- ◎ アルカン-イル (1993 年改訂で使用可能になったもの) の使用の優先順位が明示された。
  - → 大雑把に言って、より長い鎖名 (同じなら置換がより多いもの) を優先接頭語にする。
    - ・アルキル型で、yl の位置番号を記すことはない。 → 1 以外はアルカニル型に
    - ・アルカニル型で an-1-yl のパターンはない。 → このパターンはアルキル型に

#### P-29.2 置換基を命名する一般則

形式的に母体水素化物から水素原子を取り除くことによって生成する遊離原子価

語尾:以下の通り。接尾語として優先順位が高い。(例外: P-57.4.6.2(2))

相手と単結合で … yl, diyl, triyl

二重結合で … ylidene

三重結合で … ylidyne

組合せのとき… ylylidene, など

(1) アルキル型置換基 alkyl-type substituent

母体水素化物の末尾の-ane をyl (等) で置き換える。

遊離原子価をもつ原子は鎖の末端で、位置番号が常に1だが、名称からは省く。

飽和鎖状および単環炭化水素置換基、ケイ素、ゲルマニウム、スズ、鉛の単核水素化合物で用いる。

(2) アルカニル型置換基 alkanyl-type substituent

母体水素化物名に、yl (等)を追加する。

母体水素化物名が e で終わり、直接 v1 に続くときは e を省く。

遊離原子価をもつ原子の位置番号は、母体水素化物の番号付けと矛盾しない最小の数値。

位置番号が1になっても、次の場合を除いて番号を省略しない。

単核母体水素化物である場合

接尾語が ividvne である場合

- この方法は遊離原子価が位置番号1以外の位置にある単純置換基の時に使用される。
  - → 単純置換基名でも位置番号をもつものは丸括弧で括る。  $\bigcirc$  (propan-2-y1)benzene その他、括弧の使い方の詳細  $\rightarrow$  P-16.3.4, P-16.5.1

#### P-57. 4. 6. 2

- (1) 鎖状接頭語では、最長の鎖を主鎖として採用する。
  - 多重結合の数や種類に関係なく母体鎖として最長の鎖を選択する(大きな変更)。
- (2) ア命名法によって修飾されたアルカン由来の鎖状接頭語では、ア接頭語の方が yl のような 接尾語より優先順位が高い。

## P-29. 3. 1

炭素、ケイ素、ゲルマニウム、スズ、鉛以外の元素単核母体水素化物の置換基:(2)で命名

例: HS- sulfanyl ← H<sub>2</sub>S sulfane 由来, mercapto- は廃止

例外 amino- は保存する (ラジカルの場合は、azanyl)。

例外 PH2- phosphino-, AsH2 arsino-, SbH2 stibino- はGINで用いてもよい

#### P-29. 3. 2

鎖状母体水素化物の名称に由来する単純置換基の名称は、P-29.2 で述べた2つの方法でつくる。

### P-29. 3. 2. 1

鎖状炭化水素に由来し長鎖の末端に一つの遊離原子価をもつ単純置換基の名称は(1)でつくる。

#### P-29. 3. 2. 2

P-29.3.2.1 で述べたもの以外の単純置換基は、(2)で命名する。

V -		
構造	○優先接頭語(△以外)	備考((1),(2) は、P-29.2)
CH <sub>3</sub> -	methyl	(1) で命名。(2) だと methanyl- となる。
C1CH <sub>2</sub> -	chloromethyl	methyl- 基の水素を chloro- 基で置換して生成
C1-C0-	chlorocarbony $1^{ riangle}$	chloro- 基と、carbonyl -CO- 基を付加(連結)して生成
-CH <sub>2</sub> -	methylene	保存名(慣用名)(2)だと methandiyl となる。
$CH_2=$	methylidene	(1) で命名。
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> -	ethyl	(1) で命名。
-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	ethane-1,2-diyl	(2) で命名。△ ethylene は GIN でのみ使用できる保存名
CH <sub>3</sub> CH<	ethane-1,1-diyl	(2) で命名。例 4,4'-(ethane-1,1-diyl)dibenzoic acid
CH <sub>3</sub> CH=	ethyidene	(1) で命名。
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	propyl	(1) で命名。prop-1-yl ではない。(2) だと propan-1-yl となる。
$(CH_3)_2CH-$	propan-2-y1	(2) で命名。isopropyl は GIN のみで使用できる保存名
A shlamasanh	· on v1 甘け — 帆夕 し ) て 付	i田できるが、原生控頭部は oorboroobloriday! 甘でなる D_65 5 /

△ chlorocarbonyl 基は一般名として使用できるが、優先接頭語は carbonochloridoyl 基である。P-65.5.4

- PIN としては、tert-butyl ☆ (無置換)のみ許容(優先)。ただし置換を認めない。
  - → 基上に置換がある場合は、2-methylpropan-2-yl を基本に命名していく。
- GIN としては、以下のものは保存。ただし置換は不可。
  - $\triangle$  isopropyl →  $\bigcirc$  propan-2-yl,  $\times$  2-propyl,  $\times$  prop-2-yl ではない。
  - $\triangle$  isopropylidene  $\rightarrow \bigcirc$  propan-2-ylidene  $\triangle$  trityl  $\rightarrow$   $\bigcirc$  triphenylmethyl
- 以下の慣用名は廃止。
  - × isobutyl → ○ 2-methylpropyl (2-methylpropan-1-yl ではない)
  - × sec-butyl  $\rightarrow$  O butan-2-yl,  $\triangle$  1-methylpropyl
  - × isopentyl  $\rightarrow$  0 3-methylbutyl,  $\triangle$  1, 1-dimethylpropyl
  - × tert-penty1 → ○ 2-methylbutan-2-yl × neopenty1  $\rightarrow$  0 2, 2-dimethylpropyl
  - × phenethyl → ○ 2-phenylethyl × benzhydryl  $\rightarrow \bigcirc$  diphenylmethyl
- ☆ tert-butane が存在する/許容されるわけではない  $\rightarrow$  × tert-butanol (誤用) アルコールの優先名は置換命名法で命名する  $\rightarrow$   $\triangle$  tert-butyl alcohol 官能種類命名法は GIN のみ

構造	○優先接頭語	
CH <sub>2</sub> =CH-	ethenyl	(2) で命名。保存名 △ vinyl は GIN のみ。置換に制限**
$CH_2=C=$	ethenylidene	(2) で命名。保存名 △ vinylidene はGINのみ。 〃
CH <sub>2</sub> =CH-CH <sub>2</sub> -	prop-2-en-1-y1	(2) で命名。保存名 △ allyl は GIN のみ。 ″
$CH_2=CH-CH=$	prop-2-en-1-ylidene	(2) で命名。保存名 △ allylidene はGINのみ。 〃
	* 炭素の数を伸ばすよう	な基(アルキル基)、語尾で示される特性基による置換は不可。
$CH_2=C(CH_3)-$	prop-1-en-2-yl	(2) で命名。保存名 △ isopropenyl は、置換不可。
Ph-CH=CH-	2-phenylethen-1-yl	(2) で命名。保存名 △ styryl は、環上のみ置換可。
$C_3H_5-$	cyclopropyl	(1) で命名。単環炭化水素置換基なので
$C_6H_{11}-$	cyclohexyl	(1) で命名。
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -	phenyl	保存名(慣用名)。benzen-y1 としない。
$-C_6H_4-$	1,4-phenylene	保存名(慣用名)、1,2-,1,3-異性体も同様。
$C_{10}H_7-$	naphthalen-1-yl	(2) で命名。保存名の 1-naphthyl は GIN のみ使用可。2-異性体も
$C_5H_4N-$	pyridin-2-yl	(2) で命名。保存名の 2-pyridyl は GIN のみ使用可。3-, 4-体も

◎ 倍数命名法(置換命名法における)の適用範囲が広くなった。

命名の構造は、置換命名法と同じ。例 (1-)methylbenzene → 1,1'-ethane-1,2-diyldibenzene 同一の母体構造(命名上優先順位の高い構造)が複数あり、優先順位に差を付けられない時に用いる。 ※ 官能種類命名法の中の倍数命名法としては、エステルにおいて用いられることがある。

→ 例 ethyl acetate → ethane-1, 2-diyl diacetate

ここで、それぞれにおいて、<u>下線</u> は命名における対応を示すために付したもの。

#### P-15.3 置換命名法における倍数命名法

- (a) 2個以上の母体構造が、対称あるいは非対称の、1個または連結した置換基と 結合していると見做す方法 ← 倍数命名法の考え方
- (b) 母体構造から優先順位の高い母体構造を一つ選び、残りの構造を置換基と見做す ← 従来の置換命名法の基本的な考え方
  - 例 HOOC-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-S-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COOH 4,4'-sulfandivldibenzoic acid (a)で命名 △ 4-[(4-carboxyphenyl)sulfanyl]benzoic acid (b)に従った場合

# 引用「倍数命名法は、今回の勧告で、特性基の有無に関係なく環状構造まで拡張された。 炭素原子のみからなる鎖は従来通り除外されている。」

例  $Ph_2CH_2$   $\bigcirc$  1,1'-methylenedibenzene,  $\triangle$  (phenylmethyl)benzene,  $\times$  diphenylmethane → 鎖より環が優先される。

○ 1,1'-oxydibenzene, △ phenoxybenzene (RO-を接頭語として置換)より優先 例 Ph<sub>2</sub>O → 2つのベンゼンが同等。1つに対する置換ではなく倍数名とする。

#### P-15.3.1.1 同一母体構造の4種類

- (a) 飽和、あるいは、最多非集積二重結合(マンキュード)を持った環状母体水素化物
- (b) 飽和または不飽和鎖状炭化水素を除く、単核または多核の鎖状母体水素化物 → 炭化水素の鎖状の構造 (アルカン類) は除くということ
- (c) 環状または鎖状母体水素化物で、接尾語で表される特性基を置換基としてもつもの。 → すなわち官能化母体水素化物
- (d) 置換可能な水素原子をもつ官能性母体化合物。たとえば酢酸 acetic acid

同一の母体構造は、同じ結合(単、二重、三重)によって倍数置換基と結合し、しかも、 同じように置換されていなければならない(母体構造への置換でも優先度に差がない)。

#### P-15.3.1.3 倍数名の形成

- (a) 同一母体構造単位と結合する位置番号(単核の場合、位置番号1は省略) → 1,1'- (2 つのベンゼン環上の置換位置)
- (b) 結合する倍数置換原子または原子団の名称
  - → mehtylene, ethane-1,2-diyl など。複合倍数置換基を用いることもできる。
- (c) 倍数接頭語は、同一母体構造単位名の前におく。接頭語の末尾の母音字は省略しない。
- (d) 主特性基あるいは置換基を含む同一構造単位の名称は、必要ならば該当する括弧で囲む。
  - 例  $C_6H_5-CH_2CH_2CH_2-O-CH_2CH_2CH_2-C_6H_5$ 
    - $\rightarrow$  1,1'-「 di+benzene : ベンゼンは単核ではないので、位置番号 1 は省略不可
    - → 「 〕の中 oxybis(propane-3,1-div1): -0- と結合するのが 3 位。その他遊離位置が 1 位 → ○ 1,1'-[oxybis(propane-3,1-diyl)]dibenzene

#### 例 右図

- → 主基が -OH なので、母体「メタノール」として命名する。
- $\rightarrow$  1, 1', 1", 1"'- $\lceil$  ] tetra + methanol
- → []の中(複合倍数置換基) methylene + di(benzene-2,1,3-triyl)
- $\rightarrow$  0 1, 1', 1", 1"'-[methylenedi (benzene-2, 1, 3-triyl)]tetramethanol

- P-15.3.4.1 倍数命名法に使用できない倍数置換基 (母体構造単位の優先順位に差が生じるようなもの)
  - ・ 末端原子の多重性の異なった遊離原子価をもつ非対称な置換基 例 -C=, -CH<sub>2</sub>-CH=
  - 異なった構成要素が非対称に配置された倍数置換基 \* 例 -CH<sub>2</sub>-NH-, -CH<sub>2</sub>CH(C1)-0-CH<sub>2</sub>CH(C1)-

※ 構造ではなく、-B-A-B- のように、構成要素の並びが中央から見て対称である必要がある。 中央(一価置換基の一番遠いところに相当)から同一の母体構造に向けて命名していくため。

上記に該当しなければ、一つの倍数置換基内の構造が非対称でも OK (次4つは使用可能な例)

 $\begin{array}{lll} \text{-CH}_2\text{-CH} & \text{ethane-1, 1, 2-triy1} \\ \text{-CH}_2\text{CH}_2\text{C}\left(\text{CH}_3\right) - & \text{butane-1, 3-diy1} \\ \text{CH}_3\text{-N} & \text{methylazanediyl} \end{array}$ 

C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(O-)<sub>3</sub> benzene-1, 2, 4-triyltris(oxy) 複合倍数置換基

## P-51.3.1 優先名の作り方、制約

- 一定の条件を満たした倍数名は、母体を一つに限定した置換命名法に優先する
- ・接尾語となる基を含め、同一母体構造上のすべての置換基の位置番号が同じである
- ・倍数置換基が、中心となる置換基とそれに続く構造単位の間の連結が同一、対称的に配置

複合倍数置換基は、中央からはじめ、母体の構造に向かって多価置換基を接合していく。

- 例 -0-CHCl-0-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-0-CHCl-0-  $\rightarrow$   $\bigcirc$  ethane-1, 2-diylbis[oxy(chloromethylene)oxy]
- 例 シクロヘキサンカルボン酸の2位と4位がメチレン (二価基) で架橋された分子
  - △ 2,4'-methylenedi(cyclohexane-1-carboxylic acid) … GINとしては倍数名を使用可
  - 2-[(4-carboxycyclohexyl)methyl]cyclohexane-1-carboxylic acid
- 例 プロパン酸の2位、3位が酸素(オキシ基、二価基)で架橋された分子
  - △ 2,3'-oxydipropanoic acid … GIN としては倍数名を使用できる
  - 2-(2-carboxyethoxy) propanoic acid
- → このような場合、より大きな位置番号により多くのプライム記号を付ける。
- → 倍数命名法による命名で母体となる構造より優先順位の高いものがあれば、そちらを優先する

Ph-NH-Ph ○ *N*-phenylaniline ベンゼンよりアミン(保存名アニリン)が優先される

× 1, 1'-azanediyldibenzene

Ph-CO-Ph ○ diphenylmethanone 特性基ケトンが倍数名によるベンゼンに優先する

HOCOPh-CO-PhCO₂H ○ 4,4'-carbonyldibenzoic acid 安息香酸の倍数命名はケトンに優先する

- P-15.4 "ア"命名法(骨格代置"ア"命名法)
  - (a) 対応する環状炭化水素中の炭素原子を代置することによって、複素環母体水素化物の名称をつくる
  - (b) たとえばポリエーテルやポリアミンなどを命名する際、置換命名法による原則に従ってつくるよりむしろ対応する鎖状炭化水素中の炭素原子を代置することによってより簡単な名称をつくる目的で使用される。
- P-51.4 主として以下のような場合、PINを作成するために"ア"命名法を用いる。

4個以上のヘテロ単位が鎖に存在する場合、

複素単環化合物においては、11 員以上の環

ポリシクロ複素環系、複素スピロ環系

複素母体環に基づく縮合命名法が適用できない場合

## ○ 位置番号の省略等

位置番号の o-, m-, p- は廃止。ただし、GINとして xylene, cresol の位置異性体の区別に使える。

### P-14.3.4 位置番号の省略

資料作成者註: 意味を考えると次の場合に収束するが、指定されていないものは省略できない。

- (A) 母体を指定した時点で、主特性基の位置番号が自然に決まるので指定する必要がないもの
  - → propan-2-one (PIN) は、母体を propane に指定したときに可能な無置換の鎖状ケトンは 1つしか無いが、位置番号を省略するための規則の適用範囲ではない(これは、1位に phenyl などの置換基が付いたときに、pentan-1-one という名称があり得るためであると思われる)。
- (B) 置換可能な水素が、すべて同じ位置番号しかないもの。1 位以外も場合も含む。
- (C) 異なる位置番号の水素であっても、モノ置換したときに命名上同じ番号になるもの
- (D) 二置換体などにおいて、置換基の位置を入れ換えたりしても、命名上同じ番号になるもの。
- (E) 置換可能な位置が全て置換されているので、番号を指定する必要のないもの。
  - → 接頭語 per は廃止された。
- 例  $HCO_2C-CH_2CH(C1)-CO_2H$  O chlorobutanedioic acid \*\*  $\leftarrow$  (A), (C)

例 CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH  $\bigcirc$  ethanol  $\leftarrow$  (B)

例 CH<sub>3</sub>CH=CH<sub>2</sub> ○ propene ← (B), PIN では prop-1-ene とはしない。

例 CH≡Si-Si≡CCH<sub>3</sub>  $\bigcirc$  ethylidyne (methylidyne) disilane  $\leftarrow$  (D)

 $\bigcirc$  difluoroacetic acid  $\leftarrow$  (B) 例 F<sub>2</sub>CHCO<sub>2</sub>H

例 CF<sub>3</sub>CF<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H  $\bigcirc$  pentafluoropropanoic acid  $\leftarrow$  (E)

### P-14.3.4.1 鎖状炭化水素の末端の位置番号(A)

炭素原子上の置換の有無にかかわらず、鎖状炭化水素由来のモノおよびジカルボン酸、その酸ハロゲン 化物、アミド、ヒドラジド、ニトリル、エステル、アルデヒド、アミジン、アミドラゾン、ヒロラジジ ン、アミドキシムの名称には(主基の位置番号を)記さない。

- P-14.3.4.2 以下の場合において、位置番号1を省略する。(B)(C)
  - (a) 置換された単核母体水素化物
  - (b) 二個の同一原子からなる鎖のモノ置換体
  - (c) 均一な単環のモノ置換体
  - (d) 非置換の炭素数 2 個と 3 個のアルケン、アルキン (の不飽和結合の位置番号)、 不飽和結合1個のシクロアルケン、シクロアルキン
- P-14.3.4.3 (1 でなくとも) 対称的な構造で、使用可能な水素が 1 種類しかないものを母体水素化物または母体 化合物とする場合のモノ置換の位置番号は省略する。(C)
- P-14.3.4.4 接尾語や接頭語が別の場所に移動しても、あるいは2つの異なる位置の間で交換しても 異性体が生じないようなもの。(D)
- P-14-3.4.5 すべての置換可能な位置が同じように完全に置換されているか、あるいは、完全に修飾(たとえば ヒドロ hydroにより)されている場合。ただし、酸、アルコールなどカルコゲン(酸素族)原子に結合 している水素は別にして、他のすべての水素原子は置換可能と見做す。部分的な置換や修飾、完全であ っても均一ではない置換(フッ素と塩素など)などの場合には、すべての数詞接頭語を示す。(E)
- P-14.3.4.6 置換可能な水素原子がすべて同じ位置番号である場合。(B)
  - \* Corrections to Blue Book (qmul.ac.uk) https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/bibliog/BBerrors.html Page 30, P-14.3.4.1, example 2. [corrected 1 May 2019]

For 2-chlorobutanedioic acid (PIN)

chlorobutanedioic acid (PIN) (正) read

○ 倍数接頭辞 {di, tri, …} と {bis, tris, …} の選択

#### P-16.3.2 一般的な用法

- (a) 倍数化する成分が、単純であるか、複雑であるかどうかを判断する。単純な成分とは、naphthalene のような非置換母体水素化物、ethyl, tert-butyl などのような非置換接頭語、benzezesulfonic acid のような官能化母体炭化水素、または、acetic acid のような保存名である。単純な成分には、di, tri, … を使う。
- (b) 単純な命名法成分が丸括弧を必要とするかどうか (P-16.3.4) を判断する。
- (c) 成分が置換されている場合は、自動的に bis, tris, … を使う。
- (d) 単純な命名法成分が倍数接頭語の di, tri などによって倍数化されている場合に、丸括弧の有無により、曖昧さが生じないかどうかを判断 (P-16.3.4) する。

### P-16.3.3 {di, tri, …} を用いるもの

(a) 官能種類接尾語(thioic acid, dithioic acid を除く)と、集積接尾語で、基本的なものおよび官能基代置により修飾されたもの。

例 diol, diyl, dicarboxyimideamide, … など。

- (b) 単純置換基接頭語(位置番号のない語尾 ene, yne をもった母体水素化合物を含む)と特性基例 dicyclohexyl, di-tert-butyl, diethenyl, dibromo, …
- (c) "ア"接頭語

例 trisila, trioxa, …

- (d) 保存名 (P-16.3.4 に示す例外を除く) と体系名をもつ倍数化された成分 例 diphenol, diaceticacid, dipropanoic acid, …
- (e) 単順な官能基修飾語

例 dioxime, dihydrazide

P-16.3.4 丸括弧で囲み、{di, tri, …} を用いるもの ← 従来、bis, tris, …を用いていたもの(\*)を含む

(a) 位置番号をもつ単純置換基接頭語。

例 di (propan-2-yl), tetra (naphthalen-2-yl), …

(b) 語尾 ene, yne によって修飾され、位置番号をもつ単純置換基接頭語。

例 di(prop-1-en-2-y1),

(c)(\*) 数詞から始まる単純接頭語と官能化母体水素化物

例 di (dodecyl), di (pentanal), oxydi (tetratradecane-14,1-diyl) (酸素側が 14位)

- (d) 名称が dec で始まる単純置換基および官能化母体水素化物。12~19 個の原子を含む鎖状成分 (dodecane, tridecane, tetradecnea, …, nonadecane) と、倍数化された基を区別するため。 例 tri(decyl), tetra(decanoic acid),
- (e) 官能化母体水素化物

例 di(benzene-1-sulfonic acid), di(cyclohexane-1-carboxylic acid)

(f) 角括弧を含む単純成分

例 di(bicyclo[3.2.1]octan-3-yl), di([4-2H]benzoyl)

- P-16.3.5 {bis, tris, …} を用いるもの
  - (a) 置換された接頭語(複合または重複合接頭語)

例 bis(2-chloropropan-2-yl), bis(dimethylamino)

註 1,5-bis(dimethylamino)-N, N-dimethylpentane-3-amine N-oxide における「ジメチルアミノ基」は、P-14.3.4.2、単核の母体水素化物による置換基であることから、位置番号 N, N-を付けない。一方、アミンオキシド上のメチル基は、pentane-3-amine N-oxide に対する修飾なので、N, N-dimethyl と位置番号を記す必要がある。同様に、pentane-1, 3, 5-triamine に対する修飾である次の場合は、N1, N1, N3, N3, N5, N5-hexamethylpentane-1, 3, 5-triamine となる。

- (b) P-16.3.3(a) の例外。thioic acid, dithioic acid 等 (dithioic acid は、-CS₂H を表す)。
- (c) 複数の集積接尾語からなる接尾語の前

例 bis(nitrilium) ← dinitrilium だと dinitril + ium の構造とも読める。

例 bis(ylium) P-73.2 ylium は母体水素化物から水素化物イオン(ヒドリド) H を除去したもので、カルボカチオン。たとえば  $CH_3$  は PIN methylium, GIN methyl cation など。 bis(ylium) は二つの水素化物イオンを除去して生じる二価のカチオン。 $\longleftrightarrow$  diylium では、

yl + ylium すなわちラジカルカチオンの構造を意味する可能性がある。

(d) 置換された官能修飾語

例 bis(phenylhydrazone), pentane-2, 4-dione bis(0-phenyloxime)

(e) 倍数命名法において、置換された母体化合物

例 4,4'-oxybis(2-bromobenzoic acid) 4,4-oxydibenzoic acid との対比例 2,2'-propan-1,3-diylbis[5-(1-chloroethyl)pyridine]

P-16.3.6 {bis, tris, …} を用いるもの、その他の曖昧さ回避のため、

(a) 多核鎖状構造の単核部分集合の前におく。

bis(sulfanyl) -SH 基 が二つ ↔ disufanyl -SSH 基

(b) 倍数命名法において、鎖状構造と誤解されないよう、oxy, thio, methylene のような 単核二価原子団の保存名の前におく。

bis(oxy) -0- が 2 か所ある  $\longleftrightarrow$  dioxy -00- を表す可能性がある(以前の用法) bis(methylene) -CH<sub>2</sub>- が 2 か所ある  $\longleftrightarrow$  dimethylene は ethane-1, 2-diyl と取られる可能性がある

(c) aza, oxa などの "ア"接頭語の前におき、代置原子数を明確にする。Hantzsch-Widman 名の作成、あるいは "ア"命名法で使われるもの。

例 benzo[1, 2-c:3, 4-c']bis([1,2,5]oxadiazole) (oxadiazole 環が 2 つ縮合した構造) ↔ dioxadiazole 環との混同を避けるため

(d) 縮合環命名法における付随成分の前に置く。

付随成分に対する倍数接頭語と、縮合関係の倍数接頭語との区別のため。

例 bis(benzo[a]anthracen-1-yl) ↔ dibenzoanthracen-1-yl との混同を避ける

(e) 倍数接頭語の di から始まる名称の前におく。

例 bis(diazonium), bis(diazenyl), bis(disulfanyl), tris(dihydrogen phosphate)

#### ○ その他の数値用語

P-16.4.1 bi, ter, quater...

主に環集合の命名に使用する。P-28 例 1,1'-biphenyl

P-16. 4. 2 mono

接頭語の mono は通常の有意化合物の名称では省略する。母体構造の一つの特性基のみが 修飾されていることを表すような場合には使用できる。語尾の kis は mono にはつかない。

例 (GIN) monoperoxyphthalic acid → (PIN) 2-carbonoperoxybenzoic acid

例 (PIN) carbonmonoxide 一酸化炭素

P-16.4.3 sesqui

sesqui は IUPAC 名では使用しないが、1.5倍多いことを表すために使用されることがある。

## ○ 括弧の使い方

- P-16.3.4 [再掲] 丸括弧で囲み、{di, tri, …} を用いる ← 従来、bis, tris, …を用いていたもの(\*)を含む
  - (a) 位置番号をもつ単純置換基接頭語。

例 di(propan-2-yl), tetra(naphthalen-2-yl), …

- (b) 語尾 ene, yne によって修飾され、位置番号をもつ単純置換基接頭語。 例 di(prop-1-en-2-y1),
- (c)(\*) 数詞から始まる単純接頭語と官能化母体水素化物 ((d)との対応) 例 di (dodecyl), di (pentanal), oxydi (tetratradecane-14,1-diyl) (酸素側が14位)
- (d) 名称が dec で始まる単純置換基および官能化母体水素化物。12~19 個の原子を含む鎖状成分 (dodecane, tridecane, tetradecnea, …, nonadecane) と、倍数化された基を区別するため。 例 tri(decyl), tetra(decanoic acid),
- (e) 官能化母体水素化物

例 di(benzene-1-sulfonic acid), di(cyclohexane-1-carboxylic acid)

(f) 角括弧を含む単純成分

例 di(bicyclo[3.2.1]octan-3-yl), di([4-2H]benzoyl)

- P-16.5.1 丸括弧 ( ) (小括弧、カーブ、バーレン) を使うもの
  - (1) (a) 複合、重複合接頭語 (P-29.1.2, P-29.1.3) の前後、(b) bis, tris などの後に使用する。 (c) また、母体水素化物と置換接頭語または複数の置換接頭語からなる母体化合物(di, tri な どのような基本的な倍数接頭語がついていても)を囲むために使う。

例 C1CH<sub>2</sub>-SiH<sub>3</sub> → (chloromethyl)silane, C1-SH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub> → chloro(methyl)silane

- (2) 単純な置換基接頭語を囲むことで、位置番号を、異なる構造要素(つまり母体や他の置換基)と 区別するために使う。特定の構造様式に固有の位置番号が表だって現れない場合でも構わない。 例 Nap-N=N-Ph  $\rightarrow$  (naphthalen-2-y1) (pheny1) diazene
- (3) 位置番号が必要ない場合でも、母体水素化物の前に記す複数の単純置換基を表す接頭語の前後、 および位置番号をもった単純置換基を表す接頭語の前後に置く。ただし、名称の最初にくる単純 置換基は囲まない。また、丸括弧の使用は最低限にする。

例 butyl(ethyl)methyl(propyl)silane

- ・・・・単核なので位置番号を省略するので、複数の単純置換基間の位置番号での区切りがない。
- (4) 一つの置換基名中に二つの母体水素化物が存在するかのような誤解を避けるため、片方の母体水 素化物と同綴りの名称を含むような置換基名称(たとえば、シクロヘキサンカルボニル基は、シ クロヘキサンという母体水素化物ではないが、その綴りをふくむ)を囲む。

例 4-(cyclohexanecarbonyl)benzoic acid, di(benzenesulfinyl)acetic acid

- (5) 第2級および第3級のアミンを、母体構造としてamine を用いて命名する際に、amine に隣接す る2番目以降の単純な炭化水素置換基を表す接頭語は丸括弧で括る。P-62.2.2.1
  - 例  $\bigcirc$  N-(2-chroloethyl) propan-1-amine  $\rightarrow$   $\triangle$  (2-chroloethyl) (propyl) amine
  - 例  $\bigcirc$  N-ethyl-N-propylbutan-1-amine  $\rightarrow$   $\triangle$  butyl(ethyl)(propyl)amine
  - 例  $\bigcirc$  N, N-diethylethanamine  $\rightarrow$   $\triangle$  (triethyl)amine,  $\times$  triethylamine
- (6) 複雑な位置番号の集合において、補助の位置番号を区別するために使う。
- (7) 付加指示水素とその位置番号, E, Z, R, S のような立体表示記号、化合物の同位体置換(P-82)を表 す記号などを囲む。
- (8) 官能基代置接頭語による修飾を明確にするために使用する。
- (9) 接頭語 di, bis などを含む多重母体系構造が、接尾語としてのみ表すことのできる置換基をもつ 場合に、母体構造を囲む。
- (10) bis, tris, tetrakis などの倍数接頭語によって修飾される用語を囲む。
- (11) 直鎖状に書いた化学式において、骨格原子に結合した原子団を表すために囲む。
- (12) ラジカルイオン構造式において、複数の不対電子と電荷を囲むために使用する。

## P-16.5.2 角括弧 [ ] (大括弧、ブラケット) を使うもの

- (1) (a) 縮合環系における縮合部位を示す一記号を囲む。(b) ポリシクロ環系の von Baeyer 命名にお ける名称の橋の長さを囲む。(c) スピロ環系では、スピロ原子と結合する鎖の長さを示す数字を 囲む。(d) また、主特性基の接尾語または集積接尾語が続く場合の環集合名称等における構成成 分名を囲む。
- (2) 構成成分の構造特性、たとえば橋にある二重結合や縮合環名に含まれる成分環のヘテロ原子など を示す位置番号を囲む。
- (3) アンヌレン、フラーレンの環の大きさを表す数字を囲む。
- (4) 丸括弧がすでに使用されている置換基接頭語を囲む。
- (5) 化合物の同位体標識 (P-83) を表す記号を囲む。
- (6) 化学式を書く際に、鎖中の原子団の繰り返しを表すために使われる。 例  $CH_3[CH_2]_{68}CH_3 \leftarrow heptacontane$

### P-16.5.3 波括弧 { } (中括弧、ブレース) と、括弧の重複

- (1) 丸括弧と角括弧がすでに使用されている置換基接頭語を囲む。
- (2) さらに括弧を重複するときは、{[({[()]})]} のように用いる。ただし、母体構造名の一部にな っている角括弧、丸括弧はこの順位に影響を及ぼさない。この際、この順位に従うことによって 同じ種類の括弧が連続してしまう場合は、次のレベルの括弧を使う。

### ○ イタリック体

イタリック体で示すのは、英数字順に並べる際の主要な段階に関与しない文字である。

原稿においてイタリックのフォントが使えない場合、習慣として下線を引いて示す。

- (1) 縮合環系の名称において、縮合部位の位置表示に使う。P-25.3.1.3
- (2) O, N など、ヘテロ原子上に置換基があることを示す位置番号として使う。
- (3) イタリック体の元素記号の Hは、指示水素または付加指示水素を示す。
- (4) 構造異性体、立体異性体を表す記号として使われる。 tert- はイタリックだが、iso はイタリッ クにしない。他に、cis, trans, E, Z, r, c, t, R, S, R\*, S\*, M, P, rel, meso, ambo, rac, 等 P-92, P-93

### ○ 省略される母音字など

#### P-16.7 母音字の省略

英語名において母音字は、次のようなものが体系的に省略される

- (a) 次に a, e, i, o, u, y で始まる接尾語が続く、母体水素化物の名称, ene, yne の末尾 e 例 pentan**e** + al  $\rightarrow$  pentanal, alken**e** + yn**e** + ol  $\rightarrow$  alkenynol, alken**e**diyn**e**
- (c) a, o で始まる接尾語を修飾する倍数接頭語の末尾の a

接尾語が a, o 以外で始まり、又は、接頭語が a 以外で終わる場合は省略されない

例 tetra + amine → tetramine, penta + ol → pentol など

例 di + al  $\rightarrow$  dial, tri + oic acid  $\rightarrow$  trioic acid, tetra + ene  $\rightarrow$  tetraene

- (f) 母音字から始まる複素単環とベンゼンの縮合時、ベンゾ benzo の末尾の o 例 benzo + oxepine → benzoxepine など
- (b) 複素環名 (Hantzsh-Widman 名) の、次に母音字が続く場合の"ア"接頭語の末尾の a 例 thia + azole → thiazole など
- (d) a(ba)。型の繰り返し単位名称における次に母音字が続く場合の元素を表す"ア"接頭語の末尾の a 例 di + sila + oxane → disiloxane, tetra + stanna + oxane → tetrastannoxane
- (e) 次に母音字が続く場合の官能基代置挿入語の末尾文字 o
  - 例 diphenylphosphonochrolido + imidic acid → diphenylphosphonochrolidimidic acid

## P-16.7.2 次の場合は末端の母音字省略はない

- (a) 接合名
  - 例 (PIN) phenylacetic acid の接合名 benzen**e**acetic acid
- (b) "ア"命名法における、代置接頭語、倍数接頭語の末尾

例 2, 4, 6, 8-tetrasil**a**undecan-11-yl

(c) 炭化水素、水素化ホウ素を除いた、均一鎖状母体化合物の倍数接頭語

例 nona + azane → non**a**azane

(d) 倍数母体化合物における倍数接頭語

例 tetra + acetic acid → 2, 2′, 2″, 2‴-[倍数置換基]tetr<mark>a</mark>acetic acid

(e) 置換基接頭語の前につく倍数接頭語

例 di + iodo  $\rightarrow$  1, 2-tetr**a**iod**o**ethane

- (f) 次に続く接頭語が母音字から始まる場合の複合および重複合置換基の接頭語成分 例 chlor<mark>o</mark>amino, amin<mark>o</mark>oxy
- (g) 縮合環命名法において、付随成分を示す接頭語 例 cycloprop<mark>a</mark>[de]anthracene,

### P-16.8 母音字の補足

(1) polyene, polyyne polyenyne などの名称の語幹と語尾の ene または yne の前の di, tri などの 倍数接頭語との間に、文字 a を挿入する。

例 butene  $\rightarrow$  but $\mathbf{a}$ -1, 3-diene, octacos $\mathbf{a}$ -4, 7, 10, 13, 16, 19, 22, 25-octaenoic acid

(2) 官能基代置命名法では、子音字の間に文字 o を挿入する。

例 phenylphosphon<mark>o</mark>nitridic acid, ethanesulfon<mark>o</mark>diimidic acid

## ○ アミン等における窒素の位置番号

#### P-16.9 プライム記号

PIN においてプライム(')、二重プライム(")、三重プライム(")は、位置番号でも記号でもスペースを置 かずにつけ、イタリック体のフォントに付いてもイタリック体にはしない。4個以上のプライムを付け る場合は3個ずつの組として(X""") のように3個ずつにスペースを挿入して)記す\*。

ヒドラジド、イミドアミド(旧名 アミジン)などのように母体の同一位置に複数の置換可能な窒素が ある場合、それらを区別するために、N', N'' などを用いる。

また、ジアミン、ジイミド、ジアミドなどにおいて別の位置に結合した窒素原子を区別するためには、 (従来のようなプライムと二重プライムではなく)上付きアラビア数字(対称な構造の2以上の窒素の うちの1つであっても省略しない)で位置番号(窒素が結合した母体の位置番号)を付けて $N^1$ ,  $N^3$  な どのように示す。この場合、倍数命名などにおいて位置番号のアラビア数字がプライム記号を伴う場合 は、 $N^{1'}$ などのようにプライム付きアラビア数字を上付きで示す(そのため、'も上付きになる)。一方、 ジェミナルなジアミンなどのように同じ位置番号に結合した2つ(以上)の窒素を区別するときは、 $N^3$ と  $N^{3}$  のように、プライム付きの窒素に位置番号を付けて区別する ('は上付きにならない)。

例  $CH_3[CH_2]_2CO-N(CH_3)N(CH_2CH_3)-COCH_3$  O N'-acetyl-N'-ethyl-N-methylbutanehydrazide

例 H<sub>2</sub>N[CH<sub>2</sub>]<sub>2</sub>NH(CH<sub>3</sub>)

 $\bigcirc$  N<sup>1</sup>-methylethane-1, 2-diamine

例  $CH_3CH$  (NHCH<sub>3</sub>)  $CH_2C$  (NH<sub>2</sub>) ( $CH_3$ )  $_2$  O  $N^4$ , 2-dimethylpentane-2, 4-diamine

※ プライム記号、二重プライム記号は、文字コード上、アポストロフィー(')やクォーテーションマー ク(")とは異なりますが、この資料においては、大部分のプライム記号や二重プライム記号を表現形の 似ている別の文字(アポストロフィーなど)で代用してしまっています。すみません。

## ○ 記法、その他

#### P-16.1 元素の綴り

P-16.2 句読点(コンマ、コロンとセミコロン、ハイフン、スペース)

## ○ 母体構造の優先順位

以前の勧告からの大きな変更:鎖の長さと不飽和結合の数の間の優先順位が逆になった。 抜粋は、命名法の別資料にまとめてある。少し詳細に示したもの。

#### P-44 母体構造の優先順位

P-44.1.1 主特性基(接尾語)に相当する置換基あるいは優先母体水素化物を最も多く持つもの 化合物の種類の優先順位 (P-41) および接尾の優先順位 (P-43) と一致

P-44.1.2.2 環と鎖からなる系の比較

同じ優先元素をもつ場合は、水素化の程度に関わらず、鎖より環が優先される。

P-44.2.1 環全般について、優先する環

- (a) 複素環
- (b,c)優先巡視の高いヘテロ原子1つ ヘテロ原子の優先順位 例外的に窒素が最優先となる

抜粋 N>F>C1>Br>I>  $0 > S > Se > Te > N > P > \cdots$ 

- (d) より多くの環をもつ
- (e) より多くの骨格原子をもつ
- (f) 種類によらずより多くのヘテロ原子
- (g) 優先順位の高いヘテロ原子が多い

P-44.2.2 個別のタイプの環の優先順位

- (a)スピロ環系
- (b) 環状ファン系
- (c) 縮合環系
  - : (以下割愛)

## P-44.3 鎖の優先順位

- (a) 種類によらずより多くのヘテロ原子をもつ
- (b) より多くの骨格原子をもつ
- (c) 優先順位の高いヘテロ原子をより多くもつ
- 抜粋 0 > S > Se > Te > N > P >
  - P-44.4 (環、鎖共通)優先順位を決める基準

「主特性基] > [優先元素] > [環 > 鎖] > [より多くの骨格原子、等] … 上位の規則

- (a) より多くの多重結合
- (b) より多くの二重結合
- (c) 非標準結合数をもつ原子を1つ以上もつ
- (d) 指示水素がより小さな位置番号をもつ
- (e) ア命名法で導入されたヘテロ原子の位置番号の組合せがより小さいもの
- (f) ア命名法で導入されたヘテロ原子の優先順位の高いものがより小さい位置番号をもつ
- (g) 縮合部位の炭素原子がより小さな位置番号をもつ
- (h) 接尾語で表される特性基がより小さな位置番号をもつ 例 pyridin-2(1H)-one > pyridin-4(1H)-one
- (i) 連結点がより小さい位置番号をもつ
- (j) ene, yne と言った接尾語、hydro、dehydro 接頭語がより小さい位置番号をもつ
- (k) 1個以上の同位体修飾原子をもつ より大きな原子番号での同位体修飾が優先、次に、よし質量数の大きい核種が優先
- (1) 1個以上のステレオジェン中心をもつ

E/Z 配置については、Z配置が優先。

RR, SS のような like 表示記号は、RS, SR のような unlike 表示記号より優先 R は S より優先

## P-45 優先 IUPAC 名の選択

異なる置換様式のために、あるいは同じ優先母体構造が複数存在するために P-44 に従って選択した同じ優先母体構造に基づいた名称が二つ以上できることがある。母体構造には、ベンゼンのような母体水素化合物、シクロヘキサノールのような官能化母体水素化物、あるいは酢酸のような官能性母体化合物がある。

### P-45.1 同一構造の優先母体構造の倍数表現

#### P-45.2 置換基の数と位置番号に関する基準

完全に同一な母体構造がない、または同数現れているなどの場合、優先する母体の候補が一つに決まるまで、次の基準を順次適用する。

- (1) 接頭語として表示される置換基数が最大であるもの
- (2) 接頭語として表示される置換基の位置番号の組合せがより小さいもの
- (3) 名称中の置換基が、表示順でより小さい位置番号の組合せをもつもの

#### P-45.3 非標準結合数をもった置換基がある場合

- (1) 接頭語として表示する、結合数のより大きな置換基の数が最大であるもの
- (2) 接頭語として表示する、結合数のより大きな置換基の位置番号の組合せがより小さいもの

#### P-45.4 同位体標識に関連する基準

- (1) 同位体修飾された置換基をより多くもつもの
- (2) (同位体修飾された) より大きな原子番号の核種をより多くもつもの
- (3) (同位体修飾された)より大きな質量数の核種をより多くもつもの
- (4) 同位体修飾された置換基の位置番号の組合せがより小さいもの
- (5) (同位体修飾された) より大きな原子番号の核種をもつ置換基の位置番号が最小のもの
- (6) (同位体修飾された)より大きな質量数の核種をもつ置換基の位置番号が最小のもの

#### P-45.5 名称の英数字順

P-45.2 から P-45.4 の基準で結論がでないときは、英数字順で比較検討して先に表れる名称を PIN とする。ローマン体の文字は、イタリック体の文字より先に考慮する。(*tert*-butyl などの) イタリックの文字はローマン体の文字に続いて考慮する。つづいて主要置換基(母体に結合した置換基) の位置番号の組合せが小さくなるようにする。組合せの中身の順序は、位置番号がないものが最優先、次にイタリック体の英字の位置番号(*N*-など)、ギリシア文字の位置番号、ついでアラビア数字の順となる。

### P-45.6 立体配置にのみ関連する基準

## ○ 個々の化合物種類に対する適用

## P-6 個々の化合物種類に対する適用

## P-60.2 名称の紹介

PIN を作成するために推奨する一般的な方法

- (a) 接尾語を使った置換 例 methanol → P-15.1
- (b) 接頭語を使った置換 例 chloromethane
- (c) 官能種類命名法 (置換基名称 + スペース + 種類名) 例 methyl alcohol → P-15.2
- (d) "ア"命名法 → P-15.4

#### P-61.2 置換炭化水素 (環、鎖)

### P-61.3 ハロゲン化合物

標準結合数以外の結合数をもつハロゲン (-XO, -XO<sub>2</sub>, -XO<sub>3</sub> など) は別規則 PIN では、接頭語として置換命名法で命名する。 官能種類命名法(例 methyl iodide、ヨウ化メチル)も、GINとして使用できる。

### P-61.4 ジアゾ化合物

一個の炭素に結合した =N2 基 は、接頭語 diazo- を用いる。

### P-61.5 ニトロおよびニトロソ化合物

硝酸、亜硝酸の誘導体であるもの等、一部を除き、接頭語 nitro-, nitroso- を用いる。

### P-61.6 ヘテロン

## P-61.7 アジド

#### P-61.8 イソシアナート R-NCO

従来の規則からの変更。以前の勧告では、官能種類命名法を推奨していた 接頭語 isocyanato- を用いる。

### P-61.9 イソシアニド R-NC (旧名称、イソニトリル)

PIN では、isocyano- を接頭語として置換命名法で命名する。 GIN では官能種類命名法として、alkvl isocvanide を用いてもよい。

### P-61.10 雷酸 (HO-N=C)、イソ雷酸のエステル

これまで使用していた fulminate, fulminato 等を廃止 詳細割愛

### P-62 アミンとイミン

従来の命名法では曖昧なところが残っており、大きく整理された。

特に第2、第3級アミンでは triethylamine のような命名が体系名として認められなくなった。

### P-62.2.1.1 第一級アミンの保存名

 $PhNH_2 \bigcirc aniline \ \mathcal{T}=$ リンのみが保存される。 $\triangle benzenamine ベンゼンアミン (GIN として可)。$ PhNH- を接頭語として用いる場合は、○ anilino-, △ phenylamino-トルイジン、アニシジン、フェネチジン等は廃止。

### P-62.2.1.2 第一級アミンの命名

- (1) 接尾語 -amine を母体水素化物の名称の語尾に加える。
- (2) NH3 を母体水素化物 azane アザン とし、これに、置換基の名称を接頭語として加える。
- (3) 予備母体水素化物名 amine アミン に、置換基の名称を接頭語として加える。※ この中で、(1)が優先名を与える。

※ アミンは真の予備選択母体水素化物ではない(アミンが NH<sub>3</sub> を意味する名称にはならない)が、今 回の勧告においては、アミンを「疑似的な」母体水素化物名として扱う。

アルキルアミンという名称は、派生としては官能種類命名法に由来し、置換基名 + スペース + クラス 名 amine により、例えば ethyl amine であったものが、変化によりスペースが取り去られ、置換基名 + アミン ethylamine のように命名され、かつ、置換命名法として扱われるようになっていた。この定 着している名称において、「アミン」を、疑似母体水素化物名として、アザンと同様に扱うことで置換命 名法の体系との辻褄が合うようになるためである。

例  $\bigcirc$  methanamine メタンアミン  $\triangle$  methylazane,  $\triangle$  methylamine

## P-62.2.2 第二級、第三級アミン

置換体として、「接尾語アミンと母体水素化合物名」(または保存名アニリン)に、さらに 1~置換する 母体水素化物である「アミン」「アザン」に置換基名を接頭語として加えてもよい。(GINのみ) 第二級、第三級アミンの 2 番目以降の置換基は、接頭語が単純な構造であるときは丸括弧で括る。

また、diphenylamine や triethylamine のような官能性母体名は認めない。このような認められない **名称**と区別するため、第二級アミン及び第三級アミンの場合、「アミン」の前に置かれる置換基名由来 の接頭語は**丸括弧で括る必要がある。**ジアミン等における窒素の位置番号については、P-16.9

例 Ph-NH-Ph O N-phenylaniline

 $\triangle$  (diphenyl)amine,  $\triangle$  diphenylazane,  $\times$  diphenylamine

例 Et<sub>3</sub>N ○ *N, N*-diethylethanamine

 $\triangle$  (triethyl)amine,  $\triangle$  triethylazane,  $\times$  triethylamine

例 BuN (Me) (Et) 〇 N-ethyl-N-methylbutanamine

 $\triangle$  butyl (ethyl) (methyl) amine,  $\triangle$  butyl (ethyl) (methyl) azane

例  $H_2N[CH_2]_2NH(CH_3)$  O  $N^1$ -methylethane-1, 2-diamine

#### P-62.2.5 倍数命名法

-NK は nitrilo ニトリロ、-NH- は azanediyl アザンジイル を接頭語として用いる。 倍数命名法で命名できるものは、倍数名が母体をひとつに定めるような置換命名法に優先する。

O N-phenylaniline, × 1,1'-azanediyldibenzene

 $\rightarrow$  アミンへの置換命名優先。保存名 aniline は、その N置換誘導体すべてに使用する。

例 NCPh-NH-PhCN 〇 4,4'-azanediyldibenzonitrile

## P-62.3 イミン

R-C=NH の =NH 基は、母体水素化物のアルカン名に接尾語 -imine を付けて表す。

R-C=N-R' は、N-アルキル (R')置換されたイミンとして命名する。

接頭語になる場合は、(N-alkyl)imino-、逆方向の場合はN-alkylideneamino-

例 C1Ph-CH=N-Ph-NH<sub>2</sub> ○ 4-{N-[(4-chlorophenyl)methylidene]amino}aniline

### P-63 ヒドロキシ化合物、エーテル、過酸化物 等

-00H の置換命名のために、peroxol の語尾が導入された(以前は、官能種類命名法しかなかった)。 エーテルの優先名は置換命名法(倍数名を含む)によりつけるので、今までと大きく異なる場合がある。

#### P-63.1.1 保存名等

PhOH ○ phenol のみが PIN で用いられる保存名。

位置番号の表示には、o-, m-, p- を認めない(2, 3, 4 を用いる)。 → P-63.1.1.1 以下のものは、非置換体のみが GIN として使用できる保存名

 $\triangle$  ethylene glycol  $\rightarrow$   $\bigcirc$  ethane-1, 2-diol

 $\rightarrow$  O propane-1, 2, 3-triol  $\triangle$  grycerol

△ pentaerythritol  $\rightarrow \bigcirc 2, 2, -bis(hydroxymethyl)propane-1, 3-diol$ 

△ pinacol  $\rightarrow$  0 2, 2-dimethylbutane-1, 2-diol

 $\triangle$  cresol, (o-, m-)  $\rightarrow$  0 4-methylphenol, (2-, 3-)

△ pyrocatechol  $\rightarrow$   $\bigcirc$  benzene-1, 2-diol → ○ benzene-1, 3-diol  $\triangle$  resorcinol △ hydroquinone  $\rightarrow$  O benzene-1, 4-diol

 $\triangle$  1-naphthol, (2-)  $\rightarrow$   $\bigcirc$  naphthalene-1-ol, (-2-ol)

 $\triangle$  carvacrol,  $\triangle$  thymol,  $\triangle$  picric acid,  $\triangle$  9-anthrol

## P-63.1.2 アルコール、フェノール、エノール、イノールの体系名

- (1) 接尾語 -ol, 接頭語 hydroxy- を用いた置換命名法。複数の特性基がある場合は、倍数接頭語、di, tri などで示す。倍数接頭語の最後の文字 a は、接尾語 ol の前では省略する。tetr(a)ol など。
- (2) 種類名 alcohol を用いた、官能種類命名法 (GIN のみ)
- (3) 使用条件がみたされている場合は、倍数命名法による (P-51.3)

#### P-63.2.2 R-0- 基等の名称

### P-63. 2. 2. 1. 1

R-O- 基の置換接頭語は連結法により作成する。

すなわち R- の置換基名に -0- 「オキシ、oxy」を付け加える。

これらの複合接頭語は、複数を示すとき、bis, tris, …を使う。

### P-63. 2. 2. 1. 2

R-S- 基等の置換接頭語は、HS- sulfanyl 基の置換により作成する。

すなわち、アルキルスルファニルなどとする。

連結法により作成したもの、すなわちR-の置換基名に -S-thio 等を付け加えたものはGINで使用可。 これらの複合接頭語は、複数を示すとき、bis, tris, …を使う。

### P-63.2.2.2 RO- の保存名

以下のものは短縮名アルコキシが保存されており、PINでもGINでも使用できる。

これらは、tert-butyl を除き完全に置換でき、倍数接頭語には、di, tri などを使う。

CH<sub>3</sub>O-O methoxy CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>O-O ethoxy  $CH_3[CH_2]_2O-$ O propoxy CH<sub>3</sub> [CH<sub>2</sub>]<sub>3</sub>O-O butoxy PhO-O phenoxy

 $(CH_3)_3CO-$ ○ *tert*-butoxy (\*)

以下は、非置換体のみ、短縮名を GIN でのみ使用できる。

 $\triangle$  isopropoxy,  $\triangle$  1-methylethyloxy-,  $\bigcirc$  propan-2-yloxy (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CHOsec-butoxy, isobutoxy は廃止

### P-63.2.3 エーテルの保存名

アニソール anisole (Ph-OCH<sub>3</sub>) がエーテルの中の唯一の保存名で、PIN, GIN の両方で使用できる。 ただし、PIN では置換を認めない。GIN では一定の条件下で環および側鎖への置換が可能。

例 CH<sub>3</sub>O-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-OCH<sub>2</sub>C1

- 1-(chrolomethoxy)-4-methoxybenzene
  - $\triangle$   $\alpha$ -chloro-4-methoxyanisole
  - × 4-chrolemethoxyanisole (ではない)

#### P63.2.4.1 エーテルの体系名

- (1) 母体水素化物 RH に R'O- 基を接頭語として置換する。
- (2) エーテルを種類名とする官能種類命名法による。 GIN のみ。
- (3) R と R'が同一の環成分であるときは倍数命名法による。置換基の位置も含めて同じもの。
- (4) "ア"命名法による。直鎖の場合へテロ原子が4個以上のときのみ。
- (5) ファン命名法による。

種類名 オキシド oxide をもとにした官能種類命名法は廃止された。

例 CH3OCH3

- (1) O methoxymethane
- (2)  $\triangle$  dimethyl ether

例 PhCH<sub>3</sub>

- anisole (\*) 保存名, PIN では置換不可
- (1)  $\triangle$  methoxybenzxene
- (2)  $\triangle$  methyl phenyl ether
- 例 CH<sub>3</sub>O[CH<sub>2</sub>]<sub>2</sub>OCH<sub>3</sub> (1) 〇 1, 2-dimethoxyethene

  - (2)  $\triangle$  ethane-1, 2-diyl dimethyl ether
- 例 PhOPh (1)  $\triangle$  phenoxybenzene
  - (2)  $\triangle$  diphenyl ether
  - (3) 1, 1'-oxydibenzene
- 例 C1PhOPh

例 C1PhOPhC1

- (1) 1-chloro-4-phenoxybenzene × (4-chlorophenoxy) benzene
- (2)  $\triangle$  4-chlorophenyl phenyl ether
- (3) △ 4-chloro-1, 1'-oxydibenzene (1) △ 1-chloro-4-(4-chlorophenoxy) benzene
- (2)  $\triangle$  bis (4-chlorophenyl) ether
  - (3) O 1, 1'-oxybis (4-chlorobenzene)

#### P-63.5 環状エーテル

酸素を一つ含む単環系のエーテルは、P-22.2.1 に定める複素環の保存名の規則による

→ Hantzsch-Widman 名 環の員数により不飽和環の基本語尾が決まる。10員環まで。

(11 員環以上は、"ア"命名法を用いる)

-[CH<sub>2</sub>]<sub>n-m</sub>-O<sub>m</sub>- の n 員環

酸素数 = 1 酸素数 = 2, 酸素数 =3, … 例 n=3 O oxirane O dioxirane  $\triangle$  ethene oxide × ethylene oxide … エチレンは-CH2CH2-。エチレンのオキシドではない △ 1,2-epioxyethane … epioxy (epoxy) は2価基 例 n=4 Ooxetane O dioxetane, O trioxetane, … 例 n=5 O oxalane O dioxalane, O trioxalane  $\triangle$  tetrahydrofuran O oxane O dioxane, O trioxane, … 例 n=6

P-64 ケトン、擬ケトン、ヘテロンおよびカルコゲン誘導体

## P-64.1 擬ケトン pseudoketone

次の2つのタイプからなる。

環内のカルボニル基が1個または2個の骨格へテロ原子に結合している環状化合物 鎖状カルボニル基が1個または2個の鎖状骨格へテロ原子(ただし、窒素、ハロゲン、擬ハロゲン 原子団を除く) または、環のヘテロ原子に結合している化合物

- → 環状のエステル (ラクトン)、環状のアミド (ラクタム) などの優先名は、複素環の擬ケトン として命名する (P-65.6.3.5.1, P-66.1.5.1)。
- → ラクトンは、水酸基を持たない母体酸の体系名の oic acid の語尾 ic acid を、 lactone に置き換え、水酸基の位置を示す位置番号を o と lactone の間に挿入する。

例 n=3 (4 員環) △ propano-3-lactone, ○ oxetan-2-one, × propiolactone

n=4(5 員環) △ butano-4-lactone, ○ oxolan-2-one, × γ-butyrolactone

n=5 (6 員環) △ pentano-5-lactone, ○ oxan-2-one, × δ-valerolactone

n=6 (7 員環) △ hexano-6-lactone, ○ oxepan-2-one, × ε-caprolactone

- ※ IUPAC 1979 では、現在の -olactone を -olide で命名したため、butano-4-lactone につ いて、butan-4-olide のような名称が残っている場合がある。
- $\rightarrow$  ラクタムは、アミノ置換基を持たない母体酸の体系名の oic acid の語尾 ic acid を、 lactam に置き換え、アミノ基の位置を示す位置番号を o と lactam の間に挿入する。

例 n=3(4 員環) △ propano-3-lactam, ○ azetidin-2-one, × propiolactam

n=4 (5 員環) △ butano-4-lactam, ○ pyrrolidin-2-one, × γ-butyrolactam

n=5(6 員環) △ pentano-5-lactam,○ piperidin-2-one,× δ-valerolactam

n=6 (7 員環) △ hexano-6-lactam, ○ azepan-2-one, × ε-caprolactam

※ pyrrolidine, piperidine は保存名。azepane は、Hantzch-Widman 系の命名 (P-22.2.2.1.1)

- → その他の擬ケトンの例
  - O 1, 3-dioxan-2-one
  - $\bigcirc$  1-(piperidin-1-yl)ethan-1-one,  $\triangle$  1-acetylpiperidine

## P-64.2 ケトン

#### P-64.2.1 保存名

 $\bigcirc$  chalcone カルコン のみが PIN における保存名。 $\triangle$  (2*E*)-1, 3-diphenylprop-2-en-1-one trans-体, (2E)- 立体異性体を指す。カルコンは、ケトンより下位の特性基による環置換のみが可能。 GIN では、acetone, 1,4-benzoquinone, naphthoquinone, anthraquinone が保存、置換もできる。 ketene はGINで保存されるが、置換に制限がある。

acetophenone, benzophenone は GIN でのみ保存されるが、置換を認めない。 以前の勧告でもちいられてきたいくつかの慣用名は、廃止し、GINでも認めない。

> $\triangle$  acetone,  $\bigcirc$  propn-2-one,  $\triangle$  dimethyl ketone,  $\times$  propanone 例 CH<sub>3</sub>-CO-CH<sub>3</sub>

例 CH<sub>2</sub>=C=O  $\triangle$  ketene,  $\bigcirc$  ethenone

例 C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub> △ 1, 4-benzoquinone, ○ cyclohexa-2, 5-diene-1, 4-dione,

例 C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub> △ 1, 4-naphthoquinone, ○ naphthalene-1, 4-dione

 $\triangle$  benzophenone,  $\bigcirc$  diphenylmethanone\*,  $\triangle$  diphenyl ketone 例 PhC (=0) Ph

例 × pyrrolidone, ○ pyrrolidin-2-one, △ butano-4-lactam

 $\times$  propiophenone,  $\bigcirc$  1-phenylpropnan-1-one,  $\triangle$  ethyl phenyl ketone 例 PhCOCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub> ※ 1,1'-carbonyldibenzene とはならない。命名上、ケトン methanone が環 benzene に優先するため。

#### P-64.2.2 ケトンの体系名

- (1) 接尾語 -one, 接頭語 oxo- を用いた置換命名法。複数の特性基がある場合は、倍数接頭語、di, tri などで示す。倍数接頭語の最後の文字 a は接尾語 one の前では省略する。tetr(a)one など。
- (2) 鎖状ケトンの場合、種類名 ketone, diketone などを用いた、官能種類命名法 (GIN のみ)

### P-65.1 カルボン酸及びその誘導体

#### P-65.1.2 体系名

接尾語 oic acid 酸、carboxylic acid カルボン酸 を用いて置換命名法により命名する。主特性基に 含められないカルボキシ基や、より上位の特性基が存在する場合は、カルボキシ基を表す接頭語 carboxy- を用いて命名する。

- (a) メタンや枝分かれの無い炭化水素の末端 -CH<sub>3</sub> を -CO<sub>2</sub>H に置換 → oic acid, dioic acid
- (b) 上記以外は、すべて → carboxylic acid (保存名である安息香酸を除く)
  - 環につく-CO<sub>2</sub>H
  - ・ 鎖状のヘテロ水素化物 (炭素以外) に結合する -CO<sub>2</sub>H
  - ・ 枝分かれの無い鎖に、3個以上のカルボキシ基がついているもの
  - 例: ethane-1,1,2-tricarboxylic acid (2-carboxybutanedioic acid ではない) 鎖を長くするより、主基の数が多くなるように主鎖を選んでいる。
- (c) ア命名など母体炭化水素に固有番号がある場合は、-1-oic acid のように位置番号を省略しない。 例: O 3, 6, 10, 13-tetraoxapentadecane-1, 15-dioic acid
- P-65.1.1 保存名 … ニトリル、アルデヒド、カルボン酸誘導体などにもルールが引き継がれる。
  - PIN としての保存名。次の5つ。官能基化により、酸無水物、塩、エステルなどを形成できる。
    - formic acid ギ酸, △ methanoic acid (ギは蟻の字由来)
    - acetic acid 酢酸, △ ethanoic acid
    - benzoic acid 安息香酸,△ benzenecarboxylic acid
    - oxalic acod シュウ酸, △ ethanedioic acid (蓚はスイバ、oxalis はカタバミ)
    - oxamic acid オキサミド酸, △ amino(oxo)acetic acid (蓚酸のモノアミドの構造)
      - → 酢酸、安息香酸、オキサミド酸は置換可能。ギ酸は置換に制限あり。
  - GIN として使用できる保存名、置換可能なもの
    - △ 2-furoioc acid 2-フロ酸, furan-2-carboxylic acid
    - △ phthalic acid フタル酸, benzene-1, 2-dicarboxylic acid
    - △ isophthalic acid イソフタル酸, benzene-1, 3-dicarboxylic acid
    - △ terephthalic acid テレフタル酸, benzene-1, 4-dicarboxylic acid
  - GIN として使用できる保存名、置換が認められない。
  - 官能基化により、酸無水物、塩、エステルなどを形成できる。
    - △ propionic acid プロピオン酸, propanoic acid
    - △ butyric acid 酪酸, butanoic acid
    - △ palmitic acid パルミチン酸, hexadecanoic acid
    - △ stearic acid ステアリン酸, octadecanoic acid
    - △ malonic acid マロン酸, propanedioic acid
    - △ succinic acid コハク酸, butanedioic acid
    - △ glutaric acid グルタル酸, pentanedioic acid
    - △ adipic acid アジピン酸, hexanedioic acid
    - $\triangle$  oleic acid オレイン酸,  $\bigcirc$  (92)-octadec-9-enoic acid
    - $\triangle$  fumaric acid フマル酸,  $\bigcirc$  (2*E*)-but-2-enedioic acid
    - $\triangle$  maleic acid マレイン酸,  $\bigcirc$  (22)-but-2-enedioic acid
    - △ acrylic acid アクリル酸, prop-2-enoic acid
    - △ methacrylic acid メタクリル酸, 2-methylprop-2-enoic acid
    - $\triangle$  cinnamic acid ケイヒ酸,  $\bigcirc$  (2*E*)-3-phenylprop-2-enoic acid
    - △ 1-naphthoic acid 1-ナフトエ酸, naphthalene-1-carboxylic acid, 2- 誘導体も
    - △ nicotinic acid ニコチン酸, pyridine-3-carboxylic acid
    - △ isonicotinic acid イソニコチン酸, pyridine-4-carboxylic acid

HI-TI IA	間之 2010 观点50 万顶有	(20) (35), (25), (25), (27), (2	近 / M は、 正確な 列川 くはめ テ ま と	70)	
	天然物由来の以下は保存さ	され、置換が認めら	oれない。また、塩とエス	テルは形成できる。	
			ydroxypropanetricarboxy		
			2,3-dihydroxypropano		
		乳酸,〇 2-hydox		io dela	
			2-oxopropanoic acid		
	- ·		z oxopropanore aeru -dihydroxybutanoic acid		
				素の保存名に由来するカルボン	<b>新</b> 允
	= :				的友
	の名称も保存され、そのい				
	すでに廃止された、今回の				
		,吉草酸,○ pen		C5	
		, カプロン酸, ○		C6	
		ラウリル酸,○		C12	
	•	•	O tetradecanoic acid	C14	
			O 3-oxobutanoic acid		
	•		cid エチレンジアミン四暦		
	→以下:	2 つの倍数名を使用	月可。PIN の指定はしない	(グリシンが天然物) → P-100	)
	$\triangle$ N, N'	-ethane-1,2-diyll	ois[N-(carboxymethyl)gl	ycine]	
	$\triangle$ 2, 2'	, 2'', 2'''-(ethan	e-1,2-diyldinitrilo)tet	raacetic acid	
	× anthranilic	acid アントラニル	∕酸, ○ 2-aminobenzoic	acid	
	× glyoxylic ac	id グリオキシル酸	兔,○ oxoacetic acid		
	× peracetic ac	id 過酢酸, ○ etl	haneperoxoic acid, $ riangle$ p	eroxyacetic acid	
	× performic ac	id 過ギ酸,○ me	thaneperoxoic acid, 🛆	peroxyformic acid	
	× perbenzoic a	cid 過安息香酸,	O benzenecarboperoxoic	acid, 🛆 peroxybenzoic aci	d
P-65. 1. 4	4 ペルオキシカルボン酸 p				
	接尾語として、peroxic a	cid, carboperoxi	c acid を用いる。ペルオ	キソ酸、カルボペルオキソ酸。	
	保存名をもつカルボン酸に	は、ペルオキシ+係	早存名とすることができる	$(GIN)_{\circ}$	
	カルボキシ基など優先度の	の高い特性基があり	)、接頭語にする場合		
	炭素の末端の-(C	(=0) 00H ··· hydo	roperoxy-とoxo-の2つ	つの置換基に分けて修飾する。	
	置換基としての-	C(=0)00H ··· 優先	名では carbonoperoxoyl	を用いる。	
		連結	法による hydoroperoxycan	rbonyl を用いてもよい(GIN)。	
	例 フタル酸のモノ過酸	O 2-carbonoper	oxoylbenzoic acid		
		△ 2-hydoropero	xycarbonylbenzoic acid		
		$\triangle$ monoperoxyph	thalic acid		
P-65. 1. 7	7 アシル基		. ( )		
				いは慣用名をもつカルボン酸カ	
				ル基 carboacyl 基の名称は、	相
				に変えることにより得られる。	
	•		る酸に由来するカルボアシ	/ル基は、接尾語 carboxylic ad	eid
	を carbonyl に変えること				
	例 CH <sub>3</sub> CO-	$\bigcirc$ acetyl, $\triangle$ e	thanoyl, $\triangle$ 1-oxoethyl		
	Fil DLCO	O hangard A 1	onzonoonhonul A ovo	(n h a n r 1) m a + h r 1	

例 PhCO-

 $\bigcirc$  benzoyl,  $\triangle$  benzenecarbonyl,  $\triangle$  oxo(phenyl)methyl

例 -CO-CO-

 $\bigcirc$  oxalyl,  $\triangle$  ethanedioyl,  $\triangle$  dioxoethanediyl

GIN のみ保存名が使えるカルボン酸に由来するアシル基は、慣用名が維持されるが、PIN は置換命名法 によるものとなる。

例  $CH_3[CH_2]_2CO \bigcirc$  butanoyl,  $\triangle$  butyryl,  $\triangle$  1-oxobutyl

例 -CO-CH<sub>2</sub>-CO- $\bigcirc$  propanedioyl,  $\triangle$  malonyl,  $\triangle$  1,3-dioxopropane-1,3-diyl

### P-65.5 酸ハロゲン化物および酸擬ハロゲン化物

主特性基を示す接尾語として表されたすべての酸基中のヒドロキシ基をハロゲン原子で置き換えた酸 ハロゲン化物は、アシル基の名称をまず書き、その後に特定の化合物種類の名称を別の語として(英語 では、スペース区切り、対応した日本語表記ではつなぎ符号=で区切る)(複数の場合、アルファベット 順に)書いて命名する。→ つまり官能種類命名法

表 6.3 酸ハロゲン化物および酸擬ハロゲン化物の化合物種類と対応する接頭語(一部)

<b>-</b> F	fluoride	fluoro-	
-C1	chloride	chloro	
-Br	bromide	bromo	
-I	iodide	iodo	
$-N_3$	azide	azido	
-CN	cyanide	cyano	
-NC	isocyanide	isocyano	
-NCO	isocyanate	isocyanato	
-NCS	isothiocyanate	isothiocyanato	
例 CH₃COC1	○ acetyl chloride アセチル=クロリド		
例 BrCOCOC1	○ oxalyl bromide chloride オキサリル=ブロミド=クロリド		
	△ ethanedioyl bromide chloride 臭化塩化エタンジオイル		
例 ICO[CH <sub>2</sub> ] <sub>2</sub> COI	○ butanedioyl diiodide ブタンジオイル=ジョージド		

△ succinyl diiodide ニョウ化スクシニル または スクシニル=ジョージド

P-65.5.4 接尾語 carboxylic acid に相当する酸ハロゲン化物を置換基にする時、P-65.2.1.4 炭酸から派生す る酸の名称から作る接頭語、例えば carbonochloridoyl を用いる。

#### P-65.6 塩およびエステル

中性の塩およびエステルは、いずれも酸の名称に由来するアニオンの名称を用いて命名する。このアニ オンの名称は、酸の名称の語尾 ic acid を ate に、ous acid を ite に変えて作る。次に塩では、 アニオン名の前に別の語として記載するカチオンの名称を用い、エステルでは、必要なら位置番号を添 えたアニオン名の前に別の語として記載する有機基(アルキル基等)の名称を用いて命名する。

#### P-65.6.2.1 塩

- → 塩の生成は官能基化であり置換ではない。すべての保存名を制限なく使用してよい。
- → (例外的に) 環状の塩は複素環として命名する。
- → 多塩基性の有機酸の酸性塩は、
  - PIN 遊離の酸を接頭語として置換命名法とする。鎖の末端のカルボキシ基が遊離の場合、 鎖の長さが下の方法と異なる(ひとつ短くなる)ので注意。
  - GIN 中性塩と同様の帆不応で命名する。ただし残存する水素は、hydrogen を (アルファベット順とは無関係に) カチオンとアニオンの間に挿入する。

例	$CH_3CH_2CO_2^ K^+$	$\bigcirc$	potassium propanoate プロパン酸カリウム
例	$(CH_3CO_2^-)_2 Ca^{2+}$	$\bigcirc$	calcium diacetate 二酢酸カルシウム
例	$CO_3^{2-}$ $2Na^+$	$\bigcirc$	disodium carbonate 炭酸ニナトリウム
例	$K^+$ $^-OCOCH_2CH_2CO_2^ Na^+$	$\bigcirc$	potassium sodium butanedioate ブタン二酸=カリウム=ナトリウム
		$\triangle$	potassium sodium succinate コハク酸カリウムナトリウム
例	$\label{eq:hoco-charge} \begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	$\bigcirc$	ammonium 6-carboxyhexanoate 6-カルボキシヘキサン酸アンモニウム
		$\triangle$	ammonium hydrogen heptanedioate ヘプタン酸水素アンモニウム
例	$^{-}$ OCOCH $_{2}$ CH (CO $_{2}^{-}$ ) CH $_{2}$ CO $_{2}^{-}$	Na <sup>+</sup>	K⁺ H⁺ ○ potassium sodium hydrogen propane-1,2,3-tricaroboxylate
		$\bigcirc$	プロパントリカルボン酸=水素=カリウム=ナトリウム
		•••	遊離カルボン酸が指定できないので、中性塩と同様の方法で PIN となる

例( $HOOC-CH_2CH_2-CO_2^-$ )<sub>3</sub>  $Sb^{3+}$  〇 antimony tris(3-carboxypropanoate)

△ antimony tris(hydrogen succinate)

### P-65.6.3 エステル

エステルの PIN はすべて官能種類命名法により命名する。alkyl ~oate ただし、母体アニオン部分が集合体として倍数命名法を用いることがある。

#### P-65. 3. 3

エステルにおける倍数命名法

例 ○ ethyl methyl 1,4-phenylene dipropanedioate

ジプロパン二酸=エチル=メチル=1,4-フェニレン (= は英語表記のスペースの代わり\*) ※ つなぎ符号 ( = ) は紛らわしくない場合は省略できる。例:酢酸メチル etc

- 例 ethyl methyl 3,3'-oxydibenzoate 3,3'-オキシジ安息香酸=エチル=メチル
- 例 di-tert-butyl 3,3'-oxydibenzoate 3,3'-オキシジ(安息香酸 tert-ブチル)
- 例 propane-1, 2, 3-triyl triacetate 三酢酸プロパン-1, 2, 3-トリイル
- 例 propane-1, 2, 3-triyl 1, 2-diacetate 3-propanoate

1,2-二酢酸=3-プロパン酸=プロパン-1,2,3-トリイル

## P-63.6.3.3.2 単一酸に由来するポリエステル

- 例 dimethyl butanedioate, △ dimethyl succinate
- 例  $\bigcirc$  ethyl methyl propanedioate,  $\triangle$  ethyl methyl malonate

## P-65.6.3.3.3 単一の(多価)アルコールに由来するポリエステル

酸由来のアニオンが異なる場合

PIN アニオンの名称をアルファベット順に記載する。

GIN 一つのアニオンを主基アニオンとして選び、その他すべてのエステルを有機基中の接頭語として 置換により表すことができる。

例 HCO2-CH2-OCOCH3 ○ methylene acetate formate 酢酸=ギ酸=メチレン

△ (formyloxy)methyl acetate 酢酸 (ホルミルオキシ) メチル

例

- O propane-1, 2, 3-triyl 1, 2-diacetate 3-propanoate 1,2-二酢酸=3-プロパン酸=プロパン-1,2,3-トリイル
- △ 2, 3-bis (acetyloxy) propyl propanoate

#### P-65, 6, 3, 2, 3

接頭語として用いる場合、RO-C(=0)- 基 \* は、

炭素を鎖に含める場合 → alkyloxy- △ (または alkanyloxy-) と、oxo- に分けて接頭語とする。

例 sec-Bu-0-C(=0)-CH(CH<sub>3</sub>)CO<sub>2</sub>H ··· (2-メチルプロパン二酸 △ のハーフエステル)

- 3-(butan-2-yloxy)-2-methyl-3-oxopropanoic acid
- 例 CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>-OCOCH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-OCOCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub> · · · カルボン酸部分がプロパン二酸とブタン二酸 ブタン二酸の方がプロパン二酸に優先する(主基の数が同じ、より長い鎖)
  - 4-[(3-ethoxy-3-oxopropanoy1)oxy]pheny1 methy1 butanedioate

炭素を鎖に含めない場合 (カルボン酸の場合の(b) に相当) → alkvloxycarbonyl-

- 例 tert-Bu-O-C(=0)-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub>H ··· (テレフタル酸  $\triangle$  のハーフエステル)
  - 4-(tert-butoxycarbonyl)benzoic acid
- △ アルキルオキシの短縮名は、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、フェノキシ、 tert-ブトキシ(\*) のみが保存される。イソプロポキシ(\*) は GIN のみ。
- △ フタル酸、イソフタル酸、テレフタル酸は GIN のみで保存される。PIN としては不可。 マロン酸は GIN のみで保存され、置換できないの 2-メチルマロン酸は GIN としても不可。
- ※ ROC(=0)- 基を carbalkoxy group と表記する場合がある。ただし、IUPAC 体系名の規則外

接頭語として用いる場合、RC(=0)-0- 基は、アシルオキシ基として命名する。

- 例  $CH_3C$  (=0)-0- $CH_2CH_2SO_3H$   $\rightarrow$   $\bigcirc$  2-(acetyloxy)ethane-1-sufonic acid アセチルオキシは、その短縮形 アセトキシに優先する。アセトキシは GIN のみで使用可。
- 例  $C_6H_{11}$ -C(=0)-0- $CH_2CO_2H$   $\rightarrow$   $\bigcirc$  2-(cyclohexanecarbonyloxy)acetic acid

## P-65.7 酸無水物

アシル-0-アシルの構造をもつものを酸無水物といい、対称無水物および混合無水物では、それぞれ同 一のアシル基および異なるアシル基をもつ。中心酸素原子はカルコゲン原子、ペルオキシ基などに置き 換えることができる。

一塩基酸の対称酸無水物は、酸の名称の acid を種類名 anhydride に置き換えて作る。

異なる一塩基酸に由来する無水物は、英語では acid を省いて二つの酸の名称をアルファベット順に書 き、その後に種類名 anhydride を別の語として記載することにより命名する。

例 CH<sub>3</sub>COOCOCH<sub>3</sub> ○ acetic anhydride 無水酢酸 △ 酢酸無水物※

例 (PhCO)<sub>2</sub>O ○ benzoic anhydride 安息香酸無水物

例 CH<sub>3</sub>COOCOCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub> ○ acetic propanoic anhydride 酢酸=プロパン酸=無水物

例 (C1CH<sub>2</sub>CO)<sub>2</sub>O  $\bigcirc$  bis(chlotoacetic) anhydride,  $\triangle$  chloroacetic anhydride

※ [日本語における表記] 官能種類名 anhydride は字訳によりアンヒドリドとするのではなく、酸無 水物と翻訳する。ただし、(PIN) acetic anhydride, (GIN) maleic anhydride, phthalic anhydride, succinic anhydride においては、無水酢酸、無水マレイン酸、無水フタル酸、無水コハク酸と訳す。

[派生日本語 GIN] PIN を日本語名称に変える際に、翻訳名を採用するか字訳をするか、また、つなぎ符 号の有無等で複数の日本語名称の候補を生じることがある。化合物種類ごとに定めた方式で指定される 一つが(日本語の)PINとなるが、それ以外のものは派生日本語 GIN として使用できる。

## [置換されたモノカルボン酸、モノスルホン酸の酸無水物についての修正]

以下のように、同一の構造に対し、2つのPINが与えられていた。

出典: 邦訳版 BB,「有機化学命名法 IUPAC2013 勧告および優先 IUPAC 名」東京化学同人(2017).

P-65.7.1 一塩基酸の対称無水物は、置換されていても、されていなくても、酸の名称の acid を anhydride に置き換えて命名する。

例 (C1CH<sub>2</sub>CO)<sub>2</sub>O [PIN] chloroacetic anhydride {→ 下記修正により PIN ではなくなった}

P-65.7.8.1 置換したモノカルボン酸またはモノスルホン酸の無水物は、対称的に置換されている場合 は、酸の名称の前に bis を置き、acid の語を anhydride に置き換えることにより命名する。 GIN においては、接頭語の bis を省略できる。

例 (C1CH<sub>2</sub>CO)<sub>2</sub>O [PIN] bis(chloroacetic) anhydride ビス(クロロ酢酸)無水物

Corrections to Blue Book (qmul.ac.uk) https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/bibliog/BBerrors.html

Page 827, P-65.7.1, example 7. [corrected 9 January 2019]

chloroacetic anhydride (PIN) read chloroacetic anhydride (正) bis(chloroacetic) anhydride (PIN) (追加) add

### P-62.7.7 環状酸無水物

 $\downarrow$ 

PIN は、複素環の擬ケトンとして命名する。

GIN では、二塩基酸の体系名または保存名において、種類名 acid を anhydride に変えてもよい。

例  $\bigcirc$  oxolane-2,5-dione,  $\triangle$  3,4-dihydrofuran-2,5-dione,

 $\triangle$  succinic anhydride,  $\triangle$  butanedioic anhydride

例 ○ furan-2,5-dione, △ maleic anhydride

例 ○ 2-benzofuran-2,5-dione, △ phthalic anhydride

例  $\bigcirc$  1*H*, 3*H*-benzo[*de*][2]benzopyran-1, 3-dione,  $\triangle$  naphthalene-1, 8-dicarboxylic anhydride

## P-66.1 アミド

有機オキソ酸においてすべての水酸基がアミノ基または置換アミノ基に置き換えられた構造がアミド である。一般的に、一つの窒素原子上に 1 個または、2 個、3 個のアシル基を持つ場合があり、それぞ れ、第一級、第二級、第三級アミドと呼ばれることがある。

#### P66.1.1.1.1 置換命名法によりつくるアミド名

鎖状のモノアミドおよびジアミドは、接尾語 amide を該当する母体水素化物名につけて命名する。母 体水素化物名の末尾の文字 e は、a の前では省略する。ジアミドの命名には倍数接頭語 di を用いる。 枝分かれの無い鎖が3個以上の-CONH2基に直接結合しているとき、これらの基は母体水素化合物をもと にし、置換命名法により接尾語 - carboxamide カルボキシアミドを用いて命名する。

環または鎖状へテロ母体に結合する-CONH2 基をもつアミド(尿素は含まれない)の命名には、必ず接尾 語 carboxamide を用いる。

例 CH<sub>3</sub> [CH<sub>2</sub>]<sub>4</sub>CONH<sub>2</sub>

○ hexanamide ヘキサンアミド

例 H<sub>2</sub>NCO CH<sub>2</sub> 3CONH<sub>2</sub>

- pentanediamide ペンタンジアミド
- 例 CH(CONH<sub>2</sub>)(CH<sub>2</sub>CONH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> propane-1, 2, 3-tricarboxamide プロパン-1, 2, 3-トリカルボキシアミド
- 例 H<sub>2</sub>P-CONH<sub>2</sub>
- phosphanecarboxamide ホスファンカルボキシアミド
- 例 H<sub>2</sub>NNHCONH<sub>2</sub>
- hydrazinecarboxamide ヒドラジンカルボキシアミド

## P-66.1.1.1.2 酸の保存名を修飾することによりつくるアミド名

保存名の ic acid または oic acid を amide に変更することで得られる。

例 HCONH<sub>2</sub>

○ ホルムアミド

例 CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>H

- acetamide アセトアミド
- 例 PhCONH<sub>2</sub>
- benzamide ベンズアミド
- 例 H<sub>2</sub>COCONH<sub>2</sub>
- oxamide オキサミド (oxalamide オキサルアミド の短縮名)
- ※ ホルムアミドのアルデヒドの水素の置換は、ギ酸と同様に制限をうける。P-65.1.8
- ※ オキサミドは窒素上の置換が可能。アセタミド、ベンズアミドは置換が可能。
- ※ 上記4つがPINとして保存される。他に、GINにおいては、フランアミド、フタルアミド、イソフタ ルアミド、テレフタルアミドが保存され、置換可能である。
- ※ これ以外の酸の保存名 (P-65.1.1.2.2, GIN のみで使用でき、置換を認めないもの) に由来するアミ ドは GIN においてのみ使用できるが、たとえ窒素上であっても置換を認めない。
- 例 CH<sub>2</sub>=CH-CONH<sub>2</sub>
- △ acrylamide, prop-2-enamide
- 例 CH<sub>2</sub>=CH-CONH(CH<sub>3</sub>)
- $\times$  N-methylacrylamide,  $\bigcirc$  N-methylprop-2-enamide

## P-66.1.1.3.1 N-置換

一般構造 R-CONHR', R-CONR'R'' をもつ置換第一級アミドは、アミド基が1個存在する場合、位置番 号 N を前につけた置換基 R', R'' を接頭語として記載することで命名する。ジェミナルジアミドを 除くジアミドとポリアミドでは、窒素原子を区別するために、(N, N') などを用いるのではなく(N, N') $N^3$  などのように母体構造の位置番号を示す上付きアラビア数字のついた位置番号 N を用いる( $N^1$  は 位置番号1の炭素に結合した窒素の位置番号, P-16.9)。

例 HCON (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

○ N, N-dimethylformadide

例 CH<sub>3</sub>CONH(<sup>i</sup>Pro)

- N-(propan-2-y1)acetamide
- 例 H<sub>2</sub>NCO[CH<sub>2</sub>]<sub>2</sub>CONH(CH<sub>3</sub>)
- N¹-methvlbutanediamide
- 例  $(CH_3)$  HNCO $[CH_2]_3$ CONH $(CH_3)$   $\bigcirc$   $N^1$ ,  $N^5$ -dimethylpentanediamide

## P-66.1.1.3.5 アミドの一般的置換

接頭語により表し、必要に応じて数字、N, N' などの位置番号を用いる。

- 例  $(CH_3)_2CHCONH(CH_3)$   $\bigcirc$  2, N-dimethylpropanamide

## P-66.1.1.4 接頭語としてのアミド

アミドが主官能基である場合は、アミドとして命名する。そのため、1993年勧告で述べられたアミド を多環系状の置換基として見做す方法は、GINでも避けるべきである。

例  $\bigcirc$  N-(dibenzo[b, d]furan-1-yl)acetamide,  $\times$  1-acetamidodibenzofuran とはしない。

### P-66. 1. 1. 4. 1 -CONH<sub>2</sub> 基

接尾語として記載すべき上位の特性基が存在する場合、あるいはすべてのカルバモイル基を接尾語に 含めることができない場合は、-CONH<sub>2</sub> 基は次の3つの方法で命名する。この場合のアミノ基、カルバ モイル基は通常の方法で置換できる。

- (a) (鎖において)2個以上の炭素原子をもつ炭素鎖の末端原子上にある場合は、2つの接頭語、 amino- と oxo- を用いて命名する。
- (b) (環、ヘテロ鎖、炭素鎖の非末端原子上において、) アシル基名 (カルバモイル carbamoyl )を 用いて命名する (-COCONH<sub>2</sub> 基は、アシル基名 oxamoyl を使用できる)。
- (c) GIN では、carbamoyl 基を aminocarbonyl 基として命名できる (-COCONH₂ 基は、aminooxalyl)。
- 例 HOCO-CH<sub>2</sub>CH (CON (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>) CH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H ○ 3-(dimethylcarobamoyl)pentanedioic acid
  - △ 3-[(dimethylamino)carbonyl]pentanedioic acid
  - $\rightarrow \times N$ , N-dimethylcarobamoyl 基ではない。

カルバモイル基上の置換可能な位置(N上のがすべて置換されている。 P-14.3.4.5 また、同様にモノメチル体でも、× N-methylcarobamoyl 基ではない。 P-14.3.4.3

例 H<sub>2</sub>NCO-CH<sub>2</sub>-(furan)-CO<sub>2</sub>H

- 5-(2-amino-2-oxoethyl) furan-2-carboxylic acid
- △ 5-(carbamoylmethyl)furan-2-carboxylic acid
- △ 5-[(aminocarbonyl)methyl]furan-2-carboxylic acid
- → 鎖の末端なので、カルバモイル基ではなく、amino-, oxo- の 2 つの接頭語で命名する。

例 H<sub>2</sub>COCOCH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H

- O 4-amino-3, 4-dioxobutanoic acid
- $\triangle$  oxamoylacetic acid,  $\triangle$  (aminooxalyl)acetic acid

## P-66.1.1.4.2 RCONH- 基

接尾語として記載すべき上位の特性基が存在する場合、A-置換アミドの RCONH- 基は、次の2つの方 法で命名する。

- (a) 完成しているアミド名の最後の e を oに変えて接頭語にする。すなわち、接尾語 amide, carboxamide などを、amido, caroboxamido などに変えることにより接頭語とする。
- (b) GIN では、接頭語 acylamino 基 を用いてもよい。
- 例 HCONH-Ph-CO<sub>2</sub>H  $\bigcirc$  4-formamidobenzoic acid,  $\triangle$  4-formylaminobenzoic acid
- 例 PhCONH-Ph-SO<sub>3</sub>H O 4-benzamidobenzene-1-sulfonic acid,
  - △ 4-(benzoylamino)benzene-1-sulfonic acid
- 3-methanesolfonamidopropnoic acid, 例 CH<sub>3</sub>SO<sub>2</sub>NHCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H
  - △ 3-[(methanesulfonyl)amino]propnoic acid
- 例 CH<sub>3</sub>SO<sub>2</sub>N (CH<sub>3</sub>) CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H ○ 3-(N-methylmethanesolfonamido) propnoic acid
  - △ 3-[methanesulfonyl(methyl)amino]propnoic acid
- 例 CH<sub>3</sub>SO<sub>2</sub>N(C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>) CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H 〇 3-(N-cyclopropylmethanesolfonamido) propnoic acid
  - △ 3-[cyclopropyl (methanesulfonyl) amino] propnoic acid
- 例 C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>-CH<sub>2</sub>SO<sub>2</sub>NHCH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H
- (1-cyclohexylmethanesulfonamido) acetic acid
- N-(cyclohexylmethanesulfonyl)glycine
- → H<sub>2</sub>NCH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H 天然物 glycine の誘導体として命名できるので PIN 指定なし
- 例 HOCO-Ph-NHCOCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CONH-Ph-CO<sub>2</sub>H 〇 4,4'-butanediamidodibnzoic acid
  - → butanediamido 基が二価基になっている。

GINでは、この二価基をして以下のようにも命名できる。

- △ butanedioylbis(azanediyl) ← acyl + amino と同じ構造
- △ 1,4-dioxobutane-1,4-diylbis(azanediyl)

P-66.1.2 第二級、第三級アミド (アシル基が2つ、3つ結合した構造のもの)

それぞれ上位となる第一級アミドの N-アシル置換体として命名する\*。1993 年勧告で推奨されたよう な、母体水素化物 azane や見かけの母体水素化物 amine のアシル基による置換としての命名は、2013 勧告には含まれていない(体系名として認めない)。(アミンの命名では、2013年勧告においても、見 かけの母体水素化物 amine へのアルキル置換体として命名している。これに対する違いがあるのは、 アミンではなくアミドという上位の母体を選ぶべきであるということだろう。)

なお、鎖状のイミドは、第二級のアミドのことであり、上記に含まれる。

※ 対称なエーテルであっても、アルコキシ置換のアルカンと命名しなければならないのと似ている。

例 HCO-NH-CHO

 $\bigcirc$  N-formylformamide

例 (CH<sub>3</sub>CO)<sub>2</sub>N-

○ N-acetylacetamido- 基,△ diacetylamino 基

 $\rightarrow$  接頭語化に際し、完成しているアミド名 N-acetylacetamide を用いる。

(CH<sub>3</sub>CO)<sub>2</sub>NCOCH<sub>3</sub>

○ N, N-diacetylacetamide, × triacetamide (体系外の慣用名)

例 PhCONHCOCH3

○ *N*-actylbenzamide

P-66.1.3 隠れたアミド

P-66.1.5 ラクタム、ラクチムなど

P-66.2 (環状の) イミド

PIN では、それぞれ擬ケトンとして命名する。→ P-64.1

例 ○ 1-(piperidin) ethan-1-one, △ 1-acetylpiperidin,

N, N-dimethylacetamide に倣い  $\times N, N$ -(pentane-1, 5-diyl)acetamide とはしない。 ↑ 命名上、環を開く操作はない。

P-66.3 ヒドラジド

P-66.4 アミジン、アミドラゾン、ヒドラジジン、アミドキシム

P-66.5 ニトリル

#### P-66.5.1 ニトリルの命名法

- (1) カルボン酸の保存名に対して、語尾 ic acid を onitrile に変えて命名する。\*
- (2) -(C)N 基に対しては、接尾語 nitrile, -CN 基に対しては接尾語 carbonitrile を用いる。
- (3) GIN では、種類名 cyanide を用いて官能種類命名法で命名することができる。
- ※酸の命名法における特性はニトリルに引き継がれる。そのためPINとして保存されたカルボン酸名 に由来するニトリルの名称は PIN となる。また、置換不可のカルボン酸から生じるニトリルは置換不 可である。
- (4) 主特性基として上位の基が存在するとき、またはすべての -CN 基を接尾語として表すことができ ないときは、-CN 基を cyano- の接頭語で置換により示す(このとき、鎖の末端であっても接頭語 cyano を用いる)。P-66.5.1.4

例	HCN	○ formonitrile ← 保存名 formic acid に対応, △ methanenitrile
		△ hydrogene cyanide シアン化水素は、PINではない。古くは青酸とも。
例	CH <sub>3</sub> CN	○ acetonitrile ← 保存名 acetic acid に対応
		$\triangle$ ethanenitrile, $\triangle$ methyl cyanide
例	$C_6H_5CN$	○ benzonitrile ← 保存名 benzoic acid に対応, △ benzenecarobonitrile
例	NC-CN	○ oxalonitreile ← 保存名 oxalic acid に対応, △ ethanedinitrile
例	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CN	○ propanenitrile, × propionitrile プロピオニトリルは体系外
		△ propiononitrile ← propionic acid に由来、プロピオノニトリルは置換不可
例	$NC[CH_2]_3CN$	○ pentanedinitrile, △ propane-1,3-diyl dicyanide
例	$\mathrm{CH_3CH_2CHC}$ (CN) $_3$	$\bigcirc$ butane-1, 1, 1-tricarbonitrile, $ imes$ 2, 2-dicyanopentanenitrile
例	$NC-[CH_2]_2CH(CH_2CH)$	CN)[CH <sub>2</sub> ] <sub>2</sub> CN
例	$NC[CH_2]_2$ -NH-[CH	<sub>2</sub> ] <sub>2</sub> CN $\bigcirc$ 3,3'-azanediyldipropnanenitrile
		× 3,3'-azanediyldipropiononitrile プロピオノニトリルは置換不可

#### P-66.5.1.3 シアン化物の PIN をつくる官能種類命名法

α-オキソ基をもつニトリル、すなわちアシル基が結合した-CN はカルボン酸誘導体(擬酸ハロゲン化 物、P-65.5) として、官能種類命名法で命名するものが PIN となる。

- $\bigcirc$  formyl cyanide,  $\triangle$  oxoacetonitrile 例 HCO-CN
- 例 C1[CH<sub>2</sub>]<sub>2</sub>COCN O 3-chloropropanoyl cyanide, △ 4-chloro-2-oxobutanenitrile
  - × 3-chloropropionyl cyanide プロピオン酸由来のプロピオニル基は置換不可

## P-66.6 アルデヒド

## P-66.6.1 アルデヒドの体系名

- (1) カルボン酸の保存名に対して、語尾 ic acid, oic acid を aldehyde に変えて命名する。\*
- (2) -(C)HO 基に対しては、接尾語 al, -CHO 基に対しては接尾語 carbaldehyde カルボアルデヒド を用いる。
- ※ 酸の命名法における特性はアルデヒドに引き継がれる。そのため PIN として保存されたカルボン酸 名に由来するアルデヒドの名称は PIN となる。また、置換不可のカルボン酸から生じるアルデヒドは 置換不可である。
- (4) 主特性基として上位の基が存在するとき、またはすべての -OHO 基を接尾語として表すことがで きないときは、=0 を oxo-, -CHO 基を formyl- の接頭語で置換により示す。
- 例 HCHO ○ formaldehyde ← 保存名 formic acid に対応, △ methnal 例 CH<sub>3</sub>CHO ○ acetaldehyde ← 保存名 acetic acid に対応, △ ethanal 例 C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CHO ○ benzaldehyde ← 保存名 benzoic acid に対応, △ benzenecarobaldehyde 例 HCO-CHO ○ oxalaldehyde ← 保存名 oxalic acid に対応, △ ethanedial 例 CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CHO ○ propanal, △ propionaldehyde 置換不可 例 HCO[CH<sub>2</sub>]<sub>3</sub>CHO O pentanedial 例 CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CHC (CHO)<sub>3</sub> O butane-1, 1, 1-tricarbaldehyde, × 2, 2-diformylpentanal 例 HCO-CH<sub>2</sub>CH(CHO)[CH<sub>2</sub>]<sub>2</sub>-CHO O butane-1, 2, 4-tricarbaldehyde 例 C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>(CHO)<sub>2</sub> ○ benzene-1, 2-dicarbaldehyde, △ phthalaldehyde 置換可能 × 2-formylbenzaldehyde ではない。特性基が多いものを母体に選ぶ。
- 例 HCO-[CH<sub>2</sub>]<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>H 4-oxobutanoic acid
- 例 C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>(CHO)([CH<sub>2</sub>]<sub>6</sub>CHO) 2-(7-oxoheptyl)cyclopentane-1-carbaldehyde ← 環が鎖に優先

## P-66.6.5.1 アセタール、ケタール、ヘミアセタール

PIN はアルコキシ基等による置換で命名する。ヘミアセタールにおいては、水酸基が主基となる場合 はアルコールとして命名する。

GIN では、化合物種類名 acetal, ketal, hemiacetal, hemiketal を用いて官能種類命名法を用いる ことができる。

環状アセタール等においては、環部分をヘテロ環として扱う。従って、環状ケトン由来の環状ケター ルは、スピロ環として命名する必要がある。

- 例  $CH_3CH_2CH(OCH_2CH_3)$   $\bigcirc$  1,1-diethoxypropane,  $\triangle$  propanal diethyl acetal
- 例 C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>(OCH<sub>3</sub>)(OCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>) 1-ethoxy-1-methoxycyclohexane, △ cyclohexanone ethyl methyl ketal

### P-7 ラジカル、イオン

ラジカル、イオン、ラジカルイオン、および関連した化学種を示すため、集積接尾語 cumulative suffix (P-15.1.3(2)) を用いる。

集積接尾語は、置換命名法等において官能種類を表現する官能基接尾語 functional suffix とは異な り、専有的ではない。官能基接尾語は、-amine, -one, -oic acid, -oate などで、一つの特性基が主 基であると決まると残りの特性基はすべて接頭語として命名することになる。これに対し、専有的で はない集積接尾語は、-amine + yl で -aminyl (アミンで、かつ、ラジカル種であるもの) のように 官能基接尾語と組み合わせることも、また、接尾語同士を組み合わせることも可能である。

接尾語としての優先順位は、ラジカル > ラジカルアニオン > ラジカルカチオン > アニオン > 両性イオン > カチオン があり、酸以降がこれに続く。  $\rightarrow$  表 4-1 (P-41)

## 表 7.1 置換命名法におけるラジカルとイオンの接尾語(または語尾)および接頭語

→ この表の他に PIN ではないが、methyl cation, ethyl anion のような化合物種類名も使える。

ラジカルの形成 集積接尾語 接頭語

> y1 イル H・の除去による ylo イロ

2H・の除去による

同一原子から vlidene イリデン

異なる原子から divl ジイル

3H·の除去による

vlidyne イリジン 同一原子から

triyl, ylylidene トリイル, イルイリデン 異なる原子から

H· の付加による hydyl ヒドリル

アニオンの形成

H<sup>+</sup> の除去による ide イド

ate アート, ite イト(ous acid 由来)

Hr の付加による uide ウイド

電子の付加による elide エリド

カチオンの形成

H<sup>+</sup> の付加による ium イウム

HT の除去による ylium イリウム

電子の除去による eliumu エリウム

※ ate, ite は酸およびヒドロキシ化合物の OH から H を除去して生じるアニオン 例外として、methoxide (体系的に命名すると methanol + ate → methanolate), ethoxide, propoxide, butoxide, tert-butoxide (\*), phenoxide, aminoxide (H<sub>2</sub>N-O<sup>-</sup>) は PIN として保存。

- 翻訳名と字訳名の使い分け:翻訳名を使うもの
- 3.1 酸 PIN ギ酸、酢酸、シュウ酸、安息香酸、炭酸

GIN 酪酸、ケイ皮酸、コハク酸、クエン酸、乳酸、酒石酸 など

3.2 官能種類名 例 フッ化、塩化、臭化、ヨウ化、アジ化、シアン化、無水物

ハロゲン化物、アジ化物、シアン化物、オニウム塩、酸無水物などで用いられる。

3.2.1 ハロゲン化物では、PIN では置換命名法で命名するので、これらの翻訳名は用いない。

例 C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>2</sub>Br ○ (bromomethyl)benzene → (ブロモメチル)ベンゼン

 $\triangle$  ベンジル=ブロミド、臭化ベンジル、 $\alpha$ -ブロモトルエン

3.2.2 酸ハロゲン化物では、PIN が官能種類命名法になる。PIN では字訳をする。

例 acetyl chloride → ○ アセチル=クロリド, △ 塩化アセチル

- 3.2.3 酸無水物 官能種類名 anhyudride は酸無水物と翻訳する。
- 3.2.4 オニウム塩のハロゲン化物イオン (アニオン) 名は、PIN では字訳する。
- 3.2.5 その他 PIN 尿素、チオ尿素
- 酸とその誘導体の日本語名称
- 4.1 上記3に示した翻訳名を持つ酸に基づく有機化合物のPINは、字訳名ではなく翻訳名を用いる。

例 C1CH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H chloroacetic acid→ クロロ酢酸

4.2 エステルと塩 従来の方式に則り、英語名と異なる語順となる。

例 ethyl acetate → 酢酸エチル

例 sodium benzoate → 安息香酸ナトリウム

- 4.3 酸無水物 字訳ではなく、酸無水物と翻訳する。
- 4.4 酸ハロゲン化物では、PIN が官能種類命名法になる。PIN では字訳をする。
- 酸とその誘導体の日本語名におけるつなぎ符号の挿入

英語名称が2単語以上になる場合、そのスペースに位置につなぎ符号「=」を挿入することがある。

- (A) つなぎ符号を入れない。
- (B) すべての語間につなぎ符号を入れる。
- (C) 3 語以上で構成される名称の場合は、つなぎ符号を入れる。
- 7.1.1 酸 (A) 例 hexanoic acid  $\rightarrow \bigcirc$  ヘキサン酸
- 7.1.2 塩 (C) 例 sodium acetate → 酢酸ナトリウム

例 ammonium potassium hexanedioate → ○ ヘキサン二酸=アンモニウム=カリウム

- 7.1.3 酸無水物 (C)
- 7.1.4 酸ハロゲン化物 (B), PIN ではハロゲン部分は翻訳せず、字訳とする。

例 benzoyl chloride → ○ ベンゾイル=クロリド

△ ベンゾイルクロリド、塩化ベンゾイル

- 7.1.5 エステル (C)
- 7.2 オニウム塩 (B)
- 7.3 アミンオキシド、イミンオキシド、ニトリルオキシド (B)
- 7.4 GIN では官能種類命名法が認められている ケトン、エーテル、スルフィド、スルホキシド、スルホン
  - → (日本語名においても、官能種類命名法は GIN なので) つなぎ符号の挿入の有無は任意。