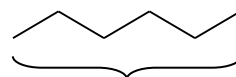


ノナノナコンタノナクタノナリアン!

> Ω Ω Ω



炭素数 = n (この図は n = 6)



[直鎖アルカン]

はじめの4種以外は、
アルカン名 = 数詞+アン

n	alkane	アルカン名
1	methane	メタン
2	ethane	エタン
3	propane	プロパン
4	butane	ブタン
5	pentane	ペンタン
6	hexane	ヘキサン
7	heptane	ヘプタン
8	octane	オクタン
9	nonane	ノナン
10	decane	デカン
11	undecane	ウンデカン
12	dodecane	ドデカン
13	tridecane	トリデカン
14	tetradecane	テトラデカン
15	pentadecane	ペンタデカン
16	hexadecane	ヘキサデカン
17	heptadecane	ヘプタデカン
18	octadecane	オクタデカン
19	nonadecane	ノナデカン
20	icosane	イコサン
21	hencosane	ヘンイコサン
22	docosane	ドコサン
23	tricosane	トリコサン
24	tetracosane	テトラコサン
25	pentacosane	ペンタコサン
26	hexacosane	ヘキサコサン
27	heptacosane	ヘプタコサン
28	octacosane	オクタコサン
29	nonacosane	ノナコサン
30	triacontane	トリアコンタン
31	hentriacontane	ヘントリアコンタン
32	dotriacontane	ドトリアコンタン
33	tritriacontane	トリトリアコンタン
34	tetratriacontane	テトラトリアコンタン
:		
40	tetracontane	テトラコンタン
50	pentacontane	ペンタコンタン
60	hexacontane	ヘキサコンタン
70	heptacontane	ヘプタコンタン
80	octacontane	オクタコンタン
90	nonacontane	ノナコンタン
100	hectane	ヘクタン
101	henhectane	ヘンヘクタン
102	dohectane	ドヘクタン
:		

倍数接頭辞 (置換された同一の基の倍数)

単独では、1 は mono、2 は di。他の数詞と複合するとき、1 は hen、2 は do とする。

decyl, decene は、デキル、デケンではなく、デシル、デセン。

mono, hen (mono)
di, do (bis)
tri (tris)
tetra (tetrakis)
penta (pentakis)
hexa (hexakis)
hepta
octa
nona
deca

un + decane undeca
do + dodeca
tri + trideca
tetra +
penta +
hexa +
hepta +
octa +
nona +

hen + icosane
do + cosane
tri +
tetra +
penta +
hexa +
hepta +
octa +
nona +

tri + acontane
hen + triacontane
do +
tri +
tetra +

tetra + (a)contane
penta +
hexa +
hepta +
octa +
nona +

ヘクト+アン

他と複合するとき、1 は hen だが、11 は例外で hendecane ではなく、undecane になる。111 も undecahectane になるなど。

20 は "icosa" 以外に "eicosa" エイコサを用いることがある (1993 年 IUPAC 以前など)。これらの語頭の "(e)i" は、"hen" 以外の一位の数詞の後で脱落する。

200 dictane	ジクタン	1000 kiliane	キリアン
300 trictane	トリクタン	2000 diliane	ジリアン
400 tetractane	テトラクタン	3000 triliane	トリリアン
500 pentactane	ペンタクタン	4000 tetraliane	テトラリアン
600 hexactane	ヘキサクタン	5000 pentaliane	ペントリアン
700 heptactane	ヘプタクタン	6000 hexaliane	ヘキサリアン
800 octactane	オクタクタン	7000 heptaliane	ヘプタリアン
900 nonactane	ノナクタン	8000 octaliane	オクタリアン
		9000 nonaliane	ノナリアン

複合数詞は小さい桁から組み合わせる。一、十、百、千の桁の該当する数詞（アルカン名語尾の -ane を -e に戻したもの）をこの順で結合する。重複する母音 a を取り去り、-ane を付加する。

例) 111 = un + deca + hecta (-a) + ane = undecahectane (11 の例外を適用。×hendecahectane)

例) 741 = hen + tetraconta + heptacta (-a) + ane = hentetracontaheptactane

例) 1132 = do + triaconta + hecta + kilia (-a) + ane = dotriacontahectakiliane

例) 2567 = hepta + hexaconta + pentacta + dilia (-a) + ane = heptahexacontapentactadiliane

[分岐アルカン]

アルキル基 (アルカンイル基)

アルカンの末端の水素の取り除き、この位置で母体に置換するような構造は、alkane の語尾 -ane を -yl (イル) に換えて alkyl として命名する。このとき水素との結合を均一開裂させて生じる遊離原子価をもつ炭素を位置番号 1 とする。

アルキル基を一般に「R」と記すことがある。一部のアルキル基には、よく使われる略号のあるものもある。Me(メチル基)、Et(エチル基)など。単純な直鎖アルキル基の例

-CH₃ メチル基 (meth-ane → meth-yl)

-C₂H₅ エチル基 (eth-ane → eth-yl)

枝分かれをもつアルカンの命名では、右図のように「主鎖」と「側鎖」に分けて考える。側鎖が結合している位置を示す番号は、他に優先すべき事情がない場合は、「数字の組」* 次ページが小さくなるよう定める。アルキル基に枝分かれがある場合も、同様に命名することができる。

例 2,4-dimethylpentane の 1 位の水素を除いてできるアルキル基 → 2,4-dimethylpentyl

末端以外の水素を取り除き、この位置で母体に置換するような構造は、その位置番号を x

(ただし、1 以外) として、alkan-x-yl として命名する。以前はアルキル基のイルは 1 位に固定されており、たとえば -CH(CH₃)₂ は 1-methylethyl 基が正式な名称であった。IUPAC 規則 1993 年勧告では、この 1-methylbutyl 基を、pentan-2-yl 基と表記することが認められた。ただし、pent-2-yl や 2-pentyl と表記することはできない。更に、2013 年改訂より、長い鎖を置換基とするためにアルカニル基を使用する旨が明記された (例: propan-2-yl 基を、1-methylethyl 基に優先して使用する*)。

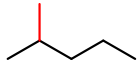
なお、単純置換基でも位置番号を持つ場合はカッコで括る。例: (propan-2-yl)benzene

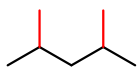
整理 alkyl … 母体との結合 (接尾語-yl) の位置は、1 位。

alkan-x-yl … 母体との結合 (接尾語-yl) の位置 x は、1 位以外。

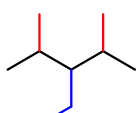
* isopropyl は優先名では使用できない。分岐したアルキル基では、tert-butyl のみ優先名で使用する。

枝分かれのある場合 : 「主鎖」と「側鎖」
主鎖中の水素が「側鎖」に置き換わったと考え、
「側鎖の位置番号」+「側鎖の名前」+「主鎖」
として命名する。


(例) 2-methylpentane 

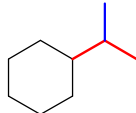
(例) 2,4-dimethylpentane 

単純なアルカンでは、最長部分が主鎖。

異なる置換基は、アルファベット順に書く。
(例) 3-ethyl-2,4-dimethylpentane 

環になっている場合 :
環状アルカン = cyclo + alkane

(例) cyclohexane 

(例) (1-methylethyl)cyclohexane 

○ propan-2-ylcyclohexane

※ 数字の組の比較

同数からなる数字の組み合わせ ((1, 1, 10, 20) と (2, 3, 1, 5) など) を比較して「小さい組」を決定する場合、それぞれを小さい順にならべ、最初の数同士を比較する。上の例の場合、どちらも 1 で引き分け。その場合、2 番目に小さい数同士を比較する。1 と 2 で最初の組の方が小さいことになる。2 番目で決まらなければ 3 番目を比較、以下同様。逆に「大きい組」を決定する必要がある場合はそれぞれの組内の数字を大きい順に並べて同様に比較する。

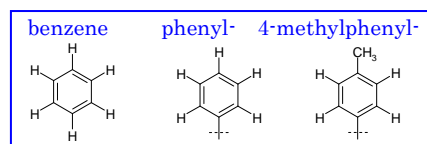
置換基の位置番号の組合せの中身の順序は、位置番号がないものが最優先、次にイタリック体の英字の位置番号 (*N* など)、ギリシア文字の位置番号、ついでアラビア数字の順に考慮する。

命名上、数字の組が小さくなることよりも優先されるべき事情の例

- アルキル基以外の官能基をもつ場合、最も優先される種類の官能基 (主官能基) の結合位置の番号がより小さくなること、そのほかの置換基全体の数字の組を小さくすることよりも優先される。

※ 慣用名 (保存名)

IUPAC による体系的な命名法以外に慣用名が認められているものがある。慣用名については、教科書等に出てくる都度、個々に学ぶこと。ただし、慣用名によっては誘導体を作ってもよいもの (例: phenyl 基は、4-methylphenyl 基とすることができる) と、誘導体を作ってはいけないもの (例: isopropyl 基から 1-bromoisopropyl 基などとしてはいけない) のものがあるので、区別して覚えるようにする。
(なお、2013 年勧告では優先 IUPAC 名 (PIN) として使用する慣用名 (保存名) が大幅に制限されている。たとえば、isopropyl 基も PIN には使用できない。)



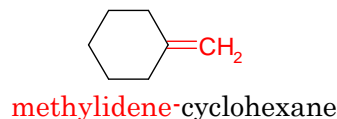
※ 二価、三価アルキル基の命名 (アルキリデン基、アルキリジン基)

アルカンのひとつの炭素から 2 個の水素を除いてできる 2 価の基は、1 価の基名 (アルキル基名) に -idene をつけて命名する。3 価の基は -idyne (イジン) である。

ただし 1993 年勧告では、相手との間に二重結合や三重結合を作らない場合は、alkane-1,1-diyl, alkane-1,1,1-triyl という使い方が推奨される。(相手との間に単結合と二重結合をもつ三価基の場合は、-1-yl-1-ylidene)

また、直鎖アルカンの両端から水素原子 1 個ずつを取り除いてできる基 -CH₂CH₂- や -CH₂CH₂CH₂- は、ethylene, trimethylene のように命名し、側鎖がある場合は置換基として接頭語をつけることができた。2013 年勧告では、これらはたとえば propane-1,3-diyl などを優先する。

CH₂= は、methyl + idene



直鎖アルキル基: アルカンの末端の炭素から水素を 1 つ取り除いてできるもの。

alkane → alkyl (語尾の -ane が -yl) -C_nH_{2n+1}, CH₃[CH₂]_{n-2}CH₂-

アルキリデン基: アルカンの末端の同一の炭素から水素を 2 つ取り除いてできるもの。

alkane → alkylidene (alkyl + id + ene) = C_nH_{2n}, CH₃[CH₂]_{n-2}CH=

アルキリジン基: アルカンの末端の同一の炭素から水素を 3 つ取り除いてできるもの。

alkane → alkylidyne (alkyl + id + yne) ≡ C_nH_{2n-1}, CH₃(CH₂)_{n-2}C≡

n	alkyl	アルキル	alkylidene	アルキリデン	alkylidyne	アルキリジン
1	methyl	メチル	methylidene (methylene)	メチリデン メチレン*	methylidyne (methine)	メチリジン メチン*
2	ethyl	エチル	ethylidene	エチリデン	ethylidyne	エチリジン
3	propyl	プロピル	propylidene	プロピリデン	propylidyne	プロピリジン
4	butyl	ブチル	butylidene	ブチリデン	butylidyne	ブチリジン

アルキル基

-CH=CH₂ vinyl ビニル*

-CH₂C₆H₅ benzyl ベンジル

-CH(CH₃)₂ isopropyl イソプロピル*

アルキリデン基

=C=CH₂ vinylidene ビニリデン*

=CHC₆H₅ benzylidene ベンジリデン*

=C(CH₃)₂ isopropylidene イソプロピリデン*

* メチレン、メチン、ビニル、イソプロピル等は、優先名では使用できない。

[官能基をもつ化合物] (ここでは短縮構造式で示した。)

複数の種類の官能基 (特性基) を含む化合物の場合、次表の下方ほど主官能基 (接尾語で命名する) の優先度が高い。最も優先度の高い官能基を**主基**とし、**接尾語**を用いる。それ以外の官能基は、接頭語を用いて**置換基**とする。優先度の最も高い基 (主基) が非環状鎖の一部である場合は、主官能基の数が最大になる最も長い炭素鎖を母体として選ぶ。主官能基が環に付いていれば母体としてその環系を用いる。

官能基の構造と命名 :		母体としての命名時に使用。	側鎖としての命名時に使用。	必要に応じ、位置番号をつける。	側鎖として命名
一般名	一般形	接尾語	接頭語	例 (名称)	
alkane	R-H	-ane	alkyl-	CH ₃ CH ₂ CH ₃ (propane)	-F fluoro
alkene		-ene		CH ₃ CH=CH ₂ (propene)	-Cl chloro
alkyne		-yne		CH ₃ C≡CH (propyne)	-Br bromo
halide	R-X		halogeno-	CH ₃ CH ₂ CH ₂ Cl (1-chloropropane)	-I iodo
ether	R-O-R'		alkyloxy-	C ₆ H ₅ OCH ₂ H ₃ (ethoxybenzene) (ethoxy は ethyloxy の短縮名)	※アニオンとしての命名時は、 -o → -ide 例: chloride
sulfide	R-S-R'		alkylsulfanyl-	C ₆ H ₅ SCH ₃ ((methylsulfanyl)benzene)	
arene	Ar-H			C ₆ H ₆ (benzene)	
-----	R-NO ₂		nitro-	CH ₃ CH ₂ CH ₂ NO ₂ (1-nitropropane)	
amine ****	R-NH ₂	-amine	amino-	CH ₃ CH ₂ CH ₂ NH ₂ (propan-1-amine)	
thiol ***	R-SH	-thiol	sulfanyl-	CH ₃ CH ₂ CH ₂ SH (propane-1-thiol)	
alcohol	R-OH	-ol	hydroxy-	CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH (propan-1-ol)	
ketone	R-CO-R'	-one	oxo-	CH ₃ C(=O)CH ₃ (propan-2-one)	
aldehyde	R-CHO	-carbaldehyde ◇	formyl-	C ₆ H ₅ CHO (benzenecarbaldehyde) △	
	R-CHO *	-al	oxo-▽	CH ₃ CH ₂ CHO (propanal)	
nitrile	R-CN	-carbonitrile ◇	cyano-	C ₆ H ₅ CN (benzenecarbonitrile) △	
	R-CN *	-nitrile		CH ₃ CH ₂ CN (propanenitrile)	
amide	R-CONH ₂	-carboxamide ◇	carbamoyl-	C ₆ H ₅ CONH ₂ (benzenecarboxamide) △	
	R-CONH ₂ *	-amide	amino-, oxo-▽	CH ₃ CH ₂ CONH ₂ (propanamide)	
carboxylic acid halide	R-COX	-carbonyl halide ◇	carbonochloridoyl-	C ₆ H ₅ COCl (benzenecarbonyl chloride) △	
ester **	R-CO ₂ R'	-oate	chloro-, oxo-▽	CH ₃ COCl (ethanoyl chloride) △	
	R-CO ₂ R' *	-carboxylate ◇	alkyloxycarbonyl-	C ₆ H ₅ CO ₂ CH ₃ (methyl benzenecarboxylate) △	
carboxylic acid anhydride **	(RCO) ₂ O	-carboxylic anhydride ◇	alkoxy-, oxo-▽	CH ₃ CO ₂ C ₂ H ₅ (ethyl ethanoate) △	
	(RCO) ₂ O *	-oic anhydride		(C ₆ H ₅ CO) ₂ O (benzenecarboxylic anhydride) △	
carboxylic acid	RCO ₂ H	-carboxylic acid ◇	carboxy-	(CH ₃ CO) ₂ O (ethanoic anhydride) △	
	RCO ₂ H *	-oic acid		C ₆ H ₅ CO ₂ H (benzenecarboxylic acid) △	
				CH ₃ CO ₂ H (ethanoic acid) △	

△ は、IUPAC2013 勧告より、優先名では、保存名 (acetic acid, benzoic acid およびそこから派生する名称等) が使用されます。→ p7

◇ 環に直結している場合など以外に、「枝分かれの無い鎖に」「3個以上」が結合している場合、接尾語としてこれらの語を用います。

例: HO₂C-CH₂CH(CO₂H)-CH₂CO₂H プロパン-1,2,3-トリカルボン酸 (3-カルボキシペンタン二酸ではない) P65-1.2.2.1

ただし、R⁻, R^{'-} はアルキル基・アルカンイル基 (アルカンから水素をひとつ除いたもの)。
Ar⁻ はアリル基 (芳香族化合物 arene (アレーン) より水素を除いたもの)。
フェニル基 Ph⁻ は、C₆H₅⁻のことで、ベンゼンより水素をひとつ除いた基)。

主基にならない (接尾語を持たない) 官能基は、置換命名法の体系では接頭語としてのみ命名する。
halide, alcohol, ketone, ether, sulfide, sulfoxide, sulfone などの官能種類命名法による命名 (例、メチルプロミド、メチルアルコール、エチルメチルケトン、ジエチルエーテル、…) は、2013年改訂により優先名 PIN としては認められないので注意。

* 母体が鎖状の化合物では、**青字で示した炭素**が官能基の一部であるが、主鎖の炭素として数える。
母体が環状のものである場合と、母体が鎖状で官能基中の炭素も含めて数える場合、接尾語が異なる。

例 C₆H₅-CHO (benzene + **carbaldehyde**) では、ホルミル基中の炭素は、benzene に含まれない。

CH₃CH₂-CHO (propan + **al**) では、ホルミル基中の炭素は、主鎖 propane の部分に含まれる。

** エステル、酸無水物

エステル、酸無水物、酸ハロゲン化物の優先名は、厳密に言えば官能種類命名法での命名になるが、置換命名法と同様に命名したカルボン酸名を用いるので、違いを意識する必要はほとんどない。

エステルは2価の官能基であるが、左右 (カルボン酸側、アルコール側) が非対称なので注意すること。

アルキル基名 + 種類名 (オアート) で、間には空白文字 (スペース) が入る。

例 CH₃CO₂CH₃ **methylethanoate**, **ethyl acetate**

なお、アルキル基名なしの -oate, -carboxylate はカルボン酸に由来するアニオン (RCO₂⁻) を表す。

例 CH₃CO₂Na **sodium acetate**, **sodium ethanoate**, NaCl **sodium chloride**

エステルを置換基として命名する場合、alkoxy- … oxo-, または alkoxycarbonyl- を用いる。

例 CH₃OCOCH₂CH₂- 3-methoxy-3-oxo-propyl 基, CH₃OCOC₆H₄- methoxycarbonylphenyl 基

一般名では、ジカルボン酸のうち一方のみがエステルになっているような化合物 (ハーフエステル、部分エステル) の場合、「エステル基をもつカルボン酸」としても命名できるが、部分エステルとして命名する場合は、アルキル基名 + 種類名 (オアート) の間に **hydrogen 水素** をおくことができる。

例 HO₂CCH₂CH₂CO₂Et **ethyl hydrogen succinate**, **ethyl hydrogen butanedioate**

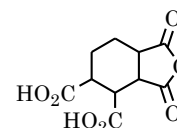
対称な酸無水物 (同じ種類のカルボン酸2分子から脱水縮合したもの) は、酸の名称の **acid** を種類名 **anhydride 無水物** に代えて命名する。非対称な酸無水物 (異なる2種類の酸から誘導される混合無水物) は、2つの酸名の形容詞をアルファベット順にならべ、種類名 **anhydride 酸無水物** を添えて命名する。ジ (またはそれ以上の) カルボン酸が分子内の脱水によって生じる環状の酸無水物は、対応するカルボン酸の名称の **acid** を種類名 **anhydride 無水物** に代えて命名する。

なお、**acetic anhydride** は、無水酢酸 (または 酢酸無水物)。水を含まない純粋な酢酸は「無水酢酸」とは言わない。(氷酢酸という慣用的な呼称がある。)

例 (CH₃CO)₂O **acetic anhydride**, **ethanoic anhydride**

例 CH₃C(=O)OC(=O)Ph **acetic benzoic anhydride**, **benzenecarboxylic ethanoic anhydride**

例 右図 **cyclohexane-1,2,3,4-tetracarboxylic acid 3,4-anhydride**



*** チオール **thiol** は、スルファニル基 (-SH) を持つ化合物のことである (スルファニルは H₂S)。スルファニル基は、IUPAC1993 以前 (IUPAC1979) では、メルカプト基 (mercapto) と命名された。そのため、チオールはメルカプタンと呼ばれることがある。

例 CH₃CH₂-SH (ethanethiol) 旧名称 **ethyl mercaptane**

例 CH₃CH(SH)CH(OH)CH₃ (3-sulfanylbutan-2-ol) 旧名称 **3-mercapto-2-butanol**

**** アミン

アミンの優先名については、2013年勧告で大きく変わっているので要注意。
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。

原則として、(従来、官能種類命名法に相当するが例外的に置換命名法として認められていた)「**アルキルアミン**」が優先名では使用できなくなり、**厳密な置換命名法の規則に則り、「アルカンアミン」の形で命名されることになる。**

P-62.2.1.1 第一級アミンの保存名

PhNH₂ ○ aniline アニリンのみが保存される。△ 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。

* 従来の「アルキルアミン」を正当化するための解釈。

→ アミンは真の予備選択母体水素化物ではない(アミンが NH₃ 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 ○ methanamine メタンアミン △ methylazane, △ methylamine

P-62.2.2 第二級、第三級アミン

「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 *N*-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。**

例 Ph-NH-Ph ○ *N*-phenylaniline
△ (diphenyl)amine, △ diphenylazane, × diphenylamine

例 Et₃N ○ *N,N*-diethylethanamine
△ (triethyl)amine, △ triethylazane, × triethylamine

例 BuN(Me)(Et) ○ *N*-ethyl-*N*-methylbutanamine
△ butyl(ethyl)(methyl)amine, △ butyl(ethyl)(methyl)azane

例 H₂N[CH₂]₂NH(CH₃) ○ *N*¹-methylethane-1,2-diamine

△ 保存名について

以下の分子について、優先名は以下の保存名となる。

	ギ酸由来	酢酸由来	安息香酸由来
カルボン酸	formic acid	acetic acid	benzoic acid
酸無水物	formic anhydride	acetic anhydride	benzoic anhydride
アルデヒド	formaldehyde	acetaldehyde	benzaldehyde
ニトリル	formonitrile	acetonitrile	benzonitrile
アミド	formamide	acetamide	benzamide
アシル基	formyl	acetyl	benzoyl
酸クロリド	formyl chloride	acetyl chloride	benzoyl chloride
ナトリウム塩	sodium formate	sodium acetate	sodium benzoate
エステル	methyl formate	methyl acetate	methyl benzoate

- ・ 上記以外に、カルボン酸 シュウ酸 oxalic acid, オキサミド酸 oxamic acid (シュウ酸のモノアミド) およびその関連分子が同様に保存名を持つ。

- ・ ギ酸由来のアシル基名 formyl が、そのままカルボアルデヒド置換基 $-CHO$ の名称 (優先接頭語) となっている。

- ・ 安息香酸誘導体以外にも以下の置換ベンゼンの優先名は保存名となる。(*) は PIN では置換不可。

benzenol	→ phenol
benzenamine	→ aniline
methoxybenzene	→ anisole (*)
benzen-yl	→ phenyl
phenylmethyl	→ benzyl (*)
phenylmethylenidene	→ benzylidene (*)
phenylmethylydyne	→ benzylidyne (*)
methylbenzene	→ toluene (*)
dimethylbenzene	→ xylene (*) … 1,2-などで位置異性体を示す

- ・ PIN において $-OR$ で短縮名が保存されるのは、以下の 6 つのみ。

methoxy, ethoxy, propoxy, butoxy, phenoxy, tert-butoxy (*)

▽ 上記表の接頭語についての補足

- ・ 炭素が母体を構成する一部である場合のエステル、酸クロリド、アミド等について、上位の特性基がある場合には、エステル基、酸クロリド基、アミド基、ではなく、同一炭素上のオキシ基とアルコキシ基などに分割して修飾する。カルボキシ基のヒドロキシ基とオキシ基への分割は行わない。

例 $HO_2C-CH_2CH_2-C(=O)OMe \rightarrow 4\text{-methoxy-4-oxobutanoic acid}$

例 $HO_2C-CH_2CH_2-C(=O)Cl \rightarrow 4\text{-chloro-4-oxobutanoic acid}$

例 $HO_2C-CH_2CH_2-C(=O)NH_2 \rightarrow 4\text{-amino-4-oxobutanoic acid}$

例 $-CH_2CH_2CO_2H \rightarrow 2\text{-carboxyethyl}$ … yl はカルボン酸より上位の接尾語。

- ・ 母体を構成しない炭素をもつ (独立した) エステル基、酸クロリド基、アミド基について、上位の特性基がある場合の接頭語は以下ようになる。

例 $HO_2C-C_6H_4-C(=O)OMe \rightarrow 4\text{-(methoxycarbonyl)benzoic acid}$

例 $HO_2C-C_6H_4-C(=O)Cl \rightarrow 4\text{-(carbonochlorido)benzoic acid}$

例 $HO_2C-C_6H_4-C(=O)NH_2 \rightarrow 4\text{-carbamoylbenzoic acid}$

PIN carbonochlorido は、GIN としては chlorocarbonyl も使用できる。

カルボノクロリドイル基の名称は、P-65.2.1.4 炭酸 carbonic acid の誘導体として得られるモノ酸塩化物である $ClC(=O)OH$ の優先名、carbonochloridic acid からの派生である。

- ・ エステル、アミド等について、結合順序によっては、接頭語は以下ようになる。

例 $CH_3C(=O)O-CH_2CH_2-CO_2H \rightarrow 3\text{-(acetyloxy)propanoic acid}$

例 $CH_3C(=O)NH-CH_2CH_2-CO_2H \rightarrow 3\text{-(acetamido)propanoic acid}$

[位置番号の省略等]

2013年改訂により、PINにおける位置番号の *o*-, *m*-, *p*- は廃止された。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

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として、母体が保存慣用名である場合、鎖由来でその(両)末端炭素が主基の構造に含まれるようなモノおよびジカルボン酸(およびその誘導体)、ニトリル、アルデヒドなど。
- (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 $\text{HCO}_2\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}(\text{Cl})-\text{CO}_2\text{H}$	○ chlorobutanedioic acid * ← (A), (C)
例 $\text{H}_2\text{NCO}-\text{CH}_2\text{CH}(\text{Cl})-\text{CONH}_2$	○ 2-chlorobutanediamide * ← (A)
例 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$	○ ethanol ← (B)
例 $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2$	○ propene ← (B), PIN では prop-1-ene とはしない。
例 $\text{CH}\equiv\text{Si}-\text{Si}\equiv\text{CCH}_3$	○ ethylidyne(methylidyne)disilane ← (D)
例 $\text{F}_2\text{CHCO}_2\text{H}$	○ difluoroacetic acid ← (B)
例 $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CO}_2\text{H}$	○ pentafluoropropanoic acid ← (E)

* ブタン二酸の場合、モノ置換基は2位、または3位で置換可能であるが、置換した位置が2位に決まる。ブタンジアミドの場合、N上も置換可能なため、2位置換基の位置番号は省略できない。

なお、「正しい名称にならなくても、物理的に可能な位置に接頭語(置換基)や接尾語(主基)を移動した時に異性体になるような場合」は、位置番号を省略できない。

- propan-2-one : 1位などに主基(オキシ基)が移動すると、アルデヒドになってしまうので正しい名称ではないが、異性体となるので位置番号は省略できない。
- propanal : アルデヒドは末端位置にしかないので、(A)の規定により位置番号を書かない。
- propan-1-ol : 接尾語(主基、水酸基)は、1位、2位で異性体となる。
- ethanol : 主基(水酸基)が移動しても、いずれにしても同じ位置番号(1位)になるので、位置番号は書かない。
- 2-chloroethan-1-ol : 接頭語(クロロ基)は1位、2位で異性体になるので省略できない。また、この場合、2-chloroethan-1-ol と 2-chloroethan-2-ol (後者は、正しい名称ではない)が異性体となるため、主基の位置番号も省略できない。
- cyclohexanamine : 対称な構造のモノ置換で、必ず1位になるので、主基の位置番号は省略する。
- 2-bromocyclohexan-1-amine : 2-chloroethan-1-ol の場合と同様。
- 2-bromoaniline : アニリン(保存慣用名)は母体炭化水素と主基に分けることのできない一体の名称であり、位置番号は書かない。
- (置換基として) $-\text{N}(\text{CH}_3)_2 \rightarrow$ dimethylamino 基 : 置換可能な位置がすべて置換されている。
- $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2 \rightarrow$ *N,N*-dimethylethanamine : 形式上、エタンアミンは、C上も置換可能。(ただし、エチル基上でのメチル置換は母体炭化水素の構造が変わるので、正しい名称ではない。)

[英数字順]

複数の置換基名がある場合は、置換基名を英数字順*に並べる。ただし、その置換基がいくつあるのかを表す倍数接頭語は除いて考慮する。つまり、methyl 基が2つある場合の dimethyl は、m として考慮する。一方で、複合置換基(置換基上にさらに置換基があるもの)において名称の一部となっている倍数接頭語は置換基名として考慮する。つまり、2,2-dimethylpropyl 基は、d として考慮する。

* 英数字順 : ローマン体英字 < イタリック体英字 (位置番号等以外) < 位置番号[英字 < 数字]の組
例 butan-2-yl < butyl < *tert*-butyl < 2,3-dimethylbutyl < 3,3-dimethylbutyl < 2-ethylbutyl

命名法(補完)

※ 優先 IUPAC 名 (preferred IUPAC name, PIN) と一般 IUPAC 名 (general IUPAC name)

2013 年勧告では、1 つの構造にはなるべく 1 つの名称を用いることが望ましいという理念から、優先的に使用することが推奨される PIN が提唱された。PIN の命名規則の基本は「置換命名法」である。また、条件にあった場合には「倍数命名法」が使用されるが、その適用範囲が大幅に広がっている。

その他に、これまでの命名規則を踏襲した命名によるものは、GIN として使用が認められる。ただし、命名規則の整理に従って、今まで体系名として認められていたものでも、そのいくつかは、体系名としては認められなくなったものもある。

例えば、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ の PIN は「置換命名法」による ethanol である。この他に「官能種類命名法」による命名 ethyl alcohol も GIN として認められる。その他にもいくつかの命名法の体系がある。

[慣用名 (common name, trivial name)] : 統一的な規則に則って定められていないもの。

e. g. methane, ethane, propane, butane, benzene, phenol, glucose...

2013 勧告により、IUPAC では、一部の化合物に対し、慣用名を優先して使用する → 「保存名」。ただし、保存名は、大幅に整理制限され、その多くが使用できないこととなった。

例) 優先 IUPAC 名において、「acetone」の使用は認められない(一般名としては使用できる)。

例) 優先 IUPAC 名において、枝分かれのあるアルキル基の慣用名としては、*tert*-butyl 基のみが許容。isopropyl 基、*sec*-butyl 基等はいずれも認められない。

優先 IUPAC 名で使用される保存名 (の例)

acetylene^(*), benzene, toluene^(*), xylene^(*), formic acid^(*), acetic acid, benzoic acid, oxalic acid, acetonitrile, benzonitrile, formaldehyde, phenol, anisole^(*), aniline

また、IUPAC で優先して使用する保存名であっても、置換命名法の体系で使用して母体とすることが認められないもの(*)もある。詳細は、IUPAC ガイドを参照する必要がある。

○ acetylene → × methylacetylene, × bromoacetylene (置換不可)

○ benzene → ○ bromo-benzene, × benzen-yl (C_6H_5- は、保存名 phenyl となる)

○ toluene → △ 2-bromo-toluene, × α -bromo-toluene

(以前は、環上のみ置換基が許されていたが、2013 勧告により置換を許さなくなった。)

○ 1,3-xylene, △ *m*-xylene → × 2-bromo-*m*-xylene (置換不可)

※ IUPAC では認めていない名称でも、一部慣例的に使用されているものもある。

例えば、 α -bromo-toluene は IUPAC では認められない名称であるが、メチル基上が臭素化された構造、 $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{Br}$ を指す。また、 $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ (IUPAC 名 ethene) は、慣例的にエチレン ethylene と記されることがあるが、IUPAC ガイド (1993) では、ethylene は、 $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ の構造の慣用名としては認められておらず、二価基 $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ (IUPAC 名 ethane-1,2-diyl) の慣用名としてのみ認められている。従って、 $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ を ethylene と表記することも、その 2 つの水素が臭素で置換された $\text{CHBr}=\text{CHBr}$ を dibromoethylene と表記することも、1993 年以降、IUPAC の体系では認めていない。とはいえ、この dibromoethylene という物質名は、 $\text{CHBr}=\text{CHBr}$ (dibromoethene) を指すと思われる。(di)bromo- が置換を表す接頭語の形であることから、置換命名法に則して命名されていると判断できるためである。

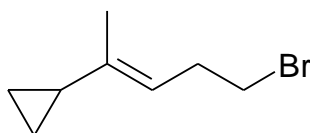
なお、bromobenzene は臭化ベンゼンと訳すことができる*のに対し、dibromoethylene を二臭化エチレンと訳してはいけぬ。二臭化エチレンの名称中のエチレンは、二価基 $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ であり、 $\text{CH}_2\text{Br}-\text{CH}_2\text{Br}$ の基官能命名法による物質名 ethylene dibromide (優先名は 1,2-dibromoethane) の訳であるからである。このような曖昧さを避けるためには、英語表記をそのまま字訳 (適切な規則に従ってカタカナに置き換え) する、体系名に直す、などすればよい。(※ 2013 年勧告では、英語名から日本語名への字訳、翻訳の仕方定められており、日本語の優先名もただ一通りに決めることができる。)

[置換命名法]

※ 2013 勧告により、優先順位則について、以下のように変更された。

- ・ 構成する炭素数と無関係に、環が鎖に優先する。
- ・ 炭素鎖の長さが、不飽和結合の存在に優先する。(重要な変更)
- ・ 優先順位に差の無い同一の母体構造が複数あるとき、倍数命名法を使用する(環にも適用)

1. **主基** (一番優先される官能基) を決める。これが名前の**接尾語**の部分を決める。
2. **主鎖** (母体の炭化水素) を見つける。このとき、単純なアルカンでは連続した最も長い炭素鎖を見つめる (次の (1) と (2) に該当する部分が無い) のであるが、一般的には次の順に決める。
 - (1) **(主基数)** 主基が最多の鎖を第 1 優先とする。
 - (2) **(環 > 鎖)** 環の構造があれば、炭素鎖に優先する。(※ 2013 勧告により追加。以前は炭素数で多いものを優先した。)
 - (3) **(鎖の長さ: 炭素数)** 上でひとつに決まらない場合、連続した炭素鎖の長さが長いものを選ぶ。
 - (4) **(多重結合数)** 多重結合 (二重結合と三重結合を区別しない) の数が最大になるもの、次いで二重結合の数が最大になるものを選ぶ。 (※ 2013 勧告以前は、多重結合が炭素鎖の長さに優先した。)
 - (5) **(二重結合の数 > 三重結合)** 上でひとつに決まらない場合、二重結合の数が多いいものを選ぶ。
 - (6) **(主基の位置)** 上でひとつに決まらない場合、主基の位置番号が最小となるような炭素鎖を選ぶ。
 - (7) **(多重結合の位置)** 上でひとつに決まらない場合、多重結合の位置番号が、組として最小 (はじめに出てくる番号が最小、同じ場合には次にでてくる番号がより小さい、…) となる鎖を選ぶ。
 - (8) **(側鎖の数)** 上でひとつに決まらない場合、接頭辞で表される置換基の数 (アルキル基の場合には、母体上の分岐点。ハロゲンなども含めて、側鎖の置換基の数) が最多の鎖を選ぶ。
 - (9) **(側鎖の位置)** 上でひとつに決まらない場合、接頭辞で表される置換基の位置番号が、組として最小 (はじめに出てくる数字が最小、同じ場合には次にでてくる番号がより小さい、以下同じように) となる鎖を選ぶ。
 - (10) **(小さい側鎖の炭素原子数)** 上でひとつに決まらない場合、側鎖の炭素原子数を小さい方から比べ、差が見つかったところの側鎖の炭素原子数が大きいものを選ぶ。
 - (11) 上でひとつに決まらない場合、側鎖の分岐が最小のものを選ぶ。



環 > 鎖 の規則導入前の名称 (GIN として許容)

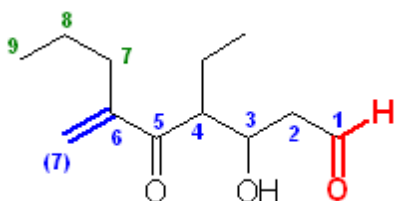
△ 5-bromo-2-cyclopropyl**pent-2-ene**

環 > 鎖 の規則導入による名称

△ (4-bromo-1-methylbut-1-enyl)**cyclopropane** または、

◎ (5-bromopent-2-en-2-yl)**cyclopropane**

後者は、1993 勧告により導入されたアルカンイル基を用いている。



多重結合 > 炭素鎖長 (2013 年勧告以前の正解)

× 4-ethyl-3-hydroxy-5-oxo-6-propyl**hept-6-enal**

炭素鎖長 > 多重結合 の規則導入による名称

◎ 4-ethyl-3-hydroxy-6-methylidene-5-oxo**nonanal**

2013 勧告によれば、前者の命名は GIN としても許容されない。

3. **位置番号をつける。** シクロアルカンを除いて末端炭素を必ず 1 番にする。位置番号をつける規則は、主鎖選択の規則と基本的に同じ。なお、多環系や複素環、天然物等については別に定められた番号系を用いる場合がある。
- (1) **(主基の位置)** 末端に一番近い主基の番号が一番若くなるように番号をつける。
 - (2) **(多重結合の位置番号)** 上で決まらない場合、末端に一番近い多重結合 (二重結合と三重結合を区別しない) の番号が一番若くなるように番号をつける。(一番近いものが同じ場合は、二番目、以下同様。ただし最後まで比較しても、二重結合と三重結合に同じ番号がつくときには、はじめの二重結合の方に小さい番号をあてる。)
 - (3) **(置換基の位置番号の組)** 上で決まらない場合、置換基の位置番号の組がもっとも小さくなるようにする。
 - (4) **(置換基の名称)** 上で決まらない場合、最もアルファベット順に先の (命名上はじめに記述される) 置換基の番号が小さくなるようにする。
 - (5) **(例外)** 環状炭化水素で、主基を含めて官能基や置換基が一つしかない場合には、位置番号をつける必要はない。
4. 置換基ごとに位置番号をつけたものをアルファベット順にならべ、**1つの化合物名として命名**する。
- (1) **(多重結合の位置番号)** 連続した2つの位置番号に跨るものはそのうちの若い方をつける。(連続していない番号を持つ2つの炭素間の多重結合の場合は、2つめの番号をカッコ内に添える。)
 - (2) **(複合官能基)** は、主鎖に結合している炭素の位置番号を 1 として同様の手順でその複合基を命名し、カッコでくくる。
 - (3) **(倍数接頭語)** 2つ以上の同一置換基がある場合は、倍数接頭語を添える (di, tri …)。ただし、複合官能基名に対しては、bis, tris, tetrakis, …
 - (4) **(アルファベット順)** 倍数接頭語や、ハイフンで区切られる *sec* などの記号を除いた置換基名のアルファベット順に並べる。ただし複合官能基内に組み込まれてしまっていて、その置換基自体の数を表すものではないような倍数接頭辞 (上(2)のルールによりカッコ内にくくられているもの) は、官能基名の一部として数える。
 - (5) **(ハイフン)** 数字と単語の間はハイフンでつなぐ。置換基と主鎖の間などはハイフンとしない。(例: × 2-methyl-pentane) ただし、行末でひとつの単語を改行して示す場合は、命名法とは別に (1つの単語であることを示すための) ハイフンを行末に示す。
 - (6) **(主鎖名の末尾の e)** 対応する炭化水素を alkane、二重結合、三重結合を含む場合は alka-en-yne (ハイフンの位置には多重結合の位置番号と必要であれば倍数接頭語) とし、その後ろに主基名を書く。ただし、母音から始まる主基名の場合は、主鎖名の末尾の e は脱落する。また、必要な場合は、主基名の直前にその位置番号や倍数接頭語を示す。数字やハイフンは、その前後の母音子音び判断に影響を与えないが、倍数接頭語により子音となった場合は、主鎖名の末尾の e は脱落しない。 例: alkan-ol → alkane-diol

[官能種類命名法 (functional class nomenclature)] :

[基官能命名法 (radicofunctional nomenclature)] :

置換基の名称と官能基の種類名 (class name, 一般名) を連結する。物質名が複数の単語からなることがある。IUPAC1993 以前は、基官能命名法の名称であったが、1993 年勧告より上位の概念としての官能種類命名法と呼ばれる。

2013 勧告により、優先 IUPAC 名として使用できる官能基の種類名が、エステル、酸ハロゲン化物、酸無水物、オキシド等に制限された (カルボン酸は、acid の前にスペースが入るが置換命名法)。それまで認められていた halide, alcohol, ketone, ether, sulfide, sulfoxide, sulfone などについては、一般 IUPAC 名 (GIN) としては認められるが、優先 IUPAC 名 (PIN) としては認められないこととなった。

左は置換命名法 (一般的には書かないハイフンを書き加えている)、右は官能種類命名法。

△は、2013 勧告により、PIN としては認められないもの。GIN としてのみ認められる。

halo-alkene → △ alkyl halide (ハロゲン化アルキル)
 alkan-ol → △ alkyl alcohol
 alkyl-oxy-alkane → △ alkyl alkyl ether, or, dialkyl ether
 alkan-one → △ alkyl alkyl ketone
 alkan-amine → △ alkylamine ※

※ アルキル基名と「アミン」の間にスペースを空けない。NH₃ amine への置換命名法として扱う。

以下のその他の例において、優先名 (○で始まるもの) は置換命名法の体系に拠るもの。

アミン以外について、△で示したものはいずれも官能種類命名法に拠るもの。

例 CH₃-I ○ iodomethane, △ methyl iodide
 例 *tert*-C₄H₉OH ○ 2-methylpropan-2-ol, × *tert*-butanol, △ *tert*-butyl alcohol
 例 CH₃-O-CH₃ ○ methoxymethane, △ dimethyl ether
 例 CH₃CH₂-O-CH₃ ○ methoxyethane, △ ethyl methyl ether
 例 Ph-O-CH₃ ○ anisole 保存名, △ methoxybenzene, △ methyl phenyl ether
 例 Ph-O-Ph ○ 1,1'-oxydibenzene 倍数命名法, △ phenoxybenzene, △ diphenyl ether
 例 CH₃-S-CH₃ ○ (methylsulfanyl)methane, △ dimethyl sulfide
 例 CH₃CH₂-S-CH₃ ○ (methylsulfanyl)ethane, △ ethyl methyl sulfide
 例 Ph-S-CH₃ ○ (methylsulfanyl)benzene, △ methyl phenyl sulfide
 例 CH₃CH₂NH₂ ○ ethanamine, △ ethylamine
 例 PhNH₂ ○ aniline 保存名, △ benzenamine, △ phenylamine, △ phenylazane
 例 PhCH₂NH₂ ○ 1-phenylmethanamine, △ benzylamine, △ benzylazane
 例 BrC₆H₄CH₂NH₂ ○ 1-(4-bromophenyl)methanamine, × 4-bromobenzylamine
 例 Et₂NH ○ (*N*-ethylamino)ethane, × diethylamine, △ (diethyl)amine, △ diethylazane
 例 Ph-NH-Ph ○ *N*-phenylaniline, × 1,1'-azanediylidibenzene ※, △ (dipheyl)amine
 例 Me₃N ○ (*N,N*-dimethylamino)methane, × trimethylamine, △ (trimethyl)amine
 例 CH₃(CH₂)₃N(Me)Et ○ *N*-ethyl-*N*-methylbutanamine, △ butyl(ethyl)(methyl)amine

※ ベンゼンを同一母体として倍数命名法を使用するより、アミン (保存名 anilin) が優先される。

環集合：同一の環状化合物が 2 個直接結合しているとき、相当する基名の前に接頭語 bi- (ビ) をつける。単結合でつながっているときには化合物名の前に接頭語 bi- をつけてもよい。位置番号を示すときには一方の環の位置番号にプライム (') をつける。例：4,4'-dibromo-1,1'-biphenyl

[付加命名法 (Additive nomenclature)] : 母体化合物に他の原子が付加したことを表す命名法

例：tetrahydrofuran, styrene oxide など

[減去命名法 (Subtractive nomenclature)] : 母体化合物から特定の原子あるいは原子団が取り除かれたことを表す命名法 例：リボースの 2 位の水酸基が取れたもの → 2-deoxy-D-ribose など

[接合命名法] 省略

[代置命名法] 2013 勧告により、ヘテロ原子 (団) 数が 4 つ以上のものに限定される。詳細省略

[複合置換基の命名]

原則として複合置換基は、以下の方法で命名することができる。なお、母体構造に対する置換基として命名する際には、カッコで括弧する必要がある。

例：(bromomethyl)benzene … ブロモ基とメチル基がそれぞれ別に母体に結合しているのではない

例：(pentyloxy)benzene ↔ ethoxybenzene (短縮名なので複合していない置換基と見做せる)

→ 置換基が複合する場合、母体構造から遠いところから重ねていく。つまり、

(母体構造) -A-B-C-D

「(Dが結合したC)が結合したB)が結合したA)が置換基である。この順で名前を付ける。

例：(母体構造) -OCH₂CH₂CH₂CH₂-OCH₂CH₂CH₂-OCH₂CH₂-OCH₂-OH

$\begin{array}{ccccccc} \text{L} & & \text{J L} & & \text{J L} & & \text{J L} & \text{J} \\ \text{4-置換ブトキシ} & & \text{3-置換プロポキシ} & & \text{2-置換エトキシ} & & \text{置換メトキシ} \end{array}$

この置換基名を組み立てると、**(4-[3-[2-(ヒドロキシメトキシ)エトキシ]プロポキシ]ブトキシ)**基となる*。カッコ()・[]・{ }の内を「置換」の文字や、具体的には単純な置換基名「クロロ」などに置き換えてしまえばわかるように、4はブトキシ上の、3はプロポキシ上の、2はエトキシ上の位置番号である。メトキシ基は置換可能な原子が炭素一つだけであるので、メトキシ基上の置換に位置番号1は書かない。

* 上位の規則 P-51. 4.1 「少なくとも1つ以上の炭素を含む枝分かれの無い鎖に、主特性基(主基)の一部あるいは全体を構成していない**ヘテロ原子が4つ以上存在する場合**」に相当するので、優先名においては、**“A”命名法**を用い、「1, 3, 6, 10, 15-ペンタオキサペンタデカン-15-イル」基とする。

→ -OR の構造をもつ置換基に対し、アルキル+オキシ(オキシ基は、二価基 -O-)のように、置換基を「連結」して新たな置換基名とする場合もある。この時の命名の順も上と同様、遠い方からである。なお、メチルオキシ、エチルオキシ、プロピルオキシ、ブチルオキシ、tert-ブチルオキシ、フェニルオキシは短縮形のそれぞれメトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、tert-ブトキシ、フェノキシが優先名として用いられる。

→ 組み立て単位の範囲を見分けにくい場合もある。例えば分岐のあるアルキル基。その場合も母体構造に近いところから、その置換基としての母体構造がどこか見極め、残り部分をパーツ化する。

例：優先保存名 *tert*-butyl 基の場合、

(母体構造) -C(CH₃)₃

→ メチル基に、3つのメチル基が結合しているとみなせる。 trimethylmethyl 基

→ エチル基の1位に2つのメチル基が結合しているとみなせる。 1,1-dimethylethyl 基

→ プロパン-2-イル 基の2位にメチル基が結合しているとみなせる。 2-methylpropan-2-yl 基

上記3つの候補のうち、一番下がアルキル基として最長の炭素鎖を持つ。

体系的な命名では、2-methylpropan-2-yl 基であり、一般名では使用できる。また、イルを1位に固定した(アルカンイル基を混用しない)1,1-dimethylethyl 基も、一般名では使用されることがある。

→ これらの作業は、置換命名法において化合物名を決定する際の作業(母体構造が何かを見極め、それ以外を置換基として命名する)に似ている。母体構造においては、全体の主基となる構造ただ一種類だけが「接尾語」として用いられ、それ以外において、官能性の置換基もすべて「接頭語」で記述される。複合置換基の命名において、この接尾語に相当するのがアルキル、アルカンイルの「イル」(など)である。母体構造は、

1) (母体炭化水素上の)主基の数が最大になるように決める

2) 主基の数が同じなら、鎖より環が優先

3) 母体炭化水素の構成炭素数(鎖なら分岐していない部分の長さ、環なら員数)が大きいものの優先順位(上記以下は、前述 p10)に従って選んだが、側鎖置換基の命名においては、(イル以外に)主基に相当するものはない。「接頭語」で命名される官能性特性基はすべて単純な置換基と平等に扱われる。

[倍数命名法]

倍数命名法は、2013年勧告で、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（接尾語となる特性官能基を持たないアルカン等）は従来通り除外されている。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。

命名の構造は、置換命名法と同じ。以下例の 下線 は命名における対応を示すために付したものを。

- 例 (1-) methylbenzene → 1, 1'-ethane-1, 2-diyldibenzene
 例 4-hydroxybenzaldehyde → 4, 4'-oxydibenzaldehyde
 例 ethyl acetate → ethane-1, 2-diyl diacetate

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

- 例 Ph-NH-Ph × 1, 1'-azanediyldibenzene
 ○ *N*-phenylaniline ベンゼンよりアミン（保存名アニリン）が優先される
 NPh-NH-PhCN ○ 4, 4'-azanediyldibenzonitrile
 Ph-CO-Ph × 1, 1'-carbonyldibenzene
 ○ diphenylmethanone ケトンが倍数名によるベンゼンに優先する
 NPh-CO-PhCN ○ 4, 4'-carbonyldibenzonitrile ニトリルはケトンに優先

命名の例 : (a) 倍数命名法で命名、(b) 一方の母体構造を接尾語で、それ以外を接頭語で命名

- 例 HOOC-C₆H₄-S-C₆H₄-COOH ○ 4, 4'-sulfandiyldibenzoic acid … (a) が優先名
 △ 4-[(4-carboxyphenyl)sulfanyl]benzoic acid … (b)
 例 Ph₂CH₂ ○ 1, 1'-methylenedibenzene … (a) が優先名
 △ (phenylmethyl)benzene, benzylbenzene … (b)
 × diphenylmethane → 鎖より環が優先なので置換メタンではない。

→ 非対称な構造（母体構造単位に優先順位を決めることができる）は、倍数名は優先名ではない。（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。）

例 シクロヘキササンカルボン酸の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) … (a) 一般名では使用できる
 ○ 2-[(4-carboxycyclohexyl)methyl]cyclohexane-1-carboxylic acid … (b) が優先名

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 … (a) 一般名では倍数名を使用できる
 ○ 2-(2-carboxyethoxy)propanoic acid … (b) が優先名

P-15. 3. 1. 3 倍数名の形成の詳細

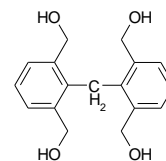
- (a) 同一母体構造単位と結合する位置番号（単核の場合、位置番号1は省略）を書く。
 (b) 結合する倍数置換原子または原子団の名称を書く。
 (c) 倍数接頭語は、同一母体構造単位名の前におく。接頭語の末尾の母音字は省略しない。
 (d) 主特性基あるいは置換基を含む同一構造単位の名称は、必要ならば該当する括弧で囲む。

例 C₆H₅-CH₂CH₂CH₂-O-CH₂CH₂CH₂-C₆H₅ : 母体構造単位をベンゼンとして命名する。

- 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-diyl) : -O- との結合が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、母体構造単位「メタノール」として命名する。

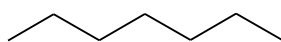
- 1, 1', 1'', 1''' -[] + tetra + methanol
 → [] の中 : methylene + di(benzene-2, 1, 3-triyl)
 → ○ 1, 1', 1'', 1''' -[methylenedi(benzene-2, 1, 3-triyl)]tetramethanol



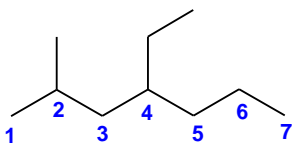
複合倍数置換基は、中央からはじめ、母体の構造に向かって多価置換基を接合していく。

- 例 -O-CHCl-O-CH₂CH₂-O-CHCl-O- → ○ ethane-1, 2-diylbis[oxy(chloromethylene)oxy]

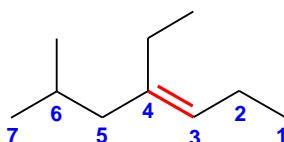
[命名の例] 赤は主官能基。位置番号の付け方にも注意。側鎖置換基はアルファベット順に記す。



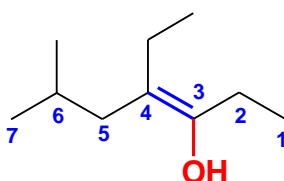
heptane



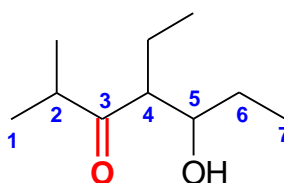
4-ethyl-2-methylheptane



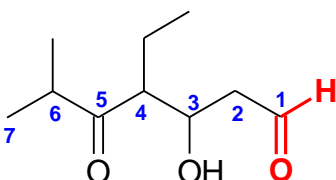
4-ethyl-6-methylhept-3-ene



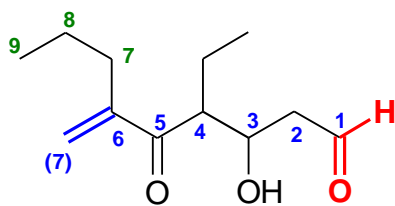
4-ethyl-6-methylhept-3-en-3-ol



4-ethyl-5-hydroxy-2-methylheptan-3-one



4-ethyl-3-hydroxy-6-methyl-5-oxoheptanal
(末端にしか来ない官能基なので、-1-al とはしない。)



◎ 4-ethyl-3-hydroxy-6-methylidene-5-oxononanal

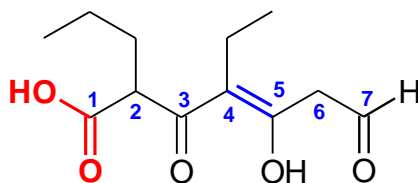
× 4-ethyl-3-hydroxy-5-oxo-6-propylhept-6-enal

2013 勧告前の規則では、多重結合が炭素鎖に優先した。

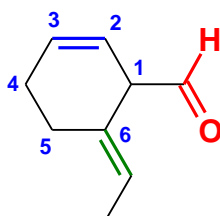
2013 勧告によれば後者の命名は GIN としても許容されない。

※ 2013 勧告では H₂C= の優先接頭語は methylidene となる。

以前は methylene を用いることができた。

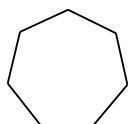


4-ethyl-5-hydroxy-3,7-dioxo-2-propylhept-4-enoic acid
(-1-oic acid とはしない。)

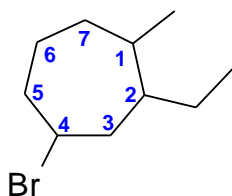


6-ethylidene-cyclohex-2-enecarbaldehyde

(主官能基 -CHO の炭素が 1 位にならない例。なお、主官能基名が子音からなので、直前の e が落ちない。)

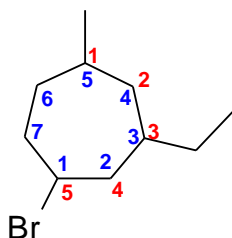


cycloheptane



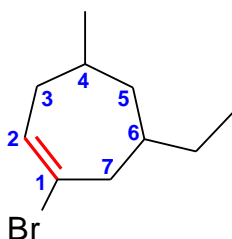
4-bromo-2-ethyl-1-methylcycloheptane

(主官能基 (接尾語として命名される官能基) も多重結合もないので、位置番号は、側鎖の種類 (や名称) に関係なく置換基の位置の数字の組が小さくなるように選ぶ。)



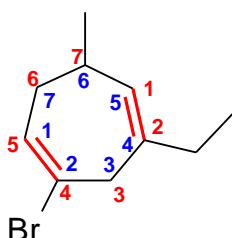
1-bromo-3-ethyl-5-methylcycloheptane

(置換基の位置だけでは、数字の組が同じになり、決められない場合は、小さい数字にアルファベット順で先の側鎖を割り当てる。このため、赤のナンバリングは間違いである。)



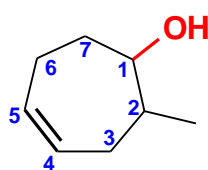
1-bromo-6-ethyl-4-methylcycloheptene

(主官能基はないが、多重結合があるので、多重結合の位置番号がもっとも小さくなるようにする。実際には、別に主官能基を持たないシクロアルケンの場合、二重結合炭素が1位と2位になる。その上で、側鎖番号の組が小さくなるように定める。なお、命名上、cycloalk-1-ene の1は省略される。)



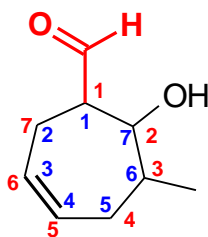
2-bromo-4-ethyl-6-methylcyclohepta-1,4-diene

(主官能基を持たないので、多重結合の位置番号の組が小さくなるようにする。つまり、側鎖の位置に関係なく、cyclohepta-1,5-diene ではなく、cyclohepta-1,4-diene とする。この時点で赤と青の2通りが考えられるが、側鎖番号の組が小さくなる方の回りを選ぶ。そのため、赤のナンバリング(2, 4, 7)ではなく、青のナンバリング(2, 4, 6)になる。)



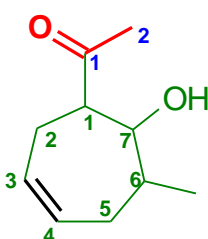
2-methylcyclohept-4-en-1-ol

(環に直結した主官能基の位置番号を1とする。主官能基は、水酸基。主官能基が複数ある場合は番号の組が小さくなるように選ぶ。ついで、多重結合の番号の組が小さくなるように選ぶ。それでもまだ決められない場合は、側鎖の番号 (の組) が小さくなるように選ぶ。更に選ぶ場合は若い番号にアルファベット順の先にくるものを選ぶことになる。)



7-hydroxy-6-methylcyclohept-3-enal

(主官能基はホルミル基。これ以外の側鎖は、水酸基もアルキル基もアルファベット順以外は同列に扱うことになる。左の例では、多重結合の番号 (の組) が小さくなるように決める方が、側鎖の位置番号に優先するので、赤のナンバリングは間違い。)



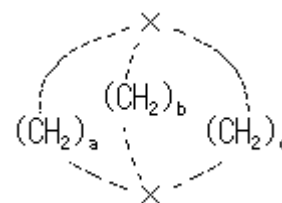
1-(7-hydroxy-6-methylcyclohept-3-enyl)ethan-1-one

(主官能基はケトンのカルボニル基。エタノンの側鎖を複合官能基として命名する。側鎖 (複合官能基) の命名では、シクロヘプチル基の -yl がこの部分における最優先の官能基扱である。従ってシクロヘプタン環の位置番号は、結合位置(-yl)が1で、左の緑数字のようになる。)

多環系化合物、スピロ化合物の命名

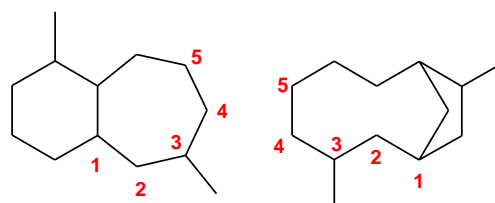
二環系化合物の命名は以下のように考える。

1) 2つの橋頭炭素 (右図、X印の炭素) の間にある炭素の数を、3本の橋について数える。この数を**大きい順**にならべたものが ” [a. b. c] ” の部分である。「ビシクロ」と、「全体の炭素数と同じアルカンの名称」の間にこれらの数字をはさむ。(なお、a、b、cの「橋の長さ」に橋頭炭素を含まないから、全体の炭素数は、 $a + b + c + 2$ となっている。)



← (数字と数字の間は、コンマではなく、ピリオドであることに注意。)

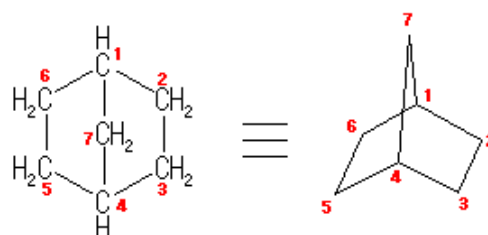
2) 番号の付け方は、2つの橋頭炭素のうち的一方を1とし、次の一筆書きの順に炭素に番号を振る。すなわち、一番長い橋を渡り反対側の橋頭炭素に行く。次に長い橋を渡りはじめの橋頭炭素に来たのち、最後の一番短い橋を渡る。



左 : 3,8-dimethylbicyclo[5.4.0]undecane

右 : 3,9-dimethylbicyclo[6.2.1]undecane

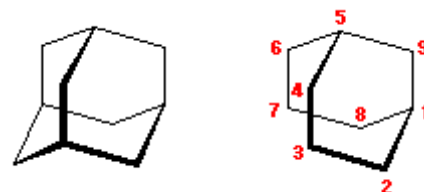
norbornane は、bicyclo 化合物の体系的命名法の下では、bicyclo[2.2.1]heptane となる。(参照、4.48 発展)



1) この化合物の骨格は、3箇所切れ目をいれることにより、完全に環構造をなくすことができるので、「三環式炭化水素、tricycloalkane」である (不飽和度も確認のこと)。

2) 「一番短い橋」を取り除いた、二環式炭化水素である左の化合物は、上述のルールにより、bicyclo[3.3.1]nonane と命名される。

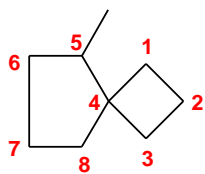
一方の橋頭 (C1) から一番長い橋 (C2, C3, C4) を通ってもう一つの橋頭 (C5) に達し、次に長い橋 (同じ長さ : C6, C7, C8) を渡り、最後に3本目の橋 (C9) を渡る。橋の長さは、[3.3.1]、全炭素数は9で、同じ炭素数のアルカンは、nonane である。



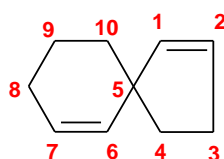
3) bicyclo[3.3.1]nonane の、3位、7位を、炭素数1の橋で結んだものがもとの三環式炭化水素であるから、これは、tricyclo[3.3.1.1^{3,7}]decane という命名となる。

4) この化合物の慣用名は、「adamantane, アダマンタン」である。

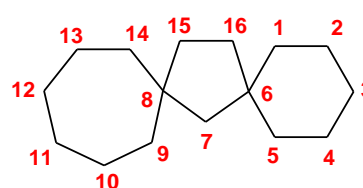
2つの環構造が1つの原子だけを共有している場合、この結合を自由スピロ結合という。また、この2環による共有原子をスピロ原子という。分子内にスピロ原子がひとつあるものを **monospiro**、二つあるものを **dispiro** の化合物などという。二つの脂環式環の **monospiro** 化合物は、炭素数が同数の非環式炭化水素の名称に **spiro-** をつけて表す。spiro 原子の隣を1位とし、(端の環で) **小さい方から順**に回って番号をつけ、spiro 原子をつなぐ橋の長さの数字をピリオドで区切り [] で囲んで示す。



5-methylspiro[3.4]octane



spiro[4.5]deca-1,6-diene



dispiro[5.1.6.2]hexadecane