

IUPAC 命名法

国際純正・応用化学連合(IUPAC)により決められた化合物命名法。化合物から構造を一義的に決定できるだけでなく、慣用名を使用しなければ一義的に化合物名を決定できる。

ここでは、1993 年勧告以前の IUPAC 命名法の最低限のルールをまとめておく。

1. 化合物命名の手順

- ① メインとなる炭素鎖を決定し、命名する。(主鎖と呼ぶ。官能基の有無で決定法が異なる。)
- ② 主鎖の炭素に番号をつける。
- ③ 各置換基について命名する。これらは接頭語となる。
- ④ 置換基の順序はアルファベット順

2. IUPAC 命名法

基本

(1) 直鎖アルカンの化合物名、置換基の名称(テキスト p. 27、表 1.7)

炭素数	基本名称	直鎖アルカンの名称 (-ane)		置換基の名称 (-yl)	
		日本語	英語	日本語	英語
1	meth-	メタン	methane	メチル	methyl
2	eth-	エタン	ethane	エチル	ethyl
3	prop-	プロパン	propane	プロピル	propyl
4	but-	ブタン	butane	ブチル	butyl
5	pent-	ペンタン	pentane	ペンチル	pentyl
6	hex-	ヘキサン	hexane	ヘキシル	hexyl
7	hept-	ヘプタン	heptane	ヘプチル	heptyl
8	oct-	オクタン	octane	オクチル	octyl
9	non-	ノナン	nonane	ノニル	nonyl
10	dec-	デカン	decane	デシル	decyl

(2) 命名法における置換基の数(倍数詞)

(1)	2	3	4	5	6	7	8	9	10
(mono-)	di-	tri-	tetra-	penta-	hexa-	hepta-	octa-	nona-	deca-
—	bis-	tris-	tetrakis-	pentakis-	hexakis-	heptakis-	octakis-	nonakis-	decakis-

下段は複合置換基に対する倍数詞。通常、置換基数が 1 の場合は倍数詞をつけない。

(3) 命名法における官能基の種類

命名法において、官能基は3種類に分類される(化学的意味はない)。

- (i) 接尾語官能基 炭素酸、アルコールなど (優先順位 9 位まで)
 - ・ 官能基間に明確な順位がある。主基として扱う官能基は例外なく上位を選択する。
 - ・ 原則として置換式命名法で命名されるが、接頭語で命名される場合もある。
- (ii) 語尾官能基 アルケン、アルキン
 - ・ (i)より順位は低く、アルケン、アルキンはアルキンに優先する。
 - ・ アルカンの命名法に準じる。接頭語で命名されることはない。

(iii) 接頭語置換基 ハロゲン、アルキル基など (優先順位 12 位)

- (ii)より順位は低く、置換基間の順位はアルキル基も含めアルファベット順で決まる。
- 主基として扱うことができないので、原則として基官能命名法で命名される。

(3) 命名法における官能基の優先順位と名称

優先順位	官能基	構造	接頭語	接尾語	備考
1	カルボン酸		carboxy-	-oic acid (-酸)	(環状置換基の場合) -carboxylic acid
2	酸無水物		—	-oic anhydride (-酸無水物)	(環状置換基の場合) -carboxylic anhydride
3	エステル		alkoxycarbonyl-	alkyl -oate (-酸アルキル)	(環状置換基の場合) alkyl -carboxylate
4	アミド		(alkyl)carbamoyl-	(alkyl)-amide (-アミド)	(環状置換基の場合) -carboxamide
5	ニトリル	$-C\equiv N$	cyano-	-nitrile (-ニトリル)	(環状置換基の場合) -carbonitrile
6	アルデヒド		formyl- (側鎖) oxo- (主鎖)	-al (アール)	(環状置換基の場合) -carbaldehyde
7	ケトン		oxo-	-one (オン)	
8	アルコール	$-OH$	hydroxy-	-ol (オール)	
9	アミン		(alkyl)amino-	(N-alkyl)-amine (アミン)	
10	アルケン		—	-ene (エン)	
11	アルキン	$-C\equiv C-$	—	-yne (イン)	
12	エーテル		oxa- (オキサ) (alk)oxy- (アルコキシ)	alkyl alkyl ether	
12	ハロゲン	$-X$ (X = F, Cl, Br, I)	fluoro- (フルオロ) chloro- (クロロ) bromo- (ブロモ) iodo- (ヨード)	-fluoride (フッ化) -chloride (塩化) -bromide (臭化) -iodide (ヨウ化)	
12	ニトロ	$-NO_2$	nitro- (ニトロ)	—	
12	アルキル		alkyl-	—	

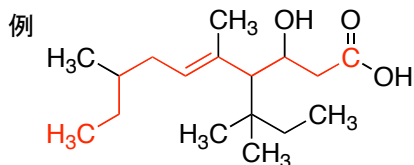
赤色: 通常用いられる命名法。紫色: しばしば用いられる命名法。灰色: 主鎖あるいは置換基の名称を入れる。

用語について

主鎖 … 命名の基本となる炭素鎖。(注:まれに窒素や酸素を含む場合あり)

主基 … 主鎖を選択するときに、基準となる官能基。優先順位最上位の官能基(9位まで)。

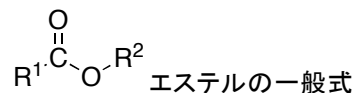
手順



- ① 主鎖を決定する。(1)主基の数、(2)アルケン・アルキンの数、(3)炭素数、(4)アルケンの数、(5)主基の位置番号、(6)アルケン・アルキンの位置番号、(7)接頭語置換基の数、の順番で判断する。(赤で示した炭素鎖)
- ② 主鎖の各炭素に位置番号を付ける。必ず末端炭素を1番にする。末端に一番近い(1)主基、(2)アルケン・アルキン、(3)接頭語置換基の有無、(4)接頭語置換基の頭文字(アルファベット順)、の順番で注目すべき官能基・置換基を選び、その位置番号が小さくなるように位置番号1の炭素を決める。(右末端が1)
- ③ 主鎖に対応する炭化水素を命名する。カルボン酸、酸無水物、エステル、アミド、ニトリルを主基とする場合、官能基を構成する炭素原子も主鎖に含める。「(基本名称)+ ane (or ene, yne)」となる。(5-decene)
注: アルケン・アルキンを含む場合 アルケン・アルキンの命名法に従う。
 - ① アルキン・アルケンの位置番号を決める。(これらの官能基は主鎖上に2つの炭素原子をもつので、位置番号には2通り考えられるが、小さな番号を採用する。)
 - ② 「(アルケンの位置番号)-(基本名称) (a+倍数詞) ene」あるいは「(アルキンの位置番号)-(基本名称) (a+倍数詞) yne」と命名する。青字は各不飽和結合が複数存在する場合に適用される。
 - ③ 主鎖がアルケン、アルキン両者を含む場合、末端は「(アルケンの位置番号)-(基本名称) en-(アルキンの位置番号)-yne」となる。「en」の後の「e」が無くなっていることに注意。
- ④ 主鎖の名前の最後尾から「e」を削除し、主基を示す接尾語をつける。但し、ニトリルの場合は「e」を削除しない(接尾語が子音で始まるから)。(5-decenoic acid)
- ⑤ (主基がケトン、アルコール、アミンの場合)主基の位置番号を付ける。主鎖が飽和している場合、位置番号を主鎖の前に置く。主鎖が不飽和な場合、位置番号を主基の前に挿入する。
- ⑥ 主基以外の各官能基・置換基を「(位置番号)-(置換基の名称)-」と命名する。同じ置換基が複数ある場合は「(位置番号),(位置番号),...(位置番号)-(倍数詞)(置換基の名称)-」とする。(3-hydroxy, 5,8-dimethyl)
- ⑦ 置換基に分岐がある場合(複合置換基)は、主鎖に結合している炭素の位置番号を1として①~⑥の手順でその複合基を命名し、括弧でくくる。複合基の位置番号は通常の置換基と同様に決める。(4-(1,1-dimethylpropyl))
- ⑧ ⑥、⑦で命名した各置換基をアルファベット順に並べ、⑤の主鎖の名称の前に置く。この時、位置番号や倍数詞は考慮しない。(4-(1,1-dimethylpropyl)-3-hydroxy-5,8-dimethyl-5-decenoic acid)

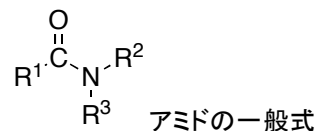
注: 複合基について カッコ内の倍数詞は考慮される。これは②の(4)にも該当する。

エステルを主基とする場合



「(R²の名称) (R¹+C(主鎖)の名称) oate」と命名する。

アミド・アミンを主基とする場合



R², R³を窒素上の置換基とみなす。

「N-(R²の名称)-N-(R³の名称) (R¹+C(主鎖)の名称) amide」と命名する。

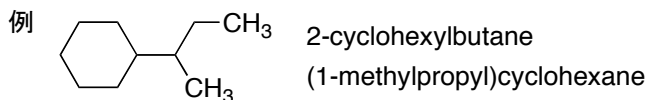
アミンも同様に命名する。

環式化合物や芳香族化合物の場合

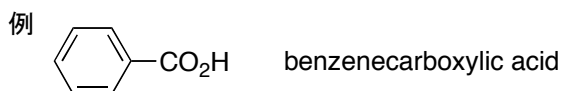
(i) 基本的に環を構成する炭素数に応じた直鎖炭化水素の名称に、接頭語「シクロ(cyclo-)」をつける。

(ii) 主基に結合する炭素を位置番号1にする。主基がない場合は、アルケンが1位になるようにする。アルケンもない場合は、接頭語官能基でアルファベット順上位を基準にする。

(iii) 鎖式置換基をもつ環式炭化水素における主鎖は、命名しやすい方を選んで良い。厳密な規則はない。



(iv) 優先順位 1-6 位の主基が環骨格に直結している場合は、「(環骨格の名称) carbox...」と命名する。



使用が認められている主な慣用名

付録 基名表

1993年勧告に基づく基名のうち主なものを抜粋した。論文などを書くときの便宜のため、基の構造によっておおまかに分類した。極めて簡単な基名でまちがうおそれのないものは省略し、同族列や異性構造で類推できるものも簡略化した。

注 * 置換不可 (置換基をもってはいけない)

** 置換制限 (環上のみ置換可)

(~ではない) は従来の IUPAC 命名法でも認められない名称

(~としない) は 1993 年勧告から認められない名称




鎖状飽和炭化水素基

$n\text{-C}_3\text{H}_7\text{-}$	propyl(<i>n</i> -不要)
$i\text{-C}_3\text{H}_7\text{-}$	isopropyl* (<i>i</i> -propyl ではない)
$n\text{-C}_4\text{H}_9\text{-}$	butyl(<i>n</i> -不要)
$i\text{-C}_4\text{H}_9\text{-}$	isobutyl* (<i>i</i> -butyl ではない)
$s\text{-C}_4\text{H}_9\text{-}$	<i>s</i> -butyl*(2-butyl は誤)
$t\text{-C}_4\text{H}_9\text{-}$	<i>t</i> -butyl*
$n\text{-C}_5\text{H}_{11}\text{-}$	pentyl (<i>n</i> -amyl ではない)
$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{-}$	isopentyl* (isoamyl ではない)
$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{-}$	neopentyl*
$\text{C}_2\text{H}_5\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{-}$	<i>t</i> -pentyl*
$n\text{-C}_3\text{H}_7\text{CH}-$ CH_3	1-methylbutyl
$n\text{-C}_6\text{H}_{13}\text{CH}-$ CH_3	1-methylheptyl (2-octyl は誤)
$n\text{-C}_{12}\text{H}_{25}\text{-}$	dodecyl (lauryl ではない)
$n\text{-C}_{16}\text{H}_{33}\text{-}$	hexadecyl (cetyl ではない)
$n\text{-C}_{18}\text{H}_{37}\text{-}$	octadecyl (stearyl ではない)
$-\text{CH}_2\text{-}$	methylene
$\text{CH}_2\text{=}$	methylidene
$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{-}$	ethylene
$\text{CH}_3\text{CH=}$	ethylidene
$-\text{CHCH}_2\text{-}$ CH_3	methylethylene (propylene としない)
CH_3 $\text{CH}_3\text{C=}$	isopropylidene*

鎖状不飽和炭化水素基

$\text{CH}_2\text{=CH-}$	vinyl(CA ethenyl)
$\text{CH}_2\text{=CHCH}_2\text{-}$	allyl(CA 2-propenyl)
$\text{CH}_3\text{CH=CH-}$	prop-1-enyl
$\text{CH}_2\text{=C-}$ CH_3	isopropenyl*
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH=CH-}$	but-1-en-1-yl
$\text{CH}_3\text{CH=CHCH}_2\text{-}$	but-2-en-1-yl
$\text{CH}_2\text{=CCH}_2\text{-}$ CH_3	2-methylallyl (methallyl ではない)
CH=C-	ethynyl
$\text{CH=CCH}_2\text{-}$	prop-2-yn-1-yl (propargyl としない)

脂環炭化水素基

	cyclohexyl
	cyclohex-1-en-1-yl
	cyclohexylidene

芳香族炭化水素基

$\text{C}_6\text{H}_5\text{-}$	phenyl
$\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{-}$	tolyl*(<i>o</i> -, <i>m</i> -, <i>p</i> -)
$(\text{CH}_3)_2\text{C}_6\text{H}_3\text{-}$	dimethylphenyl (xylyl としない)
$2,4,6\text{-(CH}_3)_3\text{C}_6\text{H}_2\text{-}$	mesityl*
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{-}$	benzyl**
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{CH}_2\text{-}$	phenethyl** (CA 2-phenylethyl)
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH-}$ CH_3	α -methylbenzyl** (CA 1-phenylethyl)