

IUPAC 命名法 (1979 規則)

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。化合物名から構造を一義的に決定できる。また、多くの場合、慣用名を使用しなければ一義的に化合物名が決まる。以下に、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 主となる炭素鎖(主鎖)を決定し、命名する。
- ② 主鎖の炭素に番号をつける。
- ③ 最も優先順位の高い接尾語官能基(主基)を命名する。
- ④ 各置換基を命名する。これらは接頭語となる。
- ⑤ 各置換基に位置番号を付し、アルファベット順に並べる。

2. 有機化合物の命名の予備知識

(1) 直鎖アルカンの化合物名、置換基の名称

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) 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

官能基は 3 種類に分類される(化学的な意味はない)。

- (i) 接尾語官能基 カルボン酸、アルコールなど (下表の優先順位 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。
 - ・原則として接尾語で命名されるが、置換基として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 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 (下表の優先順位 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。
 - ・原則として置換基として命名され、主基として扱うことができない。

(4) 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	$-\text{C}\equiv\text{N}$	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	$-\text{OH}$	hydroxy-	-ol (オール)	
9	アミン		(alkyl) amino-	(<i>N</i> -alkyl) -amine (アミン)	
10	アルケン		—	-ene (エン)	
11	アルキン	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	—	-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	$-\text{X}$ (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	$-\text{NO}_2$	nitro- (ニトロ)	—	
12	アルキル		alkyl-	—	

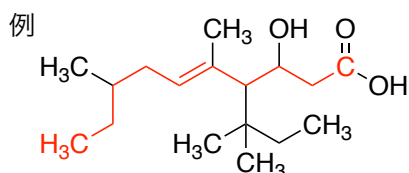
赤色：通常用いられる名称。紫色：しばしば用いられる名称。灰色：主鎖あるいは置換基の名称を入れる。

(5) 用語

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。

3. 具体的な手順



- 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)

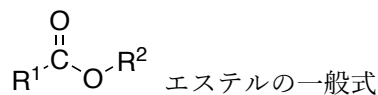
注：主鎖がアルケンやアルキンを含む場合

- 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。主基が複数存在する場合は、「(主基の位置番号),(主基の位置番号),…(主基の位置番号)-(主鎖の名称(e は削除しない))(倍数詞)(主基を示す接尾語)」とする。主鎖が不飽和な場合、位置番号を主基を示す接尾語の前に挿入する。
- 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。

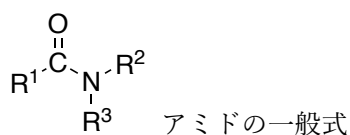
4. 注意事項

- (1) 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。

- (2) アミド・アミンを主基とする場合



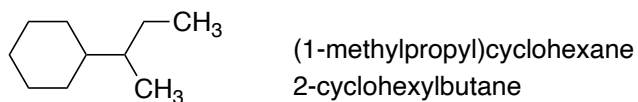
R², R³を窒素上の置換基とみなす。

「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。

(3) 環式化合物や芳香族化合物の場合

- (i) 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-)」を付す。
- (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最上位の置換基を基準にする。
- (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) 上表で優先順位 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。

