

IUPAC 命名法 (2013 規則, PIN)

2013 年の国際純正・応用化学連合(IUPAC)の勧告より、有機化学命名法は 2013 規則に従った優先 IUPAC 名(PIN)と 1979 および 1993 規則に準拠した一般 IUPAC 名(GIN)に分類され、PIN の使用が推奨されている。IUPAC 命名法(1979, 1993 規則を含めて)を理解しておけば、化合物名から分子構造を間違えることなく理解できる。また、ほとんど場合、PIN を利用することによって化合物を一義的に命名できるようになっている。ここでは 2013 規則の PIN について紹介する。

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 主鎖の炭素に位置番号をつける。
- 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)		遊離原子価が 1 価の置換基の名称 (-yl)		遊離原子価が 2 価の置換基の名称 (-ylidene)	
		日本語	英語	日本語	英語	日本語	英語
1	meth-	メタン	methane	メチル	methyl	メチリデン	methylidene
2	eth-	エタン	ethane	エチル	ethyl	エチリデン	ethylidene
3	prop-	プロパン	propane	プロピル	propyl	プロピリデン	propylidene
4	but-	ブタン	butane	ブチル	butyl	ブチリデン	butylidene
5	pent-	ペンタン	pentane	ペンチル	pentyl	ペンチリデン	pentylidene
6	hex-	ヘキサン	hexane	ヘキシル	hexyl	ヘキシリデン	hexylidene
7	hept-	ヘプタン	heptane	ヘプチル	heptyl	ヘプチリデン	heptylidene
8	oct-	オクタン	octane	オクチル	octyl	オクチリデン	octylidene
9	non-	ノナン	nonane	ノニル	nonyl	ノニリデン	nonylidene
10	dec-	デカン	decane	デシル	decyl	デシリデン	decylidene

(2) 置換基の数 (倍数接頭語)

(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接頭語。通常、置換基数が 1 の場合は倍数接頭語をつけない。

(3) 命名法における官能基の種類

便宜上、官能基は 3 種類に分類できる(化学的な意味はない)。

- 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 10 位以上)
 - ・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。
 - ・接尾語で命名される場合が多いが、接頭語で命名される場合もある。
- 炭素化合物 アルケン、アルキン (下表の優先順位 11 位)
 - ・(i)より順位は低く、主鎖の選択ではアルケンが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、エーテルなど (下表の優先順位 12 位以下)

・(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。

・主基にならない。(例：MeI の場合 × methyl iodide ○ iodomethane)

(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)	(環に直結の場合) -carboxylic acid
2	酸無水物		—	-oic anhydride (-酸無水物)	(環に直結の場合) -carboxylic anhydride
3	エステル		alkoxycarbonyl-	alkyl -oate (-酸アルキル)	(環に直結の場合) alkyl -carboxylate
4	アミド		(alkyl)carbamoyl-	(alkyl)-amide (-アミド)	(環に直結の場合) -carboxamide
5	ニトリル	$-\text{C}\equiv\text{N}$	cyano-	-nitrile (-ニトリル)	(環に直結の場合) -carbonitrile
6	アルデヒド		formyl- (側鎖) oxo- (主鎖)	-al (アール)	(環に直結の場合) -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	$-\text{N}$	(alkyl)amino-	(N-alkyl)-amine (アミン) (alkyl)phosphane	
10	ヘテロ原子	P, Si etc.	(alkyl)phosphanyl- (alkyl)silyl-	(ホスフィン) (alkyl)silane (シラン)	
11	炭素化合物		—	-ane (アン) -ene (エン) -yne (イン)	
(12)	エーテル		oxa- (オキサ) (alk)oxy- (アルコキシ)	alkyl alkyl ether	
(13)	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)	

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。

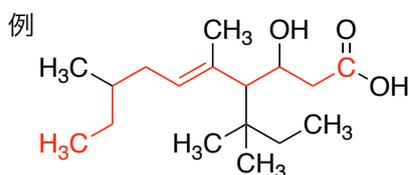
用語

主鎖 … 命名の基本となる炭素鎖。(注：ヘテロ原子を含む場合あり)

主基 … 主鎖を選択するとき、基準となる官能基。

遊離原子価 … 置換基において、結合を形成していない原子価。

3. 具体的な手順



- ① 主鎖を決定する。(1)主基の数、(2)環状 or 鎖状(環状が優先)、(3)鎖に含まれるヘテロ原子数、(4)鎖の構成原子(一般には炭素原子)数、(5)アルケン・アルキンの数、(6)アルケンの数、(7)主基の位置番号、(8)アルケン・アルキンの位置番号、(9)接頭語置換基の数、の順番で判断する。(赤で示した炭素鎖)

主鎖にヘテロ原子が含まれる場合は、4-(5)を参照。

- ② 主鎖の各炭素に位置番号を付ける。必ず末端炭素を基準にする。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(置換基の種類は問わない。両末端からみて同じ位置にある場合は2番目)、(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になる末端炭素を決める。(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 -n-ene, -n-yne (*n*:位置番号))」となる。(dec-5-ene)

注：主鎖にアルケンやアルキンが含まれる場合

- 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 「(基本名称)(a)-(アルケンの位置番号)-(倍数接頭語)ene」あるいは「(基本名称)(a)-(アルキンの位置番号)-(倍数接頭語)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「(基本名称)-(アルケンの位置番号)-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 主鎖に対応する炭化水素名の最後尾から「e」を削除し(以下、これを「主鎖の名称」とする)、主基を示す接尾語をつける。ただし、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)。(dec-5-enoic acid)
- ⑤ (主基がケトン、アルコール、アミンの場合) 主基を示す接尾語の前に位置番号を挿入する。主基が複数存在する場合は、「(主鎖の名称(eは削除しない))-(主基の位置番号),(主基の位置番号),…(主基の位置番号)-(倍数接頭語)(主基を示す接尾語)」とする。
- 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)-(倍数接頭語)(置換基の名称)-」とする。二重結合を介して主鎖に結合している置換基は遊離原子価2価の置換基名称を使う。(3-hydroxy, 5,8-dimethyl)

- ⑦ 分枝のある置換基の場合、

① 主鎖(ヘテロ原子)と結合している(遊離原子価をもつ)炭素原子を含む最長の鎖を置換基の主鎖とする。

② この原子の位置番号が小さくなるように置換基内の位置番号を決める。

飽和1級アルキル置換基の場合

③、⑥に倣って、命名したい置換基に対応する炭化水素を基本名称として命名する。

④ 置換基を「(③の基本名称)yl (or ylidene)」と命名する。(→⑤へ)

2級、3級アルキルおよび不飽和1級アルキル置換基の場合

③、⑥に倣って、命名したい置換基に対応する炭化水素を命名し、語尾の「e」を削除する。

④ 置換基を「(③の名称)-(遊離原子価をもつ炭素原子の位置番号)-yl (or ylidene)」と

命名する。

⑩ ⑩の置換基名を括弧でくくり、前に置換基の(この化合物の主鎖上の)位置番号をつける。

といったプロセスで命名する。(4-(2-methylbutan-2-yl))

分枝置換基で慣用名が認められているものは、無置換の *tert*-butyl, benzyl, benzylidene, benzylidyne, 1,*n*-phenylene のみである。

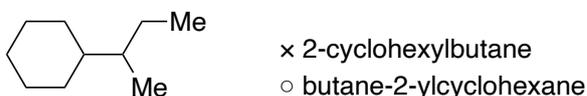
⑧ ⑥,⑦で命名した各置換基をアルファベット順に並べ、④あるいは⑤の主鎖の名前の前に置く。分枝置換基の名称が倍数接頭語で始まる場合、倍数接頭語のアルファベットを用いる。(3-hydroxy-5,8-dimethyl-4-(2-methylbutan-2-yl)dec-5-enoic acid)

注：ここでの分枝置換基の順番の取り扱いは、②の(4)にも適用される。

4. 追記

(1) 環式化合物、置換基

- 環を構成する炭素数に応じた直鎖アルカンの基本名称に接頭語「cyclo- (シクロ)」をつける。これを基に主鎖や置換基を命名する。
- 化合物名の場合、位置番号は主基と結合している(or に含まれる)炭素を基準にする。主基がない場合は、環を構成する炭素-炭素多重結合の炭素が1,2位になるようにする。多重結合がない場合は、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。
- 置換基の場合、位置番号は主鎖と結合している炭素を基準にする。置換基内の位置番号が1位であることが自明なので、「yl」の前に位置番号を挿入しない。
- 主鎖の選択では、構成原子数に関係なく、環状鎖は鎖状鎖に優先する。



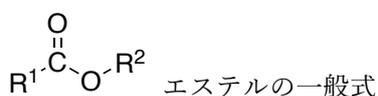
(v) 環状の主鎖に優先順位 1-6 位の主基が直結している場合は、「(環骨格に対応する炭化水素名)carbox...」と命名する。

(2) 芳香族化合物、置換基

- 化合物名としては「benzene」を基本とする。置換基としては、「phenyl」を基本とする。その他の芳香環については、IUPAC 規則で許容されている名称を調べる。
- 位置番号の決定は(1)-(ii), (iii)に準ずる。
- 主鎖の選択では、環状鎖として扱われる。
- ベンゼン環に優先順位 1-6 位の主基が直結している場合は、「...benzenecarbox...」と命名する。その他の芳香環の場合も、「(芳香族炭化水素名)carbox...」と命名する。

(3) エステルを主基とする化合物

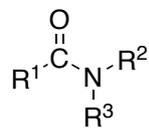
エステルのような縮合化合物の場合、置換基の優先順位を考慮しなければ(カルボン)酸由来とアルコール由来の二つの主鎖が存在する。一般には、下記のようにアルコール由来の主鎖を置換基として先に置き、酸由来の部分をエステルとして命名する。



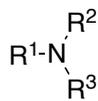
「(R²の基本名称)yl (R¹+C(主鎖)の名称)oate」と命名する。

(4) アミド・アミンを主基とする化合物

これらの化合物では窒素原子上に三つの置換基がある。3-①に示す要領で主鎖を選択し、残り二つの置換基は窒素原子上の置換基(位置番号として「N-」をつける)として命名する。



アミドの一般式



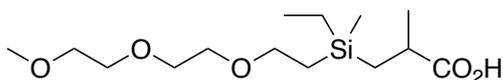
アミンの一般式 (R¹が主鎖)

「N-(R²の基本名称)yl-N-(R³の基本名称)yl(R¹+C(主鎖)の名称)amide (or -amine)」と命名する。

(5) 主鎖にヘテロ原子を含む鎖状化合物(ポリエーテルなど)の代置命名法

主鎖にヘテロ単位(ヘテロ原子および独自の名称を持つヘテロ原子群(-SS-, -SiOSi-など))を四つ以上含む場合、代置命名法が適用できる。

例



- ① 主鎖を構成する原子がすべて炭素原子であるとして、主鎖に対応する炭化水素を命名する。(tetradecane)
- ② 主鎖の各原子に位置番号を付ける。主鎖の末端原子に一番近い(1)ヘテロ原子の有無(ヘテロ原子の種類は問わない。両末端からみて同じ位置にある場合は2番目)、(4)ヘテロ原子の優先順位(注釈を参照)で注目すべきヘテロ原子を選び、その位置番号が小さくなるように位置番号1となる末端原子を選ぶ。(左末端が1)
注：主基の位置は優先しない。
- ③ 各ヘテロ原子(単位)を「(位置番号)-(ヘテロ原子(単位)の名称)-」と命名する。主鎖に同じヘテロ原子(単位)が複数ある場合は「(位置番号),(位置番号),…(位置番号)-(倍数接頭語)(ヘテロ原子(単位)の名称)-」とする。(2,5,8-trioxa-, 11-sila)
- ④ ③で命名した各ヘテロ原子(単位)を注釈の順番で並べ、③の主鎖の名称の前に置く。(2,5,8-trioxa-11-silatetradecane)
- ⑤ 3-④あるいは⑤に示す要領で主基を命名する。④に該当する官能基が1位にならない場合、位置番号をつける。(2,5,8-trioxa-11-silatetradecan-14-oic acid)
- ⑥ 3-⑥,⑦に示す要領で置換基を命名する。(11,13-dimethyl, 11-ethyl)
- ⑦ 3-⑧と同様に、上記で命名した各置換基をアルファベット順に並べ、⑤の主鎖の名前の前に置く。(11-ethyl-11,13-dimethyl-2,5,8-trioxa-11-silatetradecan-14-oic acid)

注：代置命名法におけるヘテロ原子の優先順位は、

① 族番号がより大きい元素が優先。

② 同族の場合、原子番号がより小さい元素が優先。

によって決まる。代表的な代置命名法におけるヘテロ原子の名称は、次のとおり。

O: oxa N: aza B: bora S: thia P: phospho Si: sila Sn: stanna