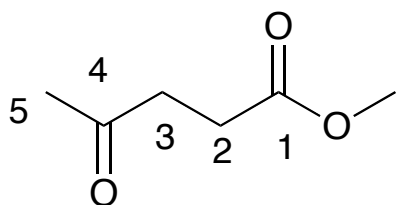


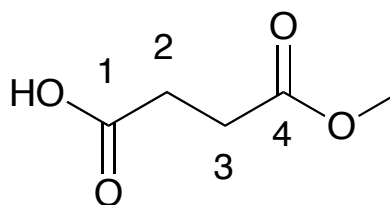
有機化合物の命名法における優先順位

(有機化学 III で必要な部分を中心に抜粋。詳細は下巻 p. 1211～などを参照)

複数の官能基を持つ有機化合物の命名法の必要性



methyl 4-oxopentanoate



4-methoxy-4-oxobutanoic acid

上の二つの化合物は、一番左の官能基がメチル基かヒドロキシ基かという違いがある。この名称を見ると、左はケト基をもつエステルとして、右はエステル基をもつカルボン酸として名付けられていることが分かる。では逆に、左はエステル基をもつケトン、右はカルボキシル基をもつエステルとして名付けて良いのだろうか？

そのように2種の名前を取り得ると混乱が生じるため、IUPAC 命名法では官能基の優先順位が決められている。つまり、逆の名付け方をしてはいけない。ただし、慣用名では往々にしてこのルールは無視されている。

化合物名を決定する順番

以下の順序に従って、名前を決定する。

- ① 優先順位が最も高い官能基（主基）を見つける
- ② 母体（主鎖）を選択する
- ③ 位置番号を付ける
- ④ 全ての官能基に位置番号と名前を付ける
- ⑤ アルファベット順に官能基を並べる
- ⑥ 官能基と母体を合わせて完成

官能基の優先順位

概ね酸化度が高いものが優先されるが、基準がいまいちよく分からない。*R,S*を決めるルールに少し近いが、原子番号が大きい方が優先度が低いことが多い気がする（誰が決めたんだろう、この適当な順番……）。

①で主となれる官能基を主官能基と呼ぶ。次ページに主官能基群を示した。ちなみに主となれない官能基を副官能基と呼び、良く出てくるものにはハロゲンとニトロ基がある。官能基の優先順位は⑤の段階で、アルファベット順で決まる。

主官能基の優先度表（使いそうな所を抜粋・上ほど優先度が高い）

官能基群 官能基	構造	接頭語	接尾語
イオンなど アニオン (カルボン酸塩) カチオン (アンモニウム)	-COO ⁻ - NH ₄	アンモニオ (ammonio ⁻)	-酸+カチオン -(o)ate アンモニウム (-ammonium)
酸類 酸無水物 カルボン酸 スルホン酸	-COOCOR -COOH -SO ₃ H	一般に使われない カルボキシ- (carboxy-) スルホ- (sulfo-)	-酸無水物 (-(o)ic anhydride) -酸 (-(o)ic acid) -スルホン酸 (-sulfonic acid)
酸誘導体 エステル 酸ハロゲン化物 アミド	-COOR -COX -CONH ₂	アルコキシカルボニル- (alkoxycarbonyl-) カルバルコキシ- (carbalkoxy-) ハロカルボニル- (halocarbonyl-) カルバモイル- (carbamoyl-)	アルキル～酸 -(o)ate ハロゲン化- (オ) イル (-(o)yl halide) -アミド (-amide)
ニトリル	-CN	シアノ- (cyano-)	-ニトリル (-nitrile)
アルデヒド	-CHO	ホルミル- (formyl-)	-アール (-al)
ケトン	(>C)=O	オキソ- (oxo-) =Oの部分	-オン (-one)
アルコール	-OH	ヒドロキシ- (hydroxyl-)	-オール (-ol)
アミン	-NH ₂	アミノ- (amino-)	-アミン (-amine)
エーテル	-O-	アルコキシ- (alkoxy-) -オキサ- (-oxa-)	エーテル (ether)
アルケン	C=C	アルケニル- (alkenyl-)	-エン (-ene)
アルキン	C≡C	アルキニル- (alkynyl-)	-イン (-yne)
アルカン	C-C	アルキル- (alkyl-)	-アン(-ane)

その他以下などにも表がある。3番目が一番基本だが見づらい。

<http://www.mhhe.com/physsci/chemistry/carey5e/Useful/nomen.html>

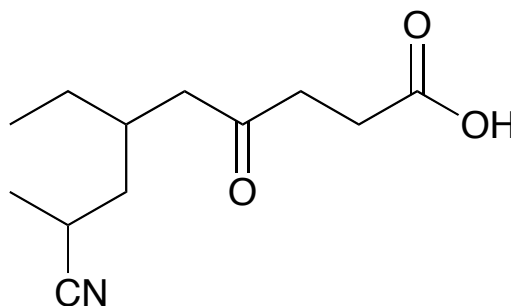
http://en.wikipedia.org/wiki/IUPAC_nomenclature_of_organic_chemistry

<http://www.och.bme.hu/ifj-nagy/Nevez%C3%A9ktan/CompleteDraft.pdf> P41の項

http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/Yuki/classes/past_materials_files/basic_org1.pdf

実際の決定法の例

右の化合物の命名を、1 ページ目のルールに従って行う。

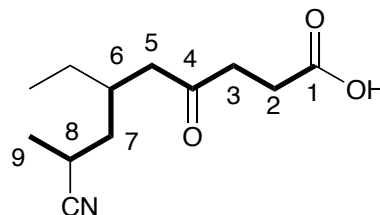


① 主基を見つける

官能基は左から-CN、ケトン、カルボン酸。
2 ページの優先順はカルボン酸が最優先なので主基はカルボン酸。

② 母体を決める

主基であるカルボン酸がある炭素鎖から母体となる炭素鎖を見つける（上巻参照）。この場合右図で太く示した C9 の炭素鎖が母体なので、ノナン酸(nonanoic acid)が決定。



③ 位置番号を付ける

末端の炭素を 1-位にする。この際、主基に近い方の末端が 1-位となる。優先順位を決める際に重視するのは、(1) 主基、(2) アルケン・アルキン、(3) 接頭語置換基の有無、(4) 接頭語置換基のアルファベット順、の順。この場合、末端にしか来ないカルボン酸があるので、この C が 1-位。

④ 全ての官能基に位置番号と名前を付ける

4-位にオキシ(oxo-)、6-位にエチル (ethyl-)、8-位にシアノ (cyano)

⑤ アルファベット順に官能基を並べる

8-cyano-6-ethyl-4-oxo

⑥ 官能基と母体を合わせて完成

8-cyano-6-ethyl-4-oxononanoic acid (8-シアノ-6-エチル-4-オキシノナン酸)

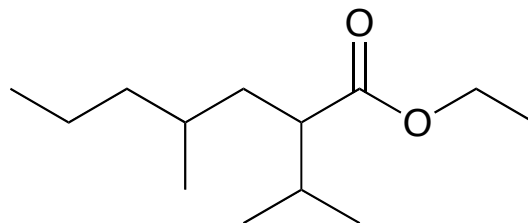
上述の副官能基の代表例であるハロゲンが付いた炭化水素をハロゲン化アルキルと呼ぶが、命名上はハロゲンが主基とならないためにハロアルカンとして命名される。つまり、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$ は IUPAC 名では、エチルブロミドではなくブロモエタンとなる。ただし、慣用的には前者がかなり用いられる。詳細は上巻 p. 326 参照。

接頭語のアルファベット順を並べる時の注意

di-, tri-などの数字を示す接頭語はアルファベット順を決める際には無視する。

例：下のアミドの項で出てくる右の化合物は、ethylの方がdimethylより優先している。ただし、形(?)を示す接頭語であるiso-はアルファベット順で考慮する。

右の化合物ではisopropylがmethylよりも優先している(isoが無視されるならpropylなのでmethylより後ろに来る)。

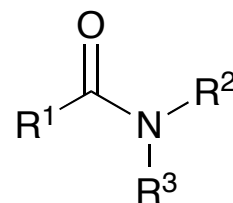


ethyl 2-isopropyl-4-methylheptanoate

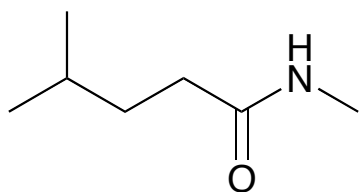
アミド・アミンを主基とし、Nに置換基を持つ場合

N上の置換基であるR²、R³もR¹中の置換基と同等に扱う。

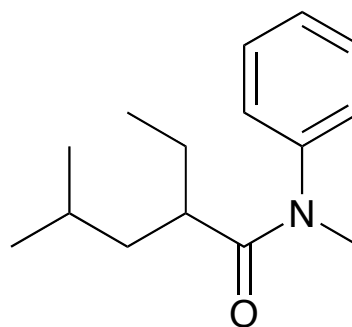
N-R²のアルキル基名-N-R³のアルキル基名R¹由来の主鎖名アミド



例



N,4-dimethylpentanamide



2-ethyl-N,4-dimethyl-N-phenylpentanamide