有機化合物の名前のつけ方

よく見られる命名上の間違いについて†

山下 恭 平
(東北大学農学部農芸化学科)

はじめに

有機化合物に名前をつけるということは一見何でもなさそうであるが、実はかなり面倒な仕事である。命名の仕方には従来から用いられている慣用名と、組織的命名法とが併用して用いられている。とくに天然物に関しては発見者が出所、特性を示すラテン語や学名にちなんで命名するのがごく普通であり、たとえばブドウ酒のアカ石 (tartarus) にちなんだ tartaric acid (酒石酸)、アオカビ (Penicillium) にちなんだ penicillin、器官の脱離 (abscission) にちなんだ植物ホルモン、abscisic acid などきりが無い。しかしこのような慣用名からはその構造は全くわからないので次第に組織的な命名法の必要性が認められ、今日では国際純正および応用化学連合 (IUPAC) 制定の命名法がほぼ確立され、日本農芸化学会をはじめほとんどすべての学会の投稿論文中の化合物名はこれに従うことになっている。もちろん、有機化合物の構造は構造式で見るのが一番確実でわかりやすいが、これでは索引するわけにゆかず、他の研究者があとから検索するためにはどうしても規則に従った命名法が要求されるわけである。しかし規則というものは何でも面倒なものであり、よほど注意しないと間違えて名前をつけてしまう。名前が違くと索引されるときに違った場所に出てくるから、あとから検索する人が探し出すことができない。こう考えてくると正確な命名をすることは研究者、とくに投稿者にとっては義務でもあるわけである。

さて名前のつけ方は時代とともに変化しているし、さらに1つの化合物にも何種類かの命名が可能であるから

誤りを正すのは困難なことが多い。しかし考えられるいくつかの名前の中でもより好ましい命名を選ぶことは重要である。たとえば methanol, methyl alcohol はともに許される名前であるが、hydroxymethane という命名を選ぶことは許されない。最近の化合物数と情報量の増加に伴い、コンピューター処理の必要性から Chemical Abstract では独得の命名法が採用されており、subject index では1つの化合物は1つの名前でしか索引されない。Chemical Abstract の命名法も基本的には IUPAC 規則と同じであり、ただ慣用名をできるだけ排除し、選択性をなくして系統的に命名しているの、たとえば aniline も benzenamine として命名されている。しかし本講座ではこれについてはふれないことにする。また複雑な化合物については和文誌でも英語で命名することが多いので日本語名への字訳法についても省略した。有機化合物の命名法については IUPAC 規則の英文原文の他、翻訳を含めて多くの単行本があり、また対応する日本語表記法についても制定されているので、詳細を知りたい方は成書を参照されたい。筆者はこれまで編集や論文審査などにたずさわってきた過程で報文中の化合物名の混乱を残念に思い、学生にも有機化学の一部として講義をしてきた。この講座では主として日本農芸化学会誌や *Agricultural and Biological Chemistry* の最近1, 2年の誌上に見られた誤った化合物名を例にとりあげながら間違いやすい点を中心に解説することとした。はじめに、そのために必要なごく初歩的な IUPAC 命名法の概略を記し、あとは個々の例について説明することとしたい。従って、すでに IUPAC 命名法について大体知っておられる方は前半をとばして、事例だけをお読みいただければよい。もちろん、この講座を読んだだけですべての命名がわかるほど大げさなものではないことをお

† How to Assign Names to Organic Compounds. Principles and Common Errors.

Kyohei Yamashita (Department of Agricultural Chemistry, Faculty of Agriculture, Tohoku University, Sendai 980)

断りしておく。

I. IUPAC 命名法の概略

(a) 炭化水素

脂肪族炭化水素の命名は比較的簡単で、飽和鎖状系では表1のごとく炭素数を示す数詞の語尾に *ane* をつければよく、分枝化合物では短い側鎖をアルキル置換基として位置番号とともに語幹の前につければよい。この際位置番号はできるだけ最少になるようにする。例えば1は2,3-dimethylpentaneであり、3,4-dimethylpentaneとしてはいけない。多重結合を含むときは語尾 *ane* を *ene*, *yne* などに換えて位置番号を一番前につければよく、二重結合と三重結合をともに含むときには語尾を *eneyne*, *ene-diyne* などにかえればよい。たとえば2は2-methyl-2-hexen-4-yneである。

飽和炭化水素で慣用名の許されているのは *isobutane*, *isopentane*, *neopentane*, *isohexane* のみであり、 C_7 以上の炭化水素では *n*-heptane のように *n* をつける必要はない。炭化水素から水素原子1つを除いたアルキル基は語尾 *ane* を *yl* にかえればよく、慣用名が許されるのは *isopropyl*, *isobutyl*, *s-butyl*, *t-butyl*, *isopentyl*, *neopentyl*, *t-pentyl*, *isohexyl* のみで、これらも未置換の場合に限って使用が認められている。一般にアルキル基は遊離原子価のある炭素原子から出発して最長鎖を持つアルキル基に置換側鎖を加えた形で命名する。従って3は2,3-dimethylbutylということになる。

単環炭化水素では飽和系では語頭 *cyclo* をつければよく、4は *cyclohexane* と命名する。また芳香族炭化水素はもちろん *benzene* の誘導体と考えればよく、5は *propylbenzene* と名づける。ただし芳香族の場合 *toluene*, *xylene* などの慣用名は使ってよい。これら環状炭化水素から水素原子1つを除いた基の名称は鎖状の場合に準じ、6は2-cyclohexen-1-yl (または2-cyclo-

4

5

6

7

8

hexenyl) とすればよく、芳香族の場合は *phenyl*, *tolyl*, *benzyl* などの慣用名が認められている。

縮合炭化水素はやや複雑であるが、基礎成分の炭化水素に接頭成分をつけ、基礎成分の辺にアルファベット記号をつけて縮合位を示せばよい。たとえば7は *benz[a]anthracene* と命名することになる。つけ加える成分の縮合位置も示す必要があるときは縮合点の位置番号をつけ、番号を並べる順序を基礎成分の文字記号をつける方向と一致させる。たとえば8は *naphtho[2,1-a]naphthalene* と命名する。

(b) 有橋炭化水素

2つの環が2つ以上の原子を共有している脂環炭化水素は有橋炭化水素と呼ばれ、全炭素原子数の同じ鎖状炭化水素名に語頭 *bicyclo* をつけ、2つの橋頭炭素を結ぶ3本の橋に含まれる炭素原子数を大きいものから順に角括弧に入れて示す。たとえば9は *bicyclo[2.2.1]heptane* であり、位置番号は図示したごとく橋頭炭素から始まり、長い橋に沿って番号をつければよい。

3環系の場合も2環系炭化水素を基本環とし、その中の2つの炭素原子がさらにもう1つの橋で結ばれたものとして命名すればよく、10は *tricyclo[2.2.1.0^{2,6}]heptane* のように命名する。

(c) スピロ炭化水素

2つの環が1つの炭素原子を共有する化合物をスピロ炭化水素といい、同じ数の炭素原子を含む鎖状炭化水素名に語頭 *spiro* をつけ、スピロ原子とつながっている環の炭素原子 (スピロ原子を除く) を小さいものから順に

表1 飽和炭化水素の名称

<i>n</i>	名 称	<i>n</i>	名 称
1	methane	9	nonane
2	ethane	10	decane
3	propane	11	undecane
4	butane	12	dodecane
5	pentane	13	tridecane
6	hexane	14	tetradecane
7	heptane	15	pentadecane
8	octane	20	eicosane

9

10

11

12

13

14

表 2 複素環の語幹

a) 窒素を含む環

環の大きさ	最多二重結合	二重結合 1 個	飽 和
3		-irene	-iridine
4	-ete	-etine	-etidine
5	-ole	-oline	-olidine
6	-ine	(a)	(b)
7	-epine	(a)	(b)

b) 窒素を含まない環

環の大きさ	最多二重結合	二重結合 1 個	飽 和
3		-irene	-irane
4	-ete	-etene	-etane
5	-ole	-olene	-olane
6	-in	(a)	-ane
7	-epin	(a)	-epane

a) 最多二重結合をもつ名称に dihydro, tetrahydro をつける。

b) 対応する不飽和化合物に perhydro をつける。

角括弧に入れて示す。11 は spiro[3.4]octane と命名され、位置番号も図示したごとくスピロ原子の次の小環炭素から数えればよい。

(d) 複素環化合物

一般に複素環は語頭でヘテロ原子を、語幹で環の大きさを表わす。主なヘテロ原子の語頭は O : oxa, S : thia, N : aza, P : phospho, Si : sila などであり、環の大きさと不飽和度によって表 2 のような語幹を用いる。たとえば 12 は oxa-olane となるが、後語が母音で始まるときは語頭の語尾の a を除いて oxolane と命名する。同様に 13 には 1,3-thiazole (thia+aza+ole) のように名前をつける。ただし複素環系には慣用名が認められているものも多いので、その主なものを列記しておく。

furan, thiophene, pyrrole, imidazole, pyran, pyridine, pyrazine, pyrimidine, indole, purine, quinoline, isoquinoline, carbazole.

縮合複素環系は炭化水素に準じて命名し、縮合にあずかる基礎成分とつけ加える成分とを結合位置を示す記号とともにつけなければよい。たとえば 14 は benzo[g]quino-line, 15 は thieno[2,3-b]furan のように命名する。

15

16

この場合基礎成分は複素環でなければならない。その優先順位は a) 含窒素成分、b) 窒素以外では O, S, P, Si, B の順、c) 多数の環を含む成分の順で選ぶ。つけ加える成分の場合は furo, thieno, imidazo, pyrido, quino などの短縮接頭語を用いてもよい。

なおヘテロ原子を骨格中に含む化合物の命名では相当する炭化水素を母体として、そのうちの炭素原子を置き換えたヘテロ原子を示す oxa, thia, azaなどを語頭として位置番号とともにつける代置命名法が便利な場合が多く、最近はとくによく使われるようになった。この方法だと 14 は 1-azaanthracene となり、16 は 1,3-dioxaindan と命名することができる。

(e) 特性基の置換命名法

IUPAC 命名法の中で最も普通に使われているのが置換命名法で、この方法では 1-pentanone, 2-bromonaphthalene のように基本的にはすべての有機化合物を、もとなる炭化水素の水素原子を置換基でおきかえた誘導体として命名している。

接頭置換基名-母体炭化水素名-接尾置換基名

ここにいう母体炭化水素とは骨格炭素数を示す語幹 (pent, oct など) に、その状態を示す語頭 (cyclo, spiro, oxa など)、語尾 (ane, ene, yne など) をつけたものであり、置換基とは水素原子を置換している原子または原子団の総称である。置換基のうち OH, NH₂, ハロゲン, C=O, C=S, C=NH, COOR, CN などの原子または

表 3 接頭語として呼称する主基

特性基	接頭語	特性基	接頭語
-Br	bromo	=N ₂	diazo
-Cl	chloro	=N ₃	azido
-ClO	chlorosyl	-NO	nitroso
-ClO ₃	perchloryl	=NO ₂	nitro
-F	fluoro	-OR	R-oxy
-I	iodo	-SR	R-thio

表 4 主要主基の優先順位とその接頭語、接尾語

種 類	特 性 基	接 尾 語	接 頭 語
陽 イ オ ン		-onium	-onio
カルボン酸	-COOH	-carboxylic acid	carboxy
	-(C)OOH	-oic acid	—
スルホン酸	-SO ₃ H	-sulfonic acid	sulfo
酸 無 水 物	-COOCO	-(o)ic anhydride	—
エ스테ル	-COOR	R—carboxylate	R-oxycarbonyl
	-(C)OOR	R—oate	—
酸ハロゲン化物	-COX	-carbonyl halide	haloformyl
酸アミド	-CONH ₂	-carboxamide	carbamoyl
	-(C)ONH ₂	-amide	—
イミド	-CONHCO-	-carboximide, -imide	—
ニトリル	-CN	-carbonitrile	cyano
	-(C)≡N	-nitrile	nitrilo
アルデヒド	-CHO	-carbaldehyde	formyl
	-(C)HO	-al	oxo
ケトン	= (C)=O	-one	oxo
アルコール	-OH	-ol	hydroxy
フェノール	-OH	-ol	hydroxy
チオール	-SH	-thiol	mercapto
アミン	-NH ₂	-amine	amino
イミン	=NH	-imine	imino

原子団を特性基といい、ある化合物に特性基が2つ以上あるときは接尾置換基は1つに限定し、接頭置換基の数は制限しない。この命名法では次の規則をまもらなければならない。

1) 特性基が1つのときはそれを主基として接尾語で表わす。ただし接頭語としてしか使えない特性基(表3)は除く。

2) 特性基が2つ以上あるときは、きめられた順位(表4)に従って最も上位の1つを主基として接尾語で表わし、残りの基は接頭語で表わす。この場合主基の位置番号ができるだけ小さくなるようにする。接頭語置換基には順位がなく、通常アルファベット順に並べる。なお、接頭語置換基だけしかないときはその位置番号よりも二重結合などの母体語尾の位置番号が小さくなるようにする。

(f) 基官能命名法

この方法は ethyl alcohol, phenyl propyl ketone のように基の名称と官能基の種類名を組合せて作るもので、特性基が2つ以上あるときは上位のもの1つを主基として官能基名で表わし、他は接頭語で示す。たとえば 3-hydroxybutyl cyanide のように命名する。

(g) その他の命名法

環状成分と炭素-炭素結合で直結した側鎖に特性基を

17

18

含むときは両部分を示す化合物名をつなげる接合命名法が使われることがある。たとえば 17 は cyclohexane-methanol, 18 は pyrrole-2-carbaldehyde のように命名される。

なお、ある化合物に他の原子が付加したことを示す付加命名法もあり、1,2,3,4-tetrahydronaphthalene, styrene oxide のような名前が可能である。

一方ある化合物から特定の原子を除いたことを示す減去命名法では dehydrocholesterol とか、 deoxybenzoin のような命名ができる。しかしこれらは特殊な場合で、一般的には置換命名法を優先して用いることが望ましく、ついで基官能命名法が適用される。

II. 報文に見られる間違った命名

化合物につけられた名称から、その正しい構造が容易に把握できることは最低必要な条件ではあるが、それだけでは十分ではない。これから例示する命名は農化誌および Agric. Biol. Chem. を中心に若干の外国雑誌も

まじえて近年の報文中に見られた間違い、および好ましくない名称である。無意識に使われている誤った名称や、不注意による好ましくない命名を避けるための参考にしていただければ幸いである。

(a) 命名法の混乱

2種以上の異なる命名法を混ぜて使うことは次のような混乱をきたしやすい。この種の間違いは無意識のうちによく使われているのが目につく。

19 誤 isopropanol

正 2-propanol, isopropyl alcohol

この誤りはきわめて多く、試薬瓶のラベルにすら間違っただ名前で印刷されていることがある。同様に、

20 誤 tert-butanol

正 2-methyl-2-propanol, tert-butyl alcohol

これはアルキル基とアルカンを混同しているために起った間違いである。すなわち isopropyl や tert-butyl というアルキル基は慣用名として認められているが、isopropane, tert-butane という炭化水素は存在しないから、その語尾を ol にかえた置換命名法はありえないわけである。

21 誤 isobutanol

正 2-methyl-1-propanol, isobutyl alcohol

枝分れのある炭化水素の中で、isobutane, isopentane, neopentane, isohexane の4つだけは慣用名が認められているが、置換基を含まない形に限って使用が許されており、語尾を ol にかえた場合には認められない。同様に、

22 誤 isobutene

正 2-methylpropene

しかしアルキル基としては前記のごとく isopropyl, isobutyl, tert-butyl, isopentyl, neohexyl, isohexyl も慣用名として認められているので、基官能命名法を使った isohexyl alcohol や isobutyl alcohol は差し支えないわけである。

(b) 主官能基の選択

有機化合物に置換命名法で名前をつける場合には、まず主官能基を探して接尾語としてつけなければならない

い。従って接尾語となりうる特性基を含む化合物をアルカンやベンゼンなどの接頭語置換誘導体として命名してはいけない。たとえば 23 は慣用語の phenol があまりにも一般化しているので hydroxybenzene という人はまずいないであろうし、24 も 2-butanol が普通に用いられているので、2-hydroxybutane と命名することもまずない。しかし少し複雑な化合物になるとこの種の間違いは意外に多い。

25 誤 5-oxo-1-undecene

正 1-undecen-5-one

この例では主基はケトンであり、語尾が one とならねばならない。なおこの場合のように炭化水素の語尾が母音 (e) で終り、接尾語が -one, -al, -ol のように母音で始まるときは前の (e) を省略して -enone, -anal, -ynol のように書く。置換基の位置番号が間に挿入されても -en-5-one のように前の (e) は省略しなければならない。

26 誤 8-hydroxyquinoline

正 8-quinolinol

27 誤 1,3,5-trihydroxybenzene

正 1,3,5-benzenetriol

28 誤 1,2,4-trihydroxybenzene

正 1,2,4-benzenetriol

29 誤 2,4,4'-trichloro-2',3'-dihydroxybiphenyl

23

24

25

26

27

28

29

19

20

21

22

正 2',4,4'-trichlorobiphenyl-2,3-diol

この種の間違いは環状化合物の場合にとくに多く見られ、官能基を含む側鎖を接頭置換基として環名の前につけた名称がしばしば見られる。

30 誤 2-acetylfuran

正 1-(2-furyl)-1-ethanone, 1-(oxacyclopent-2,4-dien-2-yl)-1-ethanone, 2-furyl methyl ketone

31 誤 2-acetyl-5-methylpyrrole

正 1-(5-methyl-2-pyrrolyl)-1-ethanone

32 誤 5-hydroxy-6,7-dimethylbenzofuran

正 6,7-dimethyl-1-benzofuran-5-ol

30 の例に見られるように複素環化合物では慣用名、代置命名、基官能命名などいくつかの名前が可能である。

特性基を2つ以上含む化合物では主官能基1つだけを接尾語置換基とし、他は接頭語として語幹の前に並べなければならないが、この間違いもときどき見られる。

33 誤 1-acetoxy-2-propanol

正 2-hydroxypropyl acetate

この例では主基の優先順位の表からも明らかなように、水酸基よりもエステル基を優先して命名しなければならない。

34 誤 4-hydroxy-1-keto-1,2-dihydronaphthalene

正 4-hydroxy-1(2H)naphthalenone

この例ではケトンが主基だから語尾は *-one* になる。この場合のように芳香環上の炭素をケトン基とすることにより、余分の水素をどこかの炭素に加えなければならなくなったときには、その位置を指示水素として示すことになる。34 は 4-hydroxy-1,2-dihydronaphthalen-1-one ならまだ許せる命名である。このような主基

選択の混乱はわが国だけではなく、最近の *J. Org. Chem.* の論文中でも次のような混乱した命名が使われていた。

35 誤 2-oxo-1-oxaspiro[4.5]deca-3,7-diene

正 1-oxaspiro[4.5]deca-3,7-dien-2-one

36 誤 2-oxo-1-oxaspiro[4.5]deca-3,7-diene-10-carbaldehyde

正 2-oxo-1-oxaspiro[4.5]deca-3,8-diene-6-carbaldehyde

37 誤 2-oxo-10-carbomethoxy-1-oxaspiro[4.5]deca-3,7-diene

正 methyl 2-oxo-1-oxaspiro[4.5]deca-3,8-diene-6-carboxylate

この例ではいずれも代置命名法を使っているのに 35 では主基がケトン、36 ではアルデヒド、37 ではエステルである。3 化合物とも 1-oxaspiro[4.5]deca-3,7-diene というスピロ複素環の誘導体として命名されており、誤った名前からでも容易に正しい構造式は書けるけれども、IUPAC 規則に反することは明らかである。すなわち 35 では語尾を *-one* としなければならず、36 では語尾が *carbaldehyde* なのでその位置番号を小さくするため二重結合が 3,8-diene となるし、37 でもエステルが主基なので 6-carboxylate としなければならない。かり

35

36

37

30

31

32

38 R=H

39 R=alkyl

40

41

33

34

42

43

44

に 35, 37 の誤った命名のように 2-oxo-1-oxaspiro [4.5]deca-3,7-diene というスピロ体の誘導体として統一したいのなら 36 も 10-formyl 体として名づけなければ首尾一貫しない。同じ雑誌に 38 のような例も見られた。

38 誤 3,4-dihydroxybenz[*a*]anthracene

正 benz[*a*]anthracene-3,4-diol

ただし 39 のような一般的な化合物を同一報文中で扱う場合、R がアルキルなら 3,4-dialkoxy 体となり、H なら語尾が -diol となるので不便なこともあり、このような特例的な場合には接頭置換基のみで統一することもある程度は許されよう。以下の例は *Agric. Biol. Chem.* 誌上に見られたものである。

40 誤 8-hydroxy-3-*p*-menthene

正 *p*-menthen-8-ol

41 誤 2-methoxycarbonylmethyl-3-methyl-2-cyclopenten-1-one

正 methyl 2-methyl-5-oxo-1-cyclopentene-acetate

42 誤 2,3-dicyano-5-(4-hydroxyphenyl)pyrazine

正 5-(4-hydroxyphenyl)pyrazine-2,3-dicarbonitrile

43 誤 5-methoxy-7-hydroxycoumarin

正 5-methoxycoumarin-7-ol, 7-hydroxy-5-methoxy-2*H*-1-benzopyran-2-one

44 誤 5-methoxy-7-acetoxycoumarin

正 5-methoxy-7-coumarinyl acetate, 5-methoxy-2-oxo-2*H*-1-benzopyran-7-yl acetate

(c) アルキル基

IUPAC 法では炭化水素やアルキル基は慣用名の認められている例外を除いては分枝がないのが建前であり、少なくとも C₇ 以上では *n* (normal) をつける必要はないし、アルキル基の結合位置は常に 1 でなければならない。

45 誤 2-propyl

正 1-methylethyl, isopropyl

46 誤 2-butyl

正 1-methylpropyl, *sec*-butyl

47 誤 3,7-dimethylpentadec-2-yl acetate

正 1,2,6-trimethyltetradecyl acetate

48 誤 2-methyl-5,5-[propanediyl-(1,3)-dithio]cyclopentan-1-one

45

47

46

48

正 2-methyl-5,5-(trimethylenedithio)cyclopentan-1-one, 2-methyl-6,10-dithiaspiro [4.5]decan-1-one

炭化水素の両端の水素を除いた 2 価の基は methyl-, ethylene-, trimethylene- のように命名されるべきで、48 の誤った例のように propanediyl とはしない。48 のような環状チオアセタールはスピロ体として代置命名法を使った方がわかりやすい。

(d) 位置番号のつけ方

主基の位置や不飽和結合の位置を示す数字は母体炭化水素の語幹の前につけて示さなければならない。不飽和結合と特性基の両方を含む化合物では不飽和結合の位置番号を語幹の前に置き、主基の位置番号は語幹と接尾語の間に挿入する。この数字の挿入場所の間違いも大変多いので以下の例を参考にして注意していただきたい。

49 誤 4,5-dibromopentan-1-ol

正 4,5-dibromo-1-pentanol

50 誤 4-methylhexan-1-ol

正 4-methyl-1-hexanol

51 誤 pentan-3-ol

正 3-pentanol

52 誤 3-methylbutan-1-ol

正 3-methyl-1-butanol

53 誤 but-2-ynedial

正 2-butyndial

54 誤 6-methylhept-5-en-2-one

正 6-methyl-5-hepten-2-one

55 誤 hex-1-en-4-yne

正 1-hexen-4-yne

しかし有橋炭化水素、スピロ炭化水素や代置命名法の場合は官能基や不飽和結合の位置番号は語幹と語尾の間

56

57

に挿入しなければならない。したがって、

- 56 誤 bicyclo[3.2.1]-2-octene, bicyclo[3.2.1]
 octene-2
 正 bicyclo[3.2.1]oct-2-ene
 57 誤 1-oxa-3-aza-2-cyclopentene
 正 1-oxa-3-azacyclopent-2-ene, 1,3-oxazolin
 -2-ene

cyclo, spiro, oxa, thia などは母体の中の状態を示す語頭であり、語幹と切り離すことはできない。

- 58 誤 cyclopentane-1,2-dione
 正 1,2-cyclopentanedione
 59 誤 indolyl-3-acetic acid
 正 3-indolylacetic acid, indole-3-acetic acid
 60 誤 2,3-dimethylcyclopent-2-en-1-one
 正 2,3-dimethyl-2-cyclopenten-1-one
 61 誤 2-*n*-pentylcyclopent-2-ene-1-one
 正 2-pentyl-2-cyclopenten-1-one
 62 誤 2-hydroxy-3-methylcyclopent-2-en-1-one
 正 2-hydroxy-3-methyl-2-cyclopenten-1-one
 63 誤 3-benzylidene-4-keto-5-phenyl-4-butenolide
 正 2-benzylidene-3-oxo-4-phenyl-4-butenolide, 3-benzylidene-5-phenyl-1-oxacyclo-

58

59

60

61

62

63

pentene-2,4-dione, 3-benzylidene-5-phenyloxolane-2,4-dione

63 の例では位置番号の間違いと keto という誤った用法が見られる。正しい命名として複素環化合物としての名称をも示したが、このどれをとるかは著者の自由であり、同じ報文中での統一がなされていればよい。

(e) 句読点や括弧などの使い分け

炭化水素の水素原子を他の原子やグループで置換したときは置換基名を接尾語および接頭語としてつけるが、この場合の位置番号はハイフンでつなげる。従って 2 butanol とか 3 pentanone と書くのは誤りで、2-butanol, 3-pentanone のように書く。接頭置換基は炭化水素の語幹とつなげて書くので、2-propylpyridine のように 1 語とするのが正しく、2-propyl pyridine のように間を離して 2 語に分けてはいけない。しかし基官能命名法ではアルキル基と官能種類名は 2 語に分けなければならないので butyl alcohol が正しく、butylalcohol とはいけない。実際には ethyl methyl ketone のような 3 語からなる名称を ethylmethyl ketone のように 2 語としている例も見られる。

同一置換基が 2 つ以上含まれるときはその位置番号をコンマでつなげ、1,2-dichloropropane のように書く。これに対しスピロ化合物、有橋炭化水素のようにアラビヤ数字で炭素数を示したときは bicyclo[2.2.0]hexane, spiro[4.5]decane のように角括弧を用い、点で数字をつなげなければならないが、実際にはコンマでつなげている例も見られる。

括弧の使い方も注意する必要がある。 (1-chloro-ethyl)benzene は 64 を表わし、1-chloro-2-ethylbenzene は 65 を表わす。括弧をなくした 1-chloroethyl-

64

65

68

69

70

66

67

71

72

73

74

benzene はまぎらわしい。同様に (2-naphthyl)acetic acid といえば **66** を示すが、2-naphthylacetic acid とすると **66** か **67** かまぎらわしい。

(f) アセタール

一般に分子内に $C(OR)_2$ を含む化合物はアセタールと呼ばれ、ケトンから導かれる化合物もケタールとは呼ばないことになった。アセタールは dialkoxo 化合物として命名することが好ましいが dialkyl acetal と命名してもよい。しかしエチレングリコールとのアセタールのような環状アセタールは複素環化合物誘導体として命名するのが普通である。

68 誤 acetone dimethyl ketal

正 2,2-dimethoxypropane, acetone dimethyl acetal

69 誤 acetone ethylene ketal

正 2,2-dimethyl-1,3-dioxolane, acetone ethylene acetal

環状ケトンの ethylene glycol acetal のようなスピロ化合物はスピロ炭化水素の誘導体として命名するのがわかりやすい。

70 誤 cyclohexanone ethylene ketal

正 cyclohexanone ethylene acetal, 1,4-dioxaspiro[4.5]decane, cyclohexanespiro-2-(1,3-dioxolane)

71 正 7,7,9-trimethyl-1,4-dioxaspiro[4.5]decane-8-one

ある化合物に命名したときには逆にその名称から構造式を書いてみて一義的に正しい構造が導かれることを確かめることが不可欠である。そうすれば **72**, **73**, **74** のような異なる構造を示してしまう不注意な命名は避けられよう。

72 誤 1-(4-methyl-1,3-dioxolan-2-yl)-formyl-methylidene-3-methylcyclopent-3-ene

正 2,7-dimethyl-1,4-dioxaspiro[4.4]non-6-en-6-ylideneethanal

73 誤 1-(4-methyl-1,3-dioxolan-2-yl)-2-allyl-3-methyl-2-cyclopenten-4-yl acetate

正 6-allyl-2,7-dimethyl-1,4-dioxaspiro[4.4]non-6-en-8-yl acetate

このようなスピロアセタールの場合には代置命名法を用いないで dioxolane とのスピロ化合物としての命名も可能である。

74 正 bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-spiro-2'-(1',3'-dioxolane)

(g) エステル

エステルの命名にもしばしば混乱が見られる。たとえば酢酸エステルは acetate であり acetate ester とはいわない。同様に **75** に phthalate ester という名称が見られたが、これは phthalate または phthalic ester でなければならない。もう1つよく見られる間違いはアルキル基の命名と関連したものである。たとえば **76**→**77**→**78** の反応を考えてみよう。この場合 **76** は 5-undecanone, **77** は 5-undecanol であるが、**78** に対してもつられて 5-undecyl acetate としてしまう例が見られる。

75

76

77

78

79

80

もちろん 78 は 1-butylheptyl acetate としなければならない。このような誤りは案外気がつかない人が多い。

(h) その他

エーテルは一般には接頭置換基で命名するか基官能法を用いる。epoxide の場合は oxiran 誘導体か語頭置換基で命名すればよい。

79 誤 α, β -epoxycyclohexylideneacetic acid

正 1-oxaspiro[2.5]octane-2-carboxylic acid

epoxy は接頭置換基であって付加命名ではないが, 80 のような間違いもよく見られるので注意が必要である。

80 誤 epoxy- β -ionone

正 4-(2,6,6-trimethyl-1,2-epoxycyclohexyl)-

3-buten-2-one

おわりに

これまで比較的簡単な化合物名の間違いについて記してきたが有機化合物の命名はかなり複雑であり, とくに複素環を含む縮合多環系などはなかなか正確に名前をつけられない。しかしそのようなときはかえって参考書などをよく調べて命名するので案外間違えないものである。また今回は立体化学に関する *R*, *S*, *E*, *Z*, *cis*, *trans* などの使い方については一切ふれなかったが, 天然物をはじめ立体構造が関係してくるときにはこれらが不可欠の表示法となることを付記しておく。

最後に命名法に関する若干の参考書をあげておくので投稿する際や必要に応じて勉強されるよう望んでやまない。

参考書

平山健三, 平山和雄訳著: 有機化学命名法 [全] 改訂版, 南江堂 (1980 予定)。

日本化学会標準化専門委員会編: 化合物命名法, 日本化学会 (1978)。

畑 一夫: 有機化合物の命名…解説と演習, 培風館 (1971)。

J.H. Fletcher, O.C. Dermer and R.B. Fox ed: Nomenclature of Organic Compounds, Principles and Practice, American Chemical Society (1974)。