

新しいIUPAC有機化合物命名法2013勧告における主要な変更

日本化学会命名法専門委員会

すでに紹介したように(本誌2014年11月号, p. 1011. 命名法専門委員会のホームページ[†]にも掲載。従来の命名法からの変更点を理解するために併せて参照していただきたい), 2013年12月に出版された有機化合物命名法に関する勧告 Nomenclature of Organic Chemistry IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013 (以下2013勧告)における最も大きな変更点は, 優先IUPAC名 (preferred IUPAC name, PIN) が導入されたことである。PINの優先的使用が推奨されてはいるが, PINしか使えなくなったということではない。PINのほかにも, 現行の命名法に準拠した名称の一部も, 一般IUPAC名 (general IUPAC name, ここではGINと略す) と呼ばれ, 使用が認められている。

系統的にPINを作成できるようにするため, 使用できる慣用名を大幅に減らすとともに, 化合物の種類における優先順位を詳しく定め, それを厳密に適用することとなった。また, PINを作成するに当たっては, 慣用名と並んで, 関連する置換基名も制限を受け, 優先接頭語 preferred prefix や優先接尾語 preferred suffix が推奨されている。優先接頭語・接尾語のほか, 従来から使われてきてGINでも使うことができる接頭語・接尾語もあり, 原著には示された構造に対してPINとともにGINも併記されている。PINにはこれまで見慣れた名称とかなり異なるものもあるが, 系統的に命名しやすいように工夫されており, 時間はかかるもののこれまでの勧告と同様に徐々に普及していくと考えられる。

以下, PINの作成法に主眼を置いて2013勧告の主要な変更点を述べる。

[†]日本化学会のホームページで, 活動→国際交流→国際機関との交流→命名法専門委員会と進む。

1. 2013勧告ではPIN, GINともに使用できる慣用名(保存名 retained name と呼ばれる)が減らされたが, 特にPINでは大幅に限定された。PINにおける保存名は以下のとおりである。この中にも置換の形が限定されているものがある。以下「無置換」とあるのは, 置換されていない場合のみ使用が認められるという意味である。

・非環式炭化水素: methane, ethane, propane, butaneなどは従来どおり。

acetylene (無置換)。

優先接頭語: methyl, ethyl, propyl, butyl, methylene は従来どおり; 枝別れのある炭化水素基については *tert*-butyl (無置換) のみ許容。

・芳香族単環炭化水素: benzene, toluene (無置換), xylene (無置換)。

優先接頭語: 1,2-, 1,3-, 1,4-phenylene, benzyl (無置換), benzylidene (無置換), benzylidene (無置換)。

・多環脂肪族炭化水素: adamantane, cubane

・酸: formic acid (無置換), acetic acid, benzoic acid, oxalic acid

優先接頭語: formyl, acetyl, benzoyl, oxalyl

・ニトリル: acetonitrile, benzonitrile

・アルデヒド: formaldehyde,

acetaldehyde, benzaldehyde

・ケトン: chalcone (acetone,

benzophenone などはGINでのみ使用できる。2. 項参照)。

・アルコール, フェノール類: phenol

優先接頭語: methoxy, ethoxy, propoxy, butoxy, *tert*-butoxy (無置換), phenoxy

・エーテル: anisole (無置換)

・第一級アミン: aniline

優先接頭語: anilino

・芳香族多環炭化水素, 不飽和・飽和複素環化合物については, 従来の慣用名を

そのまま保存名として用いることができる。ただし, PINでは位置番号や指示水素を示さなければならないなどの条件がある。例えば, biphenyl (GIN) は1,1'-biphenyl (PIN), indole (GIN) は1*H*-indole (PIN) となる。略称(例, naphthyl, anthryl, pyridyl, furyl など)はGINでのみ認められる。縮合のための接頭語 anthra, benzo, naphtho, phenanthro, furo, imidazo, pyrido, pyrimido, thieno は引き続きPINでも使用できる。

2. PINの作成に際しては, 官能種類命名法 functional class nomenclature を使用できる官能基が酸, エステル, 酸ハロゲン化物(および擬ハロゲン化物), 酸無水物, アミン(およびイミン)オキシドに制限された。他の官能基では, 原則として置換命名法が優先する。したがって, halide, alcohol, ketone, aldehyde, ether, sulfide, sulfoxide, sulfone などについては, PINでは官能種類命名法が使えない。以下の例では, *のついていない名称がPIN, *のついている名称がGINである。

- (a) CH_3I
iodomethane
methyl iodide*
- (b) *tert*- $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$
2-methylpropan-2-ol
tert-butyl alcohol*
- (c) CH_3COCH_3
propan-2-one
acetone*
- (d) $\text{C}_6\text{H}_5\text{COC}_6\text{H}_5$
diphenylmethanone
benzophenone*
- (e) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$
propanal
propionaldehyde*
- (f) $\text{C}_2\text{H}_5\text{-O-CH}_3$
methoxyethane
ethyl methyl ether*
- (g) $\text{CH}_3\text{-S-CH}_3$
(methylsufanyl)methane
dimethyl sulfide*
(methylthio)methane*

- (h) $C_2H_5-SO-C_4H_9$
1-(ethanesulfinyl)butane
butyl ethyl sulfoxide*
1-(ethylsulfinyl)butane*
- (i) $C_2H_5-SO_2-C_2H_5$
(ethanesulfonyl)ethane
diethyl sulfone*
(ethylsulfonyl)ethane*

3. 化合物種類の優先順位が詳しく決められており、PINの作成は優先順位を厳密に守って行う必要がある(化合物種類の優先順位については命名法専門委員会のホームページ[†]に掲載の表を参照。以下の説明にあるカッコ内の数字は、この表における化合物種類の番号)。

- (a) $(C_6H_5)_2CH_2$
1,1'-methylenedibenzene
diphenylmethane*

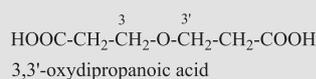
環 (benzene) が鎖 (methane) に優先する (40, rings>chains)。

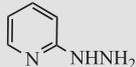
- (b) $C_6H_5-O-C_6H_5$
1,1'-oxydibenzene
diphenyl ether*
phenoxybenzene*

炭素化合物 (benzene) がエーテルに優先 (40 > 41), 母体化合物のより多く存在する名称 (倍数化 multiplication された名称, この例では dibenzene) が, 1つのみ存在する名称 (benzene) に優先する。

- (c) $C_2H_5-O-C_2H_5$
ethoxyethane
diethyl ether*

PINは1,1'-oxydiethaneではない。上記(a), (b)のPINは、これまであまり使われなかった倍数命名法 multiplicative nomenclature (置換命名法に属する) による命名であり, 2013 勧告では優先順位を守って命名するためによく使用される。しかし, 鎖状炭化水素誘導体では, 官能基がないと使用することができない。下は官能基のあるPINの例。



- (d) 
2-hydrazinylpyridine
(pyridin-2-yl)hydrazine*
(pyridin-2-yl)diazane*

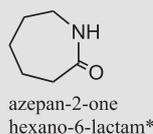
環 (pyridine) が鎖 (hydrazine, diazane) に優先する (21, rings>chains)。



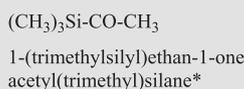
Si (silane) が C (benzene) に優先する (26 > 40)。

(f) カルボニル化合物としての優先順位を守るため, 以下の化合物は形式的なケトン誘導体(シユードケトンと呼ばれる)として命名する。

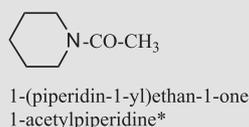
・環状化合物で環内カルボニル炭素が1個以上の環骨格ヘテロ原子に結合するもの



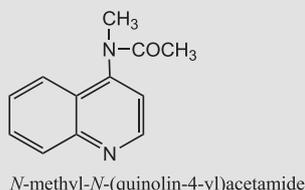
・鎖状化合物でカルボニル炭素が鎖状のヘテロ原子(窒素, ハロゲンを除く)と結合するもの



・鎖状化合物のカルボニル炭素が複素環中のヘテロ原子(窒素を含む)と結合するもの



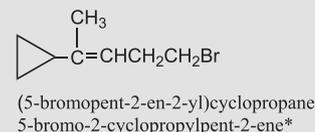
(g) 多核環状化合物のアミンのアシル化体は, 環にアミド基が置換した化合物としてではなく, アミドの窒素上に多核環状基が置換した化合物として命名する。



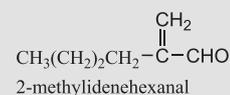
4-(N-methylacetamido)quinoline および 4-[acetyl(methyl)amino]quinoline はGINとしても使用できない。

4. 以下の2点も従来の優先順位に関する規則からの大きな変更である。

(1) 構成する炭素数と無関係に環が鎖に優先する。



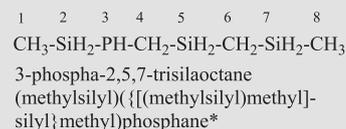
(2) 炭素鎖の長さが不飽和結合の存在に優先する。



2-butylprop-2-enal はGINとしても使用できない。

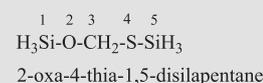
5. 鎖状化合物における 'ア' 命名法が変更されPINの作成に活用されている。変更は次の3点である。

(1) ヘテロ単位(ヘテロ原子またはそれ自身で独自の名称を持つヘテロ原子群, -SS-, -SiH₂-O-SiH₂-, -SOS- など)を4つ以上持つときに使用できる(以前は数の制限, ヘテロ原子群の概念がなかった)。



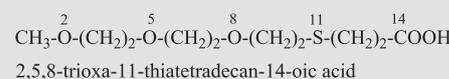
母体名称の前につけるヘテロ原子の 'ア' 名称は族番号の大きいもの(同族では原子番号が小さいもの)の順に書く(アルファベット順ではない。次の(2)の例も参照)。この例では, 初めに15族のphosphaを, 次に14族のsilaを書く。

(2) 鎖の末端にP, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In, Tl原子があるときにも使うことができる(以前は鎖がCで終わるときのみ使用できた)。



順位のより高い原子(ここではO>S)により小さい番号をつける。

(3) 母体化合物の番号付けにおいて, ヘテロ原子の番号の組み合わせが最小となるようにする(以前は主官能基の番号が優先された)。



主官能基(カルボキシ基)の番号を優先すると7,10,13-trioxa-4-thiatetradecanoic acidとなるが, これはGINとしても使えない。