

有機化合物の基礎 (1)

炭化水素と骨格構造

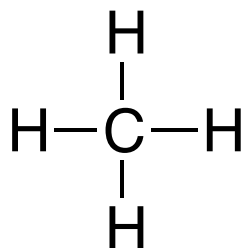


炭化水素

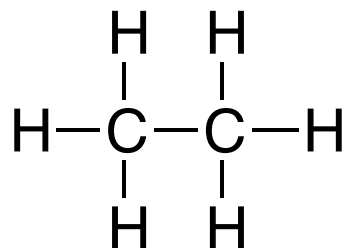
炭化水素：炭素と水素のみからなる物質
(最も基本的な有機化合物)

飽和炭化水素：単結合のみから成る炭化水素

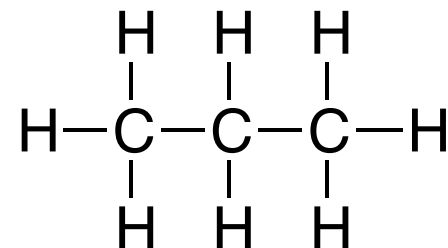
「アルカン」 alkane と呼ぶ



メタン
methane



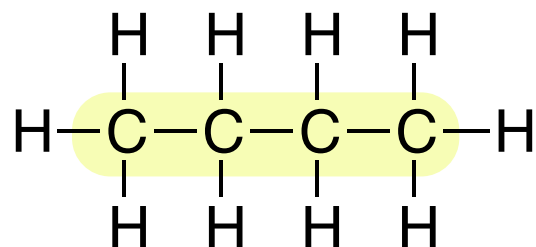
エタン
ethane



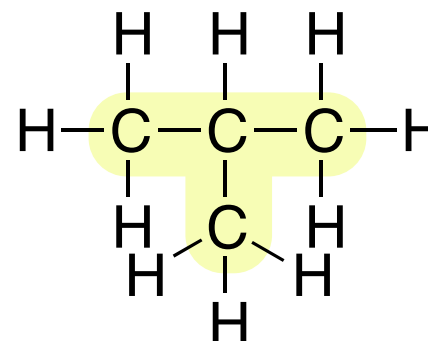
プロパン
propane



炭素数 4



ブタン
butane



イソブタン
isobutane

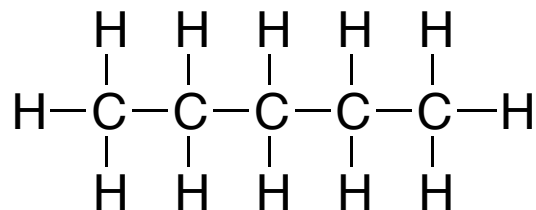
直鎖アルカン
straight-chain alkane

分岐アルカン
branched alkane

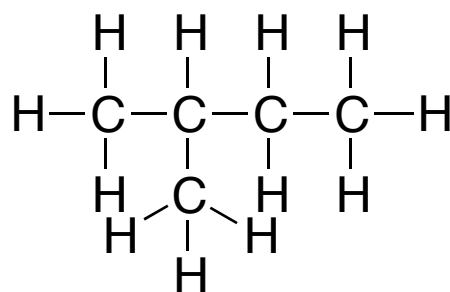
構造異性体
structural isomer



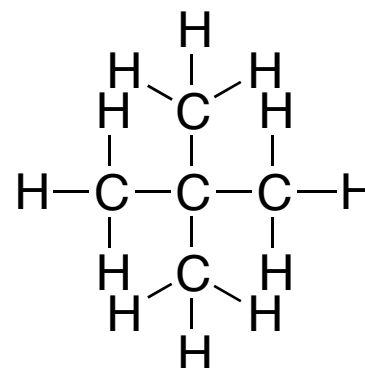
炭素数 5



ペンタン
pentane



イソペンタン
isopentane



ネオペンタン
neopentane

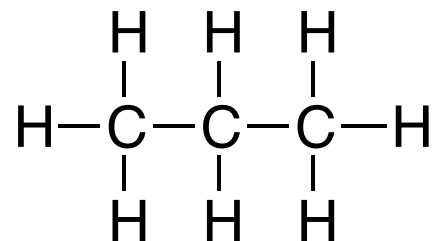
炭素数 6 … 5 種類

炭素数 7 … 9 種類

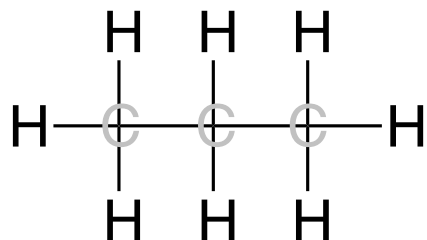
炭素数の多い複雑な化合物を
簡便に書く方法が必要！



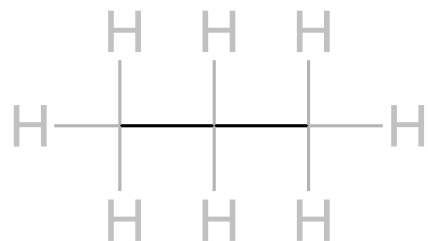
骨格構造



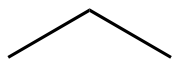
プロパン



炭素原子の“C”記号を省略する。



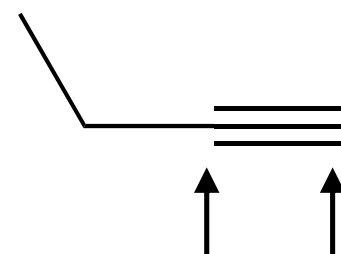
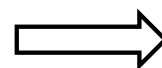
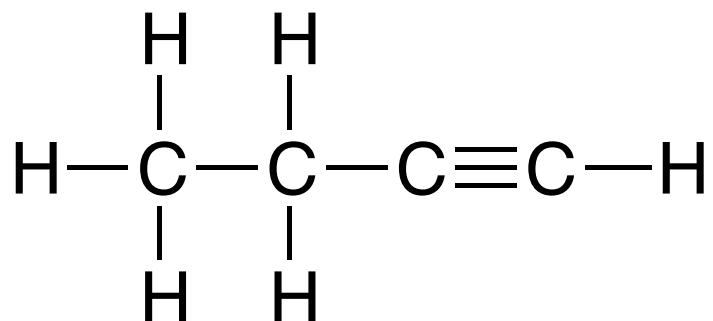
炭素原子に結合している水素原子について、炭素－水素結合と、水素原子の“H”記号を省略する。



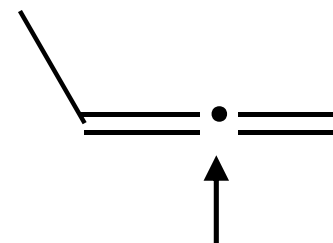
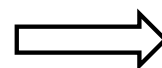
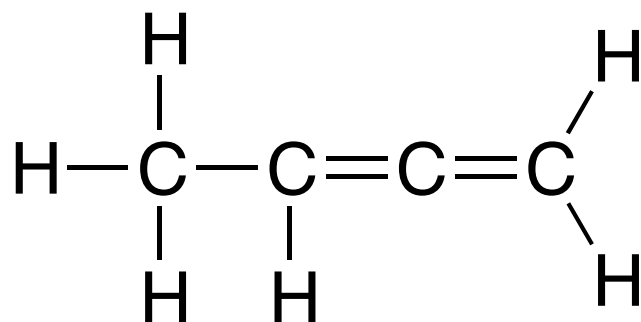
直鎖状に炭素原子がつながっているときは、炭素原子の位置を「折れ線の角」で表記する。



骨格構造 (sp炭素がある場合)



sp炭素の位置

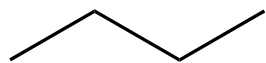


sp炭素の位置

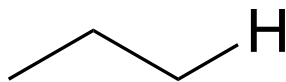


骨格構造のよくある誤り

折れ線の末端はHではなくC



炭素原子 4 つ

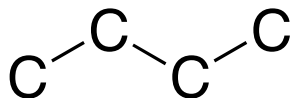


炭素原子 3 つ

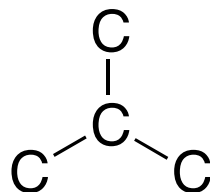
← 混同しない

“C” の記号を書いたら、そのCに結合した水素原子は省略できない

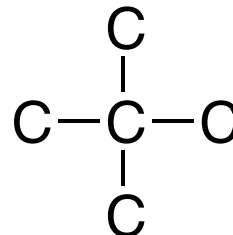
誤り :



ブタン

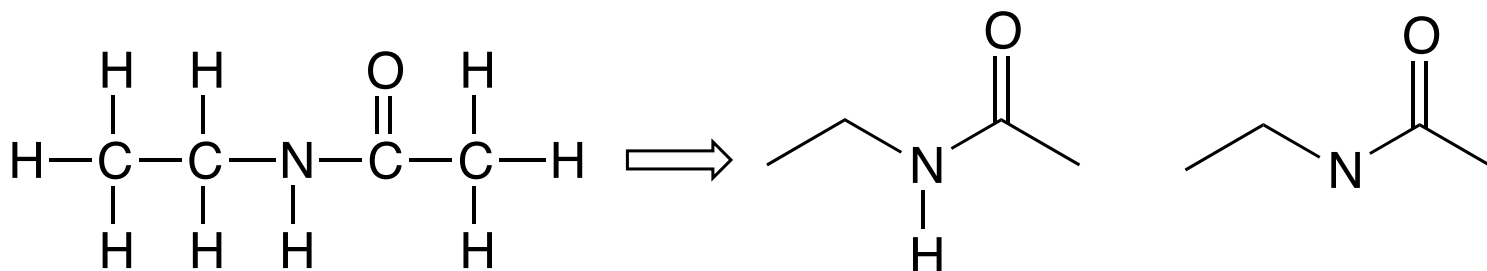


イソブタン



ネオペンタン

「炭素以外の原子」に結合した水素原子は省略できない



(正しい)

(誤り)



飽和炭化水素の命名法

直鎖アルカン

分岐アルカン



アルカンの命名法

分子の構造から一定の規則によって名称をつける

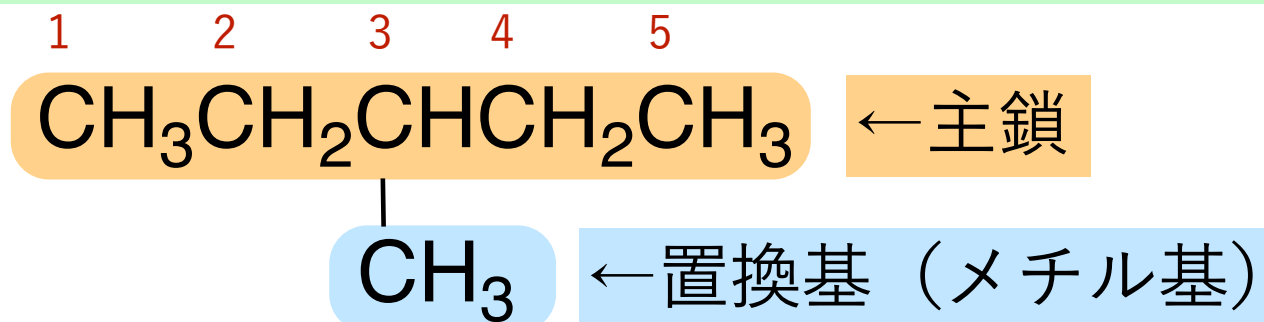
IUPAC命名法 (組織的命名法、系統的命名法)

直鎖アルカン：炭素数によって決められた名前と呼ぶ

炭素数	組成式	日本語名	英語名
1	CH ₄	メタン	methane
2	C ₂ H ₆	エタン	ethane
3	C ₃ H ₈	プロパン	propane
4	C ₄ H ₁₀	ブタン	butane
5	C ₅ H ₁₂	ペンタン	pentane
6	C ₆ H ₁₄	ヘキサン	hexane
7	C ₇ H ₁₆	ヘプタン	heptane
8	C ₈ H ₁₈	オクタン	octane
9	C ₉ H ₂₀	ノナン	nonane
10	C ₁₀ H ₂₂	デカン	decane



分岐アルカンの命名法：置換命名法



- (1) 結合している炭素原子の最も長い並びを「主鎖」とする
- (2) 主鎖に結合している「置換基」の名称と結合位置を特定する
- (3) 主鎖に「位置番号」をつける
(置換基の番号がなるべく小さくなるように)
- (4) 「位置番号・ハイフン・置換基名・主鎖名」の順につなぐ

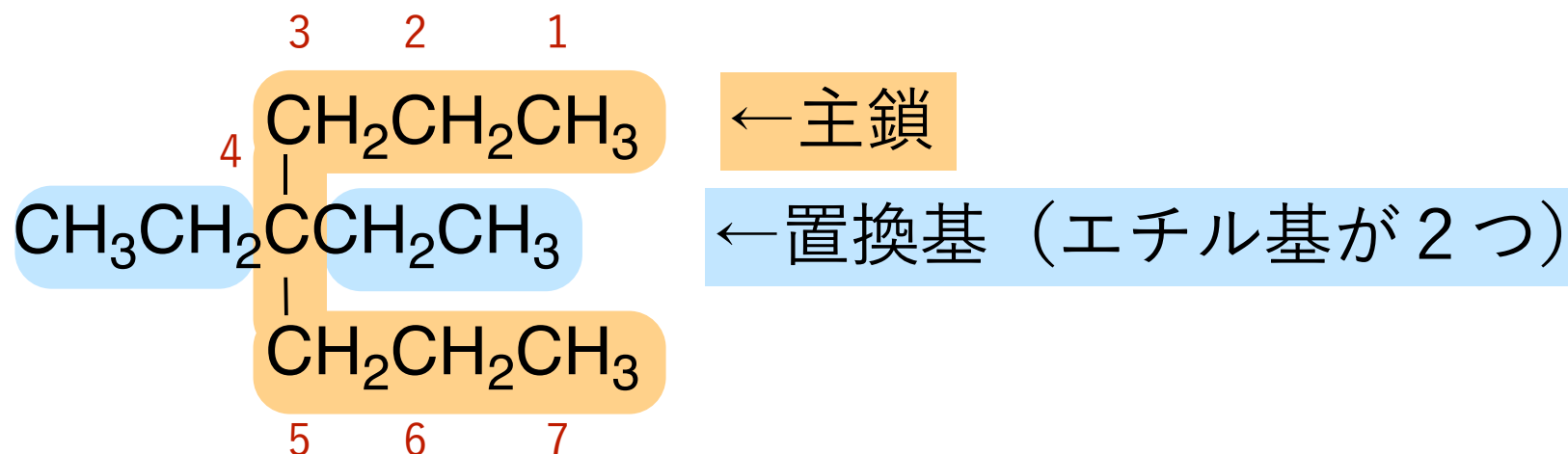
3-メチルペンタン

3-methylpentane



分岐アルカンの命名法（つづき）

- 置換基が2つ以上ある場合（同じ置換基）

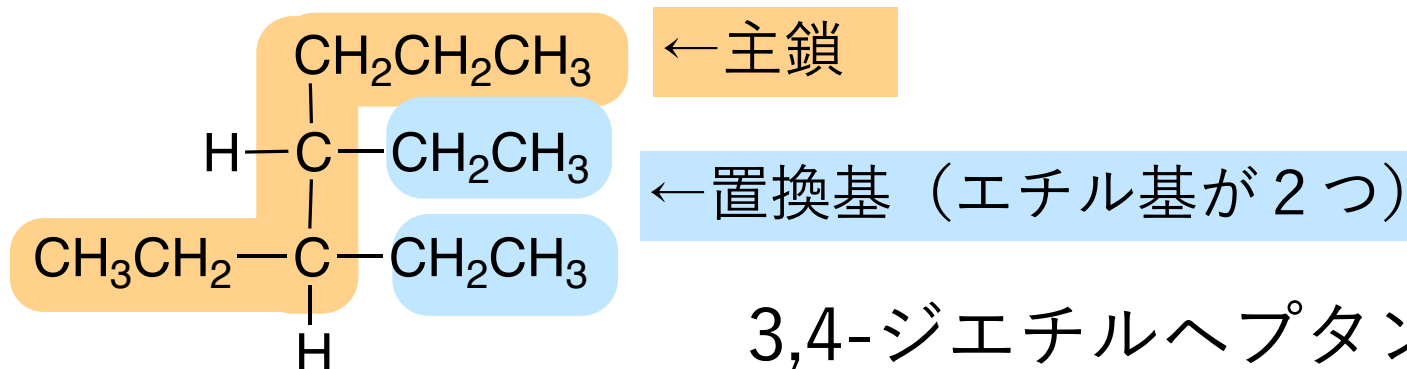


4,4-ジエチルヘプタン

↑ 数を表す接頭語

コンマ

(2:ジ、3:トリ、4:テトラ、5:ペンタ、6:ヘキサ、…)

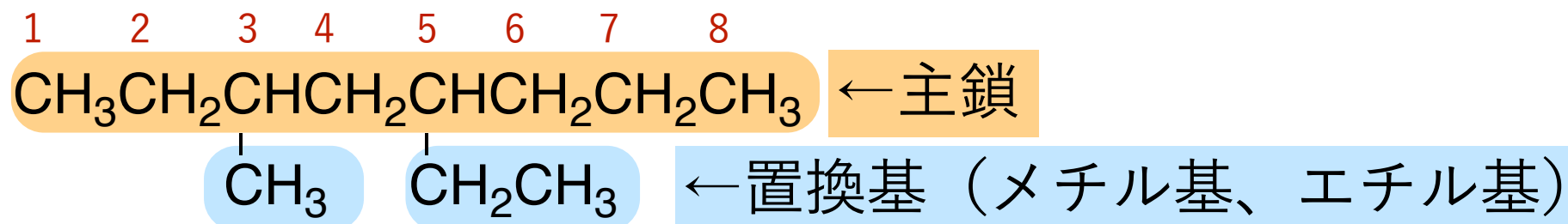


3,4-ジエチルヘプタン



分岐アルカンの命名法（つづき）

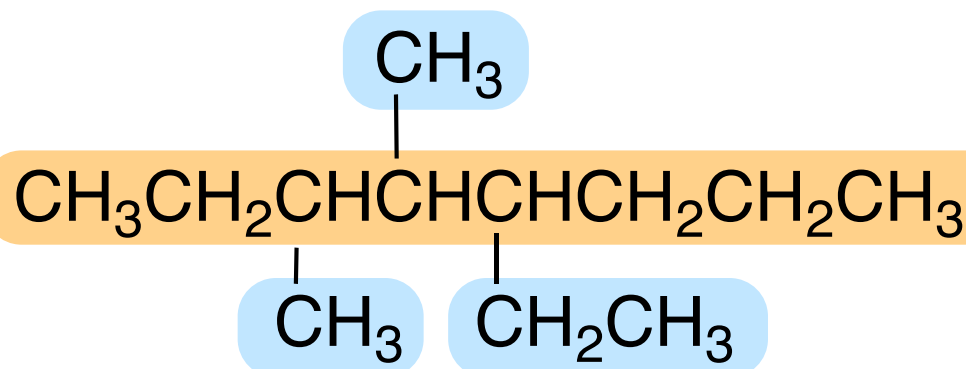
- 異なる置換基が2つ以上ある場合



5-エチル-3-メチルオクタン (5-ethyl-3-methyloctane)

ハイフン

置換基はアルファベット順に並べる



5-エチル-3,4-ジメチルオクタン



【練習問題】 C_6H_{14} のすべての構造異性体（5種類）を書き、系統的名称をつけなさい。



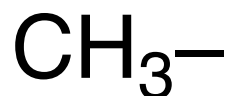
アルキル基

命名法と分類



アルキル基

アルキル基 = アルカンから水素原子を 1 つ除いたもの
多くの有機化合物の部分構造となっている



メチル
methyl



メタン
methane



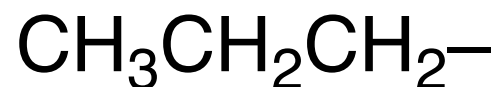
直鎖アルキル基の命名法

直鎖アルキル基：直鎖アルカンの末端の水素原子を取り除いたもの

直鎖アルキル基の名称：末尾の“ane”を“yl”に置き換える
(日本語名では、「アン」を「イル」に置き換える)



エチル
ethyl



プロピル
propyl

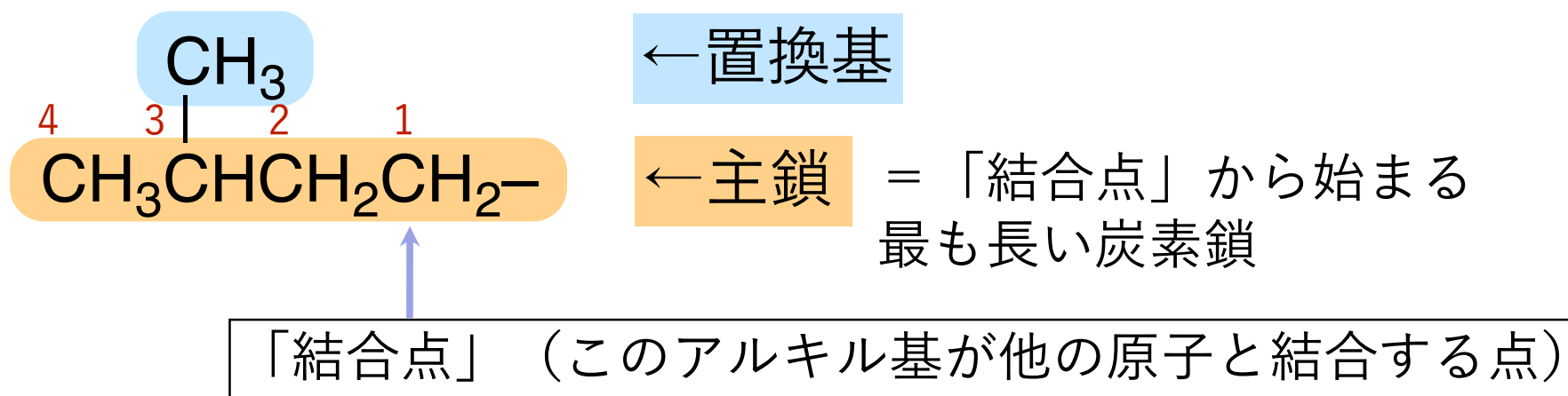


ブチル
butyl

以下、「ペンチル」「ヘキシル」「ヘプチル」……と続く



分岐アルキル基の命名法



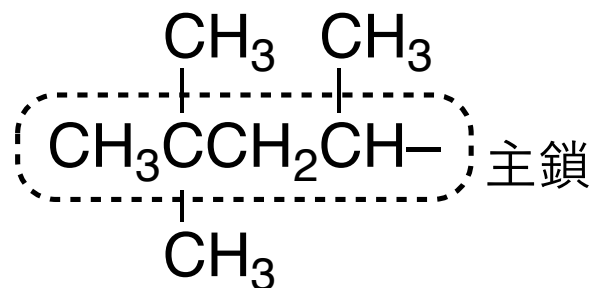
位置番号：「結合点」を1とする

3-メチルブチル

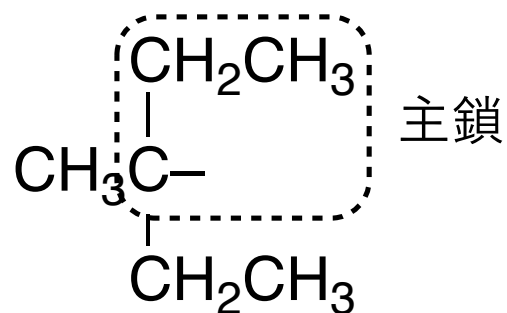
3-methylbutyl



分岐アルキル基の命名法：主鎖の決め方に注意



1,3,3-トリメチルブチル



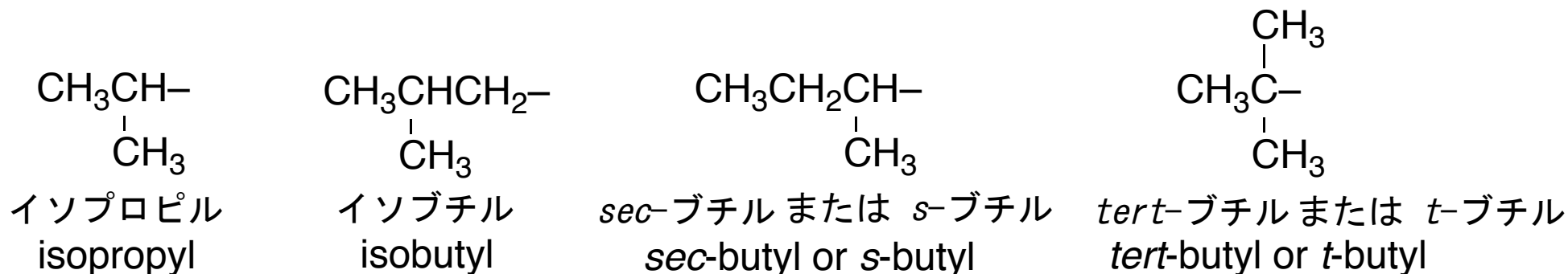
1-エチル-1-メチルプロピル



分岐アルキル基の慣用名

よく出てくる分岐アルキル基：「慣用名」を覚えておくこと

「慣用名」：系統的名称ではないが、歴史的に使われており、現在も使用が認められている名称



「*sec*-」 または 「*s*-」 = 「セカンダリー」（二級、第二級）

「*tert*-」 または 「*t*-」 = 「ターシャリー」（三級、第三級）

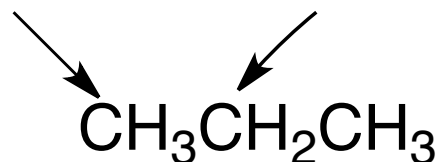


分岐の仕方による炭素原子の分類

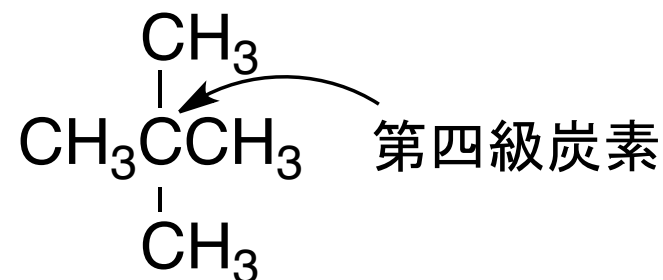
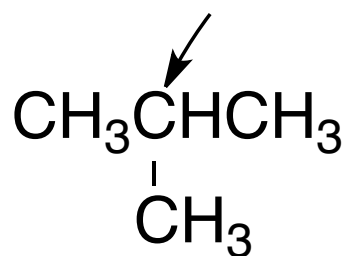
1 個の炭素原子に結合している炭素原子：第一級炭素
primary

2・3・4 個の炭素原子に結合している炭素原子：
第二級炭素・第三級炭素・第四級炭素
secondary tertiary quaternary

第一級炭素 第二級炭素



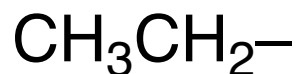
第三級炭素



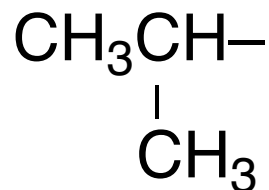
注意：「級数」「級の数」という言葉を使わないこと
(英語では数ではなく別の言葉で表すので、「級数」に対応する
学術用語が存在しない)



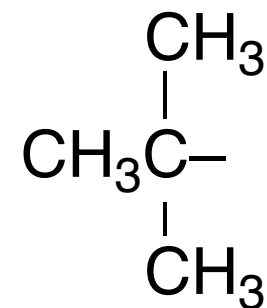
アルキル基の分類



第一級アルキル基



第二級アルキル基



第三級アルキル基

- ・ 結合点の炭素にいくつ炭素原子が結合しているかで分類
- ・ 「第四級アルキル基」は存在しない（当然）
- ・ メチル基は「第0級」だが、単にメチル基と呼ぶ

（IUPAC の勧告では「メチル基は第一級に分類」となっているが、有機化学の世界ではメチル基を特別扱いすることが多い）



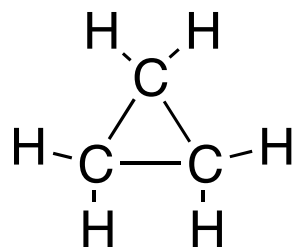
【練習問題】 イソブチル基、*s*-ブチル基、*t*-ブチル基の系統的名称を書きなさい。



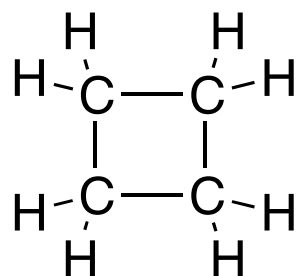
シクロアルカン



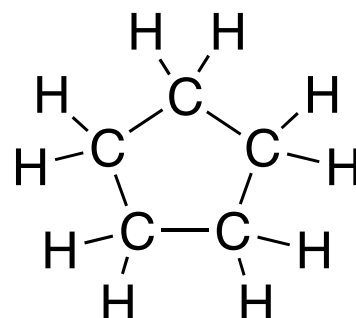
シクロアルカン



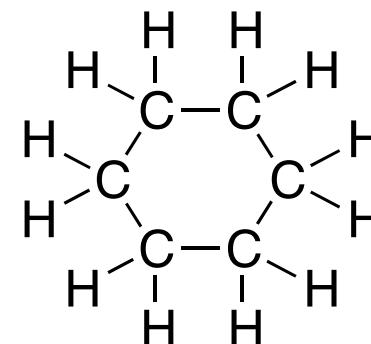
シクロプロパン
cyclopropane



シクロブタン
cyclobutane



シクロペンタン
cyclopentane



シクロヘキサン
cyclohexane

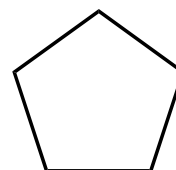
骨格構造で書くと：



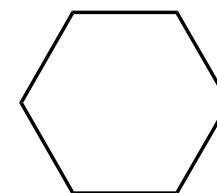
三員環



四員環

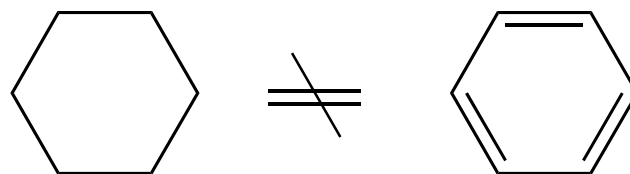


五員環



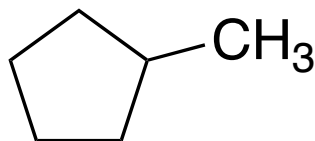
六員環

注意：シクロヘキサンとベンゼンは違う！

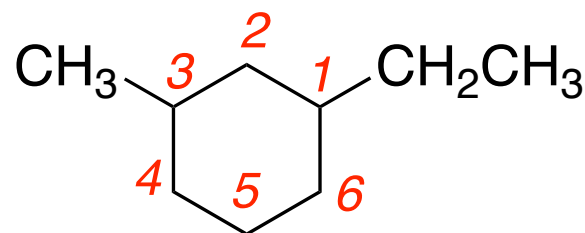


シクロアルカンの命名法

置換シクロヘキサンの命名法



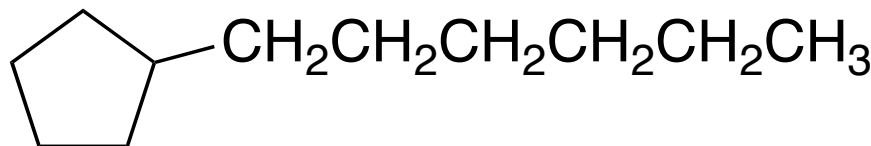
メチルシクロペンタン
methylcyclopentane



1-エチル-3-メチルシクロヘキサン
1-ethyl-3-methylcyclohexane

※ 二置換以上のシクロアルカンには立体異性体がある（後で学びます）

長い置換基を持つ場合



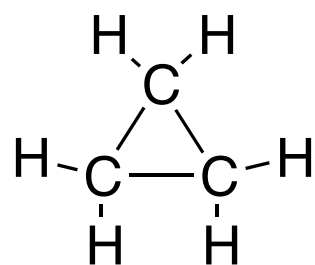
1-シクロペンチルヘキサン
1-cyclopentylhexane

※ 「置換基がたくさんついている方」「炭素数が多い方」が主鎖になる

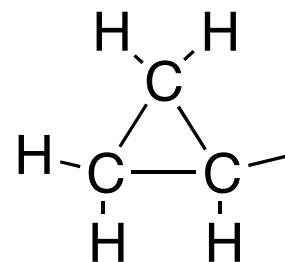
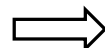


シクロアルカンの命名法

シクロアルカンを「置換基」として命名するときは
シクロアルカン名の最後の -ane を -yl に変える

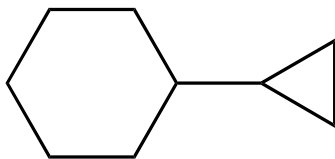


シクロプロパン
cyclopropane

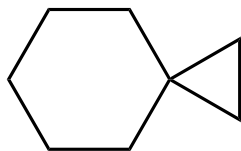


シクロプロピル
cyclopropyl

例：



シクロプロピルシクロヘキサン
cyclopropylcyclohexane

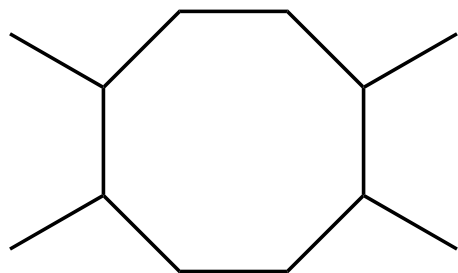
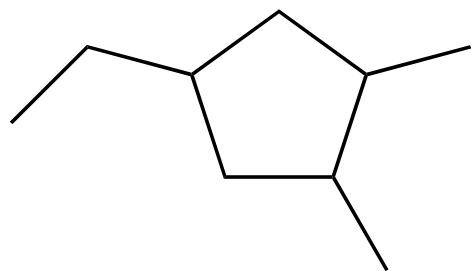


これとは別！

(スピロ[5.2]オクタン, spiro[5.2]octane)



【練習問題】 次の化合物の系統的名称を書きなさい。



不飽和炭化水素の命名法

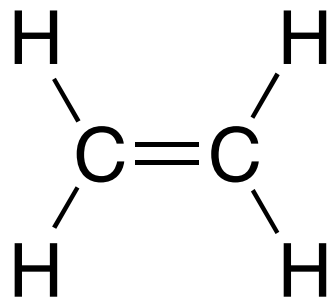
アルケンの命名法

アルキンの命名法



アルケンの命名法

アルケン：二重結合を持つ炭化水素



系統的名称：エテン (ethene)

慣用名：エチレン (ethylene)

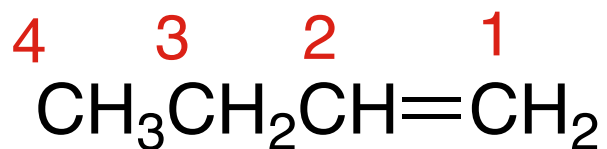
系統的名称の作り方：

同じ炭素骨格を持つアルカンの名称の末尾の
“ane”（アン）を“ene”（エン）に変える

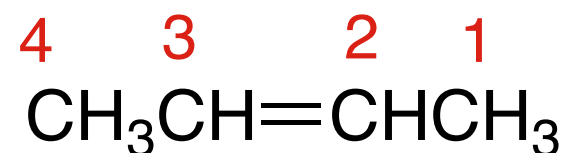


アルケンの命名法（位置番号をつける場合）

二重結合の位置が複数可能なときは位置番号をつける

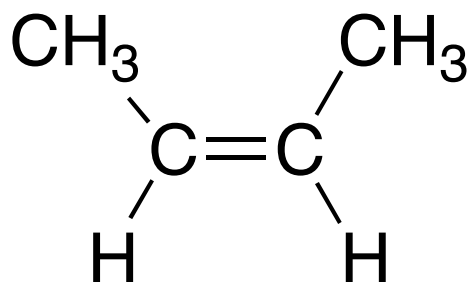


1-ブテン 1-butene

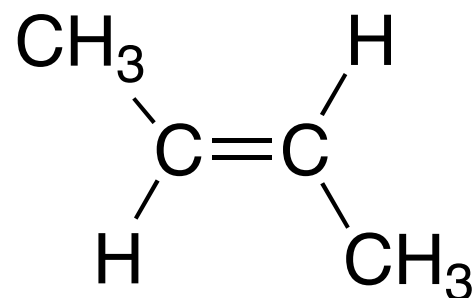


2-ブテン 2-butene

※ 2-ブテンには立体異性体（シス／トランス）がある。
その系統的命名法は後日学ぶ



cis-2-ブテン



trans-2-ブテン

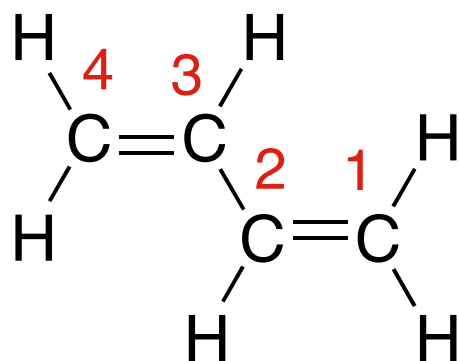


二重結合が 2 個以上ある場合

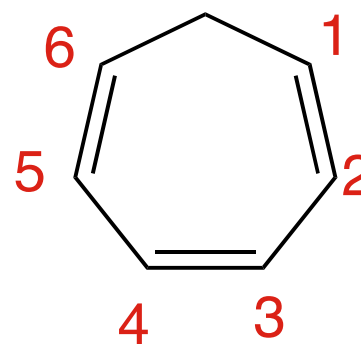
アルカンの名称の末尾の “ne” (ン) をとって

- “diene” (ジエン、二重結合 2 個)
- “triene” (トリエン、二重結合 3 個)
- “tetraene” (テトラエン、二重結合 4 個)

などと命名する



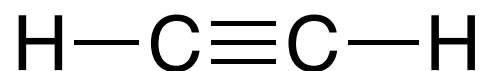
1,3-ブタジエン
1,3-butadiene



1,3,5-シクロヘプタトリエン
1,3,5-cycloheptatriene



アルキンの命名法



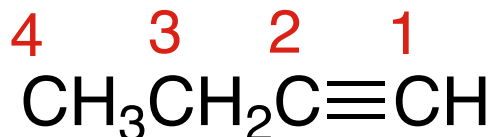
系統的名称：エチン (ethyne)

慣用名：アセチレン (acetylene)

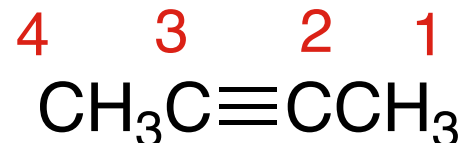
系統的名称の作り方：

同じ炭素骨格を持つアルカンの名称の末尾の
“ane”（アン）を“yne”（イン）に変える

位置番号をつける場合



1-ブチン 1-butyne

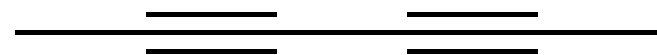
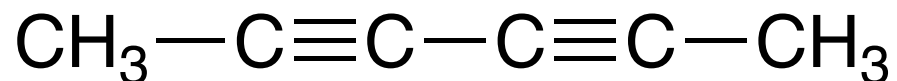


2-ブチン 2-butyne



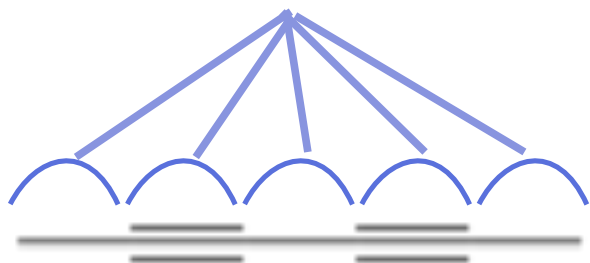
アルキンを骨格構造で書く場合

sp炭素は直線構造なので、炭素の位置で折り曲げずに書く

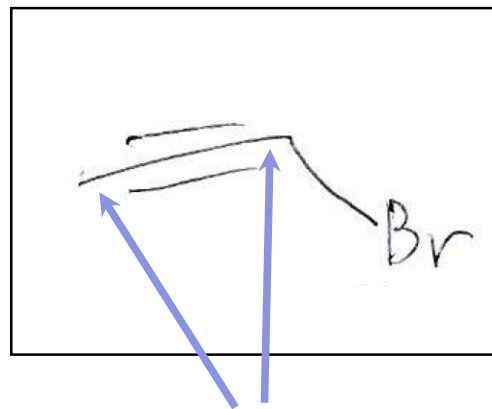


2,4-ヘキサジイン 2,4-hexadiyne (骨格構造での書き方)

炭素-炭素結合がある部分は、同じぐらいの長さで書くこと



こういう雑な書き方はダメ



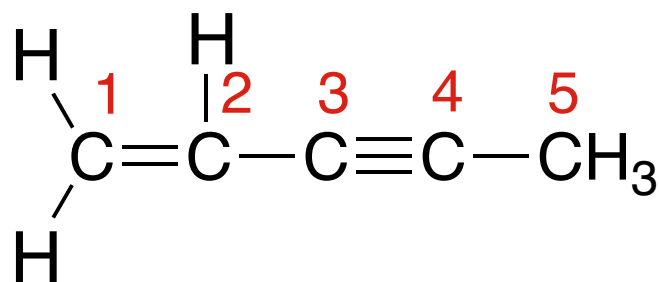
ここに C-C 結合があるのか
どうかわからない



二重結合・三重結合を両方持つ物質の場合

位置番号の決め方：「エン」「イン」を区別せずに、なるべく小さい番号になるようにつける

名前の書き方：「エン」が先、「イン」が後

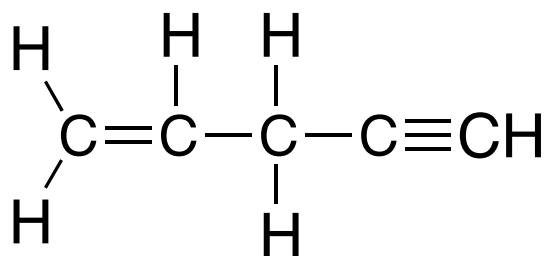


1-ペンテン-3-イン

1-penten-3-yne

ここは“e”を省く

※ 下の場合、番号を右からつけると「イン」が4、「エン」が1になり、左からつけると「エン」が1、「イン」が4になる。この場合は、「エン」が小さい番号になる方を選ぶ。



1-ペンテン-4-イン

1-penten-4-yne



【練習問題】 次の化合物の系統的名称を書きなさい。
立体異性体については考慮しなくてよい。

