

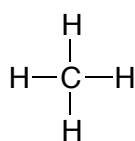
第 7 章「有機化合物の基礎 (1)」

有機化合物の種類は、まだ合成されたことがないものも含めれば無限にある。これらの有機化合物を特定するため、適切な名前を与える必要がある。有機化合物の名称は、炭化水素 hydrocarbon (炭素と水素のみからなる物質) の名称を元に決めることになっている。本章では炭化水素の命名法について学ぶ。

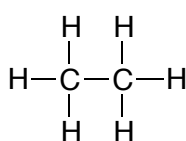
すべての炭素－炭素結合が単結合である炭化水素を飽和炭化水素 saturated hydrocarbon、またはアルカン alkane と呼ぶ。二重結合・三重結合を持つ炭化水素を不飽和炭化水素 unsaturated hydrocarbon と呼ぶ。

1. 有機化合物の表記法

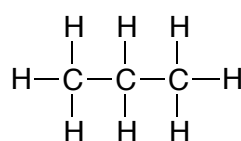
炭素原子の数が少ないものから順に、アルカンの構造を描いてみよう。炭素数が 1 ～ 3 個のアルカンは、それぞれ 1 種類のみ存在する (しばらくは、環状構造を持たないものを考える)。



メタン
methane

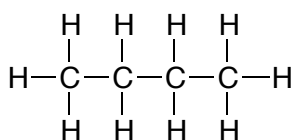


エタン
ethane

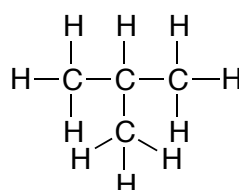


プロパン
propane

炭素数 4 のアルカンは、2 種類存在する。



ブタン
butane



イソブタン
isobutane

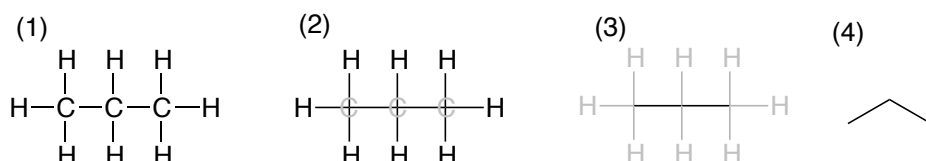
ブタンは 4 つの炭素原子が一行に並んでいる。このようなアルカン直鎖アルカン straight-chain alkane と呼ぶ。一方、イソブタンの炭素原子の並びは途中で枝分かれしている。このようなアルカン分岐アルカン branched alkane と呼ぶ。ブタンとイソブタンは異なる物質であり、物理的性質も化学反応性も異なっている。このように、構成原子の種類と数は同じだが、原子のつながり方が異なる物質のことを構造異性体 structural isomer と呼ぶ。炭素数 5 のアルカンには 3 種類、炭素数 6 だと 5 種類、炭素数 7 だと 9 種類の構造異性体が存在する。

炭素数が増えると、すべての原子を明示的に書くのは煩雑である。習慣的に用いられ

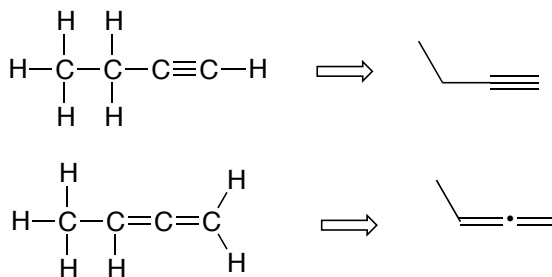
ている省略方法として、**簡略構造**と**骨格構造**がある。簡略構造は第1回ですでに説明しているの、ここでは骨格構造について説明しておく。

骨格構造は、以下の手順で作る。

- (1) すべての原子を明示した構造を書く。
- (2) 炭素原子の「C」の記号を消す。
- (3) 次に、炭素原子に結合している水素原子について、「炭素原子との結合線」と「H」の記号を消す。
- (4) どこに炭素原子があるか明示するために、骨格を折れ線で書いて、「折れ線の角」が炭素原子を表すものとする。



ただし、sp 炭素（三重結合を持つ炭素、または両側に二重結合を持つ炭素）は結合角を 180°で書きたいので、折り曲げずに書く。この場合、炭素原子の位置は、「三重結合が始まっている場所」で表す。また、両側に二重結合がある場合は、炭素原子の位置に点を書いて示すことがある。



2. 飽和炭化水素の命名法

炭素数が増えると構造異性体の数はどんどん増える。これらを区別するためには、分子構造から一意的に名前をつける方法が必要である。この方法は、IUPAC（国際純正・応用化学連合 International Union of Pure and Applied Chemistry）によって決められているため、IUPAC 命名法（IUPAC nomenclature）と呼ばれる。また、体系的命名法、系統的命名法と呼ばれることもある。

IUPAC 命名法は膨大な規則の集まりであるため、すべてを一度に学ぶことはできないが、基本的な規則は知っておこう。基本的なルールとして、環構造を持たないアルカンの命名法について説明する。

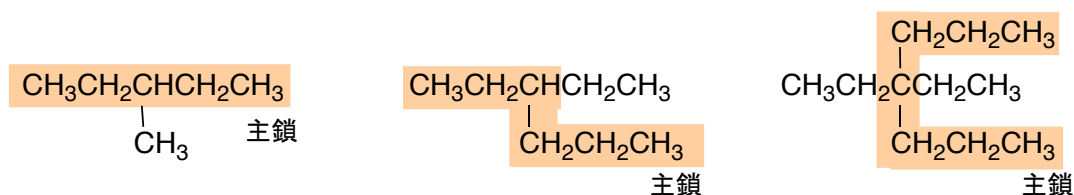
1. 直鎖アルカンの場合は、炭素数によって決められた名前と呼ぶ。C1～C10 までの直鎖アルカンの名称を次の表に示す。これらの名称は英語名とともに覚えておくこと

(注1)。

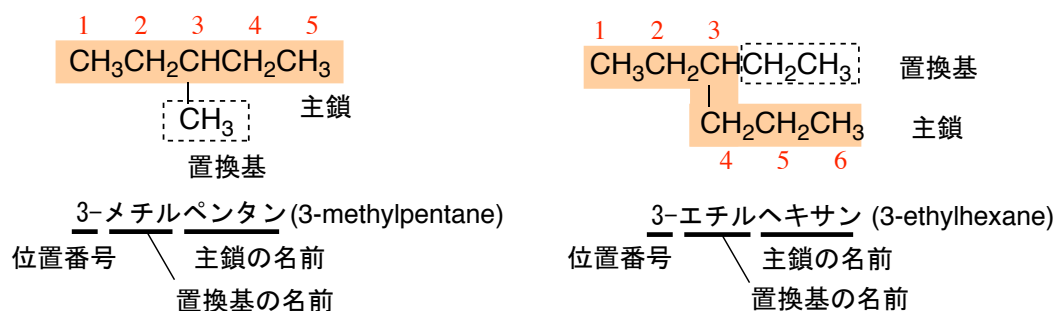
炭素数	組成式	名称
1	CH ₄	メタン methane
2	C ₂ H ₆	エタン ethane
3	C ₃ H ₈	プロパン propane
4	C ₄ H ₁₀	ブタン butane
5	C ₅ H ₁₂	ペンタン pentane
6	C ₆ H ₁₄	ヘキサン hexane
7	C ₇ H ₁₆	ヘプタン heptane
8	C ₈ H ₁₈	オクタン octane
9	C ₉ H ₂₀	ノナン nonane
10	C ₁₀ H ₂₂	デカン decane

注1：メタン、エタンは“th”であるのに対して、ブタン、ペンタン、ヘプタン、オクタンは“t”であることに注意。メタンを“*metane*”、ブタンを“*buthane*”と書くのはよくある間違いである。

2. 分岐アルカンの場合は、まず結合している炭素原子の最も長い並びを見つける。これを主鎖 parent chain または親炭化水素 parent hydrocarbon と呼ぶ。主鎖は、書かれた構造式上で直線状につながっているとは限らないので、注意深く調べること。



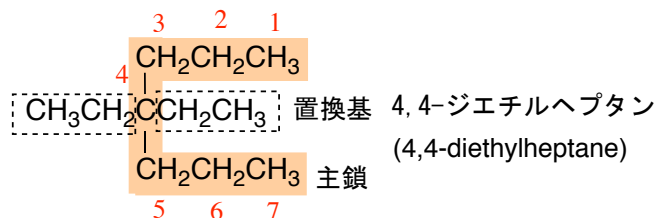
主鎖からはみ出した部分を置換基 substituent と呼ぶ。これは、親炭化水素の水素原子を「置き換えたもの」という意味である。分岐アルカンの名称を決めるためには、それぞれの置換基の名称に、結合している炭素の位置番号をつけて、主鎖の名称の前につなぐ。主鎖に位置番号をつけるとき、どちらから数えるかによって二通りのつけ方があるが、置換基の番号がなるべく小さくなるように番号をつける。



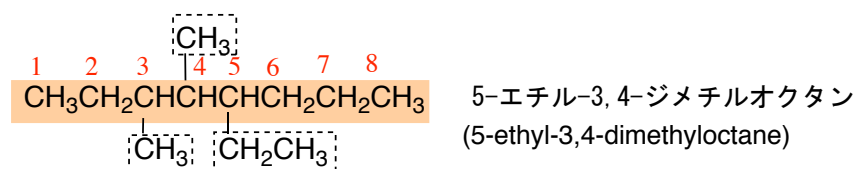
位置番号と置換基の間にはハイフンを置く。また、英語で書く時は、置換基と主鎖の名前はまとめて一語にする。

2つ以上の同じ置換基があるときには、倍数を表す語 (2: ジ (di), 3: トリ (tri), 4: テトラ (tetra), 5: ペンタ (penta), 6: ヘキサ (hexa), など) を置換基の前につける。位置番

号は置換基1つごとに1つずつ、コンマで区切って並べる。下の例では4位にエチル基が2つ結合しているが、「4-ジエチル」ではなく、「4,4-ジエチル」と書く。



2つ以上の異なる置換基があるときには、置換基をアルファベット順に並べて記述する。アルファベット順を決める時に、数を表す「ジ」「トリ」などは考慮せず、置換基名のみで比較する。また、置換基名と次の位置番号の間（下の例では「エチル」と「3」の間）にもハイフンを入れる。

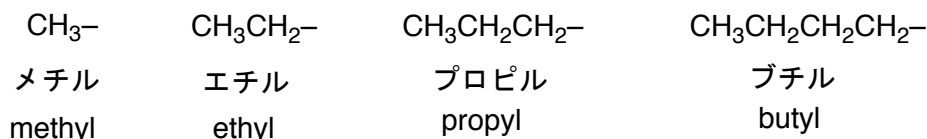


この他にも、主鎖の選び方が複数通りある場合など、複雑な規則が多数定められている。詳細を記憶する必要はないが、興味があればIUPACの命名法規則を参照のこと。

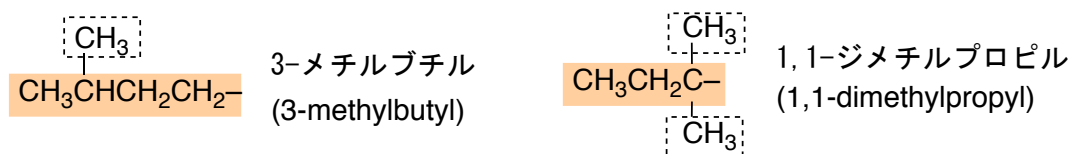
3. アルキル基の命名法

アルカンから水素原子を一つ除いたものをアルキル基 alkyl group と呼ぶ。アルキル基は、多くの有機化合物の部分構造となっている。分岐アルカンにおいて「置換基」とみなされるものは、すべてアルキル基である。

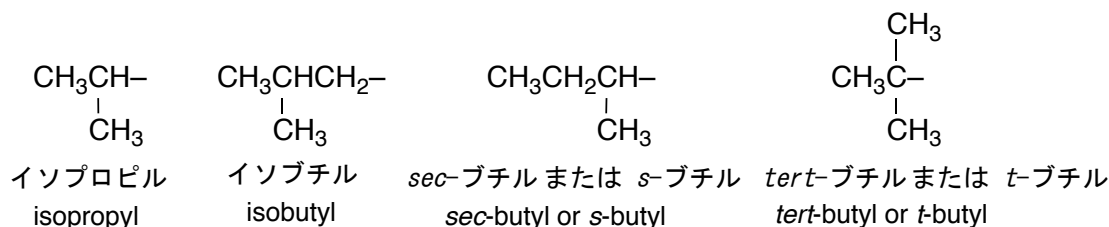
直鎖アルキル基の名称は、元のアルカンの名前の末尾の“ane”（アン）を“yl”（イル）に置き換えたものである。



分岐アルキル基の名称は、分岐アルカンと同じように定め、最後を“yl”とする。ただし、主鎖は原則として「結合点」（水素原子を除いた点）を含むものとし、結合点の炭素の位置番号を1とする（注2）。



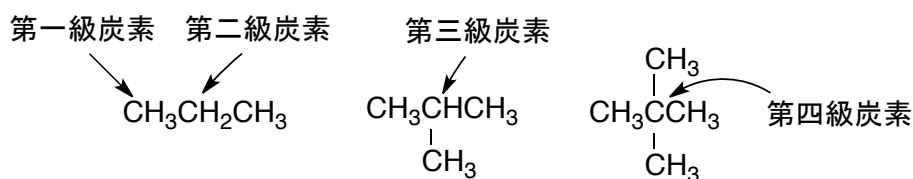
炭素数4以下の分岐アルキル基については、慣用名 **common name** の使用が認められている。これらの名称は覚えておくこと。特に、イソブチル基と *sec*-ブチル基は混同しやすい。*sec*-は secondary (セカンダリー)、*tert*- または *t*- は tertiary (ターシャリー) と読む。それぞれ「第二級の」「第三級の」という意味である。



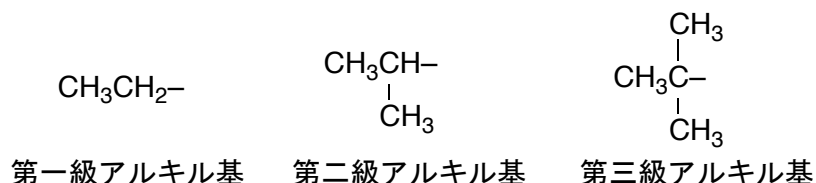
注2：これとは別に、水素原子を除く前のアルカンの名称をそのまま用いて、最後に「位置番号-yl」をつけてアルキル基の名称とする別法も認められている。たとえば、*s*-ブチル基は、本文中の規則によれば 1-methylpropyl だが、これを butan-2-yl (butane の最後の e は除く) と名付けることもできる。ただし、直鎖アルキル基の場合はこの別法は推奨されない。別法が用いられるのは、水素原子を除く前の化合物が特別な名称を持つ場合などに限られる。

4. 第一級・第二級・第三級炭素

前節の最後に出てきた「第○級」という概念について、もう少し説明する。炭素原子は4本の結合を作ることができるので、他の原子と結合できる数は最大4である。1個の炭素原子と結合している炭素原子を第一級炭素 primary carbon と呼ぶ。同じように、2個・3個・4個の炭素原子と結合している炭素原子をそれぞれ第二級炭素・第三級炭素・第四級炭素 secondary carbon, tertiary carbon, quaternary carbon と呼ぶ。「第」をつけずに「一級炭素」「二級炭素」などと呼ぶこともある。



アルキル基の場合は、結合点の炭素原子の種類によって、第一級アルキル基・第二級アルキル基・第三級アルキル基と分類する。結合点の炭素原子は置換基を3つしか持たないため、「第四級アルキル基」は存在しない。また、メチル基はいわば「第0級」に相当するが、そのような呼び方はせず、単にメチル基と呼ぶ(注3)。

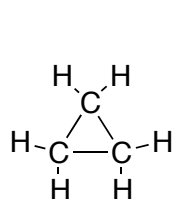


日本語では上記のように「第○級」と数字を使って表記するが、英語ではそれぞれ別の表現が与えられており、数字で表すことはない。したがって、「級の数」または「級数」というのは、正式な有機化学の用語ではない。「級数」というのは便利な言葉なのでつい使いたくなるが、この言葉を使わずに議論ができるように、習慣づけておく必要がある。そうしなければ、将来英語で論文を書く時に困ることになる。

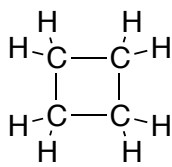
注3：IUPACの勧告では、メチル基は「第一級アルキル基」に分類する、と定められている。しかし、多くの有機化学の教科書では、メチル基とそれ以外の第一級アルキル基を区別して扱っていることが多い。経験的に、メチル基とそれ以外の第一級アルキル基とは反応性が多少異なる場合が多いためである。本講義でも、この立場をとる。なお、高校化学の教科書では、メタノールを「一級アルコール」に分類しているが、これはIUPACの定義と一致している。

5. シクロアルカンの命名法

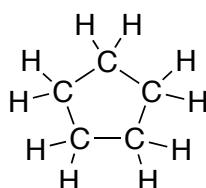
飽和炭化水素で、炭素原子が環状につながっているものをシクロアルカン *cycloalkane* と呼ぶ。最も基本的なシクロアルkanは、環状につながったすべての炭素原子に水素原子が2つずつ結合したものである。これらのシクロアルkanは、同じ炭素数のアルkanの名称の前に「シクロ」をつけて命名する。



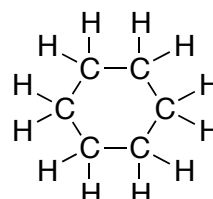
シクロプロパン
cyclopropane



シクロブタン
cyclobutane

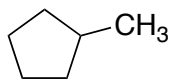


シクロペンタン
cyclopentane

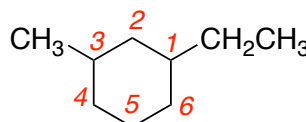


シクロヘキサン
cyclohexane

枝分かれのあるシクロアルkanは、枝分かれのないシクロアルkanに置換基がついたものとして命名する。置換基が1つなら、位置番号はつけない。2つ以上の置換基がある場合は、優先度の最も高い置換基の位置番号を1として、それ以外の置換基の位置番号がなるべく小さくなるように番号をつける。



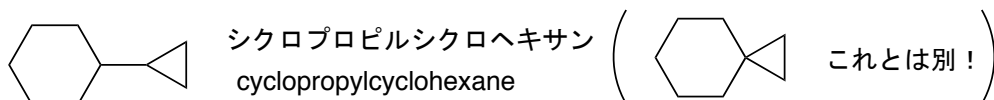
メチルシクロペンタン
methylcyclopentane



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

また、シクロアルkanから水素原子を一つ除いたものは、シクロアルキル基 *cycloalkyl* として命名に使うことができる。たとえば、下の化合物は、シクロヘキサンの水素原子のうち一つを「シクロプロピル基」で置き換えたものであるから、「シクロプロピルシクロヘキサン」という名前になる。右に示した化合物とは別なので注意（注

4)。



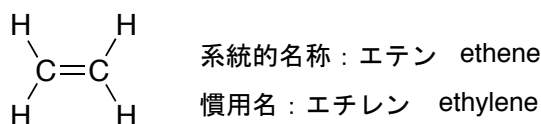
分子に含まれる環の大きさを、環を構成する原子の数を使って三員環、四員環、…などと呼ぶ(注5)。英語では three-membered ring, four-membered ring, ... となる。日本語の「員」という漢字は、英語の“member”の直訳であり、環を構成する「メンバーの数」という意味である。

注4：このように、2つ以上の環が炭素原子を共有している時は、シクロアルカンの命名法をそのまま適用することはできない。これらについては von Baeyer 命名法という特別な規則がある。

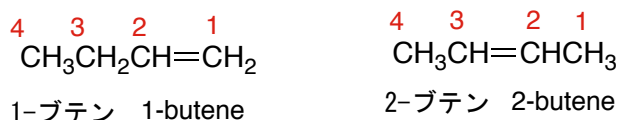
注5：三員環、四員環などの数字は、漢数字で書くのが正しく、算用数字で書くのは行儀が悪い。しかし実際には、プロの研究者が書いた公式の文書でも算用数字で書かれているものを目にすることがある。また、炭素数が10を越える場合は、算用数字で書いた方がかえって見やすい場合もある。

7. アルケンの命名法

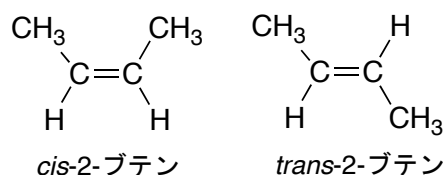
炭素-炭素二重結合を1つ持つ炭化水素をアルケン alkene と呼ぶ。アルケンの名称は、同じ骨格を持つアルカンの名称の末尾の“ane”(アン)を“ene”(エン)に置き換えたものである。



二重結合の位置を特定するのに必要な場合は、位置番号をつける。このとき、二重結合の位置番号がなるべく小さくなるようにする。



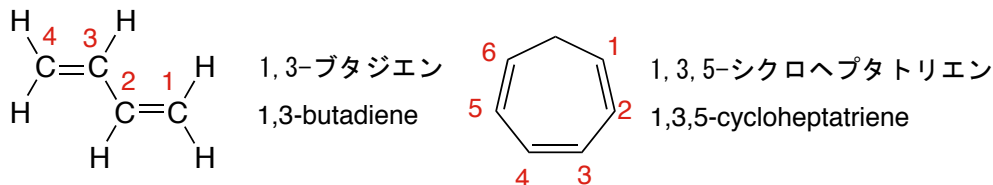
2-ブテンにはシス/トランスの異性体がある。これらの異性体が存在するのは、二重結合が(通常の条件では)回転できないためである。このように、原子の結合する順序は同じだが、原子の立体的な位置が異なる異性体のことを立体異性体 stereoisomer と呼ぶ(注6)。アルケンの立体異性体の命名法については、あとで学ぶことにする。



注6：立体異性体をさらに詳しく分類した「幾何異性体」「光学異性体」という名称もあるが、

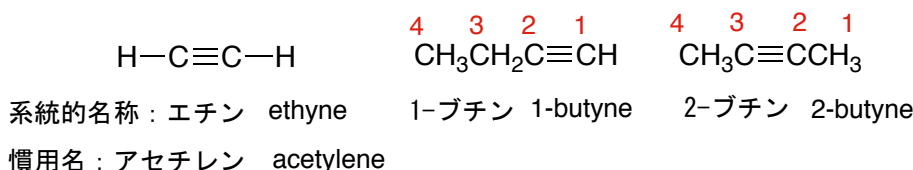
IUPAC ではこれらの名称の使用を推奨していない。

二重結合が2つ以上ある場合は、アルカン名称の末尾の“ne”(ン)を除いて、“diene”(ジエン)、“triene”(トリエン)、など「数を表す接頭辞+ene」をつける。二重結合の位置を特定するため、位置番号もつける。



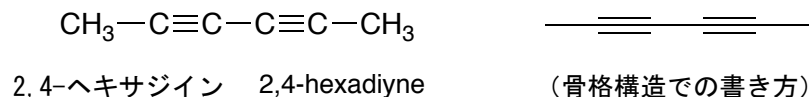
8. アルキンの命名法

炭素-炭素三重結合を1つ持つ炭化水素をアルキン alkyne と呼ぶ。アルキンの名称は、同じ骨格を持つアルカンの名称の末尾の“ane”(アン)を“yne”(イン)に置き換えたものである。三重結合の位置を特定する必要がある場合は、位置番号をつける。

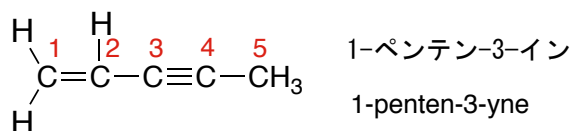


三重結合が2つ以上ある場合は、アルカン名称の末尾の“ne”(ン)を除いて、“diyne”(ジイン)、“triyne”(トリイン)、など「数を表す接頭辞+yne」をつける。二重結合の位置を特定するため、位置番号もつける。

三重結合を含む化合物を「骨格構造」で書く時には、炭素の位置で折り曲げずに、直線上に書くようにする。これは、sp 炭素が直線構造を持つためである。三重結合に隣接する単結合を丁寧に書かないと、炭素数がわからなくなるので、注意すること。



二重結合と三重結合が共存している化合物の場合は、二重結合の「エン」を先につけたあとに三重結合の「イン」をつける。



9. 今回のキーワード

- ・ 炭化水素、飽和炭化水素、不飽和炭化水素、アルカン
- ・ 直鎖アルカン、分岐アルカン
- ・ 直鎖アルカンの名称 (C10 まで)
- ・ 分岐アルカンの命名法
- ・ アルキル基
- ・ 第一級炭素、第二級炭素、第三級炭素、第四級炭素
- ・ 第一級アルキル基、第二級アルキル基、第三級アルキル基
- ・ シクロアルカンの命名法
- ・ アルケンの命名法
- ・ アルキンの命名法

【教科書の問題 (第 3 章)】

11, 12, 17, 58, 66