

有機化合物の基礎 (1)

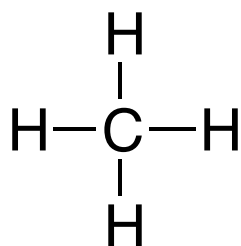
炭化水素

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)

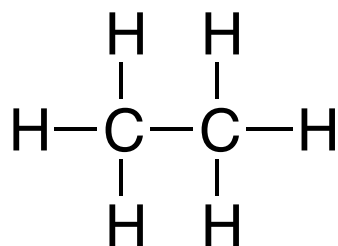
飽和炭化水素：単結合のみから成る炭化水素

「アルカン」 alkane と呼ぶ



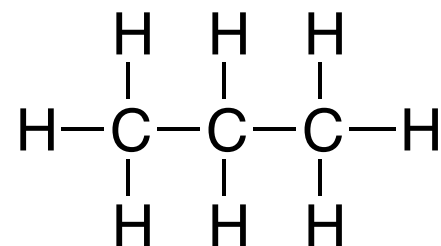
メタン

methane



エタン

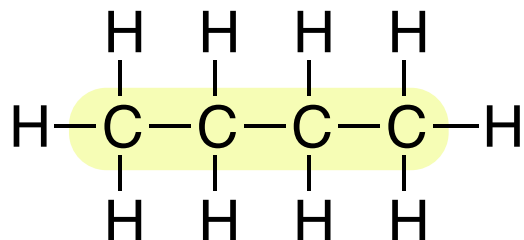
ethane



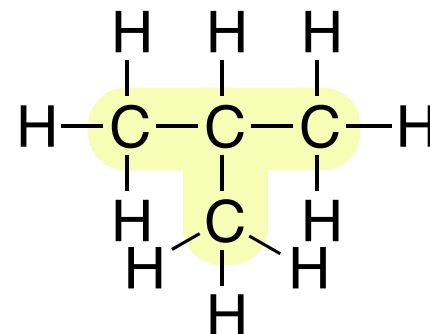
プロパン

propane

炭素数 4



ブタン
butane



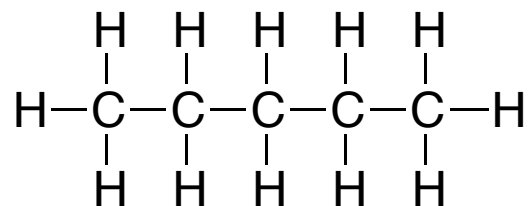
イソブタン
isobutane

直鎖アルカン
straight-chain alkane

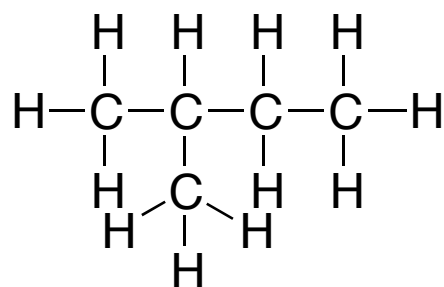
分岐アルカン
branched alkane

構造異性体
structural isomer

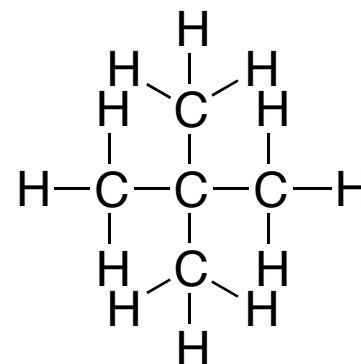
炭素数 5



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！

簡略構造

CH_4
メタン

CH_3CH_3
エタン

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$
プロパン

分岐がある場合

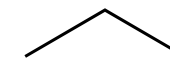
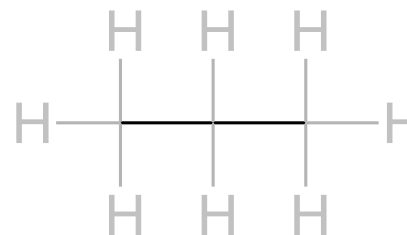
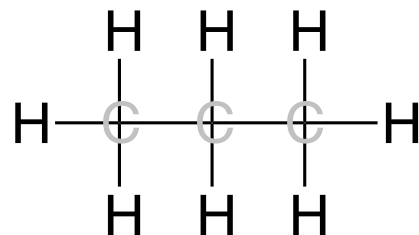
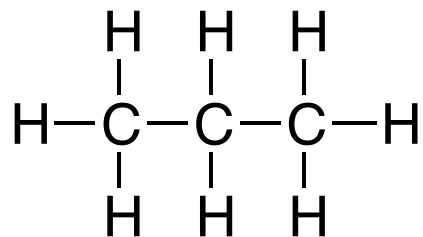
イソブタン $\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$ または $\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_3$
 $\begin{array}{c} | \\ \text{CH}_3 \end{array}$

ネオペンタン $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_3$ または $\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_3$
 $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3 \end{array}$

くり返しがある場合

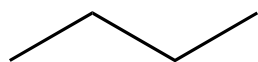
ブタン $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ または $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$
ペンタン $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ または $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$
ヘキサン $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ または $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$

骨格構造

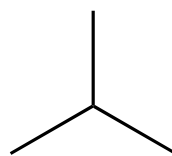


プロパン

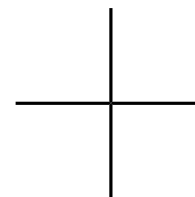
- ・炭素原子の“C”記号を省略する。
- ・炭素-水素結合と、水素原子の“H”記号を省略する。
- ・直鎖状に炭素原子がつながっているときは、炭素原子の位置を「折れ線の角」で表記する。



ブタン



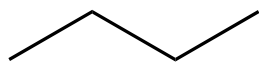
イソブタン



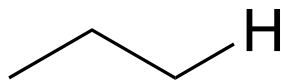
ネオペンタン

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

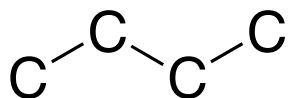


炭素原子 3 つ

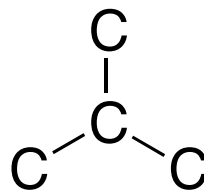
← 混同しない

”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

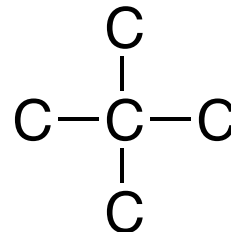
誤り :



ブタン

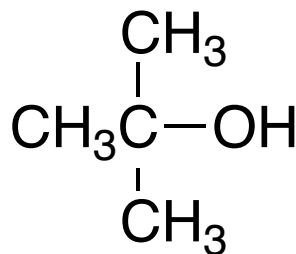


イソブタン

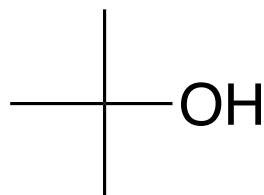


ネオペンタン

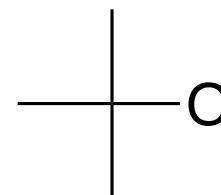
「炭素以外の原子」に結合した水素原子は省略できない



(正)



(誤)



炭化水素の命名法

直鎖アルカン

分岐アルカン

アルキル基

アルカンの命名法

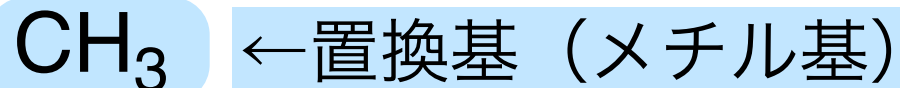
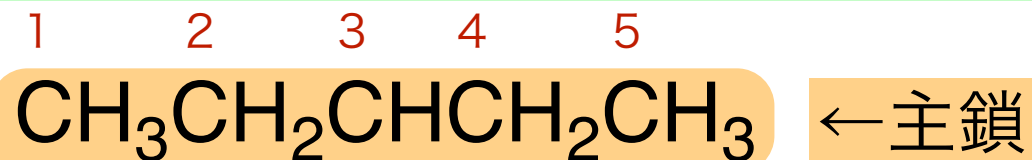
分子の構造から一定の規則によって名称をつける

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



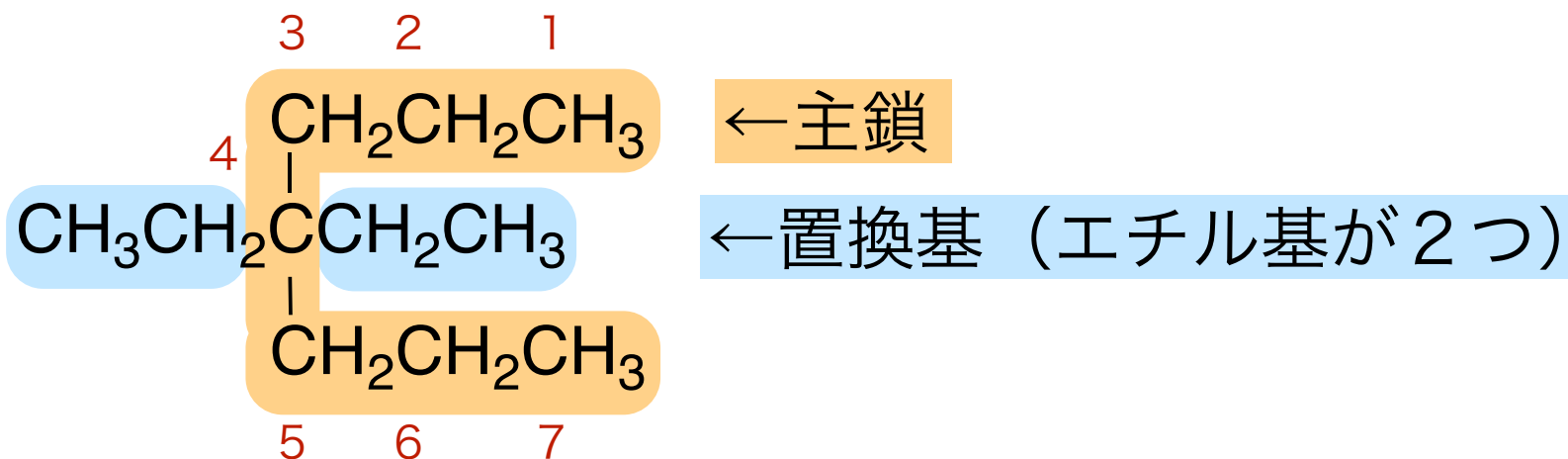
- (1) 結合している炭素原子の最も長い並びを「主鎖」とする
- (2) 主鎖に結合している「置換基」の名称と結合位置を特定する
- (3) 主鎖に「位置番号」をつける
(置換基の番号がなるべく小さくなるように)
- (4) 「位置番号・ハイフン・置換基名・主鎖名」の順につなぐ

3-メチルペンタン

3-methylpentane

分岐アルカンの命名法 (つづき)

- 同じ置換基が2つ以上ある場合



4,4-ジエチルヘプタン

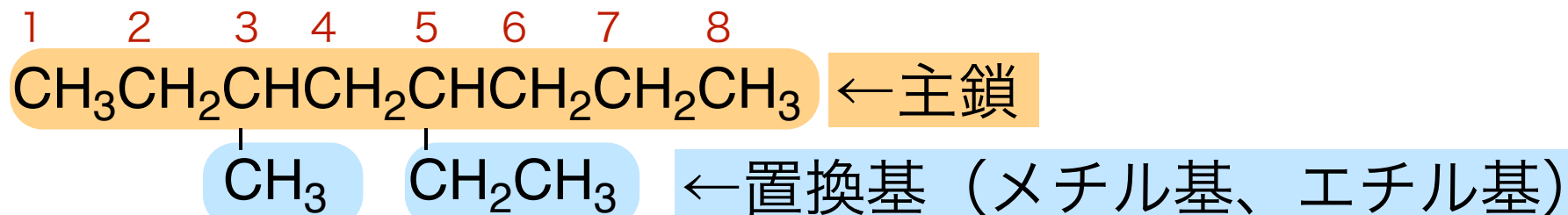
↑ 数を表す接頭語

コンマ

(2:ジ、3:トリ、4:テトラ、5:ペンタ、6:ヘキサ、…)

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)

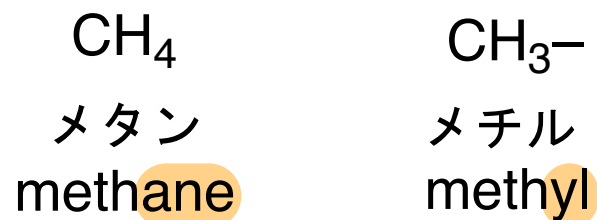
置換基はアルファベット順に並べる

ハイフン

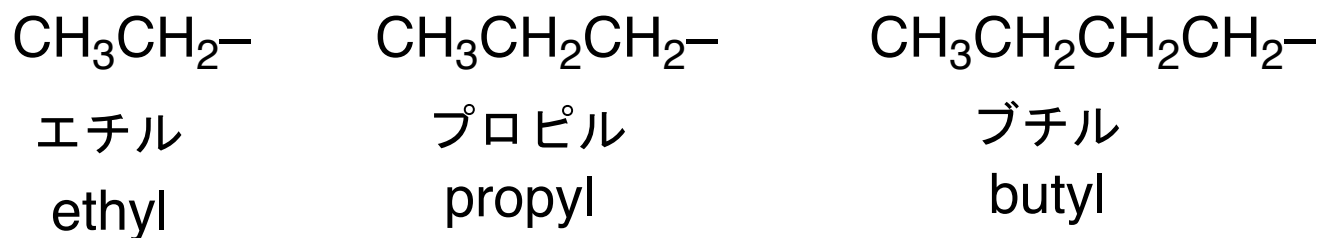
【練習問題】 C_6H_{14} のすべての構造異性体（5種類）を書き、系統的名称をつけなさい。

アルキル基

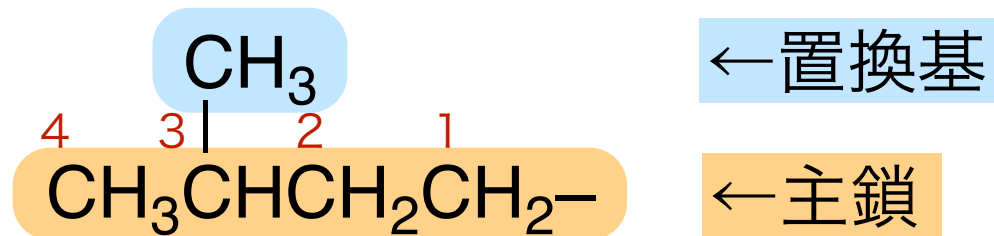
アルキル基＝アルカンから水素原子を1つ除いたもの
多くの有機化合物の部分構造となっている



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)



分岐アルキル基の系統的名称

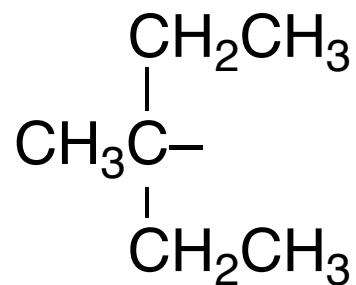
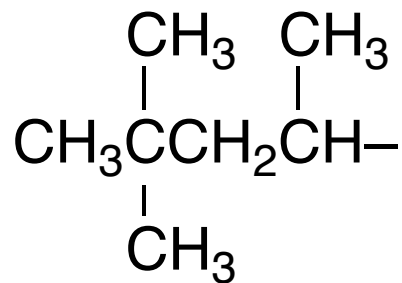


「結合点」 (このアルキル基が他の原子と結合する点)

- 主鎖は「結合点」から始まる最も長い炭素鎖
- 「結合点」の位置番号を1とする
- 置換基名を (アルカンの時と同様に) 位置番号と一緒に前に置く

3-メチルブチル 3-methylbutyl

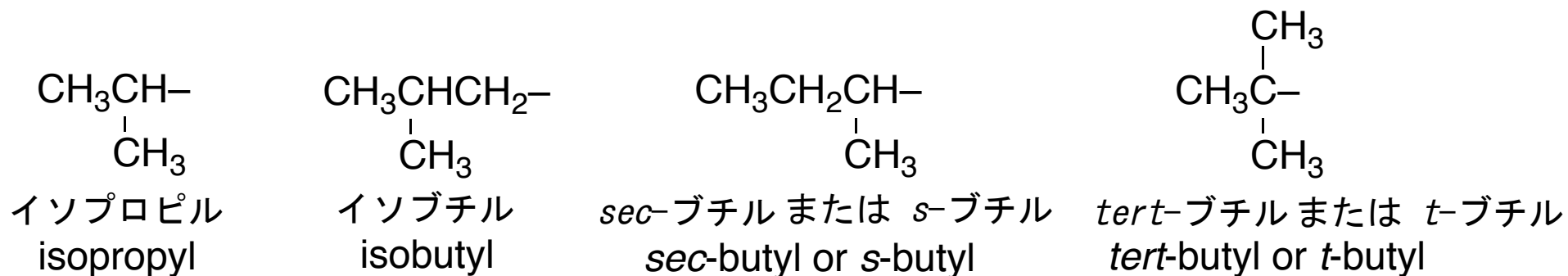
【練習問題】 次のアルキル基の系統的名称を答えなさい。



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



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

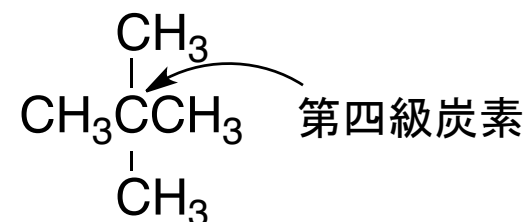
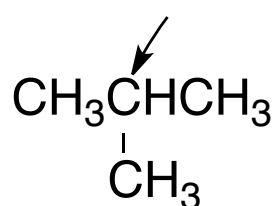
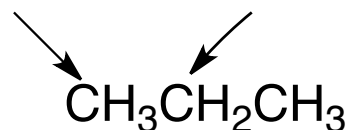
2・3・4 個の炭素原子に結合している炭素原子：

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

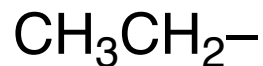
第三級炭素



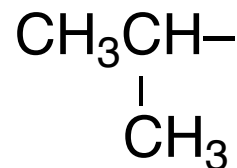
注意：「級数」「級の数」という言葉を使わないこと

(英語では対応する概念が存在しないので、論文を書くときに困る)

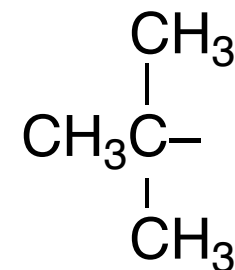
アルキル基の分類



第一級アルキル基



第二級アルキル基

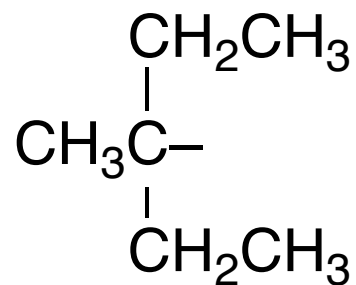
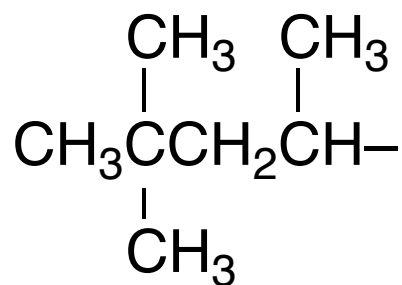


第三級アルキル基

- 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

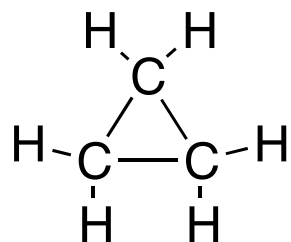
(IUPAC の勧告では「メチル基は第一級に分類」となっているが、有機化学の世界ではメチル基を特別扱いすることが多い)

【練習問題】 次のアルキル基は第一級、第二級、第三級のどれに分類されるか。

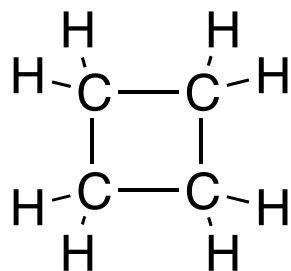


シクロアルカン

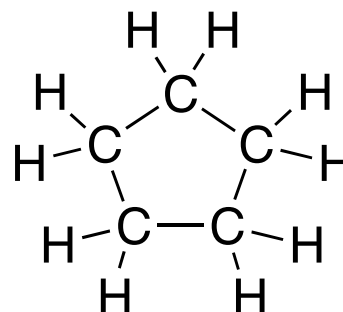
シクロアルカン



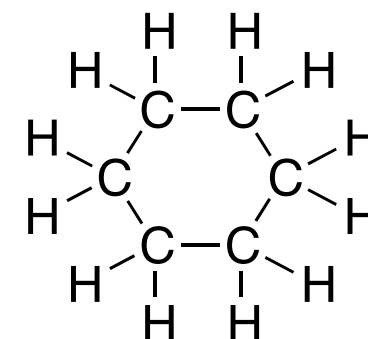
シクロプロパン
cyclopropane



シクロブタン
cyclobutane

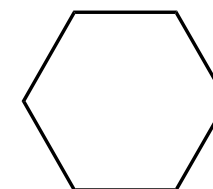
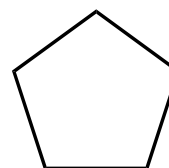
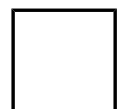


シクロペンタン
cyclopentane

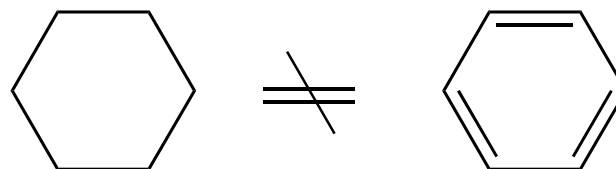


シクロヘキサン
cyclohexane

骨格構造で書くと：

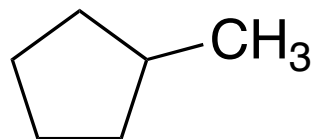


注意：シクロヘキサンとベンゼンは違う！

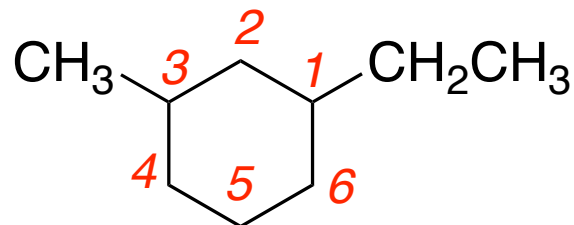


シクロアルカンの命名法

置換シクロヘキサンの命名法



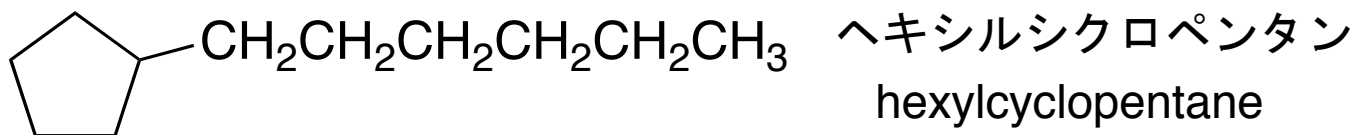
メチルシクロペンタン
methylcyclopentane



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）

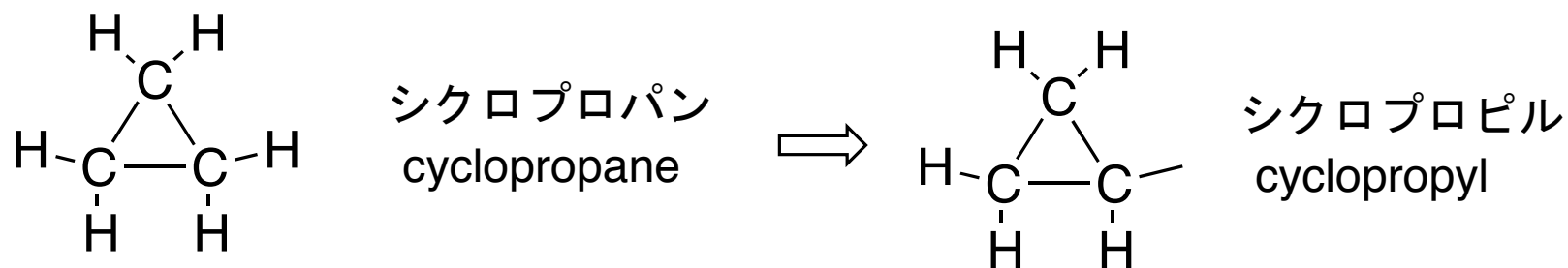
長い置換基があっても、シクロアルカンの方が「主鎖」となる



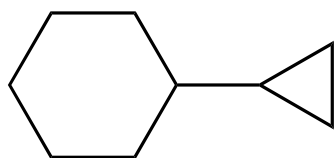
（「1-シクロペンチルヘキサン」にはならない）

シクロアルカンの命名法

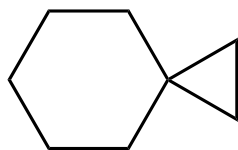
シクロアルカンを「置換基」として命名するときは
シクロアルカン名の最後の -ane を -yl に変える



例：



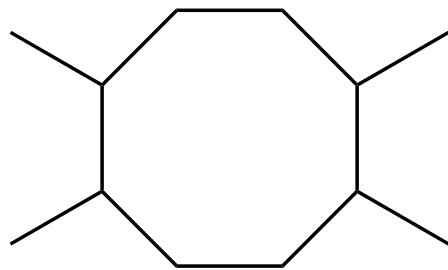
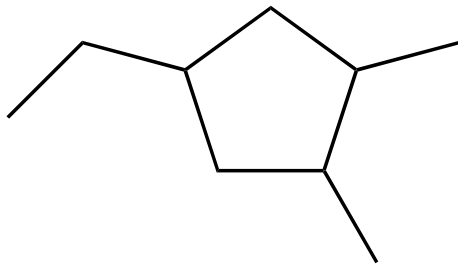
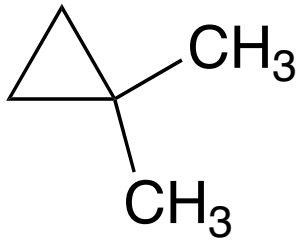
シクロプロピルシクロヘキサン
cyclopropylcyclohexane



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答えなさい。



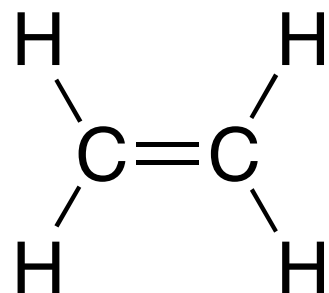
不飽和炭化水素の命名法

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：炭素－炭素二重結合を持つ化合物



系統的名称：エテン (ethene)

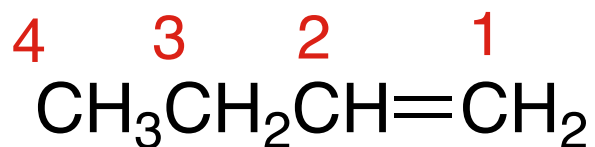
慣用名：エチレン (ethylene)

系統的名称の作り方：

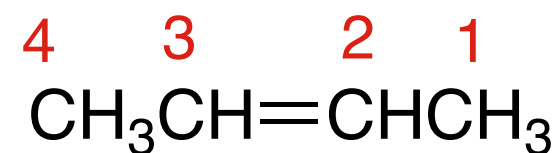
同じ炭素骨格を持つアルカンの名称の末尾の
“ane” (アン) を “ene” (エン) に変える

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

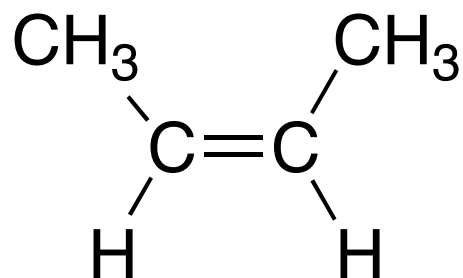


1-ブテン 1-butene

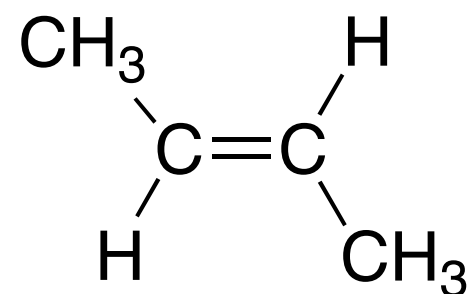


2-ブテン 2-butene

※ 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



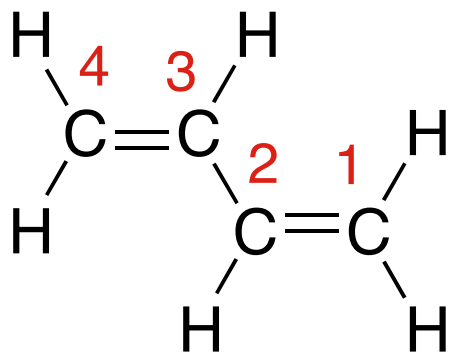
trans-2-ブテン

二重結合が2個以上ある場合

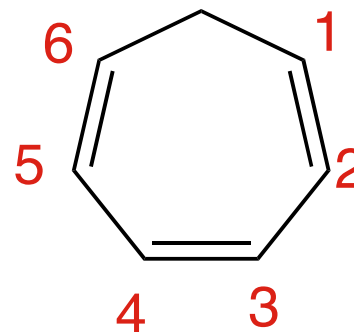
アルカンの名称の末尾の“ne”（ン）をとって

- “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



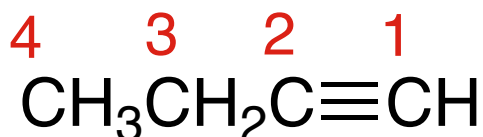
系統的名称：エチン (ethyne)

慣用名：アセチレン (acetylene)

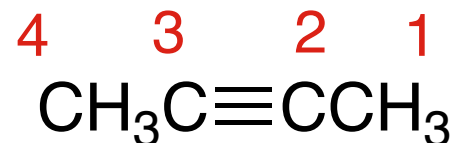
系統的名称の作り方：

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

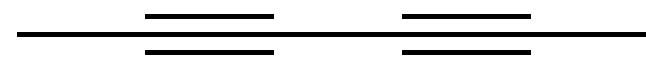
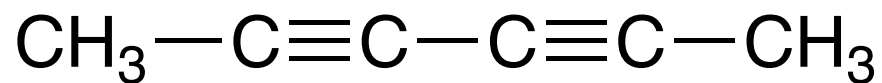


1-ブチン 1-butyne



2-ブチン 2-butyne

アルキンを骨格構造で書く場合

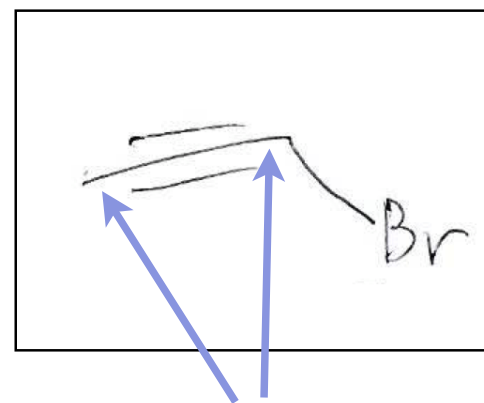
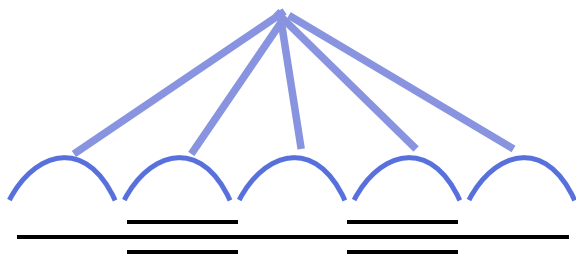


2,4-ヘキサジイン 2,4-hexadiyne

(骨格構造での書き方)

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
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

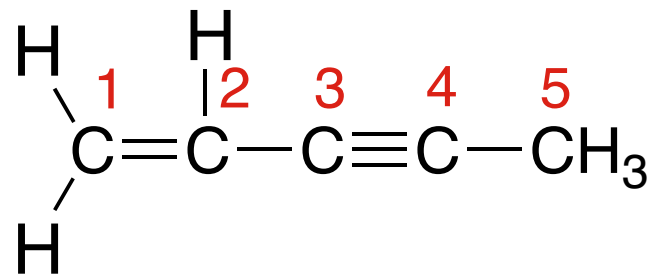
こういう雑な書き方はダメ



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

二重結合（エン）が先、三重結合（イン）が後



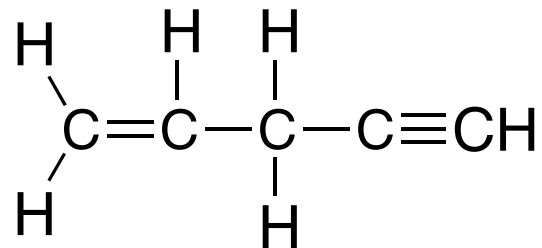
1-ペンテン-3-イン

1-penten-3-yne



ここは“e”を省く

※ 番号を決める際に二重結合は三重結合に優先する



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答えなさい。立体異性体については考慮しなくてよい。

