Naming of Chemical Compounds in a Nutshell

2021. 2. 4

이효원 chem4cbu@hitel.net

우리말 원소 및 화합물 명명법

대한화학회 화합물 명명법(www.kcsnet.or.kr) 준용

화학 술어와 화합물 명명법 통일의 기본 원칙

- 1. 외래어 표기는 원칙적으로 '외래어 표기법'을 따르되, 초·중등 교육과 고등 교육 및 산업계의 원만한 연계를 위하여 대한화학회에서 새로 정한 화학 술어와 명명법 통일의 원칙을 최대한 존중한다. 그러나 단순한 외래어 표기 원칙만으로는 화합물의 이름들이 서로 구별이 되지 않는 경우도 생기게 되고, 국제적으로 통용되는 이름과 너무 동떨어지게 되는 문제가 발생하기 때문에 화합물의 이름을 위해서는 어쩔수 없이 대한화학회에서 확장한 '외래어 표기법'을 인정한다.
- 2. 다른 언어에서 사용하는 자음과 모음을 모두 우리글로 정확하게 표기할 수는 없지만, 화학 술어와 화합물 이름도 궁극적으로는 우리말에 동화되어 우리말과 글의 발전에 기여할 수 있도록 제정되어야 한다. 따라서 화학 술어와 화합물 이름을 정하는 원칙은 우리말과 글의 관행과 크게 어긋나지 않아야 하며, 일반적으로 사용하지 않는 기호는 쓸 수 없으며, 로마자 표기를 함께 적는 것도 최대한 줄여야 한다.
- 대한화학회에서 당분간 혼용을 허용하기로 한 경우에도 초·중등 교육에서의 혼란을 최소화하기 위하여 일반적으로 가장 널리 쓰일 수 있는 것만을 제시하기로 한다.
- 4. 이미 우리말로 정착된 원소의 이름은 그대로 사용하고, 그렇지 않은 경우에는 IUPAC의 이름을 사용한다.
- 5. 화합물의 구조적 특성을 충실하게 나타내려는 IUPAC 명명법의 원칙 (<mark>영어 공식어</mark>)을 존중하되, 수식어 가 앞에 오는 우리말 조어 원칙에 따라 염의 경우에 전기적 음성 성분의 이름을 앞에 두는 우리말 명명 원칙은 그대로 사용한다. 또한 유기 화합물과 무기 화합물 이름의 일관성을 유지하기 위하여 원칙적으로 IUPAC 명명법의 띄어쓰기를 따르기로 하되, '~산'의 경우에는 앞의 단어에 붙여서 표기한다.

티올 →싸이올, 카르복실 → 카복실, 할로겐 → 할로젠, 글루코오스 → 글루코스, 효소명 -아제 → -에이스

1	[표	<u> </u>	크	유	Ŧ						2
Н									-	10.000	33						Н
수소 hydrogen							Period	ic Tabl	e of the	Eleme	nts						헬 heli
1.008	_											121	225	72	1.0		0000
3	4		표기법:	번호								13 5	14 6	15	16	17	4.0
Ľi	Be		1000 1	호								В	č	Ń	ŏ	É	Ń
리튬	베릴륨			# (국문)								붕소	탄소	질소	산소	플루오린	니
lithium	beryllium			병(영문)								boron	carbon	nitrogen	oxygen	fluorine	ne
6.94 .938, 6.997]	9.0122			원자량 원자량								10.81	12.011	14.007 [14.006, 14.008]	15.999	18,998	20
11	12		11.5	2/10								13	14	15	16	17	1
Na	Mg											Al	Si	P	S	CI	1
소듐	마그네슘											알루미늄	규소	인	황	염소	01.
sodium	magnesium 24.305											aluminium	silicon 28.085	phosphorus	sulfur 32.06	chlorine 35.45	arg
22.990	24.305 [24.304, 24.307]	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	26.982	28.085 [28.084, 28.086]	30.974		35.45 [35.446, 35.457]	39.
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	3
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	K
포타슘	칼슘	스칸듐	타이타늄	바나듐	크로뮴	망가니즈	철	코발트	니켈	구리	아연	갈륨	저마늄	비소	설레늄	브로민	∃ :
potassium	calcium	scandium	titanium	vanadium	chromium	manganese	iron	cobalt	nickel	copper	zinc	gallium	germanium	arsenic	selenium	bromine 79.904	kryp
39.098	40.078(4)	44.956	47.867	50.942	51.996	54.938	55.845(2)	58.933	58.693	63.546(3)	65.38(2)	69.723	72.630(8)	74.922	78.971(8)	[79.901, 79.907]	
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	5
Rb	Sr	Υ	Zr	Nb	Мо	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	X
루비듐 rubidium	스트론튬 strontium	이트륨	지르코늄	나이오븀 niobium	몰리브데넘	테크네튬	루테늄 ruthenium	로듐 rhodium	팔라듐	은 silver	카드뮴	인듐 indium	주석 tin	안티모니	텔루튬 tellurium	아이오딘 iodine	제
50000000	2019422	yttrium	zirconium	2001250	molybdenum	technetium	2254500	22320	palladium	5-5-5-5	cadmium		20 A 20 20 A	antimony	ACES ACCOUNTS	5-50-565	xen
85.468	87.62	88.906	91.224(2)	92.906	95.95	75	101.07(2)	102.91	106.42	107.87	112.41	114.82	118.71	121.76	127.60(3)	126.90	131
55	56	57-71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82 DI-	83	84	85	8
Cs	Ba	란타넘족	Hf	Ta 타탈램	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	TI	Pb	Bi 비스무트	Po	At 아스타틴	R
세슘 caesium	바륨 barium	lanthanoids	하프늄 hafnium	tantalum	당스텐 tungsten	레늄 rhenium	오스뮴 osmium	이리듐 iridium	백금 platinum	금 gold	수은 mercury	탈륨 thallium	납 lead	미스부트 bismuth	폴로늄 polonium	astatine	라 rac
CACHARA	Beensteen		500000000000	97 ST 45 H C 4	J 56 1 2 1 1 2	7750000		F 10 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	100000000	10000000	0.55-6.550	204.38		5-41000000000000000000000000000000000000	poternant	dotating	
132.91	137.33 88	89-103	178.49(2) 104	180.95 105	183.84 106	186.21 107	190.23(3) 108	192.22	195.08 110	196.97 111	200.59	[204.38, 204.39]	207.2 114	208.98	116	117	11
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	FI	Mc	Lv	Ts	o
프랑슘	라듐	악티늄족 actinoids	러더포듐	두브늄	시보귬	보륨	하슘	마이트너륨	다름슈타튬	뢴트게늄	코페르니슘	니호늄	플레로븀	모스코븀	리버모륨	테네신	오가
francium	radium		rutherfordium	dubnium	seaborgium	bohrium	hassium	meitnerium	darmstadtium	roentgenium	copernicium	nihonium	flerovium	moscovium	livermorium	tennessine	ogane
	1	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Но	Er	Tm	Yb	Lu	
		란타넘	세륨	프라세오디뮴	네오디뮴	프로메륨	사마륨	유로퓸	가톨리늄	터븀	디스프로슘	嘉居 holmium	어븀	돌룡	이터븀	루테튬	
		lanthanum	cerium	praseodymium	neodymium	promethium	samarium	europium	gadolinium	terbium	dysprosium	holmium	erbium	thulium	ytterbium	lutetium	
	,	138.91	140.12	140.91	144.24		150.36(2)	151.96	157.25(3)	158.93	162.50	164.93	167.26	168.93	173.05	174.97	I
		89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	
		악티늄	토륨	프로트악티늄	우라늄	넵투늄	플루토늄	아메리슘	퀴륨	버클륨	캘리포늄	아인슈타이늄	페르뮴	멘델레븀	노벨륨	로렌슘	
		actinium	thorium	protactinium	uranium	neptunium	plutonium	americium	curium	berkelium	californium	einsteinium	fermlum	mendelevium	nobelium	lawrencium	
			232.04	231.04	238.03												

참조) 표준 원자량은 2011년 IUPAC에서 결정한 새로운 형식을 따른 것으로 [] 안에 표시된 숫자는 2 종류 이상의 안정한 동위원소가 존재하는 경우에 지각 시료에서 발견되는 자연 존재비의 분포를 고려한 표준 원자량의 범위를 나타낸 것임. 자세한 내용은 *Pure Appl. Chem.* 83, 359-396(2011); doi:10.1351/PAC-REP-10-09-14을 참조하기 바람.

화합물 명명법의 종류

화합물의 명명법은 관례로 사용한 **통상명**(common name), **체계명** (IUPAC 명명법, CAS 명명법, Beilstein 명명법), **ISO** (the International Organization for Standardization), **INN** 명명법등이 존재함.

통상명 (common name, trivial name)

화학 물질에 관한 통상적, 역사적 혹은 편리한 이름이며 흔히 화학 물질이 유래된 원천으로부터 명명한다.

통상명은 체계적이 아니기 때문에 현대 공식적 명명법에서는 사용되지 않는다. 그러나 IUPAC에서 통상명을 일부 인정하여 사용하고 있음.

보기: 원소명, 콜레스테로이드 (cholesteroids), 아세트산 (acetic acid, PIN), 폼산 (formic

acid, PIN) 등



cubane



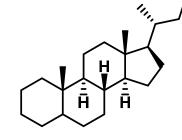
basketane



prismane



fenestrane Latin fenestra(window)



cholestane

통상명(common name)과 체계명(systemic name) 표기

화학명은 통상명 대신 체계명 사용을 권장한다.

보기:
초산 (醋酸) →아세트산 (에탄산)
개미산 → 폼산 (메탄산)
안식향산(일본식 표기) → 벤조산 포도당 → 글루코스 젖당 → 락토스

산 이름: 일본식 표기를 개정함

말린산(일본식 표기) malic acid →말산 퓨마린산(일본식 표기(fumaric acid) → 퓨마르산 글루타민산 (일본식 표기)(glutamic acid) → 글루탐산

CAS 명명법

IUPAC 명명법과 유사한 명명법으로 미국 화학회에 소속된 화학 요약 사무국 (Chemical Abstracts Service, CAS)에서 개발한 화학 요약 색인 (Chemical Abstracts Index, CA 색인)명명법이 있다. 이 CAS 명명법은 미국이 IUPAC과 병행하여 개발하였지만 대부분 내용이 IUPAC 명명법을 기초로하여 IUPAC 명명법과 일치한다. 특이한 점은 CA 색인에서는 한 화합물에 하나만의 고유한 등록번호 (registry number; RN)와 이름을 부여하여 명명법에서 파생할 수 있는 모호성을 피함으로 법적으로 사용하는 데 유용성을 부여하고 있다. 독일에서는 CAS와 같이 IUPAC 명명법을 기초로 한 Beilstein 명명법을 사용하고 있다.

IUPAC의 다양한 종류의 명명법 중에서 특히 기와 작용기 부류를 합쳐서 형성된 이름으로 구성된 치환명명법이 가장 중요하다. IUPAC에서는 앞으로 점차 작용기 부류 이름을 축소하는 방향으로 명명법을 개선할 것을 목표로 하고 있다. CAS 명명법의 장점으로 한 화합물에 한 개만의 명명법을 부여하기 때문에 국가 간의 화합물의 분쟁 및 법적인 문제가 발생한 경우 이러한 명명법에 의한 문제를 해결할 수가 있다. 이와 관련하여 IUPAC에서도 한 화합물에 관하여 가능한 여러가지의 이름 중에 우선권을 가지는 하나만의 이름인 PIN (Preferred IUPAC Name)을 개발하여 새로운 규칙을 부여하고 있다.

보기: 다이에틸 에터 (diethyl ether, PIN(우선 IUPAC 이름) 치환 명명법은 에톡시에테인 ethoxyethane, CAS 이름은 1,1'옥시비스(에테인) (1,1'-oxybisethane))

명명법의 사용

1. 자료 정보용 (data information): systematic

색인 (indexing)과 검색 (retrieving) CAS names(1:1 구조식:이름), IUPAC names (1:n 구조식: 이름)

2. 의사 소통용 (communication): systematic, semisystematic, nonsystematic

구두(oral)와 문서 (writing) IUPAC, CAS, 통상명 (보기: 천연물)

3. 상업용: 의약품, 농업용 화학물질 semi-systematic ISO, INN

IUPAC 무기 화합물의 명명법

화학식(Formula)의 체계

화학식:

- 1. 분자를 구성하는 원소들의 조성을 가장 간단 명료하게 표현.
- 2. 원소들의 화학결합에 관한 정보를 표시.
- 3. 화학 반응식에의 사용이 원칙이고 특별한 경우가 아니면 문장에서 사용하지 않음.

화학식 구성하기

- 1. 구성 원소 기호와 성분비를 결정.
- 2. 구성 성분을 **전기적 양성과 음성 부분** 구분함. 이산화 탄소 (이산화탄소 X)
- 3. 구조, 산화 상태, 전하 표시 기호 등을 붙임.

화학식의 종류

- 1. 실험식: 분자의 화학량론적 조성을 가장 간단하게 표시.
- 2. 분자식: 분자량과 분자구조를 일치시켜 표시 (온도 등 조건에 따라 변화할 수 있음).
- 3. 구조식: 분자에서 원자들의 공간적 연결과 배열 상태를 표기 (선 표시, 접두사 (보기: 시스/트랜스)).

수소화물의 치환체 명명법

헤테로 원자 수소화물은 유기화합물처럼 "-에인" (-ane), "-엔" (-ene), "-아인" (-yne)과 같은 접미사를 가진 모체 수소화물의 이름을 이용할 수 있다. 치환체명명법에 따른 수소화물의 이름은 골격 구조에 붙어있는 수소 원자들의 분포를 명확히 알려주는 장점이 있다.

BH ₃	보레인	borane	NH ₃	아제인	azaneª	OH ₂	옥시데인	oxidane ^a
SiH ₄	실레인	silane	PH ₃	포스페인	phosphanea	SH ₂	설페인	sulfane ^a

 a 포스핀(phosphine)이라는 이름은 치환되지 않은 단핵수소화물(PH $_{3}$)이나 리간드로 쓰일 경우에는 사용할 수 있지만, 치환된 유도체를 명명할 때에는 사용하지 않는다. 치환체 명명법에 따른 암모니아(NH $_{3}$)와 물(H $_{2}$ O)의 이름은 각각 아제인 과 옥시데인으로 필요에 따라서 사용할 수 있다. 설페인은 보통 황화 수소라고 부른다. 위의 표에서는 다른 분자들과의 비교를 위해서 정상적인 화학식 표기인 H $_{2}$ O, H $_{2}$ S의 원소 순서를 바꾸어 표기하였다.

[보기]

C₆H₅SC₆H₅ 다이페닐 설파이드 또는 다이페닐설페인(diphenyl sulfide or diphenylsulfane)

CH₃CH₂SeH 에테인셀렌올 또는 에틸셀레인(ethaneselenol or ethylselane)

(BrCH₂)₃N 트리스(브로모메틸)아민 또는 트리스(브로모메틸)아제인{tris(bromomethyl)amine or tris(bromomethyl)azane}

다양성자 산에서 양성자가 제거된 음이온

산의 이름 + "수소" 또는 "이수소" 등을 띄지 않고 붙여 쓴다.

[보기]	
HCO ₃	탄산수소(1-) 이온
	hydrogencarbonate(1-)
HSO ₄ -	황산수소(1-) 이온 또는 테트라옥소황(VI)산수소 이온
	hydrogensulfate(1-) or hydrogentetraoxosulfate(VI)
$H_2PO_4^-$	인산이수소(1-) 이온
	dihydrogenphosphate(1-)

중탄산 이온(X)

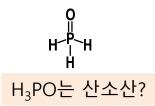
산과 산 유도체

HNO ₃ HNO ₂ HNO	질산 아질산 하이포아질산	nitric acid nitrous acid hyponitrous acid
H ₂ SO ₄ H ₂ SO ₃	황산 아황산	sulfuric acid sulfurous acid
H ₃ PO ₄ H ₃ PO ₃	(오쏘)인산 아인산	(ortho)phosphoric acid phosphorous acid (CAS) phosphonic acid (IUPAC)
$H_4P_2O_6$	하이포인산	hypophosphoric acid (이인(IV)산,
H_3PO_2 $(HPO_3)_n$ $H_4P_2O_7$	<mark>하이포아</mark> 인산 메타-인산 파이로-인산	diphosporic (IV) acid) hypophosphorous acid <i>meta</i> -phosphoric acid = H ₃ PO ₄ – H ₂ O <i>pyro</i> -phosphoric acid
HClO ₄ HClO ₃ HClO ₂ HClO		perchloric acid chloric acid chlorous acid hypochlorous acid

하이포(hypo): 낮은 산화수 표시

산소산(Oxyacid, Oxoacid)

M-O-H



HClO₄: 과산화 염소산 (perchloric acid)

HClO₃: 염소산 (chloric acid) → 염소산 음이온 혹은 염소산염은 chlorate

HClO₂ : 아염소산 (chlorous acid) → 아염소산 음이온 혹은 아염소산염은 chlorite

HCIO: 하이포아염소산 (hypochlorous acid) 차아염소산은 일본식 표기법

H₂SO₅: 과산화황산 (persulfuric acid, peroxymonosulfuric acid) c.f. H₂S₂O₈ 과산화이황산

(peroxydisulfuric acid)

H₂SO₄: 황산 (sulfuric acid)

H₂SO₃: 아황산 (sulfurous acid)

H₂S₂O₃: 하이포아황산 (hyposulfurous acid)

H₂S₂O₆: 하이포황산 (hyposulfuric acid)

H₂SO₄ → SO₃ 삼산화 황, 황산 무수물, 황산 가스

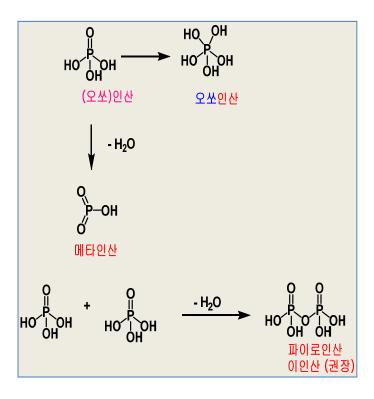
발연 황산 (H₂SO₄ + SO₃): fuming sulfuric acid or oleum H₂S₂O₇ 파이로황산 (pyrosulfuric acid) 혹은 이황산 (disulfuric acid)

 $H_2SO_3 \rightarrow SO_2$ 이산화 황, 아황산 무수물, 아황산 가스

H₂SO₂: 설핀산 (sulfinic acid)

 $H_2S_2O_3$: 싸이오황산(thiosulfuric acid) $Na_2S_2O_3$: 싸이오황산 소듐, 하이포아황산 소듐, 하이포

H_3PO_4	인산	phosphoric acid
H_3PO_2	포스핀산	phosphinic acid
H_3PO_3	포스폰산	phosphonic acid
$HP(OH)_2$	아포스폰산	phosphonous acid
$H_2P(OH)$	아포스핀산	phosphinous acid
$H_4P_2O_6$	하이포아인산	hypophosphorus
		acid
H_2PO_2	하이포인산	hypophosphoric acid



H ₂ CrO ₄	크로뮴산	chromic acid
H_2 Cr ₂ O ₇	다이크로뮴산	dichromic acid

무기 화합물 IUPAC 명명법의 변화의 보기

-ane 명명법

H₂O (물 (통상명) oxidane, 옥시데인), NH₃(azotane, 아조테인)

동소체 표기법

- O₂ (oxygen(trivial name, 통상명), dioxygen (이산소))
- O₃ (ozone(trivial name), trioxygen (삼산소))
- N₂ (nitrogen (trivial name), dinitrogen (이질소)

유기 화합물 명명법의 종류

화합물의 명명법은 관례로 사용한 통상명(common name), 체계명 (IUPAC 명명법, CAS 명명법, Beilstein 명명법), ISO (the International Organization for Standardization), INN 명명법등이 존재함.

ISO 명명법 (농약 및 농업 관련 화합물)

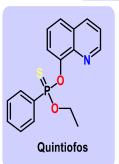
보기: fos (위치 관계 없음) 유기인 화합물 보기: 퀸티오포스 (quintiofos) -quat(접미사) 사차 질소 화합물: 파라쿼트 (paraquat)

Recommended name	Chemical name
albesilate	alkylbenzenesulfonate
butometyl	2-butoxy-1-methylethyl
butotyl	2-butoxyethyl
diclexine	dicyclohexylammonium
dimolamine	(2-hydroxyethyl)dimethylammonium
diolamine	bis(2-hydroxyethyl)ammonium
ethadyl	ethylene (ethane-1,2-diyl)
etotyl	2-ethoxyethyl
isoctyl	"iso-octyl" (mixed C-8 alkyl radical)
meptyl	1-methylheptyl
metilsulfate	methylsulfate
mexyl	1-methylhexyl
olamine	2-hydroxyethylammonium
tefuryl	tetrahydrofurfuryl
trimesium	trimethylsulfonium
trolamine	tris(2-hydroxyethyl)ammonium

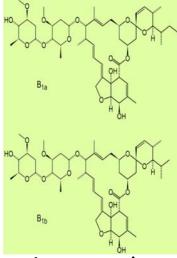
Stem	Position in name	Type of compound				
ı	suffix	2,6-Dinitroanilines				

Stem	in name	Type of compound	Example	
-alin	suffix	2,6-Dinitroanilines	trifluralin	
-azine	suffix	1,3,5-Triazines, chloro-substituted	atrazine	
-azon	suffix	Cyclic acylhydrazides	chloridazon	
-azone	suffix	N-acyl or N-phenyl triazolones	sulfentrazone	
carb- or -carb- or -carb	any position	Carbamates and thiocarbamates	carbofuran	
-conazole	suffix	Fungicides and plant growth regulators based on imidazole or 1,2,4-triazole and containing a halogenated phenyl group	penconazole	
coum- or -coum	prefix or suffix	Coumarins	coumatetralyl	
-fop	suffix	2-(4-Aryloxyphenoxy)propionic acids	fluazifop	
-fop-	infix	2-(4-Aryloxyphenoxy)propionic acid derivatives other than salts and esters	trifopsime	
fos- or -fos- or -fos	any position	Organophosphorus compounds	quintiofos	
imaz-	prefix	Imidazolinone (HRAC group B)	imazapyr	
-lure	suffix	Pheromone attractants or synthetic analogues thereof	_	
-mectin	suffix	Analogues of avermectin	abamectin	
-meton	suffix	1,3,5-Triazines, methoxy-substituted	secbumeton	
-oxydim	suffix	Alkyl 2-hydroxy-6-oxocyclohexenyl ketone oximes	cloproxydim	
-ozide	suffix	1,2-Diacyl-1-alkylhydrazine insect growth regulators	tebufenozide	
-prole	suffix	N-Arylpyrazoles	vaniliprole	
-quat	suffix	Quaternary nitrogen compounds	paraquat	
-strobin	suffix	Analogues of strobilurin	azoxystrobin	
-sulam	suffix	Aminosulfonyltriazolopyrimidines	diclosulam	
-sulfuron	suffix	Sulfonylureas	bensulfuron	
-thiuron	suffix	Thioureas	chloromethiuron	
-thrin	suffix	Esters of cyclopropanecarboxylic acids (pyrethroids)	permethrin	
-tryn ^b	suffix	1,3,5-Triazines, methylthio-substituted	simetryn	
-uron	suffix	Acyclic ureas and ureas in which one or both nitrogen atoms form part of a saturated ring system	linuron	

Table 2 — Recommended stems^a



paraquat



Avermectins

In English, the ending "-tryne" was originally recommended, but was abandoned because the ending might be thought to indic

국제 비전매 약품 명명법 (INN, International **N**onproprietary **N**ames) (농약, 의약)

보기: -케인 -caine 국소마취제 프로케인 (procaine) INN과USP (미국 약전)는 유사하지만 일부 다를 수 있다.

보기: Paracetamol (INN), Acetaminophen (USP)

관용명 (generic name)

보기: 아스피린

유기 화합물 명명법의 시작

미국 화학회에 의하면 등록된 화합물의 개수는 2021년1월 현재로 약1억7천오백만개가 된다. 이중 대부분을 차지하고 있는 화합물이 유기 화합물이다. 유기 화합물은 구조의 다양성으로 이름을 명명하기가 매우 어렵고 비교적 구조가 단순한 화합물인 경우에는 컴퓨터로 명명을 할 수있는 소프트웨어가 개발되어 있지만 삼차원적 구조는 아직도 알고리즘 개발이 어렵다.

유기 명명법의 시작은 메테인이다. 메테인의 명명법 유래를 간단히 살표보자. 프랑스 화학자 Jean-Baptiste Dumas와 Eugene Peligot는 메탄올의 화학 구조를 결정한 후 나무로부터 얻은 알코올이라는 원천을 표시하려고 그리스어 methy = "포도주" + hylē = "나무"를 합쳐서 주정이라는 의미로 메틸렌 methylene이라고 표시하였다. 어미의 -enes는 -ine 와 -one와 함께 여성 명사로 딸 (daughter)를 표시하는 그리스어의 접미사이다. 따라서 "메틸렌"을 정확하게 표시하면 주정이 아니고 "주정의 딸"이 된다. 그러나 나무라고 사용한 그리스어 hyle은 실제로는 나무 조각를 가리키며, 나무를 의미하는 xylo-의 오류이었다. 메틸이라는 용어는 약 1840년경 메틸렌으로부터 파생하게 되어 메틸 알코올에 적용된 것이다. 프랑스 화학자 Regnault 가 메틸기 CH3 methyl 이라는 이름을 사용하였다. 이것의 meth-는 메틸렌(methylene)에서 유래하였고 -yl은 메틸렌이라는 단어와 물체 (matter)라는 의미로서의 -yl의 두 개의 어원을 가진다.

이후 1866년 August Wilhelm Hofmann이 탄화수소에 산발적으로 사용한 그리스어 -ene, -ine, -one 대신 모음을 알파벳 순서로 a, e, i, o, u를 체계적으로 사용하여 -ane, -ene, -ine (혹은 -yne), -one, -une를 C_nH_{2n+2} , C_nH_{2n} , C_nH_{2n-2} , C_nH_{2n-4} , C_nH_{2n-6} 의 탄화수소에 관한 어미를 체계적으로 표시하도록 제시한 것이다. 현재 이중 앞의 3개의 어미는 사용하지만 -one는 그이전부터 acetone (독일에서는 이전에 Keton으로 사용)에 사용됨에 따라 탄화수소 명명법에서 -une와 함께 사라졌다.

알케인(alkane)

알케인 alkane은 알킬 alkyl + -에인 -ane이다. 알킬은 alk (독일어 alkohol 알코올) + -yl(으로부터)의합성어이다. Hofmann은 알케인의 동족 계열의 이름을 methane, ethane, propane, quartane으로명명하였다. Methane은 methylene으로부터의 meth- + -ane이었고 ethane은 ether + -yl인 ethyl에서파생하 eth- + -ane이다. Propane은 propionic acid (Demas가 지방산의 가장 작은 산으로 생각하여그리스어 proto (첫번 째, first) + pion (지방, fat)의 합성한 단어)에서 파생한 propyl의 prop- + -ane이다. Ether라는 말은 etho (빛난다, shine)라는 어원에서 쾌청한 날씨등을 말하는 데 사용하였지만 점차일반적으로 투명하고 휘발성물질이라는 의미로 사용하게 된 것이다. 이로부터 ethylene이라는 단어가사용되고 다시 ethyl이라는 단어도 ethylene으로부터 파생되었다. Butane은 버터가 부패되어 생성되는부티르산 butyric acid (Chevreul이 버터의 라틴어 butyrum + 산을 의미하는 -ic을 합쳐 만든 단어butyric)으로부터 파생한 butyl의 but-와 -ane을 합침에 따라서 quartane이라는 이름이 사라졌다. 초기에탄소 4개부터는 배수사의 라틴어를 사용하였지만 이후에 대부분 그리스어의 배수사로 대체되었다.

에스터 (Ester)

essig(독일어 식초) 와 에터 ether 의 합성 축약어이다.

알데하이드(Aldehyde)

독일의 Liebig 가 alcohol 을 산화하여 얻어 탈수한 알코올 (alcohol dehydrogenatum "dehydrogenated alcohol")이라는 라틴어를 합성 축약하여 만들었다.

IUPAC 유기 명명법 변천사

- 1892년: 9개국 34명의 화학자가 모여 지방족 사슬에 대하여 가장 긴 사슬을 모체 구조로 하고 작용기를 접미사로 사용하는Geneva 규약을 만들었음.
- 1920년: IUC (international union of chemistry)가 발족하여 유기 분과에서 68개의 규약을 만들었다. 이후 1947년 IUC는IUPAC (international union of pure and applied chemistry)으로 변경.
- 1979년: 1949년 이후의 규약을 종합하여 A, B, C, D, E, F, 및 H 장의 규약을 발간하였다.
 A장 탄화수소류, B장 기본 헤테로고리계, C장 탄소, 수소, 산소, 질소, 할로젠, 황, 셀레늄 및텔루륨을 포함하는 특성기, D장 탄소, 수소, 산소, 질소, 할로젠, 황, 셀레늄, 텔루륨 이외의 원소를 포함하는 유기화합물, E장 입체화학, F장 천연물 및 관련된 화합물들의 명명, H장 동위원소로 변형된 화합물이다.
- 1993년:이전 명명법에 대한 일부 수정을 하여 수정판인 R장 (recommendation, 권장)을 발간.
- 1998년: 접합고리와 스파이로고리에 관한 명명법 FR 장이 발간.
- 2004년: 우선명 (Preferred IUPAC Name, PIN)에 관한 안건이 발간되었다. IUPAC 명명법은 한화합물을 명명하는 데 관점 에 따라 몇 가지 이름이 존재할 수 있기에 현재는 전반적으로 우선권을 부여하는 우선 IUPAC 이름 (PIN, Preferred IUPAC Names)에 관한 새로운 규칙을 제정하였다. 앞으로는 PIN으로 이전 이름을 대체할 것임.
- 2013년: R(권장)과 P장(우선명) 발간

IUPAC 유기 화합물 명명 체계



접두사(prefix): 치환체를 표시하며, 치환체란 모체 화합물의 수소원자를 대치한 원자 혹은 원자단을 말한다.

모체 (parent 혹은 stem): 주사슬 (principal chain) 혹은 주고리계를 의미한다. 이러한 모체명이 IUPAC 명명법의 핵심 개념을 구현하고 있다.

접미사: 화합물의 부류 (class)를 의미하는 주원자단을 표시하는 것이다.

화합물의 부류는 특성기(characteristic group), 혹은 작용기 (functional group) 의 존재에 의하여 정해진다

IUPAC 구두법 일반 규약

• 화합물에서 특별한 구조의 위치를 표시하기 위해서 사용하는 숫자 또는 문자로 된 **위치 표시자** (locant)는 명칭에서 관련된 부분 바로 앞에 쓰고 하이픈으로 연결한다. 혼동할 가능성이 없는 분명한 경우에는 생략할 수도 있지만 항상 위치번호를 포함하는 것이 좋다.

보기: 헥스-2-엔 (hex-2-ene) (PIN)

• 쉼표, 마침표, 하이픈, 간격(space) 콜론과 세미콜론의 구두점을 사용하여 화학명의 모호함을 제거한다.

쉼표: 여러 개의 위치번호를 표시하기 위하여 혹은 접합고리에서는 접합위치의 문자를 분리하기 위하여 사용함.

보기: 1,2-다이클로로에테인, 다이벤조[a,j]안트라센

마침표: 고리크기를 분리하기 위하여 사용.

보기: 바이사이클로[3.2.1]옥테인

하이픈: 화합물의 이름에서 위치 번호나 입체화학 표기는 하이픈 '-'으로 연결한다.

보기: (*E*)-뷰트-2-엔

띄어 쓰기(space): 산과 염. 에스터 , 산무수물 , 카보닐 화합물과 케톤 , 아세탈 , 하이드라존 또 는 옥심과 같은 유도체 할로젠과 유사 활로젠 화합물.

알코올. 에터. 과산화물과 같은 산소화합물과 칼코젠 유사체의 경우에는 간격을 표시하기 위하여 빈 칸을 사용한다. 산 이름은 우리말에서는 붙여 쓰지만 영어에서는 띄어 쓴다.

보기: 아세트산 (acetic acid), 아세트산 에틸 (ethyl acetate), 에틸 메틸 케톤 (ethyl methyl ketone), 염화 아세틸 (acetyl chloride), 에틸 알코올 (ethyl alcohol), 황화 메틸 프로필 (methyl propyl sulfide)

- 수 접두사(numerical prefix 혹은 배수 접두사, multiplicative prefix): 화학식에 동일한 원자 또는 원자단이 하나 이상 있는 경우에는 수 접두사를 사용한다. 원자나 원자단의 이름이 우리말로 시작되는 경우에는 '일-". '이-", '삼. 동의 수 접두사를 사용하고, 그렇지 않을 경우에는 그리스어와 라틴어에서 유래된 수 접두사를 사용한다. 원자단의 이름이 복잡할 경우에는 괄호 앞에 '비스-", '트리스-', '테트라키스-'등의 배수접두사를사용한다.
- 괄호: 화합물 구조의 특징 부분을 명확히 알리기 위하여 소괄호(parenthesis), 중괄호 (brace), 대괄호(bracket)를 사용한다. 복합 사용 순서는 소괄호, 대괄호, 중괄호가 된다. { [(...)] } curved-square-curly CAS: [[(...)]]

소괄호: 치환기, 첨가된 수소, E/Z, R/S 등의 입체화학 지정 용어 및 동위원소가 치환된 화합물을 나타내는 데 사용한다.

대괄호: 접합고리 화합물에서는 접합위치, 여러고리 화합물과 스파이로 화합물에서 고리 크기를 표시하기 위하여 사용한다. 또한 다리에 포함한 이중결합이나 접합고리 계에서의 성분고리의 헤테로원자 같은 성분 구조 특성에 필요한 위치자를 표시하는 데 사용한다.

특성기의 우선권 순서

라디칼 > 음이온* > 양이온* > 쯔비터이온 > 카복실산 > 카복실산 유도체 (산무수물, 에스터, 카복실산 할라이드, 아마이드) > 나이트릴 > 알데하이드* > 케톤 > 알코올 > 하이드로과산화물 > 아민 > 이민 > 에터 > 과산화물 * CAS:: >양이온>음이온>--, 산무수물, 에스터, 알데하이드를 카복실산 유도체로 취급

접두사로만 사용되는 특성기: 할로젠 (브로모, 클로로, 플루오로, 아이오도), 아지도, 나이트로 등이 이에 해당된다.

접두사와 접미사로 사용되는 특성기

종 류	식	접두사	접미사
카복실산(Carboxylic acid)	-COOH	카복시(Carboxy)	-카복실산 (-carboxylic acid)
에스터(Esters)	-COOR	R옥시카보닐	카복실산 R (R carboxylate)
나이트릴 (Nitrile)	-CN	사이아노	나이트릴 (-nitrile)
알데하이드(Aldehyde)	-CHO	폼일 (Formyl-)	-카브알데하이드 (carbaldehyde)
		옥소 (Oxo-)	-알 (-al)
케톤 (Ketone)	-CO-	옥소(Oxo-)	-온 (-one)
알코올 (Alcohol)	-OH	하이드록시(Hydroxy-)	-올 (-ol)
싸이올 (Thiol)	-SH	머캅토 (Mercapto-)	-싸이올(-thiol)
아민 (amine)	-NH2	아미노 (Amino-)	-아민 (-amine)

일반적 IUPAC 명명법 과정

- 1. 주어진 화합물의 부류를 정한다. 몇 가지의 부류가 겹치는 경우 우선권을 가지는 부류를 택한다. (보기: 탄화수소, 헤테로 고리, 카복실산, 케톤, 할로젠 유도체 등) 일빈적으로 산화상태가 높은 탄소를 가지는 작용기가 낮은 산화상태를 가지는 작용기 보다 우선권이 높다.
- 2. 모체 구조를 정하고 존재하는 구조적 혹은 명명법적 요소를 정의한다. 작용기가 없는 경우에는 헤테로 고리 >탄소 고리> 사슬의 순위가 된다. 큰 고리와 긴 사슬이 작은 고 리와 짧은 사슬보다 우선권을 가진다.
- 3. 어떤 유형의 명명법을 사용할 것인지를 정한다. (보기: 치환, 접속, 첨가, 삭제, 작용기-분류 명명법 등) 가장 선호하는 명명법은 치환명명법이며 때로는 CAS의 접속 명명법을 선호하기도 한다.

구조적 혹은 명명법적 요소를 각각 개별적으로 명명한 다음 위치표시자(locant) (숫자혹은 문자)와 구두점을 첨가한다. 위치표시자는 번호매기기 규약을 따른다. **위치표시자**는 아라비아숫자, 그리스어 (α , β 등), 로마자의 이탤릭 대문자로 사용하는 원소 기호및 IUPAC에서는 권장하지 않는 o-, m-, p- 가 있다. 동일한 구조적 특성에 관한 위치표시자의 순서는 로마자, 그리스어, 숫자가 된다.

보기: N, P, S, α, β, 1, 2....

모체 구조의 작용기의 위치 번호는 어미 바로 앞에 쓰고 번호는 될 수 있는 한 낮게 한다. 그 다음 치환체의 위치 번호를 낮게 배정한다.

보기: 헥스-2-엔 (hex-2-ene) (이전 명칭 (1973년 명칭)은 2-hexene), 사이클로헥스-2-엔 -1-올 (cyclohex-2-en-1-ol) (이전 명칭 2-cyclohexen-1-ol)

- 4. 치환체 접두사, 삽입사, 접미사를 규정에 따라 배열하고 적절한 위치표 시자와 함께 모체구조 이름에 집어 넣는다. 같은 종류의 치환체의 위치 번호는 쉼표로 표시하고 모든 위치 표시자는 하이픈으로 분리한다. 모 든 접두사는 알파벳 순서로 배열한다. 전체 이름은 다음 순서가 된다. 접두사 > 모체(parent) 이름 혹은 모체 치환체 이름 > 어미(ending) (접 미사, 작용기성-모체 이름 혹은 부류 이름)
- 5. 필요에 따라서 동위원소, 입체화학 표시자를 첨부한다.

CAS 명명법은 색인에 편리하게 사용하기 위하여 이름 성분의 순서가 IUPAC과 달라서 예를 들면 <mark>모체 이름 + 접미사</mark> > 도치 쉼표 > 접두사가 된다.

보기: IUPAC 이름: 3-bromo-1,4-dichlorobutan-2-ol CAS 이름: 2-butanol, 3-bromo-1,4-dichloro-

알칸일 명명법(Alkanyl Nomencalture)

1973년 명명법은 알킬기 유리 원자가 자리를 1로 사용한 알킬기 명명법을 사용하였지만 1993년 IUPAC 명명법에서는 알케인의 -e를 제거하거 –일(-yl)을 붙여서 알칸일 (alkanyl)로 변경함으로써 이전의 자유 원자가(free valence) 위치를 1로 사용하던 종래의 법칙(알킬, alkyl)을 버렸다.

새로운 알칸일 명명법은 이전의 알킬 명명법 보다 단순하고 더 체계적인 명명법이다. 알칸일기 명명법에서는 유리 원자가를 하나의 세트로 배정하여 사슬의 번호 매기기와 일치시킨다. 에를 들어, 알킬기에서의 펜틸기(pentyl)는 에탄일(pentanyl)이 된다. (예외로 메틸, 에틸, 프로필은 종래대로 사용한다.) 알킬 명명법에서의 1-메틸뷰틸(1-methylbutyl)은 알칸일 명명법에서는 치환자리 바로 앞에 위치번호를 표시하여 펜탄-2-일(pentan-2-yl)이된다.

-이덴 (-idene)은 알킬과 마찬가지로 바꾸어 알칸일리덴 (alkanylidene), 알케인다이일 (alkanediyl), 알칸일릴리덴(alkanylylidene)으로 한다. 따라서 이러한 알칸일 명명법은 불포화 곁가지에도 마찬가지 방법으로 사용한다. IUPAC에서는 알킬 명명법은 더 이상 권장하지 않는다.

$$CH_3 - CH_2 -$$

알칸일 명명법: pentan-1-yl

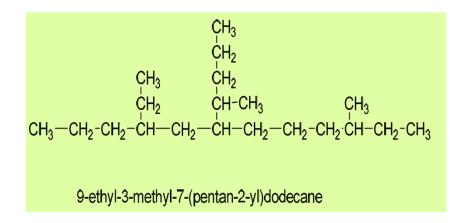
알킬 명명법: pentyl

알칸일 명명법: pentan-2-yl 알킬 명명법: 1-methylbutyl

가지 달린 사슬형 포화 탄화 수소

모체, 즉, 주사슬 (major chain) 선택 기준

- 1) 가장 긴 사슬
- 2) 곁가지가 가장 많은 사슬
- 3) 곁가지에 대한 번호가 가장 낮은 사슬



CH₃ H₃C−CH─ 아이소

허용되는 통상명

허용되는 8개 통상명의 알킬기

CH ₃ H ₃ C-CH-	아이소프로필	Isopropyl	CH3 H3C-CH-CH2-CH2-	아이소펜틸	Isopentyl
CH ₃ H ₃ C-CH-CH ₂ —	아이소뷰틸	Isobutyl	CH₃ H₃C-C—CH₂— CH₃	네오펜틸	Neopentyl
CH ₃ H ₃ C-CH ₂ —CH—	sec-뷰틸	sec-Butyl	CH₃ H₃C−CH₂−Ċ−− CH₃	tert-펜틸	tert-Pentyl
CH ₃ H ₃ C-C— CH ₃	tert−뷰틸	tert-Butyl	CH₃ H₃C−CH−CH₂−CH₂−CH₂−	아이소헥실	Isohexyl

6-아이소프로필-8-(1,2-다이메틸뷰틸)트라이데케인 (6-isopropyl-8-(1,2-dimethylbutyl)tridecane)의 알칸일 명명법

알파벳 순서의 유의점

- 1. 배수접두사는 무시한다. 에틸(ethyl)이 다이메틸 (dimethyl) 보다 우선이다.
- 2. *sec*-Butyl, *tert*-Butyl 은 b를 알파벳 첫글자로 간주한다. 접두사 *sec*-와 *tert* 는 문장의 첫부분에서도 대문자로 사용하지 않는다.
- 3. 아이소프로필, 네오펜틸은 각각 i와 n을 알파벳 첫글자로 간주한다

치환되지 않은 긴 사슬에 관하여 IUPAC, CAS 노말 (normal, n) 접두사를 사용하지 않음.

만일 모체 사슬에 동등한 길이의 사슬들이 경쟁하는 경우에는 가장 많은 곁가지를 가지는 사슬을 모체로 택한다.

$$\begin{array}{c} \mathsf{CH_3} \\ \mathsf{CH_2} \\ \mathsf{CH_2} \\ \mathsf{CH_2} \\ \mathsf{CH_3} - \mathsf{CH_2} - \mathsf{CH} - \mathsf{CH} - \mathsf{CH} - \mathsf{CH} - \mathsf{CH}_3 \\ \mathsf{CH_3} \\ \mathsf{CH_3} \\ \mathsf{CH_3} \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \mathsf{CH_3} \\ \mathsf{CH_3} \\ \mathsf{CH_3} \end{array}$$

$$2,3,5\text{-trimethyl-4-propylheptane}$$

영어 표기에는 줄을 바꿀 때에는 분철 법을 준수하여야 함

'3-메틸-2,5-다이메틸옥테인'이 아니고 '2,3,5-트라이메틸-4-프로필헵테인'

이중결합을 가지는 불포화 탄화수소 (알켄, Alkene)

포화탄화수소의 어미 '-에인(-ane) 을 '-엔(-ene)' 으로 고쳐서 명명한다. 이들의 속명은 알켄 (alkene)이다. 예외로 사용하는 관용명은 에틸렌(ethylene)과 알렌(allene)이다.

사슬에 번호를 매길 때는 이중결합 탄소원자에 최소의 번호가 주어지도록 한다. 유의할 점은 1979년의 규약에서는 위치번호에 대하여 접두사의 처음 부분 위치에 이중결합 자리를 표시하고 다시 기능기 바로 앞에 위치하는 것 을 개선하여 1993년 권장 규약에서는 전통적으로 생략하는 경우를 제외하 고는 명칭에서 관련된 부분 바로 앞에 위치하게 한다.

보기:

6 5 4 3 2 1 CH₃-CH₂-CH=CH-CH₃ 텍스-2-엔(hex-2-ene) (1993년 규약) PIN 2-텍센 (2-hexene) (1979년 규약)

H₂C=CH-CH=CH₂ 뷰타-1,3-다이엔(Buta-1,3-diene) (1993년 규약) PIN 1,3-뷰타다이엔(1,3-Butadiene) (1979년 규약)

삼중결합을 가지는 불포화 탄화수소 (알카인, alkyne)

삼중결합을 1개 가진 곁가지 없는 비고리형 불포화 탄화수소는 상응하는 포화탄화수소의 어미 -에 인 (-ane)'을 '-아인 (-yne)'으로 바꾸어 명명한다. 예외인 관용명은 아세틸렌(acetylene)이다. 둘 이상의 삼중결합이 있을 때는 어미가 '-아다이아인(-adiyne)', '-아트라이아인(-atriyne)과 같이 된다. 번호 매기기는 이중결합의 경우와 같이 삼중결합 탄소원자에 가능한 한 최소의 번호가 주어지도록 한다.

H₃C-CH₂-CH₂-C≡CH 펜트-1-아인(Pent-1-yne)

이중결합과 삼중결합 모두 다 포함하는 불포화 탄화수소

포화 탄화수소의 어미 '-에인(-ane)' 을 '-엔아인(-enyne)', '-다이엔아인(-adienyne)'.'-엔다이아인(-endiyne)', '-아트라이엔아인(-atrienyne)' 등으로 바꾸어 명명한다. 위치번호는 이중결합과 삼중결합에 가능한 한 최소의 번호가 주어지도록 정한다.

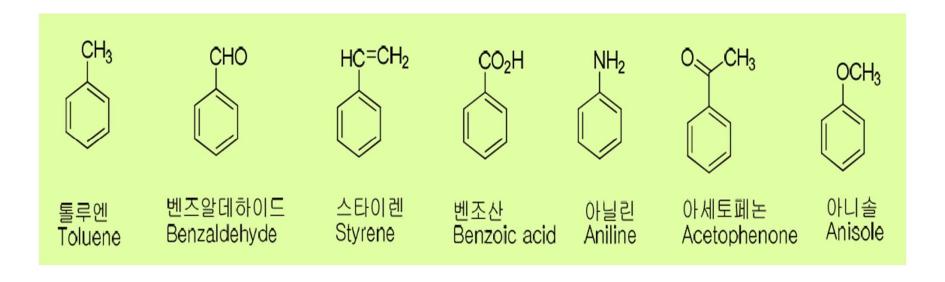
H₃C-CH=CH-C≡CH 1 2 3 4 5 펜트-3-엔-1-아인(Pent-3-en-1-yne) 펜트-2-엔-4-아인이 아님.

그러나 번호 매기는 방식이 두 가지 이상이 가능한 경우에는, 이중결합에 최소의 번호가 주어지는 쪽을 선택한다.

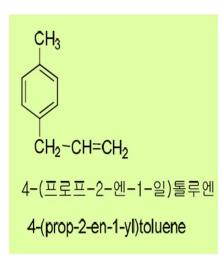
불포화 곁가지의 알칸일 명명법

$$\begin{array}{ccc} \text{CH}_3 & \text{CH}_3 \\ \text{H}_2\text{C}=\text{C}-& \text{H}_2\text{C}=\text{C}-\text{CH}_2-\\ \\ \text{IUPAC} & \text{2-methylprop-2-en-1-yl} \\ \text{prop-1-en-2yl} & \\ \text{CAS} & \\ \text{1-methylethenyl} \end{array}$$

방향족의 허용된 관용명



보 기



CAS는 톨루엔 대신 메틸벤젠을 사용함.

치환된 방향족기

IUPAC 1-페닐-2,5-다이메틸헵테인

1-phenyl-2,5-dimethylheptane

3-페닐사이클로헵트-1-엔

3-phenylcyclohept-1-ene

CAS (2,5-다이메틸헵틸)벤젠

(2,5-Dimethylheptyl)benzene

CI

NO₂

CH₂CH₃

1-브로모-3-클로로벤젠

1-Bromo-3-chlorobenzene

3-Bromochlorobenzene는 틀림

m-브로모클로로벤젠

1-클로로-3-아이오도벤젠

1-Chloro-3-iodobenzene

m-클로로아이오도벤젠

1-브로모-3-나이트로벤젠 1-Bromo-3-nitrobenzene

m−브로모나이트로벤젠

1-클로로-3-에틸벤젠

1-Chloro-3-ethylbenzene

m-클로로에틸벤젠

알코올 (Alcohol)

기-기능 명명법 (radicofunctional nomenclature)

H₃C-CH₂OH

특성원자단, OH: 알코올 Alcohol (기능부류명)

기, CH₃CH₂: 에틸 Ethyl

완성된 이름: 에틸 알코올 Ethyl alcohol

치환식 명명법

H₃C-CH₂OH

주원자단 OH에 대한 접미사: -올(-ol)

CH₃-CH₃에 대한 모체 이름 : 에테인(Ethane)

완성된 이름: 에탄올(Ethanol)

5 4 3 2 1 H₂C=CH-CH₂-CH₂-CH₂OH

접미사: -올 (ol)

모체 이름: 펜테인(pentane)을 펜텐(pentene)으로 바꿈 (불포화 결합) →펜트-4-엔 완성된 이름: 펜트-4-엔-1-올 (pent-4-en-1-ol, PIN) (4-펜텐-1-올(4-Penten-1-ol))

PIN vs IUPAC Accepted Use Name

3 2 1 H₃C−CH−CH₂OH OH

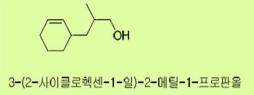
접미사: -다이올 (diol)

모체 이름: 프로페인

완성된 이름: 프로페인-1,2-다이올(Prpane-1,2-diol, PIN)

(1,2-프로페인다이올 (1,2-propanediol))

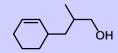
Accepted Use Name



CH₃ H₃C-C-OH CH₃ t-뷰탄올?

3-(2-사이클로헥센-1-일)-2-메틸-1-프로 3-(2-Cyclohexen-1-yl)-2-methyl-1-propanol

PIN



3-(사이클로헥스-2-엔-1-일)-2-메틸프로판-1-올

3-(cyclohex-2-en-1-yl)-2-methylpropan-1-ol

t-뷰틸 알코올 혹은 2-메틸프로판-2-올 (2-methylpropan-2-ol)

허용된 관용명들

CH₃CH=CHCH₂OH 알릴 알코올, Allyl alcohol

(CH₃)₃COH tert-뷰틸 알코올, tert-Butyl alcohol

C₆H₅-CH₂-OH 벤질 알코올, Benzyl alcohol

C₆H₅-CH₂-CH₂-OH 펜에틸 알코올, Phenethyl alcohol

HO-CH₂-CH₂-OH 에틸렌 글라이콜, Ethylene glycol

HO-CH₂-CH(OH)-CH₂OH 글리세롤, Glycerol (글리세린 glycerine은 허용안됨)

C(CH₂OH)₄ 펜타에리트리톨, Pentaerythritol

(CH₃)₂C(OH)-C(OH)(CH₃)₂ 피나콜, Pinacol

알코올 음이온

'-올산' 음이온(-olate)

CH₃ONa

메탄올산 소듐 Sodium methanolate

'산화 -일' (-yl oxide)

C₆H₅CH₂ONa 산화 벤질 소듐 Sodium benzyl oxide

예외로 축소형 이름으로 어미를'-옥시화(-oxide)'

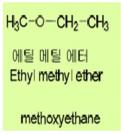
CH₃ONa

(CH₃)₃COK

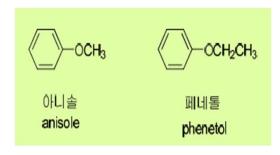
메톡시화 소듐 Sodium methoxide tert-뷰톡시화 포타슘 Potassium tert-butoxide

에터 (Ether)

IUPAC에서는 비대칭인 에터의 경우나 일부 대칭적인 에터의 경우 에터 명명법을 허용하지만 그외에는 권장하지는 않는다.



관용명



CH3-CH2-S-CH2-CH3

에틸설판일에테인 Ethylsu fany ethane 다이에틸 설파이드(촹화 다이에틸) Diethyl su fide CH₃— CH-—S-CH₂—CH₃

1-에 털설판일프로판-1-올
1-Ethylsulfanylpropan-1-ol
1-(에 털싸이오)-1-프로판올
1-(Ethylthio)-1-propanol

카복실산 등 유기산 명명법

카복실산 $(RCO_2H)>$ 설폰산 $(RSO_3H)>$ 설핀산 $(RSO_2H)>$ 포스폰산 $(RPO_3H)>$ 포스 핀산 $(R_2PO_2H)>$ 보론산 (RBO_2H_2)

3-sulfobenzoic acid

해당 탄화수소의 끝에 있는 e를 제거하고 -oic acid를 붙여 쓴다.

CH3-CH2-CH2-COOH HOOC-

HOOC-CH₂-CH₂-CH₂-COOH

CH₃-CH=CH-CH₂-CH₂-COOH

펜탄산

Pentanoic acid

펜탄이산

Petanedioic acid 관용명: 글루타르산 glutaric acid 헥스-4-엔산

hex-4-enoic acid

허용 관용명

HCOOH: 메탄1 CH3COOH: 메탄1

메탄산(Methanoic acid) 에탄산(Etanoic acid)

프로판산 (Propanoic acid, PIN)

폼산(Formic acid, PIN) 아세트산 (Acetic acid, PIN)

CH3CH2CH2COOH:

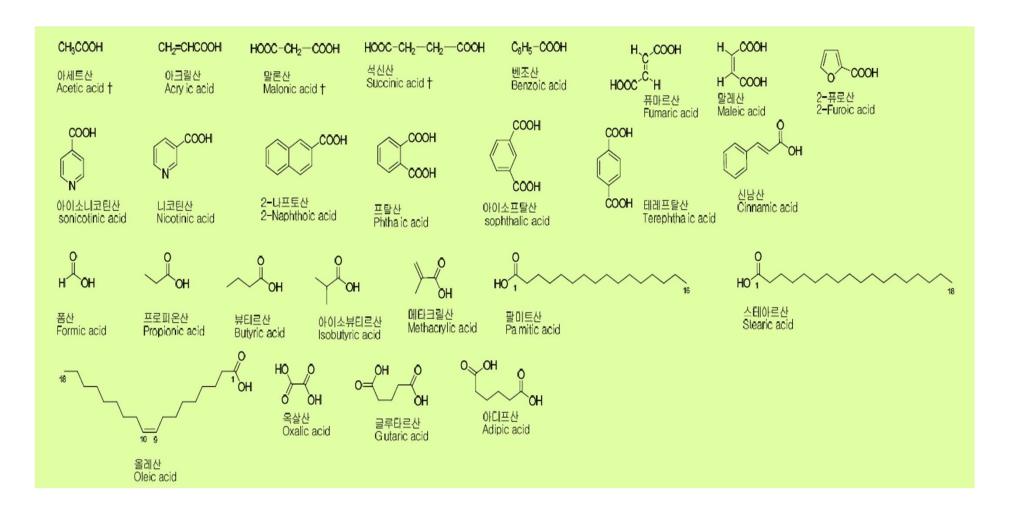
CH3CH2COOH:

뷰탄산 (Butanoic acid, PIN)

프로피온산 (Propionic acid)

뷰티르산 (Butyric acid)

허용 관용명 (계속)

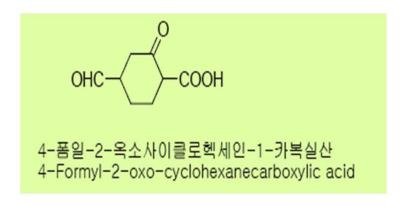


카복실산의 접속 명명법 (Conjunctive Nomenclature)

고리(지방족 고리 혹은 아렌)나 탄소이외의 원자에 부착된 카복실산에 사용(CAS 명명법과 동일)

고리와 원자이름을 모체로 하고 접미사 -카복실산을 붙여 명명한다.





에스터 (Ester)

중성염과 같은 방법으로 명명

- (a) 양이온의 이름 대신에 알킬 또는 아릴기 등의 이름을 사용
- (b) 산의 '(금속)염 [(metal)salt]' 대신에 산의 '(알킬 또는 아릴)에스터 ((alkyl 또는 aryl) ester)

우선 순위가 낮은 경우 알콕시카보닐-(alkoxycarbonyl-) 또는 '아릴옥시 카보닐- (aryloxycarbonyl-)'로 사용

아민(Amine)

1차 아민: NH₂R

2차 아민: NHR₁R₂

3차 아민: NR₁R₂R₃

4차 암모늄: N+R₁R₂R₃R₄X-

IUPAC에서는 치환명명법 (alkanamine)을 권장

CH₃NH₂

기기능 명명법: 메틸 아민 (methyl amine) 치환명명법: 메탄아민 (methanamine)

관용명

C₆H₅NH₂ 아닐린 (aniline)

CH₃O-C₆H₄-NH₂ 아니시딘 (anisidine)

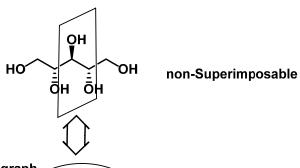
C₂H₅O-C₅H₄-NH₂ 페네티딘 (phenetidine)

CH₃-C₆H₅-NH₂ 톨루이딘 (toluidine)

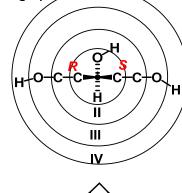
1988년도 확장된 CIP 명명법

준비대칭 화합물 (Pseudo-Asymmetric Compounds) 명명법





Hierachical Digraph



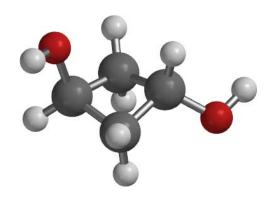
(2R,3s,4S)-pentane-1,2,3,4,5-pentaol

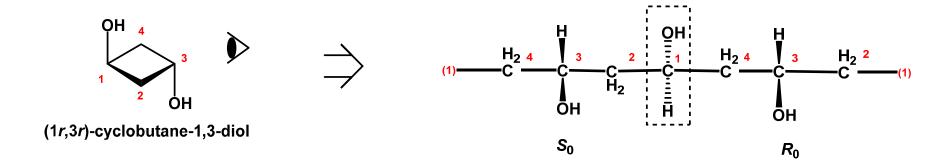
Meso Compound

$$\bigcirc$$

(2R,3r,4S)-pentane-1,2,3,4,5-pentaol

시스-트랜스의 확장 명명법





trans-cyclobutene-1,3-diol \rightarrow (1*r*,3*r*)-cyclobutene-2,3-diol (PIN)



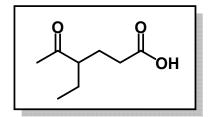
(1s,4s)-1,4-dimethylcyclohexane (PIN)

(1)-2-3-4-5-6-
$$\frac{C}{1}$$
-2-3-4-5-6-(1)
 CH_3
 R_0

(4)—5—6—1—2—3—
$$\stackrel{\stackrel{}{\overset{}_{=}}}{\overset{}_{=}}$$
 $\stackrel{\stackrel{}{\overset{}_{=}}}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{\stackrel{}{\overset{}_{=}}}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}{\overset{}_{=}}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}{\overset{}_{=}}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}{\overset{}_{=}}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}{\overset{}_{=}}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}{\overset{}_{=}}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}_{=}}$ $\stackrel{}{\overset{}}}$ $\stackrel{}{\overset{}}{\overset{}}$ $\stackrel{}{\overset{}}{\overset{}}}$ $\stackrel{}{\overset{}}{\overset{}}}$ $\stackrel{}{\overset{}}{\overset{}}$ $\stackrel{}{\overset{}}{\overset{}}}$ $\stackrel{}{\overset{}}{\overset{}}}$ $\stackrel{}{\overset{}}$ $\stackrel{}{\overset{}}}$ $\stackrel{}{\overset{}}$ $\stackrel{}{\overset{}}{\overset{}}}$ $\stackrel{}{\overset{}}}$ $\stackrel{}{\overset{}}$ $\stackrel{}}{\overset{}}}$ $\stackrel{}}{\overset{}}$ $\stackrel{}}{\overset{}}}$ $\stackrel{}}{\overset{}}$ $\stackrel{}}{\overset{}}$ $\stackrel{}}{\overset{}}$ $\stackrel{}$

(1r,4r)-1,4-dimethylcyclohexane (PIN)

명명법 완성 연습



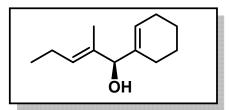
주원자단: 카복실산

모체 구조: 치환체가 2개인 옥소헥산산

치환체: 4-에틸, 5-옥소

완성된 이름: 4-에틸-5-옥소헥산산

4-ethyl-5-oxohexanoic acid

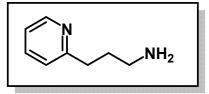


주원자단: 알코올 모체구조: 펜텐올

치환체: 사이클로헥스-1-엔-1-일

완성된 이름: (*S,E*)-1-(사이클로헥스-1-엔-1-일)-2-메틸펜트-2-엔-1-올

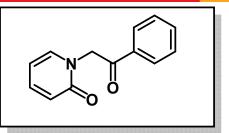
(*S,E*)-1-cyclohexenyl-2-methylpent-2-en-1-ol



주원자단: 아민

모체 구조: (pyridine이 아니고 가장 연장할 수 있는 구조로) 피리딘-2-일프로페인

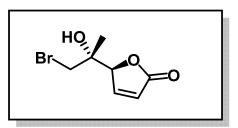
완성된 이름: 3-(피리딘-2-일)프로판-1-아민 (3-(pyridin-2-yl)propan-1-amine)



주원자단: 헤테로고리 케톤 (> 사슬 케톤)

모체 화합물: 피리딘-2(1H)-온 치환체: 옥소페닐에틸 완성된 이름: 1-(2-옥소-2-페닐에틸)피리딘-2(1H)-온

1-(2-oxo-2- phenylethyl)pyridin-2(1*H*)-one



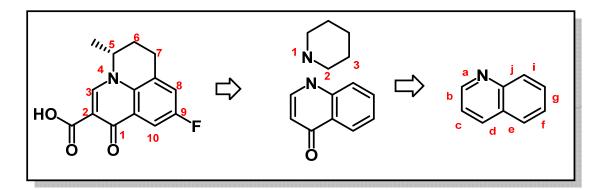
주원자단: 헤테로고리 케톤 (> 사슬형 알코올)

모체화합물: 퓨란-2(5H)-온

사슬 치환체: 브로모, 하이드록시 사슬 이름: 1-브로모-2-하이드록시프로페인

완성된 이름: (S)-5-((R)-1-브로모-2-하이드록시프로판-2-일)퓨란-2-(5H)-온

(S)-5-((R)-1-bromo-2-hydroxypropan-2-yl)furan-2(5H)-one



주원자단: 카복실산

모체 구조: 퀴놀린 (quinoline)

완성된 이름: (R)-9-fluoro-5-methyl-1-oxo-1,5,6,7-tetrahydropyrido[3,2,1-ij]quinoline-2

-carboxylic acid

(*R*)-9-fluoro-6,7-dihydro-5-methyl-1*H*,5*H*-benzo[*ij*]quinolizine-2-carboxlic acid

모체 구조: 퀴놀리진 (quinolizine)

참고 문헌

- 1. 무기화합물 명명법, 대한화학회 화학술어 위원회, 1998.
- 2. 유기화합물 명명법I, II, 대한화학회 화학술어 위원회, 2000.
- 3. Nomenclature of Inorganic Chemistry: IUPAC Recommendations, 2005.
- 4. Nomenclature of Organic Chemistry, IUPAC Recommendations and Preferred Names, 2013.

Errata: https://www.qmul.ac.uk/sbcs/iupac/bibliog/BBerrors.html

대한화학회 홈페이지:

www.kcsnet.or.kr

IUPAC 홈페이지:

www.iupac.org