

유기화합물의 명명

IUPAC name: there is IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) rule for naming but common name is widely used.

Ex: L-alanine, (2S)-2-aminopropanoic acid

화학명은 세가지 부분 (접두사, 모체, 접미사)로 나뉜다.

모체는 기본 사슬을 이루는 탄소원자의 수를 나타내어 전체 분자의 크기를 규정하고,

접미사는 분자가 어떤 계통에 속하는 가를 나타내며,

접두사는 기본 사슬에 있는 각종 치환기의 위치를 나타낸다.

2-butanol

4-aminobutanoic acid (GABA)

3,5-dinitrocatechol (3,5-dinitro-1,2-benzenediol)

Methane	hexane	undecane
---------	--------	----------

Ethane	heptane	dodecane
--------	---------	----------

Propane	octane	
---------	--------	--

Butane	nonane	
--------	--------	--

Pentane	decane	
---------	--------	--

Chemical drawing softwares

1. 가지친 알칸의 명명

명명과정:

모체가 되는 탄화수소를 찾는다: 가장 긴 탄소 사슬이 모체가 되며 길이가 같은 사슬이 존재하면 곁가지가 많은 것을 선택
가지가 가장 가까운 쪽에서부터 탄소에 번호를 매긴다.

치환기의 위치에 따라 번호를 매긴다. 동일한 탄소에 2개의 치환기가 있으면 같은 번호를 부여한다.

이름은 한 단어로 쓴다. 번호 뒤에는 -를 넣고 번호끼리는 콤마를 이용하여 분리시킨다. 2개 이상의 다른 곁사슬이 존재할 경우는 알파벳순으로 기술한다.

동일한 곁사슬의 경우는 접두사 (di-, tri-, tetra- 등)을 이용하나 알파벳순에 따르지 않는다.

Trans-1,2-dibromopentane

1-1. 치환기로 사용될 때의 명명: alkyl

수소기를 하나 떼어낸 상태로 존재하므로 여러 가지 다른 구조로 존재 (직접 그려보기 바람)

ethane: ethyl

propane: 2가지, propyl, isopropyl

butane: 4가지, butyl, sec-butyl (1-methylpropyl), isobutyl (2-methylpropyl), tert-butyl (1,1-dimethylethyl)

1-2. cycloalkane

cyclopropane, -butane, -pentane, -hexane, 등등

1-3. 다음 명칭의 구조를 직접 그려보아라.

methylcyclopentane

1,2-dimethylcyclopentane

1-ethyl-2-methylcyclopentane

2. 알켄의 명명법

이중결합을 가지고 있어 알칸보다 수소수가 적다. 따라서 불포화되었다고 하며 C_2H_4 의 기본적인 화학식을 가진다.

명명 1단계: **이중결합을 포함하는** 가장 긴 탄소사슬이 모체가 된다. 접미사 -ene 를 붙인다.

명명 2단계: 이중결합에 가까운 끝에서부터 탄소에 번호를 붙인다. 이중결합이 동일한 거리에 있으면 첫 번째 치환기가 빠른 쪽에서부터 매긴다.

명명 3단계: 전체를 명명한다. 우선 치환기를 알파벳 순으로 적고 번호를 매긴다. 이중결합이 한 개 이상 있을 경우는 각 이중결합의 위치를 표시하고 -diene, -triene 등의 접미사를 붙인다.

1-butene

2-methyl-1-butene

2-methyl-1,3-butadiene

시클로 알켄의 경우도 비슷하다. 다만 출발점은 이중결합이 C1과 C2가 되도록 명명한다.

3-methylcyclopentene (1번 위치에 이중결합 3번에 methyl 기)

1,3-cyclohexadiene

몇가지 일반명으로 사용되는 것들은 자주 등장한다:

ethylene (ethene)

propylene (propene)

isoprene (2-methyl-1,3-butadiene)

vinyl (ethenyl): vinyl chloride (chloroethene).

allyl (3-propenyl): allyl chloride (3-chloropropene)

3. 방향족 화합물의 명명

몇가지 자주 사용되는 일반명을 암기하라.

benzene
benzaldehyde
benzoic acid
phenol
toluene

단일 치환된 벤젠 유도체들은 벤젠을 모체로 하여 체계적으로 명명한다.

bromobenzene
nitrobenzene
ethylbenzene

이치환 벤젠은 ortho-, meta-, para- 등의 접두사를 이용하여 명명한다.

ortho-dichloro-benzene
m-bromochlorobenzene (note alphabetical order)

치환기가 2개 이상인 경우는 각 치환기의 위치에 번호를 매기되 가능한 낮은 숫자가 되도록 한다. 치환기의 순서는 역시 알파벳 순으로 적는다.

1,2,4-trimethylbenzene

모든 일치환 방향족화합물들은 모체로 사용될 수 있다.

3,5-dichlorotoluene

치환기로 사용될 때: aryl group

phenyl group과 benzyl group의 구분

phenyl: C_6H_5-
benzyl: $C_6H_5CH_2-$

benzyl chloride
2-phenylpentane = 2-pentylbenzene

4. 할로겐화 알킬 명명

알칸과 동일한 방법으로 명명하되 할로겐을 치환체로 생각하면 된다.

1단계: 가장 긴 사슬을 찾아 모체로 명명한다. 다중결합이 존재하면 포함되어야 한다.

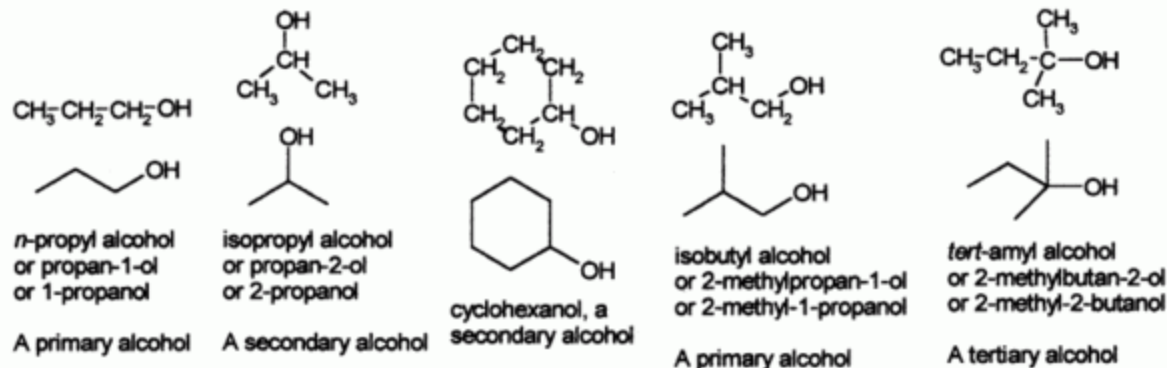
2단계: 치환체가 빠른 숫자가 되도록 탄소사슬에 번호를 매긴다. 각 치환체에 번호를 매긴다. 양쪽 끝에서 같은 위치에 치환기가 있으면 알파벳 순위가 우선인 것부터 번호를 매긴다.

3단계: 치환체를 알파벳 순으로 나열하면서 명명하되, 동일한 경우 di-, tri- 등의 접두어를 사용한다.

2-methylpentane

3-bromo-1-chlorobutane

2,2-dimethylbutane



5. 알콜, 에테르 및 페놀의 명명

자주 등장하는 알콜:

methanol

ethanol

1-propanol (*n*-propyl alcohol), 2-propanol (isopropyl alcohol)

1-butanol (*n*-butyl alcohol), 2-butanol (sec-butyl alcohol), 2-methyl-1-propanol (isobutyl alcohol),

2-methyl-2-propanol (ter-butyl alcohol)

하나 이상의 hydroxyl group을 가진 알콜

ethylene glycol = 1,2-ethanediol

glycerol (glycerine) = 1,2,3-propanetriol

알콜은 수산기를 가진 탄소에 몇 개의 치환기가 붙어있느냐에 따라 1, 2, 3차로 구분된다.

1단계: 수산기를 포함하는 가장 긴 탄소사슬을 모체로 선택하여, -이을 붙인다.

2단계: 수산기가 보다 가까이 있는 끝에서부터 번호를 매긴다.

3단계: 모든 치환기에 번호를 매기고, 알파벳 순으로 명명한다.

몇가지 일반명으로 불리는 알콜들도 있다.

2-chloroethanol

cyclobutanol

페놀은 고유명칭으로, 또는 수산기를 가진 방향족 화합물들을 지칭하는데 사용된다. 이때 모체로 사용된다. 그러나 카르복시산, 알데히드, 케톤 등과 함께 존재할 때는 이것들에 우선권이 주어진다.

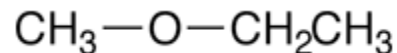
p-chlorophenol
2,4,6-tribromophenol
m-hydroxybenzoic acid
p-hydroxybenzaldehyde

***Thiols: the sulfur analogs of alcohols and phenols

methanethiol
1-butanethiol
thiophenol

에테르의 명명은 두 개의 유기화합물잔기를 표시하면서 "ether"란 단어를 추가한다. 하나 이상의 에테르 결합이 존재하거나, 다른 작용기가 있으면 알콕시 치환기로 간주한다.

ethylmethyl ether
diethyl ether
diphenyl ether
2-methoxypentane
2-methoxycyclohexanol



cyclic ethers: epoxides

ethylene oxide
tetrahydrofuran
tetrahydropyran

6. 알데히드와 케톤의 명명

알데히드를 포함하는 가장 긴 탄소사슬을 모체로 하며, 작용기 탄소는 1번이 된다. 알데히드기는 탄소사슬의 중간에는 **절대로 나타날 수 없다**. 해당되는 알칸명의 어미에 -al을 붙인다.

methanal = formaldehyde

ethanal = acetaldehyde

고리에 aldehyde 기가 붙은 경우는 접미어 carbaldehyde를 사용한다.

benzaldehyde = benzenecarbaldehyde

케톤도 작용기를 포함하는 가장 긴 알칸에 -one를 붙인다. 알데히드기와는 달리 케토기는 항상 탄소사슬의 중간에 나타날 수 밖에 없다. 케토기의 번호는 가장 가까운 말단에서부터 매긴다.

propanone = acetone

3-pentanone = diethyl ketone

cyclohexanone

acetophenone = methyl phenyl ketone

만일 -COR 기를 치환기로 취급할 때는 acyl (알킬을 의미)이라는 용어를 사용한다 (ex. acetyl, formyl, 등). 방향족인 경우는 aroyl을 사용한다 (ex. benzoyl).

이중 결합으로 결합된 산소를 치환기로 표시할 때는 접두어로 oxo-라고 쓴다.

몇가지 알데히드와 케톤은 일반명이 널리 쓰인다. 이들은 반드시 암기하여야만 한다.

7. 카르복시산의 명명

카르복시산 (RCOOH): 단순한 카르복시산은 어미에 $-\text{oic acid}$ 를 붙인다. 우리말로로는 해당 알칸명의 어미에 '산'을 붙인다. 카르복시산 탄소는 중간에 올 수 없으므로 그 원자는 항상 1번이 되므로 번호를 부여하지 않는다.

고리에 카르복시기가 결합된 경우는 $-\text{carboxylic acid}$ 를 붙인다. 이때도 1번 탄소가 되므로 번호를 부여하지 않는다.

2-bromopropanoic acid (α -bromopropionic acid)

3-hydroxybutanoic acid (β -hydroxybutyric acid)

일반명으로 불리는 카르복시산들의 명칭은 암기해두어야 한다

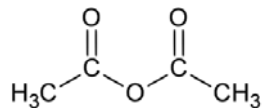
(acetic, propionic, butyric, oxalic, malonic, succinic, benzoic)

산할로겐화물 (RCOX): 먼저 아실기를 나타내고 해당하는 halide를 명명한다. 아실기는 $-\text{ic acid}$ 대신 $-\text{yl}$ 로 바꾸고, $-\text{carboxylic acid}$ 는 $-\text{carbonyl}$ 로 명명한다. 우리말로로는 '할로겐화 아실'이라 부른다.

formyl chloride (acetyl, propanoyl, benzoyl)

산무수물 (RCOOCOR): 간단한 카르복시산에서 유래한 대칭적 무수물은 acid를 anhydride로 바꾸어 부른다. 우리말로로는 '산' 뒤에 '무수물'을 붙인다. (acetic acid의 산무수물은 acetic acid 두 분자에서 물이 빠져나가면서 이종의 ester 결합을 이룬 것으로 acetic anhydride라 부른다)

acetic anhydride



아미드 (RCONH_2): 치환되지 않은 $-\text{NH}_2$ 기를 가진 아미드는 $-\text{oic acid}$ 또는 $-\text{ic acid}$ 어미를 $-\text{amide}$ 로 바꾸어 부르고, $-\text{carboxylic acid}$ 는 $-\text{carboxamide}$ 로 명명한다. 만일 질소원자에 알킬기가 치환되었을 경우는 먼저 치환기를 나타낸 후 명명한다 (단백질에서 아미노산 간의 amide 결합은 peptide 결합). 그리고 치환기 앞에는 ' N -'을 붙여 질소에 결합되어 있음을 표시한다 (N -methylpropanamide). 치환기를 추가로 가지는 경우는 ' N,N -'으로 표기한다. 다른 위치의 질소에 치환기가 있는 경우는 N,N' -로 표시한다.

formamide (methanamide)

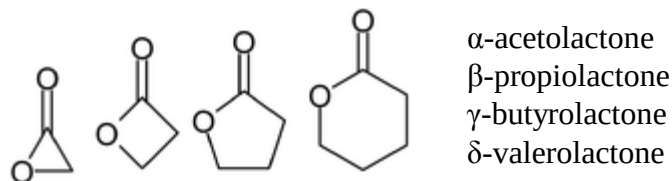
acetamide (ethanamide)

N,N -dimethylformamide

에스테르 (RCOOR'): 먼저 산소에 결합한 알킬기를 치환기로 표시하고 해당하는 카르복시산을 $-\text{ate}$ 로 바꾸어 부른다. 우리말로 '-산 알킬'이라 부른다.

methyl acetate

phenyl acetate



***cyclic ester = lactone

니트릴 ($\text{R-C}\equiv\text{N}$): 작용기가 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 인 화합물을 니트릴이라 부른다. 니트릴 탄소가 1번이 되며, 알칸명에 $-\text{nitrile}$ 을 붙여서 부른다.

$\text{R-C}\equiv\text{N}$ (nitrile or cyanide)

acetonitrile

8. 아민의 명명

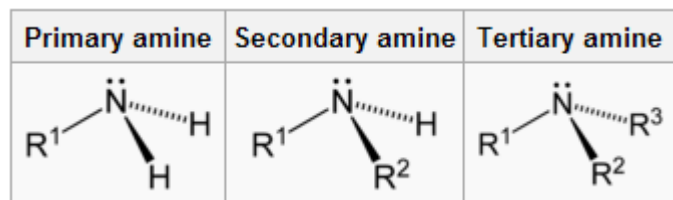
일차 아민은 다른 작용기가 없는 경우 유기치환체의 어미에 -amine을 붙여 표시한다. 다른 작용기가 있는 경우는 -NH₂를 아미노 치환체로 취급한다.

ammonia

primary amine

secondary amine

tertiary amine



대칭적인 이차 또는 삼차 아민은 알킬기 앞에 di- 또는 tri-를 붙여 명명한다. 비대칭적인 경우는 가장 긴 유기원자단을 모체로 하고 다른 것들은 N-치환체의 일차 아민으로 명명한다.

ethylamine (primary)

diethylamine (secondary)

triethylamine (tertiary)

benzeneamine = aniline

다른 작용기들이 존재할 때는 amino 기는 치환기로 명명된다.

3-aminobutanoic acid

1-amino-3-pentanone

9. Heterocycles

이종원자고리 아민 (heterocyclic amine)은 고리에 질소를 포함한 화합물이다. 이들은 고유한 기본명을 가지며, 모든 경우에 질소원자는 1번이 된다. (그 구조와 이름을 외워두자. 이들은 생물학적으로 중요한 화합물들의 기본구조이다; pyridine, pyrrole, quinoline, imidazole, indole, pyrimidine)

9-1. 6-membered heterocycles

pyridine은 방향족성 이종육원자 고리로 그 치환된 화합물은 vit. B6에 속하는 pyridoxal과 같은 중요한 화합물을 구성한다. 나머지도 마찬가지이다.

quinoline
pyrimidine
pyrazine

9-2. 5-membered heterocycles

pyrrole은 아민이면서 콘쥬게이션 디엔으로 방향족성이다. 따라서 pyrrole은 치환반응이 일어나며 치환된 pyrrole은 heme과 같이 생물학적으로 중요한 화합물들의 구성요소로 작용한다.

furan
thiophene
imidazole
thiazole

9-3. fused-ring 5-membered heterocycles

indole: benzene ring fused to C2-C3 bond of pyrrole
tryptophan

purine: pyrimidine ring fused to an imidazole ring

식물이나 동물에는 매우 다양한 아민류들이 존재한다. 모르핀과 같이 천연 아민류는 alkaloid라고 불리며, 한때 vegetable alkali라고도 불리었다.