

유기화합물 명명법

목 차

1. 유기명명법의 역사
2. 명명법과 관련된 술어
3. IUPAC 명명법의 변화
4. IUPAC 명명체계
 - 4.1. 일반적 명명법 과정
 - 4.2. 일반적인 규약
5. 비고리형 (acyclic, 사슬형) 탄화수소의 명명법
 - 5.1. 알케인 (Alkane)
 - 5.1.1. 명명하는 절차
 - 5.1.2. 번호 매김
 - 5.1.3. 탄화수소 치환체 명명법
 - 5.2. 알킬 (alkyl)과 알칸일(alkanyl)
 - 5.2.1. 알킬기 (Alkyl) 명명법
 - 5.2.2. 알칸일 (Alkanyl) 명명법
 - 5.3. 가지 달린 사슬형 포화 탄화 수소
 - 5.4. 불포화 탄화수소
 - 5.4.1. 이중결합을 가지는 불포화 탄화수소 (알켄, alkene)
 - 5.4.2. 삼중결합을 가지는 불포화 탄화수소 (알카인, alkyne)
 - 5.4.3. 이중결합과 삼중결합 모두 다 포함하는 불포화 탄화수소
 - 5.5. 곁가지를 가진 비고리형 불포화 탄화수소
 - 5.5.1. 2가 이상의 원자가를 가지는 기
 - 5.6. 단일고리형 탄화수소
 - 5.6.1. 곁가지가 없고 포화된 단일 고리형 탄화수소 (사이클로알케인, cycloalkane)
 - 5.6.2. 곁가지를 가진 포화 단일 고리 탄화수소류
 - 5.6.3. 치환체로서의 단일 고리 원자단 (monocyclic group)의 명명
 - 5.7. 다리 걸친 탄화수소 (Bridged hydrocarbon)
 - 5.8. 스피로 고리 탄화수소 (Spiro hydrocarbon)
 - 5.9. 방향족 탄화수소 (아렌) 명명법
 - 5.9.1. 단일고리형 방향족 탄화수소
 - 5.9.2. 치환된 방향족기
 - 5.9.3. 벤자인 (Benzene)
 - 5.9.4. 방향족의 고리 집합체
 - 5.9.5. 결합된 여러 고리형 방향족 (Fused Aromatic Polycycle)
 - 5.9.5.1. 지시 수소 (Indicated Hydrogen)
 - 5.9.5.2. 번호 매김
 - 5.9.5.3. 수소화된 화합물
 - 5.9.5.4. 방향족에서 유도되는 기의 이름
 - 5.9.6. 고리 집합체(Ring Assembly)
 - 5.10. 헤테로고리계 화합물
 - 5.10.1. 대체 명명법 (Replacement Nomenclature) 혹은 "아" 명명법 ("a" Nomenclature)
 - 5.10.2. 한퀴-비드만 명명법 (The Hantzsch-Widman Nomenclature)
 - 5.10.3. 흔히 사용하는 헤테로 고리 관용명
 - 5.10.4. 지시 수소 (indicated hydrogen)
 - 5.10.4.1. 지시 수소를 가지는 헤테로 고리 화합물
 - 5.10.4.2. 일부만 불포화된 헤테로 고리의 명명법
 - 5.10.5. 헤테로 고리 케톤의 명명 순서
 - 5.10.6. 두고리 결합 락톤 화합물의 헤테로 결합 고리의 명명
 - 5.10.7. 헤테로 결합고리의 명명법
 - 5.10.7.1. 일차부착성분[결합 자리]모체 성분
 - 5.10.7.1.1. 모체 성분
 - 5.10.7.1.2. 일차 부착 성분
 - 5.10.7.2. 결합 자리 표기법
6. 알코올과 싸이올의 명명법
 - 6.1. 알코올
 - 6.2. 알코올의 음이온
 - 6.3. 싸이올
 - 6.4. 싸이올 음이온
7. 에터
8. 설파이드 (황화물) (Sulfide)
9. 카복실산 등의 유기산의 명명법
 - 9.1. 단순한 사슬형 카복실산
 - 9.1.1. 허용되는 관용명
 - 9.2. 치환된 카복실산
 - 9.3. 싸이오카복실산
 - 9.4. 칼코젠산 (Chalcogen acid)
 - 9.5. 인의 산 (Phosphorus acid)
 - 9.6. 퍼옥시산 (Peroxy acid)
 - 9.7. 이머드산 (Imidic acid), 하이드라존산 (Hydrazonic acid) 및 하이드록삼산(Hydroxamic acid)
 - 9.7.1. 하이드록삼산
10. 유기산 유도체: 산 무수물 (acid anhydride), 아실 할라이드 (acyl halide), 에스터 (ester) 및 산 염 (salt)
 - 10.1. 카복실산 무수물 (Carboxylic acid anhydride)
 - 10.2. 대칭형 무수물
 - 10.3. 혼합산 무수물
 - 10.4. 폴리카복실산의 무수물
 - 10.5. 아실 할라이드 (할로젠화 아실) (Acyl halide)
 - 10.6. 산염 (Acid Salt)
11. 에스터 (Ester)
12. 락톤과 락타이드

13. 아민 (Amine)
 - 13.1. 일차아민 (Primary amine)
 - 13.2. 2차 및 3차 아민
14. 알데하이드 (Aldehyde), 케톤 (ketone) 및 아세탈 (acetal) 등 유도체
 - 14.1. 알데하이드
 - 14.1.1. 허용되는 관용명
15. 아세탈 (Acetal) 및 헤미아세탈 (Hemiacetal)
16. 케톤 (ketone)
 - 16.1. 고리형 케톤
 - 16.2. 퀴논 (Quinone)
 - 16.3. 기의 관용명
17. 케텐 (Ketene)
18. 나이트릴 (Nitrile) 및 아이소나이트릴 (Isonitrile) 및 관련 화합물
 - 18.1. 나이트릴 화합물 (Nitriles)
 - 18.2. 시안화 (Cyanide) 및 이와 관련된 원자단
 - 18.3. 산화 나이트릴 (Nitrile oxide)
19. 라디칼, 이온 및 라디칼-이온 (Radical, ion, and radical-ion)
 - 19.1. 카벤등의 2가 라디칼
20. 입체화학의 명명법
 - 20.1. 투영법
 - 20.2. 입체화학 관련 용어
 - 20.3. E/Z 표기
 - 20.3.1. CIP 우선순위 (Cahn-Ingold-Prelog priority sequence)
 - 20.4. 피셔-로자노프 (Fischer-Rosanoff) 표기법 (or Rosanoff 표기법)
 - 20.5. R/S 표기법
 - 20.5.1. 카이랄 중심
 - 20.5.2. 카이랄축 (chiral axis), 카이랄평면 (chiral plane) 및 나선성 (helicity)
 - 20.5.2.1. 카이랄 축 (chiral axis)
 - 20.5.2.2. 카이랄 평면
 - 20.5.2.3. 나선성 (helicity)
 - 20.6. 위치 배열 (configuration)과 회전 배열 (conformation)
 - 20.6.1. 위치 배열 (configuration)
 - 20.6.2. 회전 배열 (conformation)
21. 명명법의 실제
 - 21.1. 주원자단
 - 21.2. 모체 구조
 - 21.3. 명명법의 보기
22. 20개 아미노산 (Amino acid) 이름과 약자 (세글자, 한글자)
23. 탄수화물의 명명법
 - 23.1. 관용명, 위치입체배열 (이벨릭체)의 접두사와 약자
24. 매크로분자 (고분자)의 명명법
 - 24.1. 원료기준 명명법
 - 24.2. 구조기준 명명법
 - 24.3. 정규 한가닥 (Regular single-strand) 유기 고분자
 - 24.4. 정규 두가닥 고분자 (double stranded polymer)
 - 24.5. 고분자 화합물의 명명법 완성 차례

1. 유기명명법의 역사

화합물의 이름을 나타내는 명명법은 일반적인 언어와 마찬가지로 의사 소통에 사용되기 때문에 체계적인 문법을 가지고 있다. 그러나 유기화합물이 처음 알려지기 시작했을 때는 새로운 화합물을 발견한 사람들이 임의로 이름을 붙이는 것이 일반적이었다. 이러한 이름은 화합물 구조를 모른 채 사용한 것이다. 예를 들면, 알코올은 아랍어로 분말 (al-kuhul, powder)라는 어원에서 파생하였다. 물질의 정수를 얻기 위하여 여러 정제 과정을 통하여 얻어지는 것이 분말이었기 때문이라고 한다. 이러한 이유로 초기에 알코올은 순수한 정수를 의미하게 되었다. 이후에 포도주의 정수를 알코올이라 부르게 되었다. 현재도 술을 주정(酒精, spirit)이라고 부르는 것도 같은 이유이다. 프랑스 화학자 Jean-Baptiste Dumas와 Eugene Peligot는 메탄올의 화학 구조를 결정 한 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 hyle는 실제로는 나무 조각을 가리키며, 나무를 의미하는 xylo-의 오류이었다. 메틸이라는 용어는 약 1840년경 메틸렌으로부터 파생하게 되어 메틸 알코올에 적용된 것이다. 프랑스 화학자 Regnault가 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. 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 그 이전부터 acetone (독일에서는 이전에 Keton으로 사용)에 사용됨에 따라 탄화수소 명명법에서 -une와 함께 사라졌다.

알케인 이름의 역사를 다시 한번 살펴 보면, 알케인 alkane은 알킬 alkyl + -에인 -ane이다. 알킬은 alk (독일어 alkohol 알코올) + -yl의 합성어이다. Hofmann은 알케인의 동족 계열의 이름을 methane, ethane, propane, quartane으로 명명하였다. Methane은 methylene으로부터의 meth- + -ane이었고 ethane은 ether + -yl인 ethyl에서 파생한 eth- + -ane이다. Propane은 propionic acid (Demas가 지방산의 가장 작은 산으로 생각하여 그리스어 proto (첫번째, first) + pion (지방, fat)의 합성한 단어)에서 파생한 propyl의 prop- + -ane이다. Ether라는 말은 etho (빛난다, shine)라는 어원에서 쾌청한 날씨등을 말하는 데 사용하였지만 점차 일반적으로 투명하고 휘발성 물질이라는 의미로 사용하게 된 것이다. 이로부터 ethylene이라는 단어가 사용되고 다시 ethyl이라는 단어도 ethylene으로부터 파생되었다. Butane은 버터가 부패되어 생성되는 뷰티르산 butyric acid (Chevreul이 버터의 라틴어 *butyrum* + 산을 의미하는 -ic을 합쳐 만든 단어 butyric)으로부터 파생한 butyl의 but- 와 -ane을 합침에 따라서 quartane이라는 이름이 사라졌다. 초기에 탄소 4개부터는 배수사의 라틴어를 사용하였지만 이후에 대부분 그리스어의 배수사로 대체되었다.

에스터 (Ester)라는 이름은 *essig*(독일어 식초) 와 에터 *ether*의 합성 축약어이다. 알데하이드라는 말은 독일의 Liebig 가 alcohol 을 산화하여 얻어 탈수한 알코올 (alcohol dehydrogenatum "dehydrogenated alcohol")이라는 라틴어를 합성 축약하여 만들었다.

19세기에 들어서서 유기화학이 본격적으로 발전하게 되면서 화합물의 종류가 급속하게 늘어나게 되어 분자의 구조를 바탕으로 하는 체계적인 명명법이 필요하게 되었다. 이러한 필요성에 따라 1892년에 9개국 34명의 화학자가 모여 지방족 사슬에 대하여 가장 긴 사슬을 모체 구조로 하고 작용기를 접미사로 사용하는 Geneva 규약을 만들었다. 1920년에 IUC (international union of chemistry)가 발족하여 유기 분과에서 68개의 규약을 만들었다. 이후 1947년 IUC는 IUPAC (international union of pure and applied chemistry)으로 바뀌어 1949년 이후 지속적으로 규약을 만들어 1979년 종합하여 A, B, C, D, E, F, 및 H 장의 규약을 발간하였다. 각각의 내용은 A장 탄화수소류, B장 기본 헤테로고리계, C장 탄소, 수소, 산소, 질소, 할로젠, 황, 셀레늄 및 텔루륨을 포함하는 특성기, D장 탄소, 수소, 산소, 질소, 할로젠, 황, 셀레늄, 텔루륨 이외의 원소를 포함하는 유기화합물, E장 입체화학, F장 천연물 및 관련된 화합물들의 명명, H장 동위원소 변형된 화합물이다. 1993년이 이전 명명법에 대한 일부 수정을 하여 수정판인 R장 (recommendation, 권장)이 발간되었다. 1998년에는 접합고리와 스파이로고리에 관한 명명법 FR 장이 발간되었고 2004년에는 우선명 (Preferred IUPAC Name, PIN)에 관한 안건이 발간되었다. IUPAC 명명법은 한 화합물을 명명하는 데 관철에 따라 몇 가지 이름이 존재할 수 있기에 현재는 전반적으로 우선권을 부여하는 우선 IUPAC 이름 (PIN, Preferred IUPAC Names)에 관한 새로운 규칙을 제정 중이다. 앞으로는 PIN으로 이전 이름을 대체할 것이다

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)와 이름을 부여하여 명명법에서 파생할 수 있는 모호성을 피함으로 법적으로 사용하는 데 유용성을 부여하고 있다. CAS와 같이 IUPAC 명명법을 기초로 한 Beilstein 명명법을 독일에서 사용하고 있다.

많은 유기화학 교과서에서 채택하고 있는 IUPAC 명명법은 1979년도 규약이고 일부는 1993년도 권장 사항을 사용하고 있지만 점차 1993년 권장 사항으로 바뀔 것이다. 특히 컴퓨터에서 사용하는 명명법은 일찍이 1993년도 권장 사항인 PIN 명명법을 사용하고 있다. 새로운 명명법에서의 가장 큰 변화는 알킬 명명법에서 우선 명명법으로 일관된 명명법으로 바꾼 것이다.

IUPAC 우선 명명법인 PIN 에 관한 배경은 다음과 같다. 1993 년 이전까지 IUPAC 에서 개발되고 권장하였던 명명법은 주제의 역사적 개발에 맞추어 혼동이 없는 명확한 명명법에 중점을 두었다. 그러나 정보의 확산과 인간 활동의 글로벌화로 인하여 법적인 문제, 즉 특허에서의 표기 문제, 수출입 규제, 환경과 건강 및 안전 정보 등의 문제에서 중요성을 가지는 공통적인 언어가 필요하게 되었다. 따라서 1993 년 IUPAC에서는 한 구조에 관하여 단 하나만의 이름을 권장하기 보다는 한편으로는 일상 생활의 화학과 과학계 전반에 걸쳐 사용하는 명명법의 다양성과 적응성을 유지하면서도 PIN 을 배정하는 규정을 개발하였다. PIN의 존재는 특정 의미를 설명하기 위하여나 일련의 화합물에 공통적인 구조 특징을 강조하기 위하여 다른 이름을 사용하는 것을 막지는 않는다. PIN 은 PIN 명명법에 속한다. 혼동을 주지 않으며 권장하는 IUPAC의 원리를 따르는 한, 이러한 PIN 과 다른 IUPAC 이름은 **일반 IUPAC 이름 (general IUPAC name)**이라고 부른다. PIN 은 계속적으로 진화하고 있는 유기 명명법에 기여하도록 개념이 개발되었다. 2004 년 권장 PIN 명명법은 이전 1973 년 명명법과 1993 년 권장 사항의 원리, 규칙 및 규약등을 망라하여 확장하였으며 몇 가지 절에서는 수정을 가하여 전체적인 체계와 일관성을 유지하게 하였다.

현재 사용하고 있는 유기화합물의 명명법은 일부 관용명을 사용하지만 주로 화합물의 구조에 기초한 이름을 사용하여 구조에 대한 정보를 준다. 전기적으로 양성과 음성을 가진 원자 또는 원자단이 결합한 염과 같은 구조를 갖는 경우를 제외한 대부분의 유기화합물의 이름은 하나의 단어로 표시된다. 유기화합물의 이름에는 모체가 되는 부분의 이름, 치환된 작용기의 이름과 치환기가 결합된 위치를 표시하는 숫자로 구성된다. 다음에 이러한 명명법에 사용하는 술어를 간단히 설명하고 자 한다.

2. 명명법과 관련된 술어

모체 화합물 (Parent compound): 주사슬 혹은 고리계로부터 수소원자를 다른 원자나 원자단으로 치환하여 파생되는 이름.

보기: 메틸사이클로헥세인은 모체 화합물이 사이클로헥세인이 된다.

계통명 (systemic name): 수접두사가 존재하지 아니건 간에 전적으로 특별히 만들어지거나 선택된 음절로 구성된 이름

보기: 펜테인(pentane), 옥사졸(oxazole)

관용명 (trivial name): 계통명에서 전혀 사용하지 않는 이름

보기: 우레아 (urea), 잔토피일(xanthophyll)

반계통명(semisystematic name) 혹은 반통상명(semitrivial name): 일부만 계통적인 의미로 사용한 이름으로 유기화학에서 사용하는 대부분의 이름이 여기에 해당된다.

보기: 메테인 (-에인, -ane이 계통적 부분임), 뷰트-2-엔(-ene), 칼시페롤 (-ol), 아세트 (-one)

치환명 (substitutive name): 수소를 하나의 원자단이나 다른 원소로 치환한 이름으로 기-작용기 이름 대신 PIN (IUPAC 우선명, IUPAC preferred name)으로 사용한다.

보기: 1-메틸나프탈렌(1-methylnaphthalene, 펜탄-1-올 (pentan-1-ol))

대치명 (replacement name): C, CH 혹은 CH₂를 헤테로 원자로 대치하는 이름이거나, 산소를 황(혹은 셀레늄이나 텔루륨) 으로 치환한 것을 표시하기 위한 -싸이오를 포함하는 이름

보기: 2,7,9-트리아자페난트렌 (2,7,9-triazaphenanthrene), 싸이오피란 (thiopyran)

삭제명(subtractive name): 특정한 원자단을 제거한 이름으로 접두사 혹은 접미사를 사용한다.

보기: 접두사: 데- (de-) (데옥시리보스, deoxyribose), 노(nor-) (노에피네프린, norepinephrine)

접미사: 수소원자수가 감소하는 -엔 (-ene), -아인 (-yne) 끝나는 지방족 탄화수소 알킬기의 -일 (-yl) 등 (헥스-2-엔), 메틸 (methyl) -이드 (acetylenide) -아테 (산의 음이온으로 H⁺의 손실을 의미함)

기-작용기 이름 혹은 작용기 부류 이름 (radicofunctional name or functional class name): 기와 작용기 부류를 합쳐서 형성된 이름으로 IUPAC에서는 치환명명법을 권장한다. IUPAC에서는 앞으로 점차 작용기 부류 이름을 축소하는 방향으로 명명법을 개선할 것을 목표로 하고 있다.

보기: 다이에틸 에터 (diethyl ether, PIN 치환 명명법은 에톡시에테인 ethoxyethane, CAS 이름은 옥시비스에테인 oxybisethane), 에틸 알코올, 염화 아세틸

접속명 (conjunctive name): 두 개의 분자를 합쳐서 형성한 이름으로 두분자의 각각의 수소 한 개를 제거하여 연결한 것으로 간주한다. IUPAC PIN에서는 허용하지 않는다.

보기: 사이클로헥세인에탄올 (IUPAC: 사이클로헥실에탄올), 벤젠아세트산 (IUPAC: 페닐아세트산)

접합명 (fusion name): 두 개 이상의 공통 원자에서 두 개 이상의 고리계가 접합되었음을 표시하는 이름으로 고리들이 “오, o” 를 사용하여 서로 연결되었음을 표시한다.

보기: 벤조퓨란 (benzofuran)

한취-비드만 이름 (Hantzsch-Widman name): 한취와 비드만의 제안에 따른 헤테로고리계 명명법으로 한 개 이상의 헤테로 원자를 표시하는 전치사와 고리 크기와 불포화도를 표시하는 접미사로 구성되어 있다.

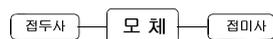
보기: 트리아졸 (triazole), 싸이아졸(thiazole)

3. IUPAC 명명법의 변화

일반적으로 IUPAC 명명법은 시대에 따라서 점차 변하고 있다. 과거에 만들어진 명명법은 일반적 IUPAC 명명법 (general IUPAC nomenclature)으로 부른다. 일반적 명명법은 한 화합물에 관하여 단 한 개의 이름이 주어지지 않으며 관점에 따라서 몇 개의 이름도 가능하다. 이러한 문제는 특히 법적인 문제 및 국제 통상에서 문제가 될 수 있어 1993년에 권장 유기 명명법을 시작으로 IUPAC 선호 이름 (PIN, preferred IUPAC name)으로 하나의 화합물에 하나의 이름을 부여하기 시작하였으며 점차 특성기를 중심으로하는 작용기 부류명은 계속적으로 제거하는 방향으로 명명법은 진화하고 있다. 최근에 일어난 커다란 변화는 알킬명명법에서 알칸일 명명법으로 PIN이 된 것이다. 이러한 변화는 명명법에 관련된 소프트웨어에 반영하여 주변에서 사용하고 있다. 과거 PIN 이전의 명명법을 사용하는 것이 틀렸다고 하지는 않지만 점차 PIN 명명법을 사용하는 것을 권장한다.

4. IUPAC 명명체계

IUPAC에서 명명하는 화합물의 이름은 일반적으로 다음과 같이 세 부분으로 나눌 수 있다.



접두사(prefix)는 치환체를 표시하며, 치환체란 모체 화합물의 수소원자를 대치한 원자 혹은 원자단을 말한다. 모체 구조는 (parent 혹은 stem)은 주사슬 (principal chain) 혹은 주고리계를 의미한다. 이러한 모체명이 IUPAC 명명법의 핵심 개념을 구현하고 있다. 마지막으로 접미사의 역할은 화합물의 부류 (class)를 의미하는 주원자단을 표시하는 것이다. 화합물의 부류는 특성기(characteristic group, 혹은 작용기, functional group)의 존재에 의하여 정해진다. 그러나 여러 개의 특성기가 존재하는 경우 가장 우선권이 높은 특성기가 주원자단이 되고 나머지 특성기는 치환체로서 접두사에 사용된다. 특성기는 메틸기 같이 탄소-탄소 결합으로 연결된 기를 제외한 OH, NH₂, COOH, 할로젠, =O, =N 등이 속한다. 특성기의 우선권은 IUPAC에서는 다음과 같다.

라디칼 > 음이온 > 양이온 > 쓰비티이온 > 카복실산 > 카복실산 유도체 (산무수물, 에스터, 카복실산 할라이드, 아마이드) > 나이트릴 > 알데하이드 > 케톤 > 알코올 > 하이드로과산화물 > 아민 > 에터

그러나 유의할 점은 치환명명법에서 어떤 특성기는 접두사나 접미사에 사용할 수 없고 단지 접두사로만 사용할 수 있다. 할로젠 (브로모, 클로로, 플루오로, 아이오도), 아지도, 나이트로 등이 이에 해당된다. 이외의 특성기가 접두사 및 접미사에 사용될 때 이름이 각각 달라진다. OH의 예를 들면, CH₃CH₂OH는 에탄올

(ethanol)이 되지만 HOCH₂CHO는 하이드록시아세트알데하이드(hydroxyacetaldehyde)가 된다. 다음의 표는 이러한 종류의 일부 특성을 표시하였다.

표1. 접두사와 접미사로 사용되는 특성기

종류	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-) 옥소 (Oxo-)	-카브알데하이드 (carbaldehyde) -알 (-al)
케톤 (Ketone)	-CO-	옥소(Oxo-)	-온 (-one)
알코올 (Alcohol)	-OH	하이드록시(Hydroxy-)	-올 (-ol)
싸이올 (Thiol)	-SH	머캡토 (Mercapto-)	-싸이올(-thiol)
아민 (amine)	-NH ₂	아미노 (Amino-)	-아민 (-amine)

주) 유기화합물에서 특별히 밝히지 않은 경우에 기호 R은 사슬 또는 고리형 탄화수소, 또는 헤테로고리 화합물에서 유도되는 1가의 작용기로 탄소 원자를 통하여 모체에 결합하고 있는 경우를 나타낸다. 한 분자에 서로 다른 작용기가 여러 종류 있을 경우에는 R, R', R'' 또는 R¹, R², R³ 등으로 구별해서 나타낸다. 이때 사용하는 접두어는 상첨자이다. 1993년부터는 IUPAC에서는 알케인에서 수소를 OH로 치환한 경우 이러한 알코올 (alcohol)을 알칸올 (alkanol)로 부른다. 마찬가지로 알케인에서 수소가 없어 유리 원자가 (free valence)를 가지는 기를 알킬 (alkyl) 대신 알칸일 (alkanyl)이라 부른다. 알칸일기의 명명법은 종래의 알킬기와 다르다.

4.1. 일반적 명명법 과정

1. 주어진 화합물의 부류를 정한다. 몇 가지의 부류가 겹치는 경우 우선권을 가지는 부류를 택한다. (보기: 탄화수소, 헤테로고리, 카복실산, 케톤, 할로젠 유도체 등) 일반적으로 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 고리와 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) (숫자 혹은 문자)와 구두점을 첨가한다. 위치표시자는 번호매기 규약을 따른다. 위치표시자는 아라비아숫자, 그리스어 (α, β 등), 로마자의 이탤릭 대문자로 사용하는 원소 기호 및 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.

4. 치환체 접두사, 삼입사, 접미사를 규정에 따라 배열하고 적절한 위치표시자와 함께 모체구조 이름에 접어 넣는다. 같은 종류의 치환체의 위치 번호는 점표로 표시하고 모든 위치 표시자는 하이픈으로 분리한다. 모든 접두사는 알파벳 순서로 배열한다. 전체 이름은 다음 순서가 된다. 접두사 > 모체(parent) 이름 혹은 모체 치환체 이름 > 어미(ending) (접미사, 작용기성-모체 이름 혹은 부류 이름)

CAS 명명법은 색인에 편리하게 사용하기 위하여 이름 성분의 순서가 IUPAC과 달라서 예를 들면 모체 이름 + 접미사 > 도치 점표 > 접두사가 된다. 보기: IUPAC 이름: 3-bromo-1,4-dichlorobutan-2-ol CAS 이름: 2-butanol, 3-bromo-1,4-dichloro-

5. 필요에 따라서 동위원소, 입체화학 표시자를 첨부한다.

4.2. 일반적인 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) (이전 명칭 (1973년 명칭)은 2-hexene), 사이클로헥스-2-엔-1-올 (cyclohex-2-1-ol) (이전 명칭 2-cyclohexen-1-ol)
- 점표, 마침표, 하이픈, 간격(space) 콜론과 세미콜론의 구두점을 사용하여 화학명의 모호함을 제거한다.
 - 점표:** 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
 - 간격(space):** 산과 염, 에스터, 산무수물, 카보닐 화합물과 케톤, 아세트알, 하이드라존 또는 옥심과 같은 유도체 할로젠과 유사 할로젠 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', 등의 수 접두사를 사용하고, 그렇지 않을 경우에는 그리스어와 라틴어에서 유래된 3-2 의 수 접두사를 사용한다. 원자단의 이름이 복잡할 경우에는 괄호 앞에 '비스-', '트리스-', '테트라키스-' 등의 배수접두사를 사용한다.
- **괄호:** 화합물 구조의 특정 부분을 명확히 알리기 위하여 소괄호(parenthesis), 중괄호(brace), 대괄호(bracket)를 사용한다. 복합 사용 순서는 소괄호, 대괄호, 중괄호가 된다. {[()]}
 - 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 스피어로 화합물에서 고리크기를 표시하기 위하여 사용한다. 또한 다리에 포함된 이중결합이나 접합고리계에서의 성분고리의 헤테로원자 같은 성분 구조 특성에 필요한 위치자를 표시하는 데 사용한다.

보기: 다이벤조[*b,e*]옥세핀 (dibenzo[*b,e*]oxepine), 바이사이클로[3.2.1]옥테인 (bicyclo[3.2.1]octane), 다이스파이로[5.1.7.2]헵타데케인 (dispiro[5.1.7.2]heptadecane), 4,4' - (1-((5-((4' -사이아노바이페닐-4-일)옥시)펜틸)옥시)카보닐)에테인-1,2-다일) 다이벤조산 (4,4' - (1-((5-((4' -cyanobiphenyl-4-yl)oxy)pentyl)oxy)carbonyl)ethane-1,2-diyl) dibenzoic acid), 4a,9a-뷰트[2]에노안트라센 (4a,9a-but[2]enoanthracene), 4*H*-[1,3]옥사싸이올롤[5,4-*b*]피롤 (4*H*-[1,3]oxathiolo[5,4-*b*]pyrrole).

- **이탤릭체**: 이탤릭체는 알파벳에 속하지 않는 문자를 표시하기 위하여 주로 사용한다. 이탤릭 소문자는 접합고리게 화합물명에서 접합 위치를 표시하거나 이치환벤젠 유도체에서는 *o*, *m*, *p*를 1,2 (*ortho*), 1,3(*meta*), 1,4(*para*) 대신 사용할 수 있지만 숫자 사용이 우선이다. *O*-, *M*-, *P*-, *S*- 같은 헤테로원자에 대한 결합을 표시하는 것과 *tert*-, *cis*-, *trans*-, *E/Z*, *R/S* 등은 이탤릭체를 사용한다. *n*-(normal, 결합지가 없다는 의미)는 IUPAC에서는 사용하지 않는다. 따라서 IUPAC명법에서는 *n*-펜테인은 사용하지 않는 이름이다. 유의할 점은 접두사 아이소 iso는 이탤릭체가 아니고 모체와 분리하여 사용하지 않는다.

5. 비고리형 (acyclic, 사슬형) 탄화수소의 명명법

5.1. 알케인 (Alkane)

탄화수소의 명명에서 포화 탄화수소는 알케인(alkane)이라고 부르기 때문에 접미사 -에인 (-ane)을 사용한다. 가지 달린 포화 탄화수소의 경우 가장 긴 끝은 사슬이 모체가 된다. 끝은 사슬 포화 탄화수소 탄소의 개수와 해당 화합물의 이름은 다음과 같다.

1. 메테인 (Methane)
2. 에테인 (Ethane)
3. 프로페인 (Propane)
4. 뷰테인 (Butane)
5. 펜테인 (Pentane)
6. 헥세인 (Hexane)
7. 헵테인 (Heptane)
8. 옥테인 (Octane)
9. 노네인 (Nonane)
10. 데케인 (Decane)
11. 운데케인 (Undecane)
12. 도데케인 (Dodecane)
13. 트라이데케인 (Tridecane).....
20. 아이코세인 (Icosane)
21. 헨아이코세인 (Henicosane)
22. 도코세인 (Docosane)

탄소 개수에 해당되는 이름은 주로 그리스어에서 유래되었으며 탄소개수 1-4에 해당되는 이름은 준통상명(semi-trivial name)에 해당된다. 탄소 5개 이상부터는 배수 음절을 사용한다. 배수 접두사로 1은 모노(mono) 혹은 헨(hen), 2는 다이 (di) 혹은 도 (do), 11은 헨데카 (hendeca), 30은 트리아이콘다 (triaconda) 등등이다. 노나와 운데카는 라틴어이고 나머지는 그리스어이다.

*20을 나타내는 접두사 아이코사는 예전에는 eicosa- 이었지만, 1979년 이후에는 IUPAC에서 사용하지 않기로 하였다. 그러나 CAS와 Beilstein에서는 여전히 사용하고 있다.

5.1.1. 명명하는 절차:

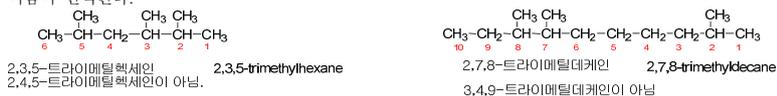
1. 끝은 탄화수소 사슬 (가지가 없는 사슬)의 모체명 붙이기
2. 모체 구조 번호 매기기
3. 치환체 접두사 붙이기
4. 끝까지 탄화수소 이름 붙이기가 된다.

모체 사슬의 명명법은 통상명 음절 '알카-' 혹은 배수 음절 + 포화를 나타내는 마지막 음절 -에인 (-ane)을 합쳐 사용한다. 배수 음절, 즉 탄소의 개수를 표시하는 음절은 다음과 같다.

음 절	탄소원자 개수
메트(메타)	meth(a)- 1
에트(에타)	eth(a) 2
프로프(프로파)	prop(a) 3
뷰트(뷰타)	but(a) 4
펜트(펜타)	pent(a) 5
헥스(헥사)	hex(a) 6
헵트(헵타)	hept(a) 7

5.1.2. 번호 매기기

탄화수소의 번호는 주 사슬의 한 끝으로부터 시작한다. 선택이 필요한 경우에는 번호매기기 규약을 적용한다 각 치환체는 한 개의 번호를 가지고 치환체의 번호는 가능한 가장 낮은 번호 (위치 표시자, locant)로 배정한다. 여러 위치 표시자는 쉼표로 각각 구별하고 위치 표시자 다음 하이픈으로 치환체 이름 바로 앞에 연결한다. 다음 보기에서 오른쪽 끝에서 번호가 시작하면 치환체 위치가 2,3,5가 된다. 그러나 왼쪽 끝에서 번호가 시작하면 치환체 위치가 2,4,5가 되어 번호는 2,3,5의 낮은 번호를 주는 오른쪽 끝에서부터 매기게 된다. 첫번째 번호는 다같이 2이지만 두번째 번호는 3과 4가 되어 3이 낮은 번호가 되어 2,3,5의 치환번호가 선택된다. 다음 2,7,8-트라이메틸데케인의 경우에는 3,4,9-치환체와 비교하여 첫번째 번호가 2가 3보다 낮은 번호가 되어 치환체 위치가 2,7,8되는 이름이 선택된다.

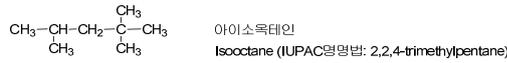


5.1.3. 탄화수소 치환체 명명법

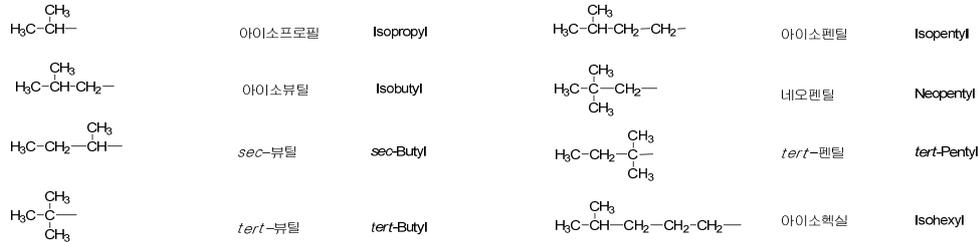
탄화수소 치환체는 알킬(alkyl) 혹은 알칸일(alkanyl)로 부른다. 1993년 이후부터 IUPAC은 알킬을 알칸일이라고 부른다. 2개 이상의 동일한 치환체는 다이 (2), 트라이 (3) 테트라(4) 등의 수접두사(numerical prefix) (혹은 배수 접두사, multiplicative prefix)을 붙인다. 복잡한 치환체는 비스(bis), 트리스(tris), 테트라키스(tetrakis), 펜타키스(pentakis) 등을 사용한다. 예를 들면 두개와 세개의 메틸 치환체는 각각 다이메틸, 트라이메틸 이된다. 이러한 배수 접두사는 알파벳 이름에 포함하지 않는다. 치환체는 모체명 앞에 위치하고 한 단어의 치환명을 가진다. 모든 치환체는 알파벳 순서로 배열한다.

보기: 4,5-다이에틸-2-메틸헵테인(4,5-diethyl-2-methylheptane) 3,3-다이메틸헥세인 (3,3-dimethylhexane), 5,5-비스(3-메틸부탄-2-일)노네인 5,5-bis(3-methylbutan-2-yl)nonane

2,2,4-트라이메틸펜테인이 된다.



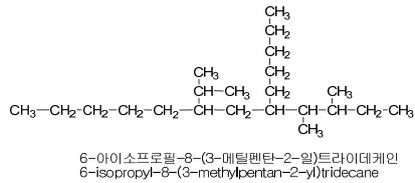
IUPAC에서는 다음 8개의 알킬기에 한하여 치환기가 없는 경우에 통상명을 인정하고 있다.



sec와 tert-는 각각 이차 (secondary) 와 삼차 (tertiary) 탄소를 의미한다. 탄소에 이웃한 탄소가 1개 존재하면 일차 (primary), 2개 존재하면 이차 (secondary), 3개 존재하면 삼차 (tertiary) 탄소라 부르는 관용에서 유래되었다. 이들의 접두사는 항상 이탤릭체로 사용되어야 한다. 이외에 곱은 사슬에 대하여 노말 (normal)에 해당되는 n- 이라는 접두사를 허용하지 않는다. Hexane이라고 하면 곱은 사슬인 n-hexane과 별개인 것으로 잘못 인식하고 있는 경우가 종종 있다.

알킬과 알칸일 명명법의 차이에 관한 다음 보기의 화합물의 이름은 이전에 사용한 알킬 명명법에 따르면 6-아이소프로필-8-(1,2-다이메틸뷰틸)트라이데케인 (6-isopropyl-8-(1,2-dimethylbutyl)tridecane)이 되지만 새롭게 알칸일 명명법에 따르면 6-아이소프로필-8-(3-메틸펜탄-2-일)트라이데케인 (6-isopropyl-8-(3-methylpentan-2-yl)tridecane)이 PIN이 된다.

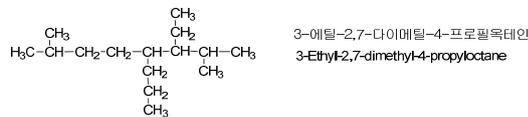
보기



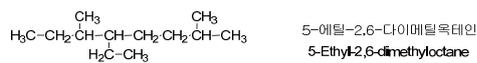
다음 우선 곁가지의 배열 순서와 번호 매김에 대한 우선성(priority)에 대하여 살펴보자. 곁가지 배열에 있어서 2가지 이상의 종류가 다른 곁가지가 있을 때 이들을 영어명의 알파벳 순으로 배열한다. 예를 들면, 에틸 (ethyl)은 메틸 (methyl) 보다 우선이 된다. 다이(di-) 트라이 (tri-) 등의 복수를 의미하는 배수접두사인 수사는 무시한다. 따라서 에틸(ethyl)이 다이메틸 (dimethyl) 보다 우선이 된다. 하이픈으로 연결된 이탤릭체 접두사는 무시한다. 유의할 점은 괄호 안에 사용하는 배수 접두사의 알파벳은 무시하지 않는다. sec-Butyl, tert-Butyl 은 b를 알파벳 첫글자로 간주한다. 접두사 sec와 tert는 문장의 첫부분에서도 대문자로 사용하지 않는다. 그러나 분리할 수 없는 접두사를 가지는 아이소프로필, 네오펜틸은 각각 i와 n을 알파벳 첫글자로 간주한다. 따라서 이것들은 문장의 첫부분에서 대문자로 사용한다.

번호 매김은 가장 긴 사슬은 한 끝으로부터 다른 끝까지 아라비아 숫자로 매기며 번호의 방향은 곁가지의 위치의 번호가 가장 낮은 번호가 되도록 한다.

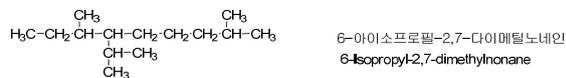
보 기:



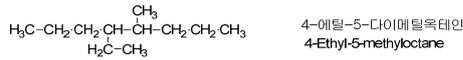
치환자리 번호는 2,3,4,7이 된다. 다른 방향은 2,5,6,7이 됨을 알 수 있다. 따라서 낮은 번호를 가지는 2,3,4,7의 방향이 올바른 방향이 된다. 다이메틸은 알파벳은 m으로 간주한다.



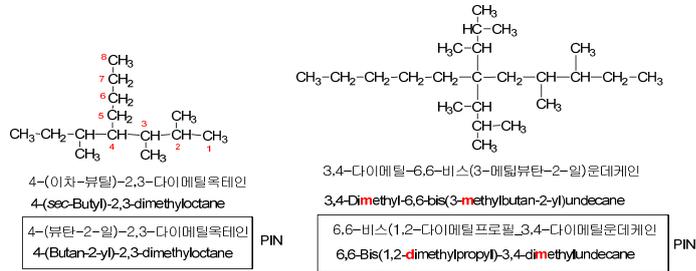
치환자리 번호는 2,5,6이 된다. 다른 방향은 3,4,7이 되어 2,5,6의 방향이 올바른 방향이 된다.



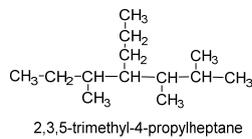
아이소프로필은 i, 다이메틸은 m에 해당된다.



양방향성이 모두 4,5가 된다. 그러나 첫번째 에틸에 대하여 낮은 번호를 사용한다.



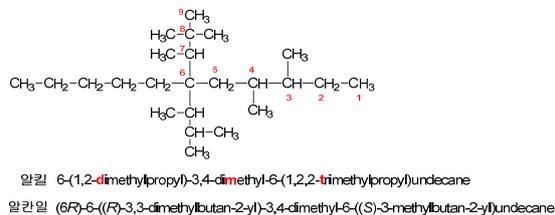
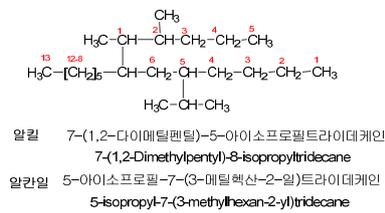
만일 모체 사슬에 동등한 길이의 사슬들이 경쟁하는 경우에는 가장 많은 곁가지를 가지는 사슬을 모체로 택한다.



따라서 이 화합물의 이름은 3-메틸-2,5-다이메틸옥테인이 아니고 2,3,5-트라이메틸-4-프로필헵테인이다.

다음에 보다 복잡한 가지가 붙은 곁가지 (branched side chain)의 경우를 살펴보고 다음 번에 불포화 탄화수소의 명명법을 다루기로 하자.

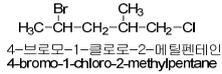
곁가지의 번호는 알킬 명명법에 의하면 주사슬에 연결된 탄소를 1번으로 시작되며 곁가지의 알파벳 순서는 첫번째 글자에 의하여 정해진다. 이때 곁가지는 괄호로 묶는다. 다음 보기는 알킬과 알칸일 명명법에 의한 이름이다. 알킬 명명법에서 다이메틸펜틸은 첫글자가 알파벳 d에 해당되어 아이소프로필의 첫글자 i보다 우선된다. 이점 유의하여야 한다. 알칸일 명명법은 주사슬과 곁가지의 명명법 구성 성분을 곁가지 연결 탄소 번호에 관계없이 합쳐서 사용할 수 있는 간편성을 가진다.



치환명에서 접두사로만 사용하는 특성이

특성기	접두사	
-Br	브로모	bromo
-Cl	클로로	chloro
-F	플루오로	fluoro
-I	아이오도	iodo
=N ₂	다이아조	diazo
-N ₃	아지도	azido
-NO	나이트로소	nitroso
-NO ₂	나이트로	nitro
-OR	(R)-옥시	(R)-oxy
-SR	(R)-설파닐*	(R)-sulfanyl
-S(=O) ₂ R	(R)-설포닐	(R)-sulfonyl

다음의 할로젠 치환체 탄화수소의 명명법 보기에서 주사슬은 치환이 많은 사슬을 택한다. 치환체는 알파벳 순서로 배열하고 치환 위치 번호는 낮은 4,1,2가 되게 한다.



5.4. 불포화 탄화수소

이중 결합 불포화도를 표시하기 위하여 -엔 (-ene), 삼중결합은 -아인 (-yne)을 사용하고 이중 결합이 여러 개 존재하는 경우 다이엔, 트라이엔 등으로 표시한다. (보기: 뷰타-1,3-다이엔). 이중 결합과 삼중결합이 혼합된 경우는 -엔아인(-enyne)를 사용한다.(보기: 펜트-1-엔-4-아인). 삼중 결합이 여러 개 존재하는 경우 다이아인, 트리아인 등으로 표기한다. 개수 표시 음절 다음 모음이 오면 a는 생략한다.

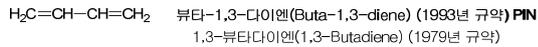
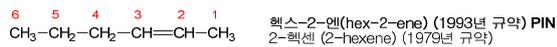
5.4.1. 이중결합을 가지는 불포화탄화수소 (알켄, alkene)

이중결합을 1개 가진 곁가지가 없는 비고리형 불포화 탄화수소는 이에 상응하는 포화탄화수소의 어미 '-에인(-ane)' 을 '-엔(-ene)' 으로 고쳐서 명명한다. 이들의 속명은 알켄(alkene)이다. 예외로 사용하는 관용명은 에틸렌(ethylene)과 알렌(allene)이다.

이중결합이 2개 이상 인 경우에는 배수를 나타내는 다이(di), 트라이(tri), 등을 사용하여 어미를 -아다이엔(-adiene), '-아트라이엔(-atriene)' 등으로 하였다. 이에 따른 부류명은 알카다이엔(alkadiene), 알카트라이엔(alkatriene) 등이 된다.

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

보기:



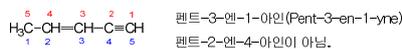
5.4.2. 삼중결합을 가지는 불포화 탄화수소 (알카인, alkyne)

삼중결합을 1개 가진 곁가지 없는 비고리형 불포화 탄화수소는 상응하는 포화탄화수소의 어미 '-에인(-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.

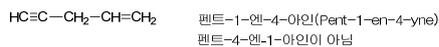


이중결합과 삼중결합 모두 다 포함하는 불포화 탄화수소

불포화탄화수소가 이중결합과 삼중결합 모두를 가지는 경우에는, 대응하는 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.



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



5.5. 곁가지를 가진 비고리형 불포화 탄화수소

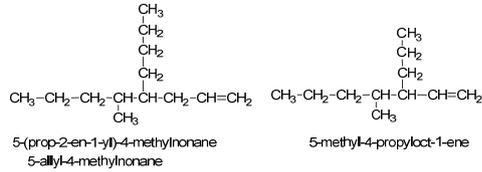
비고리형 불포화 탄화수소가 곁가지를 가지는 경우에는, 최대수의 이중결합과 삼중결합을 가진 곁가지 없는 불포화 탄화수소를 모체로 한다.

경쟁의 경우에는 우선 순위가 다음과 같다.

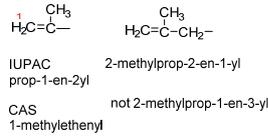
- 1) 탄소원자의 수가 가장 많은 사슬.
- 2) 탄소원자의 수가 같을 때는 최대수의 이중결합을 가진 사슬.

이외의 법칙은 사슬형 포화탄화수소의 경우를 따른다.

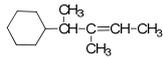
에텐일 (Ethenyl, $\text{CH}_2=\text{CH}-$)과 프로프-2-엔-1-일 (prop-2-en-1-yl, $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-$)에 관하여 IUPAC은 특별히 바이닐 (vinyl)과 알릴 (allyl)이라는 이름도 허용하였다.



알칸일 명명법도 불포화가지에도 마찬가지로 적용이 된다.



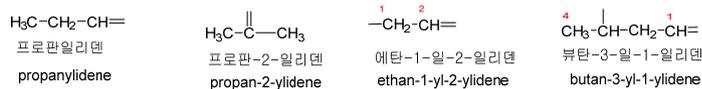
따라서 다음 보기에서의 결합지는 1,2-다이메틸-2-뷰텐일 (1,2-dimethyl-2-butenyl)이 아니라 3-메틸펜트-3-엔-2-일 (3-methylpent-3-en-2-yl)가 된다.



(3-메틸펜트-3-엔-2-일)사이클로헥세인
(3-methylpent-3-en-2-yl)cyclohexane

5.5.1. 2가 이상의 원자수를 가지는 기

탄화수소 치환기가 모체 구조에 하나의 이중결합을 통하여 연결되면 치환체는 -일리덴 (-ylidene) 어미로 명명한다. 1가와 2가의 원자수가 기들은 각각 -일과 -일리덴으로 표시한다.



5.6. 단일고리형 탄화수소

5.6.1. 결합지가 없고 포화된 단일고리형 탄화수소 (사이클로알케인, cycloalkane)

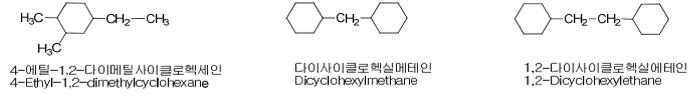
같은 수의 탄소원자를 가진 가지 없는 비고리형 포화 탄화수소의 이름에 '사이클로(cyclo)'란 접두사를 붙여서 명명한다. 포화된 단일고리형 탄화수소(결합지가 있든 없든)의 속명은 '사이클로알케인(cycloalkane)'이 된다.

5.6.2. 결합지를 가진 포화 단일고리 탄화수소류

(1) 지방족 사슬을 나타내는 작용기의 이름을 고리형 탄화수소의 이름 앞에 접두사로 붙이거나, (2) 고리형 탄화수소 작용기의 이름을 지방족 화합물의 이름 앞에

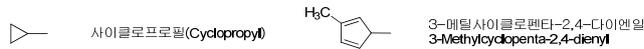
접두사로 붙인다. 이 두 가지 방법중 에서 다음의 원칙들에 보다 적합한 쪽을 택한다. 즉, (a) 구조의 단일 단위에 최대수의 치환기가 있도록 한다. (b) 구조 중의 보다 작은 단위를 보다 큰 단위에 대한 치환기로 본다.

보기:



5.6.3. 치환체로서의 단일 고리 원자단 (monocyclic group)의 명명

비고리 사슬형과 마찬가지로 어미 -일(y)을 붙인다.

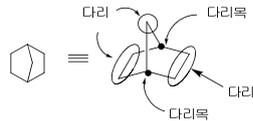


5.7. 다리 걸친 탄화수소 (Bridged hydrocarbon)

다리걸친 탄화수소란 2개 이상의 고리가 한쌍 이상의 탄소원자를 공유하고 있는 탄화수소를 말한다. 이러한 화합물에 대하여 IUPAC은 von Baeyer 방식을 확대 적용하고 있다. 일반적인 von Baeyer 계를 적용하기 위하여 고리의 개수를 고려하여야 한다. 다리걸친 탄화수소의 결합을 최소한으로 절단하여 동일한 개수의 탄소를 가지는 비고리 탄화수소로 변환하기 위한 결합의 절단 개수가 2, 3, 4 등에 따라 바이사이클로-, 트라이사이클로-, 테트라사이클로- 등의 접두사를 붙인다.

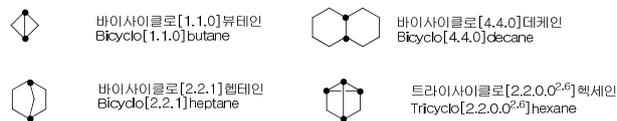


이러한 명명법에서 다리(bridge)와 다리목(bridge head)에 대하여 설명을 할 필요가 있다. 즉, ‘다리(bridge)’란 분자 내의 두 다른 부분을 연결하고 있는 원자가 결합(valence bond), 한개의 원자 또는 원자들의 가지가 없는 사슬을 가리킨다. 다리를 통해 결합되어 있는 2개의 3차 이상의 탄소원자를 ‘다리목(bridge heads)’이라 한다. 다시 말하면, 2개 이상의 고리를 공유하고 있는 탄소원자를 다리목이라 하고 이러한 다리목들에 연결된 결합을 다리라 한다.



다리 걸친 고리 탄화수소의 명명은 탄소원자의 전체 개수에 해당되는 비고리 탄소명에 사이클로- 접두사를 붙인 다음 짝은 괄호(대괄호) 안에 각 다리의 원자수를 감소 순서에 따라 나열한다. 다음 보기에서 검은 점은 다리목을 표시한다. 주고리(main ring)는 가장 많은 골격 탄소를 가지는 고리가 되며 주고리에서 가장 큰 다리가 주다리(main bridge)가 된다.

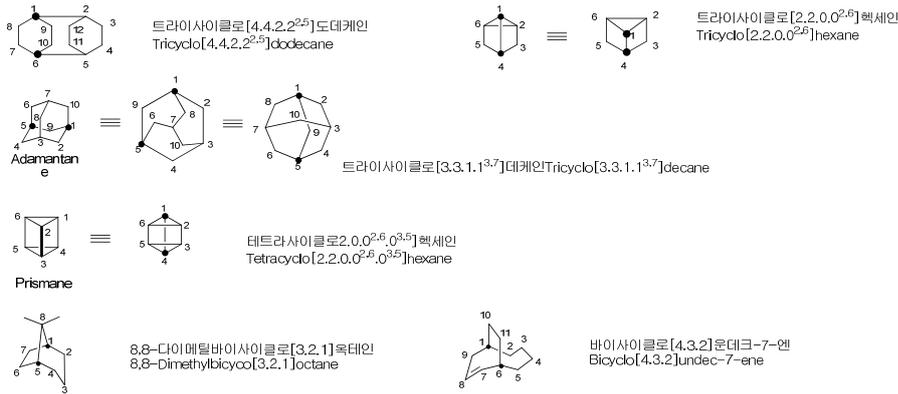
보기:



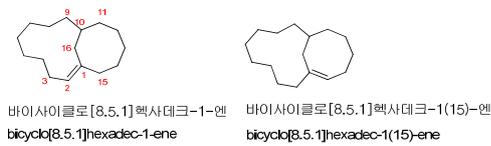
번호매김은 첫번째 다리목에서 시작하여 주고리의 가장 큰 다리(1차 다리)로 시작하여 두번째 다리목으로 따라간다. 다음에 주고리를 뛸 수 있는 한 대칭적으로 나누는 가장 긴 주다리에 번호를 매긴 후 2차 다리에 번호를 매긴다. 이차 다리에 있는 원자의 수는 마침표로 분리된 아라비아 숫자로 나타내며 가장 큰 두 고리 계를 나타내는 수 다음에 수가 작아지는 순서로 인용한다. 각각의 이차 다리의 위치는 이미 번호매김을 마친 구조의 아라비아 숫자 위치번호로 표시하며, 위치번호는 그 길이를 표시하는 아라비아 숫자 위에 위첨자로 인용하고 쉼표로 분리한다. 같은 길이의 이차 다리가 있을 때는 더 낮은 번호를 매긴 다리목원자의 번호가 증가하는 순으로 인용한다. 각 다리의 번호매김은 번호가 더 높은 끝으로부터 진행하여 이미 번호매김을 한 다리목으로부터 시작한다. 같은 길이의 이차 다리가 있을 때는, 번호매김은 가장 높은 번호의 다리목 원자를 가지는 다리에서 시작한다.

다음 보기에서 검은점은 주고리의 1차 및 2차 다리목을 표시하고 있다.

보기:



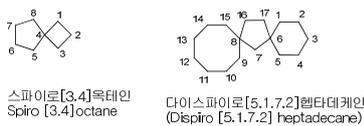
이중 결합의 위치가 큰 고리에 표시할 수 없는 경우 숫자와 괄호안 숫자로 위치를 표시한다.



5.8. 스파이로 고리 탄화수소 (Spiro hydrocarbon)

스파이로 화합물은 두 고리가 하나의 공통원자로 이루어진 화합물을 말한다. 한 화합물에 들어 있는 스파이로 원자의 수에 따라 이들을 각각 '모노스파이로-(monospiro-)', '다이스파이로 (dispiro-)', '트라이스파이로- (trispiro-)' 화합물이라 한다. 명명은 같은 수의 탄소원자를 가진 가지 없는 비고리형 끈은 사슬 탄화수소의 이름 앞에 '스파이로(spiro)' 라는 말을 붙여서 명명한다. 각 고리의 스파이로 원자에 연결된 탄소원자의 수를 숫자가 커지는 차례로 적어 대괄호에 넣어 접두사인 스파이로와 탄화수소 이름 사이에 넣는다 번호매김은 스파이로원자 이웃의 원자로부터 시작하고 더 작은 고리 둘레로 우선 진행하며 그 다음에는 스파이로원자 그리고 두 번째 고리 둘레로 진행한다. 번호매김은 맨 끝 스파이로 원자 의 바로 이웃 원자부터 시작해서 스파이로 원자들에 가능하면 작은 번호가 주어지도록 한다.

보 기:

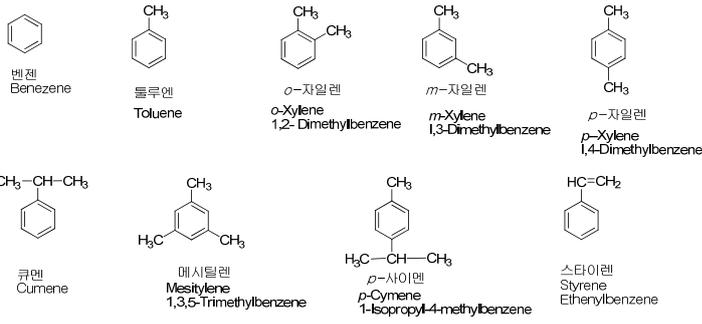


5.9. 방향족 탄화수소 (아렌) 명명법

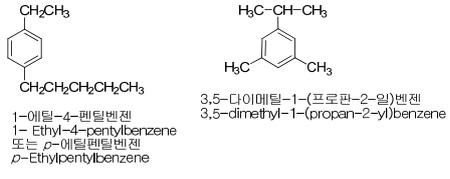
5.9.1. 단일고리형 방향족 탄화수소

탄화수소 화합물의 정의는 가상적 편재된 구조 (예로, Kekule 구조식)보다 안정된 고리형의 끈주게이트된 분자를 말한다. 쉽게 말하자면 벤젠같이 교대된 이중결합을 가지는 안정된 고리화합물을 방향족 탄화수소라 말할 수 있다. 방향족 탄화수소는 흔히 아렌 (arene, aromatic + -ene의 축약형)이라고 부른다.

벤젠의 유도체는 간단한 단일고리형 아렌 합물이다. 치환된 벤젠고리 화합물 중 관용명을 허용하는 화합물은 다음과 같다.

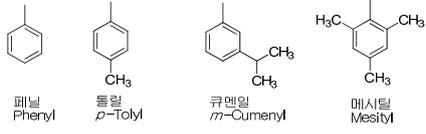


치환기의 위치는 원칙적으로 숫자로 표시하되 2개의 치환기만이 존재할 때는 1,2-, 1,3 및 1,4- 대신에 각각 *o*-(*오소*, *ortho*), *m*-(*메타*, *meta*) 및 *p*-(*파라*, *para*)를 쓸 수 있다. 치환기에 제일 낮은 번호를 주며 몇 가지 대안이 있을 경우에는 가능한 한 가지달린 사슬형 포화화합물의 명명법에 따라 우선 순위를 정한다.

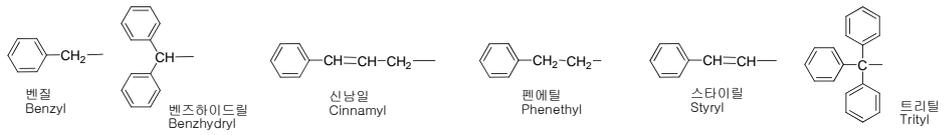


5.9.2. 치환된 방향족기

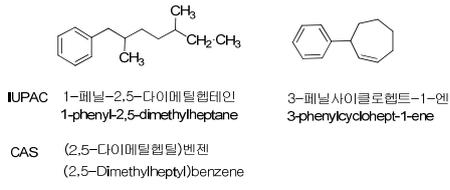
단일고리형 방향족 탄화수소에서 유도되며 그 자유원자가 고리의 원자에 있는 1가의 기의 이름은 다음과 같다. 여기에 실려 있지 않은 기들은 페닐기의 치환체로서 명명한다. 자유원자를 가진 탄소원자가 1번이 된다.



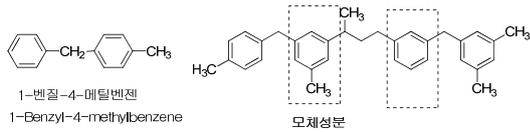
자유원자를 결가지에 가지고 있는 다음의 1가의 기들에 대해서는 관용명을 그대로 쓴다.



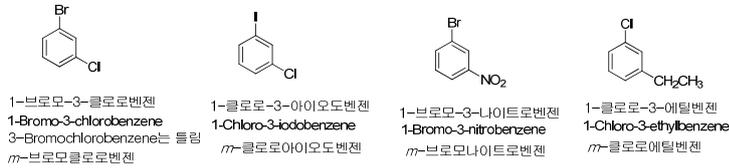
1가 및 2가의 방향족 탄화수소기의 속명은 각각 '아릴(aryl)' 과 '아릴렌(arylene)' 이 된다. 결가지가 붙어 있는 방향족의 명명의 경우 단위의 크기에 따라 치환된 사슬이나 치환된 고리 2가지 경우를 생각할 수 있다. IUPAC에서는 유사한 성분 간의 비교에서 보다 큰 원자 개수를 가지는 것이 모체 성분이 된다. 그러나 사슬 치환체인 경우에는 방향족을 우선으로 하는 것이 CAS의 방식이 된다. 다음 보기의 CAS 명명법은 결사슬의 벤젠 화합물에서 벤젠고리가 우선권을 가지고 있음을 알 수 있다.



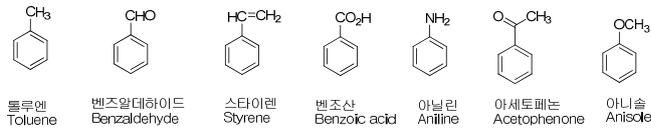
다음 첫번째 보기에서는 치환이 많이 된 벤젠고리가 우선이 됨을 알 수 있다. 두번째 보기에서는 대칭 중심에 가까운 벤젠 고리 2개 중 3개 치환체를 가지는 벤젠고리가 우선이 된다.



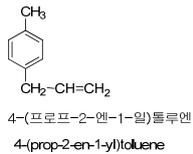
다음에 1,3-이치환된 벤젠의 예를 들었다. *o*-*m*-*p*-접두사를 사용하였을 때와 치환 번호 (locant number)를 사용하였을 때의 차이점에 유의하여야 한다.



다음에 관용적으로 사용하고 있는 벤젠의 유도체의 예를 들었다.



CA에서는 톨루엔을 메틸벤젠으로 명명하고 있지만 IUPAC에서는 톨루엔을 PIN을 사용하고 있다. 이에 따라 다음 화합물의 이름은 1-알릴-4-메틸벤젠 보다는 4-(프로프-2-엔-1-일)톨루엔을 선호한다.



5.9.3. 벤자인 (Benzyne)

벤자인은 벤젠의 1,2-이치환체를 제거하여 생성되는 중간체로 일반적으로 벤젠의 이중 결합 하나 대신 삼중결합으로 표시한다. 이러한 부류의 명명법은 IUPAC에서는 삼중결합 화합물의 명명법 보다는 1,2-데하이드로벤젠을 권장한다.

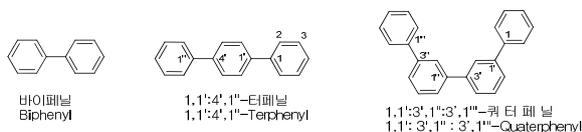


1,2-데하이드로벤젠 (PIN)
1,2-dehydrobenzene

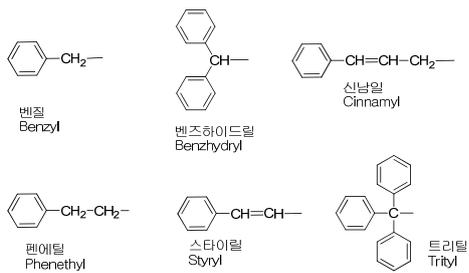
사이클로헥사-1,3-다이엔-5-아인
cyclohexa-1,3-dien-5-yne

5.9.4. 방향족의 고리 집합체

2개 이상의 동일한 고리계(단일 또는 이중 고리에 상관없이)가 이중 또는 단일 결합을 통하여 서로 직접 연결되어 있고 이러한 고리 사이의 직접 연결의 수가 고리계의 수보다 하나 작을 때, '고리집합체 (ring assembly)' 라고 부른다. 방향족의 경우 고리집합체의 대표적인 예는 바이페닐이다. 2개 이상의 동일한 고리로 구성되어 있는 가지가 없는 집합체는 반복단위에 해당하는 어미 수소화물의 이름 앞에 적당한 수치 접두사 '바이 (bi-)', '터 (ter-)', '쿼터(quarter-)', '퀸크-(quinque-)' 등을 붙여 명명한다. 벤젠고리로 이루어진 가지가 없는 집합체는 치환체 접두사 이름인 '페닐(phenyl)' 과 적당한 수치 접두사를 사용하여 명명한다. 콜론(colons)은 일련의 서로 연관된 위치 번호 무리를 분리하기 위해 사용하였다.



유리 원자가를 결합자에 가지고 있는 다음의 1가의 기들에 대해서는 관용명을 그대로 쓴다.

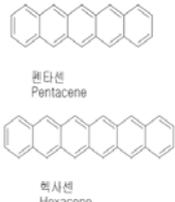
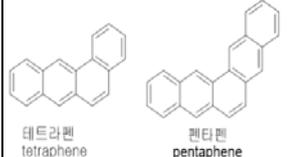


5.9.5. 접합된 여러 고리형 방향족 (Fused Aromatic Polycycles)

이웃한 2개 이상의 탄소원자를 공유하는 고리를 접합(fused)되었다고 한다. 두 개의 고리가 두 개의 공통 여러 고리형 화합물에서 이웃한 두 개의 고리가 단지 두 개만의 원자만 공유하면 오소 접합(ortho-fused)이라고 부른다. 1개의 고리가 2개 이상의 고리와 각각 2개씩의 공통 원자를 공유하는 여러 고리형 화합물은 오소-페리 접합 (ortho- and peri-fused) 고리형 화합물이라고 부른다.



접합된 여러 고리형 방향족 부류는 몇 가지로 나눌 수 있다.

	폴리아센(polyacene)	폴리아펜 (polyaphene)	폴리알렌 (polyalene)	폴리페닐렌 (polyphenylene)
접합양식	5 개이상의 벤젠고리가 선상으로 접합	중심이 되는 벤젠고리 혹은 중심에 근사한 구조를 중심으로 4 개 이상의 벤젠고리들이 각을 지어 선형으로 접합	두 개의 동일한 단일고리형 탄화수소 고리가 오쏘 접합	짝수개의 단일고리 탄화수소의 각변을 교대로 벤젠고리가 오쏘 접합
어미	-아센	-아펜 (-aphene)	-알렌 (-alene)	-페닐렌 (-phenylene)
구조예	 <p>펜타센 Pentacene</p> <p>헥사센 Hexacene</p>	 <p>테트라펜 tetraphene</p> <p>펜타펜 pentaphene</p>		

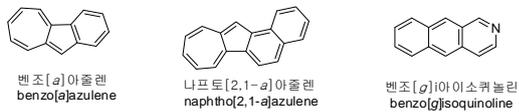
접합된 여러 고리형 방향족에서는 어느 고리가 모체 고리 (parent ring, 혹은 일차 고리 primary or main)인가를 알아야 한다. 접합된 고리 중 가장 큰 고리 (관용 명을 포함하여) 혹은 가장 많은 수의 고리를 포함하고 있는 성분을 모체 고리로 정한다. 모체 고리에 접합한 일차 부착 고리는 가능하면 간단하여야 한다. 접합하고 있는 일차 부착 성분은 자신의 끝부분의 엔 (-ene)를 에노 (-eno)로 바꾸어 접두사로 어미어미에 붙인다. 다음은 예외로 사용되는 축약된 접두사들이다. 일반적인 이름은 “**일차 부착 성분[접합자리]모체 구조(고리)**” 이 된다.

모체 구조와 일차 부착 성분에 공통된 원자는 일차 부착 성분과 모체 구조 모두의 이름에 고려하여야 한다.

접두사	원천 고리이름
아세나프토 (acetaphtho)	아세나프틸렌 (acenaphthylene)
안트라 (antra),	안트라센 (anthracene)
벤조 (benzo),	벤젠 (benzene)
나프토 (naphtho)	나프탈렌 (naphthalene)
페릴로 (perilo),	페릴렌 (perylene)
페난트로 (phenanthro)	페난트렌 (phenanthrene)

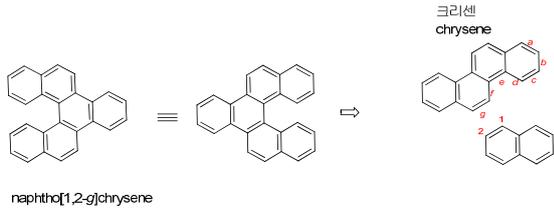
‘벤조-(benzo-)’ 외에도 최대수의 연속되지 않은 이중결합을 가진 구조를 나타내는 단일고리의 접두사로 사이클로펜타(cyclopenta), 사이클로헵타(cyclohepta), 사이클로옥타(cycloocta), 사이클로노나(cyclonona) 같은 것들을 인정한다.

새로운 IUPAC 명명법에서는 1979년 법칙과 달리 접합 명명법에서는 아세나프토(acenaphtho), 벤조(benzo), 나프토(naphtha) 및 페릴로(perilo) 등의 마지막 ‘오, o’ 와 단일고리의 접두사 사이클로프로파(cyclopropa), 사이클로부타(cyclobuta)등에서의 마지막 ‘아, a’ 를 다음에 오는 말의 첫글자가 모음이더라도 탈락시키지 않는다. 보기: 벤조[a]아줄렌 benzo[a]azulene, 나프토[2,1-a]아줄렌 naphtho[2,1-a]azulene, 벤조[g]아이소퀴놀린 benzo[g]isoquinoline

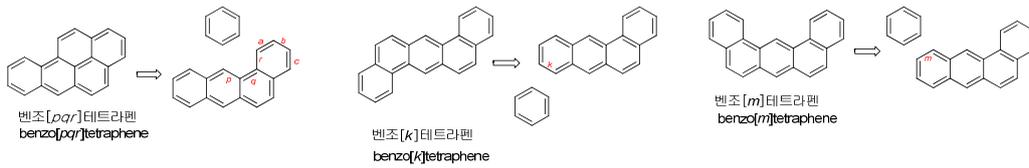


다음 보기에서 다이벤조페난트렌의 어미고리는 2개의 벤젠고리가 접합하고 있는 페난트렌이된다. 나프토고리보다 벤조고리가 더 간단하기 때문이다.



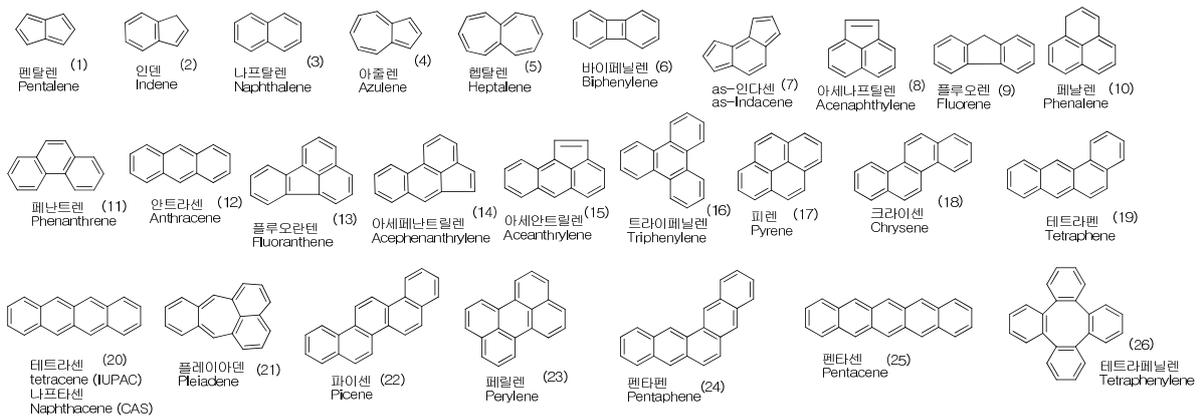


다음에서는 모체 구조의 우선 순위가 테트라렌이 크리센보다 앞선다.



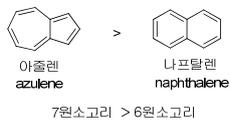
다음은 자주 쓰는 방향족 여러고리 화합물의 허용되는 관용명이다. 괄호 안에 있는 숫자가 클수록 우선권이 먼저이다. 탄소 개수가 많으면 우선 순서이다.

정확한 서열은 Moss, G. P. *Pure & Appl. Chem.*, **1998**, 70(1), 143-216.을 참조하면 된다. 다음에 서열의 일부를 표시하였다.

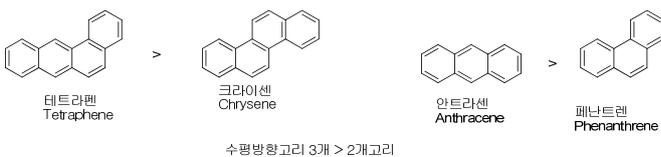


이러한 탄화수소계 접합고리의 우선 순위는 다음과 같다.

1. 접합한 고리 크기를 감소하는 순서로 배열하여 상이한 첫번째 순서에서 보다 큰 개별 고리 성분을 가지는 것이 우선권 접합고리이다.

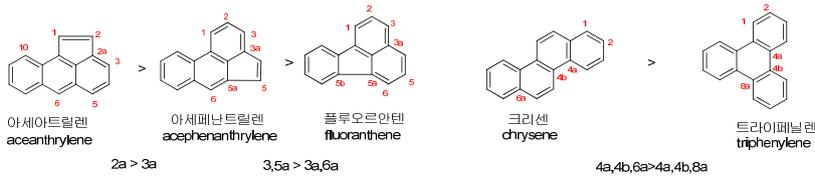


2. 수평방향에 가장 많은 고리를 가지는 접합고리가 우선이다.



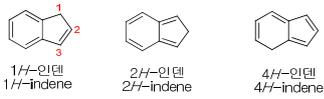
3. 고리접합의 표시에서 낮은 알파벳 문자를 가지는 접합고리가 우선이다.

접합 자리 탄소에 관하여 가장 낮은 위치번호를 가지는 접합고리가 우선이다



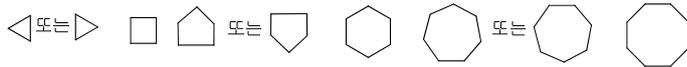
5.9.5.1. 지시 수소 (Indicated Hydrogen)

어떤 한 이름이 최대수의 연속되지 않은 이중결합을 가진 둘 이상의 서로 이성질체가 되는 접합된 모체 고리계에 대해 공통으로 쓰일 수 있고, 또한 그들 구조 안에 들어 있는 하나 또는 그 이상의 수소 원자들의 위치를 표시해 줌으로써 이들을 구별할 수 있을 때는 이러한 수소원자 하나마다 그 위치번호에 H자를 첨가한 것을 그 이름의 앞에 붙여준다. 이들 원자를 '지시된 수소(indicated hydrogen)' 라 부른다.

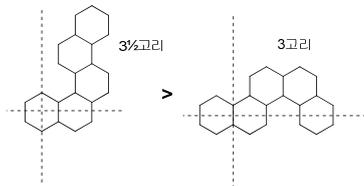
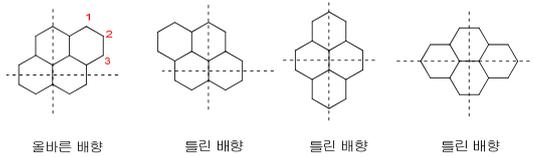


5.9.5.2. 번호 매김

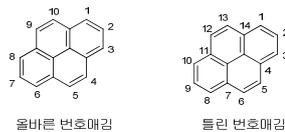
우선 일관성 있는 번호를 매기기 위하여서는 다음과 같이 정한 바대로 단고리화합물의 구조를 그려야 한다. 이러한 기하학적 형태가 번호매김의 기준이 되기 때문에 도형을 규칙에 벗어나 임의로 그리면 안된다.



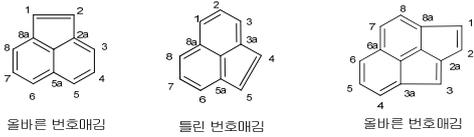
고리의 배향에 있어서 여러 고리계는 (a) 최대수의 고리가 수평으로 놓이고 (b) 최대수의 고리가 이 수평 열의 위와 오른쪽(오른쪽 위 사분면)에 놓이도록 배향한다. 만일 두 가지 이상이 이 조건에 들어 맞는 배향이 가능할 때는 왼쪽 아래 사분면에 최소수의 고리가 놓이게 되는 배향을 택한다.



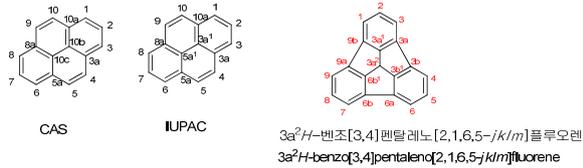
고리계를 이렇게 배향한 다음 제일 위에 있는 고리 중 고리 접합에 관여하지 않은 탄소원자 중에서 시계 반대방향으로 가장 끝에 있는 탄소원자로부터 시작해서 시계방향으로 번호를 매겨나간다. 가장 위에 있는 고리가 하나가 아닐 때는 그 중에서 제일 오른쪽에 있는 고리에서 시작한다. 둘 또는 그 이상의 고리에 공통된 원자들에는 번호를 매기지 않는다



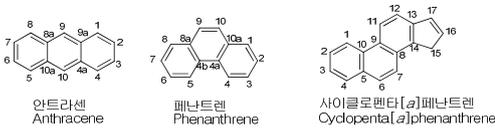
배향법칙을 적용하고도 번호를 매기는 방식의 선택이 가능할 때는 둘 또는 그 이상의 고리에 공통된 탄소원자가 최저번호의 위치에 이어진 쪽을 택한다.



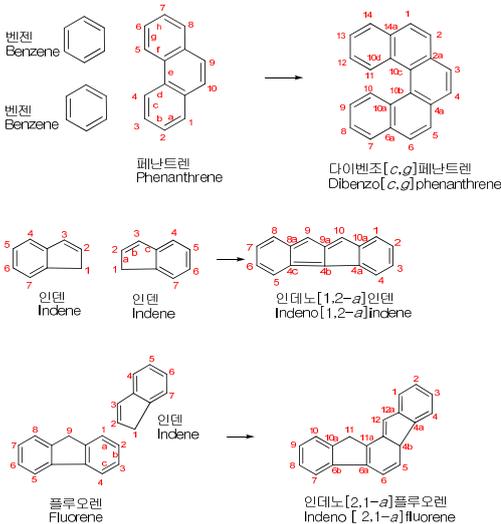
둘 이상의 고리에 공통되는 원자인 접합원자에는 바로 그 앞에 있는 원자의 위치 번호에 'a', 'b', 'c' 와 같은 글자를 붙여서 표시한다. 안쪽으로 들어 있는 원자들에는 가장 작은 번호의 뒤를 이으며 바로 이웃하면 1 하나 건너서 이웃하면 2라는 숫자를 상첨자로 표시한다. CAS는 IUPAC과 달리 가장 큰 번호를 이어 시계방향으로 a, b, c 알파벳 순서를 표시한다.



예전에 흔히 사용하던 안트라센(anthracene), 페난트렌(phenanthrene), 사이클로펜타[*a*]페난트렌(cyclopenta[*a*]phenanthrene)에 대하여서는 통상적인 전통을 이어 번호매기는 규약의 예외로 권장한다.

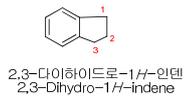
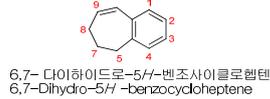


여러고리 접합 방향족의 이성질체를 구별하기 위하여 모체(기본 성분)고리의 변들에 a, b, c 등의 기호를 붙인다. 이때 변'1,2'는 'a', 변'2,3' (혹은 경우에 따라 2, 2a)은 'b'의 순서로 모든 각변을 시계방향으로 차례로 돌려 a,b,c등의 알파벳 순서를 매긴다. 다른 성분고리계가 접합된 자리에 가능하면 알파벳의 앞쪽에 있는 기호가 붙도록 하고, 필요하면 접합된 고리쪽의 접합된 자리의 번호를 기호 앞에 표시한다. 이 자리번호는 그 성분 고리계의 번호를 매기는 방식과 어긋나지 않는 한, 가능하면 낮은 번호가 접합된 자리에 주어지도록 하고, 이 숫자는 모체 (기본 성분)고리의 알파벳 기호를 붙이는 방향의 차례와 일치하도록 한다. 숫자와 기호는 대괄호 속에 하이픈으로 연결하여 넣고 그 성분고리를 표시하는 접두사 바로 다음에 적는다.



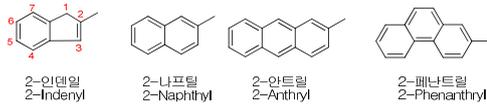
5.9.5.3. 수소화된 화합물

수소화된 여러고리 방향족은 해당 여러고리 방향족의 유도체로 취급하여 해당 화합물 이름에 '다이하이드로-(dihydro-)', '테트라하이드로-(tetrahydro-)' 와 같은 접두사를 붙여서 만든다. 완전히 수소화된 것은 '퍼하이드로-(perhydro-)' 라는 접두사를써서 표시한다. 지시 수소를 사용할 *H*를 선정할 때에 가능하면 낮은 위치 번호가 주어지도록 한다.



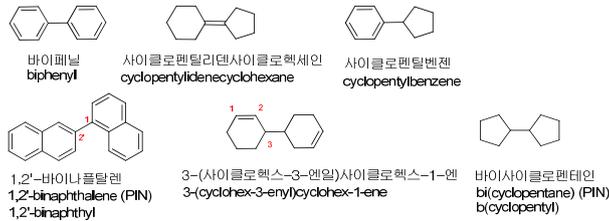
5.9.5.4. 여러고리 방향족에서 유도되는 기의 이름

여러고리 방향족에서 수소원자 1개를 제거하여 유도되는 1가의 기는 원칙적으로 어미 ‘-엔(-ene)’을 ‘-엔일(-enyl)’로 바꾸어 명명한다. 예외는 나프틸(naphthyl), 안트릴(anthryl), 페난트릴(phenanthryl)이 있다.

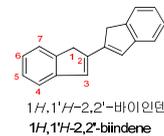


5.9.6. 고리집합체(Ring Assembly)

두 개 이상의 탄화수소 고리 혹은 고리계가 서로 직접 단일 결합 혹은 이중 결합으로 연결되어 있으면 이러한 계를 고리 집합체라 부른다. 동일한 고리의 집합체의 개수는 2, 3, 4 등에 해당되는 라틴어 배수사인 bi, ter, quarter 등의 접두사를 붙인다. 명명법은 해당 모체 고리의 수소화 화합물을 가능하다면 괄호에 넣은다음 괄호앞에 배수 접두사를 붙인다. 각고리는 관례대로 번호를 매긴다. 한 고리의 번호들은 프라임 번호 없이 다음 고리의 번호들은 프라임을 붙인다. 부착 원자의 번호는 가장 낮은 번호를 부여한다. 이전 명명법에는 모체 고리의 수소화 화합물 대신 치환기 (보기: binaphthyl, bi(cyclohexyl)) 이름을 사용하였다.



고리 집합체 앞에 지시 수소를 표시한다 예전의 2,2'-바이-1H-인덴은 1H,1'H-2,2'-바이인덴으로 표시한다.



5.10. 헤테로 고리계 화합물

헤테로고리 화합물은 고리 구성 원자 중 적어도 2개 이상의 상이한 원자가 존재하는 고리 화합물을 말한다. 유기 헤테로 고리계 화합물은 탄소 이외에 산소, 황, 혹은 질소 등의 헤테로 원자를 포함한다. 헤테로 고리계의 명명법은 복잡하다. 많은 관용적인 이름을 사용할 뿐만 아니라 IUPAC과 Chemical Abstract 명명법자체가 2가지의 치환명명법 (replacement nomenclature)와 한취-비드만 방식(Hantzsch-Widman system)을 사용하기 때문이다.

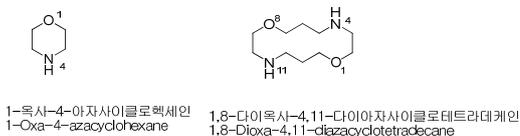
5.10.1. 대체 명명법 (Replacement Nomenclature) 혹은 “아” 명명법 (“a” Nomenclature)

대체 명명법은 고리 화합물이나 사슬 화합물이건 간에 일반적으로 헤테로 원자가 존재하면 사용할 수 있다. IUPAC에서는 치환 명명법을 11고리 이상의 단일고리 헤테로화합물에 사용한다. 헤테로원자는 접두사가 글자 “a”로 끝나기 때문에 “아” (“a”) 명명법이라고도 한다. 다음 도표에 일부 원소와 접두사를 표시하였다. 2개 이상의 헤테로 원자가 존재하는 경우에 표에 먼저 표시한 원자가 우선권을 가진다. 즉, 주기율표에서 높은 족이 우선이고 같은 족에서는 낮은 주기가 우선권을 가진다. 번호는 모든 헤테로 원자의 번호가 낮게 매긴다.

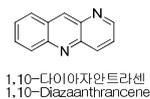
원 소	원자가	접두사	원 소	원자가	접두사
산소(Oxygen)	II	옥사(Oxa)	비스무트 (Bismuth)	II	비스마 (Bisma)
황(Sulfur)	II	싸이아(Thia)	규소 (Silicon)	IV	실라(Sila)
셀레늄 (Selenium)	II	셀레나(Selena)	저마늄/게르마늄 (Germanium)	IV	저마//게르마(Germa)
텔루륨 (Tellurium)	II	텔루라(Tellura)	주석 (Tin)	IV	스탄나(Stanna)
질소 (Nitrogen)	III	아자(Aza)	납(Lead)	IV	플럼바(Plumba)
인 (Phosphorus)	III	포스파(Phospha)	붕소 (Boron)	III	보라(Bora)
비 소 (Arsenic)	III	아르사 (Arsa)	아연 (Zinc)	II	징카 (Zinca)
안티모니 (Antimony)	III	스티바 (Stiba)	수은(Mercury)	II	머큐라(Mercura)

양이온인 경우에는 일반적으로 오니아 (-onia)가 된다. 예를 들면 옥사(oxa)는 옥소니아(oxonia), 싸이아(thia)는 싸이오니아(thionia)가 된다.

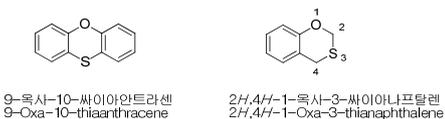
다음의 보기에서 산소는 질소 보다 우선권을 가지기 때문에 명명은 각각 옥사(oxa) 및 다이옥사- (dioxo-)로 시작되고 번호도 산소 원자로부터 시작함을 알 수 있다.



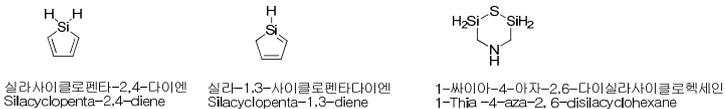
다음의 보기에서는 번호는 상응하는 탄소 고리계의 번호와 일치하며 헤테로원자에 가장 낮은 번호를 매긴다. 이중 결합의 탄소와 삼중 결합의 탄소는 순위가 낮아진다.



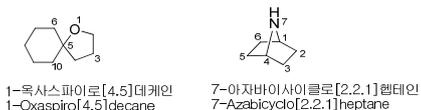
CAS의 “아” 명명법에서는 상응하는 탄소 고리계가 일부 혹은 완전히 수소화되어 있는 경우에는 여러 고리 방향족 탄화수소의 수소화 (hydro)유도체로 명명한다. 이러한 경우 어미 헤테로고리계는 최대수의 콘주계이트 혹은 고립된 이중결합을 가지는 것을 택한다. 이때 부가적인 수소는 지시 수소로 *H* 혹은 하이드로 (*hydro*) 접두사로 표시한다.



IUPAC 및 CAS에서는 실리콘 고리화합물에 대하여서 다음과 보기와 같이 예외적으로 배타적인 대체명명법을 사용하고 있다.



이러한 “아” 명명법은 좀더 확장하여 간단한 다리 화합물과 스피로 화합물에 사용된다.



5.10.2. 한취-비드만 명명법 (The Hantzsch-Widman Nomenclature)

일반적으로 10고리 이하의 헤테로고리 화합물에 대하여는 확장된 한취-비드만 명명법을 사용한다. 이 명명법은 “아” 명명법과 달리 해당 탄소고리화합물과 연관성을 가지지 않는다. 헤테로원자에 대한 접두사는 “아” 명명법과 동일하지만 접두사 다음에 모음이 오면 “-아”를 생략한다. 고리의 크기와 포화-불포화 상태에 따라서 특정한 접미사를 사용한다. 다음 표에 한취-비드만 명명법에 따른 접미사들을 표시하였다.

고리크기	불포화	포화	고리크기	불포화	포화
3	이렌 (irene)	이레인 (irene)	6C	이닌 (inine)	이네인 (inane)
4	에트 (ete)	에테인 (etane)	7	에핀 (epine)	에페인 (epane)
5	올 (ole)	올레인 (olane)	8	오신 (ocine)	오케인 (ocane)
6A	인 (ine)	에인 (ane)	9	오닌 (onine)	오네인 (onane)
6B	인 (ine)	이네인 (inane)	10	에신 (ecine)	에케인 (ecane)

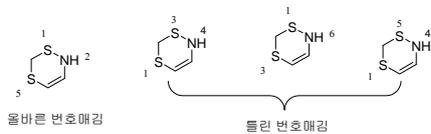
6A: O, S, Se, Te, B, Hg

6B: N, Si, Ge, Sn, Pb

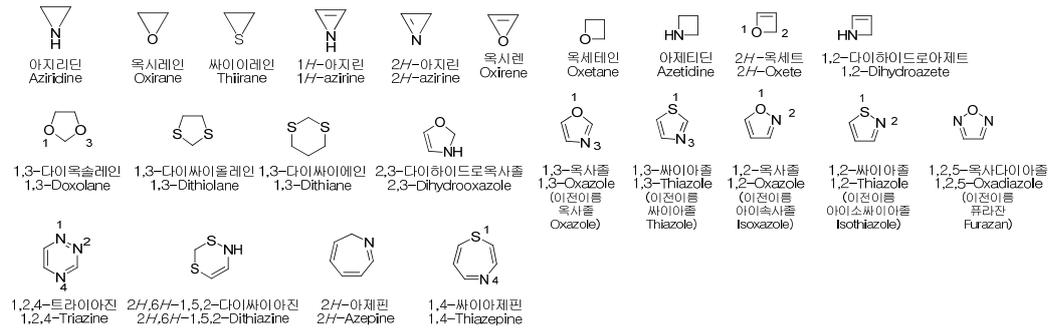
6C: B, F, Cl, Br, I, P, As, Sb

고리 크기가 3,4,7,8,9,10인 경우 접미사의 어간이 다음과 같은 수치 접두사에서 유래함을 알 수 있다. 즉, tri에서 “ir”, tetra에서 “et”, hepta에서 “epi”, octa에서 “oc”, nona에서 “on”, deca에서 “ec”가 파생되었다. 여기서 불포화란 최대수의 연속되지 않은 이중결합을 가짐을 의미한다. 질소만 포함하는 불포화 3고리의 경우 이렌(irene) 대신 전통적인 이린(irine)을 사용할 수 있다. 질소만을 포함하는 불포화 3,4,5 고리의 경우에는 전통적인 이리딘(iridine), 에티딘(etidine)과 올리딘(olidine)이 선호되고 있다. 접미사의 “e”는 때로는 생략하기도 한다. 보기로 다이옥신(dioxin)과 다이옥사포스페핀(dioxaphosphepin)이 여기에 해당된다.

헤테로 원자의 이름과 번호매김은 “아” 명명법과 동일하다. 즉, 가장 우선권이 높은 헤테로 원자에 1번을 부여하며 다른 헤테로 원자들이 가장 낮은 번호가 되게 번호를 매긴다. 다음 보기에서 우선권을 가지는 황원자를 먼저 택한다. 그 나머지의 헤테로원자의 번호는 우선권 없이 전체적으로 가장 낮은 번호가 되게 한다. 따라서 가능한 번호 매김은 (1,2,5), (1,3,4), (1,3,6) 및 (1,4,5)가 된다. 이 중에서 가장 낮은 번호매김은 1,2,5가 된다.

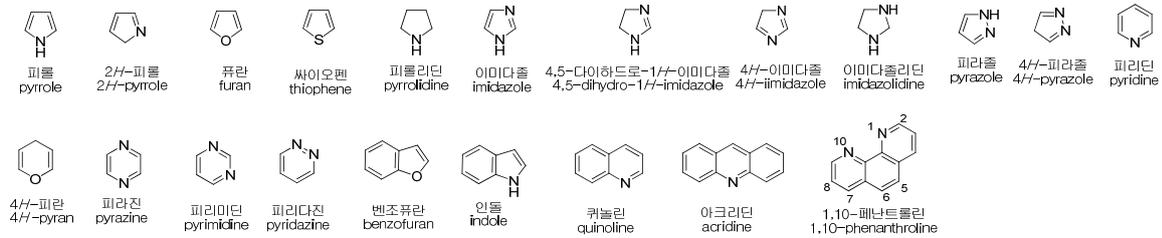


다음에 한취-비드만 명명법의 보기를 보자.



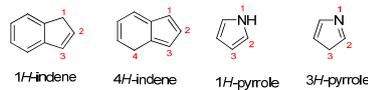
5.10.2. 흔히 사용하는 헤테로 고리 관용명

헤테로고리의 관용명은 상당히 많다. 대표적인 보기는 다음 표와 같다. 유의할 점은 헤테로고리가 기로 사용될 때 알킬기와 달리 변형이 되어 사용되는 경우가 있다. 예를 들면, 싸이오펜(thiophene)은 싸이엔일(thienyl), 퓨란(furan)은 퓨릴 (furyl), 피리딘 (pyridine)은 피리딜 (pyridyl) 퀴놀린(quinoline)은 퀴놀릴(quinolyl) 피페리딘(piperidine)은 피페리딜 (piperidyl)이 된다.

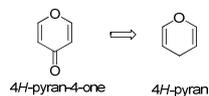


5.10.4. 지시 수소 (indicated hydrogen)

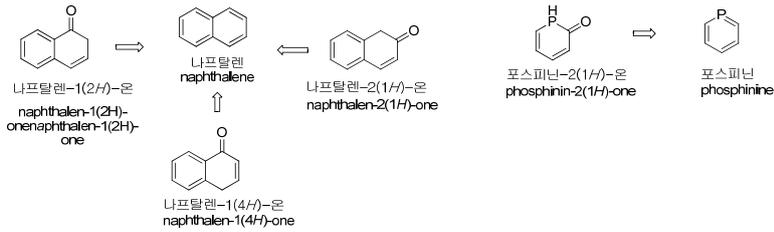
최대 개수의 비누적 이중결합 (non-cumulative double bond)하나의 고리나 고리계가 한 개 이상의 위치에서 더 이상의 다중 결합을 부착시킬 수가 없는 경우에는 이러한 것을 가리킬 필요가 있다. 이러한 경우에 하나의 여분 수소 원자의 존재를 표시하기 위하여, 접두사 위치에 포화 자리 번호를 매긴 위치표시자 다음에 이탤릭체의 대문자 H를 이름에 지시하여 준다. 다시 말하자면 최대 개수의 쾨주게이트 이중 결합을 가지는 헤테로고리계나 여러고리 탄화수소 및 유도체들은 분리된 포화 고리 원자를 가질 수가 있다. 이러한 어미 구조에 관하여 접두사 위치에 포화된 고리 원자 위치번호 앞에 이탤릭 대문자H를 부착하여 표시한다. 이러한 여분의 수소원자를 '지시 수소(indicated hydrogen)' 라 부른다.



다음의 간단한 보기에서 모체 성분 이름을 찾기 위하여서는 특성기를 제거하여 찾는 방법을 보여주고 있다.

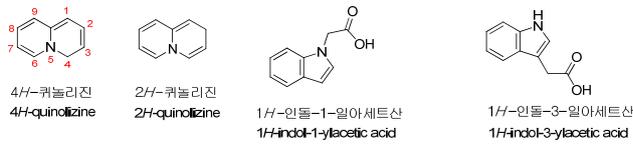


'첨가 수소(added hydrogen)' 으로도 부르는 지시 수소의 두 번째 유형은 구조 변형을 표시하는 접미사 혹은 접두사의 첨가함으로써 발생하는 특정 구조에 첨가되는 수소 원자이다. 이러한 유형의 지시 수소는 부수적 특징을 가지는 위치 표시자 바로 뒤에 괄호로 표시한다. 즉, 지시 수소가 필요하지 않은 고리계에서 주 특성기, 라디칼, 스페이로 원자 등에 의하여 포화된 위치가 발생하여 접미사에 표시한 여분의 수소가 '첨가 수소' 인 것이다. 다음의 보기는 첨가 수소를 붙이기 전의 모체 성분을 찾는 방법을 보여준다.



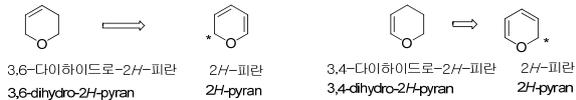
5.10.4.1. 지시 수소를 가지는 헤테로 고리 화합물

방향족 화합물의 명명법과 같은 방식으로 명명하지만 접합구조에서는 접합원자가 헤테로 원자인 경우 번호를 생략하지 않는다.



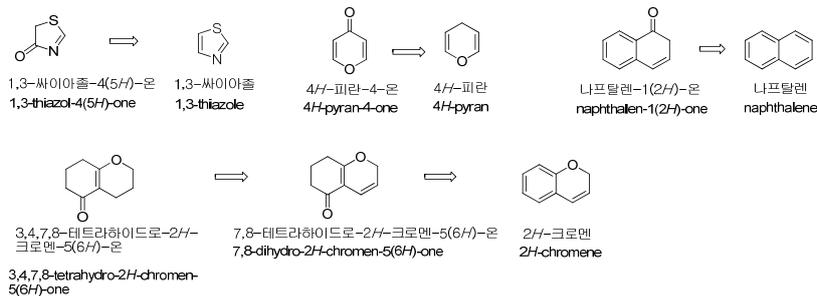
5.10.4.2. 일부만 불포화된 헤테로 고리의 명명법

일부만 불포화된 헤테로 고리에서는 지시 수소를 가지는 어미 구조를 찾은 다음 수소화 화합물로 명명한다. 다음 보기에서 3,6-다이하이드로-2H-피란의 명명법에서 어미 구조의 지시 수소는 별표의 자리가 되어 2H(6H가 아님)가 됨을 알 수 있다. 마찬가지로 방법으로 3,4-다이하이드로-2H-피란도 명명할 수 있다.



5.10.5. 헤테로 고리 케톤의 명명 순서

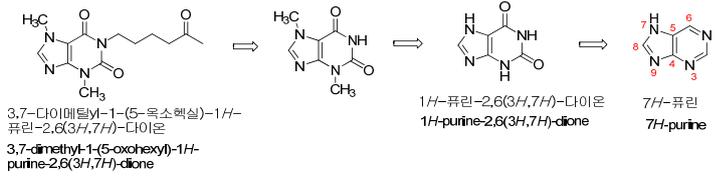
헤테로 고리 케톤의 명명법은 카보닐기를 제거한 불포화가 가장 큰 헤테로고리의 모체 성분을 찾은 다음 카보닐 위치 번호에 지시수소를 괄호 안에 삽입한다. 이후에 필요한 경우 수소화 상태를 표시하여 포화 상태를 표시한다.



5.10.6. 두고리 집합 락톤 화합물의 헤테로 집합 고리의 명명



퓨린 고리의 번호 매기기는 관용에 따라 예외이다. 따라서 다음 퓨린유도체의 명명의 순서는 다음과 같다.



5.10.7. 헤테로 집합 고리의 명명법

5.10.7.1. 일차 부착 성분 [접합 자리] 모체 성분

5.10.7.1.1. 모체 성분

모체 성분을 먼저 선택한 다음 일차부착성분은 모체성분에 직접 접합한 것들이다. 모체 성분 (구조)는 주로 통상명 혹은 준통상명을 가지고 있으며 우선 순위가 정해져 있다. 이 우선 순위는 IUPAC과 CA 색인명 지침에서 주어진 표를 참조하여야 한다. 몇가지 순위는 서로 다를 수도 있다. 이러한 순위외에 고려할 순위의 기준은 다음과 같다. 헤테로고리 > 질소를 포함하는 헤테로고리 > 질소를 포함하지 않는 헤테로 고리 (O>S>Se>Te>P>As>Sb>Bi>Si>Ge>Sn>Pb>B) (순위는 고리 크기와 나머지 헤테로원자의 개수와 관계없다.) > 최대 개수의 고리 > 가장 큰 개별 고리 > 가장 많은 헤테로 원자 개수 (종류에 관계없음)> 헤테로 원자의 종류가 가장 많은 구조 > 우선 순위가 높은 헤테로 원자가 가장 많은 구조 > 일차 선상 배열이 가장 큰 구조 > 접합 이전에 헤테로 원자 번호가 낮은 구조.

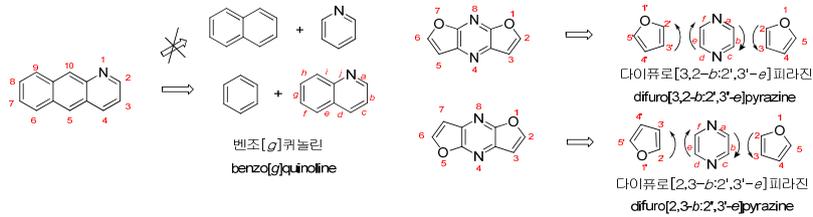
5.10.7.1.2. 일차 부착 성분

일반적으로 일차 부착 성분은 통상명 + 오 (-o)를 사용한다.

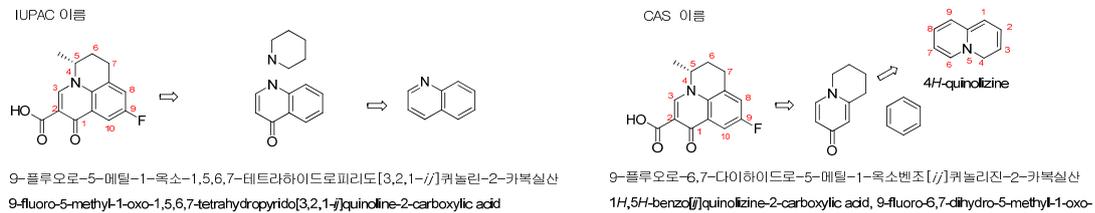
예외: 싸이오펜 → 티에노 (thieno-), 퓨란 → 퓨로 (furo-), 피리딘 → 피리도- (pyrido-), 피리미딘 → 피리미도 (pyrimido-), 퀴놀린 → 퀴노 (quino-) 등등 헤테로환고리 (heteromonocycle)의 경우는 환취-비드만이나 치환 이름에서는 환취-비드만 이름 + 오 (o), 치환이름 + 오 (o)

5.10.7.2. 접합 자리 표기법

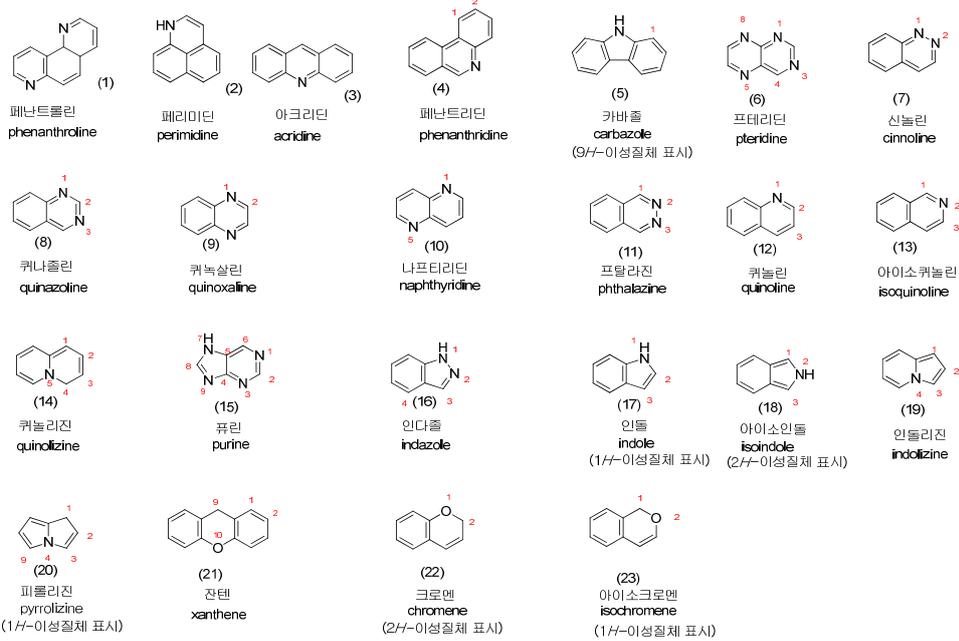
'일차 부착 성분[일차성분 위치 번호-모체 성분 문자]모체 성분' 로 접합 자리를 표기한다. 다음의 벤조[g]퀴놀린의 경우에서 모체는 퀴놀린이 되어 일차 부착 성분인 벤젠은 벤조가 되고 부착자리는 g가 된다. 그러나 일차 부착 성분의 접합 위치를 표시하는 경우에는 모체의 알파벳 순서에 따른다.



모체 구조의 우선권은 IUPAC과 CAS가 서로 다를 경우가 있다. 다음에 있는 보기에서는 IUPAC에서는 퀴놀린 (quinoline)이 퀴놀리진 (quinolizine)보다 우선권을 가져 모체 구조라 하지만 CAS에서는 우선 순위가 바뀌어서 퀴놀리진 (quinolizine)이 모체 구조가 된다.



다음에 IUPAC의 여러고리 헤테로 화합물의 통상적인 이름과 우선 순위를 표시하였다.

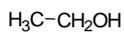


6. 알코올과 싸이올의 명명법

6.1. 알코올

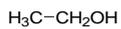
알코올(alcohol)은 한 개 이상의 하이드록시 기(OH)가 사슬이나 비방향족고리에 붙어있는 화합물을 말한다. Alcohol의 번역은 알코올이 아니라 알코올이 된다. 물론 이러한 차이는 영어 발음에서 h는 묵음에 가깝다는 이유는 아니고 알코올류의 화합물 명명법에서 어미가 -올(-ol)로 끝나는 이유 때문이다. 결과 표시는 장모음 형태가 되었다. 치환체로서의 OH인 하이드록시(hydroxy)는 라디칼을 의미하는 하이드록실(hydroxyl)과 구별하여 사용하여야 한다.

알코올을 명명은 기-기능 명명법(radicofunctional nomenclature) 혹은 치환명명법(alkanol)을 사용한다. IUPAC에서는 치환식 명명법을 권장 하지만 CAS는 치환식 명명법만 사용한다. 기-기능식 명명법은 접미사를 쓰지 않는다는 점만을 제외하고는 치환식 명명법과 별로 다른 것이 없다. 주원자단을 접미사로 명명하는 대신에 이 화합물의 기능부류명(functional class name)을 한 독립된 낱말로 표시하고 화합물의 나머지 부분의 이름을 또 하나의 낱말로 표시 한다. 유의할 점은 기와 기 능부류명 사이를 띄어 써야 한다.

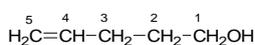


특성원자단, OH:	알코올	Alcohol (기능부류명)
기, CH ₃ CH ₂ :	에틸	Ethyl
완성된 이름:	에틸 알코올	Ethyl alcohol

치환식 명명법은 해당 탄화수소 이름의 끝부분에 해당되는 -에인 대신 -안으로 한 다음 -올(-ol)을 붙이는 것이다. (영어 명명법에서 -ane의 e를 버리고 ol을 붙인다. 영어 명명법에서는 어미화합물의 끝이 e인 경우 다음의 접미어가 a, i, o의 모음이 오면 e를 생략한다.) 하이드록시 기가 2개 이상 존재하는 다가알코올(polyhydric alcohol)의 경우 하이드록시 개수에 따라 다이올(diol), 트라이올(triol), 테트라올(tetraol) 등의 접미사를 사용한다. 이 경우, 모체이름의 -에인을 사용한다. 기-기능 명명법에서 다이올 중 1,2-다이올인 경우 글라이콜(glycol)을 사용한다.



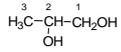
주원자단 OH에 대한 접미사:	-올(-ol)
CH ₃ -CH ₃ 에 대한 모체 이름 :	에테인(Ethane)
완성된 이름:	에탄올(Ethanol)



접미사: -올(ol)

모체 이름: 펜테인(pentane)을 펜텐(pentene)으로 바꿈(불포화 결합)

완성된 이름: 4-펜텐 1-올(4-Penten-1-ol)

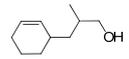
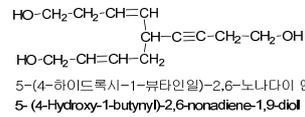
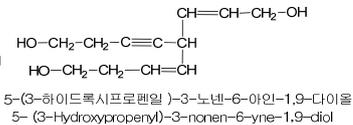
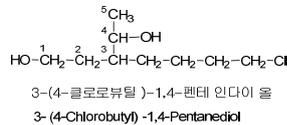


접미사: -다이올 (diol)

모체 이름: 프로페인

완성된 이름: 1,2-프로페인다이올 (1,2-propanediol)

알코올을 명명할 때 유의할 점은 기-기능 명명법과 치환식 명명법을 혼합한 잡종명명법 (hybrid nomenclature)를 사용하지 말아야 한다. 예를 들면 아이소프로필 알코올(isopropyl alcohol)과 2-프로판올은 허용되지만 아이소프로판올은 잡종명명법으로 허용이 안된다. (마찬가지로 아이소프로펜도 잡종명명법의 한 가지이다.) 모체 구조가 아이소프로페인이라는 이름이 불가능하기 때문이다. 현재 유기 화학자들이 가장 많이 사용하고 있는 잡종명명법으로 *t*-부탄올이 있다. 이것은 *t*-부틸 알코올(*t*-butyl alcohol) 혹은 2-메틸-2-프로판올 (2-methyl-2-propanol)로 사용하여야 한다.



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

허용된 관용명의 일부는 다음과 같다.

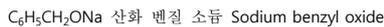
CH ₃ CH=CHCH ₂ OH	알릴 알코올, Allyl alcohol
(CH ₃) ₃ COH	<i>tert</i> -부틸 알코올, <i>tert</i> -Butyl alcohol
C ₆ H ₅ -CH ₂ -OH	벤질 알코올, Benzyl alcohol
C ₆ H ₅ -CH ₂ -CH ₂ -OH	펜에틸 알코올, Phenethyl alcohol
HO-CH ₂ -CH ₂ -OH	에틸렌 글라이콜, Ethylene glycol
HO-CH ₂ -CH(OH)-CH ₂ OH	글리세롤, Glycerol (글리세린 glycerine은 허용안됨)
C(CH ₂ OH) ₄	펜타에리트ρί톨, Pentaerythritol
(CH ₃) ₂ C(OH)-C(OH)(CH ₃) ₂	피나콜, Pinacol

6.2. 알코올의 음이온

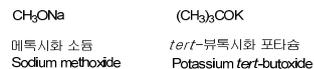
알코올 또는 페놀에서 유도된 음이온들은 알코올 또는페놀의 이름의 어미에 있는 ‘-올(-ol)’ 을 ‘-올산 음이온(-olate)’ 으로 바꾸어 명명한다. 이 방법은 치환 식명, 기-기능식명 및 관용명들에 적용한다.



음이온 RO⁻는 앞서 방법과 달리 어미를 “산화 -일” (-yl oxide)로 바꿀 수도 있다.



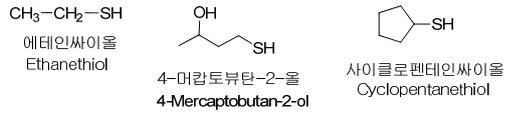
예외로 축소형 이름을 가질 때 어미를 ‘-옥시화(-oxide)’ 로 바꾼다.



6.3. 싸이올

주원자단으로서 -SH가 탄소에 직접 붙어 있는 화합물은 ‘싸이올(thiol)’ 이라고 명명한다. 치환식 명명법에서는 모체화합물 이름에 접미사 ‘-싸이올(-thiol)’

을 추가하여 명명한다. -SH기가 주원자단이 아닐 때, 치환되지 않은 -SH기를 표시하기 위해 접두사 '머캅토-(mercapto-)' 를 모체화합물의 이름 앞에 둔다.



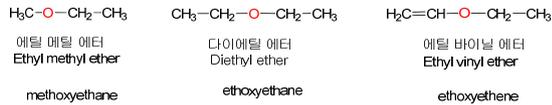
6.4. 싸이올의 음이온

싸이올의 염은 하이드록시 화합물의 염에 준하여 '올레이트(올산) (olate)' 대신 싸이올레이트(싸이올산) (thiolate) 또는 '옥사이드(산화) (oxide)' 대신 '설파이드(황화) (sulfide)' 를 써서 명명한다.

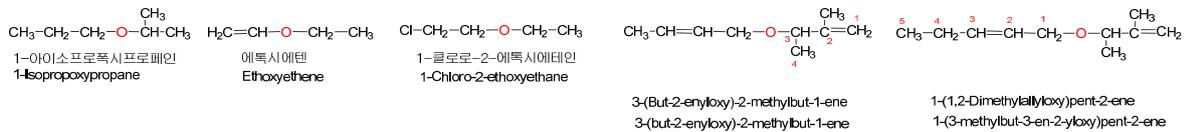
7. 에터 (Ether)

R¹-O-R²형의 화합물들은 '에터(ether)' 라는 속명을 가지며 치환식 또는 기-기능식 방법으로 명명할 수 있다. IUPAC에서는 비대칭인 에터의 경우나 일부 대칭적인 에터의 경우 에터 명명법을 허용하지만 그외에는 권장하지는 않는다. IUPAC에서는 R이 알킬인 경우 알콕시(alkoxy)라는 이름을 사용하기를 권장한다.

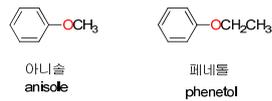
에터들의 기능식명은 R¹ 기와 R² 기의 이름을 열거하고 그 다음에 '에터 (ether)' 라는 낱말을 추가하여 만든다.



비대칭형 에터들의 치환식 이름은 R¹O- 기의 이름을 두 번째의 기 R²에 상응하는 탄화수소들의 이름에 대한 접두사로 써서 만든다, 우선순위가 상위인 성분을 모체화합물로 선택한다.



다음의 보기들은 그대로 쓰는 에터의 관용명들이다,



고리형 에터는 에폭사이드의 경우에는 산화-(oxide) 혹은 에폭시-(epoxy) 를 첨부할 수 있지만 일반적으로 헤테로고리로 명명한다.

보 기:



8. 설파이드 (황화물) (Sulfide)

설파이드 화합물은 R¹SR²로 표시되며 이때 R¹과 R²는 수소가 아니다. 설파인(sulfane)이라는 명명은 현재 IUPAC에서는 H₂S를 의미하기 때문에 사용하지 말아야 한다. 아직도 많은 유기화학자들이 설파이드 대신 이전대로 싸이오에터(thioether)라 사용하고 있다. 치환식 명명법에서는 설파닐(sulfanyl)을 사용이 권장되나 알킬싸이오(alkylthio) 또는 '아릴싸이오(arylthio)' 등을 사용하고, 기-기능식 명명법에서는 '에터(ether)' 또는 '산화(oxide)' 대신에 '설파이드 (황화) (sulfide)를 사용한다.

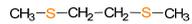
다음의 보기는 2가지 명명법을 보여 주고 있다.

보 기



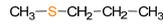
에틸설파닐에테인
Ethylsulfanylethane

다이에틸 설파이드(황화 다이에틸)
Diethyl sulfide



1,2-비스(메틸설파닐)에테인
1,2-Bis(methylsulfanyl)ethane

1,2-비스(메틸싸이오)에테인
1,2-Bis(methylthio)ethane



1-메틸설파닐프로페인
1-Methylsulfanylpropane

메틸 프로필 설파이드 (황화 메틸 프로필)
Methyl propyl sulfide



1-에틸설파닐프로판-1-올
1-Ethylsulfanylpropan-1-ol

1-(에틸싸이오)-1-프로판올
1-(Ethylthio)-1-propanol



1-에톡시-1-에틸설파닐뷰테인
1-Ethoxy-1-ethylsulfanylbutane

1-에톡시-1-(에틸싸이오)뷰테인
1-Ethoxy-1-(ethylthio)butane

4개 이상의 헤테로원자가 사슬 내부에 포함되는 경우에는 치환명방법이 편리하다. 산소원자는 옥사(oxa), 황원자는 싸이아(thia)로 탄소를 대체한다.



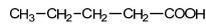
Methoxymethoxymethylsulfanylmethylsulfanylmethane
8-Dioxa-4,6-dithianone

9. 카복실산 등의 유기산의 명명법

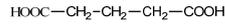
IUPAC 체계에서는 특성기를 주원자단으로 선택할 때 카복실산은 양이온 다음의 순위가 된다. 유기산에서 다음에 설편산, 설편산, 포스폰산, 포스핀산, 보론산 등의 순서가 된다. 산 유도체는 유기산 다음이며 그 뒤를 이어 산무수물, 에스터, 할로젠화 아실, 아마이드, 하이드라지드, 이미드, 아미딘 등의 순위가 된다. 모든 산 이름은 우리말에서는 붙여 쓴다. 카복실산의 접미사는 경우에 따라 -카복실산 (-carboxylic acid), -산 (-oic acid)로 사용되며 접두사인 경우는 카복시- (carboxy-)로 사용한다.

9.1. 단순한 사슬형 카복실산

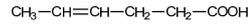
해당되는 탄화수소의 이름을 -산을 붙여 쓰면 된다. 단 포화 탄화수소의 -에인은 -안으로 바꾼다. 예를 들면 펜테인을 펜탄으로 바꾸어 펜탄산으로 사용한다. 영어 명에서는 해당 탄화수소의 끝에 있는 e를 제거하고 -oic acid를 붙여 쓴다. 카복실산기가 두 개 존재하는 경우에는 -이산 (-dioic acid)를 붙여 쓴다. 영문에서는 해당 탄화수소의 e를 제거하지 않은 채 -ioic acid를 사용한다.



펜탄산
Pentanoic acid



펜테인산
Pentanedioic acid
관용명: 글루타르산
glutaric acid



헥스-4-엔산
hex-4-enoic acid

9.1.1. 허용되는 관용명

우선 몇가지의 허용되는 관용명의 예를 들었다. 화학식에 대한 첫 명명법은 IUPAC이고 다음 명명법은 관용명이다. 특히 뷰티르산의 영어 표기법에 유의할 필요가 있다.

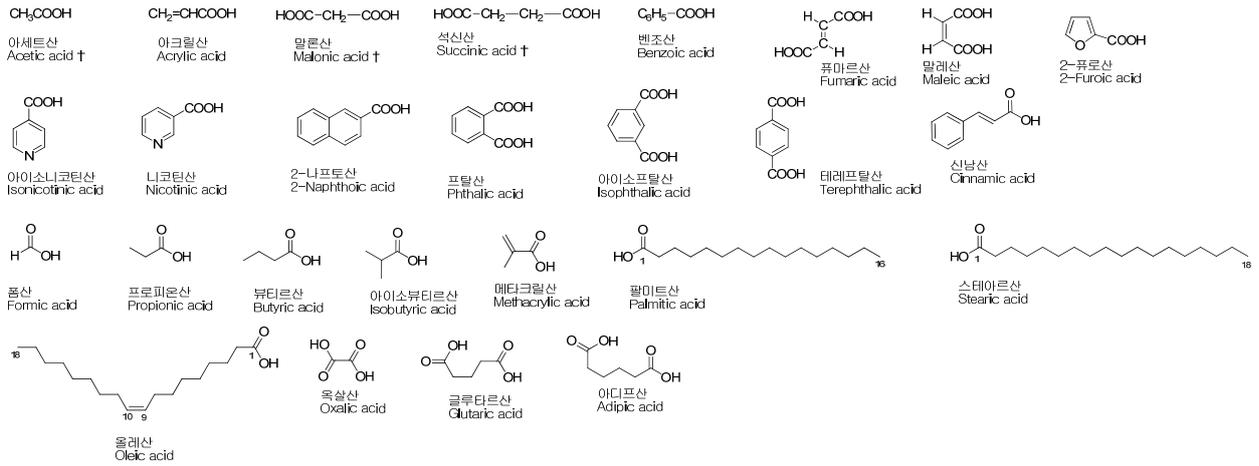
HCOOH: 메탄산(Methanoic acid) 폼산(Formic acid)

CH₃COOH: Etanoic acid, 아세트산 (Acetic acid)

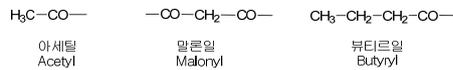
CH₃CH₂COOH: 프로판산 (Propanoic acid), 프로피온산 (Propionic acid)

CH₃CH₂CH₂COOH: 뷰탄산 (Butanoic acid), 뷰티르산 (Butyric acid)

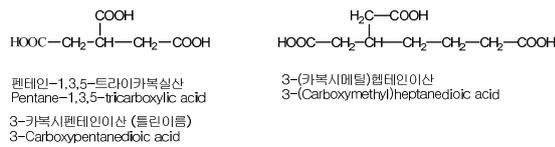
일반적으로 허용되는 관용명에서 유의할 점은 개미산 (ant acid), 식초산 (vinegar acid), 안식향산 (benzoic acid(매죽나무)로부터 얻은 발삼 수지인 안식향(storax)에서 얻은 산이라는 의미) 등의 통상명은 사용하지 말아야 한다. 또한 IUPAC명법과 다른 독일식 이름을 번역한 일본식 산 표기, 예를 들면 스테아린산 (스테아르산), 올레인산 (올레산), 말레인산 (독일어로 maleinsäure, 발음대로 번역하면 말라인산이어야 함, 말레산), 팔린산 (말산)등을 사용하지 말아야 한다. 다음에 보다 광범위한 카복실산의 관용명을 예시하였다.



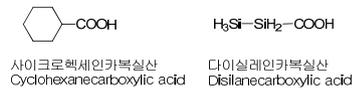
영어의 관용명에서는 -ic acid로 끝나고 있는 것을 유의하여야 한다. 카복실산에서 -OH 기를 제거하여 생성된 일가 및 이가의 아실 (acyl) 기의 이름은 -oic acid 인 경우에는 -오일(-oyl), -ic acid 인 경우에는 -일 (-yl)로 끝난다.



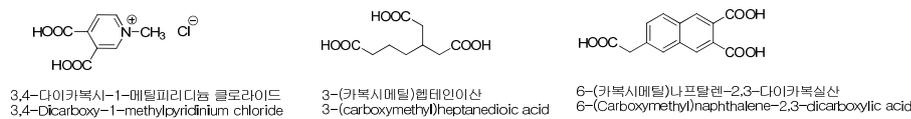
3개 이상의 카복실기가 사슬에 치환된 경우에는 -트라이카복실산, -테트라카복실산 등의 이름을 붙인다.



이외에 고리(지방족 고리 혹은 아렌)나 탄소이외의 원자에 부착된 카복실산의 명명은 고리와 원자이름을 모체로 하고 접미사 -카복실산을 붙여 명명한다.

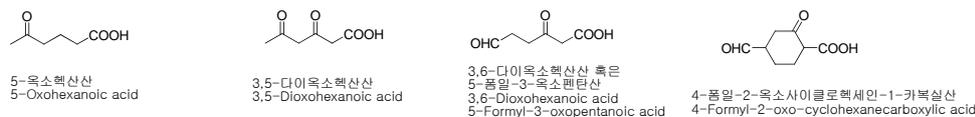


마찬가지로 카복실산을 접두사로 사용할 수 밖에 없는 경우가거나 우선권이 카복실산 보다 높은 기능이 존재하면 카복실산은 카복시(carboxy), 디카복시(dicarboxy), 트라이카복시(tricarboxy) 등의 접두사로 표시한다.



9.2. 치환된 카복실산

알데하이드기나 케톤기를 포함하는 카복실산의 이름은 해당 단순카복실산에 =O 를 의미하는 옥소(oxo), 다이옥소 (dioxo) 등의 접두사를 붙이거나 알데하이드 (-CHO)를 의미하는 폼일(formyl)의 접두사를 붙여 명명한다.



다이카복실산이 관용명을 가진다면 하나의 카복시기를 알데하이드기로 치환한 경우 -산(-ic acid)를 -알데하이드산 (-aldehydic acid)로 바꾸어 명명한다.



말론알데하이드산
Malonaldehydic acid



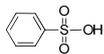
프탈알데하이드산
Phthalaldehydic acid

9.3. 싸이오카복실산

카복실산에서 1개 이상의 COOH기의 산소 원자가 황 원자로 치환되어 있는 경우 접미사 싸이오산 (thioic acid), 다이싸이오산 (dithioic acid) 및 카보싸이오산 (carbothioic acid), 보다이싸이오산 (carbodithioic acid)라 명명한다. 이때 생기는 CSOH와 COSH간의 모호성을 피하기 위하여 싸이오(thio) 혹은 카보싸이오 (cabothio) O-산 및 싸이오 혹은 카보싸이오 S-산이라고 구별한다. CSSH의 경우 다이싸이오산 (dithioic acid) 혹은 카보다이싸이오산 (carbodithioic acid)라 명명한다.

9.4. 칼코젠산 (Chalcogen acid)

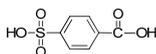
칼코젠 원소 중 황의 산들의 간단한 예만 들어보면 -SOOH 는 접미사로는 설핀산 (-sulfinic acid), 접두사로는 설포- (sulfo-)로 사용된다. -SO3H 는 접미사로는 설포산 (sulfonic acid)으로, 접두사로는 설포노 (sulfino-)로 사용된다.



벤젠설포산
Benzenesulfonic acid



뷰테인-2-설피산
Butane-2-sulfinic acid



4-설포벤조산
4-Sulfobenzoic acid

9.5. 인의 산 (Phosphorus acid)

유기기에 직접 연결된 인의 산, 즉 유기인산의 명명은 다음의 모체를 기준으로 한다.



포스핀산
Phosphinic acid

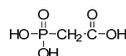


포스폰산
Phosphonic acid

이에 따른 보기를 들면 다음과 같다.



다이페닐포스핀산
Diphenylphosphinic acid



포스포노아세트산
Phosphonoacetic acid



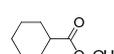
에틸포스폰산
Ethylphosphonic acid

9.6. 퍼옥시산 (Peroxy acid)

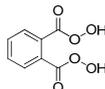
-C(=O)-OOH기를 가지는 산을 퍼옥시산 (peroxy acid)라 한다. 이전에는 퍼옥시산의 명명은 해당되는 산 (-oic acid) 혹은 카복실산(-carboxylic acid), 및 관용명 앞에 접두사 퍼옥시- (peroxy-)를 붙였지만 현재는 퍼옥소산 (-peroxoic acid) 혹은 카보퍼옥소산 (-carboperoxoic acid)이라고 명명한다.



프로페인퍼옥소산
propaneperoxy acid



사이클로헥세인퍼옥소산
cyclohexanecarboxyloxy acid



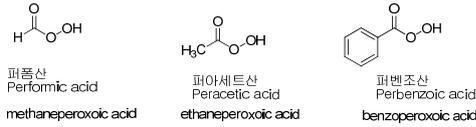
benzene-1,2-bis(carboxyloxy) acid
phthalodiperoxy acid

퍼옥시프로피온산
Peroxypropionic acid

사이클로헥실퍼옥시카복실산
Cyclohexylperoxy-carboxylic acid

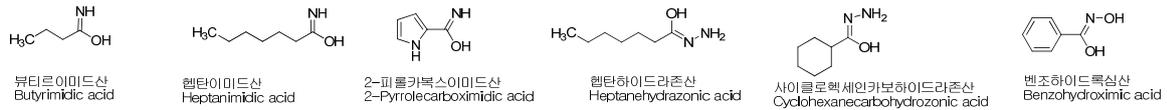
다이퍼옥시프탈산
Diperoxyphthalic acid

다음의 관용명은 허용한다.



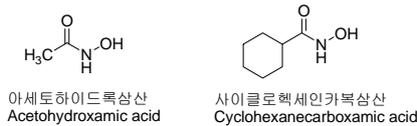
9.7. 이미드산 (Imidic acid), 하이드라존산 (Hydrazoneic acid) 및 하이드록삼산(Hydroxamic acid)

카복실기의 카보닐 산소원자가 =NH, =N-NH2 혹은 =N-OH로 치환된 경우 산 대신 이미드산, 하이드라존산, 하이드록삼산이라 명명한다. 영어 명명에서는 산의 어미 -oic, 및 -ic를 imidic acid, hydrazoneic acid, hydroxamic acid로 고쳐 명명하고, -carboxylic은 -carboximic acid, -carbohydrazoneic acid, -carbohydroxamic acid로 명명한다. 발음의 편의상 h와 앞의 자음 사이에 'o' 를 삽입한다.



9.7.1. 하이드록삼산 (Hydroxamic acid)

카복실기의 하이드록시기 -NH-OH로 치환된 산은 -산 (-oic acid, -ic acid) 을 하이드록삼산 (-hydroxamic acid), 카복실산은 카보하이드록삼산 (-carbohydroxamic acid)로 바꾸어 명명한다.



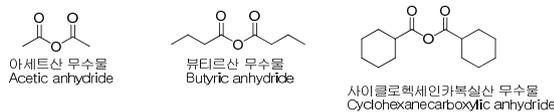
10. 유기산 유도체: 산 무수물 (acid anhydride), 아실 할라이드 (acyl halide), 에스터 (ester) 및 산 염 (salt)

유기산의 유도체는 명명법의 순위가 유기산 다음에 위치하고 있다. 순위는 산 무수물(anhydrides), 에스터 (esters) 아실 할라이드 (acyl halides), 아마이드 (amides), 하이드라자이드 (hydrazides), 이미이드 (imides), 아마딘 (amidines) 등이 된다. 이 중 아마이드에 대한 명명은 아민 항목에서 다루기로 한다.

10.1. 카복실산 무수물 (Carboxylic acid anhydride)

10.1.1. 대칭형 무수물

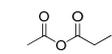
모노카복실산의 대칭형 무수물은 치환기가 없을 경우 '산' 뒤에 '무수물' 을 덧붙여 명명한다. (영어명에서는 'acid' 를 'anhydride' 로 바꾸어 명명한다).



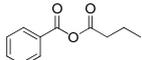
치환된 모노카복실산의 무수물은, 대칭적으로 치환되었다면, 그 산의 이름에 접두사 '비스- (bis-)' 를 붙이고 '무수물' 을 뒤에 붙여 명명한다. (영어명에서는 'acid' 를 'anhydride' 로 바꾼다). 그러나 '비스(bis) 를 생략할 수도 있다.

10.3. 혼합산 무수물

혼합산 무수물 (서로 다른 일염기산의 무수물)은 두 산의 이름을 영어명의 알파벳순으로 놓고 '무수물' 을 뒤에 붙여 명명한다. (영어명에서는 두 산의 이름의 첫 (특정)부분을 알파벳순으로 놓고 'anhydride' 를 뒤에 붙여 명명한다).



아세트산 프로피온산 무수물
Acetic propionic anhydride



벤조산 뷰티르산 무수물
Benzoic butyric anhydride

10.4. 폴리카복실산의 무수물

폴리카복실산의 고리형 산 무수물은 이것이 비록 헤테로 고리형 구조를 가지더라도 -산 무수물로 명명할 것을 권장하며, 필요에 따라 위치번호를 추가한다. 접합 고리 성분의 이름은 접합고리의 명명법을 따른다.



dihydrofuran-2,5-dione
석신산 무수물
Succinic anhydride



프탈산 무수물
Phthalic anhydride



1,2-사이클로헥세인다이카복실산 무수물
1,2-Cyclohexanedicarboxylic anhydride



benzo[de]isochromene-1,3-dione
naphthalene-1,8-dicarboxylic anhydride



1,3-dihydrobenzo[de]isochromene



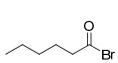
1H-isochromene

10.5. 아실 할라이드 (할로젠화 아실) (Acyl halide)

카복실기의 하이드록시기가 할로젠으로 바뀐 화합물을 아실 할라이드(acyl halides 혹은 할로젠화 아실) 혹은 산 할라이드 (acid halide 혹은 할로젠화 산)이라고 한다. 아실 할라이드는 아실기 (RCO-) 이름 뒤에 상응하는 할로젠화 음이온 이름이 가도록 명명한다. 즉, 클로라이드, 브로마이드, 아이오다이드가 각각 Cl, Br, I의 음이온 이름이 된다. (한편 예전 방법에 따라서 아실기 이름 앞에 할로젠화 음이온의 이름이 오는 것도 허용이 된다. 이 경우에는, 염화, 브로민화, 아이오딘화가 Cl, Br, I에 각각 해당된다. 파생한 구조성분 이름이 긴 경우에 할라이드 구조 성분과 멀리 떨어져 인식의 문제가 생긴다. 보기의 괄호안은 예전 방법에 따른 명명법이다. 영어로 산에 해당되는 -ic acid는 -yl, -oic acid는 -oyl로 바꾸고 -카복실산 (-carboxylic acid)는 -카보닐 (-carbonyl)로 바꾼 다음 할라이드를 붙여 기-기능기 명명법으로 두 단어로 띄어 쓴다.



아세틸 클로라이드
(염화 아세틸)
Acetyl chloride



헥산오일 브로마이드
(브로민화 헥산오일)
Hexanoyl bromide



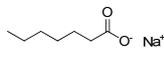
벤조일 아이오다이드
(아이오딘화 벤조일)
Benzoyl iodide



사이클로헥세인카보닐 클로라이드
(염화 사이클로헥세인카보닐)
Cyclohexanecarbonyl chloride

10.6. 산염 (Acid Salt)

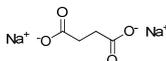
무기산과 마찬가지로 유기산의 중성염은 음이온이 양이온 앞에 가도록 명명한다. (영어 명에서는 양이온 다음에 음이온이 온다.) 그러나 복잡한 구조식에 대하여서는 양이온 뒤에 에이트 (-ate)로 끝나는 음이온이 오도록 사용한다. 이것은 에스터의 경우와 마찬가지로 상대적으로 간단한 구조를 가지는 음이온을 먼저 명명하면 구조식을 보다 쉽게 인지할 수 있기 때문이다.



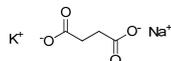
소듐 헵타노에이트
(헵탄산 소듐)
Sodium heptanoate



포타슘 아세테이트
(아세트산 포타슘)
Potassium acetate

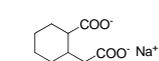


다이소듐 석시네이트
(석신산 다이소듐)
Disodium succinate

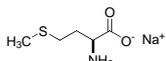


포타슘 소듐 석시네이트
(석신산 포타슘 소듐)
Potassium sodium succinate

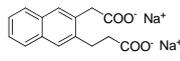
그러나 산의 카복실기가 전부 접속사로서 명명되지 않은 경우에는 (산)의 (금속)염처럼 간접적인 명명법을 사용한다. 다른 종류의 산잔기 (acidic residue)가 한 구조에 존재하는 경우에는 순위가 낮은 음이온을 에이트(-ate)는 아토(-ato), 아이드(-ide)는 이도(-ido)로 바꾸어 접두사로 사용한다. -COO⁻의 음이온은 카복실라테 이도 (-carboxylato)로 명명한다.



다이소듐 2-카복실레이트사이클로헥세인아세테이트
Disodium 2-(carboxylatocyclohexane)acetate



메티오닌의 소듐염
Sodium salt of methionine

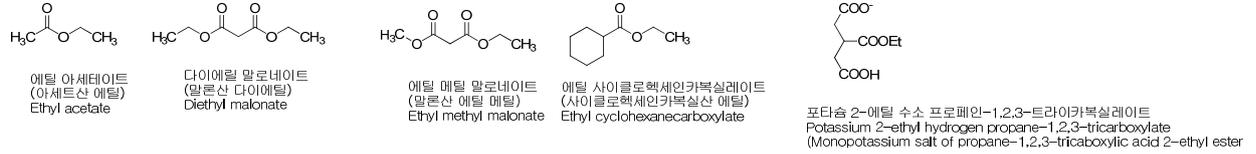


다이소듐 3-(카복실레이트메틸)-2-나프탈렌프로피오네이트
Disodium 3-(carboxylatomethyl)-2-naphthalenepropanoate

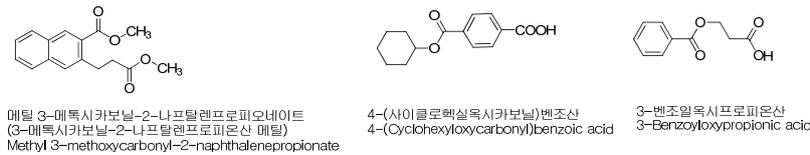
카복실산의 산성염은 중성염과 같은 방법으로 명명하되 양이온 다음 수소 (hydrogen) 혹은 경우에 따라 이수소 (dihydrogen)을 삽입한다.

11. 에스터 (Ester)

카복실산 등의 중성 에스터는 중성염과 같은 방법으로 명명되되, (a) 양이온의 이름 대신에 알킬 또는 아릴기 등의 이름을 사용하며, (b) 산의 '(금속)염 [(metal salt)]' 대신에 산의 '(알킬 또는 아릴)에스터 ((alkyl 또는 aryl) ester)' 와 같은 서술형의 간접식 명명법을 쓴다.



화합물 R¹-CO-OR²의 에스터기는 (a) R¹ 기에 주원자단으로서 인용될 우선순위가 앞선 치환기가 있을 경우에는 -CO-OR² 기에 대하여 접두사 '알콕시카보닐 (alkoxycarbonyl-)' 또는 '아릴콕시카보닐- (aryloxycarbonyl-)' 등을 사용하여 명명하며, (b) R²기에 주원자단으로서 인용될 우선순위가 앞선 치환기가 있을 때는 R¹ 기에 대한 접두사 '아실콕시-(acyloxy-)' 를 사용하여 명명한다.



예외로 CH₃COO- 에 대하여 아세톡시(Acetoxy)라는 약어를 사용한다.

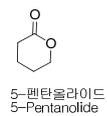
화합물 R¹C(OR²)₃ 등은 가상적인 오쏘산(ortho acid) R¹C(OH)₃의 R² 에스터로 명명한다.



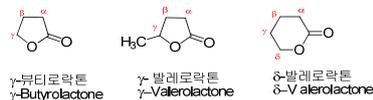
12. 락톤과 락타이드 (lactone and lactide)

하이드록시산의 하이드록시기와 카복시기 사이에서 분자 내 탈수에 의해 고리형 에스터가 형성되었다고 볼 수 있는 화합물을 '락톤(lactones)' 이라 부른다.

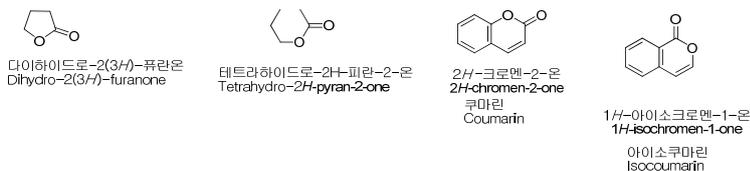
지방족 카복실산으로부터 형성된 락톤은 같은 수의 탄소수를 가지는 탄화수소(하이드록시기가 없는)의 이름에 '-올라이드(-olide)' 를 추가하여 명명한다(영어명에서는 모음 앞에 오는 끝의 'e' 가 있으면 이것을 생략한다).



하이드록시기가 없는 산의 관용명으로부터 유도된 다음의 흔히 쓰는 이름은 피오되며 이들의 치환 생성물을 명명하는 데 사용해도 좋다. 그러나 다른 락톤들에 대해 이 원칙을 확대 적용해서는 안 된다.



IUPAC에서는 락톤은 헤테로 고리형 화합물에 대한 IUPAC 규약에 따라서 사용하며 헤테로 고리계에 속한다고 생각되는 관용명도 쓸 수 있다.



13. 아민(Amine)

아민은 암모니아 (NH₃)의 한 개 이상의 수소가 비아실 (non-acyl) 유기 원자단으로 치환된 유도체라 정의할 수 있다. ‘아민(amine)’은 화합물 NH₂R, NHR¹R² 및 NR¹R²R³에 대하여 사용하며 이들을 각각 1차, 2차 및 3차 아민이라 부른다. (넓은 의미에서 고리에 질소를 가지는 화합물도 질소 원자의 염기성 때문에 아민류로 간주된다. IUPAC에서는 치환명명법 (alkanamine)을 권장한다. 보기로 기-기능 명명법의 메틸 아민 (methyl amine)은 치환명명법에서는 메탄아민 (methanamine)이 된다. 아민은 하이드론화 반응(hydration)에 의하여 양이온을 생성한다. 이러한 양이온은 -음 (-ium)을 아민 뒤에 붙여 사용한다. 예 CH₃NH₃⁺는 메탄암모늄 (methanammium)이라고 부른다. H⁺는 IUPAC에서는 천연 존재의 수소로부터 얻어지는 것으로 하이드론(hydrion)이라고 부른다. 1H 동위원소로부터 얻는 양이온을 양성자 (proton)이라고 구별한다. NH₂기가 주원자단이 아닌 경우에는 접두사 ‘아미노-(amino-)’로 명명한다. 보기로 2-아미노에틸- (2-aminoethyl-)을 들 수 있다. RNH-, R²N- 및 R¹R²N- 기는 아민의 ‘인(ine)’을 ‘이노(ino)’로 바꾸어 치환된 아미노기로서 명명한다. 보기로 메틸아미노- (methylamino-)를 들 수 있다. NH₃⁺의 양이온 치환기는 아자늄일 (azaniumyl)로 사용한다. 이 이름은 NH₃의 체계명인 아제인 (azane)에서 파생되었다. 아미노산 글라이신(glycine)의 쯔비터 이온인 NH₃⁺-CH₂-CO₂⁻는 아자늄일아세테이트 (azaniumylacetate)가 된다.

아미늄 이온 가운데 질소 원자가 수소원자를 가지지 않는 것은 사차(quarterary) 암모늄 이온이라 부른다. 질소 원자에 부착한 네 개의 치환체를 알파벳 순위로 배열하고 암모늄 (NH₄⁺)를 모체로 한다. 예를 들면, (CH₃)₄N⁺는 테트라메틸암모늄이 된다. 그러나 PIN 치환 명명법은 *N,N,N*-트라이메틸메탄아미늄 (*N,N,N*-trimethylmethanaminium)이 된다.

13.1. 일차 아민 (Primary amine)

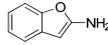
일차 아민(RNH₂)은 다음 3방법 중 하나를 택하여 명명한다.

- (a) 치환 원자단 R의 이름을 어미 수소화물 아제인 (azane)의 이름에 접두어로 붙인다.
- (b) 어미 수소화물 RH의 이름에 접미어인 ‘-아민’을 붙인다. (Alkamine)
- (c) 치환 원자단 R의 이름에 ‘-아민’을 붙인다.

방법 (b)는 PIN으로 CAS에서 권장하는 명명법이다.



- (a) 4-퀴놀릴아제인 4-Quinolylazane
- (b) 퀴놀린-4-아민 Quinolin-4-amine
- (c) 4-퀴놀릴아민 4-Quinolylamine



- (a) 1-벤조퓨란-2-일아제인 1-Benzofuran-2-ylazane
- (b) 1-벤조퓨란-2-아민 1-Benzofuran-2-amine
- (c) 1-벤조퓨란-2-일아민 1-Benzofuran-2-yl amine

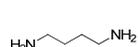
관용명으로 사용되는 보기는 다음과 같다.

C ₆ H ₅ NH ₂	아닐린 (aniline)
CH ₃ O-C ₆ H ₄ -NH ₂	아니시딘 (anisidine)
C ₂ H ₅ O-C ₅ H ₄ -NH ₂	페네티딘 (phenetidine)
CH ₃ -C ₆ H ₅ -NH ₂	톨루이딘 (toluidine)

아닐린 유도체의 관용명 접두사는 다음과 같다.

C ₆ H ₅ NH-	아닐리노 (aniline-)
CH ₃ O-C ₆ H ₄ -NH-	아니시디노 (anisidino-)
C ₂ H ₅ O-C ₅ H ₄ -NH-	페네티디노 (phenetidino-)
CH ₃ -C ₆ H ₅ -NH-	톨루이디노 (toluidino-)

1차 다이아민과 폴리아민의 경우에는 치환명명법인 (b)를 사용한다.

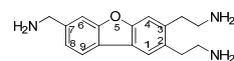


뷰테인-1,4-다이아민
Butane-1,4-diamine



나프탈렌-1,8-다이아민
Naphthalene-1,8-diamine

만일 1차 아민이 고리계의 곁가지에만 존재한다면 방법 (b)나 (c)를 사용한다.

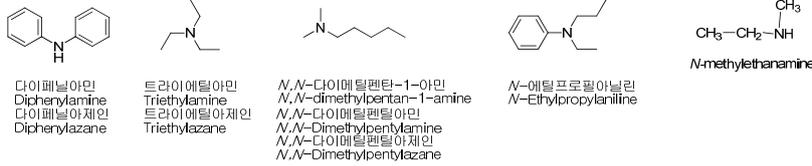


7-(아미노메틸)다이벤조퓨란-2,3-비스(에틸아민)
7-(Aminomethyl)dibenzofuran-2,3-bis(ethylamine)

혹은
2,3-비스(아미노에틸)-7-(아미노메틸)다이벤조퓨란
2,3-Bis(2-aminoethyl)-7-(aminomethyl)dibenzofuran

13.2. 2차 및 3차 아민

2차와 3차 아민에 대하여서는 1차 아민 명명법과 가장 우선순위가 높은 1차 아민의 N치환 생성물로 명명한다. 일반적으로 치환 명명법을 가장 흔히 사용하여 명명한다.



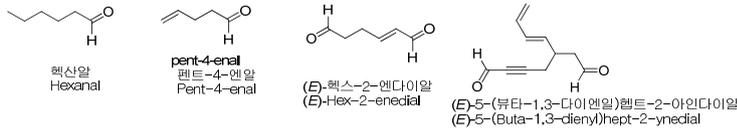
14. 알데하이드(Aldehyde), 케톤 (ketone) 및 아세탈 (acetal) 등 유도체

흔히 CO로 표기하는 카보닐기 (>C=O)가 탄소 및 수소에 붙어 있는 경우에 알데하이드(aldehyde)라고 부르며 이 작용기를 -CH=O 혹은 흔히 CHO로 표시한다. C=O 원자단이 두개의 탄소와 연결된 경우에 케톤(ketone)이라 부른다. 일반 구조식을 갖는, RR'C(O-R'') (O-R'''), R와 R'이 수소이거나 아니거나 모두 합쳐 아세탈(acetal)이라고 한다. '케탈(ketal)'은 아세탈류의 일부분을 이루며 R와 R' 모두 수소가 아니다. 이전의 정의에서 아세탈은 알데하이드의 유도체만을 인정하였지만 현재 IUPAC은 보다 광범위하게 정의하고 있다.

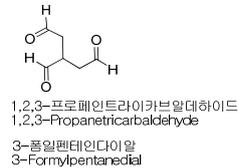
14.1. 알데하이드 (aldehyde)

알데하이드는 접미사로 카복실산의 명명법의 원칙과 같이 '-알(-al)', 또는 '-카르알데하이드(-carbaldehyde)'를 사용한다. 이외에 접두사 '폼일(-formyl-)' [탄소사슬의 말단 원자단으로서 존재하는 CHO 원자단에 해당]을 사용하거나 또는 관용명에다 접두사 '옥소-(oxo-)' (=O에 해당)를 붙여서 명명한다.

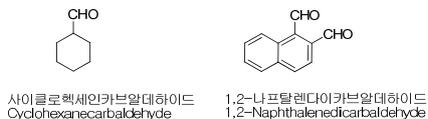
가지가 없는 비고리형 모노알데하이드(monoaldehyde) 또는 다이알데하이드(dialdehyde)의 이름은 접미사 '-알(-al)' (모노알데하이드의 경우) (영어명에서 모체화 합물 어미에 'e'가 있을 때는 그것을 생략한다) 또는 '-다이알(-dial)' (다이알데하이드의 경우)을 같은 수의 탄소원자를 가지는 탄화수소의 이름에 첨가하여 만든다.



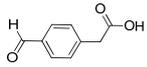
같은 골은 사슬에 부착된 3개이상의 CHO 원자단이 붙어 있는 경우 최대수의 알데하이드기를 가지고 있는 가장 긴 사슬의 이름에 '-트라이카르발데하이드(-tricarbaldehyde)', '-테트라카르발데하이드(-tetracarbaldehyde)' 등을 첨가하여 만든다. 이와 달리 주사슬이 다이알인 경우 알데하이드기를 폼일(formyl)로 치환하기도 한다.



한 개 이상의 알데하이드기가 붙어있는 고리형 알데하이드에 대하여서는 고리계의 이름에 접미사 '-카르알데하이드(-carbaldehyde)', '-다이카르알데하이드(-dicarbaldehyde)' 등을 첨가하여 만든다.



주원자단으로서의 인용 우선 순위가 앞서는 원자단이 함께 존재할 때는 고리형 화합물의 알데하이드기는 접두사 '폼일(-formyl-)'로 명명한다.



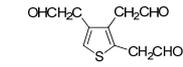
2-(4-formylphenyl)acetic acid
p-포름일페닐아세트산
p-Formylphenylacetic acid

고리계에 있는 질소원자에 붙어 있는 -CHO 기는 접두사 '폼일-(formyl-)' 로 명명하거나 또는 접미사 '-카르발데하이드(-carbaldehyde)' 를 사용한다.



3-포름일싸이아졸리딘
3-Formylthiazolidine
또는
3-싸이아졸리딘카르발데하이드
3-Thiazolidinecarbaldehyde

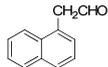
고리형 성분을 포함하는 사슬형 알데하이드에 대하여서는 앞서 IUPAC의 치환식 명명법(PIN)과 달리 CAS에서는 접속식 명명법 (conjunctive nomenclature)을 사용한다. 즉 고리형 성분을 한 분자로 간주하여 사슬형 성분 이름을 앞에 붙인다.



치환식: 싸이오펜-2,3,4-트라이알데하이드

Thiophene-2,3,4-triacetaldehyde

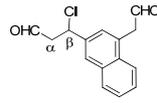
접속식: 싸이오펜-2,3,4-트라이아세트알데하이드
Thiophene-2,3,4-triacetaldehyde



치환식: 2-(나프탈렌-1-일)아세트알데하이드

2-(naphthalen-1-yl)acetaldehyde

접속식: 1-나프탈렌아세트알데하이드
1-naphthaleneacetaldehyde



치환식: 3-클로로-3-[4-(2-옥소에틸)나프탈렌-2-일] 프로피온알데하이드

3-Chloro-3-[4-(2-oxoethyl)naphthalen-2-yl]propionaldehyde

접속식: β-클로로-4-(2-옥소에틸)나프탈렌-2-프로판알
β-Chloro-4-(2-oxoethyl)naphthalene-2-propanal

14.1.1. 허용하는 관용명

알데하이드에 상응하는 일염기성 산이 관용명을 가지고 있을 때 알데하이드의 이름은 그 산 이름의 어미 '-산(-ic acid 또는 -oic acid)' 을 '-알데하이드(aldehyde)'로 바꾸어서 관용명을 만들 수 있다.

HCHO	폼알데하이드	Formaldehyde
CH ₃ CHO	아세트알데하이드	Acetaldehyde
CH ₃ CH ₂ CHO	프로피온알데하이드	Propionaldehyde

관용명식으로 명명된 다염기성 산들의 카복실기들이 알데하이드기들로 바뀌어서 얻어지는 알데하이드들의 이름은 '-산(-ic acid)' 을 '-알데하이드(-aldehyde)' 로 바꾸어서 관용명을 만든다.

CH ₂ (CHO) ₂	말론알데하이드	Malonaldehyde
OCH-CH ₂ CH ₂ -CHO	석신알데하이드	Succinaldehyde
OCH-CH ₂ CH ₂ CH ₂ -CHO	글루타르알데하이드	Glutaraldehyde
OCH-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -CHO	아디프알데하이드	Adipaldehyde
<i>o</i> -C ₆ H ₄ (CHO) ₂	프탈알데하이드	Phthalaldehyde
<i>m</i> -C ₆ H ₄ (CHO) ₂	아이소프탈알데하이드	Isophthalaldehyde
<i>p</i> -C ₆ H ₄ (CHO) ₂	테레프탈알데하이드	Terephthalaldehyde

예외:

OCH-CHO 글리옥살 Glyoxal

15. 아세탈(Acetal) 및 헤미아세탈(Hemiacetal)

아세탈류는 '알콕시-', '아릴콕시-' 등과 같은 치환명명법으로 명명하는 것이 PIN이며, 해당하는 어미수소화물 또는 어미 작용기 화합물의 유도체로도 명명된다. 또한, 작용기군의 명명법에 따라서 해당하는 알데하이드와 케톤의 이름 뒤에 산소에 붙어 있는 치환기(들)이 오고, 그 뒤에 여백과 '아세탈' 또는 '케탈' 이 따른다.

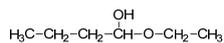


1,1-다이에톡시프로페인 1,1-Diethoxypropane
프로판알 디에틸 아세탈 Propanal diethyl acetal
프로피온알데하이드 디에틸 아세탈 Propionaldehyde diethyl acetal



1-에톡시-1-메톡시사이클로헥세인 1-Ethoxy-1-methoxycyclohexane
사이클로헥산온 에틸 메틸 케탈 Cyclohexanone ethyl methyl ketal

헤미아세탈의 경우 치환식으로 하이드록시 화합물의 알콕시 유도체로 명명하거나 헤미아세탈이라는 이름을 사용하여 아세탈과 같은 방법으로 작용기군 명명법을 사용할 수 있다.

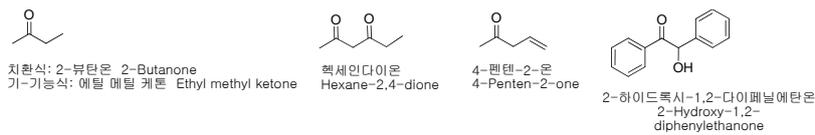


1-에톡시뷰탄-1-올
1-Ethoxybutan-1-ol
뷰탄알 에틸 헤미아세탈
Butanal ethyl hemiacetal

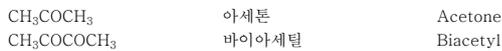
16. 케톤 (ketone)

케톤의 명명법은 알데하이드 명명법보다 다양한 명명법을 가진다. 케톤은 접미사 '-온(-one)', 접두사 '옥소-(oxo-)', 기능 부류명 '케톤(ketone)' 또는 특수한 경우에는 접미사 '-퀴논(-quinone)' 등을 써서 명명한다.

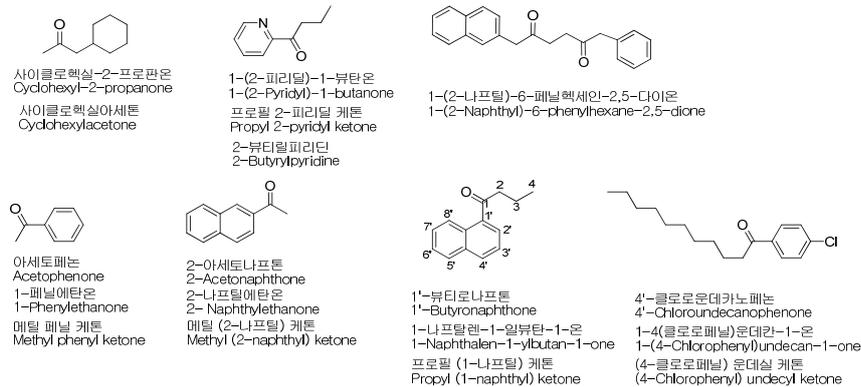
치환식 명명법에서 비고리형 케톤의 이름은 주사슬에 상응하는 탄화수소의 이름에 '-온(-one)' 또는 '-다이온(-dione)' 등의 접미사를 첨가해서 만든다(영어명의 경우 주사슬의 이름의 어미에 'e'가 있으면 'one' 앞에서 이것을 생략한다). 치환식 명명법과 병행하여 사용되는 방법으로서의 케톤 R¹-CO-R²의 기-기능식명(radicalfunctional name)은 먼저 R¹과 R²의 이름을 열거하고 그 다음에 '케톤(ketone)'이라는 낱말을 붙여서 만든다. 일반적으로 치환식 명명법이 기-기능식 명명법 보다 적용성이 더 좋다고 본다.



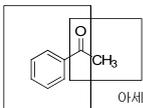
다음의 통상명을 그대로 사용한다.



고리형 성분을 포함하는 사슬형 케톤의 경우에는 치환식 명명법에 따라 고리계를 치환기로 보아 케톤기를 온, 다이온 등으로 표시한다. 그러나 카보닐기에 고리와 사슬이 붙어 있는 경우에는 명명법이 몇가지로 된다. 즉, 치환 명명법, 기-기능식 명명법, 아실기 이름을 고리 화합물 이름에 접두사로 붙이는 명명법 이외에 통상 명으로 고리가 벤젠이나 나프탈렌인 경우에 아실기에 상응하는 산의 이름의 어미 '-산(-ic acid 혹은 -oic acid) 대신에 각기 '-페논(-ophenone)' 및 '-나프톤(-onaphthone)'으로 바꾸어 명명하는 방법이 존재한다. -페논이나 -나프톤 명명은 다음 예에서와 같이 중첩성을 가져 명명법에서의 비합리성을 가진다.



페논 (Phenone)에 해당되는 부분



아세토 (Aceto)에 해당되는 부분

아세토페논은 Acetophenone

합리성을 부여하기 위하여 아세토페논 (acetophenone)은 메틸 페닐 케톤(methyl phenyl ketone)으로 명명할 수도 있지만 메탄온 (methanone)의 치환 명명법을 사용하여 메틸페닐메탄온(methylphenylmethanone)이라고 명명할 수가 있다.

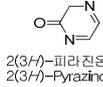
16.1. 고리형 케톤

고리계를 방향족 탄화수소로 명명한 경우에는 첨가된 수소의 위치를 표시하여 고리계의 이름에 -온(-one)을 붙인다. (영어명에서는 어미의 'e'가 존재하는 경우 이것을 생략한다).

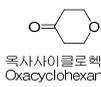


1(2H)-나프탈렌온
1(2H)-Naphthalenone

헤테로 고리형 케톤도 방향족 탄화수소 고리형 케톤과 유사하게 명명한다.



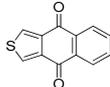
2(3H)-피라진온
2(3H)-Pyrazinone



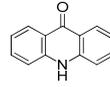
옥사시이클로헥산-4-온
Oxacyclohexan-4-one



1-아자나프탈렌-4(1H)-온
1-Azaphthalen-4(1H)-one



나프토[2,3-c]싸이오펜-4,9-다이온
Naphtho[2,3-c]thiophene-4,9-dione

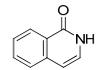


아크리딘-9(10H)-온
Acridin-9(10H)-one

그러나 -이딘(-idine)과 -올린(-oline)으로 끝나는 헤테로고리 화합물의 경우 -이딘온(-idinone)과 -올린온(-olinone) 대신 생략형으로 -이돈(-idone)과 -올론(-olone)이 흔히 사용된다.



피롤리딘-2-온
Pyrrolidin-2-one
2-피롤리돈
2-Pyrrolidone



아이스퀴놀린-1(2H)-온
Isoquinolin-1(2H)-one
1-아이스퀴놀론
1-Isoquinolone

16.2. 퀴논 (Quinone)

페논과 같이 통상명으로 방향족 불포화 고리형 다이케톤(diketone) 혹은 테트라케톤(tetraketone)들은 방향족 화합물 이름에 접미사 -퀴논(-quinone) 혹은 -다이퀴논(-diquinone)을 붙여서 명명한다.

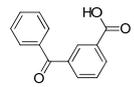


[1,4]나프토퀴논
[1,4]Naphthoquinone
나프탈렌-1,4-다이온
Naphthalene-1,4-dione

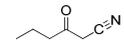


[1,4]벤조퀴논
[1,4]Benzoquinone
사이클로헥사-2,5-다이엔-1,4-다이온
Cyclohexa-2,5-diene-1,4-dione

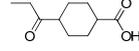
케톤기가 주원자단으로서 다른 원자단보다 순위가 낮을 때는 접두사 '옥소(-oxo-)'를 사용한다. 즉, 치환체로 케톤기가 사용되는 경우 옥소(O=)를 일반적으로 사용한다. 그러나 카보닐기(C=O)가 직접 붙은 경우에는 아실(acyl)명을 흔히 사용한다. 이외에 관용명으로 인정되는 몇가지 기의 이름을 사용한다.



3-벤조일벤조산
3-Benzoylbenzoic acid



3-옥소헥세인나이트릴
3-Oxohexanenitrile



4-(1-옥소프로필)사이클로헥세인카복실산
4-(1-Oxopropyl)cyclohexanecarboxylic acid

16.3. 케톤기의 관용명

H₃C-CO-CH₂-
H₃C-CO-CH=
C₆H₅-CO-CH₂-
C₆H₅-CO-CH=

아세톤일
아세톤일리덴
페나실
페나실리덴

acetyl
acetylidene
phenacyl
phenacylidene

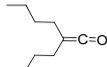
17. 케텐 (Ketene)

화합물 CH₂=C=O는 '케텐'이라는 이름을 갖는 화합물의 작용기 어미화합물이다. 케텐 유도체들은 모든 치환기들을 접두어로 표시하거나 케텐의 명명규약을 이

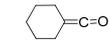
용하여 명명한다.



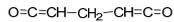
에텐온
Ethenone (ketene)



다이부틸케텐
Dibutylketene



사이클로헥실리덴메탄온
Cyclohexylidenemethanone

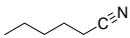


펜타-1,4-다이엔-1,5-다이온
Penta-1,4-diene-1,5-dione

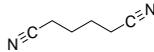
18. 나이트릴 (Nitriles) 및 아이소나이트릴 (Isonitriles) 및 관련 화합물

18.1. 나이트릴 화합물 (Nitriles)

원자단 CN을 함유하는 화합물의 부류명은 '나이트릴(nitrile)' (치환식 명명법) 또는 시안화물(cyanide)' (기-기능식 명명법)이다. 비고리형 탄화수소의 주사슬 끝에서 H3를 ≡N으로 대체한 화합물 RCN은 그 탄화수소의 이름에 '-나이트릴(-nitrile)' 또는 '다이나이트릴(-dinitrile)' 등을 붙여서 명명한다.



헥세이나이트릴 Hexanenitrile

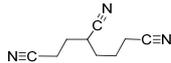


헥세이나이디나이트릴 Hexanedinitrile

나이트릴 화합물은 흔히 유기화학적 관점에서 카복실산의 유도체라 취급한다. 따라서 체계적 이름이 '-카복실산(-carboxylic acid)' 으로 끝나는 산 R-COOH에서 파생한 것이라 간주하여 화합물 RCN의 이름은 어미를 '-카보나이트릴(-carbonitrile)' 로 바꾸어 명명하기도 한다.



사이클로헥세인카보나이트릴
Cyclohexanecarbonitrile



1,3,6-헥세인트라이카보나이트릴
1,3,6-Hexanetricarbonitrile
4-사이아노옥테인다이디나이트릴
4-Cyanoctanedinitrile

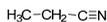


싸이아졸-2-카보나이트릴
Thiazole-2-carbonitrile

관용명을 가진 산 R-COOH에서 유도된 것으로 간주하는 화합물 RCN의 이름은 음절 '-산' 을 '-나이트릴' 로 바꾸어 명명한다(영어명에서는 '-oic acid' 또는 '-ic acid' 를 '-onitrile' 로 바꾸어 명명한다).



벤조나이트릴
Benzonitrile

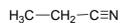


프로피오노나이트릴
Propionitrile



옥살로나이트릴
Oxalonnitrile

기능식 명명법에 있어서는 화합물 RCN은 R기 이름 앞에 CN 원자단에 대한 이름 '시안화' 를 붙인다 (영어명에서는 R기의 이름 뒤에 'cyanide' 가 오도록 한다).

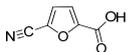


시안화 에틸
Ethyl cyanide

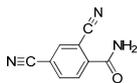


시안화 벤조일
Benzoyl cyanide

화합물에 주원자단으로서의 인용 우선순위가 앞서는 원자단이 CN과 함께 함유되어 있을 때는 -CN 원자단을 접두사 '사이아노(-cyano-)' 로 명명한다.



5-사이아노-2-퓨로산
5-Cyano-2-furic acid



2,4-다이사이아노벤즈아마이드
2,4-Dicyanobenzamide

18.2. 시안화 (Cyanide) 및 이와 관련된 원자단

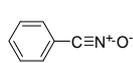
나이트릴이라고도 부르는 시안화 화합물은 카복실산의 -COOH 치환체를 C≡N으로 치환하여 파생된 이름을 가진다. 다음에 시안화 화합물과 이에 관련된 아이소이

안화 등의 원자단에 대하여 부류명과 접두사로 사용되는 경우를 표로 표시하였다. 표의 순서는 기능 부류명으로 인용될 경우 우선 순위가 낮아지는 차례가 된다.

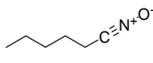
원자단	기능 부류명 및 속명	접두사
-CN	시아니드(물) cyanide	사이아노 cyano-
-NC	아이소시아니드(물) isocyanide	아이소사이아노 isocyano-
-OCN	시아산(염 또는 에스터) cyanate	사이아네이트 cyanato-
-NCO	아이소시아산(염 또는 에스터) isocyanate	아이소사이네이트 isocyanato-
-SCN	싸이오시아산(염 또는 에스터) thiocyanate	싸이오사이아네이트 thiocyanato-
-NCS	아이소싸이오시아산(염 또는 에스터) isothiocyanate	아이소싸이오사이아네이트 isothiocyanato-

18.3. 산화 나이트릴 (Nitrile oxide)

화합물 $RC\equiv NO$ 의 통상명은 '산화 나이트릴(nitrile oxide)'이다. 개별적인 명명에서는 나이트릴(nitrile) [시아니드(cyanide)가 아님]로 명명된 화합물 RCN의 이름앞에 '산화'라는 또 하나의 낱말을 첨가한다. (영어명에서는 RCN의 이름 뒤에 'oxide'가 오도록 한다.)



산화 벤조나이트릴
Benzonitrile oxide



산화 헥세인나이트릴
Hexanenitrile oxide

19. 라디칼, 이온 및 라디칼-이온 (Radical, ion, and radical-ion)

1993년 권장 규칙에서는 이전에 사용한 자유 라디칼 (free radical)의 수식어 자유(free)를 사용하지 않는다. 이전에 자유 라디칼이라는 용어는 화학종으로서의 라디칼과 치환 명명법에 있어서의 치환원자단을 기(radical)와 구별하기 위하여 사용하였던 것이다. 치환기(substituting radical)라는 용어는 치환원자단 (substituting group)으로 사용하기를 권장하고 있다. 라디칼과 이온의 명명법에서의 우선 순위는 IUPAC과 Chemical Abstract가 상이하게 사용하고 있다. IUPAC 순위는 라디칼>음이온>양이온>중성 배위 화합물>음이온 순서이다.

유기명명법에서는 대부분의 라디칼, 이온과 관련된 화학종은 형식적으로 어미 수소화화합물 (parent hydride) 혹은 특성 원자단으로부터 수소원자의 상실 혹은 수소이온의 첨가에 의하여 파생한다고 간주한다. (예외로 아실라디칼과 해당 양이온은 형식적으로 산으로부터 -OH 원자단을 하이드록시 라디칼 혹은 하이드록사이드 (수산화) 이온으로 상실함으로써 파생한다고 간주할 수 있다.) 이러한 작업은 라디칼 혹은 이온 중심에서 치환할 수 있는 수소의 숫자를 변경하는 작업은 다음과 같이 연산 접미사 (operational suffix)나 접두사 (operational prefix)로 기술할 수 있다. 접미사는 어미 수소화 화합물의 이름에 개별적이거나 조합으로 첨가하거나 치환명명법에서 주요한 특성을 표시하기 위하여 몇개의 통상적인 접미사에 첨가할 수도 있다.

모체 수소화 화합물	형식 조작	중간체	접미사
R-H	-H [·]	R [·]	-일 (-yl)
R ₂ CH ₂	-2H [·]	R ₂ C [·]	-일리덴 (-ylidene)
R-H	-H ⁺	R ⁻	-아이드 (-ide)
R-H	-H ⁻	R ⁺	-일륨 (-ylium)
R-H	+H ⁺	RH ₂ ⁺	-륨 (-ium)

연산 접미사는 어미 수소화 화합물의 이름 끝이거나 기능성 접미사에 첨가하여 치환가능한 수소의 갯수가 상이하다는 것을 표시하는 접사를 말한다. 예를 들면, "-륨(-ium)", "-일륨 (-ylium)", "아이드(-ide)", 와 전통적인 소감적 접미사 (traditional subtractive suffixes)인 "-일(-yl)", "-엔(-ene)" 및 "-아인(-yne)"이 연산 접미사에 해당된다.

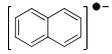
보 기

1. 전자의 제거

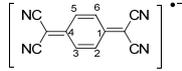


프로펜 라디칼 양이온
propene radical cation

2. 전자 첨가



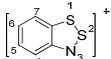
나프탈렌 라디칼 음이온
Naphthalene radical anion



2,2'-(사이클로헥사-2,5-다이엔-1,4-다이일리덴)-
다이알로노나이트릴 라디칼 음이온

2,2'-(cyclohexa-2,5-diene-1,4-ylidene)dimalononitrile
radical anion

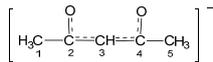
3. 하이드라이드(hydride) 음이온 제거



3H-벤조[d][1,2,3]다이싸이아졸 이온(1+)
3H-Benzothiazole ion(1+)

3H-1,2,3-다이싸이아졸 이온(1+)
3H-1,2,3-Benzothiazole ion(1+)

4. 하이드론(hydrion) 제거

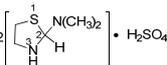


펜테인-2,4-다이온 이온 (1-)
Pentane-2,4-dione ion (1-)

아세틸아세토네이트 이온
Acetylacetonate ion

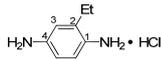
주: 하이드론 (hydrion)이라는 이름은 수소 양이온, 즉 천연에 존재하는 양성자(proton), 중양성자 (deuteron), 삼중양성자 (triton)의 혼합물에 대한 총칭이다. 양성자라는 이름은 질량수 1, 즉 1H⁺에 한하여서만 사용한다.

5. 하이드론 (hydrion) 의 첨가



비스(N,N-다이메틸싸아졸리딘-2-아민) 설페이트
Bis(N,N-Dimethylthiazolidin-2-amine) sulfate

비스[2-(N,N-다이메틸아미노)싸아졸리딘] 설페이트
Bis[2-(Dimethylamino)thiazolidine] sulfate

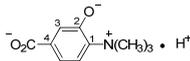


2-에틸벤젠-1,4-다이아민 모노염화수소화물
2-Ethylbenzene-1,4-diamine monohydrochloride

6. 쯔비터 이온



3,4-다이페닐-1,2,3-옥사디아졸리딘-5-온
쯔비터 이온성 다이데히다이드로 유도체
3,4-Diphenyl-1,2,3-oxadiazolidin-5-one
zwitter ionic dihydro derivative

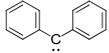


4-카복시-2-하이드록시페닐)트라이메틸양모늄
하이드록사이드 내부염
(4-Carboxy-2-hydroxyphenyl)trimethylammonium hydroxide inner salt
4-카복시-2-하이드록시-N,N,N-트라이메틸아닐륨
하이드록사이드 내부염
4-Carboxy-2-hydroxy-N,N,N-trimethylanilinium hydroxide inner salt

19.1. 카벤(carbene) 등의 2가 라디칼

단핵 어미 수소화물인 CH₄, NH₃ 및 SiH₄로부터 2개의 수소원자를 제거하여 유도된 2가 라디칼을 ‘메틸렌(methylene)’ 또는 ‘카벤(carbene)’, ‘아자닐리덴

(azanylidene) , '나이트렌(nitrene)' 또는 '아미닐렌(aminylene)' 그리고 '실릴렌(silylene)' 으로 각각 명명한다. 이러한 어미 수소화 화합물 라디칼의 유도체는 치환식으로(substitutively) 명명한다.



다이페닐 메틸렌
Diphenyl methylene
다이페닐카벤
Diphenylcarbene

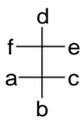


메틸아자닐리덴
Methyl azanylidene
메틸아자닐리덴
Methyl azanylidene
메탈나이트렌
Methylnitrene
메탈아미닐렌
Methylaminylene

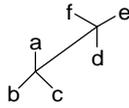
20. 입체화학의 명명법

20.1. 투영법

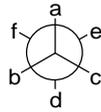
화합물의 3차원적 구조를 표시하는 데 투영법을 사용한다. 투영법에는 피셔투영법(Fischer projection), 톱질대 투영법(Sawhorse projection), 뉴만 투영법(Newman projection) 등이 있다. 이중 톱질대 및 뉴만 투영법은 2개 이하의 입체발생 중심(stereogenic center)을 가지는 화합물에 유용하다.



피셔투영

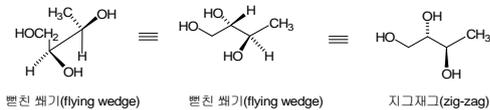


톱질대투영



뉴만투영

이외의 중요한 표시법으로 췌기형이 있다. 췌기형의 표시에는 뾰족 췌기(flying wedge) 표시법과 지그재그(zig-zag) 표시법을 사용하고 있다.

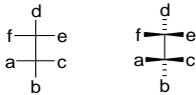


뾰족 췌기(flying wedge)

뾰족 췌기(flying wedge)

지그재그(zig-zag)

피셔투영을 췌기형으로 표시하면 다음과 같다. 췌기 표시를 보면 피셔투영에서 수평 부분(a,c,e,f)은 평면 위로 수직 부분 (b,d)은 평면 아래에 위치함을 알 수 있다.

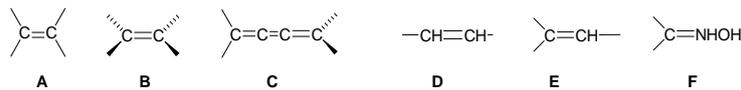


지그재그 표시법은 수소원자가 존재하는 카이랄 중심에 대하여 사용한다. 이때 수소의 입체 화학 및 수소의 존재는 생략한다.

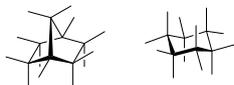
입체화학을 표시하는 데 중요한 것은 구조적 도해에 있어서 애매성이 없도록 유의하여야 한다. 1996 년 IUPAC 에서는 3차원적 구조를 표시하는 도식으로 다음을 권장하였다. 일반적으로 대략적으로 그림의 평면상에 위치하는 결합은 단순한 선을 사용하고 평면의 원자를 연결하는 결합은 굵은 췌기, **————** (췌기의 가는 부분은 평면상의 원자로부터 시작한다.)를 사용하고 평면아래의 원자를 연결하는 결합은 짧은 평행선들, **———**로 표시한다. 굵은 췌기 대신에 굵은 결합, **————** 을 사용하여도 무방하다. 평행선 대신 절쇄선 **----** 사용은 부분 결합, 비편제화 혹은 수소결합에 사용한다. 평행선의 췌기(절쇄선 췌기) **———**는 모호성때문에 사용하지 않는 것을 권장한다. 이 췌기는 사용자에 따라서 가는 끝부분이 그림의 평면에 위치하거나 보는 사람으로부터 가장 멀리 위치하게 되는 두 개의 상반된 모호성을 가지기 때문이다. 만일 입체화학인 알려지지 않은 경우에는 굵은 선 **~~~~~**를 사용한다. 접이나 축빈원을 사용하는 것은 적극적으로 반대한다. 따라서 IUPAC 에서 정사면체 입체화학의 표시는 다음과 같이 권장된다.



이중결합의 표시는 입체화학을 표시하여야 하는 경우 (A, B, C)에는 약 120 도의 각도를 표시하도록 하고 만일 입체화학적 정보가 필요없는 경우(D,E,F)에는 직선 표현을 사용한다.



원근의 도해에는 전면은 굵은 혹은 췌기선을 사용하고 결합선이 앞으로 지나가는 경우에는 결합을 끊어 주어야 한다.



어떤 화합물의 입체적 구조는 입체화학을 규정하지 않는 이름에 붙여 주는 하나의 접사 또는 몇 개의 접사들에 의하여 표시된다. 이러한 접사를 설명하기 이전에 입체이성질체의 명명법은 우선 관련된 몇 가지의 용어를 이해할 필요가 있다.

20.2. 입체화학 관련 용어

입체이성질체 (Stereoisomer)

입체이성질체는 구성 원자들, 원자간 연결성 및 결합 다중성이 동일하지만 원자들의 입체배열이 다른 이성질체이다.

거울상 이성질체 (Enantiomer)

서로의 거울상을 이루어 겹쳐지지 않는 분자 본체 한쌍 중 한 분자

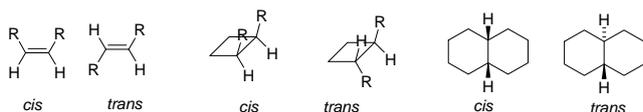
부분입체 이성질체 (Diastereoisomers)

거울상 이성질체 이외의 입체이성질체로 거울상과 관련되어 있지 않다. 부분이성질체는 물리적 및 화학적 성질이 다르다.

시스-트랜스 이성질현상 (cis-trans isomerism)

예전에는 기하학적 이성질 현상(Geometric Isomerism) 이라고 하였지만 현재는 사용하지 않기를 IUPAC 에서 권장한다.

원자들 또는 원자단들이 서로, 입체이성질체간에 공통적이라고 인지할 수 있는 기준평면의 같은 면에 위치하면 시스(cis) 또는 반대면에 위치하면 트랜스(trans)라고 말한다. 이러한 관계가 생기는 화합물을 시스-트랜스(cis-trans) 이성질체라고 말한다. 이중결합의 원자들만 포함하는 화합물에 관하여 기준평면은 이중결합 원자들을 포함하고 이러한 원자들과 이에 직접적으로 결합된 원자들을 포함하는 평면과 수직이 된다. 고리화합물에 관해서는 기준평면은 고리의 골격이 놓이는 평면이거나 근접한 평면이 된다. 다른 단어나 위치표시자를 수식하는 데 있어서 시스(cis) 또는 트랜스(trans) 다음에 하이픈을 사용한다. 구조식에 첨가될 때는 시스(cis)는 *c*, 트랜스(trans)는 *t* 로 생략할 수 있다. 알켄화합물에 대하여 시스와 트랜스라는 용어는 모호하기 때문에 *E*, *Z* 표기법을 사용한다. 만일 고리에 2 개이상의 개체가 붙어있는 경우 시스와 트랜스를 사용하기 위하여 기준 치환체에 대하여 정의하여야 한다.

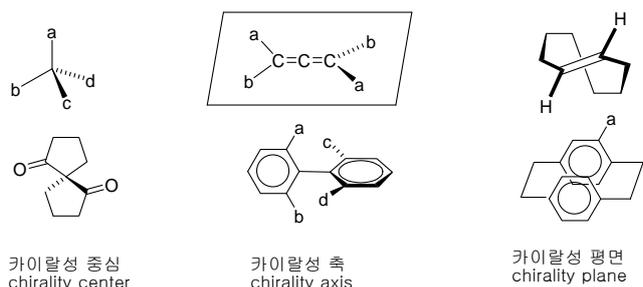


카이랄성(chirality)

견고한 대상 (혹은 점이나 원자의 입체적 배열)이 그 거울상과 겹쳐지지 않는 기하학적인 성질을 카이랄성이라고 한다. 이러한 대상은 2차적인 대칭요소가 없어야 한다. 2차적 대칭요소란 거울면 σ = S_1 도치 중심 i = S_2 및 회전-반사축 S_n 를 말한다. 카이랄성은 사용하는 사람에 따라 다른 의미로 분자에 사용된다. 일부는 전체 분자에 대하여 전적으로 사용하지만 반면에 일부는 분자의부분에 대하여 사용한다. 그러나 메조 화합물(meso-compound)을 반대의 카이랄성을 가지는 두 카이랄 부분으로 구성되어 있다고 사용하지 말아야 한다.

카이랄성 요소

카이랄성 요소는 카이랄 축 (chiral axis), 카이랄 중심(chiral center) 혹은 카이랄 평면(chiral plane)을 말한다. 어떤 사용자는 이중 결합(*E/Z*)을 포함하여 입체발생 단위 (stereogenic unit)라고도 한다.



1) 카이랄성 중심 (Chirality Center)

한 원자에 한 세트의 리간드가 붙어 입체적 배열이 거울상과 겹쳐지지 않게 되면 이 원자를카이랄성 중심이라고 한다. 카이랄 성 중심은 예를 들면 N^*abcd , $Pabc$ 및 $Cabcd$ 같은 중심원자에 대한 비대칭 탄소의 개념의 일반적 확장 개념이라고 할 수 있다. 유의할 점은 스페이로 화합물의 경우 카이랄 축이 아니고 카이랄성 중심을 가질 수 있다는 것이다.

2) 카이랄성 축 (Chirality Axis)

축을 중심으로 한 세트의 리간드가 붙어서 결과적으로 입체적인 배열이 거울상과 겹쳐지지 않으면 이 축을 카이랄성 축이라 한다. 예로 알렌 $abC=C=Ccd$ 에 대하여 카이랄 축은 $C=C=C$ 결합에 의하여 정의된다. 또한 오쏘 치환된 바이페닐에 있어서 원자 C-1, C-1', C-4 와 C-4' 는 카이랄 축상에 위치하게 된다.

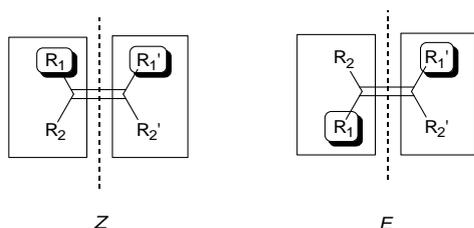
3) 카이랄성 평면 (Chirality Plane)

구조의 이웃에 연결하고 있는 평면적 단위가 한정된 회전때문에 대칭적인 평면이 되지 않는 경우 이러한 평면을 카이랄 성 평면이라고 한다. 예를 들면, (*E*)-사이

클로옥텐 ((E)-cyclooctene)에서 카이랄 평면은 이중결합 탄소원자와 4개의 이중결합에 부착된 원자를 포함한다. 마찬가지로 단일치환 파라사이클로페인에서 카이랄 평면은 3개의 수소원자와 고리에 연결된 3개의 다른 원자(다시 말하자면, 두개의 벤젠고리를 연결하는 두개의 사슬과 치환체로부터의 원자)를 가지는 단일치환 벤젠을 포함한다.

20.3. E/Z 표기법

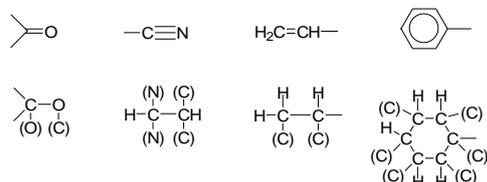
입체이성질체의 알켄 $R^1R^2C=CR^3R^4$ ($R^1 \neq R^2$, $R^3 \neq R^4$; R^1 혹은 R^2 or R^3 or R^4 와 달라야 할 필요는 없다.⁴⁾, 큐물렌 (cumulenes) $R^1R^2C[=C=C]_n=CR^3R^4$ 및 유사화합물. $R^1R^2C=NOH$, $HON=C[(CH_2)_n]_2C=NOH$ 에 대한 입체표시자 (stereodescriptor)가 E와 Z가 된다. 가장 높은 CIP 우선권의 원자 혹은 원자단이 이중결합의 한끝 (R^1 혹은 R^2)에 위치하고 나머지 다른 이중결합 끝에 부착된 원자나 원자단의 가장 순위를 비교하여 이중결합을 지나는 기준 평면의 서로 반대편에 위치하면 이성질체는 Z (zusammen = 함께, together)가 된다. 만일 서로 같은편에 위치하면 E (entgegen = 반대, opposite)가 된다. 이러한 개념은 결합차수가 1과 2사이인 구조에도 사용할 수 있으나 고리화합물에는 사용하지 않는다. 다음의 도해는 E/Z 표기를 보여 준다. 여기서 순위는 $R_1 > R_2$, $R_1' > R_2'$ 이다.



20.3.1. CIP 우선순위 (Cahn-Ingold-Prelog priority sequence)

E/Z 표기에서는 우선순위를 CIP 우선순위 법칙을 사용한다. 이 법칙은 다음과 같이

- 1) 원자의 우선 순위는 원자 번호가 클수록 순위가 높다. 예를 들면, $I > Br > Cl > S > p > F > O > N > C > H$. 전자쌍의 경우에는 원자 번호를 0인 유령원자(phantom atom)로 간주한다.
- 2) 만일 첫번째 비교 원자의 순위가 동일하면 바깥쪽으로 향한 다음 원자의 순위를 비교한다. 다음 순위도 같으면 계속 이러한 비교 과정을 되풀이한다.
- 3) 이중과 삼중결합은 각각 2개와 3개의 단일결합으로 나눈다. 이것은 이중 혹은 삼중결합하고 있는 원자를 2번 혹은 3번 복제하고 복제한 원자의 번호는 0으로 괄호안에 표시한다. $C(OR)_2$ 는 $C=O$ 보다 순위가 높다.



- 4) 동위원소인 경우 질량수가 크면 우선순위가 크다.

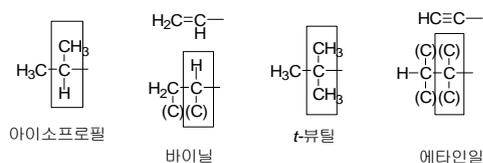
예를 들면, $T > D > H$ 가 된다.

- 5) 입체 이성질 리간드의 경우 (R)-치환체가 (S)-치환체보다 우선이 높고 Z(cis) 치환체가 E(trans)치환체 보다 순위가 높다.

순위의 예:

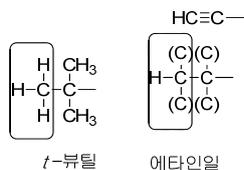
아이소펜틸 (isopentyl) < 아이소부틸(isobutyl) < 알릴(allyl) < 네오펜틸 (neopentyl) < 2-프로파인일 (2-propynyl) < 벤질(benzyl) < 아이소프로필 (isopropyl) < 바이닐(vinyl) < sec-부틸 (sec-butyl) < 사이클로헥실 (cyclohexyl) < 1-프로펜일 (1-propenyl) < tert-부틸(tert-butyl) < 이소프로펜일 (isopropenyl) < 에타인일(ethynyl) < 페닐(phenyl)

예를 들어 아이소프로필, 바이닐, t-부틸, 에타인일의 순서를 한번 자세히 보자.



첫번째 탄소를 검토하면 1개의 수소와 1개의 탄소가 붙어 있는 아이소프로필과 바이닐, 2개의 탄소가 붙어있는 t-부틸과 에타인일 (아세틸렌일)로 나누어 볼 수

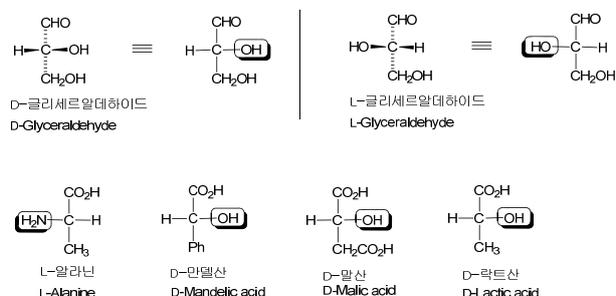
있다. 우선권은 2개의 탄소가 붙어 있는 것이 높다. 이제 *t*-뷰틸과 에타인일을 비교해보자. 다음의 비교에서 2번째 탄소를 보면 *t*-뷰틸은 3개의 수소가 붙어있고 에타인일에서 1개의 수소가 2개의 탄소가 붙어 있음을 알 수 있다. 따라서 에타인일이 우선권이 제일 높다. 마찬가지로 바이닐과 아이소프로필을 비교하면 바이닐이 2번째 비교 탄소에서 탄소가 1개 더 많아 아이소프로필보다 우선 순위가 높은 것을 알 수 있다.



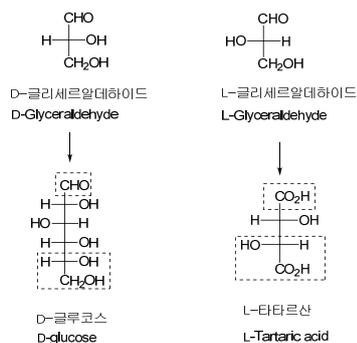
따라서 우선순위는 에타인일 > *t*-뷰틸 > 바이닐 > 아이소프로필로 감소한다.

20.4. 피셔-로자노프 (Fischer-Rosanoff) 표기법(or Rosanoff 표기법)

로자노프 (Rosanoff) 표기법보다는 피셔 (Fischer) 표기법으로 잘 알려져 있다. 로자노프에 의하여 (+)-글리세르알데하이드((+)-glyceraldehyde, ((*R*)-2,3-dihydroxypropanal))를 임의로 D-글리세르알데하이드 (D-glyceraldehyde)라 정하여 피셔 투영식에 따라서 절대적 입체배열을 정하는 방법을 말한다. 거울상 이성질체는 L-글리세르알데하이드 (L-glyceraldehyde)가 된다. D/L 명명은 정상적인 명명법에 의하여 1 번이 되는 원자를 주 사슬의 맨위에 위치하고 수직의 사슬에 따라 다른 원자나 원자단을 옆에 위치하도록 그린다. 다시말하면 RCHXR' 의 구조에서 R-C-R' 이 주사슬이 된다. 만일 X가 사슬의 오른쪽에 있으면 D, 왼쪽에 있으면 L이라 한다. 이 표기법은 4 차 탄소인 경우에는 적용을 할 수가 없지만 간단한 구조의 화합물에서 아직도 일부 사용되고 있으며 IUPAC에서는 현재 α-아미노산이나 탄수화물에 사용하고 있다. D와 L은 작은 대문자 (small capital letter)로 사용한다.



다음에 L-(+)-타르타르산의 구조는 생각하여 보자. 일핏 보아 2번 탄소에 하이드록시 작용기가 오른쪽에 있어 D-계통으로 생각하기 쉽지만 이것은 L-글리세르알데하이드에서 파생된 화합물로 간주하여 L-타르타르산이 된다. D-글루코스 (D-glucose)와 D-글리세르알데하이드 간의 구조 관계를 보면 쉽게 이해할 수 있다. 하여튼 D/L 표기법은 복잡한 구조의 입체를 표시하는 데 제약이 있다는 것을 알 수 있다. 우리는 R/S 표기법에 의하여 확실하게 입체배열을 표시할 수 있다.



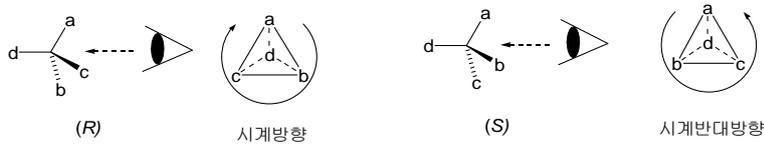
20.5. R/S 표기법

입체 표기의 순위 결정법 과정은 하나의 화합물에 관하여 절대적인 분자의 카이랄성 (handedness)을 규정하는 방법이다. 즉, 한 분자의 각 카이랄성 요소가 2개의 거울상 이성질체 형태 중 어느 것으로 존재하는가를 규정하는 방법이다. 분자 내의 각각의 카이랄 요소에 대하여 명명법이나 번호매기기에 관계없이 기호로 통상 이태릭체 *R* 또는 *S*로 표시한다. 이러한 기호들은 고려대상인 특정 화합물의 카이랄성을 정의한다. 이 과정은 직접적으로 구조의 삼차원적인 모델에 대하여 적용하며 이차원적인 투영에는 적용하지 않는다. 앞서 카이랄성 요소는 카이랄 중심, 카이랄 축 및 카이랄 평면이라고 하였다. 따라서 이러한 요소에 따라서 어떻게 R/S를 적용하는가 살펴보자. 편의상 일반적인 순위를 a>b>c>d라 하자.

20.5.1. 카이랄 중심

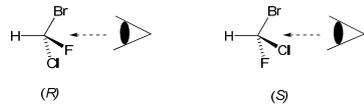
우선순위결정 과정에서 이 모델은 도시한 바와 같이 가장 순위가 낮은 리간드 d에서 가장 멀리 떨어진 방향에서 쳐다 본다. 다음 그림에서와 같이 원편 화합물에서 시계방향을 따라 a로부터 c까지 경로를 따라가면 (*R*) (오른쪽을 의미하는 라틴어 rectus)의 기호를 붙이고 오른쪽에서와 같이 시계반대방향의 경로에 대해서는

(S) (왼쪽을 의미하는 라틴어 sinister)의 기호를 붙인다.



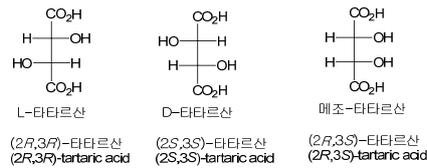
따라서 다음 보기에서 왼편 화합물은 (R)-브로모클로로플루오로메테인((R)-bromochlorofluoromethane), 오른편 화합물은 (S)-브로모클로로플루오로메테인 ((S)-bromochlorofluoromethane)이 된다.

보 기:



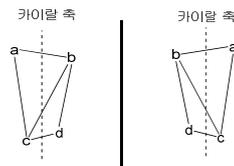
일반적 화합물의 이름에 있어서 R과 S의 기호는 보통 이름 앞에 위치번호와 함께 괄호 안에 넣는다. 타타르산의 보기는 다음과 같이 표시된다.

보 기

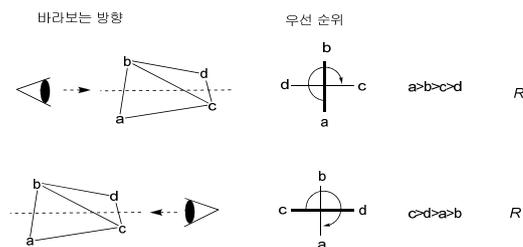


20.5.2. 카이랄축(chiral axis), 카이랄평면 (chiral plane) 및 나선성(helicity)

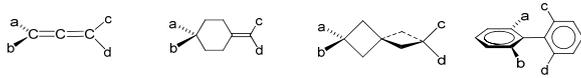
20.5.2.1. 카이랄 축 (chiral axis)



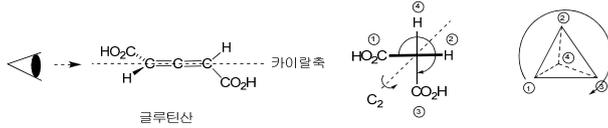
앞서 분자내 축의 카이랄성에 대하여 언급하였다. 카이랄축을 가지는 화합물의 경우, 카이랄 축 주위의 리간드 쌍을 교환하면 거울상 이성질체를 얻게 된다. 이러한 화합물에 대한 입체 이성질체의 R/S를 정하기 위하여서는 우선 순위 법칙에 부가적인 법칙을 적용하여야 한다. 즉, 축을 바라보는 방향에서 근접한 두 개의 원자(원자단)은 후면에 위치한 두 개의 원자(원자단)에 우선한다. 이에 따라 카이랄 축을 바라보는 방식에 관계없이 R/S를 정할 수 있게 된다.



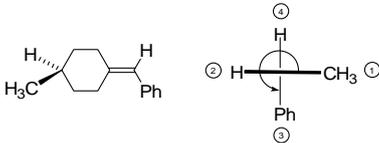
다음은 카이랄 축을 가지는 화합물의 예이다.



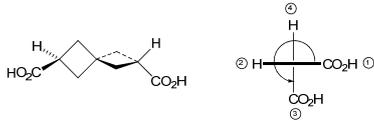
먼저 알렌 화합물의 보기를 글루타민산 (glutamic acid)의 입체화학을 보자. 이 화합물은 C_2 대칭축을 가지고 있다. 원편에서 본 투영은 다음과 같다. 우선 순위는 수평에 놓인 앞 쪽부터 카이랄축을 바라 보면 카복실산은 수소 보다 높다. 따라서 순위 1과 2가 정해졌다. 다음 3, 4위는 뒷쪽에 놓인 카복실산과 수소가 된다. 이러한 순위를 매긴 다음 R/S 를 정하면 보기의 화합물은 R 이 된다.



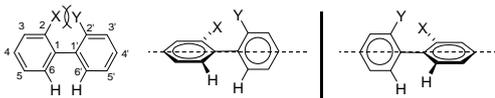
마찬가지로 다음 알킬리덴사이클로알케인 화합물은 (S)-벤질리덴-4-메틸사이클로헥세인 ((S)-1-benzylidene-4-methylcyclohexane)이 된다.



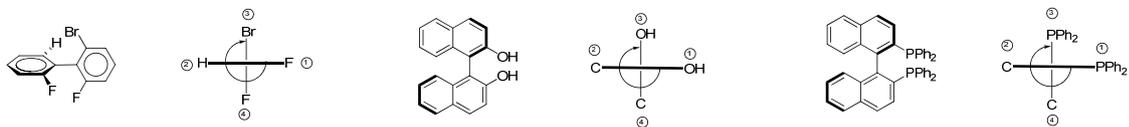
스파이로화합물의 보기를 들어보자. 다음 스파이로 화합물은 C_2 대칭축을 가진다. 원편에서 바라본 투영에서 우선권을 보면 입체화학은 S 가 된다. 이 화합물의 명명은 (S)-스파이로[3.3]헵테인-2,6-다이카복실산 ((S)-spiro[3.3]heptane-2,6-dicarboxylic acid)이 된다.



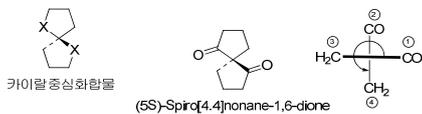
입체회전장에 이성질체(atropisomer)의 경우에는 단일결합의 회전에 따른 에너지 장애에 의하여 이성질체가 생긴다. 바이페닐 (biphenyl)의 경우 sp^2-sp^2 단일 결합을 중심으로한 회전에 의하여 입체이성질체가 생성된다. 이러한 경우 카이랄 축이 생긴다. 우선권은 2,6 및 2',6' -위치를 기준으로 한다.



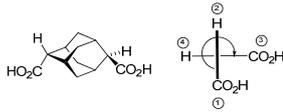
다음에 입체회전장에 이성질체의 R 입체화학의 보기를 들었다.



스파이로화합물의 경우 카이랄중심과 카이랄 축 모두가 존재하는 경우가 있을 수 있다. 이러한 경우에는 카이랄 중심이 우선한다. 다음의 보기를 들자. 다음의 화합물의 카이랄 중심은 S 가 된다. 만일 카이랄 축을 우선으로 틀리게 생각한다면 반대로 R 이 된다. 다시 한번 카이랄 중심이 카이랄 축 보다 우선이라는 점을 유의하여야 한다. 따라서 다음 화합물은 (S)-스파이로[4.4]노네인-1,5-다이온((S)-spiro[4.4]nonane-1,6-dione)이 된다. 마찬가지로 1,6-다이테트로치환 스파이로 화합물도 카이랄 중심으로 입체화학을 고려하여야 한다.



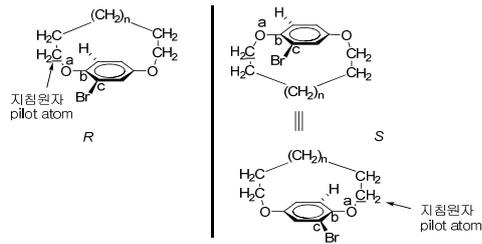
광활성 아다만테인(adamantine) 화합물에 대하여서도 카이랄 축을 생각할 수 있다. 다음 화합물의 입체화학은 R 이 된다.



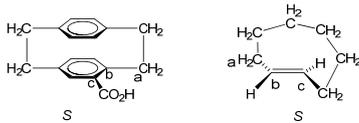
초분자 화합물(supermolecule)인 카테네인 (catenane)의 경우에도 카이랄 축을 적용할 수 있다.

20.5.2.2 카이랄 평면

카이랄 평면을 가지는 화합물의 경우 카이랄 평면 반대편의 리간드쌍을 서로 교환하면 거울상 이성질체가 얻어진다. 2-브로모하이드로퀴논(2-bromohydroquinone)에 다리(bridge)를 도입하면 브로모하이드로퀴논 평면으로부터 카이랄 평면이 얻어진다. 즉 다리가 브로모하이드로퀴논 평면을 대칭평면으로 변환한 것이다.

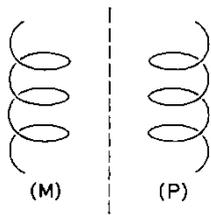


카이랄평면에 대하여 우선권 규약을 확대하기 위하여 지침 원자 (pilot atom)을 정하여야 한다. 지침원자는 평면에 바로 연결된 원자로 정한다. 따라서 앞서 분자에서 지침원자는 원편의 산소에 연결된 CH₂의 탄소원자가 된다. 지침원자로부터 평면을 바라보아 우선권에 해당되는 경로가 시계 방향이면 R, 시계 반대 방향이면 S라 한다. 앞서 원편 화합물의 경로는 CH₂-a-b-c의 시계방향이 되어 입체화학은 R이 된다. 다음에 몇가지 보기를 들었다.

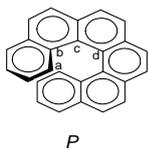


5.20.2.3 나선성 (helicity)

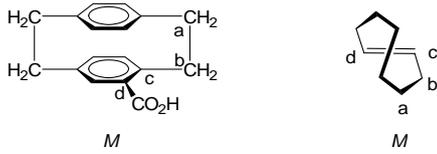
나선 (helix)은 본질적으로 카이랄성을 가진다. 나선의 축을 따라 보며 앞면에서 후면으로 움직일때 시계방향이면 우선성으로 P (plus) 시계 반대 방향이면 좌선성으로 M (minus) 로 표시한다. 엄밀히 말한다면 나선성 분자는 카이랄축을 가지고 있지만 편의상 나선성으로 표현한다.



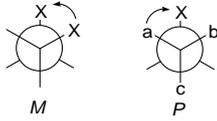
다음 헥사헬리센 (hexahelicene)의 보기를 보자. a-b-c-d 방향을 보면 우선성이 되어 입체화학은 P가 된다.



카이랄 평면의 경우에도 R/S 대신 나선성을 적용할 수 있다. R/S 표기에서 카이랄 평면과 카이랄 축을 표시하기 위하여 각각 R_p, S_p 및 R_a, S_a를 사용하기도 한다.



나선성은 카이랄 회전배열 이성질체 (chiral conformational isomer)에 대하여도 사용한다.



20.6 위치 배열(configuration)과 회전 배열(conformation)

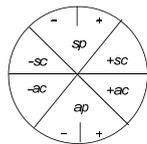
20.6.1 위치 배열 (configuration)

입체 화학에서 위치배열은 입체이성질체를 구분하는 공간에서의 분자내의 원자 배열을 말한다. *R/S* 과 *cis/trans* 표현은 위치배열을 말한다.

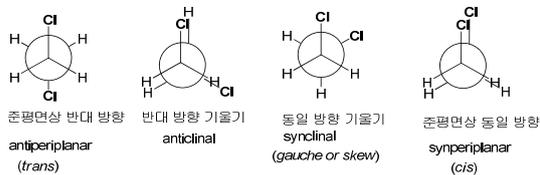
20.6.2. 회전 배열 (conformation)

형식적으로는 단일 결합의 회전에 의하여 서로 변환할 수 있는 입체 이성질체를 구분하는 공간에서의 분자 내 원자배열을 말한다.

회전 배열 이성질체(conformational isomer)를 구별하기 위하여서는 간단한 경우의 *M*과 *P* 보다는 비틀림각이 0° 로부터 $\pm 30^\circ$ 이내가 되는 경우 **준평면상 동일 방향** (synperiplanar) (*sp*), $\pm 60^\circ$ 이내가 되면 **동일 방향 기울기**(synclinal) (*sc*), $\pm 120^\circ$ 이내가 되면 **반대 방향 기울기** (anticlinal) (*ac*) 또는 $\pm 180^\circ$ 이내가 되면 **준평면상 반대 방향** (antiperiplanar) (*ap*) 에 놓여 있다고 말한다. 도해로 나타내면 다음과 같다. 대강 60° 의 기울기에 대하여 *gauche*를 사용하기도 한다.



1,2-다이클로로에테인의 입체 회전 배열은 다음과 같다.



극소 회전 배열체(conformer): 구별되는 포텐셜 에너지의 극솟값에 해당되는 입체 회전 배열에 의하여 특성화되는 하나의 입체 이성질체 집합체 중 한 요소라고 IUPAC에서 정의하고 있지만 일반적으로 무한 개수의 회전 배열 이성질체 (conformational isomer)를 의미하기도 한다. 따라서 이 용어를 사용함에 있어서 유의하여야 한다.

21. 명명법의 실제

유기화합물의 명명법은 첫째 주원자단을 정하고 둘째로 모체 구조를 정한다. 셋째로 치환체를 정한다. 치환체의 위치 표시자(번호) 표시는 알칸일 표기법을 따른다. 넷째로 해당 위치표시자 및 입체 표시자를 표시하여 이름을 완성한다. 다음에 주원자단을 정하는 순위와 모체 구조를 정하는 방법을 표시하였다.

21.1. 주원자단

IUPAC 명명법에서 주원자단을 정하는 우선 순위는 다음과 같다.

1. 라디칼
2. 음이온
3. 양이온
- 4 ' 쯔비터이온 화합물
- 5 ' 산: 카복실산(-COOH), 퍼옥시카복실산(C(O)OOH). 설펜산, 설펜산, 포스폰산, 포스핀산, 아포스폰산, 아포스핀산의 순서
- 6 ' 산의 유도체: 산무수물, 에스터, 황로겐화 아실, 아마이드, 하이드라이드, 이미드의 순서
7. 나이트릴, 사이나이드, 이소사이나이드의 순서
8. 알데하이드, 싸이오알데하이드의 순서
9. 케톤, 싸이오케톤의 순서
10. 알코올, 페놀, 싸이올 순서
11. 하이드로퍼옥사이드 싸이오하이드로퍼옥사이드의 순서
12. 아민, 이민, 하이드라진, 포스페인의
13. 에터, 설파이드의 순서
14. 퍼옥사이드, 다이설파이드 순서

21.2. 모체 구조

유기분자 골격의 모체를 정하는 법은 다음과 같은 방법에 따른다.

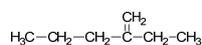
- 1) 주 원자단 (주 작용기)를 가장 많이 포함하는 사슬이나 고리 구조
- 2) 우선 순위의 헤테로 원자를 가장 많이 포함하는 사슬이나 고리

헤테로 원자의 순위는 N > P > As > Sb > Bi > B > Si > Ge > Sn > Pb > O > S > Se > Te

- 3) 고리 간의 순위는 IUPAC과 CAS 순위를 참조한다. 때로는 두 명명법에서 순위가 다른 경우가 있다.
 - a) 질소 포함하는 헤테로고리 b) 최대수의 개별 고리를 가지는 고리 c) 여러 고리계는 스파이로고리>다리걸친 접합고리 > 다리걸친 고리 > 접합 고리 d) 가장 큰 개별 고리 e) 고리 원자의 전체 개수가 가장 많은 고리 f) 다리 걸친 고리에서 2개 이상의 고리에 공통인 고리 원자 개수가 가장 많은 고리 g) 다리목이 위치 번호가 가장 작은 다리 걸친 고리 h) 최대수의 헤테로원자를 가지는 고리 i) 질소와 다른 우선 순위 헤테로 원자를 가장 많이 가지는 고리 (고리간의 순위는 O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B 가 된다. 이점 유의하여야 한다.) j) 가장 많은 직선상의 배열을 가지는 고리 성분을 가지는 고리 k) 헤테로원자에 가장 낮은 위치 번호를 가지는 고리 l) 최대수의 불포화를 가지는 고리 m) 가장 작은 위치 번호의 지시 수소 (첨가 수소가 아님)를 가지는 고리
- 4) 비고리형 헤테로원자를 가장 많이 가지는 비고리형 구조
- 5) 가장 연장할 수 있는 구조 (가장 큰 구조)
- 6) 가장 많은 비고리형 헤테로 원자를 가지는 비고리형 구조 O > S > Se > Te > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B
- 7) 가장 많은 다중결합을 가지는 구조 (같은 개수의 이중 + 삼중 결합 보다는 이중 결합이 우선임.)
- 8) 같은 구조 단위가 되풀이 되는 경우에는 중앙 단위에 이름을 기초한다.
- 9) 접두사로 표시한 치환체 개수가 가장 많은 구조
- 10) 치환체 접두사의 위치 번호가 가장 작은 구조

21. 3. 명명법의 보기

보기 1.

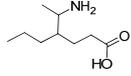


주사슬: 핵세인 (가장 긴 사슬이 짧은 불포화 사슬 보다 우선권을 가진다.)

치환체 : 3-메틸리덴

완성된 이름: 3-메틸리덴헥세인(PIN) (2-에틸펜트-1-엔은 이전 규칙에 따른 이름)

보기 2.



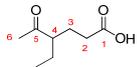
주원자단: 카복실산

모체 구조: 긴 사슬인 헵탄산

치환체: 1-아미노에틸

완성된 이름: 4-(1-아미노에틸)헵탄산 (4-(1-aminoethyl)heptanoic acid)

보기 3.



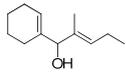
주원자단: 카복실산

모체 구조: 치환체가 2개인 옥소헥산산

치환체: 4-에틸, 5-옥소

완성된 이름: 4-에틸-5-옥소헥산산 (4-ethyl-5-oxohexanoic acid)

보기 4.



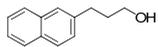
주원자단: 알코올

모체구조: 펜텐올

치환체: 사이클로헥스-1-엔-1-일

완성된 이름: (E)-1-(사이클로헥스-1-엔-1-일)-2-메틸펜트-2-엔-1-올 ((E)-1-cyclohexenyl-2-methylpent-2-en-1-ol)

보기 5.



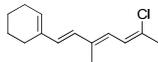
주원자단: 알코올

모체구조: 프로판올

치환체: 3-(나프탈렌-2-일)

완성된 이름: 3-(나프탈렌-2-일)프로판-1-올 (3-(naphthalen-2-yl)propan-1-ol)

보기 6.



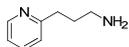
주 원자단: 없음

모체 구조: 사이클로헥센 (고리 > 사슬)

치환체: 6-클로로, 3-메틸헵타-1,3,5-트라이엔-1-일

완성된 이름: 1-((1E,3E,5Z)-6-클로로-3-메틸헵타-1,3,5-트라이엔-1-일)사이클로헥스-1-엔 (1-((1E,3E,5Z)-6-chloro-3-methylhepta-1,3,5-trienyl)cyclohex-1-ene)

보기 7.

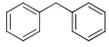


주원자단: 아민

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

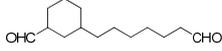
완성된 이름: 3-(피리딘-2-일)프로판-1-아민 (3-(pyridin-2-yl)propan-1-amine)

보기 8.



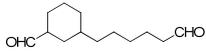
모체 구조: 메테인 (대칭 중심)
치환제: 페닐
완성된 이름: 다이페닐메테인 (diphenylmethane)

보기 9.



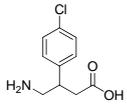
주원자단: 알데하이드
모체 구조: 헵탄알 (사슬이 탄소 개수가 더 많아 우선임)
완성된 이름: 7-(3-폼일사이클로헥실)헵탄알 (7-(3-formylcyclohexyl)heptanal)

보기 10.



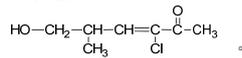
주원자단: 알데하이드
모체 구조: 사이클로헥세인카브알데하이드 (고리 알데하이드 탄소 개수가 많아 우선임)
치환기: 옥소
완성된 이름: 3-(6-옥소헥실)사이클로헥세인카브알데하이드 (3-(6-oxohexyl)cyclohexanecarbaldehyde)

보기 11.



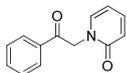
주원자단: 카복실산
모체화합물: 뷰탄산
치환기: 4-클로로페닐, 아미노
완성된 이름: 4-아미노-3-(4-클로로페닐)뷰탄산 4-amino-3-(4-chlorophenyl)butanoic acid

보기 12.



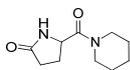
주원자단: 카보닐 (> O)
주사슬: 헥세인
모체 화합물: 3-헥센-2-온
치환기: 클로로, 하이드록시, 메틸
완성된 이름: 3-클로로-6-하이드록시-5-메틸-3-헥센-2-온
3-chloro-6-hydroxy-5-methyl-3-hexen-2-one

보기 13.



주원자단: 헤테로고리 케톤 (> 사슬 케톤)
모체 화합물: 피리딘-2(1H)-온
치환제: 옥소페닐에틸
완성된 이름: 1-(2-옥소-2-페닐에틸)피리딘-2(1H)-온 (1-(2-oxo-2-phenylethyl)pyridin-2(1H)-one)

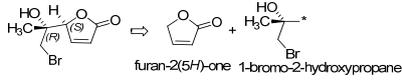
보기 14.



주원자단: 락톤
모체화합물: 피롤리딘-2-온
치환제: 5-(피페리딘-1-카보닐)
완성된 이름: 5-(피페리딘-1-카보닐)피롤리딘-2-온 (5-(piperidine-1-carbonyl)pyrrolidin-2-one)

CAS: 1-(5-oxo-2-pyrrolidinyl)carbonylpiperidine

보기 15.



주원자단: 헤테로고리 케톤 (> 사슬형 알코올)

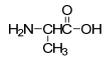
모체화합물: 퓨란-2(5H)-온

사슬 치환체: 브로모, 하이드록시

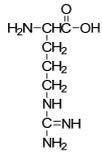
사슬 이름: 1-브로모-2-하이드록시프로페인

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)

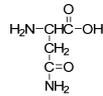
22. 20개 아미노산 (Amino acid) 이름과 약자 (세글자, 한글자)



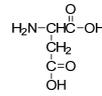
알라닌 alanine (Ala, A)



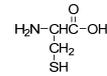
아지닌 arginine (Arg, R)



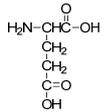
아스파라진 asparagine (Asn, N)



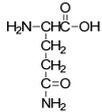
아스파르트산 aspartic acid (Asp, D)



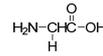
시스테인 cysteine (Cys, C)



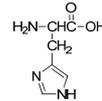
글루탐산 glutamic acid (Glu, E)



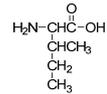
글루타민 glutamine (Gln, Q)



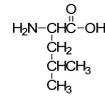
글리신 glycine (Gly, G)



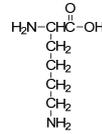
히스티딘 histidine (His, H)



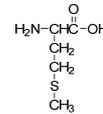
아이소류신 isoleucine (Ile, I)



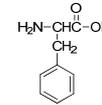
류신 leucine (Leu, L)



라이신 lysine (Lys, K)



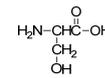
메싸이오닌 methionine (Met, M)



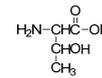
페닐알라닌 phenylalanine (Phe, F)



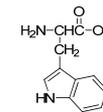
프롤린 proline (Pro, P)



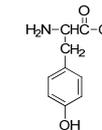
세린 serine (Ser, S)



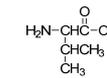
발린 valine (Val, V)



트립토판 tryptophan (Trp, W)



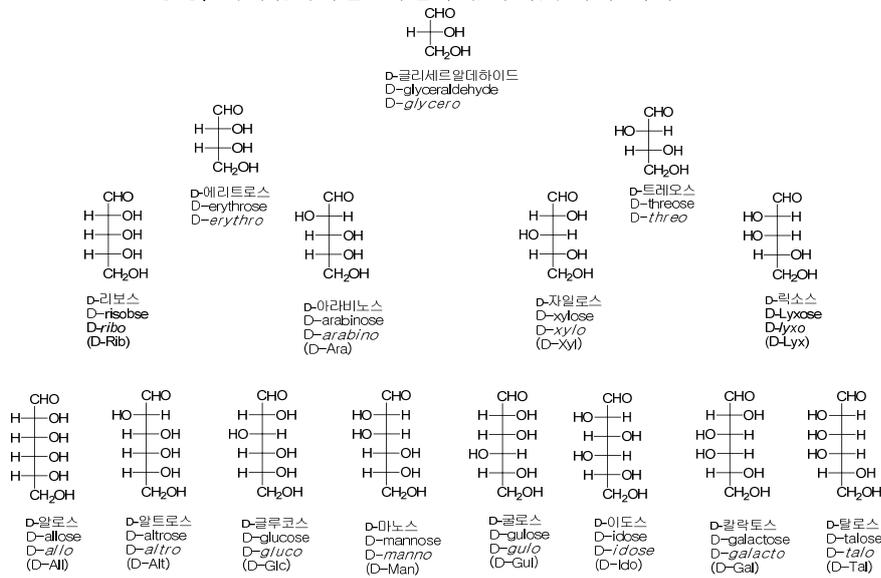
타이로신 tyrosine (Tyr, Y)



발린 valine (Val, V)

23. 탄수화물 명명법

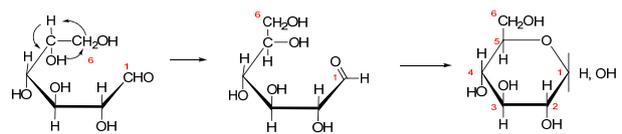
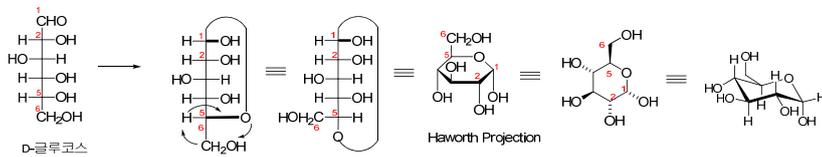
23.1. 관용명, 위치입체배열 (이탈릭체)의 접두사와 약자



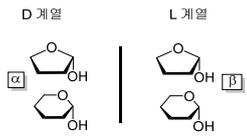
단당류 이름 중 과당(fruit sugar), 포도당(grape sugar), 엿당(malt sugar) 및 젓당 (milk sugar)은 관용명으로 권장하지 않는다. 각각의 화학명은 프룩토스, 글루코스, 말토스 및 락토스이다.

단당류의 고리형 헤미아세탈의 이름은 해당 열린 사슬 화합물의 이름에서 파생한다. 어미의 오스 (-ose)를 오원자 고리인 경우 -오퓨라노스 (-ofuranose), 육원자 고리인 경우는 -오피라노스, 칠원자 고리인 경우에는 -오셉타노스의 어미로 바꾸어 준다. α-글루코피라노스와 β-리보퓨라노스가 각각 육원자고리와 오원자고리의 보기이다.

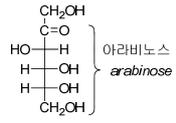
고리형 헤미아세탈을 흔히 하워스 (Haworth) 투영으로 표시하지만 밀스 (Mills) 표기법도 많이 사용하고 있다.



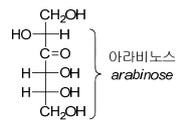
유의할 것은 L-계열의 아노머 구조이다. 알파와 베타가 D-계열과 반대로 바뀌어짐을 유의하시오.



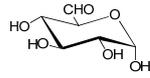
케토스의 경우는 위치입체배열을 이탈릭체인 접두사로 표시하며 어미를 -울로스 (-ulose)로 끝내며 카보닐기의 위치를 숫자로 표시한다. D-프룩토스 (D-fructose)는 IUPAC과 IUBMB 공동명명법에 의하면 D-arabino-헥스-2-울로스 (D-arabino-Hex-2-ulose)가 된다. 단당류의 아세탈 유도체를 글리코사이드(glycoside)라 부르고 각 모체 당류의 이름을 따른다. 보기 글루코사이드, 마노사이드.



D-*arabino*-헥스-2-울로스
D-*arabino*-Hex-2-ulose
(D-프럭토스)



D-*arabino*-헥스-2-울로스
D-*arabino*-Hex-3-ulose



α -D-*gluco*-헥사다이알도-1,5-피라노스
 α -D-*gluco*-Hexadiido-1,5-pyranose

24. 매크로분자 (고분자)의 명명법

매크로분자 혹은 고분자는 상대적으로 큰 분자 질량을 가지고 있는 분자로서 구조는 본질적으로 상대적으로 작은 질량을 가지는 분자의 구조단위인 단량체가 고분자 반응을 통하여 많은 반복 단위로 구성되어 있다. 고분자는 낮은 분자량의 화합물과 달리 구조가 균일하지가 않고 상이한 길이와 상이한 구조배열을 가지는 매크로분자의 혼합물이다. 폴리(염화 바이닐)은 염화 바이닐의 다양한 반복 구조 단위를 가지지만 이러한 사실과 관계없이 고분자 화학식 $-(CH_2CHCl)_n-$ 으로 표시한다. 고분자의 명명법은 관용적으로 사용하는 원료 기준 명명법 (source based nomenclature)와 IUPAC의 구조 기준 명명법 (structure based nomenclature)로 나눈다.

24.1. 원료기준 명명법

이 명명법에서는 고분자 이름은 실제 혹은 바이닐 알코올같이 가정된 단량체 즉, 고분자로 파생된 출발물질의 이름 앞에 폴리(poly)라는 접두사를 붙인다. 단량체가 두개 이상의 단어로 구성된 경우에는 괄호를 사용한다.

보기: 폴리아크릴로나이트릴, 폴리에틸렌, 폴리(메틸 메타크릴레이트)

공중합체 (copolymer)인 경우에는 구조 단위의 배열에 따라 이탤릭체 간사 (infix)를 삽입한다. 미지 혹은 명기하지 않은 구조는 co, 알려진 통계 법칙에 따른 통계적 구조는 stat, 무질서 (random)구조는 ran, 두 개의 교대하는 단량체 쌍에는 alt, 선형 블록은 block, 가지붙은 배열을 graft라는 간사를 쓴다. 폴리(아크릴로나이트릴, 폴리에틸렌, 폴리(메틸 메타크릴레이트))

보기: 폴리[스티렌-co-(메틸 메타크릴레이트)] 혹은 코폴리(스티렌/메틸 메타크릴레이트)

24.2. 구조 기준 명명법

24.2.1. 정규 한가닥(Regular single-strand) 유기 고분자

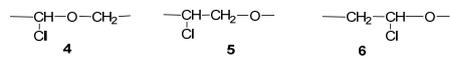
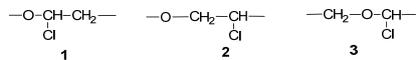
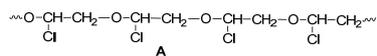
구조적 반복 단위(constitutional repeating unit, CRU) 의 한 종류의 화학종으로 구성되고 한가지의 순차적 배열과 하나만의 띠를 가지는 유기 고분자는 폴리(CRU) (poly(CRU))로 표기한다. 이가 원자가를 가지는 CRU의 이름은 유기화학 명명법을 따른다. CRU는 왼쪽에서 오른쪽으로 우선순위가 감소하는 순서로 가장 짧은 방향으로 진행한다.

CRU의 선택에 필요한 우선 순위는 다음과 같다.

헤테로고리 > 헤테로원자를 포함하는 사슬 > 탄소고리 > 탄소만 포함하는 사슬

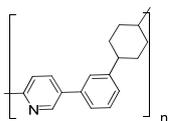
CRU에 부착한 치환체는 이러한 우선 순위에 영향을 주지 않는다. CRU는 가능한 한 이가 원자가로 표시한다.

다음에 한 고분자의 반복되는 부분 A가 가능한 CRU로 X, Y, Z를 표시하였다. CRU는 우선 순위가 가장 높은 산소가 먼저이기에 가능한 CRU의 후보중 1과2 중 하나가 된다. 다음 -CH₂-CH₂-의 부분에서 Cl 치환자리가 낮은 번호를 가지는 것을 선택하면 1이 CRU가 된다.



따라서 이 고분자 $\left(\text{O}-\underset{\text{Cl}}{\text{CH}}-\text{CH}_2\right)_n$ 는 폴리[옥시(1-클로로에틸렌)]이 된다.

다음 헤테로 고리를 포함하는 보기의 CRU는 피리딘-2,5-다이일-1,3-페닐렌-사이클로헥세인-1,4-다이일이 된다.



폴리(피리딘-2,5-다이일-1,3-페닐렌-사이클로헥세인-1,4-다이일)
poly(pyridine-2,5-diyl-1,3-phenylene-cyclohexane-1,4-diyl)

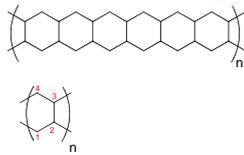
고분자	원료 기준 명명법	구조 기준 명명법
	폴리스타이렌 polystyrene	폴리(1-페닐에텐) poly(1-phenylethene)
	폴리(아크릴로나이트릴) poly(acrylonitrile)	폴리(1-사이아노에텐) poly(1-cyanoethene)
	폴리(아크릴산 메틸) poly(methyl acrylate)	폴리(1-메톡시카보닐에텐) poly(1-methoxycarbonylethene)
	폴리(산화 페닐렌) poly(phenylene oxide)	폴리(옥시-1,4-페닐렌) poly(oxy-1,4-phenylene)
	폴리(헥사메틸렌 아디프아마이드) Poly(hexamethylene adipamide)	폴리(이미노헥세인다이오일이미노헥세인-1,6-다이일) Poly(iminohexanedioyliminohexane-1,6-diyl)

24.4. 정규 두가닥 고분자 (double stranded polymer)

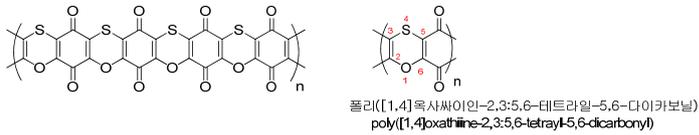
매크로분자가 연속적인 서열로 이웃한 고리와 한 원자를 공통적으로 가지거나 (스파이로 고분자) 혹은 두 개 이상의 원자를 공통적으로 가지는 접합인 경우 (사다리 고분자)에 이중 가닥 고분자라 부른다.

우선 순위는 다음과 같다. 유리 원자의 숫자가 최소인 CRU > 가장 우선되는 헤테로원자 개수가 최대인 고리 > 가장 우선되는 고리계 > 가장 긴 사슬을 가지는 비고리형 CRU.

다음 사다리 고분자의 IUPAC 이름은 폴리(뷰테인-1,4:3,2-테트라일) (poly(butane-1,4:3,2-tetrayl))이다.



다음의 다른 사다리 고분자의 이름은 폴리([1,4]옥사싸이인-2,3:5,6-테트라일-5,6-다이카보닐)이다.



참조로 퀴논 유도체의 이름은 다음과 같다.



흔히 사용하는 관용명의 고분자 약자는 다음과 같다.

ABS	acrylonitrile/butadiene/styrene copolymer
PAN	polyacrylonitrile
PBT	poly(butylene terephthalate)
PEO	poly(ethylene oxide)
PET	poly(ethylene terephthalate)
PMMA	poly(methyl methacrylate)
PP	polypropylene
PS	polystyrene
PTFE	poly(tetrafluoroethylene)
PVAC	poly(vinyl acetate)
PVAL	poly(vinyl alcohol)
PVC	poly(vinyl chloride)
PVDF	poly(vinylidene difluoride)

24.5. 고분자 화합물의 명명법 완성 차례

1. 고분자 사슬의 구조식을 쓴다. 구조의 반복을 표시할 수 있도록 사슬 부분을 충분히 쓴다.
2. 선호되는 CRU를 선택한다.
3. 치환체가 존재하는 경우 이를 포함하여 구성단위의 이름을 인용하여 선호하는 CRU를 명명한다.

4. 고분자의 이름을 완성한다.

보기:

