

## 第一分類「無機化合物及び有機金属化合物」

### 1. 無機化合物

比較的小数の簡単な炭素化合物（炭素の酸化物、シアンなど）以外の炭素化合物、すなわち一般に有機化合物と通称している化合物を除いた全ての化合物を言う。

炭素以外の元素のみを含む化合物、及び炭素化合物でも比較的簡単な化合物、例えば酸化物（ $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$ 、 $\text{C}_3\text{O}_2$ など）、シアン（ $\text{CN}$ ）及びシアン化物（ $\text{C}_2\text{N}_2$ 、 $\text{KCN}$ 、 $\text{Na}_3\text{Fe}(\text{CN})_6$ など）、チオシアン酸塩（ $\text{NaSCN}$ など）、炭酸塩（ $\text{K}_2\text{CO}_3$ 、 $\text{KHCO}_3$ など）などを総称して言う。ただし、簡単な炭素化合物といっても塩化物（ $\text{CCl}_4$ など）、硫化物（ $\text{CS}_2$ など）などでは、いわゆる有機物としての性質が強く、有機化合物に分類されることが多い。

また、シュウ酸塩や酢酸塩などのように、いずれにも分類しうるものもある。

[ 化学大事典（共立出版株式会社）より抜粋 ]

### 2. 有機化合物

有機化合物の定義は歴史的な変遷があり、現在では大体炭素化合物と同意語のように慣用されている。

無数といっても良いほどの有機化合物も、これを構成している元素の種類は非常に少なく、 $\text{C}$ 、 $\text{H}$ の2元素から成るもの、 $\text{C}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{O}$ あるいは $\text{C}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{N}$ の3元素から成るもの、及び $\text{C}$ 、 $\text{H}$ 、 $\text{N}$ 、 $\text{O}$ の4元素から成るものが圧倒的に多い。これらの4元素の他に、 $\text{S}$ 、 $\text{P}$ 、ハロゲン（ $\text{F}$ 、 $\text{Cl}$ 、 $\text{Br}$ 、 $\text{I}$ ）を含むものも多く、 $\text{B}$ 、 $\text{Si}$ 等を含むもの、各種の金属を含む有機金属化合物も知られている。

現在の慣用では、炭素化合物の全てを有機化合物とは言わない。一酸化炭素、二酸化炭素、炭酸及びその塩類などは無機化合物として取り扱われている。

炭素化合物の内、 $\text{C}-\text{H}$ 結合を含むものを有機化合物とするという定義もあるが、これも厳密なものではなく、例えばシュウ酸は $\text{C}-\text{H}$ 結合を含まないが有機化合物として取り扱われる。四塩化炭素、ホスゲン、シアンなどは中間的なもので有機化合物として取り扱うこともあり、無機化合物として取り扱うこともある。

[ 化学大事典（共立出版株式会社）より抜粋 ]

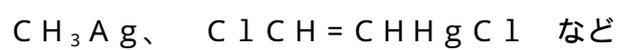
### 3. 有機金属化合物

各種の金属を含む有機化合物の総称であるが、一般に有機金属化合物という場合には炭素 - 金属結合を持つ化合物を言う。

従って、金属が酸素、硫黄、窒素などと結合する種類の有機化合物、例えばアルコキシドなどは包含されない。また有機酸の塩のように金属がイオン結合によって結合している化合物も、有機金属化合物とは言わない。

[ 化学大事典（共立出版株式会社）より抜粋 ]

(有機金属化合物の例)



(無機金属化合物の例)



## 第二分類：「鎖状炭化水素及びハロゲン化鎖状炭化水素化合物」

### 1. 炭化水素

炭素と水素との化合物であって、全ての有機化合物の母体となる化合物。炭素は四価の元素であるが、炭素元素同士が互いに結合し合う性質があり、鎖状又は環状につながって有機化合物の炭素骨格をつくる。炭素骨格を形づくる各炭素原子の余った原子価に水素原子が結合したものが炭化水素である。

炭化水素はその炭素骨格の構造によって、鎖状炭化水素と環状炭化水素とに分類される。また、炭素原子同士が全て単結合でつながっている飽和炭化水素と、炭素骨格に二重結合や三重結合を含む不飽和炭化水素に分類される。

基本的な炭化水素の分類とその一般式を示せば次のとおりである。

#### (1) 鎖状炭化水素

a) メタン列炭化水素 / パラフィン、アルカン  $C_n H_{2n+2}$

b) エチレン列炭化水素 / オレフィン、アルケン  $C_n H_{2n}$

c) アセチレン列炭化水素 / アルキン  $C_n H_{2n-2}$

#### (2) 環状炭化水素

##### a) 脂環式炭化水素

シクロパラフィン (ナフテン)  $C_n H_{2n}$

シクロオレフィン  $C_n H_{2n-2}$  など

b) 芳香族炭化水素  $C_n H_{2n-6}$  など

以上は基本的な分類であって、鎖状炭化水素には直鎖状のものと炭素鎖に枝のあるものがあり、また環状炭化水素には鎖状の炭素骨格が結合したものもある。不飽和結合を2個以上含むオレフィン、ポリエンなど。あるいは分子内に環を2個以上含む環状炭化水素などは上に記した一般式よりもっと水素原子数の少ない組成を持つ炭化水素である。

[ 化学大辞典 ( 共立出版株式会社 ) より抜粋 ]

### 2. 鎖状結合

同種又は異種の原子又は原子団が鎖状に連なって結合しているとき、この結合を鎖状結合という。

[ 化学大辞典 ( 共立出版株式会社 ) より抜粋 ]

### 3. ハロゲン

周期表第 Ⅶ 族の元素の内フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、アスタチンの5元素の総称。

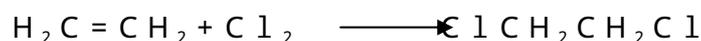
[ 化学大辞典 ( 共立出版株式会社 ) より抜粋 ]

### 4. ハロゲン化

一つあるいはそれ以上のハロゲンが有機化合物中に導入される工程をいい、ハロゲンの種類によりフッ素化、塩素化、臭素化、ヨウ素化に区分される。

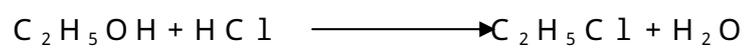
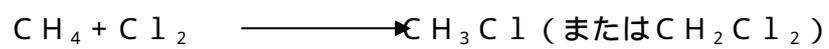
また反応の形式によりハロゲン付加反応とハロゲン置換反応に区別される。

#### (1) ハロゲン付加反応





(2) ハロゲン置換反応



[化学大辞典(共立出版株式会社)より抜粋]

第三分類：「アミン系、ニトロ系、アルコール、エーテル、アルデヒド及びケトンの構造を有する鎖状炭化水素化合物」

### 1. アミン系構造

アミン構造とはアンモニア ( $\text{NH}_3$ ) の水素原子を炭化水素残基 R で置換したものを言う。

置換された炭化水素残基の数によって第一級アミン、第二級アミン、第三級アミンの三種類がある。

- (1) 第一級アミン  $\text{R} - \text{NH}_2$
- (2) 第二級アミン  $\text{R} - \text{NH} - \text{R}'$
- (3) 第三級アミン  $\begin{array}{c} \text{R}_1 - \text{N} - \text{R}_2 \\ \quad \quad \quad \diagdown \\ \quad \quad \quad \text{R}_3 \end{array}$

また、ここでは構造的にアミンに近い以下の第四級アンモニウム塩及びヒドロキシアミン構造を含めるため、アミン系構造としている。

- (4) 第四級アンモニウム  $\begin{array}{c} \text{R}_1 - \text{N}^+ - \text{R}_3 \\ \quad \quad \quad \diagup \quad \diagdown \\ \quad \quad \quad \text{R}_2 \quad \quad \text{R}_4 \end{array}$
- (5) ヒドロキシアミン  $\text{R} - \text{NH} - \text{OH}$  又は  $\begin{array}{c} \text{R}_1 - \text{N} - \text{OH} \\ \quad \quad \quad \diagdown \\ \quad \quad \quad \text{R}_2 \end{array}$

### 2. ニトロ系構造

ニトロ系とは、有機化合物の構造の中に1個の置換基のニトロ基又はニトロソ基を持つものをいう。

- (1) ニトロ基  $-\text{NO}_2$

また、ここでは構造的にニトロに近い以下のニトロソ構造を含めるため、ニトロ系構造としている。

- (2) ニトロソ基  $-\text{NO}$

### 3. アルコール構造

アルコール構造とは、有機化合物の構造の中にヒドロキシ基を1個又はそれ以上持つものをいう。

- (1) 1個のアルコール  $\text{R} - \text{OH}$  例： $\text{CH}_3 - \text{OH}$  (メタノール)
- (2) 2個以上のアルコール  $\text{R} - (\text{OH})_n$  例： $\text{HO} - \text{CH}_2\text{CH}_2 - \text{OH}$  (エチレングリコール)

### 4. エーテル構造

エーテル構造とは、二個の炭化水素残基が酸素原子と結合した化合物をいう。一般に  $\text{R}_1 - \text{O} - \text{R}_2$  で表される。

例： $\text{CH}_3 - \text{O} - \text{CH}_2\text{CH}_3$ （メチル = エチルエーテル）

#### 5．アルデヒド構造

アルデヒド構造とは、一般にカルボニル基（ $=\text{C}=\text{O}$ ）の炭素に一個の炭化水素残基と一個の水素が結合している化合物をいう。

（1）アルデヒド  $\text{R} - \text{CHO}$  例： $\text{CH}_3 - \text{CHO}$ （アセトアルデヒド）

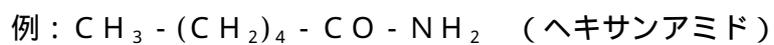
#### 6．ケトン構造

ケトン構造とは、一般にカルボニル基（ $=\text{C}=\text{O}$ ）の炭素に二個の炭化水素残基が結合している化合物をいう。

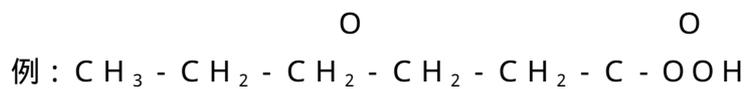
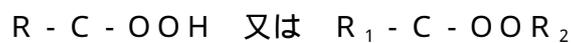
（1）ケトン  $\text{R}_1 - \text{CO} - \text{R}_2$  例： $\text{CH}_3 - \text{CO} - \text{CH}_2\text{CH}_3$ （エチル = メチル = ケトン）



(4) アミド

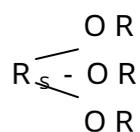


(5) ペルオキシ酸又はそのエステル



(ペルオキシヘキサン酸)      O

(6) オルトカルボン酸エステル



(7) ニトリル



分類：その他の構造を有する鎖状炭化水素化合物

その他の構造を有する鎖状炭化水素化合物とは、硫黄酸系、窒素酸系、炭酸系、シアン酸系、リン酸系及びそれらの誘導体の構造を有する鎖状炭化水素化合物並びに構造中にケイ素等の非金属を含む鎖状炭化水素化合物を言う。

### 1. 系

硫黄酸、窒素酸、炭酸などの各酸に構造的に近いチオ酸、ジチオ酸、イミド酸、ジイミド酸などを各酸の名称に含めるため各名称の第五後に「系」を付した。

### 2. 誘導体

主として有機化合物について使われる術語で、ある化合物に小部分の構造上の変化があつてできる化合物を、もとの化合物の誘導体という。

普通は化合物の中の水素原子あるいは特定の原子団が、他の原子あるいは原子団によって置換された化合物をいう。

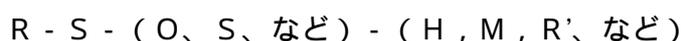
[ 化学大事典（共立出版株式会社）より抜粋 ]

### 3. 硫黄酸系及びその誘導体

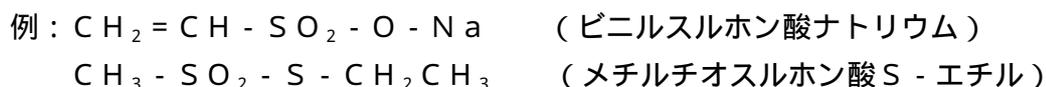
硫黄酸系及びその誘導体には、スルホン酸、スルフィン酸、スルフェン酸、スルホン、スルホキシド、硫酸又は亜硫酸及びそれらの誘導体、その他の硫黄酸誘導体が含まれる。

#### (1) スルホン酸及びその誘導体

O

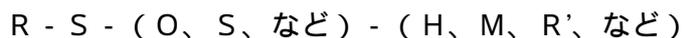


O

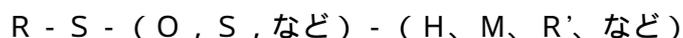


#### (2) スルフィン酸及びその誘導体

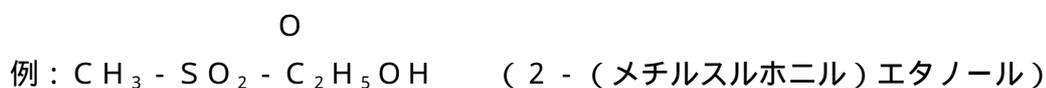
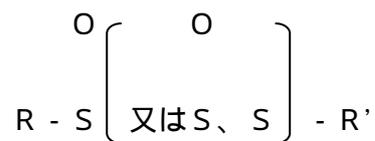
O



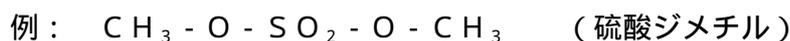
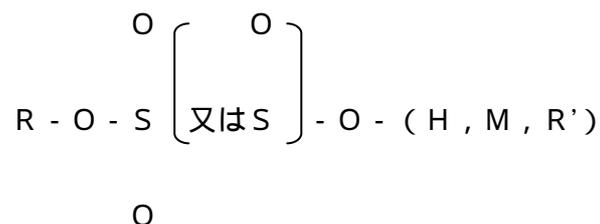
#### (3) スルフェン酸及びその誘導体



(4) スルホン誘導体、スルフィン誘導体又はスルフェン誘導体



(5) 硫酸、亜硫酸及びそれらの誘導体



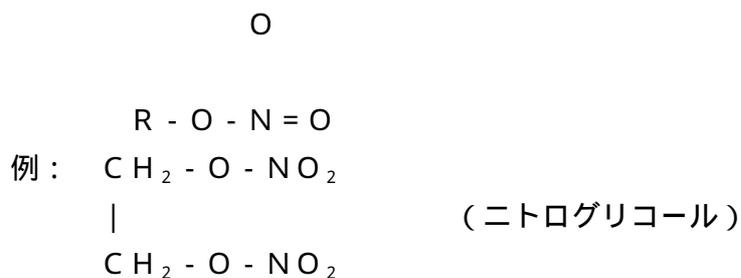
(6) その他の硫黄酸誘導体

その他の硫黄酸誘導体として、ヒドロキシスルホニウム化合物などが含まれる。

#### 4. 窒素酸系

窒素酸系には、硝酸エステル、亜硝酸エステル、次亜硝酸エステルが含まれる。

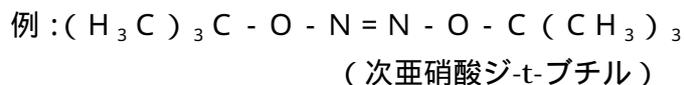
(1) 硝酸エステル



(2) 亜硝酸エステル  $R - O - N = O$



(3) 次亜硝酸エステル  $R - O - N = N - O - R'$



## 5. 炭酸系

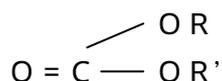
炭酸系には、炭酸誘導体又はチオ炭酸誘導体が含まれる。

### (1) 炭酸誘導体

炭酸誘導体には、炭酸エステル、過炭酸エステル、ハロギ酸エステル又はアミド、カルバミン酸及びその誘導体、アゾジカルバミン酸及びその誘導体、尿素及びその誘導体、グアニジン及びその誘導体が含まれる。

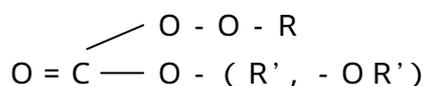
この内、カルバミン酸は炭酸のモノアミド、尿素は炭酸のジアミド、グアニジンは炭酸のトリアミドとして分類されている。

- 炭酸エステル



例：  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O} - \text{CO} - \text{O} - \text{CH}_2\text{CH}_3$  (炭酸ジエチル)

- 過炭酸エステル



例：  $(\text{CH}_3 - \text{O}_2) - \text{CO}$  (ジメチル=ジペルオキシカーボナート)

- ハロギ酸エステル又はアミド

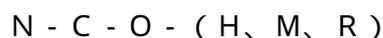
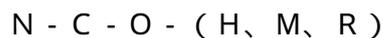


例：  $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \\ \text{C} \text{I} - \text{CO} - \text{O} - \text{CH}_3 \end{array}$  (クロロ炭酸メチル)

- カルバミン酸及びその誘導体  $(\text{H}, \text{R}')_2 - \text{N} - \text{C} - \text{O} - (\text{H}, \text{R})$

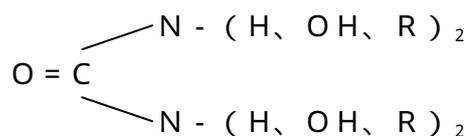
例：  $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \\ \text{H}_3\text{C} - \text{NH} - \text{CO}_2 - \text{CH}_2\text{CH}_3 \end{array}$   
(N-メチルカルバミン酸エチル)

- アゾジカルバミン酸及びその誘導体  $\text{O}$



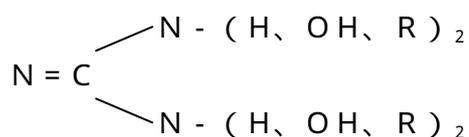
例：  $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \\ \text{N}_2 - (\text{CO} - \text{ONa})_2 \end{array}$  (アゾジカルボン酸ナトリウム)

- ・ 尿素及びその誘導体



例  $\text{H}_2\text{N} - \text{CO} - \text{N}(\text{CH}_3)_2$  (1, 1 - ジメチル尿素)

- ・ グアニジン及びその誘導体



例:  $(\text{H}_3\text{C})_2\text{N} - \text{CN} - \text{N}(\text{CH}_3)_2$   
(1, 1, 3, 3 - テトラメチルグアニジン)

## (2) チオ炭酸誘導体

チオ炭酸は、炭酸のカルボニル部分 ( $=\text{C}=\text{O}$ ) がチオカルボニル ( $=\text{C}=\text{S}$ ) に変わったものであることから、チオ炭酸誘導体は、(1) に準じる。

## 6. シアン酸系

シアン酸系には、シアン酸エステル、イソシアン酸エステル、チオシアン酸エステル、イソチオシアン酸エステルなどが含まれる。

### (1) シアン酸エステル $\text{R} - \text{O} - \text{C} \equiv \text{N}$

例:  $\text{CH}_3\text{CH}_2 - \text{OCN}$  (シアン酸エチル)

### (2) イソシアン酸エステル $\text{R} - \text{N} = \text{C} = \text{O}$

例:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2 - \text{NCO}$  (イソシアン酸 n-プロピル)

### (3) チオシアン酸エステル $\text{R} - \text{S} - \text{C} \equiv \text{N}$

例:  $\text{NCS} - \text{CH}_2 - \text{SCN}$  (メチレン = ジチオシアナート)

### (4) イソチオシアン酸エステル $\text{R} - \text{N} = \text{C} = \text{S}$

例:  $\text{CH}_3 - \text{NCS}$  (イソチオシアン酸メチル)

### (5) その他

その他シアン酸系として、フルミン酸 ( $-\text{ONC}$ )、セレノシアン酸 ( $-\text{SeCN}$ ) 等のエステルが含まれる。



(6) その他のリン化合物

その他のリン化合物として、ホスフィン化合物 ( $R_3P$ )、ホスフィンオキシド化合物 ( $R_3P=O$ ) などが含まれる。

8. ケイ素化合物

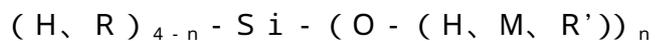
ケイ素化合物には、テトラアルキルシラン化合物、シラノール又はアルコキシシラン化合物が含まれる。

(1) テトラアルキルシラン化合物



例:  $Si - (CH_3)_4$  (テトラメチルシラン)

(2) シラノール又はアルコキシシラン化合物



例:  $Si - (O - CH_2CH_3OCH_3)_4$   
(テトラ(メトキシエトキシ)シラン)

9. その他の非金属化合物

その他の非金属化合物として、ホウ素化合物が代表として挙げられる。

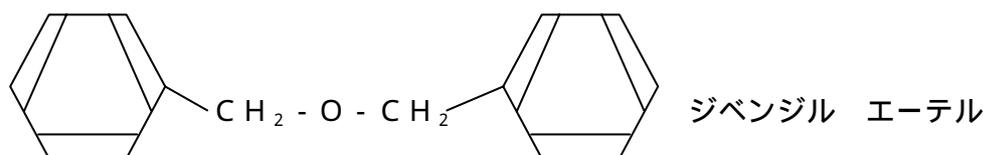
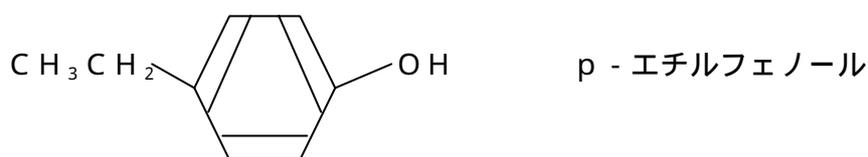
## 第六分類～第十分類

- ・第六分類：単環炭化水素及びハロゲン化単環炭化水素化合物
- ・第七分類：アミン系、ニトロ系及びアゾ系の構造を有する単環炭化水素化合物
- ・第八分類：アルコール、エーテル、アルデヒド及びケトンの構造を有する単環炭化水素化合物
- ・第九分類：カルボン酸系、硫黄酸系、窒素酸系、炭酸系、シアン酸系及びそれら誘導体の構造を有する単環炭化水素化合物並びに脂環式単環炭化水素化合物
- ・第十分類：その他の構造を有する単環炭化水素化合物

### 1．単環炭化水素化合物

単環炭化水素化合物とは、構造の中にベンゼン環を一個有する化合物、又は、複数有しその環と環の間を一個以上の炭素以外の原子を介して結ばれている化合物を言う。

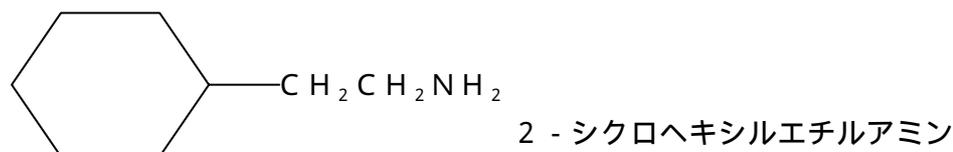
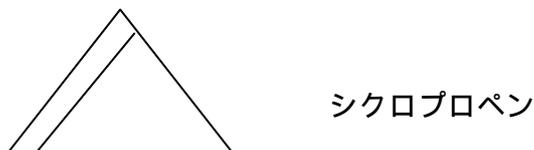
例：



### 2．脂環式単環炭化水素

脂環式単環炭化水素とは、構造の中にベンゼン環以外の環状炭化水素を一個有する化合物、又は、環を複数有しその環と環との間を一個以上の炭素以外の原子を介して結ばれている化合物を言う。

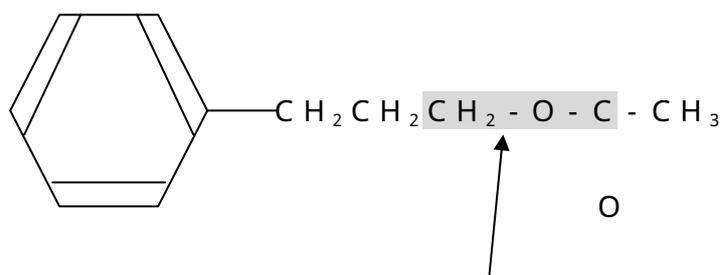
例：



### 3. 各構造について

各構造については、第二分類から第五分類に準じる。

注：これ以降の分類においては、環又は環からのびている炭素鎖を中心として分類するため、下記のような例においては見かけ上エステルであるが、環からのびている炭素鎖から見てエーテルに分類される。



この部分を環の方から見た場合にエーテル構造に分類される。

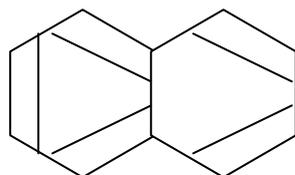
## 第十一分類：多環炭化水素化合物

### 1. 多環炭化水素化合物

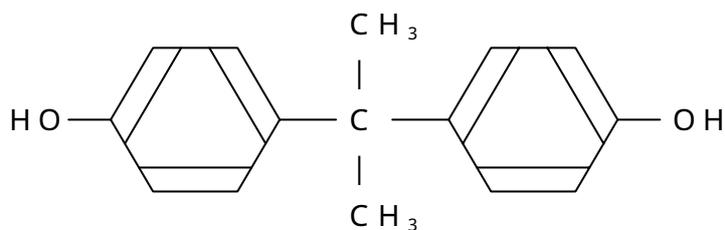
多環炭化水素化合物とは、ベンゼン環等の環状炭化水素が二つ以上直接繋がっている構造を有する、又は炭素鎖により間接的に繋がっている構造を有する化合物を言う。

鎖により繋がっている場合は、鎖の途中に炭素以外の元素がある場合には、多環ではなく単環に分類する。

例：



ナフタレン



4,4'-イソプロピリデンジフェノール (別名：ビスフェノールA)

## 第十二分類：三から五原子環の複素環化合物

### 1．複素環化合物

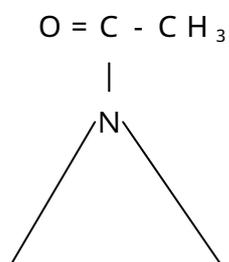
複素環化合物とは、環状構造を持つ有機化合物の内、環を構成する元素が炭素原子だけでなく酸素、イオウ、窒素、リン等を環内に含むものを言う。

[ 化学大事典（共立出版株式会社）より抜粋 ]

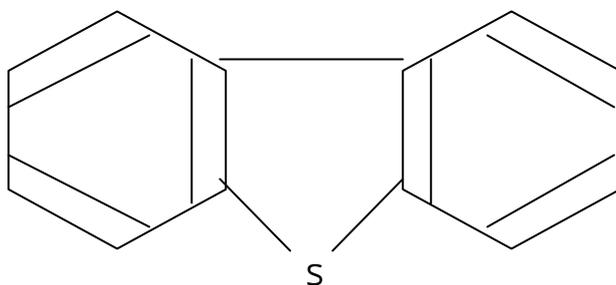
### 2．三から五原子環の複素環化合物

三から五原子環の複素環化合物とは、複素環化合物の内、複素環を構成する元素数が三個から五個で構成されているものを一個有する、又は、複素環を複数有しその複素環と複素環の間を一個以上の炭素以外の原子を介して結ばれている化合物を言う。

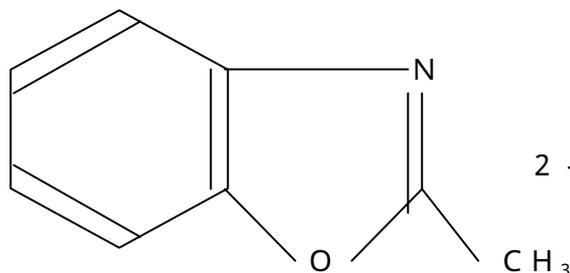
例：



N - アセチルエチレンイミン



ジベンゾチオフエン



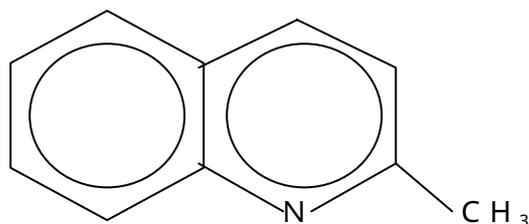
2 - メチルベンズオキサゾール

第十三分類：その他の複素環化合物

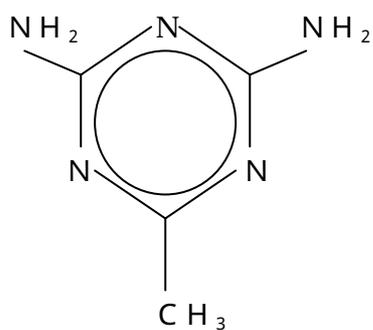
1. その他の複素環化合物

その他の複素環化合物とは、複素環化合物の内、環を構成する元素数が六個以上で構成されているものを一個持つ化合物、又は、複素環を二個以上持つ化合物を言う。

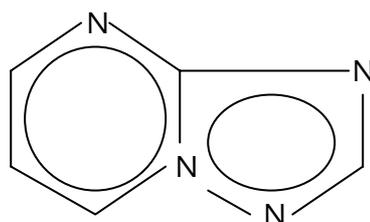
例：



2 - メチルキノリン



2 , 4 - ジアミノ - 6 - メチル -  
1 , 3 , 5 - トリアジン



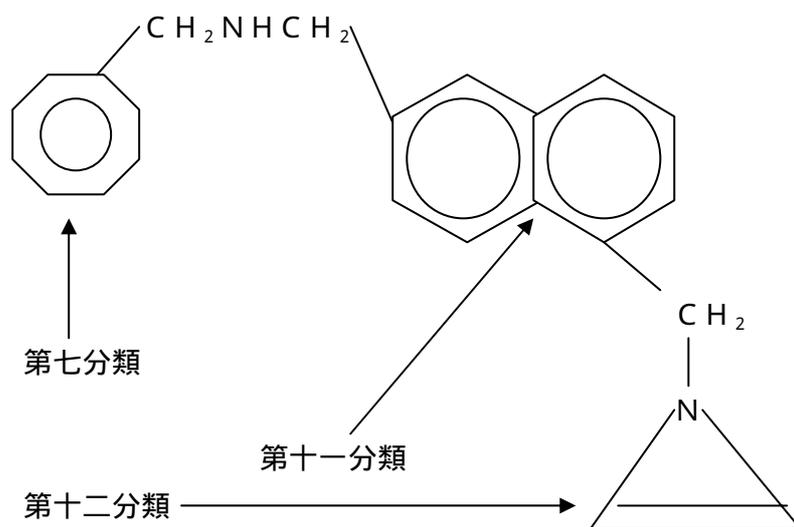
トリアゾロ [ 2,3-a ] ピリミジン

備考：含金属化合物を除き二から十三分類の各分類における構成要素が跨っている場合には、数字の大きな分類が優先する。

つまり、

第十三分類 > 第十二分類 > 第十一分類 > 第十分類 > 第九分類 > 第八分類  
> 第七分類 > 第六分類 > 第五分類 > 第四分類 > 第三分類 > 第二分類  
の順番である。

例：



従って、この物質は、第十二分類に分類される。