不規則性単条有機ポリマーの構造基礎命名法 (日本語要訳版) ならびに高分子の命名法に関する勧告一覧

畑田 耕一 Koichi HATADA, 大阪大学基礎工学部

国際純正応用化学連合 (IUPAC) 高分子部会の命名法委員会では、高分子の命名法と術語の定義についての勧告を公表してきた。これらのうち、既に改稿あるいは修正されるなどして不必要となったものを除いた一覧を次に示す。

1. "Basic Definitions of Terms Relating to Polymers 1974", *Pure Appl. Chem.*, **40**, 477-491 (1974); 日本語版 "ポリマーに関する術語の基本的定義", 鶴田禎二, 高分子, **25**, 534 (1976); 鶴田禎二, 高分子学会高分子実験学編集委員会編, 高分子実験学総論 (高分子実験学 1), 共立出版 (1979) p. 390-396
2. "Use of Abbreviations for Names of Polymeric Substances (Recommendations 1986)", *Pure Appl. Chem.*, **59**, 691-693 (1987)
3. "Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers (Rules Approved 1975)", *Pure Appl. Chem.*, **48**, 373-385 (1976). 日本語版 "規則性単条有機ポリマーの命名法", 鶴田禎二, 高分子, **27**, 345 (1978); 鶴田禎二, 高分子学会高分子実験学編集委員会編, 高分子実験学総論 (高分子実験学 1), 共立出版 (1979) p. 397-410
4. "Stereochemical Definitions and Notations Relating to Polymers (Recommendations 1980)", *Pure Appl. Chem.*, **53**, 733-752 (1981). 日本語要訳版 "ポリマーに関する立体化学の定義と概念", 三田 達, 高分子, **32**, 443 (1983)
5. "Nomenclature for Regular Single-Strand and Quasi Single-Strand Inorganic and Coordination Polymers (Recommendations 1984)", *Pure Appl. Chem.*, **57**, 149-168 (1985)
6. "Note on the Terminology for Molar Masses in Polymer Science", *J. Polym. Sci., Polym. Lett. Ed.*, **22**, 57 (1984); *J. Colloid Interface Sci.*, **101**, 277 (1984); *J. Macromol. Sci., Chem.*, **A21**, 903-904 (1984); *Br. Polym. J.*, **17**, 92 (1985). 日本語版ならびに解説 "高分子科学におけるモル質量関連用語に関する覚書", 三田 達, 高分子, **33**, 556 (1984)
7. "Source-Based Nomenclature for Copolymers (Recommendations 1985)", *Pure Appl. Chem.*, **57**, 1427-1440 (1985). 日本語版 "コポリマーの原料基礎命名法", 三田 達, 高分子, **35**, 880 (1986)
8. "Definitions of Terms Relating to Individual Macromolecules, Their Assemblies, and Dilute Polymer Solutions (Recommendations 1988)", *Pure Appl. Chem.*, **61**, 211-241 (1989)

9. "Definitions of Terms Relating to Crystalline Polymers (Recommendations 1988)", *Pure Appl. Chem.*, **61**, 769-785 (1989)
10. "A Classification of Linear Single-Strand Polymers (Recommendations 1988)", *Pure Appl. Chem.*, **61**, 243-254 (1989). 日本語要訳版 "線状単条ポリマーの分類", 畑田耕一, 高分子, **40**, 403 (1991)
11. "Nomenclature of Regular Double-Strand (Ladder and Spiro) Organic Polymers (Recommendations 1993)", *Pure Appl. Chem.*, **65**, 1561-1580 (1993)
12. "Structure-Based Nomenclature for Irregular Single-Strand Organic Polymers (Recommendations 1994)", *Pure Appl. Chem.*, **66**, 873-889 (1994). 日本語要訳版 "不規則性単条有機ポリマーの構造基礎命名法", 畑田耕一, 高分子, **44**, 254-258 (1995)

また、これらのうち上記の文献番号 1~5 ならびに 7~10 をまとめた成書 13 ならびに高分子命名法の日本語の解説 14, 15 が公表されている。

13. "Compendium of Macromolecular Nomenclature", prepared for publication by W. V. Metanovski, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991. 日本語訳 "高分子命名法", 高分子学会高分子命名法委員会訳, マグロウヒル出版, 東京 (1993)*1
14. 三田 達, 高分子学会高分子辞典編集委員会編 "新版高分子辞典", 朝倉書店 (1988) p. 505-525
15. 畑田耕一, 高分子学会編, 新高分子実験学 1 "高分子化合物の命名法", 共立出版 (1994) p. 483-523

一方、高分子学会高分子命名法委員会 (1993 年 9 月 SUN 委員会より改称; 高分子, 1993 年 11 月号参照) は 1973 年以来、IUPAC 勧告文書の国内への紹介とそれら のうち必要と思われるものについて日本語訳 (全訳または要訳) を作成してきた。今回は不規則性単条有機ポリマーの構造基礎命名法に関する勧告 "Structure-Based Nomenclature for Irregular Single-Strand Organic Polymers (Recommendations 1994)" を日本語に要訳して紹介する。

高分子学会高分子命名法委員会

〈委員長〉 畑田耕一

〈委員〉 奥田謙介, 角岡正弘, 寺町信哉, 中村茂夫, 西久保忠臣, 野瀬卓平, 堀江一之, 増田俊夫

〈顧問〉 鶴田禎二, 三田 達

IUPAC Recommendation on "Structure-Based Nomenclature for Irregular Single-Strand Organic Polymers (Recommendations 1994)" and other Macromolecular Nomenclature Recommendations

(560 豊中市待兼山町 1-3) 教授, 理博

*1 1995 年 2 月 15 日マグロウヒル出版和書出版部門の解散にともない絶版となった。

1. 緒 言

国際純正応用化学連合 (IUPAC) 高分子部会の命名法委員会は、過去に、“規則性単条有機ポリマーの構造基礎命名法”を公表している^{1), 2)}。これらは規則性ポリマー、すなわち、ただ一種の構成繰返し単位 (CRU) を単一の連結法で配列した形に記述できるポリマー³⁾に関するものである。一方、その大部分が不規則性ポリマー³⁾である共重合体の命名については原料基礎命名法が公表されている⁴⁾。

本勧告は、不規則性単条有機ポリマーの構造基礎命名法を述べたものである。不規則性ポリマーとは、2 種以上の構成単位 (CU)⁴⁾を用いなく記述できないポリマーのことである³⁾。本命名法は、原料基礎命名法では命名できない不規則性ポリマー、たとえば部分加水分解を受けたポリ酢酸ビニルのように部分的に化学修飾されたポリマー、頭一尾結合と頭一頭結合の両者を含むホモポリマー、ブタジエンやイソプレンのポリマーのように 1 種のモノマーから出発しながら 2 種以上の構造のモノマー単位を含むポリマーなどに適用できるほか、上述の共重合体の原料基礎命名法⁴⁾にかわる構造基礎命名法としても用いられるものである。

2. 命名の一般的原则と命名のための CU の決定法

ポリマーの命名は、規則性有機ポリマーの命名の場合に準じて、まず CU を選びそれらを命名することによって始める。次いで、後述の CU の配列様式ごとに定められた方法に従って CU の名称を列記してポリマーを命名する。CU の命名は、有機化合物^{5), 6)}と規則性単条有機ポリマーの命名法の規則に従って行う。

CU の選択は優先順位則 (seniority rule)¹⁾に従い、その際、CU の数は必要最少限となるようにし、選んだ CU を並べることで実際のポリマーにはないセグメント鎖を発生しないようにする。たとえば、1,4-構造と 1,2-構造の両者を有するポリブタジエンの CU には、

---CH=CH---CH₂---CH₂--- と ---CH(CH=CH₂)---CH₂--- を選んでも ---CH₂---CH=CH---CH₂--- と ---CH₂---CH(CH=CH₂)--- を選んでもポリマーを記述できるが、優先順位則に従えば前者が正しい CU である。また、1,4-構造と頭一尾ならびに頭一頭結合でつながった 1,2-構造とを有するポリブタジエン

の正しい CU は ---CH₂---CH=CH---CH₂---, ---CH(CH=CH₂)---CH₂---, ---CH₂---CH(CH=CH₂)--- である。ここで ---CH=CH---CH₂---CH₂--- を CU の一つに選ぶとポリマーを記述するのに ---CH₂---CH=CH---CH₂---, ---CH(CH=CH₂)---, ---CH₂--- の計 4 種の CU が必要になるうえ、たとえば、---CH₂---CH₂---CH₂---のような実際のポリマーにはないセグメントが発生することになる。

3. ポリマーの命名法

CU が確定すれば実際の命名法は下記の規則により行う。

*2 この勧告文書の作成中委員として仕事をしたのは次の諸氏である。

正委員: G. Allegra (Italy), R. E. Bareiss (FRG), N. M. Bikales (USA), K. Hatada (Japan), A. D. Jenkins (UK), J. Kahovec (Czech Republic), P. Kratochvil (Czech Republic), E. Maréchal (France), W. V. Metanomski (USA), I. Mita (Japan), C. Noël (France), I. M. Papisov (Russia), V. P. Shibaev (Russia), R. F. T. Stepto (UK, 委員長), U. W. Suter (Switzerland), W. J. Work (USA, 幹事)

準委員: J. V. Aleman (Spain), M. Baron (Argentina), J.-I. Jin (Korea), R. H. Marchessault (Canada), K. Matyjaszewski (USA), S. Penczek (Poland), L. Shi (P. R. China), P. Sigwalt (France), S. K. Tripathy (USA)

その他の委員: K. L. Loening (USA), N. Platé (Russia), A. Sirigu (Italy), R. B. Fox (USA)

*3 *Pure Appl. Chem.*, **66**, 873-889 (1994) より、許可を得て日本語要訳版を作成し掲載した。

*4 先に述べた構成繰返し単位 (CRU) は“その繰返しによって規則性ポリマーを記述できる構成単位のうち、最小のもの”と定義されているので、不規則性ポリマーの構成単位は、たとえそれが多数回繰返されていても CRU とよぶことはできない。また後に述べるブロックポリマーの場合は、各ポリマーブロックが構成単位であり、これらは必ずしも多数回繰返されるものではない。

3-1. CU の配列様式のわからないポリマー

poly(A/B/C/...) のように命名する。ただし A, B, C, ... は CU の構造基礎名である。また、CU の記載の順序は英語のアルファベット順とする。

(例 1) 1-フェニルエテン*5と1-クロロエテン*5の統計コポリマー

poly(1-chloroethylene/1-phenylethylene)*5 ポリ(1-クロロエチレン/1-フェニルエチレン)*5

(例 2) 頭-頭結合と頭-尾結合を含む1-クロロエテンのポリマー

poly(1-chloroethylene/2-chloroethylene) ポリ(1-クロロエチレン/2-クロロエチレン)

(例 3) 塩素化ポリメチレン

poly(chloromethylene/dichloromethylene/methylene) ポリ(クロロメチレン/ジクロロメチレン/メチレン)

(例 4) 第2節で述べた1,4-構造と1,2-構造を有するポリブタジエン

poly(but-1-ene-1,4-diyl*6/1-vinylethylene) ポリ(ブテ-1-エン-1,4-ジイル*6/1-ビニルエチレン)

(例 5) 第2節で述べた1,4-構造と頭-尾ならびに頭-頭結合でつながった1,2-構造とを有するポリブタジエン

poly(but-2-ene-1,4-diyl*6/1-vinylethylene/2-vinylethylene)

ポリ(ブテ-2-エン-1,4-ジイル*6/1-ビニルエチレン/2-ビニルエチレン)

(例 6) アジポイルジクロリドとヘキササン-1,6-ジアミンとブタン-1,4-ジアミンとの混合物から合成されたポリアミド

poly(iminobutane-1,4-diyliminoadipoyl/iminohehexane-1,6-diyliminoadipoyl)*6

ポリ(イミノブタン-1,4-ジイルイミノアジポイル/イミノヘキササン-1,6-ジイルイミノアジポイル)*6

(例 7) ポリ(1-シアノエチレン)とポリ(1-フェニルエチレン)のブロックならびに(例4)のポリマーのブロックの不規則性連鎖から成るポリマー

poly[poly(but-1-ene-1,4-diyl*6/1-vinylethylene)/poly(1-cyanoethylene)/poly(1-phenylethylene)]

ポリ[ポリ(ブテ-1-エン-1,4-ジイル*6/1-ビニルエチレン)/ポリ(1-シアノエチレン)/ポリ(1-フェニルエチレン)]

3-2. ブロックの配列様式がわかっているブロックポリマーあるいはブロックコポリマー

poly(A)-X_A-poly(B)-X_B-poly(C)-X_C... と命名する。ここで、X_A, X_B, X_C... は接合単位である。接合単位がないか、わからない場合は poly(A)-poly(B)-poly(C) のように命名する。

(例 8) $\text{---[CH(CN)-CH}_2\text{]}_p\text{---(CH}_2\text{CH}_2\text{)}_q\text{---[CH(CN)-CH}_2\text{]}_r\text{---}$ の構造を持つ三元ブロックコポリマー

poly(1-cyanoethylene)-poly(methylene)-poly(1-cyanoethylene) /

ポリ(1-シアノエチレン)-ポリ(メチレン)-ポリ(1-シアノエチレン)

(注) 右から左に向かって命名した poly(2-cyanoethylene)-poly(methylene)-poly(2-cyanoethylene)

ポリ(2-シアノエチレン)-ポリ(メチレン)-ポリ(2-シアノエチレン) は、CU の位置番号が大きくなるので間違いである。

*5 1-フェニルエテンと1-クロロエテンは物質名、1-フェニルエチレンと1-クロロエチレンは構造基礎命名法における二価基の名称であることに注意せよ。

*6 有機化合物の命名に関する IUPAC の最近の勧告⁶⁾によると $\text{---CH=CH---CH}_2\text{---CH}_2\text{---}$, $\text{---CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{---}$, $\text{---CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{---}$ などは、それぞれ but-1-ene-1,4-diyl, butane-1,4-diyl, hexane-1,6-diyl などと命名することが推奨されている。これらの名称のうち but-1-ene-1,4-diyl などの日本語訳は未だ決められていない。上記の例中に示した日本語訳ブテ-1-エン-1,4-ジイルは著者の提案とご理解頂きたい。

(例 9) $-(O-)_p-[CH_2-CH(CN)]_q-(CH_2CH_2O)_r$ の構造をもつ三元ブロックコポリマー

poly(oxy-1,4-phenylene)-poly(2-cyanoethylene)-poly(ethyleneoxy)

ポリ(オキシ-1,4-フェニレン)-ポリ(2-シアノエチレン)-ポリ(エチレンオキシ) あるいは poly(oxyethylene)-poly(1-cyanoethylene)-poly(1,4-phenyleneoxy) ポリ(オキシエチレン)-ポリ(1-シアノエチレン)-ポリ(1,4-フェニレンオキシ)

(注) ブロック間の優先順位は特に定められていないので、この場合は、右から左に命名した名称もその逆のものも正しい名称である。

(例 10) 交互にあらわれる二つの接合単位

によって $-[O-(CH_2)_4]_n$ がつながったセグメント化ポリウレタン

poly[poly(oxybutane-1,4-diyl)-oxycarbonylimino-1,3-phenyleneiminocarbonyl-poly(oxybutane-1,4-diyl)-oxycarbonylimino-1,4-phenyleneiminocarbonyl]

ポリ[ポリ(オキシブタン-1,4-ジイル)-オキシカルボニルイミノ-1,3-フェニレンイミノカルボニル-ポリ(オキシブタン-1,4-ジイル)-オキシカルボニルイミノ-1,4-フェニレンイミノカルボニル]

3-3. ポリマー poly(Z) の主鎖から分岐 poly(A) が伸びている不規則性ポリマー

poly(A) を poly(Z) の置換基と考え poly[Z/poly(A)Z] と命名する。この場合 poly(A) に接尾語 -yl はつけずに用い、主鎖につながる点に最も近い原子を位置番号 1 とする。

分岐 poly(A) が A とは異なる CU の Q を通して主鎖に結合している場合は、poly[Z/[poly(A)Q]Z] と命名する。

分岐 poly(A) が主鎖の CU の置換基 Q に結合している場合は、poly{(Q)Z/[poly(A)Q]Z} と命名する。

(例 11) 1 種類の分岐を持つ次の構造のグラフト共重合体

Poly[methylene/poly(2-phenylethylene)methylene] ポリ[メチレン/ポリ(2-フェニルエチレン)メチレン]

(例 12) 2 種類の分岐を持つ次の構造のグラフト共重合体

poly[methylene/poly(2-chloroethylene)methylene/poly(2-phenylethylene)methylene]

ポリ[メチレン/ポリ(2-クロロエチレン)メチレン/ポリ(2-フェニルエチレン)メチレン]

(例 13) ポリ(オキシ-1,4-フェニレン) のいくつかのベンゼン環の 2 の位置に $-OCO-$ を通してポリ(2-クロロエチレン) がグラフトしたポリマー

poly {oxy-1,4-phenylene/oxy-2-[poly(2-chloroethylene)carbonyloxy]-1,4-phenylene}

ポリ {オキシ-1,4-フェニレン/オキシ-2-[ポリ(2-クロロエチレン)カルボニルオキシ]-1,4-フェニレン}

(注) ベンゼン環のどの位置にグラフト鎖が結合しているかわからない場合は poly {oxy-1,4-phenylene/oxy-x-[poly(2-chloroethylene)carbonyloxy]-1,4-phenylene} ポリ {オキシ-1,4-フェニレン/オキシ-x-[ポリ(2-クロロエチレン)カルボニルオキシ]-1,4-フェニレン} と命名する。

(例 14) ポリ(1-フェニルエチレン)を主鎖とする次の構造のグラフトポリマー

poly[1-phenylethylene/1-(4-{ω-*t*-butyl-poly[2-(methoxycarbonyl)-2-methylethylene]} phenyl)eth-ylene]

ポリ [1-フェニルエチレン/1-(4-{ω-*t*-ブチル-ポリ [2-(メトキシカルボニル)-2-メチルエチレン]} フェニル)エチレン]

(注) 分岐の主鎖とは反対側の末端は ω と指定する。

3-4. poly(A), poly(B), poly(C) … を分岐とする星型ポリマー

x-[poly(A)]-y-[poly(B)]-z-[poly(C)] … X と命名する。ここで x, y, z, … は中心単位 X にそれぞれの分岐が結合している位置の位置番号である。

(例 15) 3つの分岐を持つ次の構造の星型ポリマー

1,3,5-tris[poly(1-phenylethylene)]benzene

1,3,5-トリス[ポリ(1-フェニルエチレン)]ベンゼン

(注) 分岐の数が分らない場合は *n*-kis[poly(1-phenylethylene)]benzene *n*-キス[ポリ(1-フェニルエチレン)]ベンゼンと命名することができる。

(例 16) 4つの分岐を持つ次の構造の星型ポリマー

bis[poly(but-2-ene-1,4-diyl)*⁶][poly(1-phenylethylene)][poly(2-phenylethylene)]silane

ビス[ポリ(ブテ-2-エン-1,4-ジイル)*⁶][ポリ(1-フェニルエチレン)][ポリ(2-フェニルエチレン)]シラン

文 献

- 1) IUPAC. Commission on Macromolecular Nomenclature "Nomenclature of regular single-strand organic polymers (rules approved 1975)", *Pure Appl. Chem.*, **48**, 373-385 (1976). Reprinted as Chapter 5 in "Compendium of Macromolecular Nomenclature" (The Purple Book), Blackwell Scientific Publications, Oxford (1991)
- 2) IUPAC. Commission on Macromolecular Nomenclature and Commission on Nomenclature of Inorganic Chemistry, "Nomenclature for regular single-strand and quasi single-strand inorganic coordination polymers (rules approved 1984)", *Pure Appl. Chem.*, **57**, 149-168 (1985). Reprinted as Chapter 6 in "Compendium"
- 3) IUPAC. Commission on Macromolecular Nomenclature, "Basic definitions of terms relating to polymers (rules approved 1974)", *Pure Appl. Chem.*, **40**, 479-491 (1974). Reprinted as Chapter 1 in "Compendium"
- 4) IUPAC. Commission on Macromolecular Nomenclature, "Source-based nomenclature for copolymers (rules approved 1985)", *Pure Appl. Chem.*, **57**, 1427-1440 (1985). Reprinted as Chapter 7 in "Compendium"
- 5) IUPAC. Commission on Nomenclature of Organic Chemistry, "Nomenclature of organic chemistry (1979 edition)", Pergamon Press, Oxford
- 6) IUPAC. Commission on Nomenclature of Organic Chemistry, "A guide to IUPAC nomenclature of organic compounds (recommendations 1993)", R. Panico, W. M. Powell, F. C. Richer eds, Blackwell, Oxford (1993)