

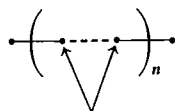
## 6. 規則性単条および準単条無機および 配位ポリマーの命名法 (1984)\*

### 前 文

すでに発表されている高分子の構造基礎命名法 [1, 2] の体系は、主として規則性単条ポリマー (regular single-strand polymers) [2] として定義されている線状有機ポリマーに関するものであり、これは、有機化合物命名法 [3] の原則にできるだけ沿うようにつくられている。したがって、最小の繰返し構造単位中の二価基 (bivalent radicals) として命名される構成副単位 (constituent subunits) が次々につながって、構成繰返し単位 (constitutional repeating unit) を形成している。この方法を線状の無機ポリマー (inorganic polymers) あるいは配位ポリマー (coordination polymers) に拡張することは、無機化合物命名法の基本原理は有機化合物命名法と異なっており、二価基を命名する体系がないことのために限界がある。さらに、大部分の無機および配位ポリマーにおいては、構成繰返し単位をなす構成単位は、通常の意味での二価基ではない。

本体系は、規則性無機あるいは配位線状ポリマーの命名法を一義的かつあいまいさのないように定めるものであり、ポリマー中の構成副単位が共有結合あるいは配位共有結合という通常の化学原理に基づいた化学式で表現されうるもので、その末端の構成副単位の少なくともひとつが1個の原子を通して他の同一の構成繰返し単位あるいは末端基へつながっているような構造をもつポリマーを扱う。したがって“ラダー”構造は除外される。

両方の末端構成副単位が1個の原子を通して他の同一の構成繰返し単位、あるいは末端基へつながっているような構成繰返し単位を使って記述することのできる規則性線状ポリマー (regular linear polymer) は、規則性単条ポリマー (regular single-strand polymer) と呼ばれる (文献 [2] も参照せよ)。



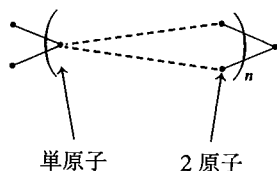
単原子

末端構成副単位的一方のみが1個の原子を通して他の同一の構成繰返し単位、あるいは末端基へつながっているような構成繰返し単位を使って記述することのできる規則性線状ポリマーは、準単条ポリマー (quasi-single-strand polymer) であり、規則性単条ポリマーの定義には適合しない [2c] が、同様の方法で命名することができる。

\* 本報告のための原稿は L.G.Donaruma (USA), B.P.Block (USA), K.L.Loening (USA), N.A.Platé (USSR), T.Tsuruta (Japan), K.Ch.Buschbeck (FRG), W.H.Powell (USA) および J.Reedijk (Netherlands) からなるワーキンググループにより作成された。

原報は *Pure Appl. Chem.* 57, 149-168 (1985) に掲載されている。

なお、本章の原案はアメリカ化学会高分子部会の命名法委員会で作成された“高分子についての構造基礎命名法 II, 一次元無機および準有機ポリマー” (1977) である。



無機および配位化合物命名法において、すでに確立されている原理 [4] は、すでに発表されているポリマー命名法の定義 [5] や基本原則 [1,2] と矛盾しない範囲で使用される。有機ポリマーの命名法の場合と同じように、それらの規則は、物質に対してでなく、構造に対して適用され、複雑な系においては、理想化された構造を表示していることもある。高分子物質は、通常多数の異なった構造を含んでおり、ポリマー分子を完全に記述しようとすれば、立体規則性の度合、主鎖中の欠陥、ランダムな枝分かれ等々を含まねばならず、非常に複雑な命名法となる。いずれにしても、ポリマーを理想化された単一の構造をもつものと見なすことは有用である。無機あるいは配位ポリマーが規則的な繰返し構成（構造）単位の線状結合として表される限りにおいては、その命名は、以下のような規則に基づいて行うことができる。末端基は、必要ならば含めることができる。

共有結合性の無機主鎖をもついくつかのポリマーには、これまで長い間用いられてきた慣用名あるいは半体系的名称 (trivial or semisystematic names) がある。たとえば、 $-(\text{Si}(\text{CH}_3)_2-\text{O})_n^*$  に対してポリ(ジメチルシロキサン)、 $-(\text{PCl}_2=\text{N})_n^{**}$  に対してポリ(ジクロロホスファゼン)などである。これらのポリマーのうちのいくつかは、たとえば、 $-(\text{Si}(\text{CH}_3)_2-\text{O})_n$  に対してポリ[オキシ(ジメチルシリレン)]、 $-(\text{PCl}_2=\text{N})_n$  に対してポリ[ニトリロ(ジクロロホスホラニリジン)]のように、有機ポリマー命名法の原理、すなわち二価基 [1,2] を用いて命名することもできる。慣用名や半体系的な名称を使うことは、それらが明瞭であいまいさのない限り、まったく差し支えなく、有機ポリマー命名法の原理に基づいた名称を使うことも、構造中の二価基が明瞭である限りは、差し支えない。しかし、いくつかの構造に対しては、以下に述べる規則を使うことにより、任意性はるかに少なく、あいまいさのない名称をつけることができる。

### 基礎的原理 (Fundamental Principles)

ここで述べる規則性単条および準単条無機および配位ポリマー命名法の体系は、単条有機ポリマーについて考えられてきたものと同じ高分子命名法の基本原理 [2] に基づいており、ポリマーの構造を記述する最小の構造単位として定義される [5a] 構成繰返し単位 (CRU) の選択法と命

\* “シロキサン” ポリマーの慣用名は、シロキサンと呼ばれる繰返し単位  $-\text{SiH}_2-\text{O}-$  と置換基を丸括弧または角括弧でくり、接頭辞“ポリ”をつけることによりつくられる。低分子量のシロキサンポリマーの場合には、有機ポリマーの規則 [1,2] に基づいて、接頭辞“オリゴ”あるいは倍数接頭辞が、“ポリ”の代わりに使用される。

一方、一般式  $\text{H}_3\text{Si}-[\text{O}-\text{SiH}_2]_n-\text{O}-\text{SiH}_3$  で表される、特定の低分子量非環式シロキサンは、規則 D-6.22 [3a] に従って命名される。この結果、たとえば上の一般式で  $n=2$  の場合にはテトラシロキサンとなり、先に述べた慣用名で表した構造と類似しているが、同一ではない。これらの名称では、デカメチルテトラシロキサンのように、置換基は母体名の接頭辞として命名される。

\*\* この名称は、付加命名法と置換命名法の混成であり、いずれの体系の規則をも完全に満たすものではない。

名法を基礎としている。ポリマーの名称は、この繰返し単位の名称に“ポリ (poly)”, “カテナ (catena)”, あるいは他の構造を示す接頭辞をつけることにより表される。必要に応じて、末端基を示すこともできる。

CRU の名称は、CRU 鎖に沿って現れた順番に、その構成副単位 (constituent subunits) の名称を列記することによってつくられる。構成副単位とは、すでに確立している無機および配位化合物命名法の原理に従って命名された、CRU の最長構造断片 (longest structural fragments) である\*。したがって、架橋配位子† (bridging ligand) を、配位子に関する配位化合物命名法 [4] の原理によって名づけられたものよりも小さな副単位に分割することはできない。

この手続きによりあいまいさなく命名することはできるが、必ずしも一義的に命名されるとは限らない。一義的な命名をするためには、単一の優先される (preferred) CRU が選ばねばならないが、これは以下の手続きにより実行される。

1. CRU およびその構成副単位を識別する (identify) こと。
2. CRU の方向づけ (orient), すなわち CRU として記述を始める最初の副単位を決め、ポリマー主鎖に沿って左から右へ CRU の残りの部分を記述していく方向を決めること。
3. (i) 確定されている無機または配位化合物命名法あるいはその両方の原理に基づいて副単位を命名する。 (ii) CRU の名称を決めるために、副単位の名称を優先される記述の方向に従ってならべる、の2つの基本的段階に従って CRU を命名すること。

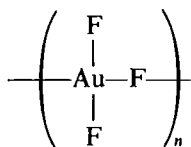
(注)

CRU の名称を決める前に、できる限り可能な CRU の識別と方向づけを検討することが大切である。しかしときには、一義的な方向は個々の副単位の名称が決まってから選ばれることもある。

#### 構成繰返し単位 (CRU) の識別 (Identification of the constitutional repeating unit)

多くの場合、ポリマーの構造は単純であり、CRU およびその構成副単位は、容易に識別される。

(例) ポリマー

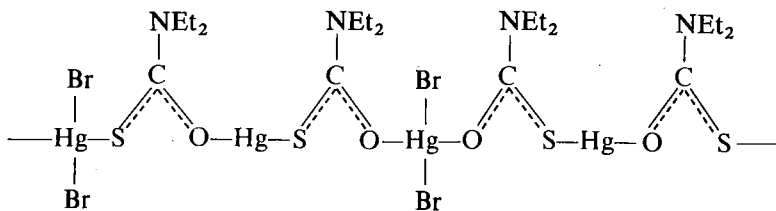


において、2つの可能な CRU は、

\* 有機ポリマーの命名の規則 [1,2] においては、CRU の構成副単位とは、すでに確立されている有機化合物命名の原理 [3] に基づいて、二価基あるいは多価基として命名された最大の構造断片のことである。単一の中心原子、単核配位中心、架橋配位子は、規則的な単条あるいは準単条の無機および配位ポリマーにおける CRU の構成副単位である。多核配位中心は特定の条件下で副単位として用いられる [“構成繰返し単位の命名” の考察 (p.128) を参照せよ]。

† (訳者注) 無機化合物命名法における架橋配位子の架橋 (bridging) は、有機ポリマー命名法における架橋 (crosslinking) と内容が異なることに注意されたい。





である。

### 構成繰返し単位の方向づけ (Orientation of the constitutional repeating unit)

CRU を記述する最初の構成副単位とは、最高の優位性 (seniority) をもつ中心原子 (あるいは配位中心)、すなわち、以下に述べる規則 IP-2.0 に与えられている一連の優先順位の規則に従って、もっとも優先される中心原子である。この中心は、通常 CRU の左端の副単位として書かれる。

ポリマー鎖に沿って CRU の優位の副単位から他の構成副単位へ順番に (左から右へ) 列記するとき、優先される方向は、一義的な結論に達するまで、順を追って考慮されるべき<sup>†</sup> 次の3つの主要因子によって決められる。

1. 単条の CRU は、準単条の CRU よりも優先される。すなわち、両方の末端構成副単位が他の同一の構成繰返し単位、あるいは末端基に1個の原子を通して結合している CRU は、片方の末端構成副単位だけが他の構成繰返し単位、あるいは末端基に1個の原子を通して結合している CRU よりも優先される。
2. 優先される方向とは、ポリマー主鎖に沿って優位の副単位から同じ優位性の副単位、あるいは次位の優位性の副単位へ向けて、原子の数が最小となるような最短の経路として定義される。
3. 優位の副単位から、同じ優位性の副単位、あるいは次位の優位性の副単位への経路の長さがすべて等しいときには、優先される方向は、より高次の優位性をもつ構成副単位を含む経路に沿った方向である。同じ優位性の副単位間、あるいは優位の副単位と次位の優位性の副単位間の経路には、必ずより低位の優位性の副単位が含まれ、しばしば、それは有機配位子から成り立っている。したがって、優先される方向を決定するのに、線状有機ポリマーに対して定められている副単位の優先順位 [1, 2] が必要である。

これらの一般原理のより詳細な説明は、規則 IP-2 の後に与えられており、個々のポリマーの命名を扱う以下の節で例示する。

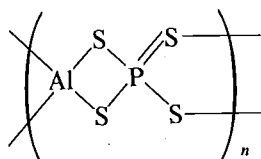
### 構成繰返し単位の命名 (Naming the constitutional repeating unit)

単条および準単条の無機あるいは配位ポリマーの CRU は、存在する中心原子および架橋配位子からなる主鎖を基礎にして命名される。すべての無機あるいは配位ポリマーは1個あるいはそれ以上の中心原子をもつが、架橋配位子をもつ場合ももたない場合もある。同一の原子からなる無機ポリマーは、中心原子からのみ成り立っていると見なされる。単核 (mononuclear) あるいは多核 (polynuclear) の配位中心 (coordination centres) や付随する配位子 (ligands) は、もし仮に存在して

<sup>†</sup> (訳者注) 1. で決まらなければ2. を、それでも決まらなければ3. を考える。

も、主鎖中の中心原子間の配位子を除いて、通常の配位化合物の命名法に従って命名される。架橋配位子は、ギリシャ文字 $\mu$ を接頭記号としてもつ配位子として命名される。

CRUの副単位として多価基をもつ主鎖中の最大構造断片を選択することは、線状有機ポリマーの命名法における基本原理のひとつである。無機および配位ポリマーの命名法においては、この原理は、CRUにおける架橋配位子の選択の際に使われる。選択が必要なときには、多座(polydentate)配位子を命名するために通常受け入れられている方法に基づいて命名される最大の原子団が選ばれる。たとえば、次のポリマーでは、CRUは、硫黄配位子が結合した2つの中心原子と考えられる。



しかし、“最大架橋配位子 (largest bridging ligand)” の原理によれば、架橋配位子は、ホスホロテトラチオアト (3-) となる。この原理を無機または配位ポリマーに厳密に適用すると、主鎖中の“最大”の構造断片として多核配位中心を選択することになる。現在のところ、ある型の多核配位中心について、一義的な命名法ならびに順位づけの正式な規則がないので、いくつかの場合には、多核配位中心を無機および配位ポリマーのCRUの副単位として使用することは適当ではない。それゆえ、最大副単位の原理はCRUの配位中心には必ずしも適用されず、この一連の規則において、単核配位中心を使って構造単位を表すことが適当でないときに限って、多核配位中心がCRUの副単位として使用される(規則IP-5を参照せよ)。しかし、多核副単位を使った命名法も、規則中の例として示されている。

いったん、CRUの構成副単位の名称が決まると、優位の副単位の名称から順にポリマー鎖に沿って優先順位の低下する方向に副単位の名称を列記することによってCRUが命名される。

## 規則IP-1 一般的なポリマーの名称 (the General Polymer Name)

### IP-1.1

そのCRUはわかっているが、次元構造\* (dimensional structure) はわかっていないか、特定する必要のないようなポリマーの名称は、接頭辞“ポリ”の後に構成繰返し単位の名称(規則IP-3~IP-7参照)を角括弧でくくって続けることにより、たとえば、ポリ[CRU]\*\*のように命名される。

### IP-1.2

もし、構成繰返し単位の数を特定したいときには、接頭辞“ポリ”の代わりに、たとえば、デカ

\* 線状(直鎖)、架橋、枝分かれなどを指す。

\*\* 線状有機ポリマー命名法の規則 [1, 2] は次元構造について記述していないので、この形式では接頭辞“ポリ”は多数の構成繰返し単位が存在するということを意味する以外、構造についてなにも明示していない一般的な記述記号であることを示している。

[CRU] のように、適当な倍数接頭辞 [3b] を用いる。

### IP-1.3

線状の（一次元の）ポリマーは、規則 IP-1.1, および IP-1.2 に従って命名されたポリマーの名称の前に接頭辞“カテナ (*catena*)”<sup>\*1</sup> を付けて示す。たとえば、カテナ-ポリ [CRU] [*catena*-poly [CRU]] のように命名する。

### IP-1.4

ポリマー分子の末端基は、もし必要ならば、ギリシャ文字の接頭記号  $\alpha$  および  $\omega$  を使って表され、規則 IP-1.1, IP-1.2, IP-1.3 で命名されたポリマー名の前に付けて、たとえば、 $\alpha$ -(末端基)- $\omega$ -(末端基)-カテナ-ポリ [CRU] [ $\alpha$ -(end group)- $\omega$ -(end group)-*catena*-poly [CRU]] のように表す。詳しくは、規則 IP-8 を参照されたい。

## 規則 IP-2 優先される構成繰返し単位を選択するための優位性に関する規則

(Seniority Rules for Selection of a Preferred Constitutional Repeating Unit)

多くの規則性単条および準単条の無機あるいは配位ポリマーは、一連のより小さな副単位よりなる繰返し単位が多数つながったものとして表すことができる。以下の規則は、正しい CRU を導くために必要な優位性の考察に関するものである。これらの基本規則の精密化と個々のポリマーへの応用例を次節以下に示す。

### IP-2.1 優位性の高い副単位の選択

#### IP-2.1.1

もっとも優位性の高い構成副単位、すなわち、無機あるいは配位ポリマーの正しい CRU において最初に記述されるべき副単位は、1 つまたはそれ以上の中心原子 (central atoms) を含んでいなければならない。ポリマー主鎖中の中心原子間の架橋基は、優位性の高い副単位とはならない<sup>\*2</sup>。

#### IP-2.1.2

線状の無機あるいは配位ポリマーの CRU 中に 2 つ (あるいはそれ以上) の中心原子が存在する場合には、図 6.1 に示す一般元素序列表 [4d] において、右上隅から出発して表に示す順序の線に沿って一番最後に現れる中心原子を含む副単位を、優位の副単位とする<sup>\*3</sup>。

\*1 接頭辞“*catena*”は、“延びきった (*extended*)”構造をもつ配位化合物に対する現行の命名規則 [4a, 4b] と対応している。鉱物学および地球化学においては、ケイ酸塩鎖は接頭辞“*ino*”で表され、接頭辞“*phyllo*”がシート状 (二次元) 構造に、“*tecto*”が三次元構造を示すのに使われている。*catena* という述語を、有機環状化合物であるカテナンやカテナ化合物と混同してはならない。

\*2 このことは、常に配位中心の方を強調する配位化合物の命名法の原理と一致している。個々の無機あるいは配位ポリマーには、少なくとも 1 個の配位中心が必ず存在する。

\*3 この優位性の順序は、有機ポリマーの規則 [2] におけるヘテロ原子に関する優位性の規則とは異なることに注意されたい。

図 6.1 元素序列表

## IP-2.1.3

線状の無機あるいは配位ポリマーの CRU において、優位性の高い副単位の選択が規則 IP-2.1.2 のみでは行えない場合の優位性の決定は次の順序で行う。

1. もし、CRU 中の副単位として多核中心を使う必要がある場合には、中心原子の数の少ない順に、多核配位中心 (polynuclear coordination centre) を選ぶ [“構成繰返し単位の命名”の考察 (p.128) を参照せよ]。
2. 中心原子あるいは配位中心については、ポリマー主鎖中の架橋配位子が配位している原子を除いて、その原子に配位している原子の数が最大のものを選ぶ。
3. ポリマー主鎖中の架橋配位子を除いて、中心原子や配位中心の名称が、配位子や倍数接頭辞を含めてアルファベット順にもっとも早いものを選ぶ。

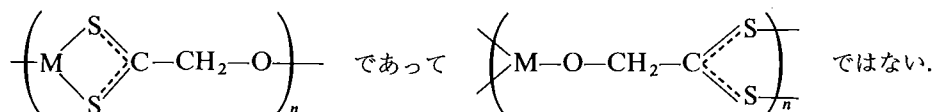
## IP-2.2 ポリマー鎖に沿って CRU の構成副単位を順番に記述するために優先される方向の選択

規則 IP-2.1 の優位性の条項をすべて満たすように CRU の優位の副単位を決めた後、次のような一般原理が適用できる範囲で、順次適用する。

## IP-2.2.1

単条あるいは準単条の CRU をもつことが可能な場合には、単条でつながった CRU\* をつくる方向が優先される方向である。

(例) (M は中心原子)



## IP-2.2.2 最短経路 (shortest path)

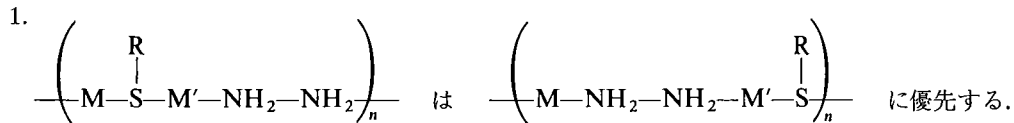
ポリマー鎖に沿って CRU の構成副単位を順次記述していくために優先される方向は、最高の優

\* この原理は、線状有機ポリマーの命名法において、もっとも優位性の高い副単位を決めるためのすべての因子を考慮した後に、二価あるいは多価の CRU を選ぶ必要が生じたときに採用される原理、すなわち、構成繰返し単位の遊離原子価を最少にするという原理とまったく同じである。

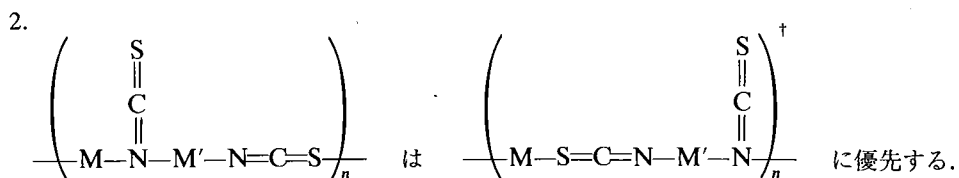


位性の副単位から同位の副単位あるいは次位の優位性の副単位までの経路が最短となるような方向である。これらの副単位間の長さとは、ある単位からもう一方の単位まで直接的につながった原子鎖中の原子の数を指す。

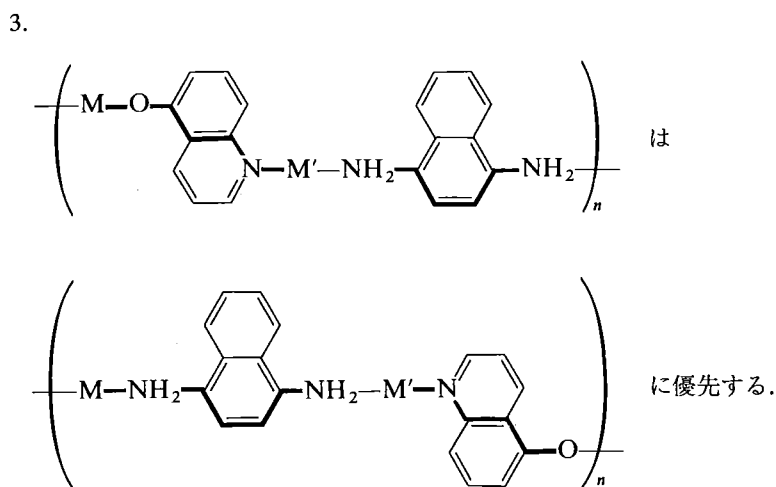
(例) (M は中心原子)



チオラト配位子を通過する1原子経路は、ヒドラジン配位子を通過する2原子経路よりも優先される。



イソチオシアナト配位子の窒素原子を通過する1原子経路は、イソチオシアナト配位子のすべての原子を通過する3原子経路よりも優先される。



5-キノリノラト配位子を通過する5原子経路は、1,4-ナフタレンジアミン配位子を通過する6原子経路よりも優先される。

### IP-2.2.3

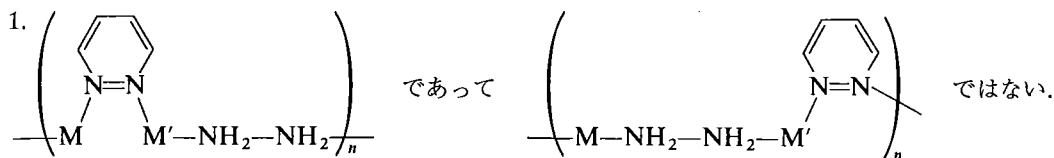
2つの同じ最高の優位性の副単位間あるいは最高の優位性の副単位と次位の優位性の副単位間の経路について、最短長のものが複数個存在する場合には、他の選択方法が残っていないとき、優先される方向は、経路中に含まれている構造や原子の種類によって決められ、最終的なCRU名の中

† (訳者注) 原著では構造式が誤って記載されているので訂正した。

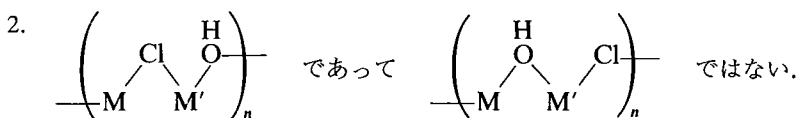
で使われる副単位の名称には依存しない。

IP-2.2.3.1 優先される経路を選択するためには、有機ポリマーに関する規則 [2c] と同じ原理が用いられる。すなわち、優位性の基本的な順序は、(i) 複素環 (heterocycles)、次いで (ii) 非環式ヘテロ原子 (acyclic hetero atoms)、次いで (iii) 炭素環 (carbocycles)、次いで (iv) 非環式の炭素原子 (acyclic carbon atoms) あるいは炭素鎖である (規則 2.1.2, 文献 [2c] を参照せよ)。有機ポリマーの規則で与えられているこれらの各分類内での優位性についても同様に適用される。複素環\*については規則 2.2.3 [2c], 非環式ヘテロ原子\*については規則 2.3.1 [2c], 炭素環については規則 2.4.1 [2c], 非環式鎖については規則 2.4.2 [2c] を参照せよ。

(例) (M は中心原子)



複素環は、非環式ヘテロ原子鎖よりも優先される。

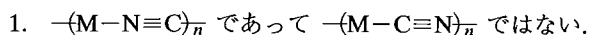


塩素配位子は、酸素配位子よりも優先される。

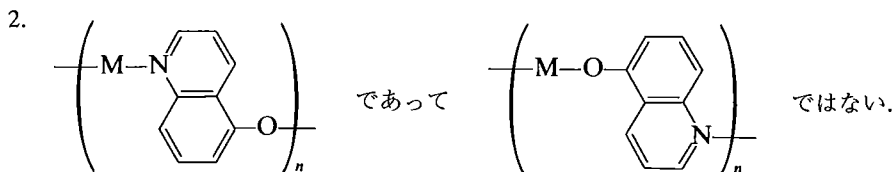
IP-2.2.3.2 有機ポリマーについての規則 2.4.2 [2c] の原則に従ったとき、同じ優位性となる複数の経路については、経路中の原子あるいは原子団の置換基 (substituents) に基づいて優位性が決められる。

IP-2.2.3.3 ここまでの方法では優位性に差のない経路で、さらに優位性を決める方法が必要な場合には、もっとも優位性の高い副単位からその経路中でもっとも優先される構造への経路が、規則 IP-2.2.2 で定義した意味で、もっとも短いものを優先される経路とする。

(例) (M は中心原子)



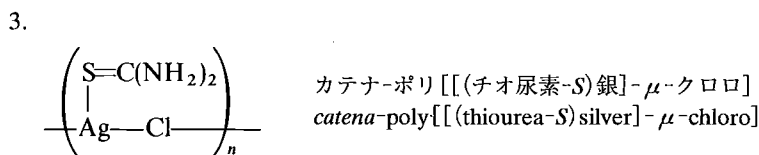
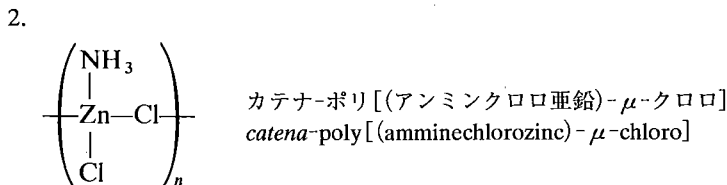
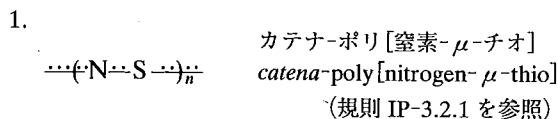
ヘテロ原子 N は炭素原子よりも優位性が高いため、優先される CRU において、最高の優位性の副単位 M に一番近くなるように記述される。



\* ここで述べている配位子中のヘテロ原子についての優位性の順序は、本規則の IP-2.1.2 で述べた配位中心に対する優位性の順序と同じではないことに注意する必要がある。



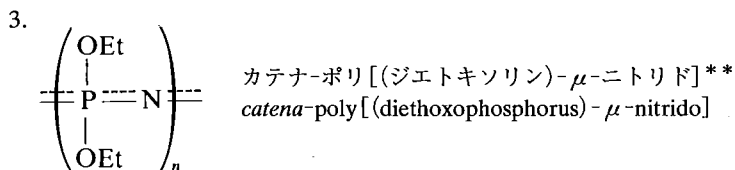
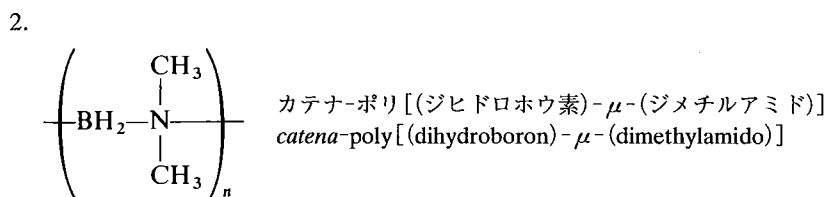
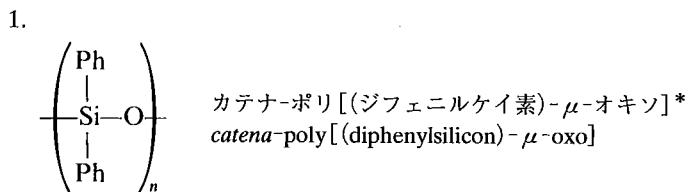
(例)



## IP-3.2.1

中心原子について選択が可能な場合、一般元素序列表(規則 IP-2.1.2 を参照)においてより後方にある元素を中心原子とする。

(例)



\* 線状有機ポリマーの規則 [1, 2] によれば、このポリマーはポリ[オキシ(ジフェニルシリレン)] [poly[oxy(diphenylsilylene)]]と方向づけられ、命名される。

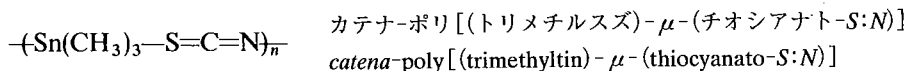
\*\* 線状有機ポリマーの規則 [1, 2] によれば、この無機ポリマーはポリ[ニトリロ(ジエトキシホスホラニリジン)] [poly[nitrilo(diethoxyphosphoranylidyne)]]と方向づけられ、命名される。

### IP-3.2.2

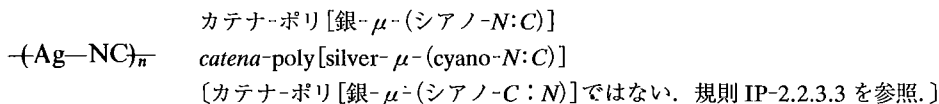
主鎖中の架橋配位子の配位原子を示すイタリック体の元素記号は CRU の列記の方向の順に記述し、間にコロンを置く。したがって、コロンの前に列記された元素記号は CRU の架橋配位子中、最初に現れる中心原子を表し、コロンの後に列記された元素記号は CRU あるいはポリマー中の架橋配位子中最後に現れる元素を表す。

(例)

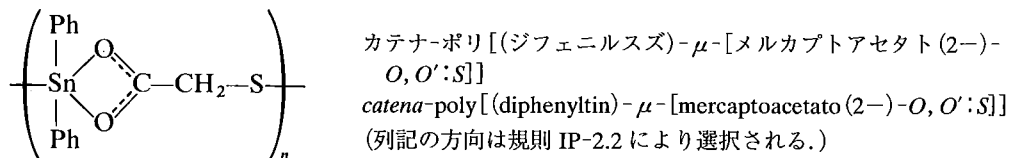
1.



2.



3.



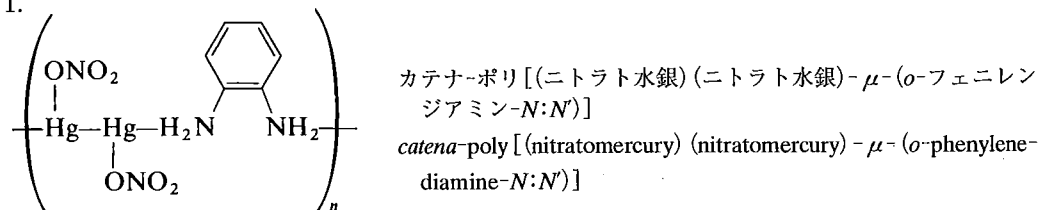
規則 IP-2.2 の原則を適用しても CRU における構成副単位の列記の方向についてなお選択が必要な場合、架橋配位子の配位原子を表すイタリック体の元素記号がアルファベット順に列記されるような方向を選ぶ (規則 IP-3.3 の例 6 を参照)。

### IP-3.3

中心原子が2つ以上、各中心原子の間の架橋配位子が1つ以下である構成繰返し単位は、規則 IP-3.2 の原理を拡張して命名される。優位の中心原子は規則 IP-2.1 によって選択され、列記の方向は規則 IP-2.2 によって決定される。

(例)

1.

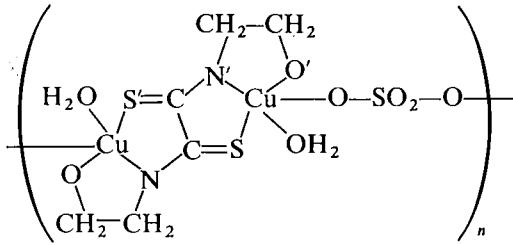


[カタナ-ポリ[(ニトラト水銀)-μ-(o-フェニレンジアミン-N:N')-(ニトラト水銀)]ではない。規則 IP-2.2.2 を参照。]\*

\* この例では金属-金属結合の表示を省略しても、二核および多核錯体のための配位の規則と矛盾しない [4f].



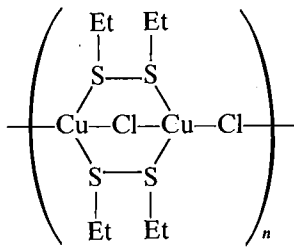
6.



カテナ-ポリ [(アクア銅)- $\mu$ -[ $N, N'$ -ビス(2-ヒドロキエチル)ジチオオキサミド(2-)- $N, O, S'$ :  
 $N', O', S$ ]- (アクア銅)- $\mu$ -[スルファト(2-)- $O:O'$ ]]\*  
*catena-poly* [(aquacopper)- $\mu$ -[ $N, N'$ -bis(2-hydroxyethyl) dithiooxamido(2-)- $N, O, S':N', O', S$ ]-  
 (aquacopper)- $\mu$ -[sulfato(2-)- $O:O'$ ]]

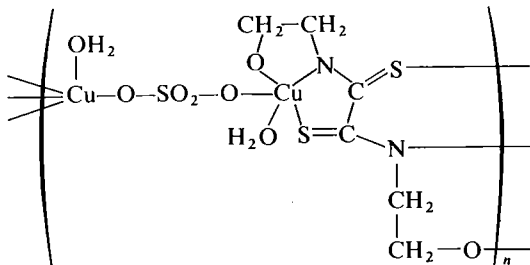
1つの対をなしている同一の中心原子の間の多重架橋配位子はアルファベット順に列記され、それぞれに接頭辞としてギリシャ文字  $\mu$  を付け、誤解の可能性を減らすために配位子全体を角括弧でくくる。

7.



カテナ-ポリ [銅-[ $\mu$ -クロロ-ビス- $\mu$ -(ジエチルジスルフィド- $S:S'$ )]-銅- $\mu$ -クロロ]  
*catena-poly* [copper-[ $\mu$ -chloro-bis- $\mu$ -(diethyl disulfide- $S:S'$ )]-copper- $\mu$ -chloro]  
 (列記の方向は規則 IP-2.2.1 によって選択される。)\*\*

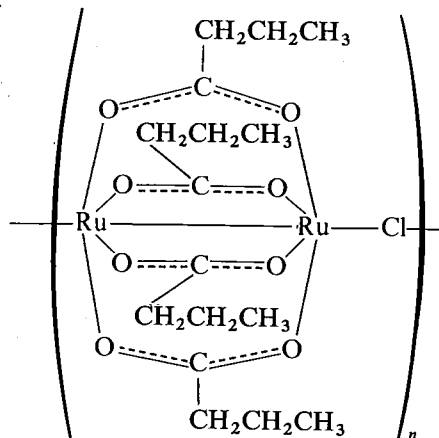
\* どちらかの銅中心原子から始めて、まずスルファト配位子を経由する CRU の方向づけは規則 IP-2.2.1 によって除外される。そのような方向づけは下に示すように、優先されない単条ポリマー構造を生じる。



残りの2つの方向づけの間の選択は、規則 IP-3.2.2 の第2段落に従ってなされる。優先される方向づけにおいて、架橋配位子の位置符号の順序は  $N, O, S': N', O', S$  の方が  $N', O', S: N, O, S'$  より低位である。

\*\* このような場合、次のように2つの銅中心原子を二核錯体として扱うのが便利かも知れない。カテナポリ [[ $\mu$ -クロロ-ビス- $\mu$ -(ジエチルジスルフィド- $S:S'$ )-二銅]- $\mu$ -クロロ] [*catena-poly* [[ $\mu$ -chloro-bis- $\mu$ -(diethyl disulfide- $S:S'$ )-dicopper]- $\mu$ -chloro]].

8.



カテナ-ポリ[[ルテニウム-テトラキス- $\mu$ -(ブチラト- $O:O'$ )-ルテニウム( $Ru-Ru$ )]- $\mu$ -クロロ]  
*catena-poly*[[ruthenium-tetrakis- $\mu$ -(butyrato- $O:O'$ )-ruthenium( $Ru-Ru$ )]- $\mu$ -chloro]  
 (列記の方向は規則 IP-2.2.1 によって選択される。)\*

#### 規則 IP-4 規則性準単条配位ポリマー (Regular Quasi-Single-Strand Coordination

Polymers)

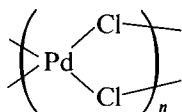
規則性準単条配位ポリマーは、規則 IP-1 によって与えられるような適当な一般的ポリマー名に、優先される構成繰返し単位の名称を入れて命名する。

##### IP-4.1

1 個の単核中心原子と 2 個以上の同種あるいは異種の架橋配位子、または 1 個のキレート配位子からなる主鎖をもつ構成繰返し単位は、結合している非架橋配位子の名称を接頭辞として付けた中心原子の名称を記述し、さらにそれぞれにギリシャ文字  $\mu$  を付けた架橋配位子の名称を続けて命名する。同一の架橋配位子の数は、もし 2 個以上の場合、適当な倍数接頭辞を付けて示す。異なる架橋配位子はアルファベット順に列記し、全体を適当な括弧でくくる。

(例)

1.

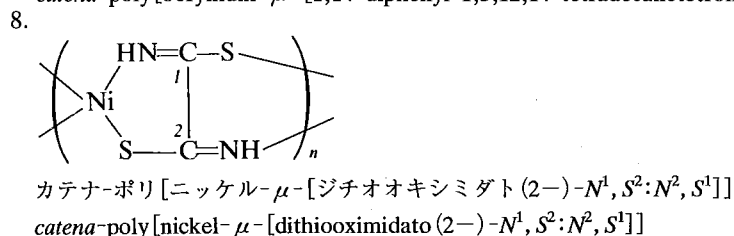
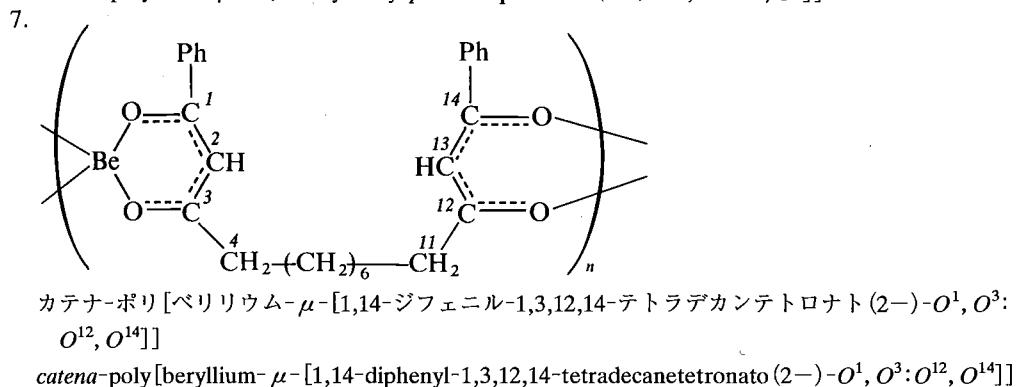
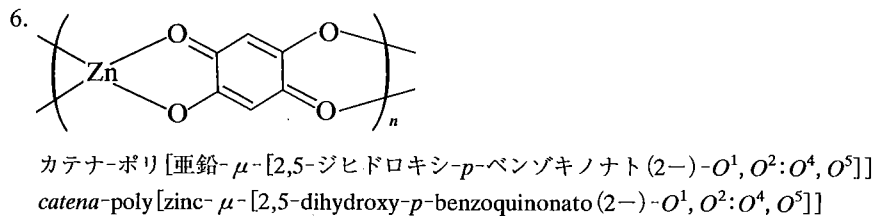
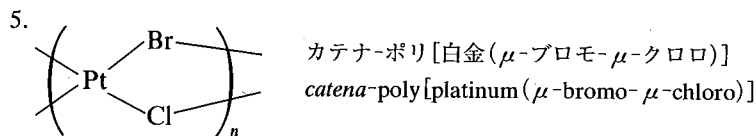
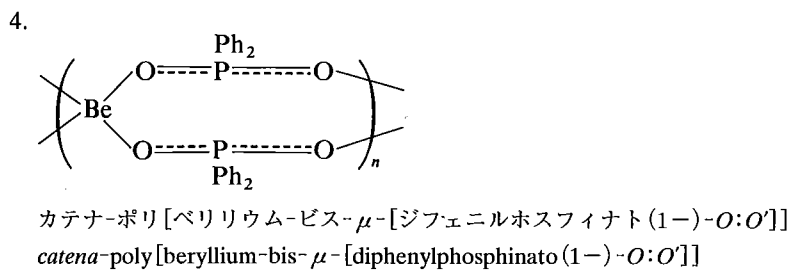
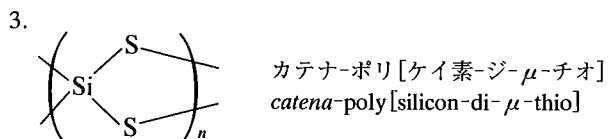
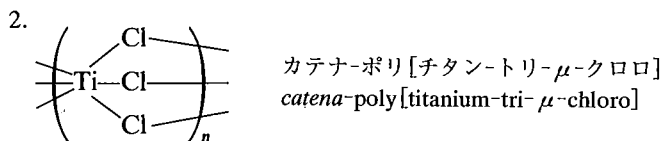


カテナ-ポリ[パラジウム-ジ- $\mu$ -クロロ]  
*catena-poly*[palladium-di- $\mu$ -chloro]

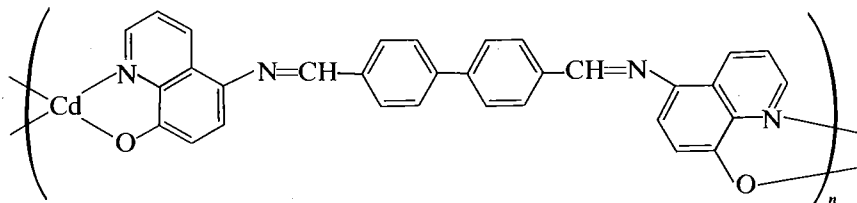
(1970 年 IUPAC 無機命名法規則 [4g] ではカテナ-ジ- $\mu$ -クロロ-パラジウムである。)

\* 金属-金属結合をこのように列記することはポリマー命名の基本原則にあまりそぐわないように見える。したがって、たとえば次のように、2 個のルテニウム中心原子を二核錯体として取り扱う方がおそらく受け入れやすいであろう。カテナ-ポリ[[テトラキス- $\mu$ -(ブチラト- $O:O'$ )-ジルテニウム( $Ru-Ru$ )]- $\mu$ -クロロ]  
*catena-poly*[[tetrakis- $\mu$ -(butyrato- $O:O'$ )-diruthenium( $Ru-Ru$ )]- $\mu$ -chloro]].





9.



カテナ-ポリ[カドミウム- $\mu$ -[[5,5'-[4,4'-ピフェニリレンビス(メチリジンニトリロ)]ジ-8-キノリノラト](2-)- $N^1, O:N^1, O^1$ ]

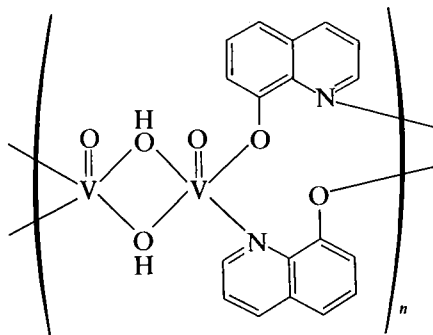
*catena-poly*[cadmium- $\mu$ -[[5,5'-[4,4'-biphenylenebis(methylidynenitrilo)]di-8-quinolinolato](2-)- $N^1, O:N^1, O^1$ ]

## IP-4.2

2個以上の中心原子を有する構成繰返し単位は、IP-4.1の原則を拡張して命名する。中心原子の優位性は規則IP-2.1に従って決定し、列記の方向は規則IP-2.2によって決定する。

(例)

1.

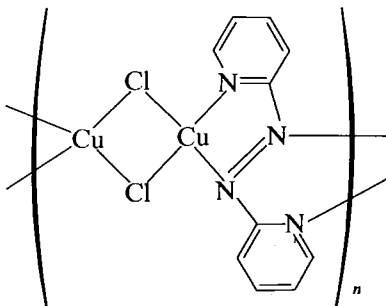


カテナ-ポリ[(オキソバナジウム)-ジ- $\mu$ -ヒドロキソ-(オキソバナジウム)-[[ $\mu$ -(8-キノリノラト- $N:O$ )- $\mu$ -(8-キノリノラト- $O:N$ )]]

*catena-poly*[(oxovanadium)-di- $\mu$ -hydroxo-(oxovanadium)-[[ $\mu$ -(8-quinolinolato- $N:O$ )- $\mu$ -(8-quinolinolato- $O:N$ )]]

(列記の方向は規則IP-2.2.2によって決定される。)

2.



カテナ-ポリ[銅-ジ- $\mu$ -クロロ-銅- $\mu$ -[[2,2'-(アゾ- $N:N'$ )ジピリジン- $N':N'$ ]]

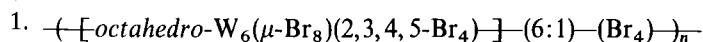
*catena-poly*[copper-di- $\mu$ -chloro-copper- $\mu$ -[[2,2'-(azo- $N:N'$ )dipyridine- $N':N'$ ]]

(列記の方向は規則IP-2.2.2によって決定される。)

**規則 IP-5 多核配位中心をもつ単条および準単条配位ポリマー (Single-Strand and Quasi-Single-Strand Coordination Polymers with Polynuclear Coordination Centres)**

1個の多核配位中心をもつ単条および準単条配位ポリマーは単核中心のみをもつ配位ポリマーと同様に命名される。多核中心は優位の副単位であり、CRUの命名において副単位の列記はこれから始める。架橋配位子が付いている多核錯体の双方の位置は位置番号によって示し、多核中心の名称と架橋配位子の名称の間に挿入し、コロンで区切る。コロンの前の位置番号はCRUで先に現れる多核中心に対するものであり、コロンの後の位置番号はポリマー鎖中の次の多核中心に対するものである。

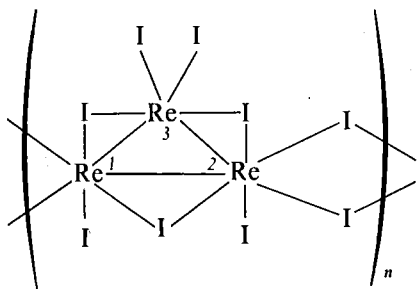
(例)



カテナ-ポリ[[オクタ-μ-ブromo-2,3,4,5-テトラブromo-オクタヘドロ-ヘキサタングステン)-6:1-μ-[テトラブromiド(2-)]]

catena-poly[(octa-μ-bromo-2,3,4,5-tetrabromo-octahedro-hexatungsten)-6:1-μ-[tetrabromido(2-)]]

2.



カテナ-ポリ[[1,2:1,3:2,3-トリ-μ-ヨード-1,2,3,3-テトラヨード-トリアングロ-トリレニウム(3Re-Re)]-2,2:1,1-ジ-μ-ヨード]\*

catena-poly[[1,2:1,3:2,3-tri-μ-iodo-1,2,3,3-tetraiodo-triangulo-trirhenium-(3Re-Re)]-2,2:1,1-di-μ-iodo]

**規則 IP-6 イオン性構成繰返し単位をもつ規則性単条および準単条無機および配位ポリマー (Regular Single-Strand and Quasi-Single-Strand Inorganic and Coordination Polymers with Ionic Constitutional Repeating Units)**

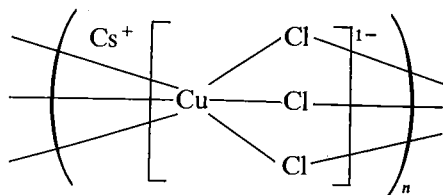
イオン性CRUをもつ規則性単条および準単条無機および配位ポリマーは規則IP-3, IP-4, IP-5において述べた方法に従って命名される。CRUの電荷はCRUのイオン性部分の名称の後にイーウェンス-バセット数 (Ewens-Bassett number) を付けて示す。中心原子の酸化状態を示すためにストック数 (Stock numbers) を用いてもよい。その場合、その数字は通常中心原子の名称に

\* 多核錯体に対して番号を付ける規則は完全には定められておらず、無機化学の命名法に関するIUPAC委員会で検討中である。ここに示した番号づけは任意のものであり、本報告においてこのポリマーの構造を規定するための便宜的なものである。

付ける。

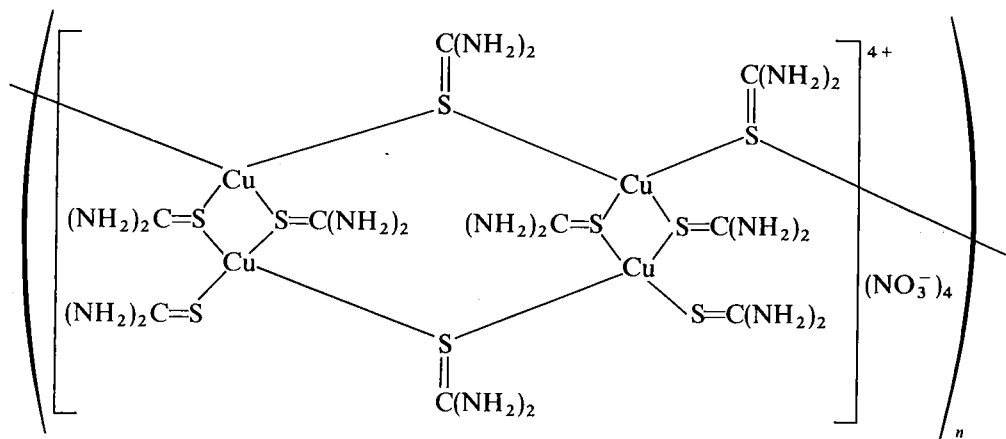
(例)\*

1.



カテナ-ポリ[セシウム[銅酸-トリ- $\mu$ -クロロ](1-)]  
*catena-poly[caesium [cuprate-tri- $\mu$ -chloro] (1-)]*  
 または  
 カテナ-ポリ[セシウム[銅(II)酸-トリ- $\mu$ -クロロ]]  
*catena-poly[caesium [cuprate (II)-tri- $\mu$ -chloro]*

2.



カテナ-ポリ[[[ビス- $\mu$ -(チオ尿素-S,S)-2-(チオ尿素-S)二銅]-1,2:1,2-[ビス- $\mu$ -(チオ尿素-S:S)]  
 [ビス- $\mu$ -(チオ尿素-S,S)-2-(チオ尿素-S)二銅]-1:1- $\mu$ -(チオ尿素-S:S)](4+)四硝酸塩]  
*catena-poly[[[bis- $\mu$ -(thiourea-S,S)-2-(thiourea-S) dicopper]-1,2:1,2-[bis- $\mu$ -(thiourea-S:S)]-  
 [bis- $\mu$ -(thiourea-S,S)-2-(thiourea-S) dicopper]-1:1- $\mu$ -(thiourea-S:S)](4+) tetranitrate]*  
 または

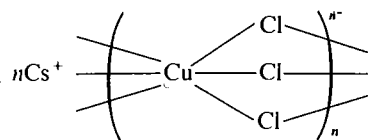
カテナ-ポリ[[[ビス- $\mu$ -(チオ尿素-S,S)-2-(チオ尿素-S)二銅(I)]-1,2:1,2-[ビス- $\mu$ -(チオ尿素-S:S)]  
 [ビス- $\mu$ -(チオ尿素-S,S)-2-(チオ尿素-S)二銅(I)-1:1- $\mu$ -(チオ尿素-S:S)]四硝酸塩]  
*catena-poly[[[bis- $\mu$ -(thiourea-S,S)-2-(thiourea-S) dicopper (I)]-1,2:1,2-[bis- $\mu$ -(thiourea-S:S)-  
 S)] [bis- $\mu$ -(thiourea-S,S)-2-(thiourea-S) dicopper (I)-1:1- $\mu$ -(thiourea-S:S)] tetranitrate]*

### 規則 IP-7 構成繰返し単位の立体配置 (Stereochemical Configuration of a

### Constitutional Repeating Unit)

1個の単核中心原子と1個の架橋配位子からなる構成繰返し単位の立体配置は、完成されたポリ

\* 無機の観点からは、これらのポリマーは下に示すように、ポリマーイオンの塩と考えた方がよいかもしれない。

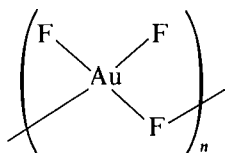


セシウム=カテナ-ポリ[[銅酸-トリ- $\mu$ -クロロ](1-)]  
*caesium catena-poly [cuprate-tri- $\mu$ -chloro] (1-)]*  
 または  
 セシウム=カテナ-ポリ[銅(II)酸-トリ- $\mu$ -クロロ]  
*caesium catena-poly [cuprate (II)-tri- $\mu$ -chloro]*

マー名の前に適当な接頭辞を付けて示される\*。

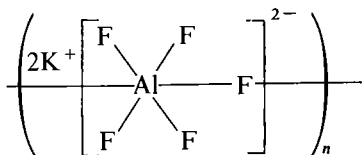
(例)：

1.



シス-カテナ-ポリ [(ジフルオロ金)- $\mu$ -フルオロ]  
*cis-catena-poly* [(difluorogold)- $\mu$ -fluoro]

2.



トランス-カテナ-ポリ [二カリウム [(テトラフルオロアルミン酸)- $\mu$ -フルオロ] (2-)]  
*trans-catena-poly* [dipotassium [(tetrafluoroaluminate)- $\mu$ -fluoro] (2-)]

または

トランス-カテナ-ポリ [二カリウム [[テトラフルオロアルミン(III)酸]- $\mu$ -フルオロ]]  
*trans-catena-poly* [dipotassium [[tetrafluoroaluminate(III)]- $\mu$ -fluoro]]

(無機命名法ではアルミニウムに対してストック数を使用する必要はない。)

## 規則 IP-8 線状無機または配位ポリマーの末端基 (End Groups of Linear Inorganic or Coordination Polymer)

線状無機または配位ポリマーの末端基はポリマー名の前に接頭辞をつけて指定する (規則 IP-1.4 を参照)。

### IP-8.1

優先される CRU の最初の構成副単位、すなわち CRU において左端の副単位として書かれる優位の配位中心に付いている原子団は、配位子として命名し、ギリシャ文字  $\alpha$  で示す。

優先される CRU のもう一方の末端副単位に付いている末端基が、中心原子または架橋配位子に

\* この規則の2つの例に対して下に示すように、立体化学接頭辞を接頭辞“ポリ”と CRU の名称の間に挿入するという別の書式は、無機の命名法とよく一致する。

1. カテナ-ポリ [シス-[(ジフルオロ金)- $\mu$ -フルオロ]]  
*catena-poly* [cis-[(difluorogold)- $\mu$ -fluoro]]

2. カテナ-ポリ [トランス-[[二カリウム [(テトラフルオロアルミン酸)- $\mu$ -フルオロ] (2-)]]  
*catena-poly* [trans-[[dipotassium [(tetrafluoroaluminate)- $\mu$ -fluoro] (2-)]]

または

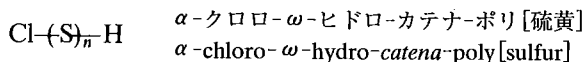
カテナ-ポリ [トランス-[[二カリウム [[テトラフルオロアルミン(III)酸]- $\mu$ -フルオロ]]]  
*catena-poly* [trans-[[dipotassium [[tetrafluoroaluminate(III)]- $\mu$ -fluoro]]]

ただし、この規則 (IP-7) における勧告は、有機ポリマーに対して勧められている立体化学表記と一致している [6]。

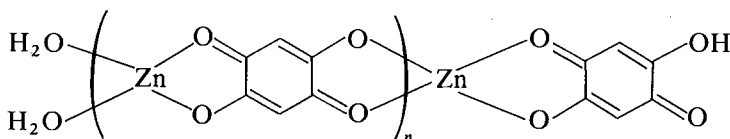
付いている場合、配位命名法の通常原則によって中心原子として命名し、ギリシャ文字  $\omega$  で示す。

(例)

1.



2.



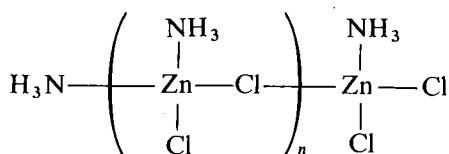
$\alpha, \alpha$ -ジアクア- $\omega$ -[[2,5-ジヒドロキシ-*p*-ベンゾキノナト(1-)- $O^1, O^2$ ]亜鉛]-カタナ-ポリ [亜鉛- $\mu$ -[2,5-ジヒドロキシ-*p*-ベンゾキノナト(2-)- $O^1, O^2:O^4, O^5$ ]]

$\alpha, \alpha$ -diaqua- $\omega$ -[[2,5-dihydroxy-*p*-benzoquinonato(1-)- $O^1, O^2$ ]zinc]-catena-poly [zinc- $\mu$ -[2,5-dihydroxy-*p*-benzoquinonato(2-)- $O^1, O^2:O^4, O^5$ ]]

### IP-8.2

配位子を末端基として表すべきか、構成繰返し単位に含めるべきか、の選択が必要な場合、 $\alpha$ 末端基として選ぶ配位子はその名称がアルファベット順で最初に現れるものとする。

(例)



$\alpha$ -アンミン- $\omega$ -(アンミンジクロロ亜鉛)-カタナ-ポリ [(アンミンクロロ亜鉛)- $\mu$ -クロロ]

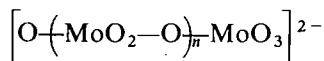
$\alpha$ -ammine- $\omega$ -(amminedichlorozinc)-catena-poly [(amminechlorozinc)- $\mu$ -chloro]

### IP-8.3

イオン性と考えられる末端基 (ionic end groups) は通常、配位命名法の原則によって命名される。電荷量はイーウェンス-バセット数を完全なポリマー名の最後に付けて示す。

(例)

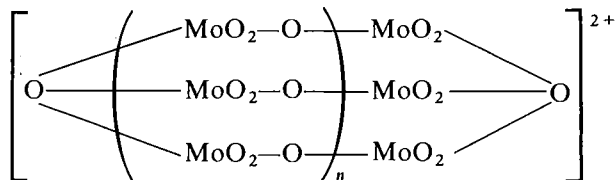
1.



[ $\alpha$ -オキソ- $\omega$ -(トリオキシモリブデン酸)-カタナ-ポリ [(ジオキシモリブデン)- $\mu$ -オキソ]] (2-)

[ $\alpha$ -oxo- $\omega$ -(trioxomolybdate)-catena-poly [(dioxomolybdenum)- $\mu$ -oxo]] (2-)

2.



[ $\alpha$ - $\mu_3$ -オキソ- $\omega$ -[ $\mu_3$ -オキソ-トリス(ジオキソモリブデン)]トリス[カタナ-ポリ[(ジオキソモリブデン)- $\mu$ -オキソ]]] (2+)\*

[ $\alpha$ - $\mu_3$ -oxo- $\omega$ -[ $\mu_3$ -oxo-tris(dioxomolybdenum)] tris[catena-poly[(dioxo-molybdenum)- $\mu$ -oxo]]] (2+)

## 文 献

- [1] アメリカ化学会. 線状ポリマーの構造基礎命名法. *Macromolecules* **1**, 193-198 (1968).
- [2] IUPAC. 規則性単条有機ポリマーの命名法: (a) *IUPAC Inf. Bull. Append. No. 29* (1972); (b) *Macromolecules* **6**, 149-158 (1973)—暫定規則についての別の出版物 (文献[2a]); (c) *Pure Appl. Chem.* **48**, 373-385 (1976)—承認された規則 (1975). 本書第5章に掲載.
- [3] IUPAC. "Nomenclature of Organic Chemistry", Sections A, B, C, D, E, F and H. Pergamon Press, Oxford (1979): (a) 規則 6.22, pp. 411-412; (b) 規則 1.1, p. 5.
- [4] IUPAC. "Nomenclature of Inorganic Chemistry", 2nd Edn, Butterworths, London (1971): (a) 規則 7.62, pp. 71-72; (b) 表 III, p. 103; (c) 規則 4.14, 脚注, p. 27; (d) 表 IV, p. 104; (e) 規則 1.4, 例 6, p. 12; (f) 規則 7.71 および 7.72, pp. 72-73; (g) 規則 7.62, p. 71.
- [5] IUPAC. ポリマーに関する術語の基本的定義 1974. *Pure Appl. Chem.* **40**, 477-491 (1974): (a) 定義 3.3, p. 482. 本書第1章に掲載.
- [6] IUPAC. ポリマーに関する立体化学の定義と概念 (1980年勧告). *Pure Appl. Chem.* **53**, 733-752 (1981). 本書第2章に掲載.

\* これは、末端がオキソ末端基によって結合された3つの鎖からなる規則性単条ポリマーである。