

7. コポリマーの原料基礎命名法(1985)*

前 文

コポリマーは科学研究, 工業的応用のいずれにおいても著しく重要となってきた。したがって, こうしたポリマーを命名するために統一的で明確に規定された体系は非常に有益であろう。ここで提案する命名法は, コポリマー分子中のモノマー単位の連鎖配列の型を指定する体系をつくりあげることによって, 上記の目的に応えようとするものである。

原則的にいえば, コポリマーを命名する総合的な構造基礎 (structure-based) の体系が望ましいであろう。しかし, このような体系には, ポリマー分子中でのすべての構成単位の明確な構造ならびにその連鎖配列の知識が前提として必要である。実際に手にする合成ポリマーでこうした情報が得られることは稀である。この理由から本勧告の提案は, 本質的に原料基礎命名法の体系 (source-based nomenclature system) を具体化したものである。

コポリマーの構造が十分にわかっていて, 単条ポリマーの諸規則 [1, 2] で処理できる場合には, 本体系の適用によって構造基礎命名法の使用が抑制されることがあってはならない。さらに IUPAC-IUB 生化学命名法委員会によって公表された合成ポリペプチドの略記命名法 [3] との整合性を可能な限り維持するように努めた。本命名法の体系は, 1952年に公表された, 前の勧告 [4] に優先するものである。

基本概念 (Basic Concept)

ここに提案する命名法体系は, コポリマーのために考えられたものである。定義によればコポリマー[†]は, 2種類以上の単量体からつくられたポリマーである [5]。コポリマーの種々の分類は, コポリマー分子中のモノマー単位の連鎖配列の特徴にもとづいて論じられている。一般に, モノマー単位の指定には, モノマー名を用いる。モノマーは慣用 (trivial), 半体系的 (semi-systematic) または体系的 (systematic) 形で命名することができる。コポリマーの分類は, 次の通りである。

無指定 (unspecified)	(規則 1.1)
統計 (statistical)	(規則 2.1)
ランダム (random)	(規則 2.2)
交互 (alternating)	(規則 3.1)
周期 (periodic)	(規則 4.1)
ブロック (block)	(規則 5.1)
グラフト (graft)	(規則 6.1)

コポリマー分子が単一の連鎖配列にあるただ1種の構成単位によって記述できる場合には, コポ

* 本勧告のための原稿は, W. Ring (FRG), I. Mita (Japan), A. D. Jenkins (UK), N. M. Bikales (USA) 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, 1427-1440 (1985) に掲載されている。

† (訳者注) copolymer の日本語は, コポリマーと共重合体のいずれでもよい。

リマーは規則性ポリマーであり [5], したがって構造基礎の方式で命名することができる [1, 2]. 例は後に本文中で取り上げる.

単一のモノマーからなるが, 構成的 (constitutional) または配置的 (configurational) 特徴の異なるモノマー単位をもつポリマーは, 基本的定義 [5] に従うとコポリマーとはみなせない. コポリマーでないこのようなポリマーの例は,

- (1) 1,2-および1,4-型の単位の配列が混合したポリブタジエン
- (2) 2つのエナンチオマー *R* と *S* の混合物の重合で得られ, *R* と *S* の両単位を含むポリメチルオキシラン, 別名ポリプロピレンオキシド

しかし, ここで提案する命名法体系は, このような擬コポリマー (pseudo-copolymers) にも適用することができる. ホモポリマーから化学的変換によって誘導される, 構成的特徴が異なるモノマー単位をもつポリマーも同様に命名することができる. たとえば,

- (3) エステルとアルコール両単位をもつ部分加水分解したポリ酢酸ビニル

関係の深いもうひとつの命名法の体系を付録に示すが, 場合によってはその方がむしろ望ましい体系である.

コポリマーの分類と定義 (Classification and Definition of Copolymers)

コポリマーに対する体系的な原料基礎命名法は構成モノマーを識別し, 存在するモノマー単位の異なった型の連鎖配列を記述するものでなくてはならない. 本提案ではこの目的を達成するために, 接頭辞“ポリ”の後に構成モノマーの名称を列記し, 各モノマーの組み合わせの間に, その2種のモノマー単位が構造中で結びつけられている配列の種類を示すイタリック体の接続記号を置く. 以下に7種の連鎖配列および対応する接続記号と例を列挙する. A, B, C はモノマーの名称である.

型	接続記号†	例†
無指定	-co-	ポリ (A-co-B)
統計	-stat-	ポリ (A-stat-B)
ランダム	-ran-	ポリ (A-ran-B)
交互	-alt-	ポリ (A-alt-B)
周期	-per-	ポリ (A-per-B-per-C)
ブロック	-block-	ポリ A-block-ポリ B
グラフト	-graft-	ポリ A-graft-ポリ B

それぞれの型のコポリマーは, 以下でさらに詳しく取り扱う. 末端基の化学的特徴を明示したいときには, (上記の) コポリマーの名称の前に末端基の体系的名称を置く. 接頭辞 α あるいは ω は, それぞれ, 構造の左または右につく末端基であることを示す.

(例) α -X- ω -Y-poly (A-co-B)

A, B, C の列記の順は, とくに順序の優位性を規則中で規定しない限り, 何ら優先順位を表すもの

† (訳者注) poly は日本語でポリと書き, 接続記号 -co-, -stat-, などは英語のまま書く.

ではない。したがって、しばしば2種以上の名称が可能となる。

1. モノマー単位の配列が無指定のコポリマー (Copolymers with an unspecified arrangement of monomeric units)

規則 1.1 モノマー単位の無指定連鎖配列は
(A-co-B)

で表し、相当するコポリマーの名称は

ポリ(A-co-B)

である。

(例) スチレンとメタクリル酸メチルの無指定コポリマーの名称は
ポリ(スチレン-co-メタクリル酸メチル)
poly[styrene-co-(methyl methacrylate)]

2. 統計コポリマー (Statistical copolymers)

統計コポリマーはモノマー単位の連鎖分布が一定の統計的法則に従うコポリマーである。たとえばモノマー単位の連鎖分布は0次のマルコフ統計(ベルヌーイ統計)や1次、2次またはさらに高次のマルコフ統計に従ってもよい。速度論的にいえば、モノマー単位の統計連鎖を与える素過程は、必ずしも同じ先験的確率で進行するとは限らない。こうした過程によって、モノマー単位の配列が交互性をもつ傾向、同じ単位が並ぶ傾向、あるいは秩序的な配列傾向(ordering tendency)をまったく示さないなど、各種の連鎖分布を与えることになる[6]。簡単な二成分系共重合においては、この連鎖分布の特性は、反応性比あるいは関連する連鎖数(run number)の関数の数値によって示すことができる[6, 7]。

ここで提案されている統計コポリマーという用語は、混合した2種以上のモノマーを同時に重合して得られる広い範囲のコポリマーを指す。このようなコポリマーは文献中では、しばしば“ランダムコポリマー”と記述されているが、これはほとんどの場合ランダムという用語を不適當に使用しているので、この慣習は改めるべきである。

規則 2.1 モノマーの単位の統計連鎖配列は
(A-stat-B), (A-stat-B-stat-C) など

で表される。ここで-stat-はA, B, Cなどの単位の連鎖分布がある種の統計に従っていることを示す。統計コポリマーの名称は

ポリ(A-stat-B), ポリ(A-stat-B-stat-C) などである。

(例) ポリ(スチレン-stat-ブタジエン)
poly(styrene-stat-butadiene)
ポリ(スチレン-stat-アクリロニトリル-stat-ブタジエン)
poly(styrene-stat-acrylonitrile-stat-butadiene)

ランダムコポリマー (random copolymers)

ランダムコポリマーは、統計コポリマーの特殊な場合である。ランダムコポリマーは、ポリマー鎖中の任意の部位で、あるモノマー単位を見いだす確率が、その位置の隣接単位の性質と無関係な(ベルヌーイ分布)統計コポリマーである。換言すると、このようなコポリマーでは、 $P[A]$ 、 $P[B]$ 、 $P[C]$ などを各モノマー単位の出現する無条件確率とすると、モノマー単位A, B, C…の連鎖…ABC…を見いだす確率、すなわち $P[\dots ABC \dots]$ は次式で与えられる。

$$P[\dots ABC \dots] = P[A] \cdot P[B] \cdot P[C] \dots = \prod_{i=A, B, C, \dots} P[i]$$

すでに述べたように“ランダム”という用語はこの狭い意味以外の統計コポリマーに対して、用い
てはならない[†]。

一部の人は“ランダム”という用語を、ベルヌーイ分布でしかもモノマー単位が厳密に等量存在
するという、さらに制約された条件の場合に用いている [8]。

規則 2.2 モノマー単位のランダム連鎖配列は

(A-ran-B), (A-ran-B-ran-C) など

で表される。-ran-はA, B, Cなどの単位に関するランダム連鎖分布を示す。ランダムコポリマー
の名称は

ポリ(A-ran-B), ポリ(A-ran-B-ran-C) などである。

(例) ポリ(エチレン-ran-酢酸ビニル)
poly[ethylene-ran-(vinyl acetate)]

3. 交互コポリマー (Alternating copolymers)

交互コポリマーは、交互連鎖で分布する2種のモノマー単位を含むコポリマーである。したがっ
て配列

-ABABABAB- すなわち $(AB)_n$

が交互コポリマーを表す。

規則 3.1 モノマー単位の交互連鎖配列は

(A-alt-B)

で表され、相当する交互コポリマーの名称は

ポリ(A-alt-B)

である。

(例) ポリ(スチレン-alt-無水マイレン酸)
poly[styrene-alt-(maleic anhydride)]

交互連鎖配列は、構成上の規則性構造 (constitutionally regular structures) をつくることが可能
であり、その場合には、規則性単条有機ポリマーの構造基礎命名法を用いて命名することができる。

[†] (訳者注) 本勧告におけるランダムという用語は、日本、アメリカ合衆国などで一般に用いられている
使い方(統計とほとんど同じ)と非常に異なるので注意が必要である。

上記の例の名称は、

ポリ[(2,5-ジオキソテトラヒドロフラン-3,4-ジイル)(1-フェニルエチレン)]
poly[(2,5-dioxotetrahydrofuran-3,4-diyl)(1-phenylethylene)]

4. その他の周期コポリマー (Other types of periodic copolymers)

交互コポリマーのほかにモノマー単位が秩序的な連鎖 (ordered sequence) で現れる構造が知られている。たとえば、

—ABCABCABC—	すなわち	(ABC) _n
—ABBABBABB—	すなわち	(ABB) _n
—AABBAABBAABB—	すなわち	(AABB) _n
—ABACABACABAC—	すなわち	(ABAC) _n

規則 4.1 モノマー単位の周期的連鎖配列は

(A-per-B-per-C)
(A-per-B-per-B)
(A-per-A-per-B-per-B)
(A-per-B-per-A-per-C) など

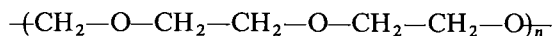
で表され、相当する周期コポリマーの名称は、それぞれ

ポリ(A-per-B-per-C)
ポリ(A-per-B-per-B)
ポリ(A-per-A-per-B-per-B)
ポリ(A-per-B-per-A-per-C) など

である。

これらのポリマーが規則性であれば、規則性単条有機ポリマーの構造基礎命名法 [1] によって命名することもできる。

(例) ホルムアルデヒドとエチレンオキシドからなる二元モノマー混合物は、周期的連鎖配列をもつコポリマー



を与えるかもしれない。その名称は

ポリ(ホルムアルデヒド-per-エチレンオキシド-per-エチレンオキシド)
poly[formaldehyde-per-(ethylene oxide)-per-(ethylene oxide)]

または

ポリ(ホルムアルデヒド-alt-ビスエチレンオキシド)
poly[formaldehyde-alt-bis(ethylene oxide)]

または、別名として、

ポリ(オキシメチレンオキシエチレンオキシエチレン)
poly(oxymethyleneoxyethyleneoxyethylene)

である。

規則 4.2 コポリマーの構造に何種類かの周期的な部位があり、そのいくつかのみを常に特定の種類のモノマー単位 (A, B, ...) が占め、他の部位を 2 種以上のモノマー単位 (U, V, ...) が不規則な順序で占めるとすると、後者の部位のモノマーの名称は、括弧の中に入れ、セミコロンで分けて示す。

(例)

1. 次の連鎖配列

—AUAVAVAUAVAU—

のコポリマーの名称は

ポリ [A-*alt*-(U; V)]

である。

2. 次の連鎖配列

—AUBUAVBUAVBVAUBVAUBU—

のコポリマーの名称は

ポリ [A-*per*-(U; V)-*per*-B-*per*-(U; V)]

である。

5. ブロックコポリマー (Block copolymers)

ブロックポリマーは複数のブロックが線状に配列した分子からなるポリマーであり、ブロックとはポリマー分子の一部分で、その部分に含まれているモノマー単位が隣接する部分には存在しない構成上あるいは配置上の特徴を少なくとも 1 つもつものである [5]。ブロックコポリマーは構成上の特徴に違いがある、すなわち、各ブロックは別種のモノマーからつくられた単位をもつ。

以下の連鎖配列

—AAAAAAAA—BBBBBBBBBB—

—AAAAAAAA—BBBBBBBBBB—AAAAAAAA—

—AABABAAABB—AAAAAAAA—BBBBBBBBBB—

で連鎖 —AAAAAAAA—、—BBBBBBBBBB— および —AABABAAABB— がブロックである。

規則 5.1 ブロックの連鎖配列は

A_k -*block*- B_m , A_k -*block*-(A-*stat*-B) など

で表され、相当するポリマーの名称は、それぞれ

ポリ A-*block*-ポリ B, ポリ A-*block*-ポリ (A-*stat*-B) など

である。もし混乱が起らなければ、ブロック結合を示すのに次式のような長いダッシュを用いてもよい。

ポリ A—ポリ B

複雑な場合には、長いダッシュよりも -*block*- を用いることを推奨する。各ブロックの名称を並べる順は、鎖の中のブロックの続く順に対応させて、左から右へ書くようにする。

(例) 以下の例で下つき k, m, \dots はブロック中に含まれるモノマー単位の数を示し、不定数でも特定の値でもよい (規則 5.3 参照): いずれの場合にも、第 1 行はブロック連鎖配列の表示であり、第 2 行は対応する名称、第 3 行は特定の例である。

A_k -*block*- B_m

ポリ A-*block*-ポリ B

ポリスチレン-*block*-ポリブタジエン

polystyrene-*block*-polybutadiene

A_k -*block*- B_m -*block*- A_k

ポリ A-*block*-ポリ B-*block*-ポリ A

ポリスチレン-*block*-ポリブタジエン-*block*-ポリスチレン

polystyrene-*block*-polybutadiene-*block*-polystyrene

(A-*stat*-B)-*block*- A_k -*block*- B_m

ポリ (A-*stat*-B)-*block*-ポリ A-*block*-ポリ B

ポリ (スチレン-*stat*-ブタジエン)-*block*-ポリスチレン-*block*-ポリブタジエン

poly(styrene-*stat*-butadiene)-*block*-polystyrene-*block*-polybutadiene

A_k -*block*- B_n -*block*- C_m

ポリ A-*block*-ポリ B-*block*-ポリ C

ポリスチレン-*block*-ポリブタジエン-*block*-ポリメタクリル酸メチル

polystyrene-*block*-polybutadiene-*block*-poly(methyl methacrylate)

規則 5.2 たとえば

- A_k - B_n - C_m -

のように連続したブロックが繰返される場合、適切な倍数接頭辞を用いる。

(例) $(A_k$ -*block*- B_n -*block*- C_m)₃

トリス(ポリ A-*block*-ポリ B-*block*-ポリ C)

$(A_k$ -*block*- B_n -*block*- C_m)_p

ポリ(ポリ A-*block*-ポリ B-*block*-ポリ C)

規則 5.3 ブロックの鎖長を特定できるときには、ポリを用いるより適切なギリシャ語系接頭辞 (たとえば 100 に対しヘクタ) を用いる。短い連鎖長のは厳密には“ブロック”の定義の範囲外であるが、一般的な接頭辞“オリゴ”または適切な特定の接頭辞 (たとえばトリ) を用いて同じ表現とすることができる。

(例) A_c -*block*- B_8

オリゴ A-*block*-オクタ B

$(A_c$ -*block*- B_k -*block*- C_3)_n

ポリ(オリゴ A-*block*-ポリ B-*block*-トリ C)

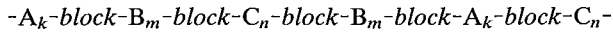
$(A_c$ -*block*- B_k)₄

テトラキス(オリゴ A-*block*-ポリ B)

上記 c はオリゴマー連鎖の重合度に対応する小さな整数である。

規則 5.4 3種類以上のモノマーからつくられ、さらにブロック自身が統計連鎖配列を示すブロックコポリマーは規則 2.1 の原理に従って命名する。

(例) 統計連鎖配列



の名称は

ポリ (ポリ A-stat-ポリ B-stat-ポリ C)

である。

規則 5.5 複数のブロックが、ブロックの一部でない接合単位 (junction units) X によって結合しているブロックコポリマーの名称では、接合単位の名称を適切な位置に挿入する。接続記号 *-block-* は省略してもよい。したがって、

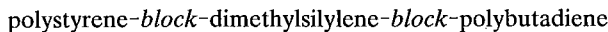


の名称は、

ポリ A-block-X-block-ポリ C または ポリ A—X—ポリ C

である。同様の表現がブロックポリマーにも適用できる。

(例) ポリスチレン-block-ジメチルシリレン-block-ポリブタジエン



または

ポリスチレン—ジメチルシリレン—ポリブタジエン

polystyrene—dimethylsilylene—polybutadiene

ポリスチレン-block-ジメチルシリレン-block-ポリスチレン

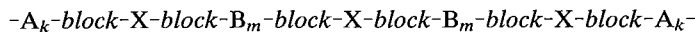
polystyrene-block-dimethylsilylene-block-polystyrene

または

ポリスチレン—ジメチルシリレン—ポリスチレン

polystyrene—dimethylsilylene—polystyrene

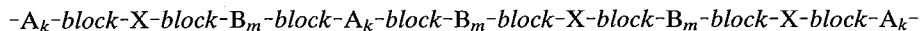
規則 5.6 ポリマー分子中で接合単位 X を通じて結ばれた A_k ブロックと B_m ブロックが



のように統計的に分布しているブロックコポリマーの名称は、

ポリ [(ポリ A-block-X)-stat-(ポリ B-block-X)]

である。 A_k ブロックと B_m ブロックと接合単位 X が



のようにすべて統計的に分布しているブロックコポリマーの名称は、

ポリ (ポリ A-stat-X-stat-ポリ B)

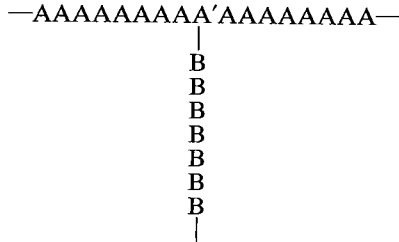
である。

6. グラフトコポリマー (Graft copolymers)

グラフトポリマーは、側鎖として主鎖に結合した1個または複数個のブロックがあり、しかもこ

これらの側鎖が主鎖とは異なる構成上または配置上の特徴をもつ分子からなるポリマーである [5]. グラフトコポリマーでは、側鎖は構成上主鎖とは異なる特徴をもつ、すなわち、側鎖に含まれる単位の少なくとも1つは、主鎖の単位を与えるモノマーと異なる種類のモノマーから得られたものである。

規則 6.1 グラフトコポリマーのもっとも簡単な場合は A_k -graft- B_m または



で表され、相当する名称は、

ポリ A -graft-ポリ B

である。はじめに名称を示すモノマー（この場合 A ）は幹（主鎖）の単位を与えるモノマーであり、次に名称を示すモノマー（ B ）は枝（側鎖）にあるものである。

（例）以下の各例は、それぞれグラフト連鎖配列、相当する名称、および特定の例の順に示してある。

1. A_k -graft- B_m

ポリ A -graft-ポリ B

ポリブタジエン-graft-ポリスチレン

polybutadiene-graft-polystyrene

（ポリスチレンがグラフトしたポリブタジエン）

2. (A_k -block- B_m)-graft- C_n

（ポリ A -block-ポリ B ）-graft-ポリ C

（ポリブタジエン-block-ポリスチレン）-graft-ポリアクリロニトリル

(polybutadiene-block-polystyrene)-graft-polyacrylonitrile

（ポリアクリロニトリルが無指定位置にグラフトしたポリブタジエン-ポリスチレンブロックコポリマー）

3. (A -stat- B)-graft- C_n

ポリ (A -stat- B)-graft-ポリ C

ポリ (ブタジエン-stat-スチレン)-graft-ポリアクリロニトリル

poly (butadiene-stat-styrene)-graft-polyacrylonitrile

（ポリアクリロニトリルが無指定位置にグラフトしたブタジエン-スチレン統計コポリマー）

4. A_k -block- (B_m -graft- C_n)

ポリ A -block- (ポリ B -graft-ポリ C) または (ポリ B -graft-ポリ C)-block-ポリ A

ポリブタジエン-block- (ポリスチレン-graft-ポリアクリロニトリル)

polybutadiene-block- (polystyrene-graft-polyacrylonitrile)

または

(ポリスチレン-*graft*-ポリアクリロニトリル)-*block*-ポリブタジエン
(polystyrene-*graft*-polyacrylonitrile)-*block*-polybutadiene

(ポリスチレンブロックにポリアクリロニトリルがグラフトしたポリスチレン-ポリブタジエンブロックコポリマー)

5. $[A_k\text{-graft-(B-co-C)]\text{-block-B}_m$

[ポリ A-*graft*-ポリ (B-co-C)]-*block*-ポリ B

または

ポリ B-*block*-[ポリ A-*graft*-ポリ (B-co-C)]

[ポリブタジエン-*graft*-ポリ (スチレン-co-アクリロニトリル)]-*block*-ポリスチレン

[polybutadiene-*graft*-poly (styrene-co-acrylonitrile)]-*block*-polystyrene

または

ポリスチレン-*block*-[ポリブタジエン-*graft*-ポリ (スチレン-co-アクリロニトリル)]

polystyrene-*block*-[polybutadiene-*graft*-poly (styrene-co-acrylonitrile)]

(モノマー単位の配列が無指定のスチレン-アクリロニトリルコポリマーがポリブタジエンブロックにグラフトしたポリブタジエン-ポリスチレンブロックコポリマー)

規則 6.2 幹に、2 種以上のグラフト鎖が結合している場合には、グラフトの名称またはその表示記号を分離するのにセミコロンを用いる。

(例) $A_k\text{-graft-(B}_m\text{;C}_n)$

ポリ A-*graft*-(ポリ B;ポリ C)

ポリブタジエン-*graft*-(ポリスチレン;ポリメタクリル酸メチル)

polybutadiene-*graft*-[polystyrene;poly (methyl methacrylate)]

(ポリスチレンおよびポリメタクリル酸メチル鎖がグラフトしたポリブタジエン)

規則 6.3 グラフト鎖の数がわかっているグラフトコポリマーは、数詞接頭辞 (モノ, ビス, トリス, 等々) を用いて命名する。

(例) $A_k\text{(-graft-B}_m)_3$

ポリ A-トリス (-*graft*-ポリ B)

ポリブタジエン-トリス (-*graft*-ポリスチレン)

polybutadiene-tris (-*graft*-polystyrene)

(ポリブタジエン幹あたり 3 本のポリスチレンがグラフトしている)

もしグラフトの正確な部位がわかればそれを指定することができる。

(例) $A_{10}\text{-block-(X-graft-B}_m)\text{-block-A}_{15}$

デカ A-*block*-(X-*graft*-ポリ B)-*block*-ペンタデカ A

デカブタジエン-*block*-(メチルシラントリイル-*graft*-ポリスチレン)-*block*-ペンタデカブタジエン

decabutadiene-*block*-(methylsilanetriyl-*graft*-polystyrene)-*block*-pentadecabutadiene

グラフトコポリマーの命名法体系は、原則として、構成上または配置上特徴の異なる鎖が中心の接合基によって結合している“星型コポリマー”にも適用できる。

(例)

1. $A_k\text{-block-[X-(graft-B}_m)_2]\text{-block-A}_k$ または $B_m\text{-block-[X-(graft-A}_k)_2]\text{-block-B}_m$

ポリ A-*block*-[X-ビス(-*graft*-ポリ B)]-*block*-ポリ A または
 ポリ B-*block*-[X-ビス(-*graft*-ポリ A)]-*block*-ポリ B

ポリスチレン-*block*-[シランテトライル-ビス(-*graft*-ポリブタジエン)]-*block*-ポリスチレン
polystyrene-block-[silanetetrayl-bis(-graft-polybutadiene)]-block-polystyrene
 または

ポリブタジエン-*block*-[シランテトライル-ビス(-*graft*-ポリスチレン)]-*block*-ポリブタジ
 エン
polybutadiene-block-[silanetetrayl-bis(-graft-polystyrene)]-block-polybutadiene

(中心の Si 原子にポリスチレン鎖 2 本, ポリブタジエン鎖 2 本が結合したもの)

2. A_k -*block*-[X-*graft*-(B_m ; C_n)]-*block*- D_p

ポリ A-*block*-[X-*graft*-(ポリ B; ポリ C)]-*block*-ポリ D

ポリスチレン-*block*-[シランテトライル-*graft*-(ポリブタジエン; ポリイソプレン)]-*block*-
 ポリ(メタクリル酸メチル)

*polystyrene-block-[silanetetrayl-graft-(polybutadiene; polyisoprene)]-block-poly(methyl
 methacrylate)*

(中心の Si 原子に, ポリブタジエン鎖, ポリイソプレン鎖, ポリスチレン鎖, ポリメタクリル酸
 メチル鎖の結合したもの)

何を優先するかの規則はないので, いくつかの他の名称が可能である。

7. 縮合重合または関連する重合法で得られるポリマー (Polymers made by

condensation polymerization or related polymerization)

コポリマーの命名法の体系は, 1 種以上のモノマーを用いた縮合重合, あるいは, もっと一般的
 にいえば, 互いに反応しうるあらゆる大きさの分子 (すなわちモノマー, オリゴマー, ポリマー)
 をモノマーとする縮合重合で得られるポリマーにも適用できる. この場合, 単独重合しうるモノ
 マーの縮合重合で得られるポリマーの場合と, 通常別々には単独重合しない相補的な成分の縮合重
 合で得られるポリマーの場合とを区別することができる.

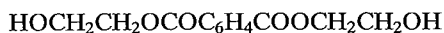
コポリマーの原料基礎方式の定義 [5] を厳密に適用すると, (通常ホモポリマーとみなされてい
 る) ポリエチレンテレフタレートあるいはポリヘキサメチレンアジパミドは, それぞれ 2 種の成分
 が重合の普通の出発物質であるから, コポリマーに含まれる. この種のポリマーが構成上規則的な
 構造をもち, 規則性ポリマーであれば, 規則性単条有機ポリマーの命名法も用いることができる
 [1]. 以上のことをたとえばテレフタル酸とエチレングリコールから得られるポリマーに適用する
 と, もしこのポリマーが事実テレフタル酸とエチレングリコールから出発し, 縮合重合で得られた
 ものであれば, その名称は原料基礎コポリマー命名法により

ポリ(エチレングリコール-*alt*-テレフタル酸)
poly[(ethylene glycol)-alt-(terephthalic acid)]

となろう. しかし, もし出発物質が部分エステル



であれば, 相当する原料基礎名は, ホモポリマーの名称であるし, 他方, 出発物質として (工業的
 に広く用いられている) ビス(2-ヒドロキシエチル)テレフタレート



が用いられれば、その名称は

ポリ[ビス(2-ヒドロキシエチル)テレフタレート]
poly[bis(2-hydroxyethyl) terephthalate]

が提唱されよう。用いた出発物質いかんにかかわらず、構造基礎名は、

ポリ(オキシエチレンオキシテレフタロイル)
poly(oxyethyleneoxyterephthaloyl)

である。ポリエチレンテレフタレートという慣用名も、文献で広く確立されているので、認めてよからう。

2つの相補的な二官能性の成分(つまりモノマー)の縮合重合において、両成分が容易に1:1で反応して潜在的モノマー(implicit monomer)、つまりその単独重合で実際の生成物を与えるはずのモノマーを与えるように見える場合、この重合で得られるすべてのポリマーについて、それが規則的で、単一の構成繰返し単位をもつものとして表現できる限り、単条の構造基礎命名法が適している。注意すべきことは、この命名法は成分のモル比が1:1で、成分が二官能の場合に限り適用できるという点である。

上記の反応系に第三成分を導入すると、下記の例のようにすでに述べた諸規則から論理的に展開できるコポリマーの命名法を用いる必要がでてくる。テレフタル酸とイソフタル酸の混合物とエチレングリコールとの反応で得られるコポリマーの名称は、

ポリ[(エチレングリコール-*alt*-テレフタル酸)-*co*-(エチレングリコール-*alt*-イソフタル酸)]
poly[(ethylene glycol)-*alt*-(terephthalic acid)]-*co*-[(ethylene glycol)-*alt*-(isophthalic acid)]

ポリ(エチレンテレフタレート-*co*-エチレンイソフタレート)
poly[(ethylene terephthalate)-*co*-(ethylene isophthalate)]

または

ポリ[(エチレングリコール)-*alt*-(テレフタル酸;イソフタル酸)]
poly[(ethylene glycol)-*alt*-(terephthalic acid; isophthalic acid)]

である。

トリメチロールプロパンの存在下で、オリゴ(アジピン酸-*alt*-1,4-ブタンジオール)とオリゴ(2,4-トリレンジイソシアナート-*co*-トリメチロールプロパン)から得られるコポリマーの名称は

ポリ[オリゴ(アジピン酸-*alt*-1,4-ブタンジオール)-*co*-オリゴ(2,4-トリレンジイソシアナート-*co*-トリメチロールプロパン)-*co*-トリメチロールプロパン]
poly[oligo[(adipic acid)-*alt*-(1,4-butanediol)]-*co*-oligo[(2,4-tolylene diisocyanate)-*co*-trimethylolpropane]-*co*-trimethylolpropane]

である。

2つの相補的官能基を分子の両端にもつ真のモノマー(たとえば6-アミノヘキサン酸)の単独の縮合重合で得られるポリマーは、定義に従って(規則的)ホモポリマーである。このタイプの2種類のモノマーが互いに反応したときの生成物はコポリマーであり、適当な方式によって命名することができる。たとえば、もし6-アミノヘキサン酸と7-アミノヘプタン酸とをモノマー単位が統計的に分布する共重縮合(copolycondensation)を行わせると、生成物の名称は、

ポリ[(6-アミノヘキサン酸)-*stat*-(7-アミノヘプタン酸)]
poly[(6-aminohexanoic acid)-*stat*-(7-aminoheptanoic acid)]

である。

8. 質量分率, モル分率, モル質量[†], 重合度に関する指定 (Specification with regard to mass fractions, mole fractions, molar masses and degrees of polymerization)

モノマー単位またはブロックの直後の下つき数字で重合度または繰返し数を表すのに対し, 質量分率, モル分率およびモル質量—ほとんどの場合平均値である—は, コポリマーの完全な名称または記号の後に対応する数字を記載して表現することもできる。列記の順序はコポリマーの名称または記号中のモノマー種の順序と同じである。未確定の数値は *a*, *b* などで示すことができる。

この方式は複雑な場合にも拡張できるが, 簡単な場合にのみ適用することが望ましい。さらに複雑な系を記述するときは, 文章中で説明すべきである。

規則 8.1 モノマー単位の質量分率, または質量百分率はコポリマーの名称の後の括弧の中に置き, その後にそれぞれ記号 “*w*” または語 “質量% (mass%)” を書く。括弧の中の列記の順序は名称の順序と同じである。

(例)

1. ポリブタジエン-*graft*-ポリスチレン (0.75 : 0.25 *w*) または
ポリブタジエン-*graft*-ポリスチレン (75 : 25 質量%)
(ポリブタジエン 75 質量% とグラフトしたポリスチレン 25 質量% を含むグラフトコポリマー)
2. ポリブタジエン-*graft*-ポリ(スチレン-*stat*-アクリロニトリル) (0.75 : *a* : *b w*) または
ポリブタジエン-*graft*-ポリ(スチレン-*stat*-アクリロニトリル) (75 : *a* : *b* 質量%)
(ポリブタジエン 75 質量% とグラフトした, 組成が不明のスチレン-アクリロニトリル統計コポリマー 25 質量% を含むグラフトコポリマー)

規則 8.2 モノマー単位のモル分率またはモル百分率はコポリマーの名称の後の括弧中に置き, その後にそれぞれ記号 “*x*” または語 “モル%” を書く。括弧の中の列記の順序は, 名称の順序と同じである。

(例)

ポリブタジエン-*graft*-ポリスチレン (0.85 : 0.15 *x*) または
ポリブタジエン-*graft*-ポリスチレン (85 : 15 モル%)
(ブタジエン単位 85 モル% とスチレン単位 15 モル% を含むグラフトコポリマー)

規則 8.3 モル質量, 相対分子質量, 重合度は, 対応する数字を示し, その後にそれぞれ, 記号 *M*, *M_r* または DP を書くことにより規則 8.1 と 8.2 の方式に含めることができる。

[†] (訳者注) モル質量でなく, 単位のない分子量を用いる方が便利である。

(例)

1. ポリブタジエン-*graft*-ポリスチレン (75:25 質量 % ; 90,000 : 30,000 M_r)
(幹として相対分子質量 90,000 のブタジエン単位 75 質量 % と相対分子質量 30,000 のグラフト鎖のスチレン単位 25 質量 % を含むグラフトコポリマー)
2. ポリブタジエン-*graft*-ポリスチレン (1700 : 290 DP)
(重合度 290 のポリスチレンがグラフトした重合度 1700 のポリブタジエン主鎖からなるグラフトコポリマー)

付 録：コポリマーのもうひとつの命名法

本勧告の主文に展開したコポリマーの命名法の体系は、いかに複雑な構造のコポリマーに対しても体系的な名称を与えるという要求に応えるように設計されている。その結果、体系的名称は場合によって望ましくないほど長いこともある。しかし、文献に現れる多くのコポリマーは比較的簡単な構造をもち、このような精緻な体系の必要がない。こうした簡単な場合のために、ここでは他のはるかに簡潔な命名法の体系を別法として示す。

基本原理

このもうひとつの命名法の体系は次の諸原理よりなる。

1. コポリマーは接頭辞“コポリ”の後に、用いるモノマーの名称（原料基礎名）を列記して表す。この接頭辞はただ1回だけ用いる。その点では規則性単条ポリマー（以下では規則性ポリマーと呼ぶ）[1] または主文中の簡単なコポリマーの命名法で“ポリ”という接頭辞がただ1回用いられるのと同様である。

(例) コポリ(スチレン/ブタジエン)
copoly(styrene/butadiene)

2. コポリマー中の構造のタイプの指定（主文中の命名法の体系における *block*, *alt* などの接続記号）は“コポリ”の前にイタリック体の接頭辞で示す。

(例) *block*-コポリ(スチレン/ブタジエン)
block-copoly(styrene/butadiene)

3. コポリマーの名称の主要部にはモノマーの名称のみが含まれる。末端単位は、主要名称の前に接頭辞 α および ω を用いて指示し、各ブロック間の接続単位は主要名称の後に（記号 μ を用いて）指示する。

(例) *block*-コポリ(スチレン/ブタジエン)- μ -ジメチルシリレン
block-copoly(styrene/butadiene)- μ -dimethylsilylene

4. コポリマー中のモノマー単位の質量分率、モル分率、モル質量、重合度は名称と分けて名称の後に括弧に入れて指示する。

5. 構造が単一の方法では分類できないようなより複雑なコポリマーに対しては、上記1.~4.で述べた原理に加えて、さらにいくつかの規約を設ける。

一般にモノマー名の列記の順序については、何を優先するかは規則は設けない。しかしブロック

あるいは周期コポリマーにおいては、モノマー名の列記の順序は、その分子中でモノマー単位が並ぶ順序に対応させる。グラフトコポリマーでは、はじめに書く名称が幹（主鎖）の名称である。

A1 簡単なコポリマーへの適用

以下に示す例では、本勧告の主文にある精緻な体系にもとづく名称を、本付録で提案した別名の後に与えてある。

規則 A1.1 コポリマーの名称は、コポリ(A/B)、コポリ(A/B/C)、等々のように接頭辞“コポリ”と、その後の括弧中に使用されるモノマーの名称を、斜線で分離して列記したものからなる。上記中 A, B, C は用いるモノマーの名称である。

(例) コポリ(スチレン/メタクリル酸メチル)	別名
copoly(styrene/methyl methacrylate)	
ポリ(スチレン-co-メタクリル酸メチル)	主文の名称
poly[styrene-co-(methyl methacrylate)]	

規則 A1.2 コポリマー中のモノマー単位の配列が明らかな場合には、以下のイタリック体の接頭辞のいずれかで指示する；*stat-*（統計）、*ran-*（ランダム）、*alt-*（交互）、*per-*（周期）、*block-*（ブロック）、*graft-*（グラフト）（主文中の‘コポリマーの分類と定義’を参照）。

(例) <i>stat-</i> コポリ(スチレン/ブタジエン)	
<i>stat-copoly</i> (styrene/butadiene)	
ポリ(スチレン- <i>stat</i> -ブタジエン)	
poly(styrene- <i>stat</i> -butadiene)	
<i>ran-</i> コポリ(エチレン/酢酸ビニル)	
<i>ran-copoly</i> (ethylene/vinyl acetate)	
ポリ(エチレン- <i>ran</i> -酢酸ビニル)	
poly[ethylene- <i>ran</i> -(vinyl acetate)]	
<i>alt-</i> コポリ(スチレン/無水マレイン酸)	
<i>alt-copoly</i> (styrene/maleic anhydride)	
ポリ(スチレン- <i>alt</i> -無水マレイン酸)	
poly[styrene- <i>alt</i> -(maleic anhydride)]	
<i>block-</i> コポリ(スチレン/ブタジエン/メタクリル酸メチル)	
<i>block-copoly</i> (styrene/butadiene/methyl methacrylate)	
ポリスチレン- <i>block</i> -ポリブタジエン- <i>block</i> -ポリメタクリル酸メチル	
polystyrene- <i>block</i> -polybutadiene- <i>block</i> -poly(methyl methacrylate)	
<i>graft-</i> コポリ(ブタジエン/スチレン)	
<i>graft-copoly</i> (butadiene/styrene)	
ポリブタジエン- <i>graft</i> -ポリスチレン	
polybutadiene- <i>graft</i> -polystyrene	

規則 A1.3 特定のモノマー単位が周期コポリマー中でまとまって現れるときには、これを“ポリキス (polykis)” 型接頭辞で示すことができる。ブロックコポリマー中のブロックの組の繰返しが一定数または数が分からなくとも何回かある場合も同様に表すことができる。

- (例) *per*-コポリ (A/B/B/B) = *per*-コポリ (A/トリス B) = *alt*-コポリ (A/トリス B)
 ポリ (A-*per*-トリス B)
block-コポリ (A/B/C/A/B/C/A/B/C) = *block*-コポリ [トリス (A/B/C)]
 トリス (ポリ A-*block*-ポリ B-*block*-ポリ C)
per-コポリ [ホルムアルデヒド/ビスエチレンオキシド]
per-copoly [formaldehyde/bis (ethylene oxide)]
 ポリ [ホルムアルデヒド-*per*-ビスエチレンオキシド]
 poly [formaldehyde-*per*-bis (ethylene oxide)]

規則 A1.4 本来、交互または周期コポリマーで、その1種類の部位が (主文の規則 4.2 で述べたコポリマー中のように) 2種以上のモノマーから得られる単位で占められるとき、このコポリマーの名称は主文の原理および本付録の諸規則にもとづいて示される。

- (例) *per*-コポリ [A/B/(C;D)]
 ポリ [A-*per*-B-*per* (C;D)]
alt-コポリ [メタクリル酸メチル/(スチレン;1-ビニルナフタレン)]
alt-copoly [methyl methacrylate/(styrene; 1-vinylnaphthalene)]
 poly [メタクリル酸メチル-*alt*-(スチレン;1-ビニルナフタレン)]
 poly [(methyl methacrylate)-*alt*-(styrene; 1-vinylnaphthalene)]

1つの幹 (A) に2種類以上の枝 (B, C など) がグラフトしたグラフトコポリマーの命名にも、同じ手法が用いられる。

- (例) *graft*-コポリ [A/(B; C)]
 ポリ A-*graft*-(ポリ B; ポリ C)
graft-コポリ [ブタジエン/(スチレン;メタクリル酸メチル)]
graft-copoly [butadiene/(styrene; methyl methacrylate)]
 ポリブタジエン-*graft*-(ポリスチレン;ポリメタクリル酸メチル)
 polybutadiene-*graft*-[polystyrene; poly (methyl methacrylate)]

規則 A1.5 末端基は接頭辞 α および ω をつけてコポリマーの主名称の前で指定し、他方、ブロックの間の接合単位は接頭辞 μ をつけて、コポリマーの主名称の後に指定する。ある1種の接合単位が2回以上構造中に現れる場合には、適切な倍数接頭辞 (ビス, トリスなど) を用いる。構造中に2種以上の接合単位が現れる場合には、それらを μ_1, μ_2 などで指定する。

- (例) α -ブチル- ω -カルボキシ-*block*-コポリ (スチレン/ブタジエン)
 α -butyl- ω -carboxy-*block*-copoly (styrene/butadiene)
 α -ブチル- ω -カルボキシ-ポリスチレン-*block*-ポリブタジエン
 α -butyl- ω -carboxy-polystyrene-*block*-polybutadiene

block-コポリ (スチレン/ブタジエン)- μ -ジメチルシリレン

block-copoly (styrene/butadiene)- μ -dimethylsilylene

ポリスチレン-*block*-ジメチルシリレン-*block*-ポリブタジエン

polystyrene-*block*-dimethylsilylene-*block*-polybutadiene

block-コポリ (スチレン/ブタジエン/スチレン)-ビス (μ -ジメチルシリレン)

block-copoly (styrene/butadiene/styrene)-bis (μ -dimethylsilylene)

ポリスチレン-*block*-ジメチルシリレン-*block*-ポリブタジエン-*block*-ジメチルシリレン-*block*-ポリスチレン

polystyrene-*block*-dimethylsilylene-*block*-polybutadiene-*block*-dimethylsilylene-*block*-polystyrene

graft-コポリ (ブタジエン/スチレン)-ポリキス (μ -メチルシラントリイル)

graft-copoly (butadiene/styrene)-polykis (μ -methylsilanetriyl)

規則 A1.6 質量分率, モル分率, モル質量, 相対分子質量, 重合度に関する指定は主文 8 節の規則の場合と同様に取り扱う。

A2 複雑なコポリマーへの適用

この命名法はある程度複雑なコポリマーへも拡張できる。二, 三のこのような場合について, 諸規則と例を以下に示す。複雑な構造に対しては一般に, 本勧告の本文中に示された命名法体系の方が望ましいことがわかるであろう。

規則 A.2 グラフトコポリマーまたはブロックコポリマーに成分としてそれ自身がコポリマーであるブロックが含まれる場合には, そのブロックは, co(B/C) と命名され, 必要があれば分類用接頭辞をつける (規則 A1.2 を参照)。

(例) *block*-コポリ [*stat*-co (スチレン/ブタジエン)/スチレン/ブタジエン]

block-copoly [*stat*-co (styrene/butadiene)/styrene/butadiene]

ポリ (スチレン-*stat*-ブタジエン)-*block*-ポリスチレン-*block*-ポリブタジエン

poly (styrene-*stat*-butadiene)-*block*-polystyrene-*block*-polybutadiene

block-コポリ [スチレン/*graft*-co (ブタジエン/アクリロニトリル)][†]

block-copoly [styrene/*graft*-co (butadiene/acrylonitrile)]

ポリスチレン-*block*- (ポリブタジエン-*graft*-ポリアクリロニトリル)

polystyrene-*block*- (polybutadiene-*graft*-polyacrylonitrile)

graft-コポリ [*stat*-co (ブタジエン/スチレン)/アクリロニトリル]

graft-copoly [*stat*-co (butadiene/styrene)/acrylonitrile]

ポリ (ブタジエン-*stat*-スチレン)-*graft*-ポリアクリロニトリル

poly (butadiene-*stat*-styrene)-*graft*-polyacrylonitrile

block-コポリ [*graft*-co [ブタジエン/*stat*-co (スチレン/アクリロニトリル)]/スチレン][†]

block-copoly [*graft*-co [butadiene/*stat*-co (styrene/acrylonitrile)]/styrene]

† (訳者注) 原著では /-*graft* および /-*stat* となっているがハイフンは不要なので省略した。

[ポリブタジエン-*graft*-ポリ(スチレン-*stat*-アクリロニトリル)]-*block*-ポリスチレン
[polybutadiene-*graft*-poly(styrene-*stat*-acrylonitrile)]-*block*-polystyrene

A3 縮合重合または関連する重合で得られるポリマーへの適用

主文の原理および本付録の諸規則が縮合重合または関連する重合により得られるポリマーへ適用できる。

別法による名称の例：

コポリ(6-アミノヘキサン酸/7-アミノヘプタン酸)

copoly(6-aminohexanoic acid/7-aminoheptanoic acid)

alt-コポリ(エチレングリコール/テレフタル酸)

alt-copoly(ethylene glycol/terephthalic acid)

alt-コポリ[エチレングリコール/(テレフタル酸；イソフタル酸)]

alt-copoly[ethylene glycol/(terephthalic acid ; isophthalic acid)]

文 献

- [1] IUPAC. 規則性単条有機ポリマーの命名法 (1975年に承認された諸規則). *Pure Appl. Chem.* **48**, 373-385 (1976). 本書第5章に掲載.
- [2] IUPAC. 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年勧告). *Pure Appl. Chem.* **57**, 149-168 (1985). 本書第6章に掲載.
- [3] IUPAC-IUB. 核酸, ポリヌクレオチドならびにそれらの構成要素の表記に用いられる略号と記号 (1970年勧告). *Pure Appl. Chem.* **40**, 277-290 (1974).
- [4] IUPAC. 高分子領域における命名法に関する報告. *J. Polym. Sci.* **8**, 257-277 (1952).
- [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). 本書第1章に掲載.
- [6] G. E. Ham. "Encyclopedia of Polymer Science and Technology", (H. F. Mark, N. G. Gaylord and N. M. Bikales 編), Wiley-Interscience, New York, **4**, 165 (1966).
- [7] H. J. Harwood and W. M. Ritchey, コポリマー中の連鎖分布の特性解析. *J. Polym. Sci., Polym. Lett. Ed.* **2**, 601 (1964).
- [8] H. J. Harwood, ジェンポリマーの構造のNMRによる特性解析. *Rubber Chem. Technol.* **55**, 769 (1982).