

高分子用語注釈 No. 18

ポリマー・ケミストリー社 ACS 部門

用語委員会

E. S. ウィルクス*

SRU: 規則の使用

本高分子用語注釈(MNN)においてはポリマーの構造準拠表示の構造繰り返し単位 (SRU)の正確な図式化と命名のプロセスが再検討されている。ケミカル・アブストラクツ・サービス(CAS)及び純粋および応用化学国際ユニオン (IUPAC)によって制定された規則によれば不正確である構造準拠の表示が出版文献に氾濫している。図式が不正確であるばかりでなく、名称が省略されたり、不正確だったり、また原料準拠の名称だったりすることがしばしばある。出版物によってはポリマーの組成を理解するためにその構造準拠に基づいた正確な表記や名称を与える必要がないのが明らかな場合もあるかもしれないが、構造準拠の正確な表記を怠り続けることによって、規則は存在しないか、或いはそれを無視しても構わないという出版物の著者間に広がり続けている確信を普及させることになるのは明白であるので危険である。規則は存在する。そしてそれを無視するのは的確な意志疎通を妨害する。規則の習得および実践を怠ることは出版物における図式表記の一貫性を低下させ出版文献の検索者に不都合を与える。ケミカル・アブストラクツ「登録ファイル」のように、きちんと系統だったデータベースの検索者で規則を知らない者は検索する構造を捜せないと次のような結論に達する。(1) 捜せなかったのでデータベースに存在しない。(2) データベースに存在するとは思うがさがせない。その理由がわからないので検索をあきらめる。(3) 問題点はわかるが、どのように解決してよいかわからない。

CAS「登録ファイル」を検索する人たちは規則に精通しなければならない。スクリーン上のSRUの画像は多くの場合左右逆に見えるため、不幸にも正確な配向についての誤解を招く恐れがある。SRUの名称に関する規則はスクリーン上の外観とは関連性がない。

ポリマーに関する文献の出版者はポリマー界に対する責任として、規則に精通しそれを出版物の構造表記に適用する義務がある。本概説書は通常見られるリニアポリマーに対する助言を提供するものであってその主題を完全に網羅するものではない。

CAS および IUPAC は SRU の **識別**、**配向**、及び **命名**に関する一定の規則に一致同意し、CASは *Index Guide*^{1a} (インデックス・ガイド)としてそれらを出版した。“Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers”² (標準単連有機ポリマー用語)中に出版された IUPAC の勧告は1968年のACSの最初の勧告³に基づく。CASはポリマーをポリ(SRU)と命名、一方IUPACは“ポリ(構造的繰り返しユニット)”或いはポリ(CRU)と命名する。これら2つは実質的には同意語である。本MNNではSRUを使用する。CASとIUPACの命名原則は基本的には同じであるが、2つのシステムによって命名されたSRUは例にあげたように、時として違う場合がある。ここではポリマーの構造準拠表記についてのみ論じている。

プロセスのすべてのステップを次に示す。

- (1) 繰り返しユニットの**識別**。このステップは少なくとも2回以上繰り返すユニットを含む連鎖の、大きい方の部分を図式化することによってより簡単に成される。
- (2) 繰り返しユニットの**配向**。これは一番難しいステップである。単純なSRUについての詳細な説明を下に示す。すべての規則の完全網羅は本MNNの目的の範疇にない。
- (3) 完全繰り返しユニットの**命名**。完全SRUは有機化学通例の用語に準じて二価有機グループとして命名される。このステップは任意であるが、出版物著者や検索者にとって有効である。

これら3つのステップの詳細を記す。

- (1) **識別**：少なくとも2つ以上の完全ユニットを含むだけの長さを持つ連鎖の部分を図式化する。まず、連鎖の2つのサブユニット(多重価基とも呼ばれる)間の単連鎖ボンドに左角かっこをつける。左から右に連鎖をたどり、同様のサブユニットがあったらその左側に右角かっこをつける。右角かっこの外側に sub-*n* と記す。これによりSRUを**識別**する。

例 1.1: 連鎖が7つの違うサブユニットを持つものと仮定する。これらを任意的に P Q R S T U V と呼ぶ。そしてそれらは次の順に結合しているものとする。..P-R-T-V-U-S-Q-P-R-T-V-U-S-Q..

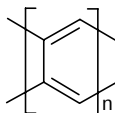
(a) 連続体の左端近くに、例えば T と V の単連鎖結合に左角かっこをつける。これによって ..P-R-T-[-V-U-S-Q-P-R-T-V-U-S-Q-].. となる。

(b) 次の V まで左から右に連鎖をたどり、単連鎖結合の左側に右角かっこをつける。これによって ..P-R-T-[-V-U-S-Q-P-R-T-]-V-U-S-Q-.. となる。

(c) 右角かっこの外側に sub-*n* と記す。これにより SRU を [-V-U-S-Q-P-R-T-]*n*- と識別する。

注: (1) 角かっこ付けは多重連鎖結合についておこなう前に単連鎖結合についておこなう。(下記規則 F 参照) (2) 連鎖に単、非環式(非円環)結合が存在しない場合には、ポリマーは梯子タイプである(例 1.2 参照)。それらの配向は複雑な規則を必要とし、それらは本 MNN の目的範疇にない。^{1,4}

Example 1.2:



(2) **配向**: SRU を正しく方向づけるには表記し直す必要がある場合もある。正しく配向された SRU はシニア・サブユニットが一番左に配置され、残りのサブユニットは下記の手順に記された通り左から右にたどる。上記ステップで識別された SRU を配向するため、6つの重要な規則(下記 A-F)が必要である。⁵

- **規則 A**: サブユニットのタイプ別シニオリティ(上級度)の順番は次の通りである。(a) 複素環式円環 (b) 非環式異種原子 (c) 炭素環式円環 (d) 炭素原子のみを含む連鎖。本 MNN では“>”は左側が右側よりシニアである(上級である)ことを意味する。

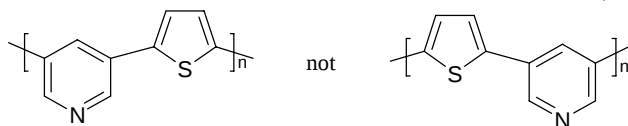
表 1: 規則 A を説明するための例

例. No.	例 ^a	使用された規則
2A1	2,5-チオフェンジイルオキシ(酸素-2,5-チオフェンジイルではない)	複素環式円環 > 非環式異種原子
2A2	酸素- <i>p</i> -フェニレン(<i>p</i> -フェニレンオキシではない)	非環式異種原子 > 炭素環式円環
2A3	<i>p</i> -フェニレンメチレン(メチレン- <i>p</i> -フェニレンではない)	炭素環式円環 > 炭素連鎖
2A4	酸素メチレン(メチレンオキシではない)	非環式異種原子 > 炭素連鎖

^a 二置換基ベンゼン派生物質には小文字のイタリック体 *p* を数字ロカント(位置表示) 1、4 の代わりに使用することもできるが、数字の使用が好ましい。⁶

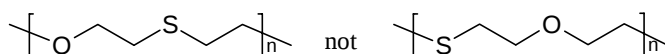
- 1つ以上の複素環式円環タイプを含む連鎖には、規則がもっと存在する。^{1b} それらはここに示すには複雑すぎるが、シニオリティ決定のため例を1つだけ挙げる。

例 2A5: 3,5-ピリジンジイル > 2,5-チオフェンジイル(窒素複素循環 > 非窒素複素循環)。それゆえ



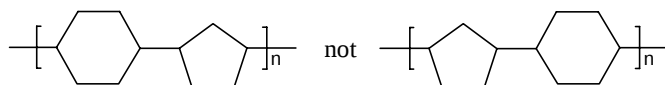
- 異種原子を含む連鎖でのシニオリティは次の通りである。O, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Hg。

例 2A6: -O-C-C-S-C-C- であって -S-C-C-O-C-C- ではない。なぜなら O > S。それゆえ



- 1つ以上の炭素環式円環タイプを含む連鎖ではもっと規則が存在する。^{1b} それらはここで示すには複雑すぎるが、シニオリティ決定のため例を1つだけ挙げる。

例 2A7: 1,4-シクロヘキサンジイル > 1,3-シクロペンタンジイル(大きな円環 > 小さな円環)。それゆえ



- **規則 B:** 規則 A によって決定されたシニア・サブユニット（一番優先される多重価基）から最短経路（原子の数が最小）を通り、次に進む。(a) SRU 中に同じサブユニットが存在する場合にはそのサブユニット (b) そして第二優先サブユニット、第三というように進む。^{1a} この規則はこうにしてシニア・サブユニット決定後、連鎖をどの方向に読み進めるかを示す。表 2 に例を示す。

表 2: 規則 B を説明するための例

例 no.	例	使用規則
2B1	-O-C-O-C-C- (-O-C-C-O-C- ではない)	B(a): 同じサブユニットまでの最短経路
2B2	-O-C-S-C-C- (-O-C-C-S-C- ではない)	B(b): シニア・サブユニットから第二優先サブユニットまで

規則 B の応用によって 1 つ以上の経路が可能な場合、一番よく置換が行われる経路をとる。ナイロン 6 6 はこのいい例である。(表 3 参照)。

表 3: “同等経路距離” 問題の解決

例 no.	例	使用規則
2B3	-NH-CO-(CH ₂) ₄ -CO-NH-(CH ₂) ₆ - (-NH-(CH ₂) ₆ -NH-CO-(CH ₂) ₄ -CO-ではない -CO-(CH ₂) ₄ -CO-NH-(CH ₂) ₆ -NH-ではない)	N-から-N の経路距離はアジポイルを通ってもヘキサメチレンを通っても同じである。その場合、より置換度の高い経路つまりアジポイル経路が優先される。

- **規則 C:** サブユニット中、原子がどんな配置にあっても、不飽和は飽和よりシニアとなる。^{1a}

表 4: 規則 C を説明するための例

例 no.	例
2C1	-CF=CF-CH=CH- > -CF=CF-CH ₂ -CH ₂ - > -CHF-CHF-CH ₂ -CH ₂ -
2C2	1,4-フェニリン > 2,5-シクロヘキサジエン-1,4-ジイル > 2-シクロヘキセン-1,4-ジイル > シクロヘキサン-1,4-ジイル
2C3	2,5-フランジイル > 2,5-ジヒドロ-2,5-フランジイル > テトラヒドロ-2,5-フランジイル

- **規則 D:** 置換基が存在する場合には、SRU の親基サブユニット (基) は次の原則に沿って選択される。(a) 最大数 (b) 最小ロカント、および (c) 置換基のアルファベット順^{1a}

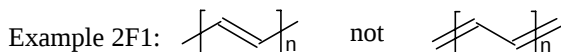
表 5: 規則 D を説明するための例

例 no.	例	使用された置換基規則
2D1	2,5-ジクロロ- <i>p</i> -フェニレン > 2-ブロモ- <i>p</i> -フェニレン	D(a): 最大数
2D2	2,5-ジメチル- <i>p</i> -フェニレン > 2,6-ジクロロ- <i>p</i> -フェニレン	D(b): 最小ロカント
2D3	2-ブロモ- <i>p</i> -フェニレン > 2-クロロ- <i>p</i> -フェニレン	D(c): アルファベット順

- **規則 E:** SRU 規則^{1a} に違反せず、選択の余地がある場合には、炭素連鎖中の多重結合は可能最小ロカントをとる。

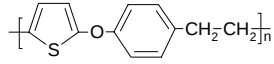
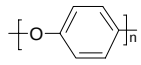
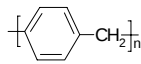
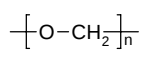
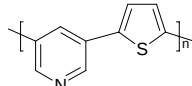
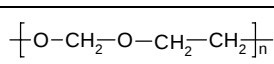
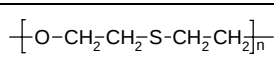
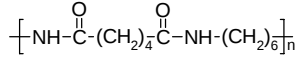
規則 E を説明する例: (1) いわゆる“1,4”モードの 1,3-ブタジエンの重合によって得られたポリ(1,3-ブタジエン)は出版物において -(CH₂-CH=CH-CH₂)_n- と誤表記される場合が多い。それは -(CH=CH-CH₂-CH₂)_n- と表記されるべきである。つまり二重結合は可能最小ロカントが付与されなくてはならない。そしてその CAS SRU 名称はポリ(1-ブテン-1,4-ジイル)である。(2) ポリイソプレンとも呼ばれるポリ(2-メチル-1,3-ブタジエン)は -[C(CH₃)=CH-CH₂-CH₂]_n- のように表記されるべきである。(3) 同様に -(O-CH₂-CH=CH-CH₂-CH₂-CH₂-)_n- の方が -(O-CH₂-CH₂-CH₂-CH=CH-CH₂-)_n- より好ましい。(O が筆頭原子で、二重結合は最小ロカントをとる)

- **規則 F:** SRU を定義する際、単連鎖結合をカッコでくくれる場合には多重連鎖結合には決してカッコを使用しない。(CAS はこれを規則としてはあげていないが、例^{1a}としてあげている)。



- (1) **命名:** 配向された SRU 中左から右に順にサブユニットに名称をつける。左から右に順にその名を書く。それらを丸カッコまたは角カッコでくくる。サブユニット全体の前に“ポリ”と書く。CAS と IUPAC の用語は多少違うので上記表 1、2、3、にあげた例の CAS および IUPAC の名称を表 6 に対比させる。

表 6: ポリマーの CAS 9CI^a および IUPAC 名称の対比

例 No.	構造	CAS ポリマー名称 ^a	IUPAC ポリマー名称
2A1		ポリ(2-5-チオフェンジイルオキシ-1,4-フェニレン-1,2-エタンジイル)	ポリ(チオフェン-2,5-ジイルオキシ-p-フェニレンエチレン)
2A2		ポリ(オキシ-1,4-フェニレン)	ポリ(オキシ-p-フェニレン)
2A3		ポリ(1,4-フェニレンメチレン)	ポリ(p-フェニレンメチレン)
2A4		ポリ(オキシメチレン)	ポリ(オキシメチレン)
2A5		ポリ(3,5-ピリジンジイル-2,5-チオフェンジイル)	ポリ(ピリジン-3,5-ジイルチオフェン-2,5-ジイル)
2B1		ポリ(オキシメチレンオキシ-1,2-エタンジイル)	ポリ(オキシメチレンオキシエチレン) ^b
2B2		ポリ(オキシ-1,2-エタンジイルチオ-1,2-エタンジイル)	ポリ(オキシエチレンチオエチレン) ^b
2B3		ポリ[イミノ(1,6-ジオキソ-1,6-ヘキサンジイル)イミノ-1,6-ヘキサンジイル] ^b	ポリ(イミノアジポイルヘキサ-1,6-ジイル)

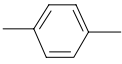
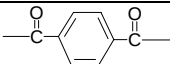
^a 本 MNN に使用されている CAS 用語は the Ninth Collective Index period (インデックス第 9 収集期) (1972) の始めに紹介されたいわゆる“9CI 用語”である。これを採用した理由は第 9 収集インデックス・ガイドおよび学会誌論文にに記載されている。⁷

^b 等号, “=” は名称が次の行に渡るとき、その間にハイフンもスペースもないことを示す。

手順のうちこの部分はサブユニットの名称の知識を要するので、名称に精通していない人にはそれらのリストが役立つが、上記にも記したようにこれは導入書であり完全なコースではないのでそれは不可能である。参考のため表 7 に少し例をあげる。CAS は長いリストを出版したが、それでも全部は網羅していない。^{1c} それらの多くは SRU 用語の中でサブユニットの名称として使用可能である。表 7 において重要な点を 2 つあげる。(1) CAS と IUPAC の二価基の名称は同じ場合もあるし同じでない場合もある。(1-11 行を比較); (2) CAS は 2 つ以上のサブユニットを包含するモイエティ (半分) の俗名の使用を停止したが、⁸ IUPAC はしていない。(12-14 行を比較)。

表 7: 頻繁に使われる二価基の名称 - CAS 9CI と IUPAC の比較

例 No.	構造	CAS 9CI 名称	IUPAC 名称
1	-O-	オキシ	オキシ
2	-S-	チオ	チオ
3	-NH-	イミノ	イミノ
4	-N=	ニトリロ	ニトリロ
5	-CH ₂ -	メチレン	メチレン
6	-CH=	メチリジン	メチリジン
7	-CH ₂ -CH ₂ -	1,2-エタンジイル	エチレン
8	-CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	1,3-プロパンジイル	プロパン-1,3-ジイル

9	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$	1,4-ブタンジイル	ブタン-1,4-ジイル
10	$-\text{CH}=\text{CH}-$	1,2-エテンジイル	ビニレン
11		1,4-フェニレン ^a	p-フェニレン ^a
12	$-\text{C}(=\text{O})-(\text{CH}_2)_4-\text{C}(=\text{O})-$	(1,6-ジオキソ-1,6-ヘキサンジイル) ^b	アジポイル ^d
13		カルボニル-1,4-フェニレンカルボニル ^c	テレフタロイル ^{c,d}
14	$-\text{NH}-\text{C}(=\text{O})-\text{NH}-$	イミノカルボニルイミノ ⁸	ウレイレン ^d

^a このシリーズの他の2つは 1,2-フェニレン (= o-フェニレン) と 1,3-フェニレン (= m-フェニレン) である。

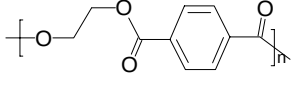
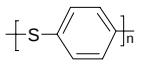
^b このシリーズの他の名称は推測が可能である。例 (1,2-ジオキソ-1,2-エタンジイル) = オキサリル、(1,3-ジオキソ-1,3-プロパンジイル) = グルタル他。置換基を含むこのような化合物 (つまり “複合体”) 表記はかっこでくくられなければならない。

^c このシリーズの他の2つは カルボニル-1,2-フェニレンカルボニル (= フタロイル) と カルボニル-1,3-フェニレンカルボニル (= イソフタロイル) である。

^d アジポイル、テレフタロイル、ウレイレンなどの IUPAC 名称は配向規則に違反しなければ認められる。

市場で入手可能なポリマーの正確な SRU 表記および IUPAC 名称を示すため、表 8 に例をあげる。CAS 名称は適用する場合のみ示してある。CAS の方針はアセチレン族、アクリル族、メタクリル族、エチレン族、およびビニールポリマーには原料準拠の表記をし、命名もそれに従うということである。しかるにポリ(ビニールアルコール) (8 行) の CAS 名称は エテノール、ホモポリマーであり、CAS 表記は $(\text{CH}_2=\text{CH}-\text{OH})_x$ である。原料準拠であり、構造準拠の表記ではない。

表 8 市場で入手可能なポリマーの例 (表 6 の例 2B3 も参照)

No.	SRU	俗名: CAS ポリマー名称 ^a	典型的 IUPAC ポリマー名称
1	$[\text{CH}_2]_n$	ポリエチレン SRU として構成または命名されていない	ポリ(メチレン)
2	$[\text{CH}(\text{Me})-\text{CH}_2]_n$	ポリプロピレン SRU として構成または命名されていない	ポリ(1-メチルエチレン)
3	$[\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2]_n$	ポリ(オキシ-1,2-エタンジイル)	ポリ(オキシエチレン)
4	$[\text{O}-(\text{CH}_2)_4]_n$	ポリ(オキシ-1,4-ブタンジイル)	ポリ(オキシブタン-1,4-ジイル)
5		ポリ(エチレン テレフタル塩酸) (PET); ポリ(オキシ-1,2-エタンジイルオキシカルボニル-1,4-フェニレンカルボニル) ^b	ポリ(オキシエチレンオキシテレフタロイル)
6	$[\text{NH}-\text{C}(=\text{O})-(\text{CH}_2)_5]_n$	ナイロン-6; ポリ[イミノ(1-オキソ-1,6-ヘキサンジイル)]	ポリ[イミノ(1-オキソヘキサン-1,6-ジイル)]
7		RYTON® PPS; ^c ポリ(フェニレン硫化物); ポリ(チオ-1,4-フェニレン)	ポリ(チオ-p-フェニレン)

8		Elvanol®; ^c ポリ(ビニールアルコール) SRU として構成または命名されていない	ポリ(1-ヒドロキシエチレン)
9		Kevlar®; ^c ポリ(イミノ-1,4-フェニレンイミノカルボニル-1,4-フェニレンカルボニル)	ポリ(イミノ- <i>p</i> -フェニレンイミノテレフタロイル)
10		Kapton®; ^c ポリ[(5,7-ジヒドロ-1,3,5,7-テトラオキソベンゾ[1,2- <i>c</i> :4,5- <i>c'</i>]ジピロール-2,6(1 <i>H</i> ,3 <i>H</i>)-ジイル)-1,4-フェニレンオキシ-1,4-フェニレン]	ポリ[(5,7-ジヒドロ-1,3,5,7-テトラオキソベンゾ[1,2- <i>c</i> :4,5- <i>c'</i>]ジピロール-2,6(1 <i>H</i> ,3 <i>H</i>)-ジイル)- <i>p</i> -フェニレンオキシ- <i>p</i> -フェニレン]

^a「登録ファイル」中、CAS はしばしば 1- および 2-構成要素縮合ポリマーを原料準拠と構造準拠表記両方で索引をつけている。それら 2 つの記録は通常相互参照されていない。(例外については注 b 参照)。かくして、9 行目のポリアミドは 2 つの表記 (原料準拠および構造準拠) をもち、各々独自の CAS 登録番号 (RN) をもつ。照合事項を完全に検索するには **両方** の RN を検索する必要がある。

^bこのポリマーは特殊なケースである。SRU の RN である 25038-59-9 が **優先登録番号 (PR)** であるが、「登録ファイル」は代替登録 (AR) においてその他 3 つの RN をあげ、多数の RN (DR) は削除されている。ラインナンバーを作るための「登録ファイル」における PR の検索、そして CAPlus ファイルにおいてそのラインナンバーを検索することによって PR 記録、AR 記録、そしてすべての DR 記録における参照事項のすべてを入手することができる。PR だけを、または PR および 3 つの AR を検索しただけではすべての参照事項を入手したことにはならない。

^c登録商標: フィリップス・石油会社 (RYTON® PPS)、デュポン (Elvanol®, Kevlar®, Kapton®)。

SRU の末端基がわかっている場合には、ギリシャ文字 “α-”、“ω-” と共に適切な基名称で表わされる。 インデックス・ネーム と呼ばれる CAS のポリマー優先名称では、ポリマー名のあとに末端基の表記が付加される。構造が上記規則によって配列された時、α-末端基は SRU の左側に位置され、アルファベット順のいかに関わらず、最初に配置される。^{1a} その例を表 9 に示す。

表 9: 末端基をもつ SRU の例

例 No.	SRU	CAS ポリマー名 ^a	IUPAC ポリマー名
1	H-(O-CH ₂ -CH ₂) _n -OH	α-ヒドロ-ω-ヒドロキシポリ(オキシ-1,2-エタンジイル)	α-ヒドロ-ω-ヒドロキシポリ(オキシエチレン)
2	Cl-(CH ₂) _n -CCl ₃	α-クロロ-ω-(トリクロロメチル)ポリ(メチレン)	α-クロロ-ω-(トリクロロメチル)ポリ(メチレン)
3	Cl ₃ C-(CF ₂ -CH ₂) _n -Cl	α-(トリクロロメチル)-ω-クロロポリ(1,1-ジフルオロ-1,2-エタンジイル)	α-(トリクロロメチル)-ω-クロロポリ(1,1-ジフルオロエチレン)

^aIUPAC 名との比較を簡単にするため、ここでは CAS の反転していない名称を使用している。CAS ポリマー インデックス・ネーム は大体反転している。例: ポリ(オキシ-1,2-エタンジイル)、α-ヒドロ-ω-ヒドロキシ-

文献

- CAS : インデックス・ガイド、付録 IV (© 1998)。Chemical Abstracts Service(ケミカル・アブストラクツ・サービス)、2540 Olentangy River Road, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210 (オハイオ州コロンバス、私書箱 3012、オレンタンジー・リバー・ロード 2540 番、郵便番号 43210) (a) セクション 222-CAS ポリマーのインデックスの規則の記述。(b) セクション 138 – リング・シニオリティに関する記述。(c) セクション 294 – 置換基接頭記号のリスト。

2. IUPAC. “Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers” (標準単連有機ポリマー用語) *Pure Appl. Chem.* **1976**, *48*, 373-385. “Compendium of Macromolecular Nomenclature (高分子用語要約)” (紫色の本)の第5章として再版。 Blackwell Scientific Publications (ブラックウェル科学出版)、オックスフォード、1991。
3. ACS. “A Structure-Based Nomenclature for Linear Polymers (リニアポリマーの構造準拠による用語)”。 *高分子* **1968**, *1*, 193-198.
4. IUPAC. “Nomenclature of Regular Double-Strand (Ladder and Spiro) Organic Polymers (標準二連(梯子およびスピロ)有機ポリマーのための用語)”。 *Pure Appl. Chem.* **1993**, *65*, 1561-1580.
5. これらの規則は本 MNN における論議の明白化のためにだけ記してある。CAS または IUPAC には記されていない。
6. Panico, R.; Powell, W. H.; Richer, J.-C. “A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (有機化合物の IUPAC 用語への手引き) (勧告 — 1993)”。 Blackwell Scientific Publications (ブラックウェル科学出版)、オックスフォード 1993 [ISBN 0-63203-488-2] セクション R-0.1.6.1 参照。
7. Donaldson, N.; Powell, W. H.; Rowlett, R. J.; White, R. W.; Yorka, K. V. “Chemical Abstracts Index Names for Chemical Substances in the Ninth Collective Period (ケミカル・アブストラクト第9収集期化学物質インデックス・ネーム) (1972-1976)”。 *J. Chem. Doc.* **1974**, *14*, 3-15.
8. セクション 294 (ref. 1c 参照) の化合物あるいは複合体 “は SRU サブユニットの承継というよりは置換用語での基を2倍にする意図である。例えば -NHCONH-モイエティは(カルボニルジイミノ)と命名される。これは(カルボニルジイミノ)二酢酸などに使われる。この名称は SRU のサブユニット -NH-C(=O)-NH- シーケンスの命名とは関連がない。セクション 294 からの名称には注意を要する。

* 郵送先: CR&DD, Barley Mill Plaza P-14/1288, E. I. du Pont de Nemours and Co. (Inc.), P. O. Box 80014, Wilmington, DE 19880-0014 (デラウェア州ウィルミントン私書箱 80014, E.I.デュポン・ドウ・ヌムール、バーレー・ミル・プラザP-14/1288, CR&DD、郵便番号 19880-0014
 米国ケミカル・ソサエティ、ポリマー・リプリンツの許可を得て再版。
 出版: *Polym. Prepr.* **2000**, *41*(1), 6a-11a; *Macromol. Chem. Phys.* **2000**, *201*(17), 2615-2620.

脚注 (出版物の一部ではない)

[1]2000 年 9 月: 次の CAS 原則により二重結合は三重結合より **シニア**である。

CAS Name Selection Manual (名称選択マニュアル)、page I-A-124 (古い版ではページ A-195, セクション A-134)。”下記の順に最小ロカントを与える。“という文章

- 1) 有機交替 ("a")接頭記号によって表示された異種原子
- 2) いかなる多重連結
- 3) 二重連結

これにより、二重連結は三重連結よりシニアである。かくして、1-ブテン-3-インは3-ブテン-1-インより優先される。 $[-O-CH=CH-C\equiv C-]_n$ のような SRU は **正しいが** $[-O-C\equiv C-CH=CH-]_n$ は **正しくない**。

[2] 2001 年 5 月: Todd Hoytink の CAS:ポリ(1-メチル-2-ブテン-1,4-ジイル)ではなくポリ(3-メチル-1-ブテン-1,4-ジイル)。使われた原則:主要部関係は置換基関係より**シニア**である。つまり、SRU で最小ロカントを二重連結に与えることは置換基に最小ロカントを与えることに**優先**する。