

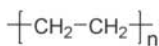
알기쉬운 고분자 명명법

제1부 고분자의 구조중심 명명법

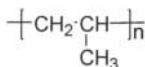
도춘호 번역 | 순천대 학교 신소재 응용공학부, 대한화학회 화학술 어위원장

머리말

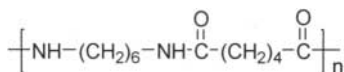
고분자의 구조가 간단한 경우 또는 그 이름이 잘 알려져 있는 고분자의 경우에는 그 이름이나 구조가 자명하고 또 익숙하지만, 조금 복잡한 구조를 가지면 명확하지 않게 된다. 폴리에틸렌, 폴리프로필렌, 나일론 66의 경우를 보자. 폴리에틸렌과 폴리프로필렌의 구조는 각각 1과 2처럼 쓰고 있고, 나일론 66의 경우 3 또는 4의 식을 대부분 사용하고 있다.



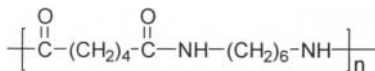
1



2

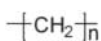


3

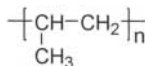


4

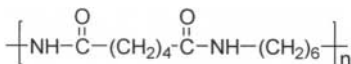
그러나, IUPAC 명명법에 따르면 이들 고분자들은 각각 5-7로 표기된다.



5



6



7

이와 같이, IUPAC 명명법에 따른 고분자의 표기법은 우리의 상식과 다를 때가 많고, 여기에 붙여지는 이름도 따라서 다르다. 그러므로, 고분자를 제대로 화학식으로 표기하고 이름을 붙이려면, 우리는 IUPAC 명명법을 제대로 익혀야 한다.

고분자의 이름을 다른 화합물들의 이름과 마찬가지로 IUPAC 규칙에 따라서 고분자의 구조를 표기하고 이름붙여야 한다는 당위성은 이해되지만, 실제로 IUPAC 규칙에 따라서 고분자의 구조식을 정확하게 표기하고 이 구조에 맞는 이름을 붙이는 일은 고분자를 연구하고 또 이것을 발표하고 출판물로 발행하려는 많은 사람들에게 걱정거리이다. 그리고 어떤 고분자에 대해서 문헌 검색하려고 할 때에도 정확한 고분자의 이름이 필요하게 된다. 이름을 정확하게 넣지 않으면, 검색 결과 원하는 자료를 얻지 못하게 되고, 남이 이미 발표한 내용을 다시 연구한다고 나서거나, 발표를 하거나 특허를 신청하거나하는 잘못을 범하게 된다. 고분자에 이름을 붙이는 방법은 일반적인 고분자 화학 교재들에도 실려 있고, IUPAC 권고안들은 계속 발행되고 있다. 그러나 교재들의 내용은 너무 초보적이고, 고분자명명법에 관한 IUPAC 권고안들은 상당히 분량이 많고 또 복잡하다.

고분자에 이름붙이는 방법은 고분자 구조에 바탕을 둔 구조중심 명명법(structure-based nomenclature)과 그 고분자를 만든 원료가 무엇인가에 따라서 이름

을 붙이는 **원료중심 명명법**(source-based nomenclature)이 있다. 최근에 발행된 두편의 글은 각각 구조중심 명명법과 원료중심 명명법을 알기 쉽게 풀어쓴 내용이라 번역하여 소개하고자 한다. 단순한 번역이 아니라, 대한화학회 화학술어위원회에서 정한 규약에 따라서 우리말로 옮긴 것이므로 이것은 또한 대한화학회 화학술어위원회의 고분자 명명법 안이 된다.

구조중심 명명법에 관한 글은 E. S. Wilks 가 쓴 것인데 (E. S. Wilks, "Macromolecular Nomenclature Note No. 18", *Polym. Prepr.* 2000, 41(1), 6a-11a.), 대한화학회 학술발표회와 한국고분자학회 학술발표회에서도 소개되었다 (i). 도춘호, "고분자 구조에 기초한 고분자 명명법," 대한화학회, 제87회 학술발표회 (2001) : F24D1구 ; (ii). 도춘호, "고분자의 이름을 어떻게 붙이는가? / 반복 단위 구성과 구조중심의 고분자 명명법," 한국고분자학회, 연구논문초록집, Vol. 25, No. 2 (2000) : 1P1-7). 원료중심 명명법에 관한 글은 E. Marechal 과 E. S. Wilks 가 쓴 글이다 (E. Marechal and E. S. Wilks, "Generic Source-Based Nomenclature for Polymers/ IUPAC Recommendations 2001," *Pure Appl. Chem.*, 2001, 73(9), 1511-1519). 이 두편의 번역은 저자들의 동의를 받았다.

번역을 하면서 고분자 이름의 한글화는 대한화학회에서 제정한 유기화합물 명명법의 일반적 원칙에 따랐다. 그 중 중요한 것 몇가지를 쓰면, (1) IUPAC 명명법의 띄어쓰기를 따르고, (2) 작용기를 나타내기 위해 연음을 피하고 (3) 이전에 사용하던 알칸(alkanes)을 알케인으로 표기하였다. 여러 기호들은 그대로 사용하였다. 몇몇 기본적인 술어, 소단위의 이름과 약어에는 이해를 돕기 위해 괄호속에 영어를 적어두었다.

여기서 고분자 명명법을 2부로 나누고, 제1부에서는 고분자의 구조중심 명명법을 다루고 제2부에서는 고분자의 원료중심 명명법을 다룬다. 이번 호에는 제1부를 다루고 제2부는 다음 호에 실는다.

제1부

고분자의 구조중심 명명법⁹

여기에서 우리는 한 고분자의 구조중심으로 표기된 구조 반복 단위 (constitutional repeating unit, CRU)를 어떻게 바르게 그리고 이름붙이는가 하는 과정을 개관하고자 한다. 화학초록서비스 (Chemical Abstracts Service, CAS)와 국제순수응용화학연합회 (IUPAC)에서 정한 규칙들에 따르면, 발표된 문헌들에는 부정확한 구조중심 표기가 아주 많이 있다. 화학식으로 표기된 것이 잘못되었을 뿐만 아니라, 빠뜨렸거나, 부정확하거나, 또는 원료중심으로 이름붙인 것이 흔하다.

출판물에서, 어느 한 고분자의 정확한 구조의 표기와 이름을 붙이는 것은 이것의 조성을 이해하기 위해서는 불필요하다고 인정할지 모르지만, 구조를 바탕으로 하는 표현을 정확하게 그리는 것을 계속해서 실패하는 것은 출판물의 저자들 사이에 출판물 규칙이 없거나 또는 이것들을 무시하는 것이 허용된다는 믿음을 널리 확실하게 유포시키기 때문에 위험하다. 규칙들이 존재한다; 이 규칙들을 무시하는 것은 적절한 의사전달을 방해하는 것이 된다.

규칙들을 공부하고 지키는 것에 실패하면 출판물에서 그림으로 표현되는 것들 사이의 일관성이 줄어들고 발표된 문헌을 찾는 사람들을 혼란시키는 결과를 초래한다. 잘 정리된 기초자료들에서, 예컨대 화학초록집의 등록 파일 (Registry File), 사람들은 찾고자하는 구조를 찾을 수 없기 때문에 규칙들을 알지 못하는 사람들이 찾으면 당황하게되고, 그들은 (1) 찾을 수 없기 때문에 기초자료 (batabase)속에 없다거나 (2) 기초자료 속에 있을지 모르겠다고 의심하지만, 찾을 수 없고, 그 이유를 모르고 찾기를 포기하거나 (3) 문제가 무엇인지 알지만 그것을 해결하는 기술을 모른다고 결론을 내린다.

CAS 등록 파일 (Registry File)을 찾는 사람들은 스스로 이 규칙들을 배워야한다. 스크린에 나타나는 많은 CRU의 모양은 옆으로 뒤집어져있는데, 유감스럽게도 정확한 배열에 대해 오해를 일으키게 하는데 기여한다; CRU 명명법 규칙들은 스크린에 나타나는 모양과는 관련이 없다.

고분자 관련 논문들을 발표하는 사람들이 이 규칙들에 스스로 익숙하게 되고 발표된 구조 표기들에 이 규칙들을 적용하는 것은 고분자 사회의 덕택이다. 이 서론은 일반적으로 만나는 선형 고분자에 대한 지침을 주려한다; 이 주제에 관한 완전한 강의를 목적으로 하는 것은 아니다.

CAS와 IUPAC은 반복단위의 **확인, 배열과 이름짓는 방법**에 관한 일련의 규칙들에 동의했다. CAS는 이 규칙들을 Index Guide^{1a}에 발행하였다. “정규 단일 사슬 유기 고분자의 명명법 (Nomenclature of regular Single-Strand Organic Polymers)”²로 발행된 IUPAC 권고안들은 1968년부터 시작한 ACS 권고안들에 근거를 두었다. CAS는 고분자를 폴리(구조 반복 단위)[poly(structural repeating unit), poly(SRU)]로 이름 붙였는데, IUPAC은 폴리(구조 반복 단위)[poly(constitutional repeating unit)] 또는 폴리(CRU)로 이름붙였다. 여기서는 CRU를 사용한다. CAS와 IUPAC 명명법 원칙들은 근본적으로 동일하지만, CRU의 이름은 가끔 다른데, 그 보기들이 주어졌다. 구조중심 표기만 여기서 다룬다.

고분자의 구조중심 명명법의 전체 과정은 다음 단계와 같다:

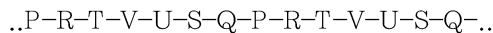
- (1) 반복 단위의 **확인**: 적어도 두 반복단위를 포함하는 사슬의 큰 부분을 그리는 것으로 쉽게 할 수 있다.
- (2) 반복 단위의 **배열**: 이것이 가장 어려운 단계이고, 간단한 반복단위 몇가지에 대한 정확한 지침이 아래에 주어졌다. 모든 규칙의 완벽한 적용은 여기서는 그 범위가 아니다.
- (3) 온전한 반복단위의 **이름짓기**: 온전한 반복단위

는 이가 유기 그룹(bivalent organic group)처럼 유기화학의 일상적인 명명법에 따라서 이름짓는다. 이 단계는 자유롭지만, 이것은 출판물을 쓰거나 찾는 사람들에게 보통 도움이 된다.

이 세 단계의 각각을 지금부터 좀 더 자세하게 설명하고자한다.

- (1) **확인**: 적어도 완전한 두 단위를 포함하는 긴 사슬의 부분을 그린다. 이 사슬에서 두 소단위 (다가 라디칼(multivalent radical)이라도 부른다) 사이 단일 사슬 결합에 왼쪽 꺾쇠괄호를 그린다. 왼쪽에서부터 오른쪽으로 사슬을 읽어서 아래첨자 n을 오른쪽 꺾쇠괄호밖에 쓴다. 이것이 CRU를 확인하는 것이다.

보기 1.1: 임의로 P, Q, R, S, T, U, 그리고 V라고 불리는 일곱 개의 다른 소단위로 구성되어있고, 다음과 같은 순서로 연결되어있는 한 사슬을 가정하자:



- (a) 이 순서의 왼쪽편 가까이 어딘가에, 예를 들면, T와 V 사이의 단일 결합 사이에, 왼쪽 꺾쇠괄호를 그린다. 이렇게 되면

$$\dots P-R-T-[V-U-S-Q-P-R-T-V-U-S-Q-\dots$$
 와 같이 된다.

- (b) 왼쪽에서부터 사슬을 따라서 다음 V가 나타날 때까지 읽고, V의 왼쪽에 단일 결합 사슬 위에 오른쪽 꺾쇠괄호를 그린다. 이렇게 되면,

$$\dots P-R-T-[V-U-S-Q-P-R-T-]V-U-S-Q-\dots$$
 로 된다.

- (c) 아래첨자 n을 오른쪽 꺾쇠괄호 바깥쪽에 쓴다. 이것은 CRU를 $[-V-U-S-Q-P-R-T-]_n-$ 로 확인하는 것이다.

주의: (1) 다중사슬 결합에 우선해서 단일 결합위에

괄호를 그린다 (아래의 규칙 F를 참조할 것); (2) 단일 결합이 없다면, 이 고분자는 사다리형인데 (보기 1.2 참조), 사슬에서 고리가 아닌 결합에 그린다. (사다리 고분자의 배열은 복잡한 규칙을 요구하는데, 여기서는 다루지 않는다).¹⁴

보기 1.2:



(2) 배열: CRU의 올바른 배열은 이 배열을 다시 그려야 하는 것을 뜻할지도 모른다. 올바르게 배열된 CRU는 우선순위의 소단위를 제일 왼쪽에 놓고 다른 소단위를 아래에 설명한 순서에 따라서 정해진 대로 왼쪽에서부터 오른쪽으로 배열하는 것이다. 이전 단계에서 확인된 CRU를 배열하기 위해서는 중요한 여섯 규칙 (아래의 A-F)이 필요하다.⁵

● 규칙 A: 소단위들의 우선순위는 다음과 같다: (a) 이종원자 고리; (b) 비고리 이종 원자; (c) 탄소원자 고리; 그리고 (d) 탄소원자만 포함하는 사슬. 여기의

표 1. 규칙 A를 설명하는 보기

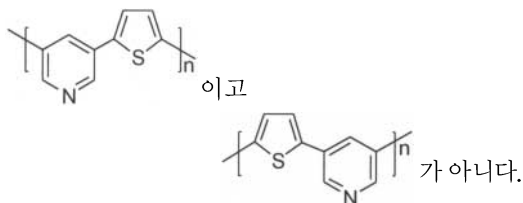
보기 2A1		2,5-싸이오펜다이일옥시 (옥사-2,5-싸이오펜다이일이 아님)
	적용된 규칙	이종원자 고리 > 비고리 이종 원자
보기 2A2		옥사- <i>p</i> -페닐렌 (<i>p</i> -페닐렌옥시가 아님)
	적용된 규칙	비고리 이종 원자 > 탄소원자 고리
보기 2A3		<i>p</i> -페닐렌메틸렌 (메틸렌- <i>p</i> -페닐렌이 아님)
	적용된 규칙	탄소원자 고리 > 탄소 사슬
보기 2A4		옥시메틸렌 (메틸렌옥시가 아님)
	적용된 규칙	비고리 이종 원자 > 탄소 사슬

¹⁴ 이치환 벤젠 유도체의 1,4 위치번호 대신에 아래첨자 이태릭체인 *p*를 사용할 수 있지만, 위치번호의 숫자가 더 낫다.⁶

보기들에서 “>”는 “우선한다”는 뜻이다.

● 한 종류 보다 더 많은 이종원자고리의 형태를 포함하는 사슬에서는 그 우선순위를 여기서 설명하기에는 더 복잡한 규칙들이 있으므로,^{1b} 보기만 하나 들어둔다.

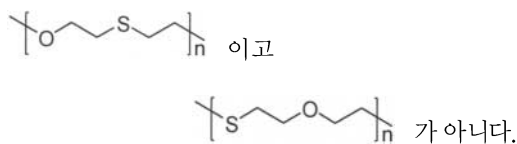
보기 2A5: 3,5-피리딘다이일 > 2,5-싸이오펜다이일 (질소포함 이종고리 > 질소없는 이종고리); 그러므로:



● 이종 원자들을 포함하는 사슬에서 이종 원자들의 우선 순위는 다음과 같다:

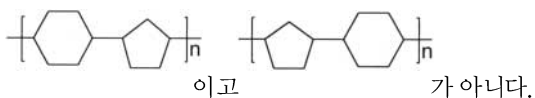
O, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Hg.

보기 2A6: O > S 이므로, -O-C-C-S-C-C-이고 -S-C-C-O-C-C- 가 아니다; 그러므로:



● 탄소원자 고리를 한 종류보다 더 많이 포함한 사슬에서는, 그 우선 순위를 결정하는데 여기서 설명하기에는 더 복잡한 규칙들이 있다.^{1b} 여기서는 보기 하나만 들어둔다.

보기 2A7: 1,4-사이클로헥세인다이일 > 1,3-사이클로펜테인다이일 (큰 고리 > 작은 고리); 그러므로:



⁶ 이치환 벤젠 유도체의 1,4 위치번호 대신에 아래첨자 이태릭체인 *p*를 사용할 수 있지만, 위치번호의 숫자가 더 낫다.⁶

● **규칙 B:** 규칙 A로 정한 우선순위의 소단위 (가장 우선하는 다가 라디칼)에서 제일 짧은 경로(가장 작은 수의 원자들)로 (a) CRU 안에서 다음의 동일한 소단위로, 그리고 (b) 그 다음 최우선 소단위로(존재한다면) 등등으로 진행한다.^{1a} 이 규칙은 우선 소단위를 확인한 다음 사슬을 따라 읽어야될 방향을 나타낸다. 표 2에 몇 가지 보기가 주어졌다.

표 2. 규칙 B를 설명하는 보기

보기 2B1	—O—C—O—C—C— (다음이 아님: —O—C—C—O—C—)	
	적용된 규칙	B(a): 동일한 소단위가 나타나는 제일 짧은 경로
보기 2B2	—O—C—S—C—C— (다음이 아님: —O—C—C—S—C—)	
	적용된 규칙	B(b): 최우선 순위의 소단위에서 두 번째 우선하는 소단위 순서

규칙 B의 적용으로 한가지 이상의 경로가 생기면, 이 경우에는 가장 치환이 많이된 경로를 선택해서 해결한다; 나일론 66가 좋은 보기이다 (표 3을 보시오).

표 3. 동일한 경로 길이를 가지는 경우의 해답

보기 2B3	$\text{—NH—CO—(CH}_2\text{)}_4\text{—CO—NH—(CH}_2\text{)}_6\text{—}$ (다음이 아님: $\text{—NH—(CH}_2\text{)}_6\text{—NH—CO—(CH}_2\text{)}_4\text{—CO—}$, $\text{—CO—(CH}_2\text{)}_4\text{—CO—NH—(CH}_2\text{)}_6\text{—NH—}$)	
	적용된 규칙	N-N 경로 길이는 아디포일 또는 헥사메틸렌을 경유하거나 동일하다; 치환이 더 많은 경로, 즉, 아디포일을 경유하는 것을 더 선호한다.

● **규칙 C:** 한 소단위 안의 주어진 원자들의 배열에서 불포화가 포화보다 우선한다.^{1a}

표 4. 규칙 C를 설명하는 보기

보기 2C1	—CF=CF—CH=CH— >
	$\text{—CF=CF—CH}_2\text{—CH}_2\text{—}$ >
	$\text{—CHF—CHF—CH}_2\text{—CH}_2\text{—}$

보기 2C2	1,4-페닐렌 > 2,5-사이클로헥사다이엔-1,4-다이일 > 2-사이클로헥센-1,4-다이일 > 사이클로헥세인-1,4-다이일
보기 2C3	2,5-퓨란다이일 > 2,5-다이하이드로-2,5-퓨란다이일 > 테트라하이드로-2,5-퓨란다이일

● **규칙 D:** CRU에서 치환기만 없으면 동일한 소단위 모체를 가진 경우에, 치환체가 있다면, 다음 원칙들, 치환체의 (a) 최대 치환체 수, (b) 가장 낮은 위치번호 (locant), 그리고 (c) 알파벳순에 의해 차례가 정해진다.^{1a}

표 5. 규칙 D를 설명하는 보기

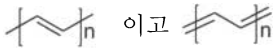

보기 2D1	2,5-다이클로로- <i>p</i> -페닐렌 > 2-브로모- <i>p</i> -페닐렌	
	적용된 치환체 규칙	D(a): 최대 치환체 수
보기 2D2	2,5-다이메틸- <i>p</i> -페닐렌 > 2,6-다이클로로- <i>p</i> -페닐렌	
	적용된 치환체 규칙	D(b): 가장 낮은 위치번호
보기 2D3	2-브로모- <i>p</i> -페닐렌 > 2-클로로- <i>p</i> -페닐렌	
	적용된 치환체 규칙	D(c): 알파벳순

● **규칙 E:** 선택할 수 있고 CRU 배열 규칙과 배치되지 않는다면, 탄소 사슬에서 다중 결합은 가능한 가장 낮은 위치번호를 가진다.^{1a}

규칙 E를 설명하는 보기: (1) 소위 1,4 양식에 따라서 1,3-뷰타다이엔의 중합에서 얻어진 폴리(1,3-뷰타다이엔)은 출판물들에서 $\text{—(—CH}_2\text{—CH=CH—CH}_2\text{—)}_n\text{—}$ 로 자주 잘못 그려진다; 이것은 $\text{—(—CH=CH—CH}_2\text{—CH}_2\text{—)}_n\text{—}$, 즉, 이중 결합이 가능한 가장 낮은 위치번호가 되도록 그려져야 하고, 이것의 CAS의 CRU 이름은 폴리(1-뷰텐-1,4-다이일)이다; (2) 역시 폴리(아이스프렌)으로 불리는 폴리(2-메틸-1,3-뷰타다이엔)은 $\text{—[—C(CH}_3\text{)=CH—CH}_2\text{—CH}_2\text{—]}_n\text{—}$ 로 그려져야 한다; (3) 비슷하게, $\text{—(—O—CH}_2\text{—CH=CH—CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—)}_n\text{—}$ 는

$-(O-CH_2-CH_2-CH_2-CH=CH-CH_2-)_n-$ 보다 더 낮다 (O가 앞서는 원자이다; 이중 결합은 가능한 가장 낮은 위치번호를 가진다).

● **규칙 F:** CRU를 정의할 때, 괄호는 단일 사슬 결합에 그릴 수 있다면, 다중 사슬 결합 사이에 결코 그려서는 안된다 (CAS는 이것을 규칙으로 언급하지 않았지만, 다음 보기를 인용했다⁶).

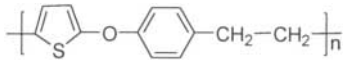
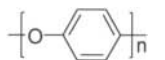
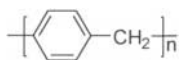
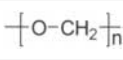
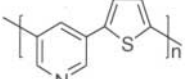
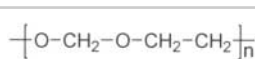
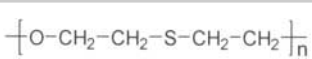
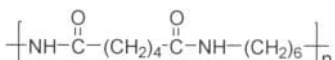
보기 2F1:  이고  가 아니다.

(3) **이름짓기:** 소단위의 이름을 배열된 CRU에서 왼쪽에서부터 오른쪽으로 나타나는 순서대로 붙인다; 왼쪽에서 오른쪽으로 순서대로 치환체들의 이름을 쓴다; 이름들을 괄호 또는 꺾쇠괄호로 쓴다; 그리고 정리된 소단위 앞에 '폴리'를 붙인다. CAS와 IUPAC 명명법은 조금 다르므로, 표 1, 2, 그리고 3

에 주어진 보기들을, 비교하기 위해, CAS와 IUPAC 이름 모두를 표 6에 반복하였다.


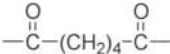
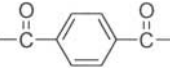
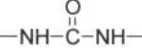
이 절차의 일부는 소단위의 이름에 대한 지식이 필요하므로, 소단위의 이름에 익숙하지 않은 사람들에게는 이것들의 긴 목록이 도움이 될 것이지만, 여기서는 아주 불가능하다; 위에서 언급한 것처럼, 이것은 소개서이고, 완벽한 내용은 아니다. 안내를 위해 몇 가지 보기들을 표 7에 포함시켜 두었다. 역시 불완전하기는 하지만, CAS는 긴 목록을 발행하였는데,^{1c} CRU 명명법에서 소단위의 이름으로서 많은 것이 유용하다. 표 7에서 두가지 중요한 점을 주목해야한다: (1) 어떤 이라디칼의 CAS와 IUPAC 이름들은 동일하고 또 어떤 것은 같지 않다 (보기 번호 1-11을 비교하시오); (2) CAS는 두 개 또는 그 이상의 소단위로 구성된 부분의 관용명의 사용을 중지한 반면,⁸ IUPAC는 중지하지 않았다 (보기 번호 12-14를 비교하시오).

표 6. 몇몇 고분자들의 CAS 9CI 이름^a 과 IUPAC 이름들의 비교

보기 번호	구조	CAS 고분자 이름 ^a	IUPAC 고분자 이름
2A1		폴리(2,5-싸이오펜다이일옥시-1,4-페닐렌-1,2-에테인다이일)	폴리(싸이오펜-2,5-다이일옥시-p-페닐렌에틸렌)
2A2		폴리(옥시-1,4-페닐렌)	폴리(옥시-p-페닐렌)
2A3		폴리(1,4-페닐렌메틸렌)	폴리(p-페닐렌메틸렌)
2A4		폴리(옥시메틸렌)	폴리(옥시메틸렌)
2A5		폴리(3,5-피리딘다이일-2,5-싸이오펜다이일)	폴리(피리딘-3,5-다이일싸이오펜-2,5-다이일)
2B1		폴리(옥시메틸렌옥시-1,2-에테인다이일)	폴리(옥시메틸렌옥시에틸렌)
2B2		폴리(옥시-1,2-에테인다이일사이오-1,2-에테인다이일)	폴리(옥시메틸렌사이오메틸렌)
2B3		폴리[이미노(1,6-다이옥소-1,6-헥세인다이일)이미노-1,6-헥세인다이일]	폴리(이미노아디포일 이미노헥세인-1,6-다이일)

^a 여기에서 사용된 CAS 명명법은 소위 9CI 명명법인데, 이것은 CA의 제9판(Ninth Collective Index) 때(1972)의 초기에 도입된 것이다. 이것을 택한 이유들은 제9판 색인 안내(Index Guide)와 한 집지의 논문으로 실려있다⁷

표 7. 자주 나타나는 이가 라디칼들의 CAS 9CI 이름과 IUPAC 이름의 비교

보기번호	구조	CAS 9CI 이름 ^a	IUPAC 이름
1	—O—	옥시 (oxy)	옥시
2	—S—	싸이오 (thio)	싸이오
3	—NH—	이미노 (imino)	이미노
4	—N=	니트릴로 (nitrilo)	니트릴로
5	—CH ₂ —	메틸렌 (methylene)	메틸렌
6	—CH=	메틸리다인 (methylidyne)	메틸리다인
7	—CH ₂ —CH ₂ —	1,2-에테인다이일 (1,2-ethanediyl)	에틸렌
8	—CH ₂ —CH ₂ —CH ₂ —	1,3-프로페인다이일 (1,3-propanediyl)	프로페인-1,3-다이일
9	—CH ₂ —CH ₂ —CH ₂ —CH ₂ —	1,4-뷰테인다이일 (1,4-butanediyl)	뷰테인-1,4-다이일
10	—CH=CH—	1,2-에텐다이일 (1,2-ethenediyl)	바이닐렌
11		1,4-페닐렌 ^a (1,4-phenylene)	<i>p</i> -페닐렌 ^a (<i>p</i> -phenylene)
12		1,6-다이옥소-1,6-헥세인다이일 (1,6-dioxo-1,6-hexanediyl) ^b	아디포일 (adipoyl) ^d
13		카보닐-1,4-페닐렌카보닐 (carbonyl-1,4-phenylenecarbonyl) ^c	테레프탈로일 (terephthaloyl) ^{c,d}
14		이미노카보닐이미노 (iminocarbonylimino) ^b	유레일렌 (ureylene) ^d

^a 이 계열에서 다른 두가지는 1,2-페닐렌 (= *o*-페닐렌) 그리고 1,3-페닐렌 (= *m*-페닐렌) 이다.
^b 이 계열에서 다른 것들의 이름들은 안전하게 연역할 수 있다. 예를 들면, (1,2-다이옥소-1,2-에테인다이일) = 옥살일; (1,3-다이옥소-1,3-프로페인다이일) = 글루타랄; 등등. 치환체를 포함하는 이와 같이 복합된 표현에는 반드시 괄호를 사용해야한다.
^c 이 계열에서 다른 두 가지는 카보닐-1,2-페닐렌카보닐 (= 프탈로일) 그리고 카보닐-1,3-페닐렌카보닐 (= 아이소프탈로일) 이다.
^d 아디포일, 테레프탈로일, 유레일렌 등의 IUPAC 이름들은 배열 규칙들과 어긋나지 않는다면 허용된다

더 많은 보기들을 보여주기 위해 표 8에 여러 가지 상업적으로 구할 수 있는 고분자들의 정확한 표현과 IUPAC 이름들이 주어졌다. CAS 이름은 적절한 경우에만 주어졌다; 아세틸렌익, 아크릴익, 메타아크릴, 에틸렌익, 그리고 바이닐 고분자들에 대한 CAS의 정책은 원료중심 표기를 사용하는 것이고, 이것들을 일치하게 이름을 붙인다. 그래서, 폴리(바이닐 알코올) (보기 번호 8)의 CAS 이름은 에텐올, 단일고분자이다; CAS 표기는 (CH₂=CH-OH)_x, 이다. 즉, 원료중심이 지 구조중심이 아니다.

CRU의 말단기들이 알려진 경우에는 그 이름에 희랍 문자 α 와 ω를 사용하고 적절한 라디칼 이름으로 명확하게 한다. 색인 이름 (index name)이라고 불러

는 CAS의 선호하는 고분자 이름에서는, 고분자의 이름 뒤에 말단기의 표현을 더한다. α-말단기는 그 구조가 위에서 주어진 규칙들에 따라서 정돈된 CRU의 왼쪽 끝에 붙어있는 기이다; 이것은 알파벳 순서에 관계없이 처음에 인용된다.^{1a} 보기들이 표 9에 주어졌다.

참고문헌

1. CAS: Index Guide, Appendix IV (1998). Chemical Abstracts Service, 2540 Olentangy River Road, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210: (a) Section 222 Description of CAS

표 8. 상업적으로 구할 수 있는 고분자들의 보기(표6에서 보기 2B3도 보시오)

보기 번호	반복 단위 (CRU)	관용명 : CAS 고분자 이름 ^a	전형적인 IUPAC 고분자 이름
1	$\text{-(CH}_2\text{)}_n\text{-}$	폴리에틸렌 : 구조도 이름도 CRU와 같지않음	폴리(메틸렌)
2	$\text{-(CH(Me)-CH}_2\text{)}_n\text{-}$	폴리프로필렌 : 구조도 이름도 CRU와 같지않음	폴리(1-메틸에틸렌)
3	$\text{-(O-CH}_2\text{-CH}_2\text{)}_n\text{-}$	폴리(옥시-1,2-에테인다이일)	폴리(옥시에틸렌)
4	$\text{-(O-(CH}_2\text{)}_4\text{)}_n\text{-}$	폴리(옥시-1,4-부테인다이일)	폴리(옥시부테인-1,4-다이일)
5		폴리(에틸렌테레프탈레이트)(PET) : 폴리(옥시-1,2-에테인다이일옥시카보닐-1,4-페닐렌카보닐) ^b	폴리(옥시에틸렌옥시테레프탈로일)
6	$\text{-(NH-CO-(CH}_2\text{)}_5\text{)}_n\text{-}$	나일론-6 : 폴리(이미노(1-옥소-1,6-헥세인다이일))	폴리[이미노(1-옥소헥세인-1,6-다이일)]
7		라이톤 (RYTON® PPS) : ^c 폴리(페닐렌 설파이드) : 폴리(싸이오-p-페닐렌)	폴리(싸이오-p-페닐렌)
8	$\text{-(CH(OH)-CH}_2\text{)}_n\text{-}$	엘바놀 (Elvanol®) : ^c 폴리(바이널 알코올) : 구조도 이름도 CRU와 같지않음	폴리(1-하이드록시에틸렌)
9		케브라 (Kevlar®) : ^c 폴리(이미노-1,4-페닐렌이미노테레프탈로일)	폴리(이미노-p-페닐렌이미노테레프탈로일)
10		캡톤 (Kapton®) : ^c 폴리[(5,7-다이하이드로-1,3,5,7-테트라옥소벤조[1,2-c:4,5-c']다이피롤-2,6(1H,3H)-다이일)-1,4-페닐렌옥시-p-페닐렌]	폴리[(5,7-다이하이드로-1,3,5,7-테트라옥소벤조[1,2-c:4,5-c']다이피롤-2,6(1H,3H)-다이일)-p-페닐렌옥시-p-페닐렌]

^a 검색하는 사람들은 등록파일에서 그것을 알 필요가 있으므로, CAS는 1- 그리고 2-성분 축합 고분자들에 대해서 자주 원료중심 표기와 구조중심 표기 양쪽을 모두 색인을 만든다. 이 두 기록은 보통 서로 교차참조되는 것은 아니다 (예외적인 것으로는 아래 b를 보시오). 따라서, 보기 번호 9에 있는 폴리아마이드는 두가지 표기 (원료 중심과 구조중심을 가지고 있고, 각각은 자신의 CAS 등록번호 (Registry Number, RN)를 가진다. 참고문헌의 완전한 검색을 확실하게하기위해서는 양쪽 등록번호 (RN)을 모두 찾는 것이 필요하다

^b 이 고분자에 대해서는 비정상적인 경우가 존재한다; CRU의 RN, 25038-59-9는 선호되는 등록 번호(preferred registration number, PR)이다; 대체 등록 (alternate registration, AR) 영역과 많은 지워진 RN (deleted RN, DR)에서 등록 파일은 세 개의 RN을 보여주었다. 등록 파일에서 PR의 검색은 줄 번호 (line number)를 생성하고, 그 다음 이 줄 번호를 CAPLUS 파일에서 검색하는 것은 PR 기록, AR 기록, 그리고 모든 DR 기록의 모든 문헌들을 검색하게된다. PR을 혼자 또는 PR과 세 개의 AR을 합쳐서 검색하는 것도 완전한 검색을 확실하게 하지는 않는다. 왜냐하면, 염화 테레프탈로일과 에틸렌 글리콜로부터 만들어진 PET와 같이 원료중심 명명법으로 만들어진 것은 다른 RN을 가지고 있기 때문이다. 줄 번호에 대한 설명을 하면 다음과 같다: CAS의 등록파일(Registry File)에 들어가서 검색을 하려고 RN 25038-59-9를 넣는 경우 아래와 같이 나타나는데, "L1"이 줄번호에 해당한다. L1의 번호로 다시 검색하면 다음에는 "L2" 등으로 나타난다.

" => FILE CAPLUS

=> S 25038-59-9

REGISTRY INITIATED

Substance data SEARCH and crossover from CAS REGISTRY in progress...

Use DISPLAY HITSTR (or FHITSTR) to directly view retrieved structures.

L1 55885 L3 (=all references to 25038-59-9, + AR and DR numbers"

^c 등록 상표: 필립스 석유 회사 [라이톤(RYTON® PPS)]; 듀폰 [엘바놀(Elvanol®), 케브라(Kevlar®), 캡톤(Kapton®)].

표 9. 말단기가 있는 반복 단위들의 보기

보기번호	반복 단위 (CRU)	CAS 고분자 이름 ^a	IUPAC 고분자 이름
1	$\text{H}-(\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2)_n-\text{OH}$	α -하이드로- ω -하이드록시폴리(옥시-1,2-에테인다이일)	α -하이드로- ω -하이드록시폴리(옥시에틸렌)
2	$\text{Cl}-(\text{CH}_2)_n-\text{CCl}_3$	α -클로로- ω -(트라이클로로메틸)폴리(메틸렌)	α -클로로- ω -(트라이클로로메틸)폴리(메틸렌)
3	$\text{Cl}_3\text{C}-(\text{CF}_2-\text{CH}_2)_n-\text{Cl}$	α -(트라이클로로메틸)- ω -클로로폴리(1,1-다이플루오로-1,2-에테인다이일)	α -(트라이클로로메틸)- ω -클로로폴리(1,1-다이플루오로에틸렌)

^a IUPAC 이름들과 쉽게 비교하기 위해 CAS의 앞뒤가 바뀐 이름들을 여기에 주었다. 고분자의 CAS 색인 이름들은 예를 들면, 폴리(옥시-1,2-에테인다이일), α -하이드로- ω -하이드록시- 와 같이 전형적으로 앞뒤가 바뀌어져 있다.

Polymer Indexing Rules; (b) Section 138 Description of Ring Seniority; (c) Section 294 Illustrative List of Substituent Prefixes.

2. IUPAC, Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers. *Pure Appl. Chem.* 1976, 48, 373-385. Reprinted as Chapter 5 in Compendium of Macromolecular Nomenclature (The Purple Book). Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991.

3. ACS, A Structure-Based Nomenclature for Linear Polymers. *Macromolecules* 1968, 1, 193-198.

4. IUPAC, Nomenclature of Regular Double-Strand (Ladder and Spiro) Organic Polymers. *Pure Appl. Chem.* 1993, 65, 1561-1580.

5. 이 규칙들은 여기서 단지 명쾌하게 설명하기 위해 문자를 붙인 것이다: 이것들은 CAS나 IUPAC에서는 확인되지 않는 것이다.

6. Panico, R.; Powell, W. H.; Richer, J.-C. A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993). Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993 [ISBN 0-63203-488-2]; see section R-0.1.6.1.

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 (1972-1976). *J. Chem. Doc.* 1974, 14, 3-15.

8. 참고문헌 1c의 294절에 있는 복잡한 이름들의 어떤 것은 CRU 소단위들의 연속이라기보다는 대체할 수 있는 명명법에서 이중 라디칼로서 사용하려고 한 것이다; 예를 들면, -NHCONH- 부분은 (카보닐 다이이미노)라고 이름붙인다; 이것은 (카보닐다이이미노)다이아세트 산과 같이 사용할 수 있다. 이 이름은 CRU에서 -NH-C(=O)-NH- 순서의 소단위의 이름을 붙이는 것과는 관계가 없다. 그러므로, 294절에 있는 이름들은 주의해서 사용해야한다.

9. Wilks, E. S. "Macromolecular Nomenclature Note No. 18". *Polym. Prepr.* 2000, 41(1), 6a-11a.