

알기쉬운 고분자 명명법

제2부 고분자의 원료중심 명명법

도춘호 번역 | 순천대학교 신소재응용공학부, 대한화학회 화학술어위원장

“알기쉬운 고분자 명명법” 제1부 [화학세계, 42(10), pp 72-80 (2002)](주 1)에서는 IUPAC의 구조중심 명명법 (structure-based nomenclature)에 대해서 살펴보았다. 고분자의 이름은 먼저 고분자의 구조 반복 단위 (constitutional repeating unit, CRU)를 정한 다음 “폴리”라는 접두사를 붙여서 폴리(구조 반복 단위), [poly(CRU)]로 이름지으면 된다. IUPAC 규칙들(CAS 규칙들과 같음)에 따라서 구조 반복 단위를 정하는 것이 약간 어려운 부분인데, CRU의 이름은 IUPAC이나 CAS에서 정한 CRU를 구성하는 소단위의 이름을 사용하면 된다. 이렇게 해서 정한 구조중심 명명법은 매우 체계적이므로, 구조중심 이름으로부터 고분자의 구조를 알 수 있고, CA 등 문헌 검색에 도움을 주고, 고분자 사회에서 의사소통을 분명하게 할 수 있다. 그러나, 이름이 복잡하고, 부르기가 쉽지 않고, 화학지식을 필요로 하며, 고분자가 무엇으로부터 만들어 지는지 알기 어려운 단점이 있다.

한편, 원료중심 명명법은 고분자의 구조에 바탕을 두지 않고, 고분자를 만드는 원료명, 즉 단량체의 이름에 근거를 둔 것으로서, “폴리(단량체 이름)”으로 붙인다. 예를 들면, 에틸렌 단량체로부터 얻는 폴리에틸렌과 스티리렌 단량체로부터 얻는 폴리스티리렌이 대표적인 것이다. 그런데, 단량체의 구조는 고분자가 합성되는 과정에서 화학적으로 변하므로, 중합 후에는 고분자의 구조에서 엄밀한 의미에서는 단량체의 구조가 없어진다. 예컨대, 단량체인 에틸렌의 이중 결합은 폴

리에틸렌에서는 찾을 수 없다. 그러나, 고분자의 이름이 폴리에틸렌이므로, 마치 에틸렌이 그냥 그대로 연결되어 고분자를 형성한다는 생각을 가지게 한다. 또 단량체는 다르지만, 동일한 고분자를 만드는 경우도 있다. 예를 들면, ε-카프로락탐이나 6-아미노헥산산을 사용하면 동일한 구조를 가지는 나일론 6를 만들 수 있다. 이런 경우, 원료중심 명명법을 사용하면 혼동을 줄 수 있다. 그리고 한 종류의 단량체가 중합할 때 중합 조건이나 반응 진행에 따라서 한 종류의 고분자가 아니라 구조가 다른 두 종류 이상의 고분자가 만들어지는 경우가 있는데, 이 경우에도 원료중심 명명법은 혼동을 주게 된다. 그러나, 우선 이름부르기가 비교적 쉽고, 또 화학구조를 몰라도 무엇으로부터 만들어진 것인지 알기 쉽고, 또 실제로 고분자 관련 산업계나 학계에서 많이 사용되고 있다. 따라서 이런 현실을 고려하여서, IUPAC에서는 원료중심 명명법에 대해서도 체계적으로 정하여서 IUPAC 권고안들을 제정하였다. 이 중에서 최근 E. Marechal과 E. S. Wilks가 정리한 “분류에 의한 원료중심 명명법 (IUPAC 권고안 2001)” (E. Marechal and E. S. Wilks “Generic Source-Based Nomenclature for Polymers/IUPAC Recommendations 2001,” *Pure Appl. Chem.*, Vol. 73, No. 9, pp. 1511-1519, 2001)을 번역하여 소개한다.

여기서 소개하고자 하는 “분류에 의한” 원료중심 명명법은 우리가 알고 있는 일반적인 원료중심 명명법에

“분류명”을 더한 것이다. “원료중심 명명법”과 “분류에 의한 원료중심 명명법”에 따라서 고분자의 이름을 붙이는 방법을 요약하면 다음과 같은데, 고분자의 분류명을 빼면 보통 사용하는 원료중심 명명법이 된다. 그리고 항상 분류명을 넣는 것은 아니다. 자세한 것은 아래의 번역된 분문을 보자.

원료중심 명명법 : 폴리(단량체 이름)

분류에 의한 원료중심 명명법 :

폴리(고분자의분류명) : (단량체 이름)

국제적으로 통용되는 원소와 화합물의 이름을 IUPAC에서 결정하고 있는데, IUPAC이름은 단순히 원소와 화합물 이름의 로마자 표기에 한정된 것이므로, 우리와 같이 고유 문자를 가지고 있는 나라에서는 IUPAC 이름을 그 나라의 고유 문자로 표기하는 것을 그 나라의 화학계를 대표하는 단체가 정하는 것이 관례인데, 우리나라의 경우에는 1963년부터 IUPAC의 정회원 단체로 활동하고 있는 대한화학회가 대표단체이며, 대한화학회 안에 있는 화학술어위원회가 그 역할을 맡고 있다.

제 2 부

분류에 의한 고분자의 원료중심 명명법 (IUPAC 권고안 2001)

초록

명명법위원회는 선형 공중합체와 비선형 고분자에 대한 원료중심 명명법에 관해 문헌 두편을 이미 발행하였다: 그러나, 어느 경우에는 이 명명법이 애매모호한 이름을 주게 된다. 이 문헌은 이런 문제들을 해결하고 명백하게 원료중심 이름을 붙일 수 있는 분류에 따

른 원료중심 명명법(generic source-based nomenclature)을 제안하고자 한다. 일반적인 원료중심 명명법은 두 부분으로 이루어진다:

- 1) 고분자 분류 이름, 그 다음에 콜론(:)이 따른다.
- 2) 실제 또는 가정적 단량체 이름, 공중합체의 경우 항상 괄호 속에 넣는다.

고분자의 화학식, 구조중심 이름, 원료중심 이름, 분류에 따른 원료중심 이름들이 각 보기에 주어졌다. 어떤 경우에는, 예를 들면, 한 고분자가 이름을 한가지 이상 가질 때 또는 고분자가 여러 중간 구조들의 연속에 의해 얻어졌을 때는 분류에 의한 원료중심만이 명확한 이름을 준다. 이 규칙들은 주로 주 사슬에 하나 또는 그 이상의 작용기 또는 이중고리계를 가진 형태의 고분자들과 관련이 있지만, 그러나 어느 정도, 이 규칙들은 결합작용기, 바이닐 또는 다이엔 고분자들과 같은 탄소사슬 고분자들, 스파이로와 고리 고분자들, 그리고 그물 구조들과 같은 고분자들에게도 적용할 수 있다.

내용

1. 서론
2. 단일고분자의 원료중심 명명법
3. 분류 명명법
 - 3.1 기본 원리
 - 3.2 일반적 규칙
4. 분류명의 응용 확장
5. 참고문헌

1. 서론

IUPAC의 고분자명명법위원회(Commission on Macromolecular Nomenclature)는 가교결합을 제외한 대부분의 고분자의 이름을 붙일 수 있는 구조중심 명명법(structure-based nomenclature)에 관한 세 문서[1-3]를 발행하였다. 이 위원회는 선형 공중합체와 비선형 고분자의 원료중심 명명법(source-based nomenclature)에 관한 두 문서[4,5]도 역시 발행하였다. 일반적으로, 구조중심 이름보다는 원료중

심 이름은 간단하고 덜 엄격하다. 그러나, 원료중심 명명법의 단순성이 고분자의 이름을 애매모호하게하는 경우가 있다. 예를 들면, 이무수물(dianhydride) A가 다이아민 B와의 축합으로 처음에, 폴리아마이드-산(polyamide-acid)을 만들고, 이것은 폴리이미드로 고리화할 수 있다; 그러나, 현행 원료중심 명명법에 의하면, 두 생성물 모두 같은 이름인 폴리(A-alt-B)을 가진다. 만약 그 고분자의 분류명인 “아마이드-산” 또는 “이미드”가 그 이름에 포함되면, 구별은 쉽게 된다. 단지 한가지 생성물만 형성되는 경우에도, 분류명(class name 또는 generic name)의 사용은 고분자의 구조를, 특히 그것이 아주 복잡한 경우에, 명백하게 하는데 도움이 된다.

애매모호한 이름의 보기들은 단일고분자에서도 있다. 원료중심 이름인 “폴리부타다이엔”은 그 구조가 1,2-, 1,4-cis-, 또는 1,4-trans- 인가를 나타내지 않는다; 이 가능성들 사이를 구별하기 위해 추가 정보가 필요하다.

이 문서의 목적은 이런 문제들을 해결하고 더 나은 원료중심 이름들을 만들기위한 분류의 의한 명명법 체계를 소개하기위한 것이다.

폴리스타이렌과 같이, 대부분의 관용명(trivial name)들은 원료중심 이름들이다. 지금까지, 더 엄격한 구조중심 이름들이 과학적 의사소통에 더 적절하다고 생각하였으므로 이 위원회는 단일고분자에 대해서는 원료중심 이름들을 체계적으로 권장하지 않았다. 그러나, 1976년에 “정규 단일가닥(single-strand) 유기 고분자의 명명법”을 발표한 이후에도 산업계와 학계 양쪽 모두에서 과학자들은 관용명 사용을 계속해왔다. 원료중심 명명법의 간단하고 실용성 때문에 위원회 자체도 공중합체에 관한 원료중심 명명법을 1985년에 채택하였다. 이런 사실들에 바탕을 두고, 이 위원회는 원료중심 명명법을 단일고분자에 대한 대체할 수 있는 정식 명명법으로 권고하기로 결정하였다. 이 문서에서, 단일고분자들에 대한 원료중심 이름들을 생성하는 규칙들

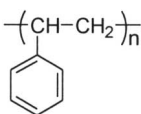
이 설명되어 있다. 결과적으로, 원료중심과 구조중심 이름들은 대부분의 고분자들에 대해서 유효하다.

고분자의 원료중심 이름들에서 단량체들의 이름들은 체계적인 것이 선호되지만, 관례상 잘 정립이 되어 있으면 관용명도 괜찮다. 구조중심 이름에서 구조 반복 단위(CRU)의 부분으로서의 유기 그룹의 이름들은 유기 명명법의 원칙들과 1993년의 “IUPAC 유기 화합물의 명명법 지침 [6]”에 바탕을 둔 것들이다.

2. 단일고분자의 원료중심 명명법

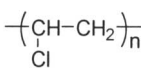
- **규칙 1:** 단일고분자(homopolymer)의 원료중심 이름은 단량체의 이름과 접두사 “폴리”로 만들어진 단량체의 이름이 두 단어 이상으로 구성되었거나 또는 애매모호함이 예상되면, 그 단량체의 이름은 괄호 안에 넣는다.

보기 1.1



원료중심 이름: 폴리스타이렌
구조중심 이름:
폴리(1-페닐에틸렌)

보기 1.2



원료중심 이름: 폴리(염화 바이닐)
구조중심 이름:
폴리(1-클로로에틸렌)

3. 분류에 따른 명명법

3.1 기본 원칙

분류에 의한 원료중심 명명법의 기본 개념은 아주 간단하다; 고분자의 원료중심 이름에 고분자의 분류명을 더하면 된다. 고분자의 분류명을 더하는 것은 가끔 임의적이다; 어떤 경우에는, 애매모호한 것을 피하고

분명하게 하기 위해 더하는 것이 필요하다. 그러나, 명백하게 하지 못하면 더하는 것이 바람직하지 않다.

여기에서 제시하는 체계는 대부분의 모든 단일고분자들, 공중합체들, 그리고 그물구조체들과 같은 다른 것들도 적용될 수 있다. 그러나, 분류에 따른 원료중심 명명법은 다른 두 명명법 체계에 더해서 제삼의 명명법 체계로 생각되어서는 안된다; 이것은 부수적인 체계이고, 현행 원료중심 명명법의 단순한 확장이라고 생각해야 한다. 이름의 분류 부분이 고분자의 이름에서 제거되면, 잘 정립된 원료중심 이름이 남는다.

3.2 일반적 규칙

- **규칙 2** : 한 고분자의 분류에 의한 원료중심 이름은 다음 순서에 따른 두 부분으로 되어있다: (1) 고분자의 분류명 (class 또는 generic name) 폴리G 다음에 콜론을 쓰고 (2) 실제 또는 가상적인 단량체 이름(들) (A, B, 등등)을 쓴다. 공중합체의 경우에는 항상 괄호 속에 넣는다. 단일고분자의 경우에는, 명확하게 하는데 필요하다면 괄호를 사용한다. polyG:A, polyG:(B), polyG:(A-co-B), polyG:(A-alt-B)

주의 1 : 고분자의 분류명은 가장 적절한 형태의 작용기 또는 이종원자고리계를 표현한다.

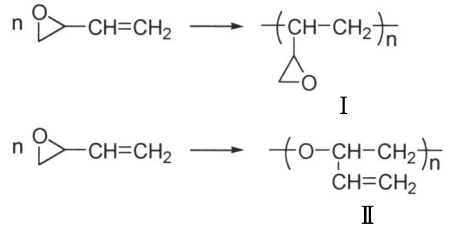
주의 2 : 원료중심 명명법에 관한 이전의 두 문서 [4,5]에 있는 모든 규칙들은 현재의 명명법계에 이름의 분류 부분을 더해서 적용될 수 있다.

주의 3 : 고분자는 한가지 이상 이름을 가질 수 있다; 이것은 고분자가 한가지 방법 이상으로 만들어지는 경우에 발생한다.

주의 4 : 한 단량체 또는 한 쌍의 상호보완 단량체들이 한 종류 고분자 이상을 만들거나, 또는 그 고분자가 중간 구조들의 연속의 결과로 얻어진 것이라면,

분류 명명법의 사용이 필요하다(보기 2.1, 2.3, 그리고 2.4를 보시오).

보기 2.1



분류에 따른 원료중심 이름:

- I. 폴리알킬렌:바이닐옥시레인
- II. 폴리에터:바이닐옥시레인

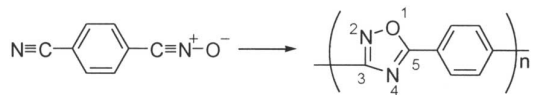
원료중심 이름:

- I 과 II 는 같은 원료중심 이름을 가진다: 폴리(바이닐옥시레인)

구조중심 이름:

- I. 폴리(1-옥시란일에틸렌)
- II. 폴리[옥시(1-바이닐에틸렌)]

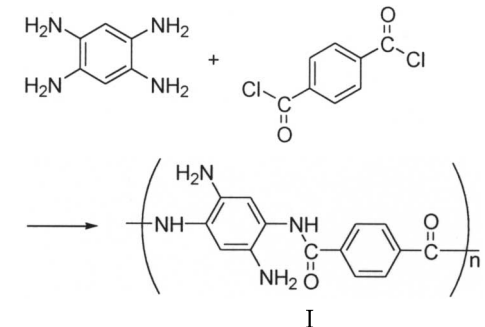
보기 2.2

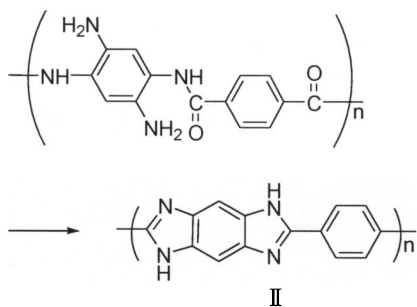


분류에 따른 원료중심 이름: 폴리옥사디아아졸:(4-사이아노벤조나이트릴 N-옥사이드

구조중심 이름: 폴리(1,2,4-옥사디아아졸-3,5-다이일-1,4-페닐렌)

보기 2.3





분류에 따른 원료중심 이름:

- I. 폴리아마이드: [(테레프탈로일 다이클로라이드)-*alt*-벤젠-1,2,4,5-테트라민]
- II. 폴리벤즈이미다졸: [(테레프탈로일 다이클로라이드)-*alt*-벤젠-1,2,4,5-테트라민]

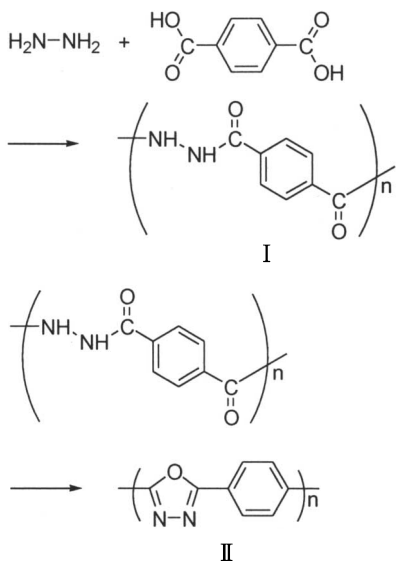
원료중심 이름:

- I 과 II 는 같은 원료중심 이름을 가진다:
폴리[(테레프탈로일 다이클로라이드)-*alt*-벤젠-1,2,4,5-테트라민]

구조중심 이름:

- I. 폴리[이미노 (2,5-다이아미노-1,4-페닐렌)이미노테레프탈로일]
- II. 폴리[(1,5-다이하이드로벤조[1,2-d:4,5-d']다이이미다졸-2,6-다이일)-1,4-페닐렌]

보기 2.4



분류에 따른 원료중심 이름:

- I. 폴리하이드라자이드: [하이드라진-*alt*-(테레프탈산)]
- II. 폴리옥사다이아졸: [하이드라진-*alt*-(테레프탈산)]

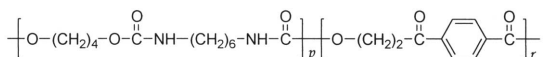
원료중심 이름:

- I 과 II는 동일한 원료중심이름을 가진다: 폴리[하이드라진-*alt*-(테레프탈산)]

구조중심 이름:

- I. 폴리(하이드라진-1,2-다이일테레프탈로일)
- II. 폴리(1,3,4-옥사다이아졸-2,5-다이일-1,4-페닐렌)

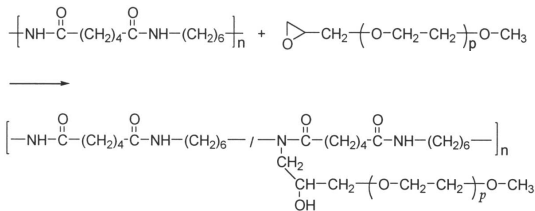
보기 2.5



분류에 따른 원료중심 이름: 폴리우레테인: [부테인-1,4-다이올-*alt*-(헥세인-1,6-다이일다이아미노시아네이트)]-*block*-폴리에스터: [(에틸렌 글리콜)-*alt*-(테레프탈산)]

구조중심 이름: 폴리(옥시부테인-1,4-다이일옥시카보닐이미노헥세인-1,6-다이일이미노카보닐)-*block*-폴리(옥시에틸렌옥시테레프탈로일)

보기 2.6



분류에 따른 원료중심 이름:

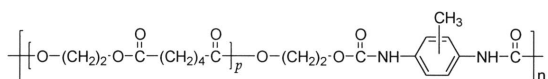
- 폴리아마이드: [헥세인-1,6-다이아민-*alt*-(아디프산)]-*graft*-폴리에터: (에틸렌 옥사이드)

주의 5 : 이 반응은 각 CRU에 대해서 한개의 그라프트만 생기는 것으로 생각한다.

● **규칙 3** : 고분자 구조에 작용기의 형태 또는 이중 고리계가 한가지 이상 있으면, 이름들은 알파벳 순으로 하여야 한다; 예를 들면 폴리(GG'):(A-*alt*-B).

주의 6 : 모든 분류명들을 언급하는 것이 더 낫지만, 필수적인 것은 아니다.

보기 3.1

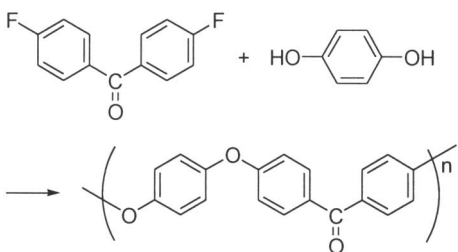


분류에 따른 원료중심 이름:

폴리에스테르유레테인: α, ω -다이하이드록시올리고 [(에틸렌 글리콜)-*alt*-(아디프산)-*alt*-(2,5-톨릴렌다이아이소시아네이트)]

구조중심 이름: 폴리[[올리고(옥시에틸렌옥시아디포일)]옥시에틸렌옥시카보닐이미노(x-메틸-1,4-페닐렌)이미노카보닐]

보기 3.2

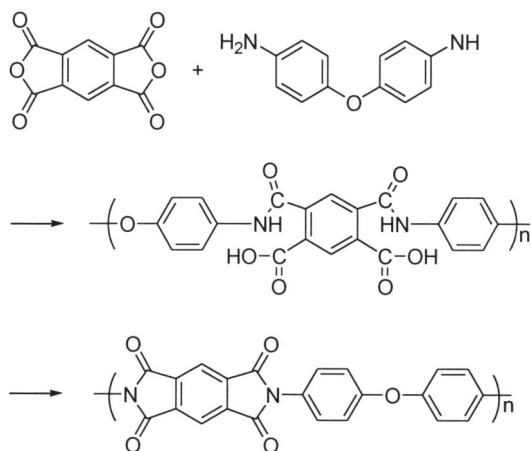


분류에 따른 원료중심 이름: 폴리에테르케톤:(4,4-다이플루오로벤조페논-*alt*-하이드로퀴논)

구조중심 이름: 폴리(옥시-1,4-페닐렌옥시-1,4-페닐렌카보닐-1,4-페닐렌)

● **규칙 4** : 주 사슬에만 관련된 고분자의 분류명들은 그 이름에서 구체화된다; 옆사슬의 작용기들이 고분자 중합 반응 중에 생겼다면, 이것들의 이름은 하이픈 다음에 포함시킬 수 있다.

보기 4.1



분류에 따른 원료중심 이름:

I. 폴리(아마이드-산): [(파이로멜리트산 이무수물)-*alt*-(4,4'-옥시다이아닐린)] (카복시기 두 개 모두 중합 반응에서 생겼다.)

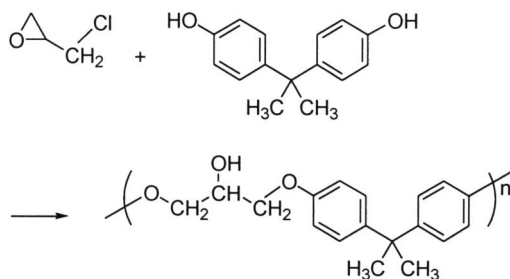
II. 폴리이미드: [(파이로멜리트산 이무수물)-*alt*-(4,4'-옥시다이아닐린)]

구조중심 이름:

I. 폴리(옥시-1,4-페닐렌이미노카보닐(4,6-다이카복시-1,3-페닐렌)카보닐이미노-1,4-페닐렌]

II. 폴리[(5,7-다이하이드로-1,3,5,7-테트라옥소벤조[1,2-c:4,5-c']다이피롤-2,6(1H,3H)-다이일)-1,4-페닐렌옥시-1,4-페닐렌]

보기 4.2



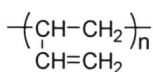
분류에 따른 원료중심 이름: 폴리(에터-알코올):(에피클로로하이드린-*alt*-비스페놀 에이)

구조중심 이름: 폴리(옥시(2-하이드록시프로페인-

1,3-다이일)옥시-1,4-페닐렌(1-메틸에테인-1,1-다이일)-1,4-페닐렌]

● **규칙 5** : 바이닐 고분자 또는 다이엔 고분자와 같은 탄소-사슬 고분자들의 경우에는, 주어진 한가지 단량체계에서 다른 고분자 구조들이 생길 때에만 분류명이 사용된다.

보기 5.1



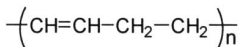
분류에 따른 원료중심 이름:

폴리알킬렌:(부타-1,3-다이엔)

원료중심 이름: 폴리(부타-1,3-다이엔)

구조중심 이름: 폴리(1-바이닐에틸렌)

보기 5.2



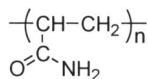
분류에 따른 원료중심 이름:

폴리알켄일렌:부타-1,3-다이엔

원료중심 이름: 폴리(부타-1,3-다이엔)

구조중심 이름: 폴리(부트-1-엔-1,4-다이일)

보기 5.3

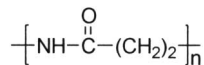


분류에 따른 원료중심 이름:

폴리알킬렌:아크릴아마이드

구조중심 이름: 폴리[1-(아미노카보닐)에틸렌]

보기 5.4



분류에 따른 원료중심 이름:

폴리아마이드:아크릴아마이드

구조중심 이름:

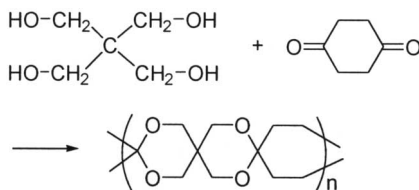
폴리[이미노(1-옥소프로페인-1,3-다이일)]

주의 7 : 폴리알킬렌(polyalkylene)과 폴리알켄일렌(polyalkenylene) 단어들은 참고 문헌 7번, p.149에 정의되어있다.

4. 분류에 따른 원료중심 명명법의 응용 확장

분류에 따른 원료중심 명명법은 스피어로, 고리 고분자, 그리고 그물구조와 같은 더 복잡한 고분자들로 확장될수 있다.

보기 6.1



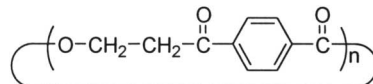
분류에 따른 원료중심 이름: 폴리스파이로케탈:

[[2,2-비스(하이드록시메틸)-프로페인-1,3-다이올]-*alt*-사이클로헥세인-1,4-다이온

또는 폴리스파이로케탈:(펜타에리트릴-*alt*-사이클로헥세인-1,4-다이온)

구조중심 이름: 폴리[2,4,8,10-테트라옥사스피로[5.5]엔데케인-3,3,9,9-테트라일-9,9-비스(에틸렌)]

보기 6.2

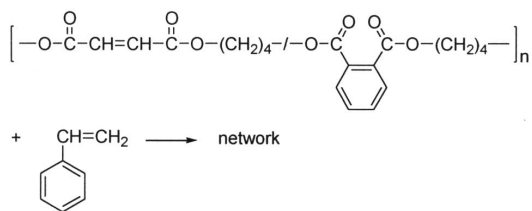


분류에 따른 원료중심 이름: *cyclo*-폴리에스터:[(에틸렌 글리콜)-*alt*-(테레프탈산)]

주의 8

고리 고분자에 대한 IUPAC 명명법은 아직 없다.

보기 6.3



분류에 따른 원료중심 이름:

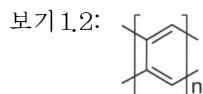
폴리에스터:{부테인-1,4-다이올-*alt*-(말레산 무수물)}:(프탈산 무수물)}-*net*-폴리알킬렌:(말레산 무수물)-*co*-스타이렌]

5. 참고문헌

1. “정규(regular) 단일가닥 유기고분자들의 명명법, 1975”, *Pure Appl. Chem.* **48**, 373-385 (1976). Reprinted as chapter 5 in Ref. 7.
2. “정규 이중가닥 (사다리화스파이로) 유기 고분자의 명명법, 1993”, *Pure Appl. Chem.* **65**, 1561-1580 (1993).
3. “비정규(irregular) 단일 가닥 유기 고분자들의 구조중심 명명법, 1994”, *Pure Appl. Chem.* **66**, 873-889 (1994).
4. “공중합체의 원료중심 명명법 1985”, *Pure Appl. Chem.* **57**, 1427-1440 (1985). Reprinted as chapter 7 in Ref. 7.
5. “비선형 고분자와 고분자 어셈블리의 원료중심 명명법”, *Pure Appl. Chem.* **69**, 2511-2521 (1997).
6. *IUPAC 유기 화합물의 명명법 지침 (A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds)*, R. Panico, W. H. Powell, J-C. Richer (Eds.), Blackwell Scientific Publications, Oxford (1993).
7. *Compendium of Macromolecular Nomenclature*, W. V. Metanomski (Ed.), Blackwell Scientific Publications, Oxford (1991).

주 1: 제1부 중 오기를 다음과 같이 정정한다.

- 1) p. 75 왼쪽 칼럼 위에서 6째줄의 화학식에 “보기 1.2”가 다음처럼 넣어져야 한다.



- 2) p. 77 왼쪽칼럼 위에서 두 번째 줄 “..보다 더 낫다”로 읽혀야 한다.
- 3) p.77 표6 중 보기번호 2B2와 보기번호 2B3의 CAS 고분자 이름은 서로 바뀌었다. 다음과 같아야 한다.
보기 2B2의 CAS고분자 이름: 폴리(옥시-1,2-에테인다이일싸이오-1,2-에테인다이일)
보기 2B3의 CAS고분자 이름: 폴리[이미노(1,6-다이옥소-1,6-헥세인다이일)이미노-1,6-헥세인다이일]
- 4) p.80 표9에서 “반복단위(SRU)”는 반복단위(CRU)”로 읽혀야 한다.