

Taxonomy 分類の定義・規則

1. L1～L4 の分類の定義・規則

1.1 L1 29 項目の定義

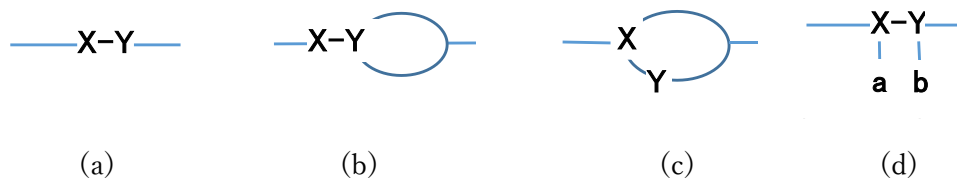
ポリマーの繰り返し単位に含まれる化学構造の特徴から項目立てした L1 (level 1: 第一階層) 29 項目を表 1 に示す。

表 1 ポリマーの繰り返し単位中の官能基の化学構造式の特徴をもとに分類した 29 の項目

	(L1)29 項目
1	acrylic polymers
2	polyamides
3	polyanhydrides
4	polycarbonates
5	polydienes
6	metal containing polymers
7	polyesters
8	polyethers
9	halogenated polymers
10	inorganic polymers
11	polyimides
12	polyimines
13	polyketones
14	polyolefins
15	polyphenylenes
16	poly(phosphine oxide)/ polythiophosphines
17	polystyrenes
18	polysulfides/polysulfones/polysulfoxides
19	polysulfates/polysulfonates
20	polysulfonamides
21	polythioketones/polythioesters/polythiocarbonates
22	polythioamides
23	polythioureas/polythiourethanes
24	polythioanhydrides
25	polythioimides
26	polyureas/polyurethanes
27	vinyl polymers
28	condensed-ring aromatic polymers
29	Other polymers

1) L1 の 1~28 項目には、官能基の化学構造が以下の場合を一つの項目にまとめる。

- (a) 化学構造全体が主鎖を形成している場合
- (b)、(c) 官能基の化学構造が環の一部を形成している場合
- (d) 化学構造の一部が他の原子(a, b)と置換している場合



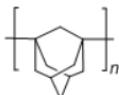
2) L1 の 1~28 の項目に帰属できないポリマーは other polymers に帰属させる。

3) ポリマーの繰り返し単位の化学構造において複数の分類項目がある場合は、それぞれについて分類を行う。

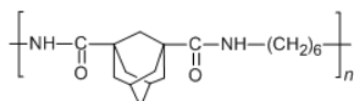
4) 官能基を複数有するポリマーでは、これらの官能基を持つ単独のポリマーに対して分類付けした項目を含めることができない場合がある。

例えば

poly(adamantane) **PID:P310013** は 14. polyolefins に帰属できるが、



PID:P100055 CU formula:C18H28N2O2



では、「飽和脂肪族炭化水素基のみから構成されている」とする olefines の定義から polyolefines には帰属できない。このポリマーは 2. polyamides のみに分類する。

1.2 L2 の各項目についての定義内容

1) **1 acrylic polymer** は、acryloyl 基 (-CH₂-CH₂-C(=)-) に結合する官能基の種類によって aliphatic、aromatic あるいは heterocyclic のいずれかに分類する。

2) **27 vinyl polymer** は、vinylene 基(-CH₂-C(-)H-)に結合する側鎖の官能基の種類によって aliphatic、aromatic あるいは heterocyclic のいずれかに分類する。

3) **6 metal containing polymers**、**9 halogenated polymers**、**10 inorganic polymers**、**15**

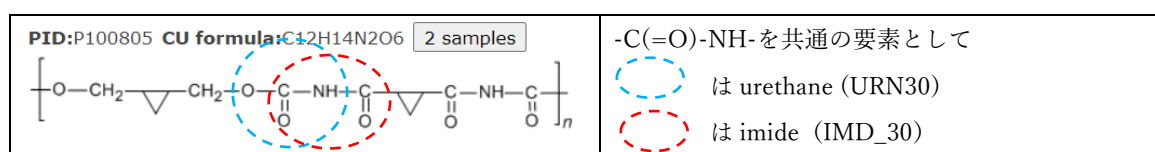
polyphenylenes、17 polystyrenes は、L2 で分類が完結する。

4) 1)、2)、3)を除く L1 の 2~5、7、8、11~13、15、16、18~26、28 の項目は主鎖を構成する官能基の構造によって aliphatic、aromatic あるいは heterocyclic のいずれかに分類する。

(補足)

主鎖に結合した原子の並び方によっては共通の要素を持つ異なる分類項目にすることができる。

例



1.3 L3 繰り返し単位中の側鎖の分類

1) polydienes、polyolefins を除く項目では、側鎖を(Unmodified、aliphatic、aromatic、heterocyclic)の4項目に分類する。

i) Unmodified 繰り返し単位が主鎖だけで構成されている。L2 と同義。

ii) Aliphatic **側鎖に環状構造を含まない場合は、すべて aliphatic とする。**即ち、側鎖が、H、OH、ハロゲン、ヘテロ原子のみの場合も aliphatic とする。なお、D は H と同等に扱った。

iii) Aromatic 側鎖にベンゼン環、ベンゼン環を少なくとも一つ含む縮合多環、あるいはアズレン環(7員環と5員環が縮合)を含む。

(補足) フェロセンは、芳香族性を有するので aromatic に帰属させる。L4 の分類は multi-ring aromatic とした。

iv) Heterocyclic ヘテロ原子を含む環状化合物。

2) Polydienes、polyolefins では、側鎖の有無で分類した。これらは L3 で分類が完結する。

1.4 L4 の分類

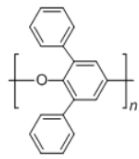
L3 で項目立てした Aliphatic、Aromatic、Heterocyclic の3項目をさらに

- acyclic aliphatic、
- alicyclic aliphatic、
- condensed-ring aromatic、

multiring aromatic、
 single-ring aromatic、
 saturated heterocyclic、
 unsaturated heterocyclic に分類した。

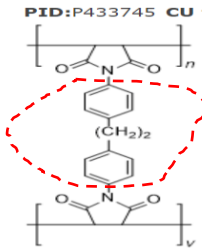
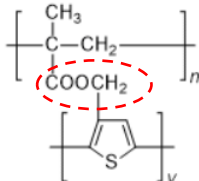
ここで、multiring aromatic、single-ring aromatic の項目は、それぞれの側鎖に含まれるベンゼン環の数とする。

主鎖に含まれる官能基が側鎖を二つ有していてそれぞれの側鎖にベンゼン環が一つずつ含まれる場合は single-ring aromatic に帰属した。

例		<p>主鎖に含まれる phenylene 基は、2 個の phenyl 基を有するが、それぞれの側鎖に 1 個ずつなので single-ring aromatic に帰属した。</p> <p style="text-align: center;">PHN_45</p>
---	---	--

(補足)

繰り返し単位の主鎖同士が共通の側鎖でつながったネットポリマーの場合は、それぞれの主鎖に結合している側鎖全体を分類の対象とした。

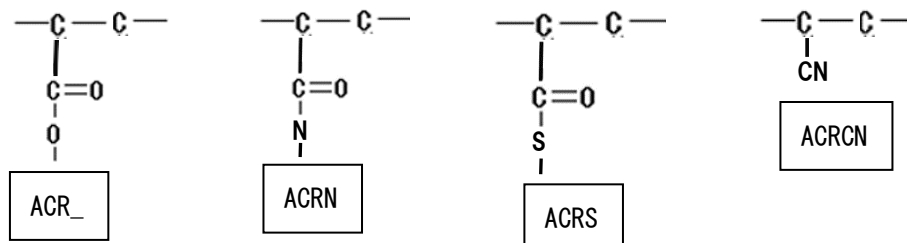
<p>PID:P433745 CU formula</p> 	<p style="text-align: center;">IMDH44</p>
<p>PID:P342644 CU for</p> 	<p style="text-align: center;">ACR_41 VNL_41 SULFIH41</p>

2. L1 各 29 項目の分類するための定義・規則

□内のアルファベットは分類 ID を表す。

2.1 acrylic polymers(アクリリックポリマー)

定義：主鎖は直鎖飽和脂肪族炭化水素基からなり、下記に示す基のうち少なくとも一つが主鎖炭素に直結しているポリマー。

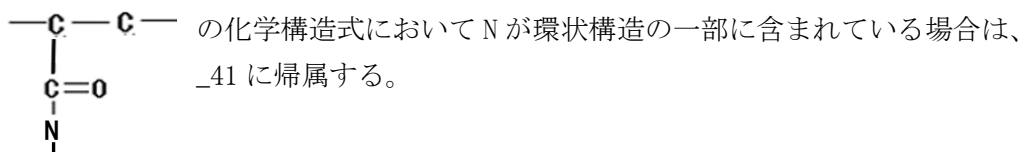


- Polyacrylics を特徴づける基は二つ以上あっても良い。
- Polyacrylics に分類されるポリマーは同時に vinyl polymers にも分類される。

追加した規則

- 側鎖の—C(=O)—(N, O, S)—に水素が結合する場合、L3 の分類は「aliphatic」、L4 では「ACR (, N, S, CN) 41」に帰属させた。従来の分類法では、—COOH は vinyl にのみ分類されている。
- 主鎖が二重結合やヘテロ原子、ベンゼン環を含む場合は、部分的に上記の化学構造式を含んでも acrylic に帰属していない。
- 主鎖のビニル基の一部にハロゲンを含む場合、acrylic に帰属していない。
- 分類の対象は、acryloyl 基の—C(=O)—(N, O, S)—に結合している官能基のみを対象とし、主鎖のビニル基に結合したメチル基などの官能基は VNL_41 のみに帰属する

(補足)ACRN の項目における例外的な規則



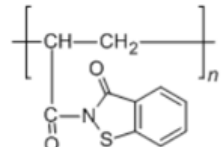
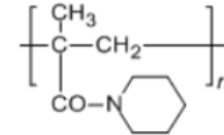
	P330079 ACRN41、VNL_47
	P040327 ACRN41、VNL_41、VNL_46

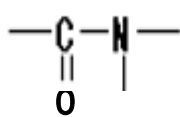
表 2.1 acrylic polymers の分類項目

No	L1	L2	L3	L4)	ID				
acrylic polymers ACR1	unmodified	ACR_2	aliphatic	ACR_31	acyclic aliphatic	ACR_41	ACR_41		
					alicyclic aliphatic	ACR_42	ACR_42		
			aromatic	ACR_32	condensed-ring aromatic	ACR_43	ACR_43		
					multiring aromatic	ACR_44	ACR_44		
					single-ring aromatic	ACR_45	ACR_45		
			heterocyclic	ACR_33	saturated heterocyclic	ACR_46	ACR_46		
					unsaturated heterocyclic	ACR_47	ACR_47		
		N-substituted	ACRN2	aliphatic	ACRN31	acyclic aliphatic	ACRN41	ACRN41	
							alicyclic aliphatic	ACRN42	ACRN42
				aromatic	ACRN32	condensed-ring aromatic	ACRN43	ACRN43	
						multiring aromatic	ACRN44	ACRN44	
						single-ring aromatic	ACRN45	ACRN45	
				heterocyclic	ACRN33	saturated heterocyclic	ACRN46	ACRN46	
						unsaturated heterocyclic	ACRN47	ACRN47	
	S-substituted	ACRS2	aliphatic	ACRS31	acyclic aliphatic	ACRS41	ACRS41		
						alicyclic aliphatic	ACRS42	ACRS42	
			aromatic	ACRS32	condensed-ring aromatic	ACRS43	ACRS43		
					multiring aromatic	ACRS44	ACRS44		
					single-ring aromatic	ACRS45	ACRS45		
			heterocyclic	ACRS33	saturated heterocyclic	ACRS46	ACRS46		
					unsaturated heterocyclic	ACRS47	ACRS47		
			CN-substituted	ACRCN2	unmodified	ACRCN30		ACRCN30	
					aliphatic	ACRCN31	acyclic aliphatic	ACRCN41	ACRCN41
								alicyclic aliphatic	ACRCN42
	aromatic	ACRCN32			condensed-ring aromatic	ACRCN43	ACRCN43		
					multiring aromatic	ACRCN44	ACRCN44		
					single-ring aromatic	ACRCN45	ACRCN45		
	heterocyclic	ACRCN33			saturated heterocyclic	ACRCN46	ACRCN46		
unsaturated heterocyclic			ACRCN47	ACRCN47					

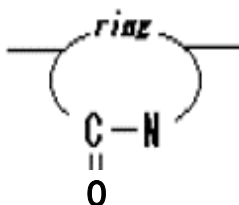
注) 分類 ID の下二けたの数字において「30」は、側鎖を有さないことを意味する。
以下の表においても同様である。

2.2 polyamides (ポリアミド)

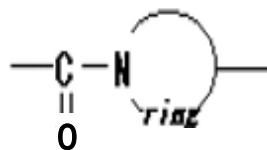
定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。



AMD_



AMDH



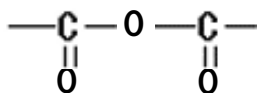
AMDT

ただし、これらの部分構造が下記のポリマー系を特徴付ける原子団の中に含まれる場合を除く。

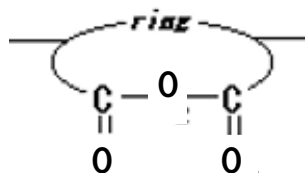
Polyurethanes >N-CO-O- 中の >N-CO- など

Polyureas >N-CO-N< 中の >N-CO- など

Polyimides -CO-N-CO- 中の >N-CO- など



ANH_



ANHH

表 2.2 polyamides の分類項目

No	L1	L2		L3		L4)		ID		
2	polyamides AMD1	unmodified linear	AMD_2	unmodified	AMD_30			AMD_30		
						aliphatic	AMD_31	acyclic aliphatic	AMD_41	AMD_41
				alicyclic aliphatic	AMD_42			AMD_42		
				aromatic	AMD_32	condensed-ring aromatic	AMD_43	AMD_43		
						multiring aromatic	AMD_44	AMD_44		
						single-ring aromatic	AMD_45	AMD_45		
				heterocyclic	AMD_33	saturated heterocyclic	AMD_46	AMD_46		
						unsaturated heterocyclic	AMD_47	AMD_47		
				heterocyclic	AMDH2	unmodified	AMDH30			AMDH30
								aliphatic	AMDH31	acyclic aliphatic
						alicyclic aliphatic	AMDH42			AMDH42
						aromatic	AMDH32	condensed-ring aromatic	AMDH43	AMDH43
								multiring aromatic	AMDH44	AMDH44
								single-ring aromatic	AMDH45	AMDH45
		heterocyclic	AMDH33			saturated heterocyclic	AMDH46	AMDH46		
						unsaturated heterocyclic	AMDH47	AMDH47		
		partially heterocyclic	AMDT2			unmodified	AMDT30			AMDT30
								aliphatic	AMDT31	acyclic aliphatic
						alicyclic aliphatic	AMDT42			AMDT42
						aromatic	AMDT32	condensed-ring aromatic	AMDT43	AMDT43
								multiring aromatic	AMDT44	AMDT44
								single-ring aromatic	AMDT45	AMDT45
				heterocyclic	AMDT33	saturated heterocyclic	AMDT46	AMDT46		
						unsaturated heterocyclic	AMDT47	AMDT47		

2.3 polyanhydrides (ポリ酸無水物)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。

表 2.3 polyanhydrides の分類項目

No	L1	L2		L3		L4)		ID	
3	polyanhydrides ANH1	unmodified linear	ANH_2	unmodified	ANH_30			ANH_30	
				aliphatic	ANH_31	acyclic aliphatic		ANH_41	ANH_41
						alicyclic aliphatic		ANH_42	ANH_42
				aromatic	ANH_32	condensed-ring aromatic		ANH_43	ANH_43
						multiring aromatic		ANH_44	ANH_44
						single-ring aromatic		ANH_45	ANH_45
				heterocyclic	ANH_33	saturated heterocyclic		ANH_46	ANH_46
		unsaturated heterocyclic				ANH_47	ANH_47		
		heterocyclic	ANHH2	unmodified	ANHH30			ANHH30	
				aliphatic	ANHH31			ANHH41	ANHH41
						acyclic aliphatic		ANHH42	ANHH42
				aromatic	ANHH32	condensed-ring aromatic		ANHH43	ANHH43
						multiring aromatic		ANHH44	ANHH44
						single-ring aromatic		ANHH45	ANHH45
heterocyclic	ANHH33			saturated heterocyclic		ANHH46	ANHH46		
		unsaturated heterocyclic		ANHH47	ANHH47				

2.4 polycarbonates (ポリカーボネート)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。

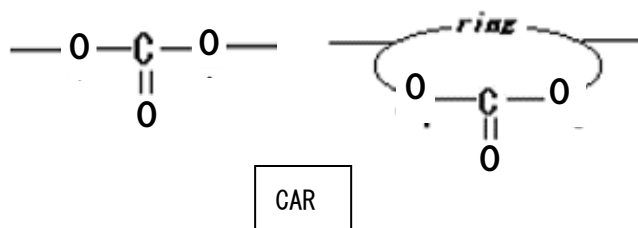


表 2.4 polycarbonates の分類項目

No	L1	L2		L3		L4		ID
4	polycarbonates CAR1	polycarbonates	CAR2	unmodified	CAR_30			CAR_30
				aliphatic	CAR_31	acyclic aliphatic	CAR_41	CAR_41
						alicyclic aliphatic	CAR_42	CAR_42
				aromatic	CAR_32	condensed-ring aromatic	CAR_43	CAR_43
						multiring aromatic	CAR_44	CAR_44
						single-ring aromatic	CAR_45	CAR_45
				heterocyclic	CAR_33	saturated heterocyclic	CAR_46	CAR_46
						unsaturated heterocyclic	CAR_47	CAR_47

2.5 polydienes (ポリジエン)

定義：脂肪族炭化水素基からなり、主鎖上または側鎖上に二重結合 C=C または三重結合 C≡C を一つ以上有するポリマー。(不飽和脂肪族炭化水素基を一つ以上含むもの。)

- ・主鎖にハロゲンが直結してもよい。
- ・主鎖中に不飽和脂肪族環状炭化水素基を含むものもここに含まれる。
- ・ベンゼン環がないものだけを対象としている。例えば、fluorene は対象外とする。
- ・_30 と_31 の判別は、acyclic、alicyclic どちらの基に結合しているということにかかわらず、側鎖の有無で判断する。

表 2.5 polydienes の分類項目

No	L1	L2		L3		L4		ID
5	polydienes DIE1	acyclic	DIE_2	unmodified	DIE_30			DIE_30
				pendant group-modified	DIE_31			DIE_31
		alicyclic	DIEC2	unmodified	DIEC30			DIEC30
				pendant group-modified	DIEC31			DIEC31

例)

	<p>側鎖を持つ脂肪族炭化水素で、主鎖に不飽和脂環炭化水素を持つ。</p> <p>⇒polydiene (DIEC31)</p>
	<p>側鎖を持つ脂肪族炭化水素で、主鎖に飽和脂環炭化水素を持つ。</p> <p>⇒polydiene (DIEC31)</p>

2.6 metal containing polymers(金属含有ポリマー)

定義：主鎖中にSb、As、B、Ge、Pb、Hg、Se、Te、Sn、P、Siを含むポリマー。

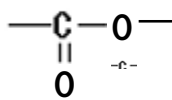
- ・主鎖にこれらの金属と炭化水素やヘテロ化合物を含むポリマーを対象とし、主鎖がこれらの金属だけで構成されている場合は、Inorganic polymer に帰属する。
- ・分類の項目に挙げた 11 種類の金属以外の金属は、分類の対象外とした。

表 2.6 metal containing polymers の分類項目

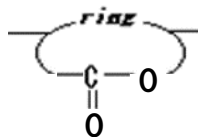
No	L1	L2		L3		L4		ID
6	metal containing polymers MTL1	Antimony (Sb)-containing	MTL21					MTL21
		Arsenic (As)-containing	MTL22					MTL22
		Boron (B)-containing	MTL23					MTL23
		Germanium (Ge)-containing	MTL24					MTL24
		Lead (Pb)-containing	MTL25					MTL25
		Mercury (Hg)-containing	MTL26					MTL26
		Selenium (Se)-containing	MTL27					MTL27
		Tellurium (Te)-containing	MTL28					MTL28
		Tin (Sn)-containing	MTL29					MTL29
		Phosphorus (P)-containing	MTL210					MTL210
		Silicon (Si)-containing	MTL211					MTL211

2.7 polyesters (ポリエステル)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。



ESL_



ESLH

ただし、これらの部分構造が下記のポリマー系を特徴付ける原子団の中に含まれる場合を除く。

Polyurethanes >N-CO-O-中の -CO-O- など

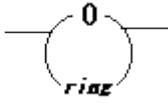
Polyanhydrides -CO-O-CO-中の -CO-O- など

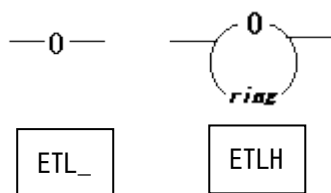
Polycarbonates -O-CO-O-中の -CO-O- など

表 2.7 polyesters の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID	
7	polyesters ESL1	unmodified linear	ESL_2	unmodified	ESL_30			ESL_30
				aliphatic	ESL_31	acyclic aliphatic	ESL_41	ESL_41
			alicyclic aliphatic			ESL_42	ESL_42	
			aromatic	ESL_32	condensed-ring aromatic	ESL_43	ESL_43	
					multiring aromatic	ESL_44	ESL_44	
					single-ring aromatic	ESL_45	ESL_45	
			heterocyclic	ESL_33	saturated heterocyclic	ESL_46	ESL_46	
		unsaturated heterocyclic			ESL_47	ESL_47		
		heterocyclic	ESLH2	unmodified	ESLH30			ESLH30
						aliphatic	ESLH31	acyclic aliphatic
			alicyclic aliphatic	ESLH42	ESLH42			
			aromatic	ESLH32	condensed-ring aromatic	ESLH43	ESLH43	
					multiring aromatic	ESLH44	ESLH44	
					single-ring aromatic	ESLH45	ESLH45	
heterocyclic	ESLH33		saturated heterocyclic	ESLH46	ESLH46			
		unsaturated heterocyclic	ESLH47	ESLH47				

2.8 polyethers (ポリエーテル)

定義：-O-や  を含む環構造を主鎖中に含むポリマー。



ただし、これらの部分構造が下記のポリマー系を特徴付ける原子団の中に含まれる場合を除く。

- Polyesters -CO-O- 中の -O- など
- Polyurethanes >N-CO-O- 中の -O- など
- Polyanhydrides -CO-O-CO- 中の -O- など
- Polycarbonates -O-CO-O- 中の -O- など
- Polysulfones -SO₂-O- 中の -O- など

表 2.8 polyethers の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID
8	polyethers ETL1	unmodified linear	ETL2	unmodified	ETL_30		ETL_30
				aliphatic	ETL_31	acyclic aliphatic	ETL_41
			aromatic	ETL_32	alicyclic aliphatic	ETL_42	ETL_42
					condensed-ring aromatic	ETL_43	ETL_43
					multiring aromatic	ETL_44	ETL_44
			heterocyclic	ETL_33	single-ring aromatic	ETL_45	ETL_45
					saturated heterocyclic	ETL_46	ETL_46
		unsaturated heterocyclic	ETL_47	ETL_47			
		heterocyclic	ETLH2	unmodified	ETLH30		ETLH30
				aliphatic	ETLH31	acyclic aliphatic	ETLH41
			alicyclic aliphatic			ETLH42	ETLH42
			aromatic	ETLH32	condensed-ring aromatic	ETLH43	ETLH43
					multiring aromatic	ETLH44	ETLH44
					single-ring aromatic	ETLH45	ETLH45
heterocyclic	ETLH33		saturated heterocyclic	ETLH46	ETLH46		
		unsaturated heterocyclic	ETLH47	ETLH47			

2.9 halogenated polymers (ハロゲン含有ポリマー)

定義：ハロゲン含有ポリマーの分類では、polyolefine とこれ以外のポリマーの二つの項目に分ける。

HAL21：

飽和脂肪族炭化水素基のみから構成されているポリマー (Polyolefins)が有する水素のうち、少なくとも一つがハロゲンに置換されているポリマー

- ・ハロゲンが主鎖に結合している水素と置換している場合
- ・ハロゲンが側鎖に結合している水素と置換している場合
- ・ハロゲンが主鎖に直結している水素と置換した—CH₂—CHX—のみ vinyl polymers にも分類される。(VNL_41)

HAL22：

ヘテロ原子や多重結合を含む直鎖炭化水素基からなる主鎖に少なくとも一つのハロゲンが直結しているポリマー。

注：halogenated polymers の分類以外では、主鎖の官能基に結合したハロゲンは、側鎖とみなし_41 に分類する。

表 2.9 halogenated polymers の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID
9	halogenated polymers	halogenated polyolefins	HAL21				HAL21
	HAL1	other halogenated polymers	HAL22				HAL22

[分類例]

$\begin{array}{c} \cdot\text{CH} \text{---} \text{CH} \cdot \\ \qquad \qquad \\ \text{O}(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3 \quad \text{Cl} \end{array}$	<p>繰り返し単位中にヘテロ原子 (O) が含まれているので olefine ではない。 ⇒HAL_22</p>
$\begin{array}{c} \cdot\text{CH} \text{---} \text{CH}_2 \cdot \\ \\ \text{CF}_3 \end{array}$	<p>Olefine の水素にハロゲンが置換している。VNL には 帰属しない。 ⇒HAL_21</p>
	<p>ベンゼン環に結合したFは主鎖に直結していないので 分類の対象外。主鎖に結合したFのみ分類の対象である。 ⇒HAL22、ETL_30、PHN_41</p>
$\begin{array}{c} \\ \text{---C=C---} \\ \end{array}$	<p>主鎖に二重結合が含まれるので olefine ではない。 ⇒HAL22、DIE_31</p>

2.10 inorganic polymers(無機高分子)

定義：主鎖が炭素以外の元素からなるポリマー。“element-organic polymer”と同義である。

具体的には下記の部分構造が挙げられる。

polyphosphazene (-P=N-)

INPN

polysilane (-Si-)

INSi

polysilazane (-Si-N-)

INSiN

polysiloxane (-Si-O-)

INSiO

- 主鎖に炭化水素と共に、部分的にこれらの element を含んでいる場合は inorganic polymer ではなく **metal containing polymer** に帰属させる。

表 2.10 inorganic polymers の分類項目

No	L1	L2	L3	L4	ID			
10	inorganic polymers IN1	polyphosphazenes	NPN2	unmodified	NPN30		NPN30	
				aliphatic	NPN31	acyclic aliphatic	NPN41	NPN41
			alicyclic aliphatic			NPN42	NPN42	
			aromatic	NPN32	condensed-ring aromatic	NPN43	NPN43	
					multiring aromatic	NPN44	NPN44	
					single-ring aromatic	NPN45	NPN45	
			heterocyclic	NPN33	saturated heterocyclic	NPN46	NPN46	
					unsaturated heterocyclic	NPN47	NPN47	
			polysilanes	NSi2	unmodified	NSi30		NSi30
					aliphatic	NSi31	acyclic aliphatic	NSi41
				alicyclic aliphatic			NSi42	NSi42
				aromatic	NSi32	condensed-ring aromatic	NSi43	NSi43
		multiring aromatic				NSi44	NSi44	
		single-ring aromatic				NSi45	NSi45	
		heterocyclic		NSi33	saturated heterocyclic	NSi46	NSi46	
					unsaturated heterocyclic	NSi47	NSi47	
		polysilazanes		NSiN2	unmodified	NSiN30		NSiN30
					aliphatic	NSiN31	acyclic aliphatic	NSiN41
				alicyclic aliphatic			NSiN42	NSiN42
				aromatic	NSiN32	condensed-ring aromatic	NSiN43	NSiN43
			multiring aromatic			NSiN44	NSiN44	
			single-ring aromatic			NSiN45	NSiN45	
			heterocyclic	NSiN33	saturated heterocyclic	NSiN46	NSiN46	
					unsaturated heterocyclic	NSiN47	NSiN47	
			polysiloxanes	NSiO2	unmodified	NSiO30		NSiO30
					aliphatic	NSiO31	acyclic aliphatic	NSiO41
				alicyclic aliphatic			NSiO42	NSiO42
				aromatic	NSiO32	condensed-ring aromatic	NSiO43	NSiO43
		multiring aromatic				NSiO44	NSiO44	
		single-ring aromatic				NSiO45	NSiO45	
		heterocyclic		NSiO33	saturated heterocyclic	NSiO46	NSiO46	
					unsaturated heterocyclic	NSiO47	NSiO47	

2.11 polyimides (ポリイミド)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。

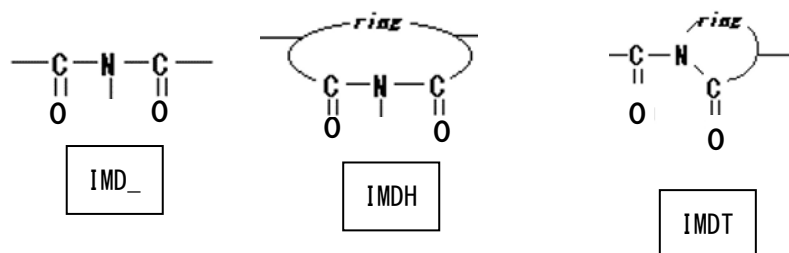
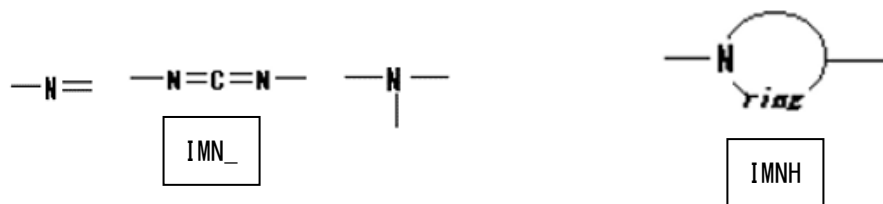


表 2.11 polyimides の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID			
11	polyimides IMD1	unmodified linear	MD_2	unmodified	MD_30			MD_30		
				aliphatic	MD_31	acyclic aliphatic	MD_41	MD_41		
			alicyclic aliphatic			MD_42	MD_42			
			aromatic	MD_32	condensed-ring aromatic	MD_43	MD_43			
					multiring aromatic	MD_44	MD_44			
					single-ring aromatic	MD_45	MD_45			
			heterocyclic	MD_33	saturated heterocyclic	MD_46	MD_46			
					unsaturated heterocyclic	MD_47	MD_47			
			heterocyclic	MDH2	MDH30	unmodified	MDH30			MDH30
						aliphatic	MDH31	acyclic aliphatic	MDH41	MDH41
				alicyclic aliphatic	MDH42			MDH42		
				aromatic	MDH32	condensed-ring aromatic	MDH43	MDH43		
		multiring aromatic				MDH44	MDH44			
		single-ring aromatic				MDH45	MDH45			
		heterocyclic		MDH33	saturated heterocyclic	MDH46	MDH46			
					unsaturated heterocyclic	MDH47	MDH47			
		partially heterocyclic		MDT2	MDT30	unmodified	MDT30			MDT30
						aliphatic	MDT31	acyclic aliphatic	MDT41	MDT41
				alicyclic aliphatic	MDT42			MDT42		
				aromatic	MDT32	condensed-ring aromatic	MDT43	MDT43		
			multiring aromatic			MDT44	MDT44			
			single-ring aromatic			MDT45	MDT45			
			heterocyclic	MDT33	saturated heterocyclic	MDT46	MDT46			
					unsaturated heterocyclic	MDT47	MDT47			

2.12 polyimines (ポリイミン)

定義：主鎖中に C=N=を含む下記のような部分構造を含むポリマー。



ただし、これらの部分構造が下記のポリマー系を特徴付ける原子団の中に含まれる場合を除く。

Polyamides CO-N< 中の -N< など

Polyurethanes >N-CO-O- 中の -N< など

Polyureas >N-CO-N< 中の -N< など

Polyimides -CO-N-CO- 中の -N< など

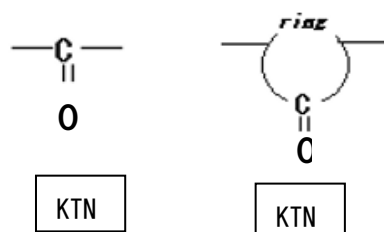
Polysulfones/sulfoxides/sulfonates/sulfoamides -SO2-N< 中の -N< など

表 2.12 polyimines の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID				
No	L1	L2	unmodified linear	L3	L4	ID	No	L1			
									aliphatic	MN_31	acyclic aliphatic
						alicyclic aliphatic	MN_42	MN_42			
				aromatic	MN_32	condensed-ring aromatic	MN_43	MN_43			
						multiring aromatic	MN_44	MN_44			
						single-ring aromatic	MN_45	MN_45			
				heterocyclic	MN_33	saturated heterocyclic	MN_46	MN_46			
						unsaturated heterocyclic	MN_47	MN_47			
				polyimines IMN1	heterocyclic polyimines	MNH2	unmodified	MNH30			MNH30
							aliphatic	MNH31	acyclic aliphatic	MNH41	MNH41
		alicyclic aliphatic	MNH42						MNH42		
		aromatic	MNH32				condensed-ring aromatic	MNH43	MNH43		
							multiring aromatic	MNH44	MNH44		
							single-ring aromatic	MNH45	MNH45		
		heterocyclic	MNH33				saturated heterocyclic	MNH46	MNH46		
				unsaturated heterocyclic	MNH47	MNH47					

2.13 polyketones (ポリケトン)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。



ただし、これらの部分構造が下記のポリマー系を特徴付ける原子団の中に含まれる場合を除く。

- Polyesters -CO-O- 中の -CO- など
- Polyamides -CO-N< 中の -CO- など
- Polyurethanes >N-CO-O- 中の -CO- など
- Polyureas >N-CO-N< 中の -CO- など
- Polyimides -CO-N-CO- 中の -CO- など
- Polyanhydrides -CO-O-CO- 中の -CO- など
- Polycarbonates -O-CO-O- 中の -CO- など

表 2.13 polyketones の分類項目

No	L1	L2	L3	L4	ID			
13	polyketones KTN1	unmodified linear	unmodified	KTN_2	KTN_30	KTN_30		
			aliphatic	KTN_31	acyclic aliphatic	KTN_41	KTN_41	
					alicyclic aliphatic	KTN_42	KTN_42	
			aromatic	KTN_32	condensed-ring aromatic	KTN_43	KTN_43	
					multiring aromatic	KTN_44	KTN_44	
					single-ring aromatic	KTN_45	KTN_45	
			heterocyclic	KTN_33	saturated heterocyclic	KTN_46	KTN_46	
					unsaturated heterocyclic	KTN_47	KTN_47	
		cyclic	KTNC2	unmodified	KTNC30	KTNC30		
				aliphatic	KTNC31	acyclic aliphatic	KTNC41	KTNC41
						alicyclic aliphatic	KTNC42	KTNC42
				aromatic	KTNC32	condensed-ring aromatic	KTNC43	KTNC43
						multiring aromatic	KTNC44	KTNC44
						single-ring aromatic	KTNC45	KTNC45
heterocyclic	KTNC33			saturated heterocyclic	KTNC46	KTNC46		
				unsaturated heterocyclic	KTNC47	KTNC47		

2.14 polyolefins (ポリオレフィン)

定義：飽和脂肪族炭化水素基のみから構成されている（ポリマー中に炭素、水素以外の原子が含まれない）ポリマー。

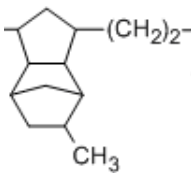
L2では、主鎖が直鎖か環状であるかによって分類し、それぞれについて側鎖の有無によってさらに分類する。

- ・不飽和炭素結合を含むものはここに含めていない。
- ・主鎖に直鎖と環状の両方のオレフィンを含む場合は環状としてアサインする。

表 2.14 polyolefins の分類項目

No	L1	L2		L3		L4		ID
14	polyolefins OLF1	acyclic	OLF_2	Unmodified	OLF_30			OLF_30
				pendant group-modified	OLF_31			OLF_31
		alicyclic	OLFC2	Unmodified	OLFC30			OLFC30
				pendant group-modified	OLFC31			OLFC31

[例]

	<p>直鎖と環状のオレフィンの両方を含む場合は alicyclic に帰属する。</p> <p>⇒OLFC_41</p>
---	--

2.15 polyphenylenes (ポリフェニレン)

定義：主鎖中に **phenylene** 基を含むポリマー。

具体的には 1,4-phenylene、1,3-phenylene、1,2-phenylene を主鎖に含むポリマー。

- ・主鎖中に **phenylene** 基以外の原子が含まれても対象とする。

表 2.15 polyphenylenes の分類項目

No	L1	L2		L3		L4		ID
15	polyphenylenes PHN1	polyphenylene	PHN_2	unmodified	PHN_30			PHN_30
				aliphatic	PHN_31	acyclic aliphatic	PHN_41	PHN_41
						alicyclic aliphatic	PHN_42	PHN_42
				aromatic	PHN_32	condensed-ring aromatic	PHN_43	PHN_43
						multiring aromatic	PHN_44	PHN_44
						single-ring aromatic	PHN_45	PHN_45
				heterocyclic	PHN_33	saturated heterocyclic	PHN_46	PHN_46
						unsaturated heterocyclic	PHN_47	PHN_47

2.16 poly(phosphane oxide)/poly(phosphane sulfide) (ポリフォスファンオキシド/ポリフォスファンサルフィド)

定義：主鎖中に直鎖—P—を含む以下の基を少なくとも一つ含むポリマー。

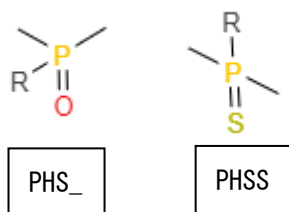


表 2.16 poly(phosphane oxide)/poly(phosphane sulfide) の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID		
16	aliphatic poly(phosphane oxide) /poly(phosphane sulfide) PHS1	poly(phosphane oxide)	PHS2	unmodified	PHS_30			PHS_30	
				aliphatic	PHS_31	acyclic aliphatic		PHS_41	PHS_41
						alicyclic aliphatic		PHS_42	PHS_42
				aromatic	PHS_32	condensed-ring aromatic		PHS_43	PHS_43
						multiring aromatic		PHS_44	PHS_44
						single-ring aromatic		PHS_45	PHS_45
				heterocyclic	PHS_33	saturated heterocyclic		PHS_46	PHS_46
		unsaturated heterocyclic				PHS_47	PHS_47		
		poly(phosphane sulfide)	PHSS2	unmodified	PHSS30			PHSS30	
				aliphatic	PHSS31	acyclic aliphatic		PHSS41	PHSS41
						alicyclic aliphatic		PHSS42	PHSS42
				aromatic	PHSS32	condensed-ring aromatic		PHSS43	PHSS43
						multiring aromatic		PHSS44	PHSS44
						single-ring aromatic		PHSS45	PHSS45
heterocyclic	PHSS33			saturated heterocyclic		PHSS46	PHSS46		
		unsaturated heterocyclic		PHSS47	PHSS47				

2.17 polystyrenes (ポリスチレン)

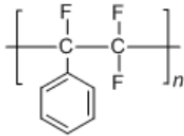
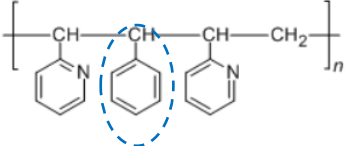
定義：主鎖は飽和脂肪族炭化水素基からなり、主鎖炭素中の少なくとも一つに芳香環が直結しているポリマー。

- ・主鎖にハロゲンが結合していない。
- ・ヘテロ環は含まない。
- ・Polystyrenes に分類されるポリマーは同時に Vinyl polymers に分類される。

表 2.17 polystyrenes (ポリスチレン) の分類項目

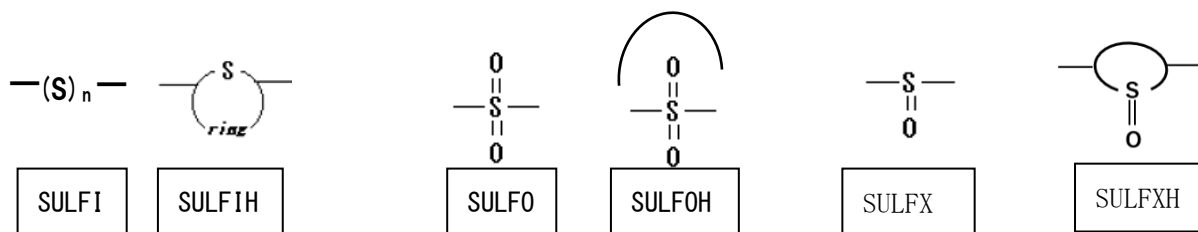
No	L1	L2	L3		L4		ID	
17	polystyrenes STY1	polystyrenes	STY_2	unmodified	STY_30		STY_30	
				aliphatic	STY_31	acyclic aliphatic	STY_41	STY_41
						alicyclic aliphatic	STY_42	STY_42
				aromatic	STY_32	condensed-ring aromatic	STY_43	STY_43
						multiring aromatic	STY_44	STY_44
						single-ring aromatic	STY_45	STY_45
				heterocyclic	STY_33	saturated heterocyclic	STY_46	STY_46
						unsaturated heterocyclic	STY_47	STY_47

例)

<p>PID:P020153 CU formula:C8H5F3</p> 	<p>主鎖にハロゲンが結合しているため STY にはアサインしない。</p> <p>⇒HAL22</p>
<p>1. poly[(2-styrylpyridine)-alt-(2-vinylpyridine)] PID:P020194 CU formula:C20H18N2 2 samples</p> 	<p>主鎖は直鎖炭化水素基なので側鎖にベンゼン環を含む官能基を STY に帰属できる。</p> <p>⇒STY_30 VNL_45、VNL_47</p>

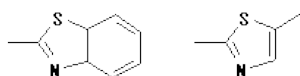
2.18 polysulfides/polysulfones/polysulfoxides (ポリスルフィド/ポリスルホン/ポリスルホキシド)

定義：主鎖中に—S—を含む以下の基を少なくとも一つ含むポリマー。



ただし、これらの部分構造が下記のポリマー系を特徴付ける原子団の中に含まれる場合を除く。

- thioester -CO-S- 中の -S- など
- thiourethanes >N-CO-S- 中の -S- など
- thioanhydrides -CO-S-CO- 中の -S- など
- thiocarbonates -O-CO-S- 中の -S- など
- ・主鎖中の Si の両端にある S は Polysulfides の S とみなす。
- ・以下に示す部分構造が含まれる場合は Polysulfides および Polyimides に分類される。



[例]

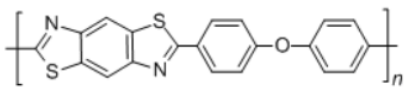
<p>PID:P070703 CU formula:C20H10N2O</p> 	<p>⇒IMNH30、SULFIH30、ETL_30、PHN_30</p>
--	---------------------------------------

表 2.18 polysulfides/polysulfones/polysulfoxides (ポリスルフィド/ポリスルホン/
ポリスルホキシド) の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID			
1	polysulfides /polysulfones /polysulfoxides (主鎖に-Sを 含む) SULF1	linear polysulfides	SULFI2				SULFI2			
		heterocyclic polysulfides	SULFIH2	unmodified	SULFIH30			SULFIH30		
				aliphatic	SULFIH31	acyclic aliphatic	SULFIH41	SULFIH41		
						alicyclic aliphatic	SULFIH42	SULFIH42		
				aromatic	SULFIH32	condensed-ring aromatic	SULFIH43	SULFIH43		
						multiring aromatic	SULFIH44	SULFIH44		
						single-ring aromatic	SULFIH45	SULFIH45		
				heterocyclic	SULFIH33	saturated heterocyclic	SULFIH46	SULFIH46		
						unsaturated heterocyclic	SULFIH47	SULFIH47		
				linear polysulfones	SULFO2					SULFO2
				heterocyclic polysulfones	SULFH2	unmodified	SULFH30			SULFH30
		aliphatic	SULFH31			acyclic aliphatic	SULFH41	SULFH41		
						alicyclic aliphatic	SULFH42	SULFH42		
		aromatic	SULFH32			condensed-ring aromatic	SULFH43	SULFH43		
						multiring aromatic	SULFH44	SULFH44		
						single-ring aromatic	SULFH45	SULFH45		
		heterocyclic	SULFH33			saturated heterocyclic	SULFH46	SULFH46		
						unsaturated heterocyclic	SULFH47	SULFH47		
		linear polysulfoxides	SULFX2							SULFX2
		heterocyclic polysulfoxides	SULFXH 2			unmodified	SULFXH30			SULFXH30
				aliphatic	SULFXH31	acyclic aliphatic	SULFXH41	SULFXH41		
						alicyclic aliphatic	SULFXH42	SULFXH42		
				aromatic	SULFXH32	condensed-ring aromatic	SULFXH43	SULFXH43		
						multiring aromatic	SULFXH44	SULFXH44		
single-ring aromatic	SULFXH45					SULFXH45				
heterocyclic	SULFXH33			saturated heterocyclic	SULFXH46	SULFXH46				
				unsaturated heterocyclic	SULFXH47	SULFXH47				

2.19 polysulfates/polysulfonates (ポリスルフェイト/ポリスルホネイト)

定義：主鎖中に—S—O—を含む以下の基を少なくとも一つ含むポリマー。

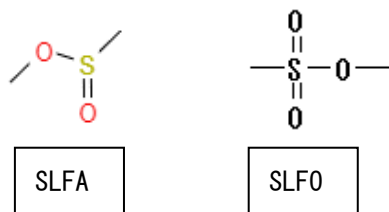


表 2.19 polysulfates/polysulfonates の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID
19	polysulfates /polysulfonates (主鎖に —S—O—を含む) SLF1	polysulfates	SLFA2	unmodified	SLFA30		SLFA30
				aliphatic	SLFA31	acyclic aliphatic	SLFA41
			alicyclic aliphatic			SLFA42	SLFA42
			aromatic	SLFA32	condensed-ring aromatic	SLFA43	SLFA43
					multiring aromatic	SLFA44	SLFA44
					single-ring aromatic	SLFA45	SLFA45
			heterocyclic	SLFA33	saturated heterocyclic	SLFA46	SLFA46
		unsaturated heterocyclic			SLFA47	SLFA47	
		polysulfonates	SLFO2	unmodified	SLFO30		SLFO30
				aliphatic	SLFO31	acyclic aliphatic	SLFO41
			alicyclic aliphatic			SLFO42	SLFO42
			aromatic	SLFO32	condensed-ring aromatic	SLFO43	SLFO43
					multiring aromatic	SLFO44	SLFO44
					single-ring aromatic	SLFO45	SLFO45
heterocyclic	SLFO33		saturated heterocyclic	SLFO46	SLFO46		
		unsaturated heterocyclic	SLFO47	SLFO47			

2.20 polysulfonamides (ポリスルホンアミド)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。

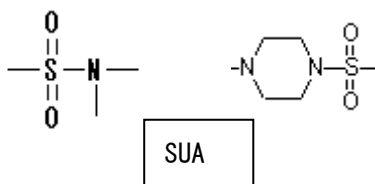


表 2.20 polysulfonamides (ポリスルホンアミド) の分類項目

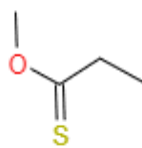
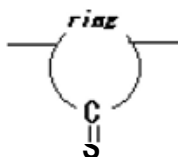
No	L1	L2		L3		L4		ID
20	polysulfonamides SUA1	polysulfonamides	SUA_2	unmodified	SUA_30			SUA_30
				aliphatic	SUA_31	acyclic aliphatic	SUA_41	SUA_41
						alicyclic aliphatic	SUA_42	SUA_42
				aromatic	SUA_32	condensed-ring aromatic	SUA_43	SUA_43
						multiring aromatic	SUA_44	SUA_44
						single-ring aromatic	SUA_45	SUA_45
				heterocyclic	SUA_33	saturated heterocyclic	SUA_46	SUA_46
						unsaturated heterocyclic	SUA_47	SUA_47

2.21 polythioketones/polythioesters/polythiocarbonates (ポリチオケトン/ポリチオエステル/ポリチオカーボネート)

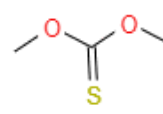
定義：主鎖中に-C(=S)-、または-C(=S)-O-を含む以下の部分構造を含むポリマー。



TKN

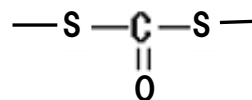
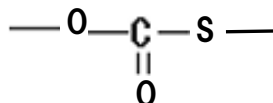
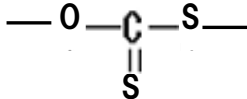
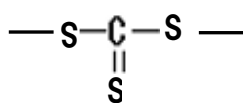


TES



TCA

TCAには以下の構造式も含まれる。



TCA

ただし、これらの部分構造が下記のポリマー系を特徴付ける原子団の中に含まれる場合を除く。

Polythioamides -CS-N< 中の -CS- など

Polythiourethanes >N-CS-O- 中の -CS- など

Polythioureas >N-CS-N< 中の -CS- など

Polythioimides -CS-N-CS- 中の -CS- など

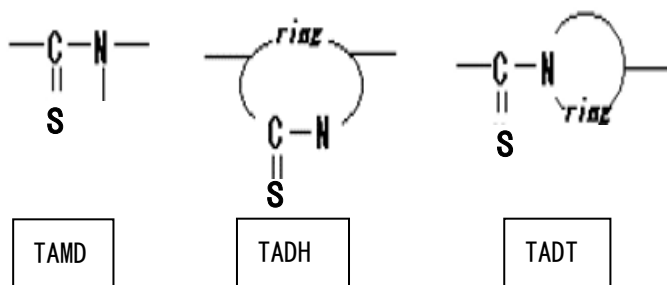
Polythioanhydrides -CS-O-CS- 中の -CS- など

表 2.21 polythioketones/polythioesters/polythiocarbonates の分類項目

No	L1	L2		L3		L4		ID	
21	polythioketones /polythioesters /polythiocarbonates (少なくとも一つのOがSと置換している) T1	polythioketones	TKN2	unmodified	TKN30			TKN30	
				aliphatic	TKN31	acyclic aliphatic	TKN41	TKN41	
						alicyclic aliphatic	TKN42	TKN42	
				aromatic	TKN32	condensed-ring aromatic	TKN43	TKN43	
						multiring aromatic	TKN44	TKN44	
						single-ring aromatic	TKN45	TKN45	
			heterocyclic	TKN33	saturated heterocyclic	TKN46	TKN46		
					unsaturated heterocyclic	TKN47	TKN47		
			polythioesters	TES2	unmodified	TES30			TES30
					aliphatic	TES31	acyclic aliphatic	TES41	TES41
							alicyclic aliphatic	TES42	TES42
		aromatic			TES32	condensed-ring aromatic	TES43	TES43	
						multiring aromatic	TES44	TES44	
						single-ring aromatic	TES45	TES45	
		heterocyclic		TES33	saturated heterocyclic	TES46	TES46		
					unsaturated heterocyclic	TES47	TES47		
		polythiocarbonates		TCA2	unmodified	TCA30			TCA30
					aliphatic	TCA31	acyclic aliphatic	TCA41	TCA41
							alicyclic aliphatic	TCA42	TCA42
			aromatic		TCA32	condensed-ring aromatic	TCA43	TCA43	
						multiring aromatic	TCA44	TCA44	
						single-ring aromatic	TCA45	TCA45	
			heterocyclic	TCA33	saturated heterocyclic	TCA46	TCA46		
					unsaturated heterocyclic	TCA47	TCA47		

2.22 polythioamide(ポリチオアミド)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。



ただし、これらの部分構造が下記のポリマー系を特徴付ける原子団の中に含まれる場合を除く。

Polythiourethanes >N-CS-O- 中の >N-CS- など

Polythioureas >N-CS-N< 中の >N-CS- など

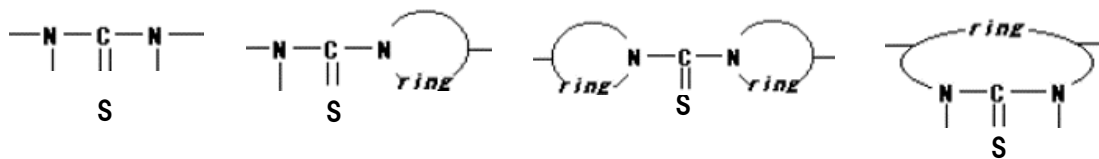
Polythioimides -CS-N-CS- 中の >N-CS- など

表 2.22 polythioamide の分類項目

No	L1	L2		L3		L4		ID		
22	polythioamide TA1	unmodified linear	TAMD2	unmodified	TAMD30			TAMD30		
				aliphatic	TAMD31	acyclic aliphatic	TAMD41	TAMD41		
						alicyclic aliphatic	TAMD42	TAMD42		
				aromatic	TAMD32	condensed-ring aromatic	TAMD43	TAMD43		
						multiring aromatic	TAMD44	TAMD44		
						single-ring aromatic	TAMD45	TAMD45		
				heterocyclic	TAMD33	saturated heterocyclic	TAMD46	TAMD46		
						unsaturated heterocyclic	TAMD47	TAMD47		
				heterocyclic	TADH2	unmodified	TADH30			TADH30
						aliphatic	TADH31	acyclic aliphatic	TADH41	TADH41
		alicyclic aliphatic	TADH42					TADH42		
		aromatic	TADH32			condensed-ring aromatic	TADH43	TADH43		
						multiring aromatic	TADH44	TADH44		
						single-ring aromatic	TADH45	TADH45		
		heterocyclic	TADH33			saturated heterocyclic	TADH46	TADH46		
						unsaturated heterocyclic	TADH47	TADH47		
		partially heterocyclic	TADT2			unmodified	TADT30			TADT30
						aliphatic	TADT31	acyclic aliphatic	TADT41	TADT41
				alicyclic aliphatic	TADT42			TADT42		
				aromatic	TADT32	condensed-ring aromatic	TADT43	TADT43		
						multiring aromatic	TADT44	TADT44		
						single-ring aromatic	TADT45	TADT45		
				heterocyclic	TADT33	saturated heterocyclic	TADT46	TADT46		
						unsaturated heterocyclic	TADT47	TADT47		

2.23 polythioureas/polythiourethanes (ポリチオウレア/ポリチオウレタン)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。



TURA



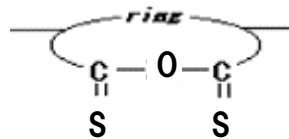
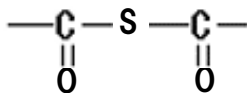
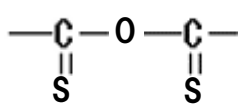
TURN

表 2.23 polythioureas/polythiourethanes の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID			
2	polythioureas /polythiouret hanes TUR1	unmodified linear polythioureas	TURA2	unmodified	TURA30			TURA30		
				aliphatic	TURA31	acyclic aliphatic	TURA41	TURA41		
						alicyclic aliphatic	TURA42	TURA42		
				aromatic	TURA32	condensed-ring aromatic	TURA43	TURA43		
						multiring aromatic	TURA44	TURA44		
						single-ring aromatic	TURA45	TURA45		
				heterocyclic	TURA33	saturated heterocyclic	TURA46	TURA46		
						unsaturated heterocyclic	TURA47	TURA47		
				Heterocyclic polythioureas	TURAH2	unmodified	TURAH30			TURAH30
						aliphatic	TURAH31	acyclic aliphatic	TURAH41	TURAH41
		alicyclic aliphatic	TURAH42					TURAH42		
		aromatic	TURAH32			condensed-ring aromatic	TURAH43	TURAH43		
						multiring aromatic	TURAH44	TURAH44		
						single-ring aromatic	TURAH45	TURAH45		
		heterocyclic	TURAH33			saturated heterocyclic	TURAH46	TURAH46		
						unsaturated heterocyclic	TURAH47	TURAH47		
		unmodified linear polythiourethanes	TURN2			unmodified	TURN30			TURN30
						aliphatic	TURN31	acyclic aliphatic	TURN41	TURN41
				alicyclic aliphatic	TURN42			TURN42		
				aromatic	TURN32	condensed-ring aromatic	TURN43	TURN43		
						multiring aromatic	TURN44	TURN44		
						single-ring aromatic	TURN45	TURN45		
				heterocyclic	TURN33	Heterocyclic saturated	TURN46	TURN46		
						unsaturated heterocyclic	TURN47	TURN47		
				heterocyclic polythiourethanes	TURNH2	unmodified	TURNH30			TURNH30
						aliphatic	TURNH31	acyclic aliphatic	TURNH41	TURNH41
		alicyclic aliphatic	TURNH42					TURNH42		
		aromatic	TURNH32			condensed-ring aromatic	TURNH43	TURNH43		
						multiring aromatic	TURNH44	TURNH44		
						single-ring aromatic	TURNH45	TURNH45		
heterocyclic	TURNH33	saturated heterocyclic	TURNH46			TURNH46				
		unsaturated heterocyclic	TURNH47			TURNH47				

2.24 polythioanhydrides (ポリチオ酸無水物)

定義：主鎖中に下記のような、anhydride 基の少なくともひとつの O が S と置換した部分構造を持つポリマー。



TAN

TANH

表 2.24 polythioanhydrides の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID	
24	polythioanhydrides TAN1	unmodified linear	TAN_2	unmodified	TAN_30			TAN_30
				aliphatic	TAN_31	acyclic aliphatic	TAN_41	TAN_41
						alicyclic aliphatic	TAN_42	TAN_42
			aromatic	TAN_32	condensed-ring aromatic	TAN_43	TAN_43	
					multiring aromatic	TAN_44	TAN_44	
					single-ring aromatic	TAN_45	TAN_45	
			heterocyclic	TAN_33	saturated heterocyclic	TAN_46	TAN_46	
					unsaturated heterocyclic	TAN_47	TAN_47	
			heterocyclic	TANH2	unmodified	TANH30		
		aliphatic			TANH31	acyclic aliphatic	TANH41	TANH41
						alicyclic aliphatic	TANH42	TANH42
		aromatic			TANH32	condensed-ring aromatic	TANH43	TANH43
						multiring aromatic	TANH44	TANH44
						single-ring aromatic	TANH45	TANH45
		heterocyclic			TANH33	saturated heterocyclic	TANH46	TANH46
						unsaturated heterocyclic	TANH47	TANH47

2.25 polythioimides (ポリチオイミド)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。

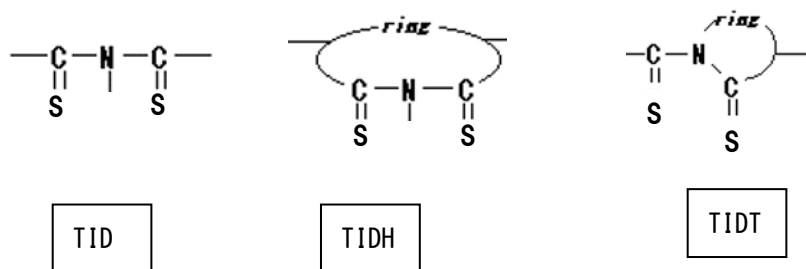


表 2.25 polythioimides の分類項目

No	L1	L2	L3		L4		ID
2	polythioimides TID1	unmodified linear	TID_2	unmodified	TID_30		TID_30
				aliphatic	TID_31	acyclic aliphatic	TID_41
			aromatic	TID_32	acyclic aliphatic	TID_42	TID_42
					condensed-ring aromatic	TID_43	TID_43
					multiring aromatic	TID_44	TID_44
					single-ring aromatic	TID_45	TID_45
			heterocyclic	TID_33	saturated heterocyclic	TID_46	TID_46
					unsaturated heterocyclic	TID_47	TID_47
			heterocyclic	TIDH2	unmodified	TIDH30	
		aliphatic			TIDH31	acyclic aliphatic	TIDH41
		aromatic		TIDH32	acyclic aliphatic	TIDH42	TIDH42
					condensed-ring aromatic	TIDH43	TIDH43
					multiring aromatic	TIDH44	TIDH44
					single-ring aromatic	TIDH45	TIDH45
		heterocyclic		TIDH33	saturated heterocyclic	TIDH46	TIDH46
					unsaturated heterocyclic	TIDH47	TIDH47
		partially heterocyclic		TIDT2	unmodified	TIDT30	
			aliphatic		TIDT31	acyclic aliphatic	TIDT41
				acyclic aliphatic		TIDT42	TIDT42
aromatic	TIDT32		condensed-ring aromatic	TIDT43	TIDT43		
			multiring aromatic	TIDT44	TIDT44		
			single-ring aromatic	TIDT45	TIDT45		
heterocyclic	TIDT33		saturated heterocyclic	TIDT46	TIDT46		
			unsaturated heterocyclic	TIDT47	TIDT47		

2.26 polyureas/polyurethanes (ポリウレア/ポリウレタン)

定義：主鎖中に下記のような部分構造を含むポリマー。

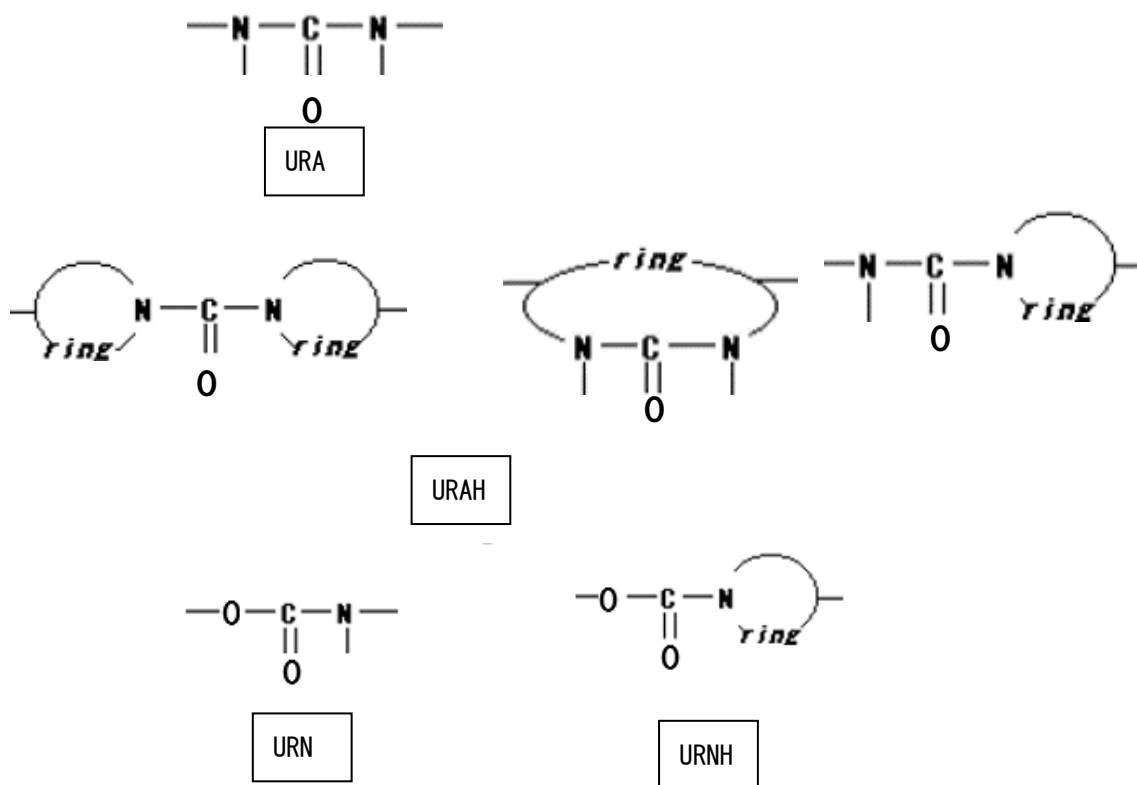


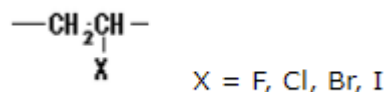
表 2.26 polyureas/polyurethanes の分類項目

No	L1	L2	L3	L4	ID					
2	polyureas /polyurethanes UR1	unmodified linear polyureas	URA2	unmodified	URA30	URA30				
				aliphatic	URA31	acyclic aliphatic	URA41	URA41		
						alicyclic aliphatic	URA42	URA42		
				aromatic	URA32	condensed-ring aromatic	URA43	URA43		
						multiring aromatic	URA44	URA44		
						single-ring aromatic	URA45	URA45		
				heterocyclic	URA33	saturated heterocyclic	URA46	URA46		
						unsaturated heterocyclic	URA47	URA47		
				heterocyclic polyureas	URAH2	unmodified	URAH30	URAH30		
						aliphatic	URAH31	acyclic aliphatic	URAH41	URAH41
								alicyclic aliphatic	URAH42	URAH42
						aromatic	URAH32	condensed-ring aromatic	URAH43	URAH43
								multiring aromatic	URAH44	URAH44
								single-ring aromatic	URAH45	URAH45
		heterocyclic	URAH33			saturated heterocyclic	URAH46	URAH46		
						unsaturated heterocyclic	URAH47	URAH47		
		unmodified linear polyurethanes	URN2			unmodified	URN30	URN30		
						aliphatic	URN31	acyclic aliphatic	URN41	URN41
								alicyclic aliphatic	URN42	URN42
						aromatic	URN32	condensed-ring aromatic	URN43	URN43
								multiring aromatic	URN44	URN44
								single-ring aromatic	URN45	URN45
				heterocyclic	URN33	saturated heterocyclic	URN46	URN46		
						unsaturated heterocyclic	URN47	URN47		
				heterocyclic polyurethanes	URNH2	unmodified	URNH30	URNH30		
						aliphatic	URNH31	acyclic aliphatic	URNH41	URNH41
								alicyclic aliphatic	URNH42	URNH42
						aromatic	URNH32	condensed-ring aromatic	URNH43	URNH43
multiring aromatic	URNH44							URNH44		
single-ring aromatic	URNH45							URNH45		
heterocyclic	URNH33	saturated heterocyclic	URNH46			URNH46				
		unsaturated heterocyclic	URNH47			URNH47				

2.27 vinyl polymers (ビニルポリマーズ)

定義：主鎖は脂肪族炭化水素基のみからなり、側鎖に芳香環、ヘテロ原子もしくはヘテロ原子を含んだ基のいずれかが含まれているポリマー。

ただし、ハロゲンを含む場合は以下の形のものに限定され、他の結合形態をとるものは halogenated polymer だけに分類される。



- ・構成単位 (CU) 中の主鎖の炭素原子数は制限していない。
- ・主鎖中に 二重結合 C=C、 三重結合 C≡C が含まれる場合もここに分類されている。
- ・Polystyrenes および Polyacrylics に分類されるポリマーは同時に vinyl polymers にも分類される。
- ・vinyl polymers は、Polyolefins、Polydienes とは同時に分類されない。

表 2.27 vinyl polymers の分類項目

No	(L1) 28 項目	(L2) (75 項目)	(L3) 224 項目	(L4)項目 (385 項目)	ID(469 項目)		
2	vinyl polymers VNL1	vinyl polymers	aliphatic	VNL_31	acyclic aliphatic	VNL_41	VNL_41
					alicyclic aliphatic	VNL_42	VNL_42
			aromatic	VNL_32	condensed-ring aromatic	VNL_43	VNL_43
					multiring aromatic	VNL_44	VNL_44
					single-ring aromatic	VNL_45	VNL_45
			heterocyclic	VNL_33	saturated heterocyclic	VNL_46	VNL_46
					unsaturated heterocyclic	VNL_47	VNL_47

[分類例]

$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{---CH=CH---CH}_2\text{---C---(CH}_2\text{)}_2\text{---} \\ \\ \text{COOCH}_3 \end{array}$	⇒VNL_41
$\begin{array}{c} \text{---CH---CH---CH}_2\text{---CH---} \\ \quad \quad \quad \quad \\ \text{COOH} \quad \text{COO(CH}_2\text{)}_7\text{CH}_3 \quad \text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$	⇒VNL_41、VNL_45、ACR_41、STY_30
$\begin{array}{c} \text{COO(CH}_2\text{)}_2\text{OH} \\ \\ \text{Cyclopentane ring} \end{array}$	⇒VNL_41
$\begin{array}{c} \text{Cyclohexane ring} \\ \\ \text{CH}_2\text{---} \\ \\ \text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CH(CH}_2\text{)}_3\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_2\text{CH}_3 \end{array}$	⇒VNL_41

2.28. condensed-ring aromatic hydrocarbon (COND)

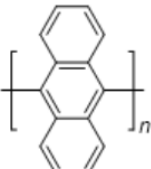
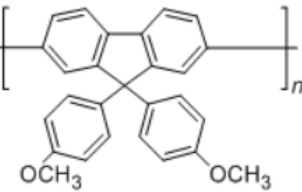
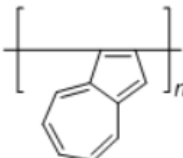
定義：主鎖に芳香族縮合多環炭化水素を含むポリマー。

芳香族縮合多環炭化水素とはベンゼン環を少なくとも一つ含む縮合多環炭化水素、およびアズレン環（7員環と5員環が縮合）を指す。

表 2.28 condensed-ring aromatic hydrocarbon の分類項目

No	L1	L2	COND_2	L3		L4		ID
28	Condensed-ring aromatic hydrocarbon COND1	Condensed-ring aromatic hydrocarbon	COND_2	unmodified	COND_30			COND_30
				aromatic	COND_31	acyclic aliphatic	COND_41	COND_41
							alicyclic aliphatic	COND_42
						COND_32	condensed-ring aromatic	COND_43
				heterocyclic	COND_33	multiring aromatic	COND_44	COND_44
						single-ring aromatic	COND_45	COND_45
						saturated heterocyclic	COND_46	COND_46
				unsaturated heterocyclic	COND_47	COND_47		

分類例)

<p>PID:P522064 CU formula:C14H8</p> 	COND_30
	COND_45
	COND_30

2.29 other polymers (その他ポリマー)

定義：分類項目 01 から 28 に属さないポリマー。

表 2.29 other polymers の分類項目

No	L1	L2		L3		L4		ID
28	other polymers OTR1							OTR1