

## ポリエチレングリコール (PEG) 命名法



新成化学では PEG 誘導体名を簡潔に表現するため以下のルールで便宜的に命名し、カタログ等で使用しています。IUPAC 名とも一般的に使用されている方式\*とも異なります。

### 0. 数値の記載方式

弊社方式：繰り返し単位数  $n$  で記載 OH-PEG45-OH (繰り返し単位  $n=45$  : 分子量 1,999 の単一品)

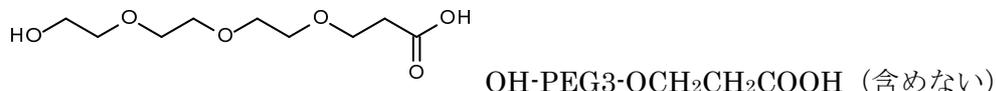
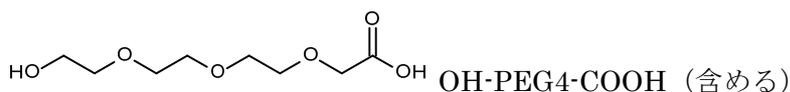
一般的な表記：平均分子量で記載 PEG2K (両末端 OH 換算で平均分子量 2,000 の混合物)

\*詳細は末尾記載の補足説明をご参照ください。

### 1. 繰り返し単位数

-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-X- (X:酸素または炭素以外の元素) を 1 ユニットとしてカウントする。繰り返し単位数  $n$  を組み合わせて “OH-PEG9-OH “ (繰り返し単位数  $n=9$ ) のように記載する。 $n=1$  の場合は数値を省略する。

末端水酸基を置換または酸化して合成でき、炭素数が変化しないユニットは繰り返し単位に含める。炭素数が異なる場合は繰り返しに含めない。



### 2. 末端置換基表記ルール

“PEG”の左側に優先順位の高い官能基を配置する。

- ・左側：OH の場合はそのまま OH と表記する。OH の H を置換した構造は O を省略した置換基を、OH を置換の場合はそのヘテロ原子を含めた置換基を表記する。
- ・右と左の置換基は同じ表記にする。例えば DiaminoPEG3 の場合、H<sub>2</sub>N-PEG3-NH<sub>2</sub> とはせず、NH<sub>2</sub>-PEG3-NH<sub>2</sub> とする。

例:nonaethyleneglycol=OH-PEG9-OH / hexaethyleneglycol monotosylate=Tos-PEG6-OH

Tos-PEG13-COOH=Tos-PEG12-O-CH<sub>2</sub>-COOH=Tos-PEG11-O-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-COOH。

アルデヒドも同様。

### 3. 置換基表記

3-1 各置換基、保護基の短縮表記は Protective groups in Organic Chemistry 記載に従う。複数通りの記載がある場合はどちらを採用しても構わないが、一連の化合物群については極力統一する。NH<sub>2</sub>、-CH<sub>2</sub>-などの数字は下付にせず便宜上 NH<sub>2</sub>、-CH<sub>2</sub>-と表記する場合がある。

3-2 上記書籍に記載のない官能基は適宜ルールを決めるが、概ね以下の例を参考にする。頻繁に登場する官能基はローカルネームを設定することがある。下記 4. に示す上位の官能基は概ね左側に記載して収まる表記、下位の官能基は右側に記載して違和感のない表記と採用するが例外もある。

- ・カルボキシル基：COOH-PEG3-COOH
- ・Boc 保護アミン：BocNH-PEG3-BocNH
- ・アルデヒド：CHO-PEG4-CHO

- ・スルホン酸：SO<sub>3</sub>H
- ・4-Nitrophenylcarbonate：PNPC

4. 官能基の優先順位：“>”の左側が優先とする。一部 IUPAC と異なる。PEG 両端の官能基が異なる場合、優先順位の高い官能基を左側に記載する。

OR<sup>\*\*</sup>>N<sub>3</sub> (Azide) >RNHR'N (Hydrazine) \*>RNH (Amine) \*>X (ハロゲン及び同等機能を有する活性基)>CN (Nitrile)>CC (“CC”=3重結合のアセチレン)>Mal (Maleimide)>CHO (Aldehyde)  
 \*>SO<sub>3</sub>R\*>PO<sub>3</sub>R\*>SR\*>OH (Alcohol) >OR (保護基以外エーテル結合) \*>Amide\*>NHS  
 (N-hydroxysuccinimide) >COOR\*>COOH

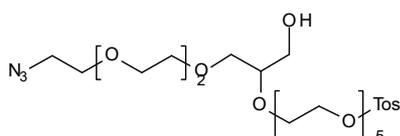
\*同一グループの優先順位は IUPAC に従う。

\*\*官能基の保護体またはその官能基の前駆体として機能する構造>活性化体>無保護

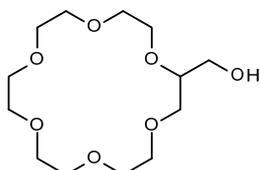
\*\*\*例外的に保護基つきまたはエステル化体 OH を最優先とする。その中でも Trt>DMT>その他とする。

#### 5. 枝分かれ構造の表記法

- ① 枝分かれがなく最も長い PEG 鎖を基本構造とする。
- ② 枝分かれのうち長い順に記述し、最も短い枝を最後にする。最初と最後以外の枝構造は括弧 ( ) 内に記載する。同じ構造の枝が複数個の場合は括弧でまとめて ( )<sub>2</sub> のように記載する。
- ③ 同じ長さの場合はついている置換基の優先順位順とする。
- ④ 繰り返し単位数 n は枝分かれ構造も含め・C-C-O・単位が連なった最長とする。



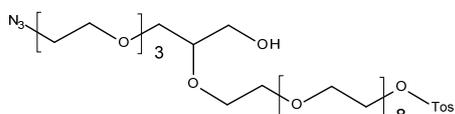
Triglycerol(N3-PEG3)(OH)[Tos-PEG5] n=9



OH-CH<sub>2</sub>-18-Crown-6 n=7

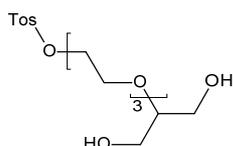
Glycerol 骨格は新たに以下の命名ルールを設ける。

- ① Glycerol から始まる。繰り返し単位は Glycerol 骨格も含め、PEG 繰り返し単位の最長を記載する。



Glycerol(N3-PEG3)[Tos] (OH) n=13

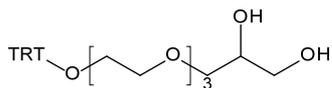
- ② 1級アルコール、2級アルコールの優先順。1級アルコールに付く置換基は ( ) で、2級アルコールは [ ] で囲む。同じ1級アルコール同士の場合は上記 PEG ルールに従う。末端が同じ置換基の場合は結合する PEG 鎖の長さ (繰り返し単位) で順位付けする。
- ③ 各置換基の記載順は結合位置には無関係に末端の置換基優先順とする。



Glycerol [Tos-PEG3] (OH)<sub>2</sub> n=4

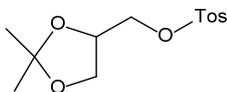
- ④ 全ての置換基が同一の場合、及び置換基の結合位置が特定できない場合は全て ( ) で記載する。
- ⑤ 同じ置換基が複数結合する場合は ( )<sub>n</sub> と表記する。同じ置換基が1級、2級それぞれ異なるアル

コールに付く場合はそれぞれ別置換基として、1級アルコール置換基を優先して表記する。



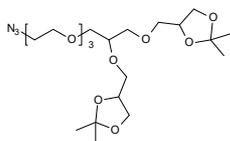
Glycerol(Trt-PEG3)(OH)[OH] n=4

- ⑥ ケタール保護構造は **ketal** と表記する。1級アルコールと2級アルコールを結ぶ構造一つしかないため ( ) で囲む。

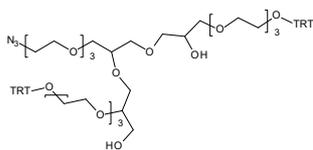


Glycerol(Tos)(ketal)

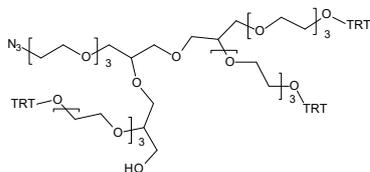
- ⑦ Glycerol 骨格が連なった構造の場合は Diglycerol、Triglycerol、・・・を基本骨格とする。どの Glycerol 骨格に結合するかを区別するため (1: のように結合骨格の位置を記す。同じ置換基が同じ水酸基に複数結合する場合はカッコの後ろに結合数を記載して )n と示す。結合位置が特定できていないまたは混合物の場合は ( ) に統一して表記する。



Triglyrecol(1,3:ketal)2(2:N3-PEG3)

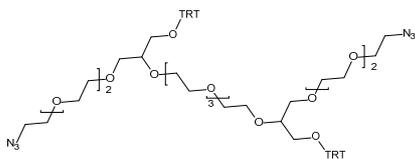


Triglycerol(1:Trt-PEG3)(2:N3-PEG3)(3:OH)[3:Trt-PEG3][1:OH]

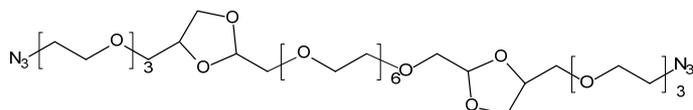


Triglycerol(1:Trt-PEG3)(2:N3-PEG3)(3:OH)[1,3:Trt-PEG3]2

- ⑧ Glycerol が直接結合した構造ではなく例えば PEG を介して結合する場合、1級2級どちらから伸びたか区別するため以下の記述とする。以下の例では2級アルコール通して結合するため [ ] とするが、例えば1級アルコールと2級アルコールで橋かけする場合は ( ) (左は1級アルコール、右は2級アルコールで結合) と記述する。



Glycerol(Trt)(N3-PEG3)[-O-PEG4-]Glycerol(Trt)(N3-PEG3)



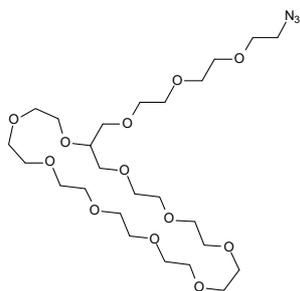
Glycerol(N3-PEG3)(acetal)(-PEG8-acetal-)Glycerol(N3-PEG3)

- ⑨ Glycerol の O が N,S などの他の元素に変わった構造についても骨格を Glycerol で命名する。  
 ⑩ Pentaerythrytol, Triethanolamine, 2-Hydroxypropanediol も同様に命名するが等価なので [ ] を用いることがない。その他構造についても合成することがあれば別途定める。

## 6. 環状エーテル

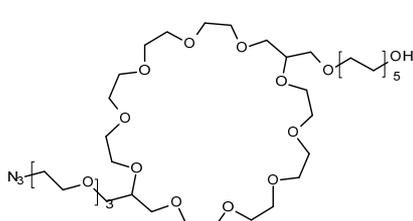
- ① PEG 枝がついていない場合は環の最も長い構造で示し、“m-Crown-n”のように記載する。

- ② 環状エーテルに PEG の枝がついている場合は、枝の PEG 鎖の方を最初に記載し、最後に環状部分を記載する。
- ③ 繰り返し単位の長さは環状部分と枝部分を含め、枝の末端から始まり・C-C-O・単位が連なった最長数とする。

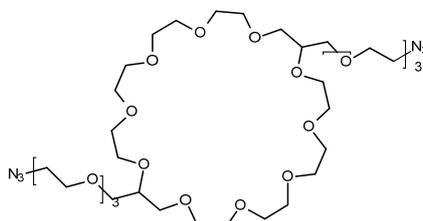


: N<sub>3</sub>-PEG3-CH<sub>2</sub>-27-Crown-9 n=12

- ④ 枝が 2 つ以上ついている場合は 5. の枝の優先順位に従い記載する。同じ枝であれば括弧でまとめる。各枝の結合位置については構造解析で特定できていないことが多いため現状はルールなしとし、必要に応じて別途定める。



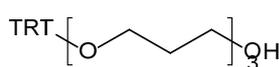
H-PEG5-CH<sub>2</sub>-(N<sub>3</sub>-PEG3-CH<sub>2</sub>)-30-crown-10  
n=15



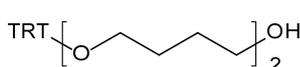
(N<sub>3</sub>-PEG3-CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-30-crown-10  
n=13

## 7. 特殊長さの繰り返し単位構造について

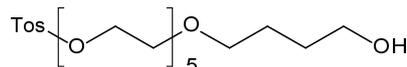
・O-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>構造の繰り返しの場合は“Pr”を使用する。メチレンが更に一つ増えたら“Bu”とする。PEG 誘導体との混合構造の場合、繰り返し単位の長い方を優先して基本命名する。PEG との混合構造で繰り返し単位が 1 の場合は Pr、Bu 等を使わず O(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-OH または O(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-OH と記載することがある。



Trt-Pr3-OH

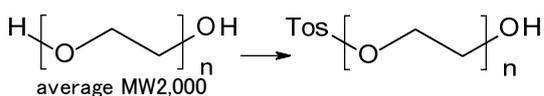


Trt-Bu2-OH



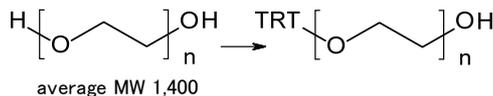
Tos-PEG5-O(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-OH

8. 市販品（混合物）からの誘導体を扱う際は一般的方式のうち、“K”(kilo: 平均分子量)を用いる記載方法を採用する。



H-PEG2K-OH

Tos-PEG2K-OH

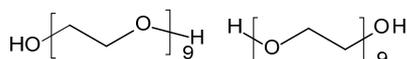


OH-PEG1.4K-OH

Trt-PEG1.4K-OH

## 9. 構造式表記について

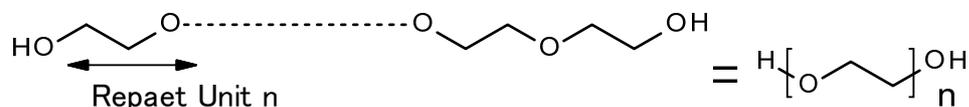
繰り返し単位を [ ] 括弧で括り、繰り返し数 n を括弧の右側に下付で表記する。括弧の位置に選択の余地がある場合、どちらでも良いこととする（下記）。





### \*補足説明

一般的に市販されているポリエチレングリコールは当社品と異なり重合法で合成したものを GPC カラム等で分離したものです。分子量に近い（繰り返し単位数に近い）構造は高分子ほど分離困難で例外なく様々な分子量の構造が含まれる混合物です。そのため特定の繰り返し単位や分子量で記述できず平均分子量での表記が一般的です。



PEG2,000 または PEG2K：平均分子量 2,000 のポリエチレングリコール

メーカー、ロットごとに大きなばらつきが出るとは思われますが、弊社で LC/MS 分析したロット品では繰り返し単位  $n=30\sim 60$  程度（微小シグナルまで拾うと  $n=70$  近い成分も含まれます）の混合物であることを確認しました。平均分子量が 2,000 ですので  $n=45$ ：分子量 1,999.1 が主成分となりますが、各 MS スペクトルシグナルの各ピーク高さから単純計算するとその含有率はせいぜい数%に過ぎないことが理解できます。（下図）

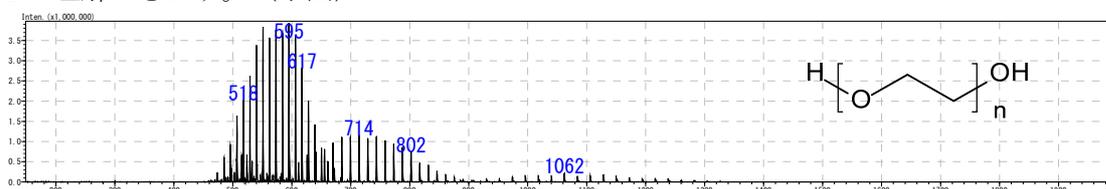
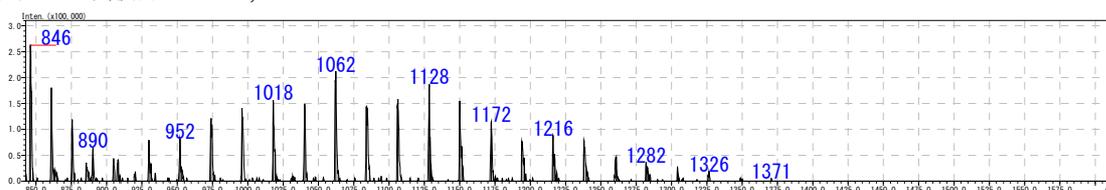


図1 市販品 PEG2,000 の MS スペクトル



$m/z=850\sim 1,600$  領域拡大図

今回実施した LC/MS 分析条件では分子量の整数分の 1 のアンモニウム付加イオン ( $1/n M+18$ ) が検出されます。

$1/2MS$  領域では  $m/z=1,062$  付近を中心に  $m/z=22$  等間隔でシグナルが認められます。

$m/z=1,062$  が分子量 2,088 ( $n=47$ )、 $1,128$  が分子量 2,220 ( $n=50$ ) にそれぞれ対応します。

当社品は合成法が市販品とは全く異なり、分子量分布のない単一品です。

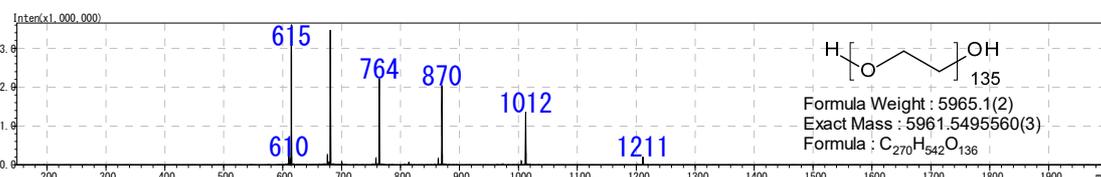
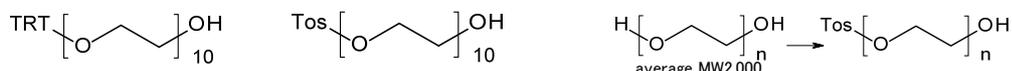


図2 当社品 OH-PEG135-OH（市販品方式で記述すると PEG5,965 となります）

$n=135$  以外の分子量に相当するシグナルは検出されません。

$m/z=1,211$ 、 $1,012$ 、 $870$ 、 $764$ ・・・がそれぞれ分子量の  $1/5$ 、 $1/6$ 、 $1/7$ ・・・のそれぞれアンモニウム付加イオン( $M+18$ )に相当します。

弊社品も一般の市販品と同じ方式に従い命名すべきか検討したのですが、（平均）分子量で記載する市販品方式だと以下の場合、繰り返し単位が同じ構造なのに分子量がそれぞれ異なるため、構造式を見れば末端官能基が異なるだけなのに別物の印象を与えてしまいます。また小数点以下まで表記すべきかどうか、**Formula weight** と **Exact mass** が微妙に異なるためどちらで表記するのが適切かなど、細かいことで迷ってしまいます。（市販品は混合物で平均分子量のため細かい違いに悩むことはありません）



当社方式命名：Trt-PEG10-OH

Tos-PEG10-OH

OH-PEG2K-OH

Tos-PEG2K-OH

市販品方式： Trt-PEG700

Tos-PEG612

PEG2K

Tos-PEG2K

一方、市販品は混合物のため当社方式で記載しようとする例えば PEG2K の場合、“OH-PEG30~60-OH” “OH-PEG45 (Average) -OH” のような記載にせざるを得ませんし、ロットごとにこの数値が変わることもあるでしょう。

以上のように命名法でも**当社品を差別化できる**と考えています。



ポリエチレングリコール誘導体に関する詳しい技術資料を是非ご参照ください。

<http://www.schem.jp/PEG.html>

- ・比較低分子でも分離困難で不純物を多く含むという考察データです。

<http://www.schem.jp/document/001-02.pdf>

- ・分子量 5,000 超のポリエチレングリコール分析データです。

[http://www.schem.jp/document/031\\_02.pdf](http://www.schem.jp/document/031_02.pdf)

- ・PEG 合成法を適用し、今までになかった高分子の環状エーテル（クラウンエーテル）のご紹介です。

[http://www.schem.jp/document/034\\_01.pdf](http://www.schem.jp/document/034_01.pdf)