
NOMENKLATURA A TERMINOLOGIE

Chem. Listy 90, 888 - 898 (1996)

NOMENKLATURA IREGULÁRNÍCH JEDNOPRAMENNÝCH ORGANICKÝCH POLYMERŮ ZALOŽENÁ NA STRUKTUŘE (1994)

Česká komise pro makromolekulární nomenklaturu* předkládá se souhlasem Českého komitétu pro chemii české znění dokumentu Mezinárodní unie čisté a užité chemie (IUPAC), publikovaného v roce 1994¹, s cílem poskytnout chemické veřejnosti pomůcku ke strukturnímu pojmenovávání iregulárních jednopramenných organických polymerů. Pravidel lze využít zejména v těch případech, kdy názvosloví založené na názvech monomerů je nedostačující.

Tak jako v anglickém originálu, je v české verzi zachován název ethylen pro dvojevaznou skupinu odvozenou od ethanu a název vinyl pro jednovaznou skupinu odvozenou od ethenu, neboť je dnešní nomenklaturní pravidla organické chemie připouštějí jako názvy tradiční. Je však třeba upozornit, že Chemical Abstracts tyto skupiny nazývají ethan-1,2-diyl a ethenyl.

V českém dokumentu se pro anglické "seniority" používá ve shodě s dokumentem o českém názvosloví regulárních jednopramenných organických polymerů výraz "významnost" k vyjádření uzančného postavení v řadě strukturních jednotek.

Souhrn

Pro pojmenovávání mnoha typů iregulárních polymerů neexistuje všeobecně přijatá praxe. Tento dokument popisuje nomenklaturní systém založený na struktuře pro iregulární jednopramenné organické polymery, tj. jednopramenné organické polymery, které lze popsat opakováním více než jednoho druhu konstituční jednotky, nebo které zahrnují konstituční jednotky, jež nejsou všechny spojené identicky ve smyslu směrové orientace. Podle nového systému se pojmenovávají iregulární polymery, pro něž je systém založený na názvech monomerů nedostačující, např. polymery částečně chemicky modifikované, homopolymery s řazením monomerních jednotek "hlava - pata" i "hlava - hlava", polymery odvozené od jediného monomeru, jež může vytvářet více než jeden druh monomerní jednotky. Mimoto je tento systém založený na struktuře alternativou nomenklatury kopolymerů založené na názvech monomerů. Iregulární polymery, oligomery nebo bloky se pojmenovávají předřazením předpony "poly" před názvy konstitučních jednotek založené na struktuře, jež jsou souborně umístěné v závorkách a od sebe oddělené šikmými lomítky. V blokových kopolymerech se vazby mezi bloky a vazby se spojovacími jednotkami znázorňují dlouhými pomlčkami. V roubovaných a hvězdicových polymerech se rouby nebo bloky považují za substituenty na hlavním řetězci a tato struktura se pojmenuje stejným způsobem jako regulární nebo iregulární polymer.

Úvod

Předchozí dokumenty Komise pro makromolekulární nomenklaturu IUPAC pojednávají o systémech založených na struktuře pro pojmenovávání regulárních jednopramenných organických polymerů^{2,3}. To jsou polymery, jejichž molekuly lze popsat jen jediným druhem opakující se konstituční jednotky v jediném sekvenčním uspořádání⁴. Publikován byl také systém pojmenovávání kopolymerů, jež jsou většinou iregulární, založený na názvech monomerů⁵.

Tento dokument popisuje nomenklaturní systém založený na struktuře pro iregulární jednopramenné organické polymery, tj. jednopramenné organické polymery, které lze popsat opakováním více než jednoho druhu konstituční

* Členové komise: M. Beneš, P. Čefelín, J. Kahovec, J. Kotas, P. Kratochvíl, B. Meissner, J. Pouchlý, J. Roda, J. Vohlídal.

jednotky, nebo které zahrnují konstituční jednotky, jež nejsou všechny spojené identicky ve smyslu směrové orientace. Podle nového systému se pojmenovávají iregulární polymery, pro něž se je systém založený na názvech monomerů nedostačující, např. polymery částečně chemicky modifikované, homopolymery s řazením monomerních jednotek jak "hlava - pata" tak "hlava - hlava", polymery odvozené od jediného monomeru, jenž může vytvářet více než jeden druh monomerní jednotky; kromě toho je systém alternativou nomenklatury kopolymerů založené na názvech monomerů⁵.

Základní principy

Iregulární polymery nebo bloky se pojmenovávají předřazením předpony "poly" před strukturální názvy konstitučních jednotek, jež jsou souborně umístěny v kulatých či hranatých závorkách a od sebe odděleny šikmými lomítky. Typický název podle nového systému je

poly(A/B),

což značí iregulární polymer skládající se z konstitučních jednotek A a B.

V názvech blokových kopolymerů, u nichž je pořadí regulárních bloků známo, se vazby mezi bloky a vazby bloků se spojovacími jednotkami znázorňují vodorovnými dlouhými pomlčkami,

poly(A) — X_A — poly(B) — X_B — poly(C) — X_C —

kde A, B, C, ... jsou názvy konstitučních jednotek a X_A, X_B, X_C, ... jsou názvy spojovacích jednotek.

Postup pro pojmenování iregulárních jednopramenných polymerů podle systému založeného na struktuře:

1. Napíšeme strukturu řetězce dle dostupných informací.
2. Vybereme a zorientujeme nejmenší počet konstitučních jednotek nutný k vystižení struktury polymeru²; je-li možná volba, výběr se řídí pravidly o významnosti (viz ²)*. Struktury se zapisují tak, aby se četly zleva doprava.
3. Aby bylo zaručeno, že konstituční jednotky jsou správně zvoleny, spojí se jejich jednotlivé struktury všemi možnými způsoby vytvářejícími polymerní řetězec. Nesprávné konstituční jednotky poskytnou řetězcové segmenty, které neodpovídají napsané struktuře nebo popisu polymeru.
4. Konstituční jednotky se pojmenují podle pravidel nomenklatury organické chemie ^{6,7} a nomenklatury polymerů založené na struktuře².**
5. Název polymeru se napíše podle dále uvedených pravidel.

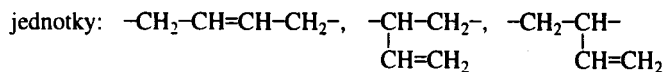
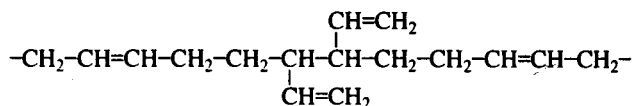
Poznámka: Chybějící údaje o struktuře, např. polohy substituentů, lze vyjádřit v názvu polymeru pomocí symbolů ?-, x- nebo n₁..., kde n₁... jsou možné číselné lokanty.

* Významnost konstitučních jednotek: heterocyklické systémy > heteroatomy v řetězci > uhlíkaté kruhy > necyklické uhlíkaté řetězce. Nenasycené jednotky jsou nadřazeny nasyceným. V uvedených skupinách je významnost dána pořadím, pro heterocyklické systémy pořadím - kruhy s dusíkem > kruhy s jinými heteroatomy > kruhové systémy s nejvyšším počtem kruhů > největší kruh > kruhový systém s nejvyšším počtem heteroatomů > kruhový systém s největší rozmanitostí heteroatomů > kruhový systém s nejvyšším počtem heteroatomů nejvýše postavených v pořadí v dále uvedeném seznamu. Pořadí významnosti heteroatomů: O > S > Se > Te > N > P > As > Sb > Bi > Si > Ge > Sn > Pb > B > Hg a další atomy umístěné v pořadí podle jejich postavení v periodické tabulce. Pořadí významnosti v uhlíkatých kruhových systémech: nejvyšší počet kruhů > největší kruh > nejnižší číselné lokanty v místech připojení. V jinak stejných strukturách je významnost dána substituenty, a to v pořadí: necyklický řetězec s nejvyšším počtem substituentů > řetězec se substituenty o nejnižších lokantech > abecední pořadí substituentů. Další podrobnosti a příklady jsou uvedeny v dokumentu¹.

Poznámka české komise: V češtině použijeme české abecední pořadí, i když bude v některých případech jiné než anglické.

** Pravidla nomenklatury organické chemie se stále vyvíjejí. Do tohoto dokumentu bylo zahrnuto mnoho nejnověji doporučených změn⁷ a v některých případech se zde odvozené názvy polymerů liší od názvů dřívějších¹. Nová pravidla jsou flexibilní a dovolují užívat četné triviální názvy; pokud jsou starší názvy zachovány, je to proto, že se běžně používají.

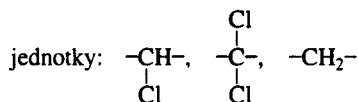
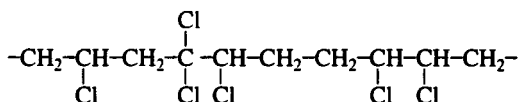
- 1.5 Polymer skládající se z jednotek vzniklých z buta-1,3-dienu 1,4 i 1,2 polymerizací a řazených jak "hlava - hlava", tak "hlava - pata":



název: poly(but-2-en-1,3-diyl/1-vinylethylen/2-vinylethylen).

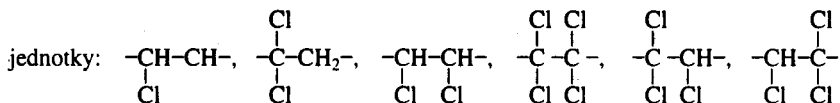
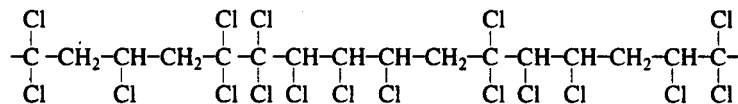
Poznámka: K vystižení výše uvedené struktury nemůže být zvolena konstituční jednotka but-1-en-1,4-diyl, protože to by vyžadovalo také užití jednotek but-2-en-1,4-diyl, vinylmethylenu a methylenu, tedy porušení principu minimálního počtu konstitučních jednotek. Mimoto pospojováním zvolených jednotek, jako např. methylenových, se vytvářejí segmenty, jako je propan-1,3-diyl, které neodpovídají napsané struktuře polymeru.

- 1.6 Chlorovaný poly(methylen):



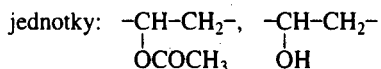
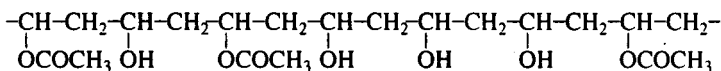
název: poly(dichlormethylen/chlormethylen/methylen).

- 1.7 Chlorovaný poly(1-chlorethylen); kterékoliv methylenové jednotky jsou nutně odděleny lichým počtem uhlíkových atomů:



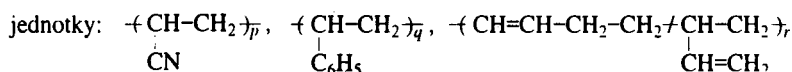
název: poly(1-chlorethylen/1,1-dichlorethylen/1,2-dichlorethylen/tetrachlorethylen/1,1,2-trichlorethylen/1,2,2-trichlorethylen).

- 1.8 Částečně hydrolyzovaný poly(1-acetoxyethylen), který má tudíž původně uspořádání "hlava - pata"



název: poly(1-acetoxyethylen/1-hydroxyethylen).

- 1.9 Polymer skládající se z bloků poly(1-kyanoethylen), poly(1-fenylethylen) a iregulárního bloku z příkladu 1.4 v nepravidelném pořadí:

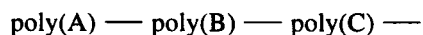


název: poly[poly(but-1-en-1,4-diyl/1-vinyl ethylen)/poly(1-fenylethylen)/poly(1-kyanoethylen)].

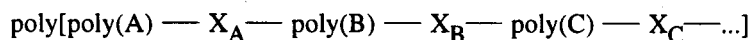
Pravidlo 2. Iregulární polymery s regulárními nebo iregulárními bloky a spojovacími jednotkami v určitém pořadí se pojmenovávají spojením názvů bloků a spojovacích jednotek dlouhými pomlčkami,



kde A, B, C, ... jsou strukturální názvy vhodných konstitučních jednotek - bloků a X_A, X_B, X_C, \dots jsou strukturální názvy spojovacích jednotek. Pořadí názvů bloků odpovídá pořadí bloků v řetězci, jak je napsáno zleva doprava⁵. Jestliže se v řetězci spojovací jednotky nevyskytují nebo nejsou známe, polymer se nazývá



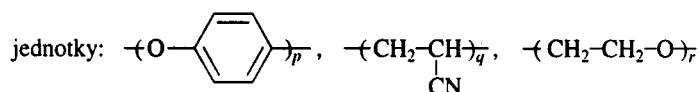
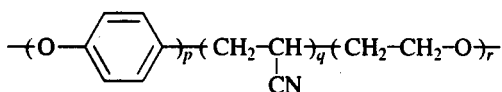
Polymer, skládající se z opakujících se určitých sekvencí, se nazývá



Poznámka: Jelikož pravidla pro rozlišování významnosti bloků nejsou určena, je jednou z možností použít pravidel v lit.². Alternativa je ukázána v poznámce k příkladu 2.1.

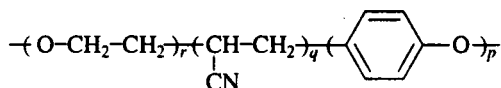
Příklady

2.1 Tříblokový kopolymer skládající se z tří bloků spojených přímo nebo prostřednictvím neurčených spojovacích jednotek:



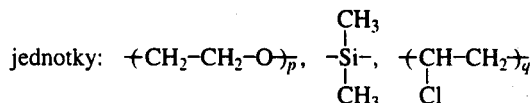
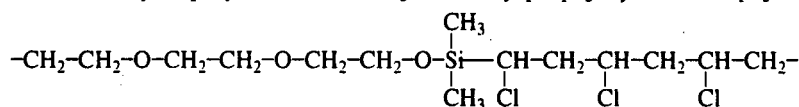
název: poly(oxy-1,4-fenylen) — poly(2-kyanoethylen) — poly(ethylenoxy)

Poznámka: Druhou možností je



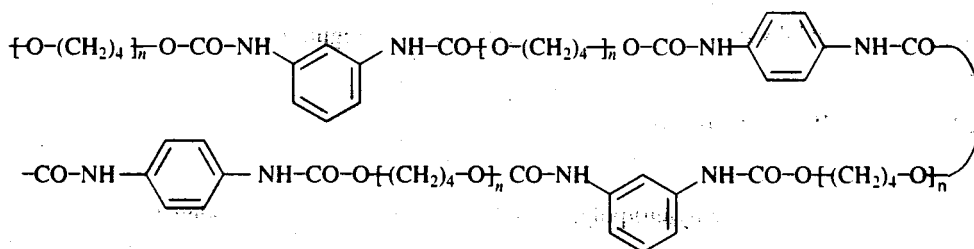
název: poly(oxyethylen) — poly(1-kyanoethylen) — poly(1,4-fenylenoxy).

2.2 Dvoublokový kopolymer, v kterém jsou bloky propojeny určitou spojovací jednotkou:



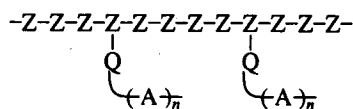
název: poly(ethylenoxy) — dimethylsilandiyl — poly(1-chlorethylen).

2.3 Segmentový polyurethan skládající se z poly(oxybutan-1,4-diylových) bloků spojených střídavě spojovacími jednotkami vzniklými z 1,3- a 1,4-fenylen-diisokyanátu:



Pravidlo 4. Iregulární polymery, v kterých jsou řetězce polymeru nebo oligomeru připojeny k hlavnímu řetězci prostřednictvím konstituční jednotky (spojky) odlišné od konstituční jednotky postranního řetězce, se pojmenovávají takto: Postranní řetězce polymeru nebo oligomeru jsou považovány za substituenty na spojce a pojmenují se podle Pravidla 3. Postranní řetězec spolu se spojkou se jako celek považuje za substituent na hlavním řetězci. Při tvorbě názvu se atom spojky, který je nejbližší k místu připojení v hlavním řetězci, označí lokantem 1.

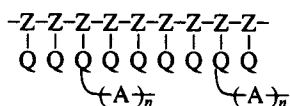
Poznámka 1: Roubovaný kopolymer mající strukturu



tj. s bloky poly(A), které jsou spojkou Q připojeny k regulárnímu polymeru skládajícímu se z konstitučních jednotek ---Z--- , se nazývá

poly{Z/[poly(A)Q]Z}.

Poznámka 2: Roubovaný kopolymer mající strukturu

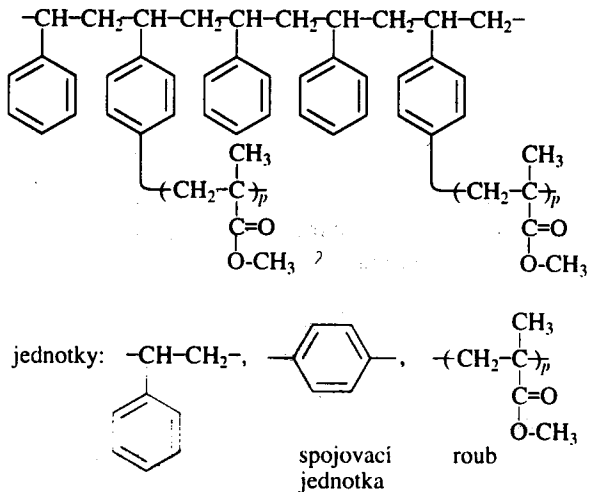


tj. s bloky poly(A), které jsou připojeny k substituentu Q v regulárním polymeru skládajícím se z konstitučních jednotek ---(Q)Z--- , se nazývá

poly{(Q)Z/[poly(A)Q]Z}.

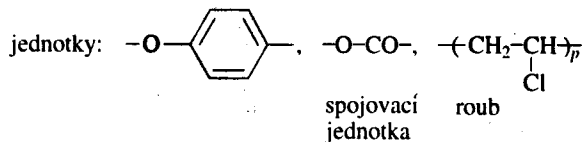
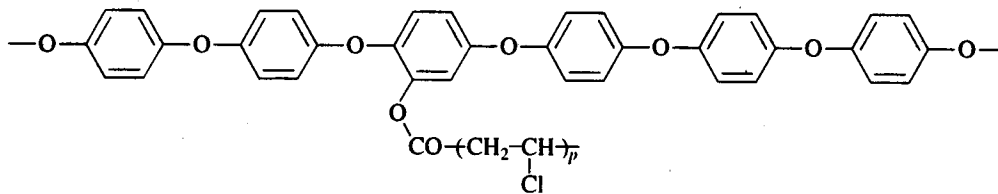
Příklady

4.1 Poly(1-fenylethylen) s poly[2-(methoxykarbonyl)-2-methylethylen]ovými rouby na některých fenylových skupinách:



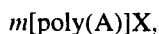
název: poly(1-fenylethylen/1-[4-poly[2-(methoxykarbonyl)-2-methylethylen]fenyl]ethylen).

4.2 Poly(oxyfenylen) s poly(2-chlorethylen)ovými bloky naroubovanými prostřednictvím karbonyloxyskupiny v poloze 2 některých kruhů:

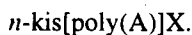


název: poly{oxy-1,4-fenylen/oxy-2-[poly(2-chlorethylen)karbonyloxy]-1,4-fenylen}.

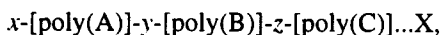
Pravidlo 5. U iregulárních polymerů se třemi nebo více bloky připojenými k centrální jednotce, tj. hvězdicových polymerů, se bloky považují za substituenty na jediné centrální jednotce. Hvězdicový polymer s rameny tvořenými identickými bloky se nazývá



kde m znamená řeckou násobící předponu (tris, tetrakis, ...) označující počet substituentů poly(A) na centrální jednotce X. Pokud není počet ramen známý, hvězdicový polymer se nazývá



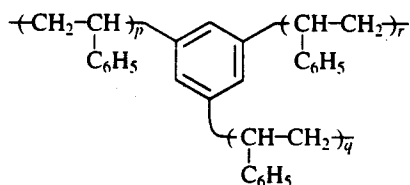
Hvězdicový polymer s rameny tvořenými odlišnými bloky se nazývá



kde x, y, z, \dots jsou lokanty pro polohy na centrální jednotce X. Atom v blocích, který je nejbližší k centrální jednotce, nese lokant 1.

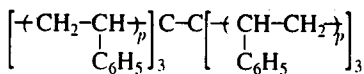
Příklady

5.1 Tříramenný hvězdicový polymer, v němž jsou poly(1-fenylethylen)ové bloky připojeny k benzenovému kruhu v určitých polohách:



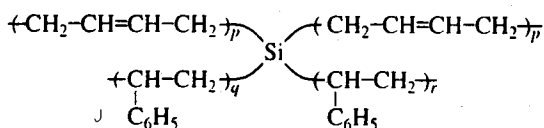
název: 1,3,5-tris[poly(1-fenylethylen)]benzen.

5.2 Šestiramenný hvězdicový polymer odvozený od ethanu substitucí poly(1-fenylethylen)ovými bloky:



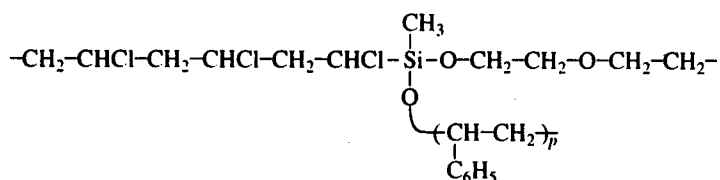
název: hexakis[poly(1-fenylethylen)]ethan.

5.3 Čtyřramenný hvězdicový polymer odvozený od silanu substitucí odlišnými bloky:



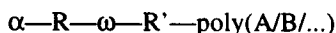
název: bis[poly(but-2-en-1,4-diyl)][poly(1-fenylethylen)][poly(2-fenylethylen)]silan

- 5.4 Třiramenný hvězdicový polymer odvozený od methylsilanu substitucí bloky poly(1-chlorethylen), poly(oxyethylen) a poly(1-fenylethylen), z nichž poslední uvedený je připojen k centrální jednotce prostřednictvím kyslíku jako spojkou:



název: [poly(1-chlorethylen)][poly(oxyethylen)][poly(1-fenylethylen)oxy]methylsilan.

Pravidlo 6. Názvy koncových skupin se předřazují před název polymeru spolu s řeckými písmeny α a ω . Není-li známo, jak jsou koncové skupiny na konstituční jednotky vázány, nazývá se iregulární polymer



kde R a R' jsou názvy koncových skupin. Pro určení způsobu navázání koncových skupin ke konstitučním jednotkám se koncové skupiny spojí se sousedními jednotkami, dříve než se polymer pojmenuje.

Příklady

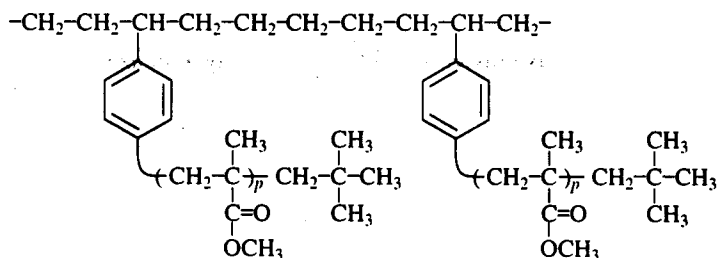
- 6.1 Kopolymer popsáný v příkladu 1.1 s určitými koncovými skupinami:

název: α -chlor- ω -(trichlormethyl)-poly(1-fenylethylen/1-chlorethylen).

- 6.2 Kopolymer popsáný v příkladu 6.1, ve kterém jsou připojeny trichlormethylová skupina k 1-fenylethylenové jednotce v poloze 2 a chlor k 1-chlorethylenové jednotce v poloze 1:

název: α -(2,2-dichlorethyl)- ω -(3,3,3-trichlor-1-fenylpropyl)-poly(1-fenylethylen/1-chlorethylen).

- 6.3 Roubovaný kopolymer s rouby, jejichž koncové skupiny jsou určeny:



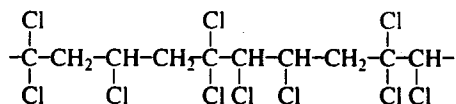
název: poly[ethylen/1-(4-{ ω -neopentyl-poly[2-methoxykarbonyl]-2-methylethylen})fenyl]ethylen].

Poznámka: Volný konec polymerního substituentu se považuje za polohu ω , druhý konec je připojen k hlavnímu řetězci.

Pravidlo 7. Hmotnostní a molární zlomky i molární hmotnosti se uvádějí jako v nomenklatuře kopolymerů založené na názvech monomerů⁵.

Příklady

- 7.1 Chlorovaný poly(1-chlorethylen) s hmotnostním zlomkem chloru 0,65:



H₂O
[logikid vzebr]

Literatura

1. Structure-based nomenclature for irregular single-strand organic polymers, *Pure & Appl. Chem.* 66, 873 (1994).
2. IUPAC, Komise pro makromolekulární nomenklaturu, Nomenclature of regular single-strand organic polymers (1975), *Pure Appl. Chem.* 48, 373-385 (1976). Přetištěno jako kapitola 5 v "*Compendium of Macromolecular Nomenclature*" (Fialová kniha), Blackwell Scientific Publications, Oxford 1991. Český překlad: *Chem. Listy* 81, 290 (1987).
3. IUPAC, Komise pro makromolekulární nomenklaturu a Komise pro Nomenklaturu anorganické chemie, Nomenclature for regular single-strand and quasi-single-strand inorganic and coordination polymers (1984), *Pure Appl. Chem.* 57, 149-168 (1985). Přetištěno jako kapitola 6 v *Compendiu*.
4. IUPAC, Komise pro makromolekulární nomenklaturu, Basic definitions of terms relating to polymers (1974), *Pure Appl. Chem.* 40, 479-491 (1974). Přetištěno jako kapitola 1 v *Compendiu*. Český překlad: *Chem. Listy* 79, 281 (1985).
5. IUPAC, Komise pro makromolekulární nomenklaturu, Source-based nomenclature for copolymers (1985), *Pure Appl. Chem.* 57, 1427-1440. Přetištěno jako kapitola 7 v *Compendiu*. Český překlad: *Chem. Listy* 84, 843 (1990).
6. IUPAC, Komise pro nomenklaturu organické chemie, Nomenclature of Organic Chemistry (1979), Pergamon Press, Oxford 1979.
7. IUPAC, Komise pro nomenklaturu organické chemie, A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry (1992). Blackwell Scientific Publications, Oxford 1993.