

**МЕЖДУНАРОДНЫЙ СОЮЗ ПО ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ
(ИЮПАК)**

**МАКРОМОЛЕКУЛЯРНОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
КОМИССИЯ ПО НОМЕНКЛАТУРЕ МАКРОМОЛЕКУЛ
ОТДЕЛЕНИЕ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ
КОМИССИЯ ПО НОМЕНКЛАТУРЕ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ**

**НОМЕНКЛАТУРА РЕГУЛЯРНЫХ ОДНОТАЖНЫХ
И КВАЗИОДНОТАЖНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ
И КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ**

(Рекомендации 1984 года)

Подготовлено рабочей группой в составе

Л. Дж. ДОНАРУМА (США); Б. П. БЛОК (США);
К. Л. ЛЁНИНГ (США); Н. А. ПЛАТЭ (СССР); Т. ЦУРУТА
(Япония); К. Ч. БУШЕНБЕК (ФРГ); У. Г. ПАУЭЛЛ (США);
Ж. РЕЕДИЙК (Нидерланды).

СОСТАВ КОМИССИИ ПО НОМЕНКЛАТУРЕ МАКРОМОЛЕКУЛ

Титулярные члены: Дж. Аллегра (Италия), 1977–1985; Н. Бикалес (США), 1977–1985, секретарь 1979–1985; П. Коррадини (Италия), 1968–1977; Р. Фокс (США), секретарь 1968–1979; А. Дженкинс (Англия), 1975–1985, председатель, 1977–1985; П. Кратохвил (ЧССР), 1979–1985; К. Лёнинг (США), председатель, 1968–1977; И. Мита (Япония), 1979–1985; И. М. Паписов (СССР), 1979–1985; Н. А. Плата (СССР), 1971–1979; В. Ринг (ФРГ), 1971–1981; П. Сигвалт (Франция), 1975–1983; У. В. Сутер (Швейцария), 1981–1985; Т. Цурута (Япония), 1968–1979.

Ассоциированные члены: Н. Бикалес (США), 1975–1977; Д. Браун (ФРГ), 1981–1985; Дж. Кови (Англия), 1983–1985; Л. Кросс (Англия), 1975–1979; Л. Донарума (США), 1977–1985; Р. Фокс (США), 1979–1983; П. Кратохвил (ЧССР), 1977–1979; К. Лёнинг (США), 1977–1985; Р. Марчесолт (Канада), 1977–1985; И. Мита (Япония), 1977–1979; С. Пенчек (ПНР), 1979–1983; Н. А. Плата (СССР), 1979–1983; Р. Квирк (США), 1983–1985; М. Риндо (Франция), 1981–1985; П. Сигвалт (Франция), 1983–1987; Л. Сунделоф (Швеция), 1981–1984; У. Сутер (Швейцария), 1979–1981; Т. Цурута (Япония), 1979–1983; Р. Веттон (Англия), 1977–1981; Г. Вилски (ФРГ), 1975–1979.

**СОСТАВ КОМИССИИ ПО НОМЕНКЛАТУРЕ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ
ХИМИИ**

Титулярные члены: Л. Бертелло (Аргентина), 1971–1979; Д. Буш (США), вице-председатель, 1979–1985; К. Бушбек (ФРГ), 1971–1979; Дж. Чатт (Англия), председатель, 1975–1981; Т. Койли (США), секретарь, 1979–1984; П. Фодор-Ксаны (Венгрия), 1979–1985; Е. Флюк (ФРГ), 1979–1985; И. Жаннин (Франция), 1971–1985, председатель, 1981–1985, вице-председатель 1975–1981; Дж. Лей (Англия), 1973–1985; Д. Минтос (Англия), секретарь, 1973–1979; Б. Ф. Мясоедов (СССР), 1971–1979; В. Пауэлл (США), 1975–1979; Дж. Реедийк (Нидерланды), 1979–1985; Э. Самюэль (Франция), 1981–1985.

Ассоциированные члены: Р. Адамс (США), 1975–1981; Г. Б. Бокий (СССР), 1979–1983; Д. Буш (США), 1977–1979; К. Бушбек (ФРГ), 1979–1985; Дж. Коннор (Англия), 1981–1985; Т. Койл (США), 1977–1979; А. Ромао-Диас (Португалия), 1979–1983; Е. Годли (Англия), 1979–1985; В. Фернелиус (США), 1975–1985; И. Кликорка (ЧССР), 1977–1984; Р. Лайтинен (Финляндия), 1981–1985; Р. Мехротра (Индия), 1981–1985; Дж. Никсон (Англия), 1981–1985; Дж. Реедийк (Нидерланды), 1977–1979; Ж. Рейс (Франция), 1973–1977; Э. Самюэль (Франция), 1977–1981; К. Самуэльсон (Швеция), 1981–1985; С. Шаффер (Дания), 1971–1981; Слоан (США), 1979–1985; А. Влечек (ЧССР), 1969–1977; К. Ямасаки (Япония), 1969–1977.

Национальные представители: Л. Бертелло (Аргентина), 1979–1985; Т. Койл (США), 1974–1977; Е. Флюк (ФРГ), 1975–1977; П. Фодор-Ксаны (Венгрия), 1977–1979; Г. Эмонс (ГДР), 1978–1983; Б. Холстром (Швеция), 1979–1980; Ж. Кликорка (ЧССР), 1974–1977; Д. Пурдела (Румыния), 1978–1985; К. Сайто (Япония), 1975–1979; К. Самуэльсон (Швеция), 1980–1981; А. Сарджесон (Австралия), 1980–1985; В. Симеон (Югославия), 1981–1985; К. Ямасаки (Япония), 1979–1985; М. Зикмунд (ЧССР), 1978–1985.

Напечатано в Pure and Applied Chem., 1985, v. 57, № 1, p. 149–168.

Перевод с английского И. М. Паписова

НОМЕНКЛАТУРА РЕГУЛЯРНЫХ ОДНОТЯЖНЫХ И КВАЗИОДНОТЯЖНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ И КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ

(ПРИМЕЧАНИЕ 1)

ВВЕДЕНИЕ

Основанные на структуре номенклатурные правила для полимеров, опубликованные ранее [1, 2], относились к линейным органическим полимерам и в первую очередь к таким, которые были определены [2] как регулярные однотяжные полимеры; эти номенклатурные правила базировались, насколько было возможно, на номенклатурных правилах органической химии [3]. В соответствии с этим для образования названия составного повторяющегося звена (СПЗ) использовали комбинацию из последовательности составных частей наименьшего повторяющегося структурного фрагмента полимерной молекулы; эти части называли так же, как и бирадикалы. Распространение данного метода на линейные неорганические и (или) координационные полимеры встречает серьезные ограничения из-за полного отсутствия систематизированных рекомендаций для названий бирадикалов, что является следствием различных подходов к номенклатуре неорганической и органической химии. Это усугубляется еще и тем, что составные части СПЗ в большинстве неорганических и координационных полимеров не являются бирадикалами в принятом смысле этого слова.

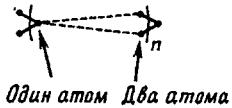
Предлагаемые правила предназначены для составления единственных и однозначных названий регулярных неорганических и (или) координационных линейных полимеров, составные фрагменты которых могут быть названы в соответствии с принятыми химическими принципами для ковалентных и (или) координационных связей и структура которых может быть описана с помощью СПЗ по крайней мере с одним конечным составным фрагментом, связанным с другими идентичными СПЗ или же кольцевой группой через одиночный атом. Для «лестничных» структур, таким образом, эти правила непригодны.

Регулярный линейный полимер, который может быть описан СПЗ и в котором оба концевых составных фрагмента связаны с другими идентичными СПЗ или с концевой группой через одиночные атомы, называется *регулярный однотяжный полимер* (см. также [3]):



Одиночные атомы

Регулярный линейный полимер, который может быть описан СПЗ, в котором только один концевой составной фрагмент связан с другими идентичными СПЗ или концевой группой через одиночный атом, называется *квазиоднотяжным полимером*, т. е. он не подходит под определение регулярного однотяжного полимера [2c], но его название может быть образовано аналогичным образом:



Принципы неорганической и координационной номенклатуры [4] используются настолько, насколько это не противоречит определениям [5] и основным принципам номенклатуры полимеров [1, 2]. Как и в случае номенклатуры органических полимеров, номенклатурные правила используются в приложении к структурам, а не веществам; эти структуры могут давать идеализированные представления о сложных системах. Полимерные вещества обычно включают ряд различных структур, поэтому полное описание полимерной молекулы должно было бы включать такие пункты,

как степень стереорегулярности, дефекты и случайные ветвления цепи и т. д., что в итоге породило бы чрезвычайно сложную номенклатуру. Так или иначе целесообразно рассматривать полимер в рамках одной, пусть и идеализированной структуры. Если распространить это на неорганические или координационные полимеры, которые могут быть представлены как линейные комбинации регулярно повторяющихся составных (структурных) звеньев, то их названия можно составить по правилам, приведенным ниже. Концевые группы, когда это необходимо, также могут быть включены в названия.

Для наибольшего числа полимеров с неорганической основной цепью существуют установленные тривиальные или полусистематические названия, например полидиметилсилоксан $-(Si(CH_3)_2-O-)_n$ (примечание 2) или полидихлороfosфазен $-(-PCl_2=N-)_n$ (примечание 3); некоторые из этих полимеров также могут быть названы в соответствии с принципами номенклатуры органических радикалов, т. е. с использованием названий бирадикалов [1, 2], например поли[окси(диметилсилилен)] для $-(-Si(CH_3)_2-O-)_n$ и поли[нитрило(дихлорfosфорилидин)] для $-(-PCl_2=N-)_n$. Можно использовать как тривиальные или полусистематические названия, если они понятны и недвусмыслены, так и названия, основанные на принципах, разработанных для органических полимеров, если для бивалентных радикалов в структуре полимера легко подыскать названия. Однако для некоторых структур использование приведенных ниже правил дает возможность составления их недвусмысленных названий более естественным образом.

ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ

Номенклатура для регулярных однотяжных и квазиоднотяжных неорганических и координационных полимеров, представленная приведенными ниже правилами, опирается на те же основные принципы, что и номенклатура, разработанная для однотяжных органических полимеров [2]. Она основана на выборе и составлении названия СПЗ, определенного [5а] как наименьшее структурное звено, повторение которого описывает структуру полимера. Название полимера есть название этого повторяющегося звена с префиксом «поли», «катена» или другим структурным индикатором, а также названиями для концевых групп, если это необходимо.

Название СПЗ формируется путем последовательного, в соответствии с расположением СПЗ в цепи, наименования составных частей, являющихся *наибольшими структурными фрагментами* СПЗ из тех, которые могут быть названы в соответствии с принятыми принципами неорганической и (или) координационной номенклатуры [4]. Соответственно названия мостиковых лигандов, которые не делятся на меньшие составные части, строятся в соответствии с координационной номенклатурой лигандов [4].

Хотя данная процедура дает возможность построить недвусмысленное название полимера, она не обязательно приведет к единственному названию. Чтобы получить единственное название полимера, необходимо выбрать единственное предпочтительное СПЗ. Это можно сделать следующим образом:

- (1) идентифицировать СПЗ и его составные части;
- (2) ориентировать СПЗ, т. е. определить составную часть, с которой начинается СПЗ и расположить скелет полимерной цепи таким образом, чтобы остальные составные части СПЗ были записаны слева направо;
- (3) назвать СПЗ в два этапа:

а) назвать его составные части в соответствии с принципами неорганической и (или) координационной номенклатуры;

б) соединить названия этих составных частей, следуя предпочтительной последовательности их расположения, формируя, таким образом, название СПЗ.

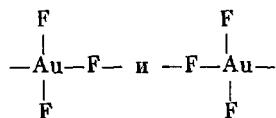
Замечание: Важно идентифицировать и ориентировать СПЗ, насколько это возможно, до формирования названия СПЗ. Однако иногда выбор

этой единственной ориентации будет зависеть от названия каждой из составных частей.

Идентификация СПЗ. Во многих случаях структура полимера настолько проста, что идентификация СПЗ и его составных частей не вызывает затруднений.

Пример.

В полимере $\left(\begin{array}{c} \text{F} \\ | \\ -\text{Au}-\text{F}- \\ | \\ \text{F} \end{array} \right)_n$ двумя возможными СПЗ являются

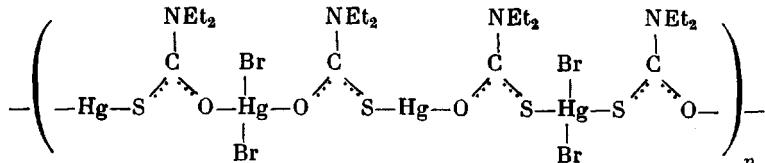


Однако во многих сложных, а иногда и в некоторых простых случаях может возникнуть необходимость выбора очень длинного сегмента полимерной цепи с тем, чтобы идентифицировать возможные СПЗ.

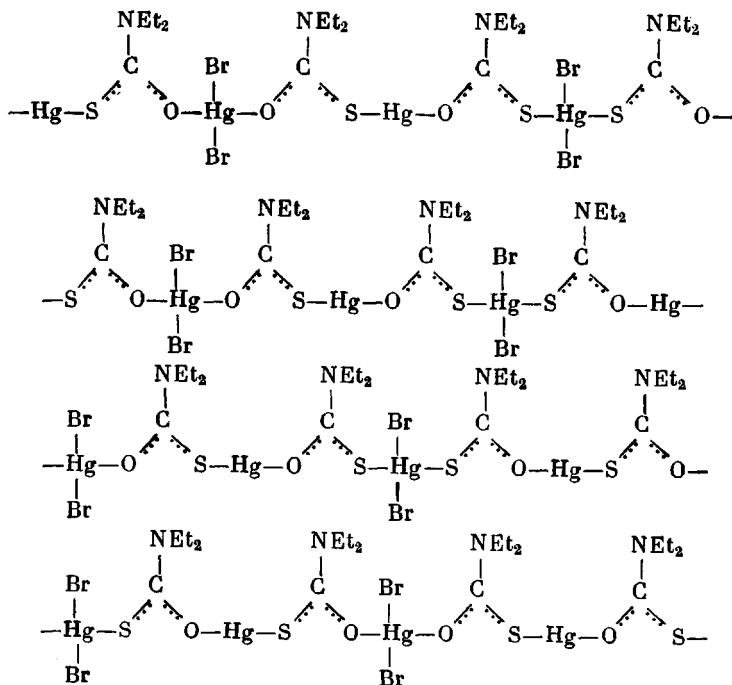
Примеры.

В полимере $\left(-(\text{Ag}-\text{CN}-\text{Ag}-\text{CN})_n \right)$ возможными СПЗ являются $-\text{Ag}-\text{CN}-$; $-\text{Ag}-\text{NC}-$; $-\text{CN}-\text{Ag}-$ и $-\text{NC}-\text{Ag}-$. (Как отмечалось выше, мостиковый лиганд $-\text{CN}$ не может быть разделен на меньшие составные части.)

2. В полимере



возможными СПЗ являются



Ориентация СПЗ. Составной частью СПЗ, с которой начинается последовательное расположение других составных частей, является централь-

ный атом (или координационный центр), первый по старшинству, т. е. наиболее старший из центральных атомов в соответствии с правилом иерархии (Правило НР-2.0, см. ниже). Этот центр записывается как *левое концевое звено СПЗ*.

Выбор направления вдоль полимерной цепи, начиная с первого по старшинству звена, предпочтительного в смысле последовательного расположения остальных составных частей СПЗ, определяется тремя главнейшими факторами, которые рассматриваются по очереди, прежде чем будет принято окончательное решение.

1. Однотяжное СПЗ предпочтительнее квазиоднотяжного, т. е. СПЗ с *двумя концевыми составными звеньями, связанными с другими одиночными СПЗ или концевой группой через единственный атом*, предпочтительнее, чем СПЗ с *только одним* таким концевым составным звеном.

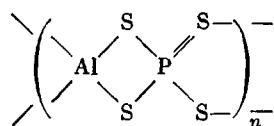
2. Предпочтительное направление расположения составных звеньев СПЗ определяется как кратчайший путь, измеренный по числу атомов в полимерной цепи от первого старшего звена к звену равного или более низкого старшинства.

3. Если все пути между составными звеньями (равными по старшинству либо от старшего к следующему, в соответствии с иерархией, звену) одинаковой длины, предпочтительным путем будет тот, который включает составные звенья, наиболее старшие в иерархии. Путь между составными звеньями СПЗ, равными по старшинству, или от более старшего звена к звену, занимающему более низкое положение в иерархии, обязательно включает звенья с еще более низким положением в иерархии, и часто состоит из органических лигандов. Следовательно, чтобы определить предпочтительное направление в полимерной цепи, может оказаться необходимой иерархия звеньев, принятая для линейных органических полимеров [1, 2].

Дальнейшее развитие этих основных принципов дано в Правиле НР-2.0 и иллюстрируется в соответствующих разделах, относящихся к наименованию отдельных полимеров.

Образование названия СПЗ. Название СПЗ однотяжного и квазиоднотяжного неорганического или координационного полимера базируется на скелете цепи, состоящем из центральных атомов и мостиковых лигандов, если они имеются. Все неорганические или координационные полимеры имеют один центральный атом или более, но могут иметь или не иметь мостиковые лиганда. Гомоатомные неорганические полимеры рассматриваются как состоящие только из центральных атомов. Если имеются центры, моноядерные или полиядерные, и ассоциированные с ними лиганды (за исключением лигандов между центральными атомами в скелете цепи), то они называются с использованием обычных принципов координационной номенклатуры. *Название мостикового лиганда имеет префикс в виде греческой буквы μ .*

Основной принцип образования названий органических полимеров — выбор наибольших структурных фрагментов в скелете цепи, которым могут быть присвоены названия мультивалентных радикалов как фрагментов СПЗ. При образовании названий неорганических полимеров этот принцип используется для выбора мостиковых лигандов в СПЗ. Если имеется несколько возможностей для такого выбора, выбирается наибольшая группа, которая может быть названа с помощью методов, принятых для полидентатных лигандов. Например, в полимере, показанном ниже, СПЗ может рассматриваться как фрагмент, состоящий из двух центральных атомов, соединенных серными лигандами:



Однако принцип выбора наибольшего мостичного лиганда требует, чтобы в качестве мостикового был выбран лиганд фосфотетратиоато ($3-$).

Строгое приложение этого принципа к неорганическим или координационным полимерам должно привести к выбору полиядерных координационных центров как наибольших структурных фрагментов в скелете цепи. Поскольку в настоящее время отсутствуют официально принятые правила для однозначного наименования и/или порядка расположения друг за другом определенных типов полиядерных координационных центров, в некоторых случаях представляет неудобство использование полиядерных координационных центров как фрагментов СПЗ в неорганических и координационных полимерах. Следовательно, принцип наибольшего фрагмента не всегда может быть применен по отношению к координационным центрам СПЗ, и в рамках настоящих правил полиядерные центры используются как фрагменты СПЗ тогда, когда неудобно называть такие структурные единицы путем перечисления их моноядерных центров (Правило НП-5.0). Однако ниже в иллюстративных целях названия полимеров, сформированные с использованием полиядерных фрагментов, в некоторых примерах приводятся как альтернативные.

Итак, когда названы составные фрагменты СПЗ, название СПЗ образуется помещением названия старшего фрагмента перед названием остальных составных фрагментов в порядке их чередования, в предпочтительном направлении вдоль данной полимерной цепи.

ПРАВИЛА

Правило НП-1.0. Общее название полимера.

НП-1.1. Название полимера, СПЗ которого известно, но пространственная структура (Примечание 5) которого может быть неизвестна или нет необходимости в ее точном определении, состоит из префикса «поли» и названия СПЗ (см. Правила НП-3.0 – НП-7.0), заключенного в квадратных скобках, т. е. поли[СПЗ] (см. Примечание 6).

НП-1.2. Если нужно указать на наличие определенного числа СПЗ, вместо префикса «поли» может быть использован нужный числительный префикс [36], например дека[СПЗ].

НП-1.3. Линейный полимер обозначается префиксом «катена» перед названием полимера, образованным согласно правилам НП-1.1 и НП-1.2 (см. Примечание 7), например катена-поли[СПЗ].

НП-1.4. Концевые группы полимера, если это нужно, могут быть указаны с помощью специальных префиксов, включающих греческие буквы α или ω , которые ставятся перед названием полимера, образованным согласно правилам НП-1.1, НП-1.2, НП-1.3, например α -(концевая группа), ω -(концевая группа)-катена-поли[СПЗ]. Подробнее см. Правило НП-8.1.

Правило НП-2.0. Правила старшинства, используемые при выборе СПЗ. Многие однотяжные и квазиоднотяжные неорганические и координационные полимеры могут быть представлены несколькими модификациями повторяющихся звеньев, которые в свою очередь удобно представить в виде последовательности фрагментов меньшего размера. Приведенные ниже правила касаются необходимых приемов определения предпочтительного СПЗ, соответствующего расположению составных звеньев в нем в порядке старшинства.

НП-2.1. Выбор старшего составного звена.

НП-2.1.1. Самое старшее составное звено, т. е. то звено, с которого должно начинаться СПЗ неорганического или координационного полимера, должно содержать один или более центральных атомов; мостиковые группы между центральными атомами в скелете полимерной цепи не могут являться старшими звеньями (см. Примечание 8).

НП-2.1.2. Если в СПЗ неорганического или координационного полимера имеется два или более центральных атома, старшим звеном будет то, которое содержит центральный атом, находящийся последним в варианте периодической таблицы Д. И. Менделеева (4д), если следовать вдоль линии, начинающейся в правом верхнем углу таблицы (см. Примечание 9):

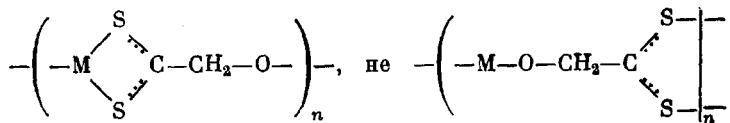
НП-2.1.3. Если необходимо уточнить, какое из звеньев в СПЗ линейного или координационного полимера является старшим, то предпочтение отдается (в указанном порядке):

- а) полиядерному координационному центру, с тем чтобы уменьшить число центральных атомов и использовать полиядерные центры как звенья СПЗ (см. «Образование названия СПЗ» в разделе «Основные принципы»);
 - б) центральному атому или координационному центру с наибольшим числом координированных атомов, за исключением координационных атомов в мостиковых лигандах, находящихся в скелете полимерной цепи;
 - в) центральному атому или координационному центру, название которого, включая лиганды и их префиксы (указывающие повторения, если они имеются), названия которых отличаются от названия мостиковых лигандов в скелете полимерной цепи, предпочтительнее с точки зрения алфавита, т. е. название начинается с буквы, стоящей в алфавите раньше.

НП-2.2. Выбор предпочтительного направления вдоль полимерной цепи для расположения последовательности составных звеньев СПЗ. После того как старшие звенья СПЗ были определены в соответствии с правилами старшинства (Правило НП-2.1), необходимо руководствоваться следующими основными принципами (в тех случаях, когда они применимы).

НП-2.2.1. Если СПЗ может быть изображено в виде однотяжного либо двутяжного звена, предпочтение отдается однотяжному СПЗ (см. примечание 10).

Пример (M – центральный атом)



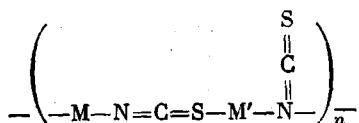
НП-2.2.2. Кратчайший путь. Предпочтительным направлением вдоль полимерной цепи для последовательного расположения составных фрагментов СПЗ является направление, которое в первую очередь приводит к кратчайшему пути от составного фрагмента наивысшего старшинства к фрагменту равного старшинства или следующему по старшинству в соответствующей иерархии. Длиной пути между этими фрагментами называется число атомов в кратчайшей цепочке из атомов между одним и другим фрагментами.

Примеры (M – центральный атом).

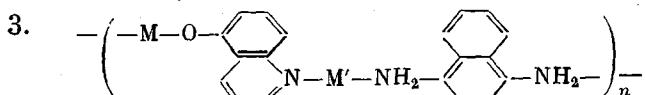
1. $\left(\begin{array}{c} \text{R} \\ | \\ -\text{M}-\text{S}-\text{M}'-\text{NH}_2-\text{NH}_2- \end{array} \right)_n$ предпочтительнее, чем
 $\left(\begin{array}{c} \text{R} \\ | \\ -\text{M}-\text{NH}_2-\text{NH}_2-\text{M}'-\text{S}- \end{array} \right)_n$

Путь длиной в один атом (через тиолато лиганд) предпочтительнее пути длиной в два атома (через лиганд гидразин)

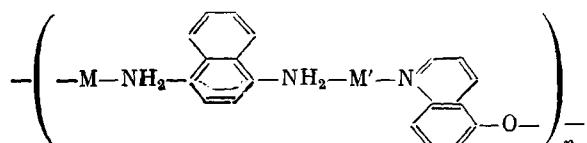
2. $\left(\begin{array}{c} S \\ || \\ C \\ || \\ -M-N-M'-N=C=S- \end{array} \right)_n$ предпочтительнее, чем



Путь длиной в один атом (через атом азота в изотиоцианато лиганде) предпочтительнее пути длиной в три атома (через все атомы изотиоцианато лиганда).



предпочтительнее, чем

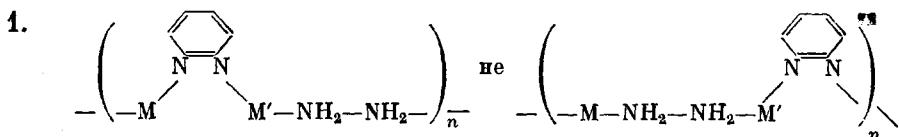


Путь длиной в пять атомов (через 5-хинолинолато лиганд) предпочтительнее, чем путь длиной в шесть атомов (через 1,4-нафталиндиамин лиганд).

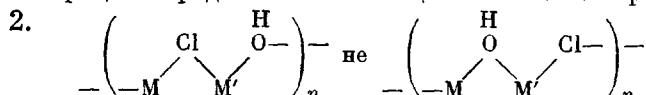
НП-2.2.3. Если имеются пути одинаковой (наименьшей) длины между двумя составными фрагментами одинакового, наивысшего старшинства, или между составным фрагментом наивысшего старшинства и составным фрагментом, следующим по старшинству, предпочтительное направление определяется путем сопоставления типов структур и атомов, включенных в соответствующие отрезки, независимо от того, как будут названы составные фрагменты в окончательном названии СПЗ, если, конечно, нет какого-либо иного выбора.

НП-2.2.3.1. Для выбора предпочтительного направления используются те же принципы, которые положены в основу номенклатурных правил для органических полимеров [2c]; фундаментальный порядок расположения по старшинству выглядит следующим образом: гетероциклы — ациклические гетероатомы — карбоциклы — ациклические углеродные атомы или цепочки из этих атомов (см. Правило 2.12 в [2c]). Внутри этих классов иерархия определяется: для гетероциклов (см. Примечание 11) Правилом 2.23 [2c], для ациклических гетероатомов (см. Примечание 11) Правилом 2.31 [2c], для карбоциклов — Правилом 2.41 [2c], для ациклических цепей Правилом 2.42 [2c].

Примеры (M — центральный атом).



Гетероцикл предпочтительнее ациклической гетероцепи.



Лиганд Cl предпочтительнее лигандного атома O.

НП-2.2.3.2. Заместители при атомах или группах используются для выбора более предпочтительного пути, если эти пути с других точек зрения равнозначны; при этом следует использовать принципы, которые изложены в Правиле 2.42 для органических полимеров [2c].

НП-2.2.3.3. Если имеется необходимость дальнейшего выбора между путями, идентичными с точки зрения приведенных выше принципов, то выбирается наикратчайший путь согласно Правилу НП-2.2.2. от старшего фрагмента к фрагменту, наиболее предпочтительному с точки зрения структурных особенностей.

Примеры (M – центральный атом).

1. $-(\text{M}-\text{N}\equiv\text{C}-)_n$, и $-(\text{M}-\text{C}\equiv\text{N}-)_n$

Гетероатом N предпочтительнее атома углерода, и, следовательно, в СПЗ его следует располагать как можно ближе к старшему фрагменту.

$$2. \quad -\left(-M-N\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_4 \\ | \\ \text{C}_6\text{H}_3\text{O}- \end{array}\right)_n, \quad \text{Hg} \quad -\left(-M-O\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_4 \\ | \\ \text{C}_6\text{H}_3\text{N}- \end{array}\right)_n$$

Гетероцикл предпочтительнее гетероатома О, и, следовательно, в СПЗ его следует располагать как можно ближе к старшему фрагменту М.

НП-2.2.3.4. Если тем не менее выбор еще существует, предпочтение отдается лиганду по алфавитному принципу.

Правило НП-3.0. Регулярные однотяжные неорганические и координационные полимеры. Названия регулярных неорганических и координационных полимеров состоят из названия предпочтительного СПЗ, помещенного в соответствующее общее название для полимера, как указано в Правиле НП-1.0.

НП-3.1. Названия повторяющихся составных звеньев с гомоатомной основной цепью состоят из названия моноядерного центрального атома вместе с боковыми группами (если они имеются) как лигандами.

Примеры (см. Примечание 12).

НП-3.2. Названия составных повторяющихся звеньев с основной цепью, состоящей из моноядерного центрального атома и одного мостикового лиганда, образуются из названия центрального атома, префикс которого образован из названия ассоциированного с ним немостикового лиганда и идущего следом названия мостикового лиганда с префиксом μ (см. Примечание 13).

Примеры.

--(N=S)_n катена-поли[азот-μ-тио]. (см. Правило НП-3.2.1.)

2. $\left(\begin{array}{c} \text{NH}_3 \\ | \\ -\text{Zn}-\text{Cl}- \\ | \\ \text{Cl} \end{array} \right)_n$

кетена-поли[(амминхлороцинк)- μ -хлоро].

$$3. \quad -\left(\begin{array}{c} S=C(NH_2) \\ | \\ --Ag--Cl-- \end{array}\right)_n$$

катена-поли[амминхлороцинк]-серебро]- μ -хлоро].

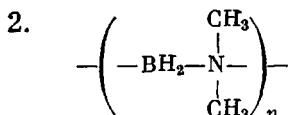
НП-3.2.1. Если необходимо выбрать, какой из атомов является центральным, то выбирается старший элемент согласно иерархии их расположения в таблице Менделеева (см. Правило НП-2.1.2).

Примеры.

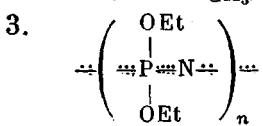
$$1. \quad -\left(\begin{array}{c} \text{Ph} \\ | \\ -\text{Si}-\text{O}- \\ | \\ \text{Ph} \end{array}\right)_n$$

*катена-поли[(дифенилкремний) -
μ-оксо]* (Примечание 14)

¹ В латинском алфавите F расположено выше ІІ (прим. переводчика).



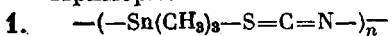
катена-поли[(дигидробор)- μ - (диметиламидо)]



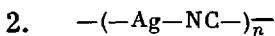
катена-поли[(триметилолово)- μ - (триоцианато-S : N)]

НП-3.2.2. Выделенные курсивом и разделенные двоеточием символы элементов, указывающие координирующие атомы мостиковых лигандов в основной цепи, помещают в соответствующем месте названия СПЗ. Символ элемента перед двоеточием относится к центральному атому, расположенному в СПЗ непосредственно перед мостиковыми лигандом, а символ элемента после двоеточия относится к центральному атому, расположенному в СПЗ или же полимерной цепи сразу/же после мостикового лиганда.

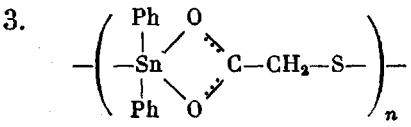
Примеры.



катена-поли[(триметилолово)- μ - (триоцианато-S : N)]



*катена-поли[(серебро- μ - (циано-N : C)] (не *катена-поли[серебро- μ - (циано-C : N)]*) (см. Правило НП-2.3.3.)*

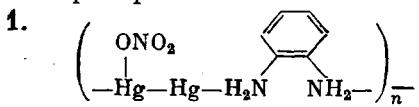


катена-поли[(дифенилолово)- μ - [меркаптоацетато(2-) - O, O' : S] (порядок расположения фрагментов дается Правилом НП-2.2).

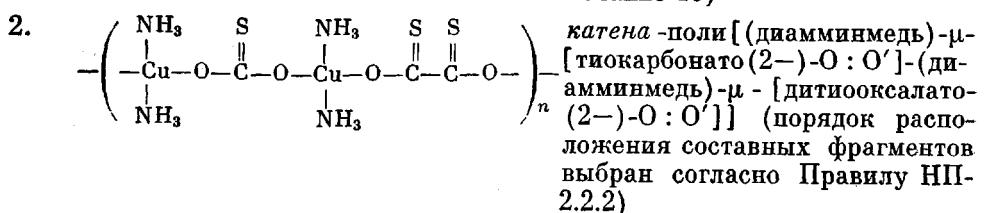
Если после использования принципов, изложенных в правиле НП-2.2, остается возможность выбора порядка расположения составных фрагментов в СПЗ, то выбирается такой порядок, чтобы символы координирующих атомов мостикового лиганда располагались в алфавитном порядке (см. пример 6, Правило НП-3.3).

НП-3.3. Принципы, изложенные в Правиле НП-3.2, распространяются на образование названий составных повторяющихся звеньев, содержащих более одного центрального атoma и не более одного мостикового лиганда между центральными атомами полимера. Старший центральный атом выбирается согласно Правилу НП-2.1, а порядок расположения составных фрагментов — Правилу НП-2.2.

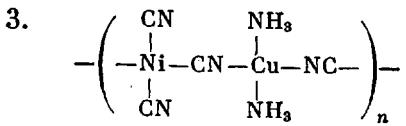
Примеры.



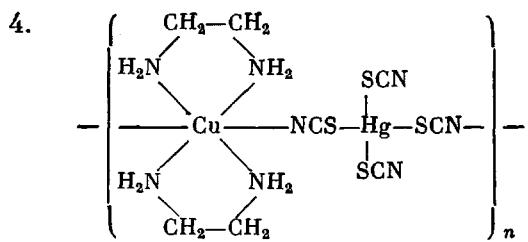
*катена - поли[(нитратортут) - (нитратортут) - μ -(o-фенилендиамин-N : N')] (не *катена-поли[(нитратортут) - μ -(o-фенилендиамин-N : N')-нитратортут)]:* Правило НП-2.2.2) (см. Примечание 16)*



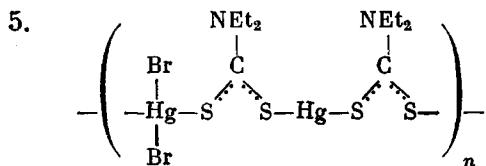
катена - поли[(диамминмедь)- μ - [тиокарбонато(2-) - O : O']- (диамминмедь)- μ - [дитиооксалато(2-) - O : O']] (порядок расположения составных фрагментов выбран согласно Правилу НП-2.2.2)



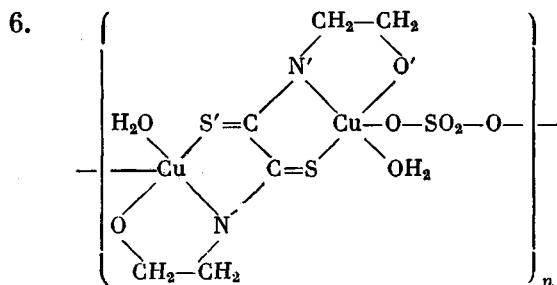
катена-поли[[бис-(циано-C) никель] - μ - (циано-C : N)- (диамминмедь) - μ - (циано - N : C)] (старший фрагмент выбран согласно Правилу НП-2.1.2)



катена-поли[[бис(этилендиамин-N : N') медь]- μ -(тиоцианато-N : S - [бис - тиоцианато-S) ртуть]- μ -(тиоцианато-S : N)]

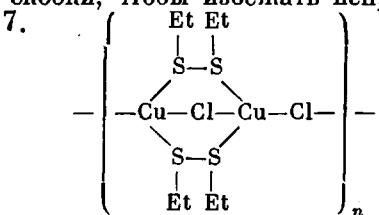


катена - поли[(дигидроортути)- μ -(диэтилдитиокарбамато-S : S')-ртуть- μ -(диэтилдитиокарбамато-S : S')]
(старший фрагмент выбран согласно Правилу 2.1.3. (б))

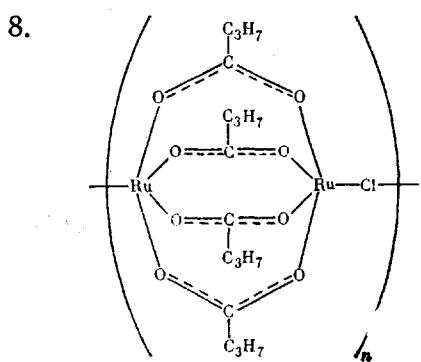


катена-поли[(аквамедь)- μ -[N, N' - бис(2 - гидроксиэтил)дитиоксамидо (2-) - N, O, S' : N', O', S] (аквамедь)- μ -[сульфато(2-) - O : O']] (см. Примечание 17)

Мостиковые лиганды между одной и той же парой центральных атомов располагаются в алфавитном порядке, причем перед названием каждого ставится греческая буква μ , и все названия помещаются в квадратные скобки, чтобы избежать неправильную интерпретацию названия СПЗ.



катена - поли[медь - [μ - хлоробис - μ - (диэтилдисульфид - S : S')]-медь- μ -хлоро] (порядок расположения выбран согласно Правилу НП-2.2.1) (см. Примечание 18)

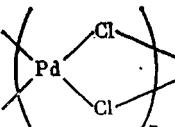
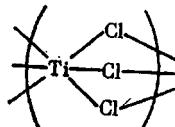
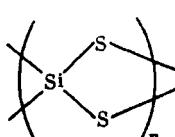
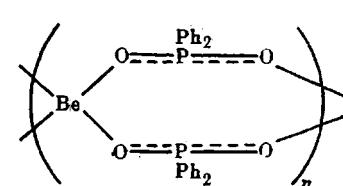
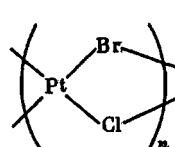
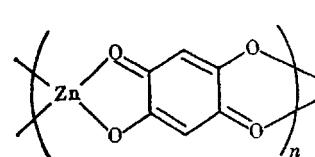
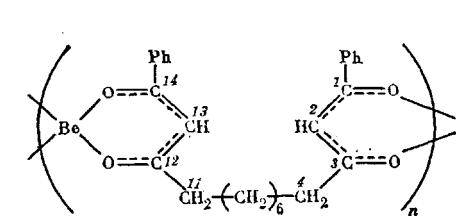


катена - поли[рутений - тетракис- μ -(бутирато - O : O') - рутений(Ru - Ru) - μ - хлоро] (порядок расположения выбран согласно Правилу НП-2.2.1) (см. Примечание 19)

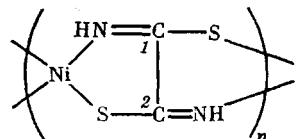
Правило НП-4.0. Регулярные квазиоднотяжные координационные полимеры. Названия регулярных квазиоднотяжных координационных полимеров образуются путем добавления названия предпочтительного СПЗ к соответствующему общему названию полимера, как указано в Правиле НП-1.0.

НП-4.1. Названия составных повторяющихся звеньев с основной цепью, состоящей из моноядерного центрального атома и двух или более одинаковых или разных мостиковых лигандов, образуются из названия центрального атома с префиксом, образованным из названия ассоциированного с ним немостикового лиганда (лигандов) и следующими за ним названиями мостиковых лигандов, каждый из которых имеет в качестве префикса греческую букву μ . Число одинаковых мостиковых лигандов, если оно больше единицы, указывается соответствующим числовым префиксом; разные мостиковые лиганды размещаются в алфавитном порядке и после названия каждого лиганда, если необходимо, помещаются нужные отметки.

Примеры.

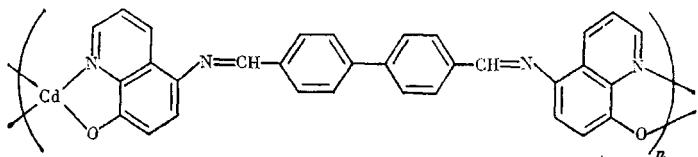
1.  **катена-поли[палладий - ди - μ -хлоро]** (по правилам 1970 г. [4д] катена-ди- μ -хлоро - палладий).
2.  **катена - поли[титан - три- μ -хлоро]**
3.  **катена-поли[кремний-ди- μ -тио]**
4.  **катена - поли[бериллий - бис- μ -[дифенилфосфинато(1-) - O : O']]**
5.  **катена-поли[платина (μ - бромо- μ -хлоро)]**
6.  **катена - поли[цинк- μ -[2,5 - ди-гидрокси-*n*-бензоинонато(2-) - O¹,O² : O⁴,O⁵]]**
7.  **катена - поли[бериллий- μ -[1,14-дифенил-1,3,12,14-тетрадеканатетронато(2-) - O¹,O³ : O¹²,O¹⁴]]**

8.



катена-поли[никель - μ - [дитиооксимидато(2-) - N¹,S² : N²,S¹]]

9.

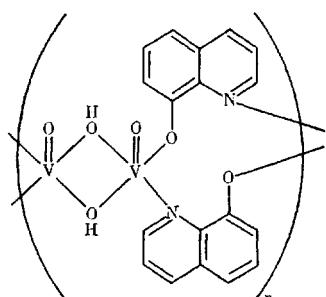


катена-поли[кадмий - μ - [[5,5'-(4,4'-бифенилилен-бис-(метилиденнитрило)]ди-8-хинолинолато] (2-) - N¹,O : N¹',O']

НП-4.2. Названия составных повторяющихся звеньев, содержащих более одного центрального атома, образуются в соответствии с Правилом НП-4.1. Старший центральный атом выбирается в соответствии с Правилом НП-2.1, а порядок расположения фрагментов – Правилом НП-2.2.

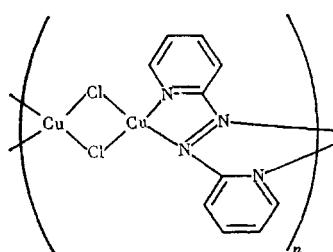
Примеры.

1.



катена-поли[(оксovanадий - ди-гидроксо - оксованадий)-[μ -(8-хинолинато-N : O)- μ -(8 - хинолинато-O : N)]] (порядок расположения определяется Правилом НП-2.2.2)

2.



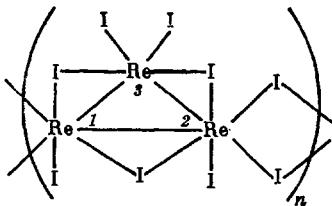
катена - поли[медь-ди- μ -хлоромедь- μ -[2,2'-(азо - N : N')-дипиридин-N' : N]] (порядок расположения определяется Правилом НП-2.2.2)

Правило НП-5.0. Однотяжные и квазиоднотяжные координационные полимеры с полиядерными координационными центрами. Названия однотяжных и квазиоднотяжных координационных полимеров с одним полиядерным координационным центром образуются практически таким же образом, как и названия полимеров с моноядерными центрами. Полиядерный центр является старшим фрагментом и название СПЗ начинается с него. Оба положения в полиядерном комплексе, к которым присоединены мостиковые лиганда, указываются разделенными двоеточием цифровыми индексами, помещенными между названиями полиядерного центра и названиями мостикового лиганда; индексы перед двоеточием относятся к предшествующему полиядерному центру в СПЗ, а индексы после двоеточия – к следующему полиядерному центру в полимерной цепи.

Примеры.

1. $-\left(-\text{октаэдро-W}_6(\mu-\text{Br}_3)(2,3,4,5-\text{Br}_4--)\right)-(6:1)-(Br_4)-\right)_n-$

катена - поли[(окта - μ - бромо - 2,3,4,5 - тетрабромооктаэдро-гексавольфрам)-6 : 1- μ -[тетрабромидо(2-)]]

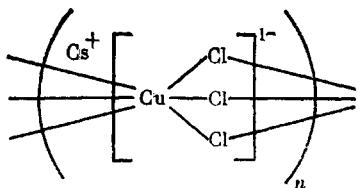


катена - поли[1,2 : 1,3 : 2,3-три- μ -иодо - 1,2,3,3 - тетраиодо - три-ангило - трирений(3Re - Re)]-2,2 : 1,1-ди- μ -иодо] (см. Примечание 20)

Правило НП-6.0. Регулярные однотяжные и квазиоднотяжные неорганические и координационные полимеры с ионными СПЗ. Названия регулярных однотяжных и квазиоднотяжных неорганических и координационных полимеров с ионными СПЗ образуются с помощью общих принципов, изложенных в Правилах НП-3.0, 4.0 и 5.0. Заряд СПЗ может быть указан с помощью числа Эванса — Бассетта, помещенного после названия ионной части СПЗ. Степень окисления центрального атома может быть указана числом Стока; в данном случае эти числа присоединяются к названию центральных атомов обычным способом.

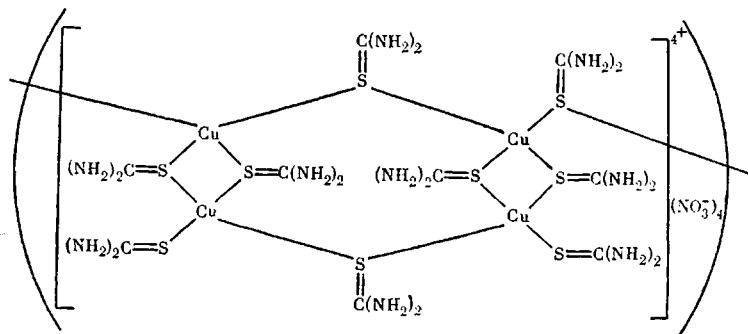
Примеры (см. Примечание 21).

1.



катена - поли[цезий[купрат-три- μ -хлоро](1-)] или катена-поли[цезий[купрат(II) - три- μ -хлоро]]

2.

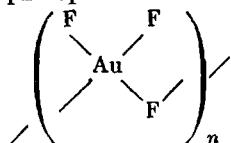


катена-поли[[[бис- μ - (тиомочевина - S,S)-2-(тиомочевина-S)димедь]-1,2 : 1,2-[бис- μ - (тиомочевина - S,S)-2-(тиомочевина - S)димедь] - 1 : 1 - μ - (тиомочевина - S : S)](4+)тетранитрат];
катена - поли[[[бис - μ - (тиомочевина - S,S)-2-(тиомочевина - S)димедь(I)]-1,2 : 1,2-[бис - μ - (тиомочевина-S :S)] [бис- μ - (тиомочевина - S,S)-2-(тиомочевина - S)димедь(I)]-1 : 1 - (μ -тиомочевина - S : S)]тетранитрат]

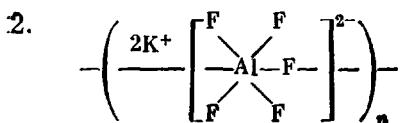
Правило НП-7.0. Стереохимическая конфигурация СПЗ. Стереохимическая конфигурация СПЗ, содержащего один моноядерный центральный атом и один мостиковый лиганд, может быть указана с помощью префиксовых, помещенных перед полным названием полимера (см. Примечание 22).

Примеры.

1.



цикло-катена - поли[(дифторозолото)- μ -фторо]



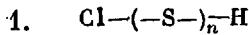
транс - катена - поли[дикалий [[(тетрафтороалюминат) - μ - фторо] (2-)]]
транс - катена - поли[дикалий [[(тетрафтороалюминат(III)) - μ -фторо]]] (неорганическая номенклатура не требует использования числа Стока для алюминия)

Правило НП-8.0. Концевые группы линейных или координационных полимеров. Названия концевых групп линейных и координационных полимеров помещают в виде префиксов перед названием полимера (см. Правило НП-1.4).

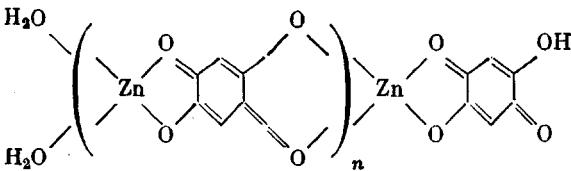
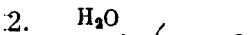
НП-8.1. Группы, присоединенные к первому составному фрагменту предпочтительного СПЗ, т. е. к старшему координационному центру, записанному с левого края СПЗ, называют так же как лиганды, и отмечают греческой буквой α .

Краевые группы, присоединенные к другому концевому фрагменту предпочтительного СПЗ, называют как лиганды, если они присоединены к центральному атому, либо, если они присоединены к мостиковому лиганду — как центральный атом, используя при этом обычные принципы координационной номенклатуры; эти концевые группы обозначаются греческой буквой ω .

Примеры.



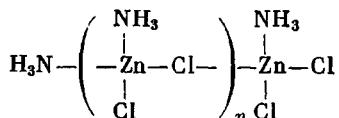
α - хлоро- ω -гидро - катена-поли-[серы]



α,α - диаква- ω -[[2,5 - дигидрокси - n - бензохинонато(1-) - O¹,O²]цинк] - катена - поли[цинк- μ -[2,5 - дигидрокси- n -бензохинонато(2-) - O¹,O² : O¹,O²]]]

НП-8.2. Если необходимо установить лиганды, которые должны быть включены в концевую группу или в СПЗ, выбор в качестве концевой группы лиганда производится по алфавитному признаку:

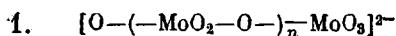
Пример.



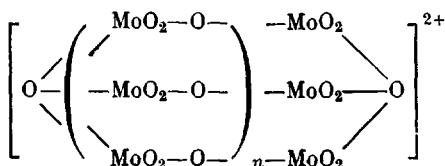
α - аммин - ω - (амминдихлороцинк) - катена - поли[(амминхлороцинк)- μ -хлоро]

НП-8.3. Названия концевых групп, которые могут рассматриваться как ионные, образуются обычным способом с использованием принципов координационной номенклатуры. Величина заряда указывается с помощью числа Эванса — Бассетта, помещенного в конце названия полимера.

Примеры.



[α - оксо- ω - (триоксомолибдат) - катена-поли[(диоксомолибден)- μ -оксо]](2-)



[α - μ_3 -оксо- ω - [μ_3 -оксо-трис(диоксомолибден)] - трис[катена - поли[(диоксомолибден) - μ - оксо]]](2+) (см. Примечание 23)

Примечание 1.

Подготовлен на основе документа «Номенклатура полимеров, базирующаяся на структуре. II. Однотяжные неорганические и семиорганические полимеры», подготовленном Номенклатурным комитетом Полимерного отделения Американского химического общества (1977 г.).

Примечание 2.

Тривиальные названия «силоксановых» полимеров базируются на названии фрагмента $-\text{SiH}_2-\text{O}-$, которые вместе с заместителями помещаются в скобки с префиксом «поли» перед скобками. Названия низкомолекулярных силоксановых полимеров могут быть образованы с использованием префикса «олиго» или численного префикса вместо «поли», как описано в правилах для органических полимеров [1, 2].

С другой стороны, названия специфических низкомолекулярных, ациклических силоксанов общей формулы $\text{H}_3\text{Si}-[-\text{O}-\text{SiH}_2-]_n-\text{O}-\text{SiH}_3$, образуются согласно Правилу D-6.22 [За]. Образованные подобными способами названия похожи, но не идентичны; например, если в приведенной выше формуле $n=2$, то название будет тетрасилоксан. В этих названиях заместители образуют префиксы, например дека-метилтетрасилоксан.

Примечание 3.

Это название представляет собой гибрид аддитивной и заместительной номенклатуры и не удовлетворяет полностью правилам ни той, ни другой системы.

Примечание 4.

В номенклатурных правилах для органических полимеров [1, 2] составными фрагментами СПЗ являются наибольшие структурные фрагменты, которые могут быть названы как бивалентные или мультивалентные радикалы согласно принципам органической номенклатуры [3].

В регулярных однотяжных и квазидонотяжных неорганических и координационных полимерах одиночные центральные атомы, моноядерные координационные центры и мостиковые лигандаe являются составными фрагментами СПЗ. Полиядерные координационные центры используются только при соблюдении определенных условий (см. раздел «Образование названия СПЗ» в главе «Основные принципы»).

Примечание 5.

Линейная цепь, сшитый, разветвленный полимер и т. д.

Примечание 6.

Хотя правила для образования названий линейных органических полимеров [1, 2] не приспособлены для описания пространственных структур, такая детализация позволяет префиксу «поли» быть очень общим дескриптором, не имеющим другого назначения, как только указывать на наличие некоторого количества СПЗ.

Примечание 7.

Префикс «катена» находится в согласии с существующими правилами для образования названий соединений с протяженной структурой [4а, 4б]. В минералогии и геохимии силикатные цепи обозначаются префиксом «ино»; префиксы «фило» и «текто» используются соответственно для обозначения двумерных структур [42]. Термин *катена* не следует путать с такими терминами, как катенан, или катена соединения, используемые для описания «сплеленных» колец в органических соединениях.

Примечание 8.

Это находится в соответствии с принципами координационной номенклатуры, в которой всегда особенно подчеркивается координационный

центр. В СПЗ неорганического или координационного полимера всегда имеется как минимум один такой центр.

Примечание 9.

Следует отметить, что этот порядок старшинства не совпадает с порядком старшинства для гетероатомов в правилах для органических полимеров [2].

Примечание 10.

Этот принцип совершенно аналогичен принципу минимизации свободных валентностей в СПЗ при образовании названий органических полимеров, если есть необходимость выбора между бивалентностью или более высокой валентностью СПЗ после того, как были приняты во внимание все факторы, касающиеся установления составного звена наивысшего старшинства [2].

Примечание 11.

Важно отметить, что порядок старшинства для гетероатомов и лигандов, предписываемый данными правилами, не идентичен порядку старшинства для координационных центров (см. Правило НП-2.1.2).

Примечание 12.

Согласно правилам составления названий линейных органических полимеров [1, 2], такие неорганические гомоатомные полимеры могут быть названы: поли(сульфандиил); поли(диметилстанилен) или поли(диметилстанинандиил); поли (1,1-дифтор-2,2-диметилдисилилан-1,2-диил).

Примечание 13.

Следует подчеркнуть, что мостиковый лиганд не включается в название вместе со всеми другими лигандами, соединенными с центральным атомом. Однако мостиковые лиганды полиядерных координационных центров, не являющиеся фрагментами основной цепи, ставятся на обычное место в названии полиядерного координационного центра (см. Правило НП-5.0).

Примечание 14.

Согласно правилам для линейных органических полимеров [1, 2], этот полимер может быть ориентирован и назван: поли[окси(дифенилсилилен)].

Примечание 15.

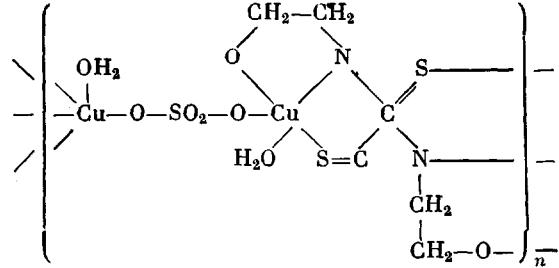
Согласно правилам для линейных органических полимеров [1, 2], этот неорганический полимер может быть ориентирован и назван: поли[нитрило(диэтоксифосфоранилиден)].

Примечание 16.

Отсутствие указания на наличие связи металл — металл в данном примере находится в соответствии с существующими координационными правилами для ди- и полиядерных комплексов [4f].

Примечание 17.

Ориентация СПЗ, который начинается с центрального атома меди, стоящего сразу перед сульфато-лигандом, определяется Правилом НП-2.2.1. Такого рода ориентация приводит к менее предпочтительной квазиоднотяжной структуре полимера, как показано ниже:



Выбор между существующими двумя способами ориентации СПЗ делается согласно второму параграфу Правила НП-3.2.2. В предпочтительной ориентации порядок расположения символов элементов, указывающих на расположение мостиковых лигандов N, O, S': N', O', S, а именно: ниже в соответствующей иерархии чем порядок N', O', S : N, O, S'.

Примечание 18.

В подобных случаях может оказаться удобным рассматривать два центральных атома меди как биядерный комплекс например: катена-поли[[μ -хлоро-бис- μ - (диэтилсульфид-S : S') димедь] - μ -хлоро].

Примечание 19.

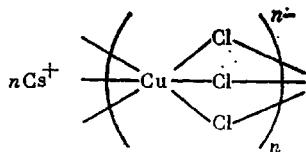
Расположение подобным образом связи металл – металл, по-видимому, не согласуется с общими положениями полимерной номенклатуры. Поэтому было бы, вероятно, более приемлемо рассматривать два центральных атома рутения как биядерный комплекс, например: катена-поли[[тетракис- μ - (бутирато-O : O') -дирутений(Ru – Ru)] - μ -хлоро].

Примечание 20.

Правила нумерации для полиядерных центров к настоящему времени еще не установлены и находятся на рассмотрении комиссией ИЮПАК по номенклатуре неорганической химии. Приведенная в данных примерах нумерация условна и используется только для удобства определения структуры данного полимера в данном документе.

Примечание 21.

С точки зрения неорганической номенклатуры, целесообразнее рассматривать эти полимеры как соли полимерных ионов, например



цезия катена-поли[[купрат-три- μ -хлоро] (1-)] или цезия катена-поли- [купрат(II)-три- μ -хлоро].

Примечание 22.

Другая форма названия, в котором стереохимический префикс помещается между префиксом «поли» и названием СПЗ, как показано ниже для приведенных в Правиле НП-7.0 двух примеров, в большей степени согласуется с принятой практикой в неорганической номенклатуре:

1. катена-поли[цис[(дифторозолото)- μ -фторо]]
 2. катена-поли[транс[дикалий[[(тетрафтороалюминат)- μ -фторо] (2-)]]]
- или
- катена-поли[транс[дикалий[[тетрафтороалюминат(III)- μ -фторо]]]]. Однако рекомендации, изложенные в Правиле НП-7.0, согласуются со стереохимической системой, рекомендованной для органических полимеров [6].

Примечание 23.

Здесь представлен однотяжный регулярный полимер, состоящий из трех цепей, соединенных концевыми оксо-группами.

ЛИТЕРАТУРА

1. American Chemical Society, «A Structure – Based Nomenclature for Linear Polymers», *Macromolecules*, 1(3), 193–198 (1968).
2. International Union of Pure and Applied Chemistry, «Nomenclature of Regular Single – Strand Organic Polymers»: (a) IUPAC Information Bulletin Appendices on Tentative Nomenclature, Symbols, Units and Standards, № 29, November, 1972; (b) *Macromolecules*, 6(2), 149–158 (1973) – a separate publication of the tentative rules (Ref. 2a); (c) *Pure Appl. Chem.*, 48(3), 373–385 (1976) – the approved rules (1975).
3. International Union of Pure and Applied Chemistry, «Nomenclature of Organic Chemistry», Sections A, B, C, D, E, F and H, Pergamon Press, 1979: (a) Rule 6.22, pp. 411–412; (b) Rule 1.1, p. 5.
4. International Union of Pure and Applied Chemistry, «Nomenclature of Inorganic Chemistry (1970)», 2nd ed., Butterworths, London, 1971: (a) Rule 7.62, pp. 71–72; (b) Table III, p. 103; (c) Rule 4.14, footnote, p. 27; (d) Table IV, p. 104; (e) Rule 1.3, example 6, p. 12; (f) Rules 7.71 and 7.72, pp. 72–73; (g) Rule 7.62, p. 71.
5. International Union of Pure and Applied Chemistry, «Basic Definitions of Terms Relating to Polymers (1974)», *Pure Appl. Chem.*, 40(3), 479–491 (1974): term 3.3, p. 482.
6. International Union of Pure and Applied Chemistry, «Stereocochemical Definitions and Notations Relating to Polymers», *Pure Appl. Chem.*, 53(3), 733–752, (1980).