

РЕКОМЕНДАЦИИ ИЮПАК ПО НОМЕНКЛАТУРЕ МАКРОМОЛЕКУЛ (ПОЛИМЕРОВ)

Руководство для авторов статей и сообщений
в области полимерной науки и технологии

Титулярный член комиссии ИЮПАК по номенклатуре макромолекул

Edward S. Wilks

E.I. du Pont de Nemours & Co., Inc.
Barley Mill Plaza, Wilmington, Delaware, 19880, USA

Данному руководству¹ легко следовать, и оно написано менее формально, чем официальные рекомендации ИЮПАК по номенклатуре макромолекул, опубликованные ранее в журнале “Pure and Applied Chemistry”.

Целью комиссии ИЮПАК по номенклатуре макромолекул является улучшение взаимодействия между специалистами в области науки о полимерах путем выработки рекомендаций для однозначного, стандартизованного и универсального представления названий и структур полимеров.

А. Рекомендации Международного союза по теоретической и прикладной химии (ИЮПАК)

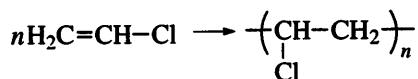
Вещество, называемое полимером, обычно отличается от низкомолекулярного соединения (не полимера) тем, что оно неоднородно по своей структуре; точнее, оно представляет собой смесь индивидуальных макромолекул. Каждая макромолекула в смеси отличается от других своей структурой и длиной. Такие различия обусловлены проявлением следующих особенностей: нерегулярностью последовательности мономерных звеньев в цепи, наличием разветвлений, различи-

ями в ориентации мономерных звеньев и структуре концевых групп.

Для всех типов полимеров (однотяжных органических, двутяжных органических, однотяжных неорганических и координационных) руководство по номенклатуре обычно описывает структуры, которые являются идеализированными или теоретическими. При этом из рассмотрения исключаются разветвления, дефектность или нерегулярность цепи.

В свете перечисленных проблем попытки дать строгое определение полимерным веществам бесполезны; следовательно, графическое представление и номенклатура полимеров требуют иного подхода. Наименование полимера частично известной или неизвестной структуры с использованием номенклатурной системы, основанной на структуре, может оказаться трудным или невозможным без определенных допущений. Тем не менее, полимеру можно дать название, используя номенклатурную систему, основанную на происхождении (номенклатурные системы, базирующиеся на структуре и на происхождении, описаны ниже).

Реакцию полимеризации мономера, например винилхлорида, обычно изображают [1] следующим образом:



Такое графическое представление полимера является скорее идеальным, чем реальным. Оно

¹ Это руководство опубликовано в 2001 г. и сейчас признается ИЮПАК частично устаревшим из-за некоторых противоречий с “Красной книгой” – Номенклатурными правилами по неорганической химии (рекомендации ИЮПАК 2005 г.) Тем не менее данное руководство продолжает оставаться наиболее практически полезным изданием ИЮПАК в отношении номенклатуры полимеров.

Пер. с англ. доц. Е.В. Черниковой под ред. проф. И.М. Паписова. Оригинальный английский текст доступен на сайте ИЮПАК <http://old.iupac.org/reports/IV/guide-for-authors.pdf>

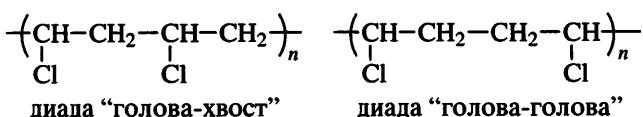
Таблица 1. Примеры названий гомополимеров

Название полимера*	Название полимера**	Название полимера*	Название полимера**
Полиакрилонитрил	Полиакрилонитрил	Поли(метакриловая кислота)	Полиметакриловая кислота
Поли(<i>n</i> -бромстирол)	Поли- <i>n</i> -бромстирол	Поли(винилпропиленовый эфир)	Поливинилпропиленовый эфир
Полибут-1-ен	Полибут-1-ен	Поливинилацетат	Поливинилацетат
Поли(1,1-дифторэтилен)	Поли-1,1-дифторэтилен	Поли(виниловый спирт)	Поливиниловый спирт
Полиэтилакрилат	Полиэтилакрилат	Поливинилфторид	Поливинилфторид
Полиэтилен	Полиэтилен	Поливинилиденфторид	Поливинилиденфторид

* По номенклатуре ИЮПАК.

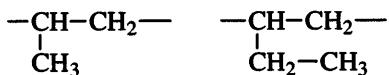
** Принятые в русскоязычной литературе.

не содержит информации о том, что полимер состоит из макромолекул (индивидуальных цепей) различной длины. Кроме того, предполагается, что все повторяющиеся звенья соединены идеальным образом, а именно по принципу "голова-к-хвосту". В реальной полимерной цепочке каждая макромолекула содержит некоторое количество диад, образованных по принципу "голова-к-голове" и "хвост-к-хвосту".



Точная последовательность повторяющихся звеньев "голова-к-хвосту", "голова-к-голове" и "хвост-к-хвосту" в каждой макромолекуле, как правило, неизвестна.

Подобная проблема возникает и для сополимеров; любой асимметричный сомономер, из-за которого в цепи возникают асимметричные повторяющиеся звенья, усложняет ситуацию. Каждое повторяющееся звено может быть ориентировано в цепи более чем одним способом, кроме того, может различаться и порядок расположения в цепи повторяющихся звеньев, образованных из сомономеров. Например, сополимер, полученный из сомономеров 1-пропена и 1-бутена, содержит два составных², или мономерных звена:



² Составное звено – атом или группа атомов, входящих в состав цепи олигомера или полимера. Термин "составное звено" употребляется традиционно, хотя по существу повторяющееся звено является "составляющим" (т.е. структурным) элементом полимерной цепи, – *прим. перевода*.

Различная комбинация этих звеньев дает несколько типов сополимеров: чередующиеся, блочные, привитые, периодические, случайные, статистические или сополимеры, структура которых не установлена.

В таких ситуациях используется номенклатура, основанная на происхождении, что позволяет избежать указанных проблем. Обсуждение номенклатурных систем, основанных на структуре и на происхождении, приведено ниже.

A1. Рекомендации ИЮПАК для номенклатурной системы, основанной на происхождении.

A1.1. Номенклатура гомополимеров.

Гомополимер, как следует из названия, представляет собой полимер, полученный из мономерных молекул только одного типа. Это может быть или реальный мономер (т.е. реагент), или гипотетический мономер; примером последнего служит гомополимер, полученный модификацией другого гомополимера.

Гомополимеры именуют, записывая после приставки "поли" название реального или гипотетического мономера. При этом названия мономеров, содержащих заместители или состоящих по меньшей мере из двух слов, берут в круглые скобки³. Некоторые примеры приведены в табл. 1.

Если требуется многократное использование скобок, ИЮПАК рекомендует ставить скобки разных типов в такой последовательности: для обозначения внутреннего содержимого – круглые, затем квадратные и далее фигурные. Скобки применяют в "циклической" последовательно-

³ В русскоязычной литературе в подобных названиях не принято ставить скобки (см. табл. 1) – *прим. перевода*.

Таблица 2. Классификация сополимеров по номенклатурной системе ИЮПАК, основанной на происхождении

Тип сополимера	Тип соединительного слова	Пример
Не уточненный или неизвестный	-со-	поли(А-со-В)
Случайный (распределение звеньев описывается законом Бернули)	-сл-	поли(А-сл-В)
Статистический (распределение звеньев описывается известным законом статистики)	-стат-	поли(А-стат-В)
Чередующийся (для двух мономерных звеньев)	-чер-	поли(А-чер-В)
Периодический (упорядоченная последовательность из более, чем двух мономерных звеньев)	-период-	поли(А-период-В-период-С)
Блок (линейная последовательность блоков)	-блок-	поли(А-блок-В)
Привитой (боковые цепи соединены с основной цепью)	-прив-	поли(А-прив-В)

Таблица 3. Примеры номенклатуры сополимеров, основанной на происхождении

Название полимера	Название полимера
Поли(пропен-со-метакрилонитрил)	Полиакрилонитрил-блок-полибутиадиен-блок-полистирол
Поли[(акриловая кислота)-сл-этилакрилат]	Поли(этиленоксид-период-этиленоксид-период-тетрагидрофуран)
Поли(бутен-стат-этилен-стат-стирол)	
Поли[(себациновая кислота)-чер-бутандиол]	Полиизопрен-прив-поли(метакриловая кислота)

сти, т.е. (...), [...], {[...]}, ([[...]]), ([{[...]}]) и т.д. В отличие от этого реферативная служба по химии (CAS) Американского химического общества использует круглые скобки для внутренних обозначений, квадратные скобки во всех остальных случаях, т.е. (...), [...], [[...]] и т.д. Такой способ расстановки скобок в ряде случаев используется при написании названий, выдержанных в стиле ИЮПАК, хотя официально ИЮПАК этого не одобряет.

Все полимеры, приведенные в табл. 1, за исключением полиэтилена, содержат асимметричные составные звенья, и ориентация каждого из них в цепи, как правило, неизвестна. Более того, различные образцы любого заданного гомополимера, представленного одним и тем же составным звеном, могут иметь различные химические и физические характеристики, например, средняя молекулярная масса или молекулярно-массовое распределение.

A1.2. Номенклатура сополимеров.

Любой полимер, полученный из мономеров более чем одного типа, обычно относят к сополимерам [2]. Как и в случае гомополимеров, каждый из сомономеров может быть реальным мо-

нером, т.е. реагентом, либо гипотетическим мономером.

Сополимеры именуют, записывая после приставки "поли" названия реальных или гипотетических мономеров. Для обозначения характера последовательности расположения структурных единиц в цепи между названиями мономеров вставляют инфикс, т.е. соединительное слово⁴.

В табл. 2 перечислены семь типов соединительных слов, используемых для обозначения последовательности структурных единиц в цепи; отдельные примеры названий сополимеров (по номенклатуре ИЮПАК) приведены в табл. 3.

Таблица 3 содержит примеры тривиальных, или полусистематических названий сополимеров. Можно также использовать и систематические названия: например, полиакрилонитрил-блок-полибутиадиен-блок-полистирол (табл. 3) можно также назвать поли(проп-2-еннилтрил)-блок-полибутила-1,3-диен-блок-полиэтенилбензолом.

ИЮПАК не требует располагать в алфавитном порядке названия сомономеров при наимено-

⁴ В русскоязычной литературе подобные обозначения для указания типа сополимеров не приняты – *прим. переводчика.*

Таблица 4. Примеры номенклатуры сополимеров, основанной на происхождении (альтернативный вид)

Название полимера
сополи(пропен/метакрилонитрил)
сл-сополи(акриловая кислота/этилакрилат)
стат-сополи(бутен/этилен/стирол)
чер-сополи(себациновая кислота/бутандиол)
блок-сополи(акрилонитрил/бутадиен/стирол)
период-сополи(этиленоксид/этиленоксид/тетрагидрофуран)
прив-сополи(изопрен/метакриловая кислота)

Таблица 5. Соединительные слова для нелинейных макромолекул и макромолекулярных агрегатов

Тип	Соединительное слово	Тип	Соединительное слово
Разветвленный (неопределенного типа)	<i>разв</i>	Сетчатый	<i>сет</i>
Разветвленный с точкой ветвления функциональности <i>f</i>	<i>f-разв</i>	Полимерная смесь	<i>смесь</i>
Гребнеобразный	<i>греб</i>	Полимер-полимерный комплекс	<i>компл</i>
Шитый	<i>в</i>	Полувзаимопроникающая полимерная сетка	<i>пеп-сет</i>
Циклический	<i>цикло</i>	Короткоцепной разветвленный	<i>к-разв</i>
Взаимопроникающая полимерная сетка	<i>вп-сет</i>	Звездообразный	<i>зв</i>
Длинноцепной разветвленный	<i>д-разв</i>	Звездообразный с <i>f</i> лучами	<i>f-зв</i>

вании сополимера, поэтому для некоторых сополимеров допустимы несколько вариантов названий. ИЮПАК также рекомендует альтернативную схему для наименования сополимеров, которая включает использование приставки “сополи” перед названием сомономеров; использование косой черты для разделения названий сомономеров; добавление перед приставкой “сополи” любого из соединительных слов, перечисленных в табл. 2, кроме -со-.

В табл. 4 приведены некоторые примеры из табл. 3, записанные с использованием альтернативной схемы. Названия сомономеров при этом не нужно брать в скобки.

A1.3. Номенклатура нелинейных макромолекул и макромолекулярных агрегатов.

Выпущенный ИЮПАК в 1997 г. документ [3] описывает номенклатуру нелинейных макромолекул (разветвленных, гребнеобразных, циклических, привитых, сетчатых и звездообразных) и макромолекулярных агрегатов (взаимопроника-

ющих полимерных сеток, полимерных смесей и полимер-полимерных комплексов), основанную на происхождении. Типы полимеров данных классов, а также соответствующие соединительные слова⁵, приведены в табл. 5. Указанные термины можно использовать в качестве соединительных слов, префиксов, либо и того и другого для указания характерных особенностей строения макромолекул.

Нелинейные полимеры именуют, используя в названии полимерного компонента или компонентов в качестве префикса соединительное слово, написанное курсивом. Некоторые примеры приведены в табл. 6.

Агрегаты макромолекул, существующие за счет взаимодействий, отличных от ковалентных связей, именуют путем введения подходящего соединительного слова, написанного курсивом,

⁵ Примеры соответствуют номенклатуре ИЮПАК, в русскоязычной литературе данные обозначения не приняты (см. также табл. 6 и 7) – *прим. переводчика*.

Таблица 6. Примеры соединительных слов, используемых как префиксы в названиях нелинейных макромолекул

Название полимера	Структурные особенности полимера
Поли(акриловая кислота)-греб-полиакрилонитрил	Гребнеобразный полимер с основной цепью из полиакриловой кислоты и ответвлениями из полиакрилонитрила
Греб-поли(этилен-стат-винилхлорид)	Гребнеобразный полимер с основной цепью неустановленного строения и ответвлениями из статистического сополимера этилена и винилхлорида
Полибутадиен-граб-(полиэтилен; полипропилен)	Гребнеобразный полимер с основной цепью из полибутадиена и ответвлениями из полиэтилена и полипропилена
Зв-(полиA; полиB; полиC; полиD)	Звездообразный полимер, каждый луч которого содержит сомономеры A, B, C и D
Зв-(полиA-блок-полиB-блок-полиC)	Звездообразный полимер, каждый луч которого состоит из триблок-сополимерных сегментов, содержащих мономеры A, B и C
Зв-полиэтиленоксид	Звездообразный полимер, полученный из этиленоксида
6-Зв-полиэтиленоксид	Звездообразный шестилучевой полимер, полученный из этиленоксида
Зв-(полиакрилонитрил; полиэтилен) (M_r 20000 : 50000)	Звездообразный полимер, содержащий лучи из полиакрилонитрила с $M_w = 20000$ и полиэтилена с $M_w = 50000$

Таблица 7. Примеры соединительных слов, используемых в названиях полимерных смесей и сеток

Название полимера
полиэтилен-смесь-полибутилен
поли(метакриловая кислота)-смесь-полиметилметакрилат
сет-поли(4-метилстирол- <i>v</i> -дивинилбензол)
сет-поли[стирол-чер-(малеиновый ангидрид)]- <i>v</i> -(полиэтиленгликоль; полипропиленгликоль)
сет-полиэтилакрилат- <i>vn</i> -сет-полиэтилен
[сет-поли(бутадиен-стад-4-этилстирол)]- <i>vn</i> -сет-[сет-поли(4-этилстирол- <i>v</i> -дивинилбензол)]

между названиями индивидуальных компонентов данного агрегата. Соответствующие примеры приведены в табл. 7.

A2. Рекомендации ИЮПАК для номенклатурной системы, основанной на структуре.

A2.1. Номенклатура регулярных однотяжных органических полимеров.

Регулярные однотяжные органические полимеры, состоящие из последовательно соединенных составных повторяющихся звеньев⁶ (СПЗ) одного типа, именуют следующим образом:

поли(составное повторяющееся звено).

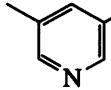
Повторяющуюся группу целиком называют как двухвалентную органическую группу в соответствии с рекомендациями ИЮПАК по наименованию органических соединений [4]. Любое СПЗ включает одну или более субъединиц, каж-

дая из которых может содержать заместитель. Некоторые примеры субъединиц приведены в табл. 8.

Перед тем как СПЗ может быть названо, оно должно быть идентифицировано (т.е. определены субъединицы, из которых оно состоит) и должна быть определена его ориентация, т.е. СПЗ должно быть записано в соответствии с правилами, которые разрабатывают как ИЮПАК [4], так и CAS [5]. Для составных повторяющихся звеньев ИЮПАК использует термин “поли(составное повторяющееся звено)”, или поли(СПЗ), а CAS – поли(структурное повторяющееся звено), или поли(СПЗ); эти термины фактически идентичны. Номенклатурные принципы ИЮПАК и CAS почти одинаковы, однако названия СПЗ, устанавливаемые этими организациями, могут различаться, поскольку ИЮПАК и CAS используют разные наименования некоторых субъединиц. Примером такого противоречия является субъединица “изопропилиден”, которая согласно требованиям CAS называется 1-метилэтилиден,

⁶ Составное повторяющееся звено – наименьшее звено, повторением которого может быть описано строение регулярного полимера, – прим. переводчика.

Таблица 8. Примеры двухвалентных компонентов, обычно используемых в качестве структурных субъединиц^a

Название	Структура	Название	Структура
1-бромэтилен	$-\text{CH}-\text{CH}_2-$ Br	1-метилэтан-1,1-диил ^г	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\ \\ \text{C} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$
бутан-1,4-диил	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$	1-оксоэтан-1,2-диил	$-\text{C}=\text{CH}_2-$
1-(хлорметил)этилен	$-\text{CH}-\text{CH}_2-$ CH_2Cl	окси	$-\text{O}-$
циклогексан-1,2-диил		1,2-фенилен ^д	
диметилсиландиил	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C} \\ \\ \text{Si} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	пиперазин-1,4-диил	$-\text{N}(\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{N})-$
этан-1,1-диил ^б	$-\text{CH}-\text{CH}_3$	пропилимино	$-\text{N}(\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3)-$
этен-1,2-диил ^в	$-\text{CH}=\text{CH}-$	пиридин-3,5-диил	
этилен	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$	силандиил	$-\text{SiH}_2-$
гидразо	$-\text{NH}-\text{NH}-$	сукцинил ^е	$-\text{C}(=\text{O})-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C}(=\text{O})-$
имино	$-\text{NH}-$	сульфандиил [*]	$-\text{S}-$
метилен	$-\text{CH}_2-$	сульфонил	$-\text{SO}_2-$

^a Даже при наличии замещения предпочтительно выбирать для наименования наибольшую из возможных субъединиц. Например, этилен не называют "метиленметиленом"; терефталоил не называют "карбонил-*пара*-фениленкарбонилом"; $-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ называют 2-оксобутан-1,4-диил, а не "метиленкарбонилэтилен".

^б ИЮПАК уже не рекомендует использовать в качестве названия субъединицы этилиден, когда эта субъединица соединена с двумя другими атомами.

^в ИЮПАК по-прежнему разрешает использовать в качестве названия субъединицы термин "винилен", но предпочтительным является термин "этен-1,2-диил".

^г ИЮПАК уже не рекомендует использовать в качестве названия субъединицы изопропилениден.

^д Разрешается использовать как термин *o*-фенилен, так и 1,2-фенилен. ИЮПАК подобным же образом допускает использование терминов *m*-фенилен и 1,3-фенилен, а также *пара*-фенилен и 1,4-фенилен.

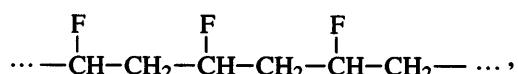
^е Допустимые названия подобных субъединиц: адипоил, глутарил, изофталоил, малонил, оксалил, фтaloил и терефталоил.

^{*} ИЮПАК по-прежнему разрешает использовать "тио" в качестве названия этой субъединицы, но предпочтительным является термин "сульфандиил".

в то время как ИЮПАК использует название 1-метилэтан-1,1-диил.

Для большинства полимерных структур СПЗ может быть записано более чем одним способом.

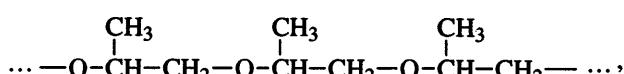
Пример 1. Для простого полимера, такого как



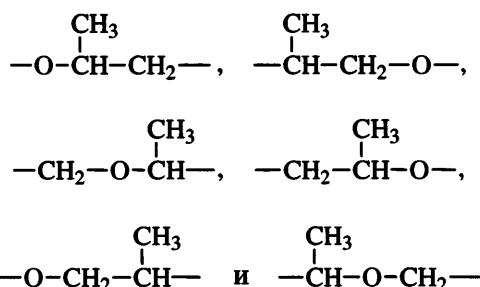
существуют два варианта написания СПЗ:



Пример 2. Для полимера более сложной структуры, такого как



можно выделить шесть вариантов написания СПЗ:



В примере 1 нужно выбрать в качестве предпочтительного один из двух вариантов; аналогичным образом, в примере 2 – один из шести вариантов. В каждом из примеров выбранное СПЗ должно быть сориентировано, после чего ему можно дать правильное название.

Весь процесс идентификации, ориентации и наименования СПЗ включает три шага, которые необходимо выполнить в указанном порядке.

Шаг А. Идентификация СПЗ. Данный шаг выполняется лучше всего путем изображения протяженного отрезка цепи, содержащего по меньшей мере два составных повторяющихся звена.

Шаг Б. Ориентация СПЗ. Это наиболее трудный этап. Для большинства типов СПЗ порядок действий приведен ниже, однако исчерпывающее рассмотрение данного вопроса выходит за рамки этой статьи.

Шаг В. Наименование всего СПЗ. После выбора ориентации звена (шаг Б) его называют как двухвалентную органическую группу, согласно обычным требованиям номенклатуры органических соединений.

Принципы, представленные ниже, разработаны для возможности определения старшинства в субъединицах, т.е. выбора той субъединицы, которая будет записана в крайнем левом положении полного СПЗ, и направления вдоль цепи, в котором следует продолжать наименование вплоть до конца СПЗ.

Старшинство

Среди двухвалентных субъединиц, из которых состоит однотяжное СПЗ, порядок старшинства следующий.

Субъединица типа (а): компонент, включающий гетероцикл

Примеры:

пиперидин-3,5-диил

тиофен-2,5-диил

Субъединица типа (б): ациклический компонент, включающий гетероатом

Примеры:

имино

окси

сульфандиил

сульфонил

Субъединица типа (в): компонент, включающий карбоциклы

Примеры:

1,3-фенилен

циклогексан-1,3-диил

Субъединица типа (г): компонент, включающий углеродные цепи

Примеры:

1-хлорэтилен

пропан-1,3-диил

Старшинство внутри типов субъединиц (а)–(г) определяется такими принципами.

Субъединица типа (а): гетероциклы. Старшинство азотсодержащих циклов выше, чем циклов, содержащих другой гетероатом [4, 6]. Дальнейшее снижение старшинства определяется наибольшим количеством колец в системе циклов, наибольшим размером индивидуального цикла в системе циклов, наибольшим количеством гетероатомов и наибольшим разнообразием гетероатомов.

Субъединица типа (б): гетероатомный ациклический компонент. Старшей двухвалентной субъединицей будет та, которая располагается ближе к правому верхнему углу периодической таблицы элементов; в порядке убывания по старшинству: O, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Hg.

Субъединица типа (в): карбоциклические компоненты. Старшинство [4] определяется наибольшим количеством колец в системе циклов, наибольшим размером индивидуального цикла в системе циклов и степенью насыщенности цикла; ненасыщенный цикл старше, чем насыщенный цикл того же размера.

Пример 3. Трехкольцевая система старше, чем двухкольцевая.

Пример 4. Двухкольцевая система, состоящая из двух шести-членных циклов, старше, чем двухкольцевая система, состоящая из одного шести-членного и одного пяти-членного циклов.

Пример 5. Система из двух конденсированных колец (два атома являются общими для обоих колец) старше, чем система из двух спироколец (один атом общий для обоих колец) [7].

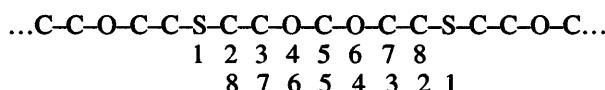
Субъединица типа (г): углеродсодержащие ациклические группы. Снижение старшинства определяется длиной цепи (длинная цепь старше, чем короткая), числом заместителей (чем больше, тем старше), порядком заместителей (чем меньше номер положения, в котором находится заместитель, тем старше) и алфавитным порядком названий заместителей.

Рассмотренные выше правила определения старшинства применяются только к субъединицам основной цепи, или скелета. Заместители в субъединицах основной цепи любого из типов (а), (б), (в) или (г) не влияют на выбор СПЗ, если только не требуется дифференцировать идентичные субъединицы цепи или по числу заместителей или по их алфавитному порядку.

Направление

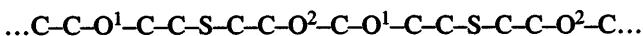
Предпочтительным является вариант, когда написание СПЗ начинают со старшей субъединицы и продолжают цепь в направлении (1) следующей такой же субъединицы или (2) следующей по старшинству субъединицы. Если в случае (1) существует несколько вариантов местонахождения такой же субъединицы, то предпочтительнее тот вариант, в котором расстояние между двумя повторяющимися субъединицами короче.

Рассмотрим повторяющееся звено

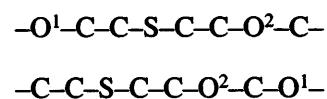


Идентификация СПЗ. Данное СПЗ содержит регулярно повторяющуюся последовательность из восьми атомов. Таким образом, начиная от одного из атомов серы и двигаясь вдоль цепи в любом направлении до следующего атома серы (но не включая его), получаем СПЗ, содержащее восемь атомов. Эта последовательность также содержит два атома кислорода.

Ориентация СПЗ. Данное СПЗ не содержит гетероциклов (субъединиц типа (а)); следовательно, один из двух гетероатомов (субъединиц типа (б)) должен быть старшей субъединицей. Атом О старше атома S (см. выше), поэтому один из двух атомов кислорода выбирают в качестве старшей субъединицы. Нумеруя атомы кислорода произвольным образом как O¹ и O², получим



Начиная от местонахождения любого O¹ и двигаясь вдоль цепи в направлении другой субъединицы O² такого же старшинства до следующего местонахождения O¹ (но не включая его), получаем два возможных варианта, каждый из которых включает по восемь атомов в повторяющемся звене (на этом шаге любое из двух направлений движения допустимо):



В соответствии с правилами предпочтительнее более короткий путь от O¹ к O², поэтому из двух только что представленных возможностей следует выбрать последовательность (2) -C-C-S-C-C-O²-C-O¹- . Обратная к ней последовательность -O¹-C-O²-C-C-S-C-C- и становится предпочтительным СПЗ.

Итак, определенным и сориентированным составным повторяющимся звеном является -O-C-O-C-C-S-C-C-. Теперь можно назвать его. Для этого нужно выбрать названия субъединиц (например из табл. 8) в порядке, в котором они расположены в последовательности слева направо; записать их в выбранном порядке; перед названи-

ем субъединицы поместить приставку "поли" и при необходимости использовать в названии круглые, квадратные или и те и другие скобки.

Следовательно, предпочтительное название данного СПЗ, записанное в виде "поли(составное повторяющееся звено)", есть поли(оксиметиленоксиэтиленсульфандиилэтилен); приемлемой альтернативой является название поли(оксиметиленоксиэтиленоэтилен).

Применяя данное руководство к примеру 2 (...—O—CH(CH₃)—CH₂—...), получим

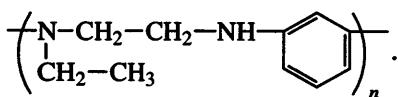
– старшая субъединица – O;

– для замещенной субъединицы этилена предпочтительным является размещение метильной группы у крайнего слева атома углерода, т.е. эта группа ставится в положение с наименьшим номером при чтении слева направо.

Таким образом, полимер называется поли[окси(1-метилэтилен)] [8].

Использование данного руководства иллюстрируется еще двумя примерами.

Пример 6. Поли[(этилимино)этиленимино-1,3-фенилен] имеет следующую структуру



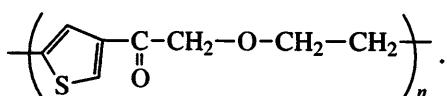
Чтобы сориентировать и назвать этот полимер, был проведен следующий анализ.

1. Один из двух атомов азота является старшей субъединицей.

2. Замещенный атом азота является более старшим по отношению к незамещенному (субъединица типа (г)).

3. Более короткий путь от старшего атома N к незамещенному атому N лежит через субъединицу этилена (два атома между двумя атомами азота), а не через кольцо (три атома между двумя атомами азота).

Пример 7. Поли[тиофен-2,4-диил(1-оксоэтилен)оксиэтилен] имеет структуру



Чтобы сориентировать и назвать этот полимер, был проведен следующий анализ.

1. Гетероцикл является старшей субъединицей.

2. Расстояние от старшей субъединицы к следующей по старшинству субъединице -O- одинаково в обоих направлениях вдоль СПЗ. Для выбора между двумя путями используется второе правило для субъединицы типа (г), согласно которому замещенная субъединица (1-оксоэтилен) старше, чем незамещенная (этилен).

Процедура наименования концевых групп в СПЗ такова:

– Выполняется идентификация, ориентация и наименование СПЗ согласно правилам, описанным выше.

– Проводится наименование концевых групп как заместителей, при необходимости используются круглые или квадратные скобки, или и те и другие.

– Перед названием концевой группы, находящейся на левом краю цепи, ставится греческая буква α .

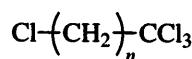
– Перед названием концевой группы, находящейся на правом краю цепи, ставится греческая буква ω .

– Полное название составляется следующим образом:

α -(концевая группа слева)- ω -(концевая группа справа)поли(СПЗ).

Для симметричных СПЗ, таких как поли(метилен), концевые группы располагают в алфавитном порядке, первую обозначают через α (см. пример 8).

Пример 8. α -хлор- ω -(трихлорметил)поли(метилен)



Для несимметричных СПЗ, в которых названия концевых групп различаются, вначале указывают концевую группу α независимо от алфавитного порядка (см. пример 9).

Таблица 9. Названия⁷ некоторых распространенных полимеров, основанные на структуре и происхождении, а также их тривиальные названия

Структура	Название, основанное на структуре	Название по происхождению и тривиальное название
	Поли(1-ацетоксиэтилен)	Поливинилацетат
	Поли(бут-1-ен-1,4-диенил)	Полибутадиен ^a
	Поли(1-хлорэтилен)	Поливинилхлорид
	Поли(1-цианоэтилен)	Полиакрилонитрил
	Поли(1,1-дифторэтилен)	Поливинилиденфторид
	Поли(дифторметилен) ^b	Политетрафторэтилен
	Поли(1,1-диметилэтилен)	Полизобутилен
	Поли[(2,5-диоксотрагидрофуран-3,4-диил)(1-фенилэтилен)]	Поли(малеиновый ангидрид-чер-стирол)
	Поли(1-гидроксиэтилен)	Поливиниловый спирт
	Поли(иминоадипоилиминогексан-1,6-диенил)	Поли(адипиновая кислота-чер-гексаметилендиамин); найлон-66; полигексаметиленадпамид
	Поли[имино(1-оксогексан-1,6-диенил)]	Поли(ε-капролактам); найлон 6
	Поли[1-(метоксикарбонил)-1-метилэтилен]	Полиметилметакрилат
	Поли(метилен) ^b	Полиэтен; полиэтилен
	Поли(оксиэтилен)	Полиоксиран; полиэтиленоксид
	Поли(оксиэтиленокситерефталоил)	Полиэтилентерефталат; ПЭТФ

⁷Названия, основанные на структуре, приведены по номенклатуре ИЮПАК; названия по происхождению и тривиальные названия даны в виде, принятом в русскоязычной литературе.

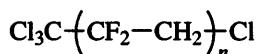
Таблица 9. Окончание

Структура	Название, основанное на структуре	Название по происхождению и тривиальное название
	Поли(окси-1,4-фенилен)	Полифениленоксид
	Поли(1-метилэтилен)	Полипропилен; полипропен
	Поли(1-фенилэтилен)	Полиэтилбензол; полистирол
	Поли[(2-пропил-1,3-диоксан-4,6-ди-il)метилен]	Поливинилбутираль

^a Это название предполагает полимеризацию бутадиена в положении 1,4, при этом СПЗ обычно записывают как $-[\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2]_n$. Согласно правилам ИЮПАК и CAS, такое представление некорректно; правильная структура и название приведены в таблице. Аналогичным образом повторяющееся звено в полизопрене, образующемся при полимеризации в положении 1,4, следует изображать в виде $-\text{[CH}(\text{CH}_3)=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2]-$ и называть поли(1-метилбут-1-ен-1,4-диил).

⁶ Основанное на структуре представление $-(\text{CH}_2)_n$ и $-(\text{CF}_2)_n$ является предпочтительным для поли(метиlena) и поли(дифторметиlena) соответственно. Однако ввиду использования в прошлом и попыток сохранить некоторое сходство с формулами СПЗ гомополимеров, полученных из других производных этилена, представление СПЗ в виде $-(\text{CH}_2-\text{CH}_2)_n$ и $-(\text{CF}_2-\text{CF}_2)_n$ также является приемлемым.

Пример 9. α -(трихлорметил)- ω -хлорполи(1,1-дифторэтилен)



В табл. 9 сравниваются названия некоторых распространенных полимеров, основанные на структуре и на происхождении.

A2.2. Номенклатура нерегулярных однотяжных органических полимеров.

Наименование каждого составного звена в нерегулярных однотяжных органических полимерах определяется принципами, описанными выше в разделе A2.1. Полное название полимера строят следующим образом. После префикса "поли" в круглых или (при необходимости) в квадратных скобках перечисляют названия всех индивидуальных составных звеньев, отделяя их друг от друга косой чертой [9]. Косая черта отражает отсутствие сведений о последовательности расположения в цепи индивидуальных СПЗ. В графическом представлении таких полимеров дефисы и тире на концах каждого СПЗ располагают целиком внутри закрывающих их круглых скобок. Это означает, что данные связи не обязательно являются

ются крайними связями изображаемой макромолекулы. Примеры, представленные в табл. 10, иллюстрируют применение этих правил (названия даны по номенклатуре ИЮПАК).

A2.3. Номенклатура регулярных двутяжных органических полимеров.

Каждая макромолекула двутяжного полимера содержит последовательность колец, таким образом, эти макромолекулы не имеют одинарных ациклических связей. Спирополимеры содержат один общий атом в смежных кольцах. Лестничные полимеры имеют в смежных кольцах два и более общих атома. Аналогично линейным однотяжным полимерам, перед тем как получить название, СПЗ двутяжных полимеров должны быть идентифицированы и сориентированы правильным образом [6]. СПЗ в данном случае является мультивалентной группой (обычно четырехвалентной), в которой указывается присоединение ко всем (обычно четырем) атомам. СПЗ называют в соответствии с номенклатурой ИЮПАК для органических соединений [4]. Название полимера представляют так: поли(составное повторяющееся звено).

Таблица 10. Примеры номенклатуры нерегулярных однотяжных органических полимеров

Структура	Название и примечание
$\left(-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-/\text{-}\underset{\text{CH}=\text{CH}_2}{\text{CH}}-\text{CH}_2- \right)_n$	Поли(бут-1-ен-1,4-диил/1-винилэтилен) Продукт полимеризации бута-1,3-диена в положения 1,2- и 1,4-
$\left(-\underset{\text{Cl}}{\text{CH}}-\text{CH}_2-/\text{-}\underset{\text{Ph}}{\text{CH}}-\text{CH}_2- \right)_n$	Поли(1-хлорэтилен/1-фенилэтилен) Сополимер винилхлорида и стирола
$\left(-\text{CH}_2-/\text{-}\underset{\text{Ph}}{\text{CH}}-/\underset{\text{Cl}}{\text{-C-}} \right)_n$	Поли(дихлорметилен/хлорметилен/метилен) Идеализированный продукт хлорирования полиэтилена, а также поливинилхлорида
$\left(-\underset{\text{OH}}{\text{CH}}-\text{CH}_2-/\text{-}\underset{\text{O}}{\text{C}}-\text{CH}_3-\text{OH} \right)_n$	Поли(1-ацетоксиэтилен/1-гидроксиэтилен) Частично гидролизованный поли(1-ацетоксиэтилен), построенный по типу "голова-хвост"
$\left(-\underset{\text{OH}}{\text{CH}}-\text{CH}_2-/\text{-}\underset{\text{O}}{\text{C}}-\text{CH}_2-/\text{-}\underset{\text{O}}{\text{C}}-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \right)_n$	Поли[(1-ацетоксиэтилен)/(1-гидроксиэтилен)]/[2-пропил-1,3-диоксан-4,6-диил]метилен] Поливиниловый спирт, частично превращенный в поливинилацетат-ко-винилбутираль

Поскольку двутяжные полимеры не содержат одинарных ациклических связей, СПЗ может быть определено только путем разрыва колец. При разрыве колец применяются следующие правила в порядке снижения приоритета.

Правило 1. Число свободных валентностей в СПЗ минимизируется.

Правило 2. Число наиболее предпочтительных гетероатомов в кольцевой системе делается максимальным.

Правило 3. Наиболее предпочтительная кольцевая система оставляется нетронутой [4].

Дальнейшие решения должны опираться на такие действия.

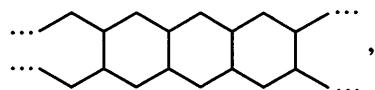
Правило 4. Определение старшинства кольцевых систем [4, 5].

Правило 5. Ориентирование СПЗ таким образом, чтобы заместитель со свободной валентностью в положении с наименьшим номером располагался на структурной схеме слева внизу.

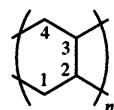
Правило 6. Расположение ациклических субъединиц СПЗ в правой части структурной схемы.

Ниже приведены три примера, иллюстрирующие применение данных правил.

Пример 10. Для лестничного полимера



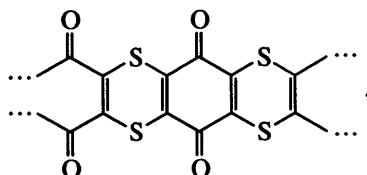
включающего смежные шестичленные насыщенные углеродные циклы, предпочтительным вариантом написания СПЗ является ациклическая субъединица, состоящая из четырех атомов углерода с четырьмя свободными валентностями, по одной на каждом атоме. Атому в левом нижнем положении приписывается наименьший номер положения заместителя.



В названии СПЗ положения заместителей со свободной валентностью указывают непосредственно перед окончанием четырехвалентной субъединицы, к которой они относятся. Номера заместителей перечисляют по часовой стрелке от правого нижнего положения. Таким образом, порядок их расположения вместе со знаками пунктуации (запятыми и двоеточием) всегда следующий: нижний левый, верхний левый: верхний правый, нижний правый.

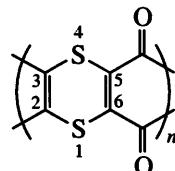
Название использованного в примере лестничного полимера – поли(бутан-1,4 : 3,2-тетраил).

Пример 11. Для лестничного полимера



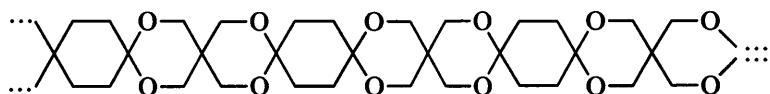
состоящего из чередующихся гетероциклических и карбоциклических колец одного типа, гетероциклическая субъединица в соответствии с Правилом 2 (см. выше) старше, чем карбоциклическая субъединица. Таким образом, при написании

СПЗ разрывают карбоциклическое кольцо, гетероцикл ставят в крайнее левое положение, а две ациклические цепочки, полученные в результате разрыва карбоцикла, помещают в правой части циклической субъединицы согласно Правилу 6.

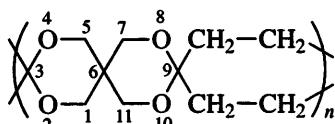


Название данного лестничного полимера – поли(1,4-дитиин-2.3:5.6-тетраил-5.6-дикарбонил).

Пример 12. Спирополимер



содержит три типа колец – два кольца 1,3-диоксана (обращенные в разные стороны) и одно кольцо циклогексана. В предпочтительном СПЗ оставляют два кольца 1,3-диоксана, а карбоциклическое кольцо разрывают (см. Правило 2 выше). Ациклические фрагменты помещают справа от циклической субъединицы (см. Правило 6).



Название данного спирополимера – поли(2,4,8,10-тетраоксаспиро[5.5]ундекан-3,3:9,9-тетраил-9,9-диэтилен).

A2.4. Номенклатура регулярных однотяжных неорганических и координационных полимеров.

Названия, используемые ИЮПАК для неорганических и координационных полимеров [10], основаны на фундаментальных принципах номенклатуры, разработанных для органических полимеров. СПЗ должно быть определено и сориентировано, прежде чем оно может получить название. Однако вследствие коренного различия номенклатур неорганических и органических соединений субъединицы неорганических СПЗ называют так же, как и неорганические или координационные

группы с ковалентными или координационными связями соответственно. Наименование полимера включает название СПЗ с подходящим префиксом, таким как “поли” или “катена”.

Ориентация СПЗ зависит от старшинства субъединиц и от предпочтительного направления каждой субъединицы, входящей в его состав. В номенклатуре координационных соединений особое значение придается положению координационного центра. В этой связи старшая из субъединиц должна содержать по меньшей мере один центральный атом; старшинство мостиковых групп, соединяющих центральные атомы основной цепи, ниже. В том случае, когда СПЗ линейного неорганического или координационного полимера содержит два или более центральных атома, старшей субъединицей является та, центральный атом которой встречается позже в приведенной ниже последовательности атомов [10]: F, Cl, Br, I, At, O, S, Se, Te, Po, N, P, As, Sb, Bi, C, Si, Ge, Sn, Pb, B, Al, Ga, In, Tl, Zn, Cd, Hg, Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Co, Rh, Ir, Fe, Ru, Os, Mn, Tc, Re, Cr, Mo, W, V, Nb, Ta, Ti, Zr, Hf, Sc, Y, La—→Lu, Ac—→Lr, Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra, Li, Na, K, Rb, Cs, Fr, He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn.

Таблица 11. Примеры номенклатуры ИЮПАК для неорганических соединений

Структура	Название
$\left(\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{Sn} \\ \\ \text{Ph} \end{array} \right)_n$	катена-поли[метилфенилолово]
$\left(\begin{array}{cc} \text{Cl} & \text{CH}_3 \\ & \\ \text{Si} & -\text{Si}- \\ & \\ \text{Cl} & \text{CH}_3 \end{array} \right)_n$	катена-поли[(дихлорид кремния)(диметилкремний)]
$\left(\begin{array}{c} \text{NH}_3 \\ \\ \text{Zn}-\text{Cl} \\ \\ \text{Cl} \end{array} \right)_n$	катена-поли[(аммиакат хлорид цинка)- μ -хлоро] ^a
$\left(\begin{array}{cc} \text{H} & \text{CH}_3 \\ & \\ \text{B} & -\text{N}- \\ & \\ \text{H} & \text{CH}_3 \end{array} \right)_n$	катена-поли[(дигидроборан)- μ -(диметиламидо)] ^a
$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2 \quad \text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ \qquad \quad \\ \text{S} \text{---} \text{S} \\ \qquad \quad \\ \text{Cu} \text{---} \text{Cl} \text{---} \text{Cu} \text{---} \text{Cl} \\ \qquad \quad \\ \text{S} \text{---} \text{S} \\ \qquad \quad \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2 \quad \text{CH}_2-\text{CH}_3 \end{array} \right)_n$	катена-поли[медь[μ -хлор-бис- μ -(диэтилдисульфид-S:S')]медь- μ -хлоро] ^b

^a Многие координационные полимеры содержат одноядерный центральный атом с мостиковыми лигандами. СПЗ структур такого типа называют, указывая центральный атом с любыми присоединенными к нему немостиковыми группами, название которых помещают как префикс перед названием центрального атома, греческую букву μ и название лигандного мостика.

^b Множественные мостиковые лиганды между центральными атомами указывают в алфавитном порядке. Химические элементы, обозначающие координирующие атомы, к которым присоединены мостиковые лиганды, указывают курсивом, разделяют двоеточием и располагают в направлении чтения СПЗ, т.е. слева направо.

Данный порядок старшинства отличается от применяемого к гетероатомам в номенклатуре органических соединений [4].

При необходимости дальнейшего выбора старшей субъединицы предпочтение отдается в следующем порядке:

– Многоядерному координационному центру в порядке уменьшения числа центральных атомов.

– Центральному атому или координационному центру с наибольшим числом присоединенных координирующих атомов, исключая координирующие атомы мостиковых лигандов в основной полимерной цепи.

– Центральному атому или координационному центру, название которого (включая лиганда и любые дополнительные префиксы, отличные от мостиковых лигандов в основной полимерной цепи) располагается первым по алфавиту.

Примеры использования данных правил приведены в табл. 11.

A2.5. Номенклатура регулярных псевдооднотяжных координационных полимеров.

СПЗ, включающие основные цепи с одноядерным центральным атомом и двумя или более мостиковыми лигандами (одинаковыми или разными) или хелатирующими лигандами, называют следующим образом: указывают название центрального атома, используя в качестве префикса название связанного с ним немостикового(ых) лиганда(ов); указывают названия мостиковых лигандов, предваряя каждый из них греческой буквой μ . Если имеется два или более идентичных мостиковых лигандов, то используют соответствующий численный префикс для указания их числа [10]. В общем виде название полимера с одинаковыми мостиковыми лигандами записывают как катена-поли[(немостиковые лиганда)моноядер-

Таблица 12. Примеры номенклатуры для псевдооднотяжных координационных полимеров

Структура	Название	Структура	Название
	катена-поли[палладий-ди- μ -хлоро]		катена-поли[титан-три- μ -хлоро]
	катена-поли[(кремний-ди- μ -тио)]		катена-поли[платина(μ -бром- μ -хлоро)]

ный центральный атом- μ -мостиковый(е) лиганд(ы)]

Для двух или более неодинаковых мостиковых лигандов их названия указывают в алфавитном порядке: катена-поли[(немостиковые лиганды)моноядерный центральный атом- μ -мостиковый лиганд а- μ -мостиковый лиганд б].

Круглые и квадратные скобки или и те и другие используют по мере надобности. В табл. 12 приведены примеры применения данных правил.

Б. Использование общепринятых, полусистематических и тривиальных названий.

Основная цель химической номенклатуры заключается в идентификации химических веществ по их названиям, с тем чтобы ученые могли передавать данные о них, не прибегая к представлениям о химической структуре. Систематические химические номенклатурные системы были разработаны непосредственно для того, чтобы дать читателям возможность установить химическую структуру соединений из их названий. Как обсуждалось выше, структурные названия полимеров основаны на их структурных особенностях.

Однако для многих часто используемых соединений уже более 40 лет существуют традиционные названия, необязательно связанные с их химической структурой, которые продолжают регулярно использоваться. Такие названия обычно называют общепринятыми, полусистематическими или тривиальными. Если это не вносит неоднозначности, то ИЮПАК разрешает использовать их как для полимеров, так и для их фрагментов, компонентов и субъединиц. ИЮПАК признает, что многие общезвестные полимеры имеют установленные и часто используемые по-

лусистематические и тривиальные названия, и нет необходимости заменять их названиями, основанными на структуре. Тем не менее, ИЮПАК одобряет сведение к минимуму использования полусистематических и тривиальных названий полимеров в научных сообщениях. Примеры еще разрешенных полусистематических и тривиальных названий включают адипоил, этилен, изофталоил, малонил, оксалил, фталоил, сукцинил и терефталоил.

В табл. 13 приведены примеры общепринятых, полусистематических и тривиальных названий ряда мономеров наряду с соответствующими им систематическими названиями по номенклатуре ИЮПАК, а в табл. 14 – аналогичные примеры названий полимеров.

Аббревиатуры и акронимы широко используются и для неполимерных, и для полимерных веществ, а также для добавок, модификаторов и наполнителей. При создании акронимов ученые, к сожалению, редко задумываются об однозначности сокращений. Например, акроним АК используется для обозначения как акриловой, так и адииновой кислоты, АН можно применять для обозначения не только акрилонитрила, но и нитрата аммония. В этой связи бесполезно помещать здесь список акронимов, поскольку каждый день возникают новые. ИЮПАК рекомендует всем авторам публикаций по химии приводить в начале статьи полный список использованных аббревиатур [13]. Для представления полимеров ИЮПАК ранее рекомендовал использовать стандартные аббревиатуры [14]. В четвертом издании Polymer Handbook содержится список наиболее широко используемых аббревиатур, признанных международными организациями [15]. Названия публикаций могут содержать акронимы и аббревиату-

Таблица 13. Некоторые общезвестные мономеры: сопоставление общепринятых, полусистематических и тривиальных названий с названиями, основанными на структурной номенклатуре ИЮПАК

Общепринятые, полусистематические или тривиальные названия	Типичное название ИЮПАК ^a
2,2-Бис- <i>n</i> -гидроксифенилпропан, бисфенол А, БФА Бис-4-изоцианатфенилметан, 4,4'-диизоцианатдифенилметан, 4,4'-метилен-бис-фенилизоцианат, 4,4'-метилендифенилизоцианат, МДИ	4,4'-(1-Метилэтан-1,1-диил)дифенол Метиленди-1,4-фенилендиизоцианат
Капролактам	Гексано-6-лактам
1,4-Циклогексилендиизоцианат, ЦГДИ, 1,4-диизоцианатциклогексан	Циклогексан-1,4-диилдиизоцианат
1,2-Диаминоциклогексан	Циклогексан-1,2-диамин
Диаминодифениловый эфир, ДАФЭ, ОДА, 4,4'-ОДА	4,4'-Оксидианизилин
1,6-Диизоцианатгексан, ГДИ, ГМДИ	Гексан-1,6-диилдиизоцианат
2,4-Диизоцианаттолуол, 2,4-ТДИ, 2,4-толуолдиизоцианат	4-Метил-1,3-фенилендиизоцианат
Этиленгликоль	Этан-1,2-диол
Гексаметилендиамин, ГМД, ГМДА	Гексан-1,6-диамин
Изофорондиизоцианат, ИФДИ	3-(Изоцианатметил)-3,5,5- trimetilциклогексилизоцианат ^b
Пиромеллитовый диангидрид, ПМДА	Бензол-1,2,4,5-диангидрид тетракарбоновой кислоты

^a Названия веществ по системе ИЮПАК всегда однозначны, однако не всегда они являются единственными возможными; таким образом, вещество может иметь несколько систематических названий. В таблице приведены некоторые типичные примеры.

^b Систематическое название ИЮПАК для ИФДИ заметно отличается от названия 5-изоцианат-1-(изоцианатметил)-1,3,3-trimetilциклогексан, предлагаемого CAS. Это различие возникло вследствие того, что с точки зрения ИЮПАК изофорондиизоцианат является сложным эфиrom изоциановой кислоты, в то время как с точки зрения CAS это замещенный циклогексан (в соответствии с номенклатурой CAS 9CI [11, 12] группа -NCO не считается функциональной группой).

Таблица 14. Некоторые общезвестные полимеры: сопоставление общепринятых, полусистематических и тривиальных названий с названиями, основанными на структурной номенклатуре ИЮПАК

Общепринятые, полусистематические или тривиальные названия	Название ИЮПАК, основанное на структуре
2,2-Бис-4-гидроксифенилпропан поликарбонат, бисфенол А поликарбонат	Поли[оксикарбонилокси-1,4-фенилен(1-метилэтан-1,1-диил)-1,4-фенилен]
Поликаролактам, проликапроамид, найлон 6	Поли[имино(1-оксогексан-1,6-диил)]
Полиалкоксикетон	Поли(окси-1,4-фениленкарбонил-1,4-фенилен)
Полиэтиленоксид, полиоксиэтилен, ПЭО	Поли(оксиэтилен)
Полиэтилентерефталат, ПЭТ, ПЭТФ, PETE ^a	Поли(оксиэтиленокситерефталоил)
Полигексаметиленадипамид; найлон 66	Поли(иминоадипоилиминогексан-1,6-диил)
Полифениленсульфид, поли- <i>n</i> -фениленсульфид, ПФС	Поли(тио-1,4-фенилен)
Политетраметиленоксид, полиокситетраметилен, ПТМО	Поли(оксибутан-1,4-диил)

^a В США обозначение PETE часто штампуют или отливают на дне бутылок из ПЭТФ с целью классификации и идентификации типа пластика при его вторичной переработке.

ры только вместе с их определениями, например "Получение полиметилметакрилата (ПММА)".

B. Названия классов полимеров.

Во многих публикациях (энциклопедиях, справочниках, указателях, учебниках и др.), в которых обсуждаются вопросы номенклатуры полимеров,

информацию о полимерах группируют по названиям их классов. Эти классы не являются взаимно исключающими; некоторые из них весьма ограниченные, в то время как остальные более обширные. В табл. 15 перечислена большая часть терминов, обычно встречающихся в таких публикациях.

Таблица 15. Список обычно встречающихся названий классов полимеров

Столбец 1	Столбец 2	Столбец 3	Столбец 4
Акриловые полимеры	Полиарилены	Полиимидазолы	Полисилазаны
Алкидные полимеры	Полиазометины	Полииимида	Полисилоксаны
Аминопласти	Полибензимидазолы	Полиимины	Полисилесквиоксаны
Кумароновые смолы	Полибензтиазолы	Полиизоцианураты	Полисульфиды
Эпоксидные смолы	Полибензоксазиноны	Поликетоны	Полисульфонамиды
Фторполимеры	Полибензоксазолы	Полиолефины	Полисульфонофоны
Феноло-альдегидные смолы	Полибензилы	Полиоксациазолы	Политиазолы
Полиацетали	Поликарбодиимида	Полиоксиды	Политиоалкилены
Полиацетилены	Поликарбонаты	Полиоксиалкилены	Политиоарилены
Полиакрилаты	Поликарбосиланы	Полиоксиарилены	Политиоэфиры
Полиалкенилены	Полицианураты	Полиоксиметилены	Политиометилены
Полиалкилены	Полидиены	Полиоксифенилены	Политиофенилены
Полиаминокислоты	Сложные полиэфиры – полиуретаны	Полифенилы	Полимочевины
Полиамида	Сложные полиэфиры	Полипирролы	Полиуретаны
Полиамины	Полиэфиралкоксикетоны	Полихинолины	Поливинилацетали
Полиангидриды	Простые полиэфиры – полиуретаны	Полихиноксалины	Поливинилбутирали
Полиариленаалкенилены	Полиэфиры	Полисиланы	Поливинилформали
Полиариленаалкилены	Полигидразиды		Виниловые полимеры

Г. Ссылки и примечания.

1. ИЮПАК рекомендует выделять курсивом подстрочные индексы “*n*” и “*x*”, обозначающие повторение полимерной последовательности, а в случае, когда это невозможно, использовать подчеркивание.

2. К сожалению, слово “сополимер” используется также для обозначения полимера, содержащего два типа мономеров. Использование термина “бинарный полимер” в этом случае лучше бы соответствовало термину “тройной полимер” для полимера, содержащего три типа мономеров, “четверной полимер” для полимера, содержащего четыре типа мономеров, и т.д.

3. ИЮПАК: Source-Based Nomenclature for Non-Linear Macromolecules and Macromolecular Assemblies (Recommendations 1997) // Pure Appl. Chem. 1997. V. 69. P. 2511.

4. ИЮПАК: Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers (Recommendations 1975) // Pure Appl. Chem. 1976. V. 48. P. 373; переиздание в качестве главы 5 в ссылке [18].

5. Chemical Abstracts Service, 2540 Olentangy River Road, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210: CA Index Guide, Appendix IV: Chemical Substance Index Names (© 1999). Section 222 – описание правил индексирования полимеров.

6. ИЮПАК: Nomenclature of Regular Double-Strand (Ladder and Spiro) Organic Polymers (Recommendations 1993) // Pure Appl. Chem. 1993. V. 65. P. 1561.

7. При рассмотрении вопроса о старшинстве колец возникает одно различие между требованиями ИЮПАК и CAS. При прочих равных условиях в номенклатуре ИЮПАК отдается предпочтение конденсированным кольцевым системам, а не спиросистемам; в номенклатуре CAS – наоборот. Причина этого различия неизвестна.

8. Это название строго отвечает полимеру, целиком состоящему из повторяющихся единиц –O–CH(Me)–CH₂–. Для данного полимера, часто называемого просто “полипропиленоксид”, CAS использует другой подход к наименованию. Чтобы показать наличие в этом полимере двух типов звеньев –O–CH(Me)–CH₂– и –O–CH₂–CH(Me)–,

его называют поли[окси(метил-1,2-этандиил)], а сопутствующая структура отражает неуточненное положение метильной группы. Для субъеди- ницы $-\text{CH}_2\text{--CH}_2-$ CAS использует название 1,2-этандиил, а ИЮПАК разрешает использовать название этан-1,2-диил, но предпочтительным является название “этилен”.

9. ИЮПАК: Structure-Based Nomenclature for Irregular Single-Strand Organic Polymers (Recommendations 1994) // Pure Appl. Chem. 1994. V. 66. P. 872.

10. ИЮПАК: Nomenclature for Regular Single-Strand and Quasi Single-Strand Inorganic and Coordination Polymers (Recommendations 1984) // Pure Appl. Chem. 1985. V. 57. P. 149; переиздание в качестве главы 6 в ссылке [18].

11. Так называемая номенклатура 9CI была введена CAS в 1972 г. в начальном периоде издания Ninth Collective Index. Причины ее введения были описаны в Ninth Collective CA Index Guide и в журнальной статье (см. ссылку [12]).

12. Donaldson N., Powell W.H., Rowlett Jr.R.J., White R.W., Yorke K.V. Chemical Abstracts Index Names for Chemical Substances in the Ninth Collective Period (1972–1976) // J. Chem. Doc. 1974. V. 14. P. 3.

13. ИЮПАК: Use of Abbreviations in the Chemical Literature (Recommendations 1979) // Pure Appl. Chem. 1980. V. 52. P. 2229.

14. ИЮПАК: Use of Abbreviations for Names of Polymeric Substances (Recommendations 1986) // Pure Appl. Chem. 1987. V. 59. P. 691; переиздание в качестве главы 9 в ссылке [18].

15. Elias H.-G. Polymer Handbook / Ed. by J. Brandrup, E.H. Immergut, E. A. Grulke, New York: Wiley, Ch. VII. P. 1–24. 1998.

В следующих шести ссылках, которые не цитируются в тексте настоящего руководства, также обсуждаются вопросы номенклатуры полимеров.

16. Wilks E. S. Macromolecular Nomenclature Note №17; Whither Nomenclature? // Polym. Prepr. 1999. V. 40. № 2. P. 6. В этой статье приведены все наиболее важные документы, посвященные вопросам номенклатуры полимеров, опубликованные за последние 50 лет.

17. ИЮПАК: Source-Based Nomenclature for Copolymers (Recommendations 1985). // Pure Appl. Chem. 1985. V. 57. P. 1427; переиздание в качестве главы 9 в ссылке [16].

18. ИЮПАК: Compendium of Macromolecular Nomenclature (“Purple Book”) / Ed. by W.V. Metanomski. Oxford: Blackwell Sci. Publ., 1991. Эта книга распродана; электронная версия доступна на веб-сайте <http://www.iupac.org/divisions/IV/index.html>.

19. Американское химическое общество: A Structure-Based Nomenclature for Linear Polymers. // Macromolecules. 1968. V. 1. P. 193.

20. Американское химическое общество: A Structure-Based Nomenclature for Linear Polymers. // Polym. Prepr. 1967. V. 8. № 2. e–r.

21. ИЮПАК: Report on Nomenclature in the Field of Macromolecules (1951): Section VII – Linear High Polymers. // J. Polym. Sci. 1952. V. 8. P. 257.