

Generische herkunftsbezogene Namen für Polymere**

Obfrau: Ingrid Meisel* und Übersetzer: Michael Hess, Duisburg

1. Einleitung

Die Commission on Macromolecular Nomenclature der International Union of Pure and Applied Chemistry hat bereits drei Empfehlungen zur Nomenklatur von Polymeren veröffentlicht, die auf der chemischen Strukturformel basieren („systematische Namen“) und eine Benennung der meisten Polymere mit Ausnahme von Netzwerken möglich machen.^[1–3] Die Kommission hat weiterhin Empfehlungen zur Bildung herkunftsbezogener Namen für lineare Copolymere und nichtlineare Polymere veröffentlicht.^[4,5] Im Allgemeinen sind die herkunftsbezogenen Namen einfacher und weniger streng als die systematischen Namen. Allerdings gibt es Fälle, in denen der herkunftsbezogene Name nicht eindeutig ist, z. B. entsteht bei der Kondensation eines Dianhydrids (A) mit einem Diamin (B) ein Polymer aus Amid- und Säurebausteinen und daraus in einem Cyclisierungsschritt ein Polyimid. Für beide Produkte gilt derselbe herkunftsbezogene Name: Poly(A-alt-B). Nimmt man nun den Namen der Polymerklasse, in diesem Fall (Amid-Säure) bzw. Imid, hinzu, ist eine eindeutige Unterscheidung der Produkte anhand des Namens gewährleistet. Selbst wenn nur ein Produkt entsteht, kann der Name der Polymerklasse (der generische Name) helfen, die Polymerstruktur klarer wiederzugeben, insbesondere, wenn es sich um sehr komplexe Moleküle handelt.

Auch bei Homopolymeren gibt es Beispiele für mehrdeutige Namen. So informiert der Name Polybutadien nicht darüber, ob es sich bei der Substanz um das 1,2-, 1,4-*cis*- oder 1,4-*trans*-Isomer handelt. Zusätzliche Informationen sind erforderlich, um zwischen diesen Möglichkeiten unterscheiden zu können.

Ziel dieser IUPAC-Empfehlung ist es, diesen Mangel durch Einführen einer generischen Komponente zu beheben und so ein besseres herkunftsbezogenes Nomenklatorsystem zu erhalten.

Die meisten Trivialnamen, wie Polystyrol, sind herkunftsbezogene Namen. Bisher hatte die Kommission solche Namen für Homopolymere nicht ausdrücklich empfohlen, da die strengeren systematischen Namen als besser für die wissenschaftliche Kommunikation geeignet angesehen wurden. Doch auch nach der Veröffentlichung der IUPAC-Empfehlung „Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers“ im Jahre 1976 haben Wissenschaftler an Hochschulen, in Forschung und Industrie weiterhin Trivialnamen verwendet, und die Kommission selbst hat 1985 ein herkunftsbezogenes Nomenklatorsystem für die Benennung von Copolymerisaten wegen seiner Einfachheit und leichten Anwendbarkeit übernommen. Daher hat sich die Kommission nun entschlossen, das herkunftsbezogene Nomenklatorsystem offiziell als alternatives Nomenklatorsystem auch für Homopolymere zu empfehlen. Hier werden die Regeln zur Ableitung eines herkunftsbezogenen Namens für Homopolymere beschrieben. Somit sind nun herkunftsbezogene und systematische Namen für die meisten Polymere zugänglich.

Die Namen der Monomere, die im herkunftsbezogenen Namen verwendet werden, sollten die systematischen Namen der entsprechenden chemischen Verbindungen sein. In Fällen, in denen sich Trivialnamen eingebürgert haben, können aber auch diese verwendet werden. Für die organischen Gruppen, die Teil der konstitutionellen Wiederholungseinheiten (constitutional repeating units, CRUs) in den systematischen Namen sind, sollen die Namen verwendet werden, die mithilfe der Nomenklaturregeln für organische Verbindungen erhalten werden, wie sie 1993 im *Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds*^[6] beschrieben sind.

Die *Angewandte Chemie* veröffentlicht Übersetzungen von Recommendations und Technical Reports der IUPAC, um die chemische Fachsprache im Deutschen zu fördern. Sauber definierte Begriffe und klare Nomenklaturregeln bilden die Basis für eine Verständigung zwischen den Wissenschaftlern einer Disziplin und sind für den Austausch zwischen Wissenschafts- und Fachsprache sowie Allgemeinsprache essenziell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Die nächste Übersetzung („NMR-Nomenklatur: Kernspin-Eigenschaften und Konventionen für chemische Verschiebungen“) ist für Heft 15/2004 vorgesehen. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

[*] Dr. I. Meisel
Wiley-VCH
Postfach 101161, 69451 Weinheim (Deutschland)
Fax: (+49) 6201/606-309
E-mail: imeisel@wiley-vch.de

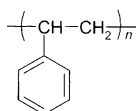
[**] Copyright© der englischen Fassung, die unter dem Titel „Generic Source-Based Nomenclature for Polymers“ von E. Maréchal (Paris, Frankreich) und E. S. Wilks (Hockessin, USA) für die Veröffentlichung in *Pure Appl. Chem.* **2001**, 73, 1511–1519^[8] vorbereitet wurde: International Union of Pure and Applied Chemistry, 2001. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation.

2. Herkunftsbezogene Nomenklatur für Homopolymere

Regel 1

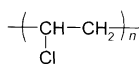
Der herkunftsbezogene Name eines Homopolymers besteht aus dem Präfix „Poly“ und dem Monomernamen. Falls der Name des Monomers aus mehr als einem Wort besteht oder Mehrdeutigkeiten auftreten, wird der Monomernamen in Klammern gesetzt.

Beispiel 1.1



herkunftsbezogener Name: Polystyrol
systematischer Name: Poly(1-phenylethylen)

Beispiel 1.2



herkunftsbezogener Name: Poly(vinylchlorid)^[*]
systematischer Name: Poly(1-chlorethylen)

3. Regeln zur Erzeugung generischer Namen

3.1. Grundprinzipien

Der Grundgedanke eines Nomenklatorsystems zur Erzeugung generischer herkunftsbezogener Namen ist sehr einfach: Der Name der Polymerklasse wird zusätzlich zum herkunftsbezogenen Namen angegeben. Die Angabe der Polymerklasse ist in vielen Fällen optional, in einigen dagegen unbedingt erforderlich, um Eindeutigkeit zu schaffen oder größere Klarheit der Formulierung zu erreichen. Man sollte jedoch von dem Zusatz absehen, wenn er keinen Beitrag zur Klarheit der Formulierung liefert.

Das hier vorgestellte System kann auf nahezu alle Homopolymere, Copolymere und auch andere Systeme, wie Netzwerke, angewendet werden. Jedoch sollte das generische herkunftsbezogene Nomenklatorsystem nicht als drittes eigenständiges System neben dem herkunftsbezogenen und dem strukturbezogenen System gesehen werden; vielmehr ist es ein Hilssystem, eine einfache Erweiterung des altbekannten herkunftsbezogenen Systems. Entfernt man den generischen Zusatz, erhält man wieder das ursprüngliche herkunftsbezogene System.

[*] Die Klammern sind hier im Deutschen nicht nötig, da Vinylchlorid ein Wort ist, während das englische Äquivalent aus zwei Wörtern besteht (vinyl chloride). Im Folgenden sind die Klammern so gesetzt, wie es die deutsche Sprache erfordert; bei der Generierung englischer Namen können Abweichungen auftreten.

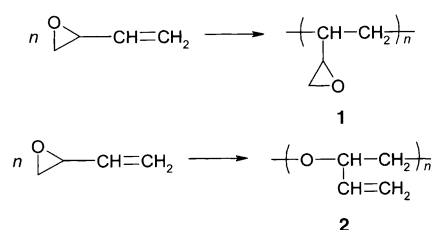
3.2. Allgemeine Regeln

Regel 2

Der generische herkunftsbezogene Name eines Polymers besteht aus zwei Komponenten in folgender Reihenfolge: 1) der Name der Polymerklasse (generischer Name) (PolyG), 2) der Name des (hypothetischen) Monomers (A, B etc.), bei Copolymeren stets durch einen Bindestrich separiert. Die beiden Komponenten werden durch einen Doppelpunkt getrennt. Bei Homopolymeren werden Klammern nur verwendet, wenn sie der Klarheit wegen notwendig sind. Beispiele sind: PolyG:A, PolyG:(B), PolyG:(A-co-B), PolyG:(A-alt-B).

- Anmerkung 1 Der generische Name bezeichnet die geeignetste funktionelle Gruppe oder das geeignetste heterocyclische Ringsystem des Polymers.
- Anmerkung 2 Alle in den beiden früheren Empfehlungen^[4,5] gegebenen Regeln für die herkunftsbezogene Nomenklatur können – unter Hinzufügung des generischen Namens – unverändert angewendet werden.
- Anmerkung 3 Für ein Polymer kann mehr als ein Name existieren. Dies gilt vor allem, wenn es auf mehr als einem Weg hergestellt werden kann.
- Anmerkung 4 Falls ein Monomer oder ein Paar sich ergänzender Monomere zu mehr als einem Polymer führen kann oder falls das Polymer über eine Sequenz von Zwischenstufen erhalten wird, dann ist ein generischer Name unbedingt erforderlich (siehe Beispiele 2.1, 2.3 und 2.4).

Beispiel 2.1

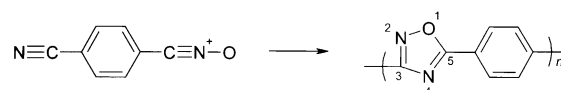


generischer herkunftsbezogener Name: 1: Polyalkylen:Vinyl-oxiran, 2: Polyether:Vinyloxiran

herkunftsbezogener Name: 1 und 2 haben denselben herkunftsbezogenen Namen Poly(vinyloxiran).

systematischer Name: 1: Poly(1-oxiranylene), 2: Poly[oxy(1-vinylethylen)]

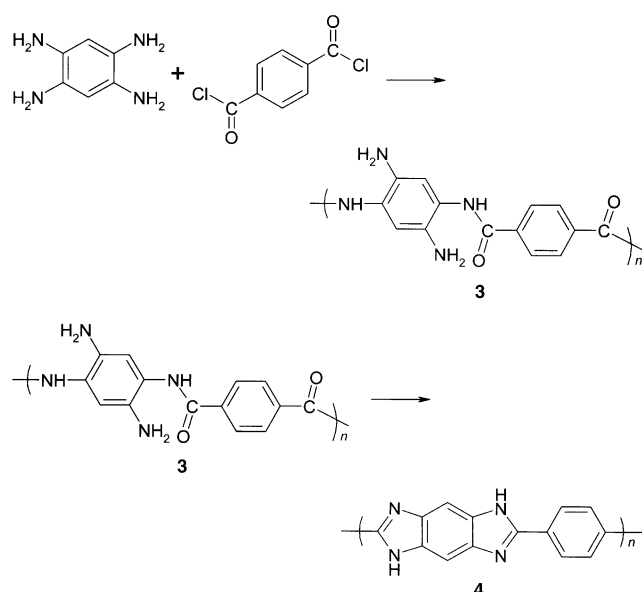
Beispiel 2.2



generischer herkunftsbezogener Name: Polyoxadiazol: (4-Cyanbenzonitril-N-oxid)

systematischer Name: Poly(1,2,4-oxadiazol-3,5-diyl-1,4-phenylene)

Beispiel 2.3

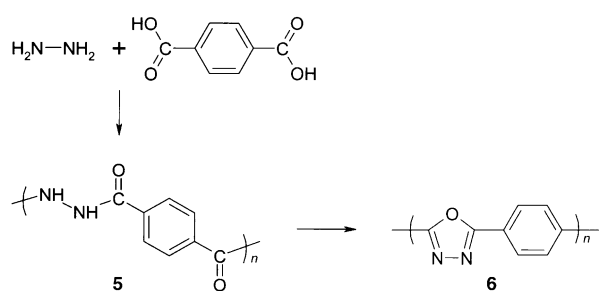


generischer herkunftsbezogener Name: **3:** Polyamid:(Terephthaloyldichlorid-*alt*-benzol-1,2,4,5-tetramin), **4:** Polybenzimidazol:(Terephthaloyldichlorid-*alt*-benzol-1,2,4,5-tetramin)

herkunftsbezogener Name: **3** und **4** haben denselben herkunftsbezogenen Namen Poly(terephthaloyldichlorid-*alt*-benzo-1,2,4,5-tetramin).

systematischer Name: **3:** Poly[imino(2,5-diamino-1,4-phenylen)iminoterephthaloyl], **4:** Poly[(1,5-dihydrobenzo[1,2-*d*:4,5-*d'*]diimidazol-2,6-diyl)-1,4-phenylen]

Beispiel 2.4

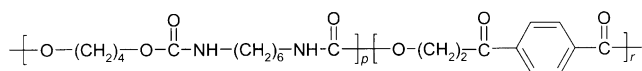


generischer herkunftsbezogener Name: **5:** Polyhydrazid:(Hydrazin-*alt*-terephthalsäure), **6:** Polyoxadiazol:(Hydrazin-*alt*-terephthalsäure)

herkunftsbezogener Name: **5** und **6** haben denselben herkunftsbezogenen Namen Poly(hydrazin-*alt*-terephthalsäure).

systematischer Name: **5:** Poly(hydrazin-1,2-diylterephthaloyl), **6:** Poly(1,3,4-oxadiazol-2,5-diyl-1,4-phenylen)

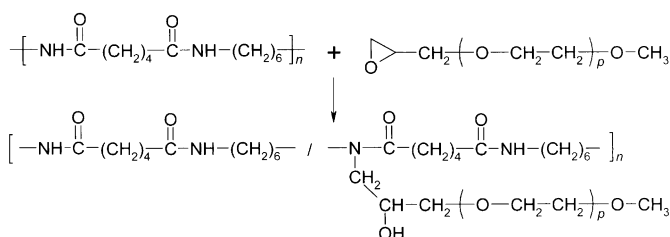
Beispiel 2.5



generischer herkunftsbezogener Name: Polyurethan:(Butan-1,4-diol-*alt*-hexan-1,6-diyl-diisocyanat)-*block*-Polyester:(Ethylenglycol-*alt*-terephthalsäure)

systematischer Name: Poly(oxybutan-1,4-diyloxycarbonyliminohexan-1,6-diyliminocarbonyl)-*block*-Poly(oxyethylenoxyterephthaloyl)

Beispiel 2.6



generischer herkunftsbezogener Name: Polyamid:(Hexan-1,6-diamin-*alt*-adipinsäure)-*graft*-Polyether:Ethylenoxid

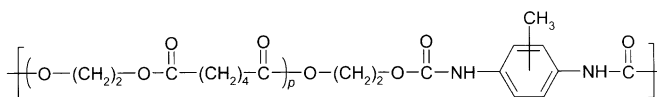
Anmerkung 5 Es wird angenommen, dass bei dieser Reaktion nur eine Pfropfreaktion pro CRU auftritt.

Regel 3

Ist mehr als eine Art funktioneller Gruppen oder heterocyclischer Systeme in der Polymerstruktur vorhanden, dann sollten deren Namen in alphabetischer Reihenfolge genannt werden, beispielsweise: Poly(GG'):(A-*alt*-B).

Anmerkung 6 Es wird empfohlen, jedoch nicht als zwingend angesehen, alle generischen Klassen anzugeben.

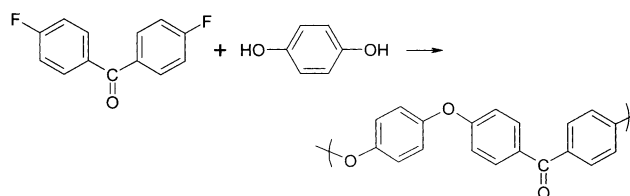
Beispiel 3.1



generischer herkunftsbezogener Name: Polyesterurethan:{ α,ω -Dihydroxyoligo[ethylenglycol]-*alt*-(adipinsäure)}-*alt*-(2,5-tolyldiisocyanat)}

systematischer Name: Poly[[oligo(oxyethylenoxyadipoyl)]-oxyethylenoxycarbonylimino(*x*-methyl-1,4-phenylen)iminocarbonyl]

Beispiel 3.2



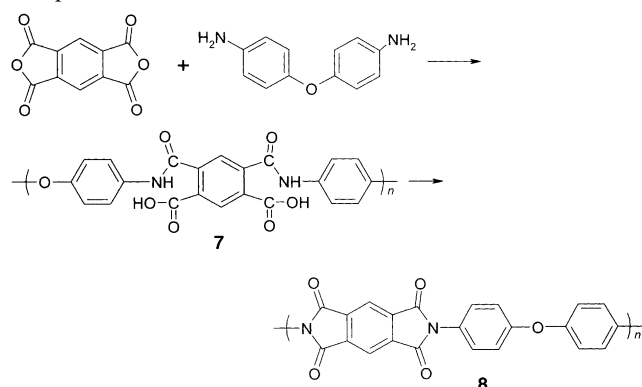
generischer herkunftsbezogener Name: Polyetherketon:(4,4'-Difluorbenzophenon-*alt*-hydrochinon)

systematischer Name: Poly(oxy-1,4-phenylenoxy-1,4-phenylencarbonyl-1,4-phenylen)

Regel 4

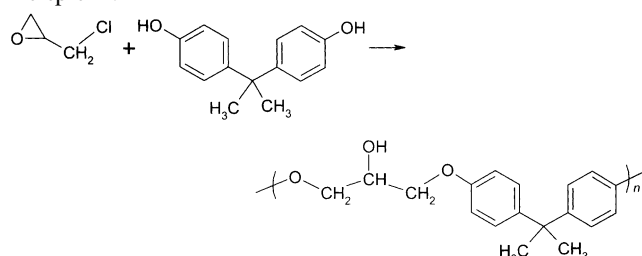
Polymerklassen, deren Name nur für die Hauptkette von Bedeutung ist, werden im Namen angegeben; die Namen von funktionellen Gruppen in Seitenketten können ebenfalls – durch einen Bindestrich abgetrennt – angegeben werden, falls sie während der Polymerisationsreaktion entstanden sind.

Beispiel 4.1



generischer herkunftsbezogener Name: 7: Poly(amid-säure): (Pyromellitdianhydrid-*alt*-4,4'-oxydianilin) (beide Carboxygruppen entstehen während der Polymerisationsreaktion), 8: Polyimid: (Pyromellitdianhydrid-*alt*-4,4'-oxydianilin)
systematischer Name: 7: Poly[oxy-1,4-phenyleniminocarbonyl(4,6-dicarboxy-1,3-phenylen)carbonylimino-1,4-phenylen], 8: Poly[(5,7-dihydro-1,3,5,7-tetraoxobenzo[1,2-*c*:4,5-*c'*]-dipyrrol-2,6(1*H*,3*H*)-diyl)-1,4-phenylenoxy-1,4-phenylen]

Beispiel 4.2

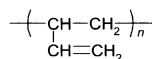


generischer herkunftsbezogener Name: Poly(ether-alkohol): (Epichlorhydrin-*alt*-bisphenol A)
systematischer Name: Poly[oxy(2-hydroxypropan-1,3-diyl)-oxy-1,4-phenylen(1-methylethan-1,1-diyl)-1,4-phenylen]

Regel 5

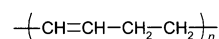
Bei reinen Kohlenwasserstoffketten, wie in Vinyl- oder Dienpolymeren, wird der generische Name nur verwendet, wenn aus einem gegebenen Monomersystem verschiedene Polymere entstehen können.

Beispiel 5.1



generischer herkunftsbezogener Name: Polyalkylen: (Buta-1,3-dien)
herkunftsbezogener Name: Poly(buta-1,3-dien)
systematischer Name: Poly(1-vinylethylen)

Beispiel 5.2

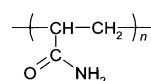


generischer herkunftsbezogener Name: Polyalkylen: (Buta-1,3-dien)

herkunftsbezogener Name: Poly(buta-1,3-dien)

systematischer Name: Poly(but-1-en-1,4-diyl)

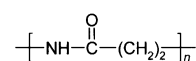
Beispiel 5.3



generischer herkunftsbezogener Name: Polyalkylen: Acrylamidamid

systematischer Name: Poly[1-(aminocarbonyl)ethylen]

Beispiel 5.4



generischer herkunftsbezogener Name: Polyamid: Acrylamid

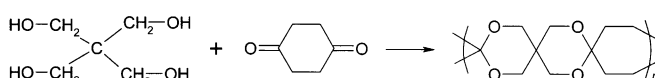
systematischer Name: Poly[imino(1-oxopropan-1,3-diyl)]

Anmerkung 7 Die Bezeichnungen Polyalkylen und Polyalkylenyl sind in Lit. [7], S. 149 definiert.

4. Weitere Anwendungen generischer Namen

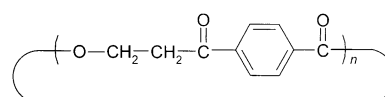
Generische herkunftsbezogene Namen können auch für kompliziertere Polymere wie Spiro- und cyclische Polymere sowie Netzwerke abgeleitet werden.

Beispiel 6.1



generischer herkunftsbezogener Name: Polyspiroketal: {[2,2'-Bis(hydroxymethyl)propan-1,3-diol]-*alt*-cyclohexan-1,4-dion} oder Polyspiroketal: (Pentaerythrit-*alt*-cyclohexan-1,4-dion)
systematischer Name: Poly[2,4,8,10-tetraoxaspiro[5.5]undecan-3,3,9,9-tetrayl-9,9-bisethylen]

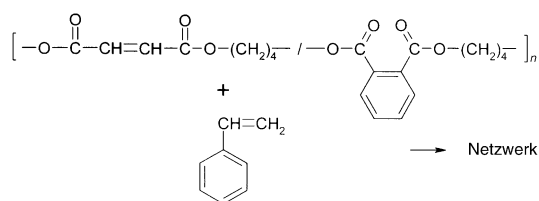
Beispiel 6.2



generischer herkunftsbezogener Name: *cyclo*-Polyester: (Ethylenglycol-*alt*-terephthalsäure)

Anmerkung 8 Eine IUPAC-Empfehlung für die Benennung cyclischer Polymere ist in Vorbereitung.

Beispiel 6.3



generischer herkunftsbezogener Name: Polyester:[Butan-1,4-diol-*alt*-(maleinanhydrid;phthalanhydrid)]-*net*-Polyalkylen:
(Maleinanhydrid-*co*-styrol)

- [1] „Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers“: K. L. Loening, R. B. Fox, N. M. Bikales, P. Corradin, L. C. Cross, A. D. Jenkins, N. A. Plate, W. Ring, P. Sigwalt, G. J. Smets, T. Tsuruta, *Pure Appl. Chem.* **1976**, 48, 373–385; ebenfalls als Kapitel 5 in Lit. [7] gedruckt.
- [2] „Nomenclature of Regular Double-Strand (Ladder and Spiro) Organic Polymers“: W. V. Metanomski, R. E. Bareiss, J. Kahovec, K. L. Loening, L. Shi, V. P. Shibaev, *Pure Appl. Chem.* **1993**, 65, 1561–1580.
- [3] „Structure-Based Nomenclature for Irregular Single-Strand Organic Polymers“: R. B. Fox, N. M. Bikales, K. Hatada, J. Kahovec, *Pure Appl. Chem.* **1994**, 66, 873–889.

- [4] „Source-Based Nomenclature for Copolymers“: W. Ring, I. Mita, A. D. Jenkins, N. M. Bikales, *Pure Appl. Chem.* **1985**, 57, 1427–1440.
- [5] „Source-Based Nomenclature for Non-Linear Macromolecules and Macromolecular Assemblies“: I. Kahovec, P. Kratochvíl, A. D. Jenkins, I. Mita, I. M. Papisov, L. H. Sperling, R. F. T. Stepto, *Pure Appl. Chem.* **1997**, 69, 2511–2521.
- [6] *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds* (Hrsg.: R. Panico, W. H. Powell, J.-C. Richter), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1993**.
- [7] *Compendium of Macromolecular Nomenclature* (Hrsg.: W. V. Metanomski), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1991**.
- [8] Der Originaltext wurde von der Commission on Macromolecular Nomenclature der Macromolecular Division der International Union of Pure and Applied Chemistry betreut. – Dieser Kommission gehörten während der Vorbereitung des Berichts (1993–2000) folgende Personen an: Titularmitglieder: R. E. Bareiss (1983–1993), M. Barón (ab 1996, Sekretär ab 1998), K. Hatada (1989–1997), M. Hess (ab 1998, Vorsitzender ab 2000), K. Horie (ab 1997), J. Kahovec (bis 1999), P. Kubisa (ab 1999), E. Maréchal (ab 1994), I. Meisel (ab 2000), W. V. Metanomski (1994–1999), C. Noël (bis 1997), V. P. Shibaev (bis 1995), R. F. T. Stepto (1989–1999, Vorsitzender bis 1999), E. S. Wilks (ab 2000), W. J. Work (1987–1999, Sekretär 1987–1997); assoziierte Mitglieder: M. Barón (1991–1995), K. Hatada (1998–1999), J.-I. Jin (ab 1993), M. Hess (1996–1997), K. Horie (1996–1997), O. Kramer (ab 1996), P. Kubisa (1996–1998), E. Maréchal (1991–1993), I. Meisel (1997–1999), S. Penczek (ab 1994), L. Shi (1987–1995), V. P. Shibaev (1996–1999), E. S. Wilks (1998–1999).