

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 Copolymeren 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 dieselbe 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 Nomenklatursystem zu erhalten.

[*] 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.

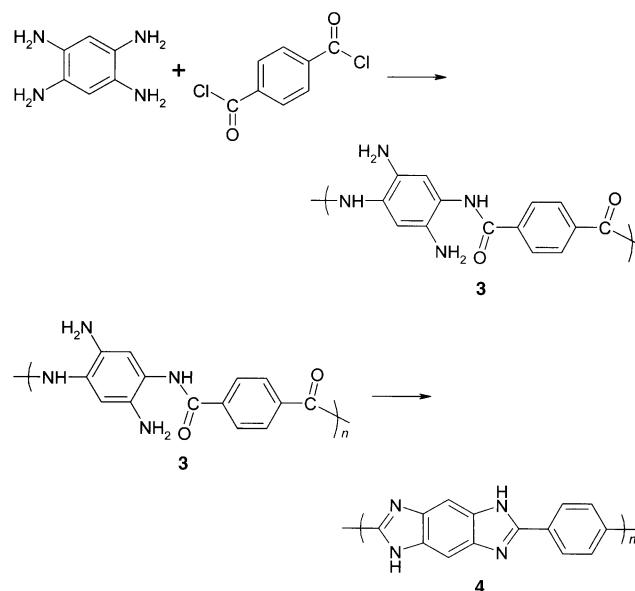
Die meisten Trivialnamen, wie Polystyrol, sind herkunftsbezogene Namen. Bisher hatte die Kommission solche Namen für Homopolymere nicht ausdrücklich empfohlen, da die strengeren systematischen Namen als besser für die wissenschaftliche Kommunikation geeignet angesehen wurden. Doch auch nach der Veröffentlichung 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 Nomenklatursystem für die Benennung von Copolymerisaten wegen seiner Einfachheit und leichten Anwendbarkeit übernommen. Daher hat sich die Kommission nun entschlossen, das herkunftsbezogene Nomenklatursystem offiziell als alternatives Nomenklatursystem 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.

IUPAC-Empfehlungen

Beispiel 2.3

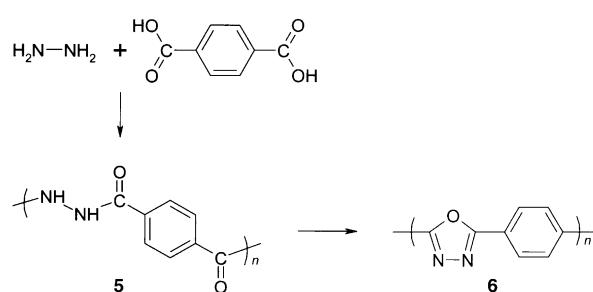


generischer herkunftsbezogener Name: 3: Polyamid:(Terephthaloyldichlorid-*alt*-benzol-1,2,4,5-tetramin), 4: Polybenzimidazol:(Terephthaloyldichlorid-*alt*-benzol-1,2,4,5-tetramin)

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-phenylene)iminoterephthaloyl], 4: Poly[(1,5-dihydrobenzo[1,2-*d*:4,5-*d'*]diimidazol-2,6-diyl)-1,4-phenylen]

Beispiel 2.4

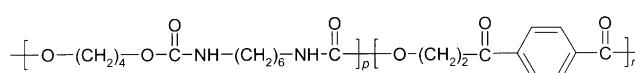


generischer herkunftsbezogener Name: 5: Polyhydrazid:(Hydrazin-*alt*-terephthalsäure), 6: Polyoxadiazol:(Hydrazin-*alt*-terephthalsäure)

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)

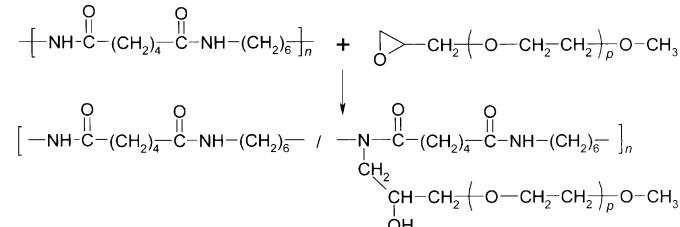
Beispiel 2.5



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

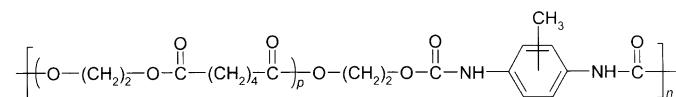
Anmerkung 5 Es wird angenommen, dass bei dieser Reaktion nur eine Ppropfreaktion pro CRU auftritt.

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.

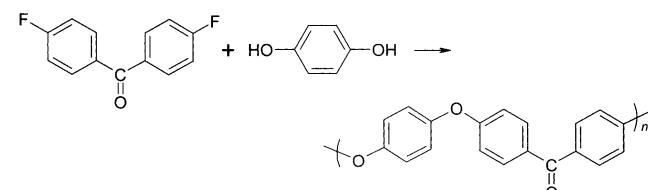
Beispiel 3.1



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

systematischer Name: Poly{[oligo(oxyethylenoxyadipoyl)]-oxyethylenoxy carbonylimino(x -methyl-1,4-phenylen)imino-carbonyl)}

Beispiel 3.2

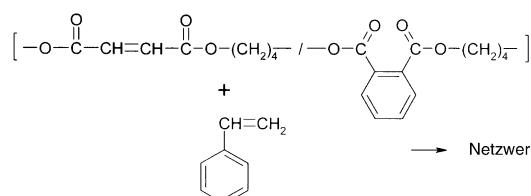


generischer herkunftsbezogener Name: Polyetherketon:(4,4'-Difluorbenzophenon-*alt*-hydrochinon)

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

IUPAC-Empfehlungen

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).