

УДК 541.600

## НОМЕНКЛАТУРА ЛИНЕЙНЫХ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ ИХ СТРОЕНИЯ \*

Предлагаемый вниманию читателей американский проект номенклатуры линейных полимеров имеет целью облегчить взаимопонимание химиков и оперативную научную информацию в быстро развивающейся области, оперирующей в настоящее время весьма сложными сочетаниями разнообразных химических структур. Этот проект еще не утвержден и не рекомендуется к применению, а публикуется лишь для информации и обсуждения.

### ВВЕДЕНИЕ

Линейные полимеры по традиции именовали по исходным веществам, хотя этот способ наименования ограничен и страдает серьезными недостатками. Между тем, в связи с непрерывным появлением все большего числа новых и сложных полимеров нужны были систематические усилия для описания этих веществ с целью обеспечения действенной научной информации. Подкомитет по номенклатуре при Комитете по высокомолекулярным соединениям Национального исследовательского Совета осознал эту необходимость около 20 лет тому назад. Его достижения в этой области, потребовавшие многолетних исследований большого числа химиков-органиков и специалистов в области полимеров как в национальном, так и в международном масштабе, составили в 1952 г. часть доклада<sup>1</sup> Номенклатурной секции Комиссии по высокомолекулярным соединениям Международного Союза по теоретической и прикладной химии. Среди многих предложений в области полимерной номенклатуры, появившихся за последние годы, доклад<sup>1</sup> был наиболее полным и отвечал требованиям химиков того времени. Однако, взрывоподобное развитие полимерной химии за последующий период и постепенное изменение химического языка потребовали модификации и дополнения предложений ИЮПАК.

Так как большая часть полимерной химии является разделом органической химии, то исследователи, использующие полимерную номенклатуру, ожидают, что предложенные названия будут не только сходными с названиями органических веществ, но и потребуют или небольшого, или совсем никакого перевода из хорошо систематизированной органической номенклатуры. В настоящем сообщении для полимеров предлагается структурная номенклатура, которая, насколько это возможно, придерживается общепринятых принципов органической номенклатуры, теперь уже хорошо разработанных<sup>2,3</sup>.

Введение общего понятия о повторяющемся структурном фрагменте влечет необходимость применения присоединительной номенклатуры для наименования такого фрагмента. В других отношениях делается упор на сходство с органической номенклатурой.

\* Номенклатура разработана Комитетом по номенклатуре полимерного отдела Американского химического общества под пред. Р. Б. Фокса. *Macromol.*, 1, 193 (1968). Перев. с англ. Л. С. Солодкина.

Предлагаемые правила разработаны для линейных полимеров, структура которых может быть точно описана при помощи обычных химических понятий, они не могут быть использованы для веществ с неизвестным химическим строением. Правила для описания стереорегулярности не даны, так как существующие сейчас для этого правила ИЮПАК<sup>4</sup> могут быть легко приведены в соответствие с предлагаемыми здесь.

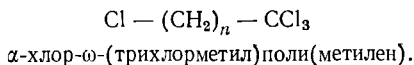
## 1. ПРАВИЛО 1. ОБЩАЯ ФОРМА

Полимер с неопределенной длиной цепи называют с помощью приставки «поли», за которой в круглых или квадратных скобках, в зависимости от конкретного случая, следует название повторяющегося структурного фрагмента. Таким образом, каждый из линейных одноцепных полимеров будет иметь общее название поли(двухвалентный радикал). Для точного определения длины цепи вместо приставки «поли» применяется соответствующее греческое числительное. Например, линейная цепь из 10 звеньев, декамер, называется дека(двухвалентный радикал).

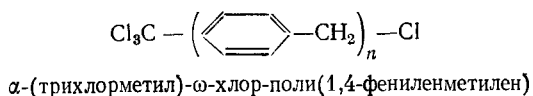
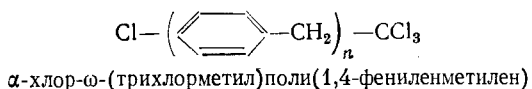
*Примечание.* В очень редких случаях названия коротких линейных полимеров могут напоминать названия некоторых циклических соединений. Эти соединения можно будет легко отличить по появлению скобок и локантов\* в названии полимера. Например, названия три- и тетрафенилен отвечают циклическим соединениям, состоящим из трех и четырех радикалов 1,2-фенилена. Согласно правилу А—54.3<sup>2</sup> органической номенклатуры ИЮПАК и практике Chemical Abstracts<sup>5</sup> линейные аналоги этих соединений называются *о*-тер- и *о*-кватерфенил; согласно настоящим правилам, их предлагается называть три(1,2-фенилен) и тетра(1,2-фенилен). Концевые водородные группы подразумеваются или описываются по Правилу 2. Полимер неопределенной длины цепи будет называться поли(1,2-фенилен).

## II. ПРАВИЛО 2. КОНЦЕВЫЕ ГРУППЫ

Обычно концевые группы высокомолекулярных соединений не характеризуются. Если они известны и это желательно подчеркнуть например, в случае теломеров, обозначения их помещают впереди слова — названия, а положение в полимерной цепи указывают греческими буквами  $\alpha$  и  $\omega$ :



В формуле концевую группу  $\alpha$  приписывают слева к главному радикалу повторяющегося фрагмента в соответствии с приведенными ниже правилами:



\* Локант — это числовой или буквенный индекс — «адрес», указывающий на положение двойной или тройной связи, заместителя или гетероатома в молекуле или свободной валентности у радикала (Прим. перев.)

## III. ПРАВИЛО 3. ДВУХВАЛЕНТНЫЙ РАДИКАЛ.

Повторяющимся фрагментом линейного полимера является двухвалентный радикал. В названиях двухвалентных радикалов следует, насколько это возможно, придерживаться правил ИЮПАК по номенклатуре органических соединений<sup>2,3</sup>. Простой повторяющийся фрагмент содержит только один тип ациклического или циклического двухвалентного радикала. Более сложные повторяющиеся фрагменты могут состоять из нескольких двухвалентных радикалов. Их названия в порядке, обусловленном последующими правилами, составляют полное название повторяющегося фрагмента. Общий принцип состоит в том, чтобы был выбран наименьший возможный повторяющийся фрагмент, внутри которого был бы назван наибольший возможный двухвалентный радикал.

*Примечание.* Ввиду затруднений нумерации атомов циклоцепных комбинаций, которые могут подвергаться замещению как в кольцо, так и в цепь, их следует рассматривать как две независимые части. Следует называть 1,4-фениленэтилен, а не 1,4-ксилилен. Однако, если замещение может иметь место только в кольце, то применяют обычное название типа терефталойл. Из-за трудностей нумерации в названиях сложных повторяющихся структурных фрагментов не используют названия многих несимметричных двухвалентных радикалов, например: аспарагиноил, цитраконоил, глутамоил, малоил, мезаконоил.

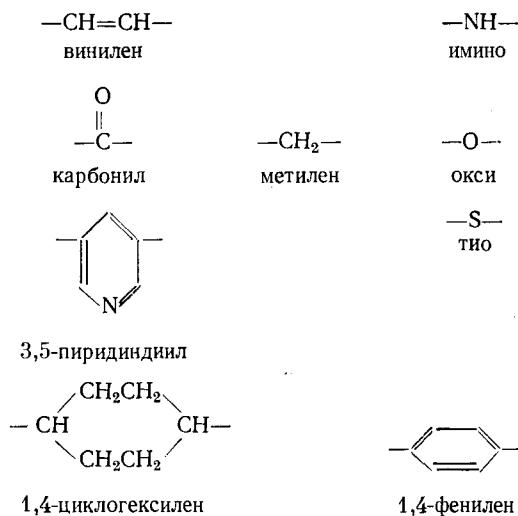
Примерами простых радикалов могут служить гексаметилен, этилен, 1-бутенилен, бензилиден, 1,3-фенилен, 3,8-хиолиндиил, адипойл.

Простые двухвалентные радикалы могут сочетаться в различные комбинации, например:



Обратите внимание, что эти и все последующие названия всегда подразумевают чтение структуры слева направо.

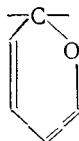
Чаще всего встречаются следующие простые двухвалентные радикалы:



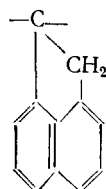
Нередки двухвалентные радикалы с циклами, например:



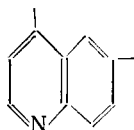
4-циклогексен-1,3-илен



2H-пиран-2-илиден



1-аценафтилиден

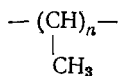


4,6-хинолиндиил

### 1. Простые повторяющиеся фрагменты. Название полимера

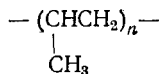
Полимер, повторяющийся фрагмент которого представляет собой простой двухвалентный радикал (примеры см. III), называют с прибавлением приставки «поли» к названию радикала, заключенному в скобки, например: поли(метилен), поли(3,5-пиридиндиил), поли(4-циклогексен-1,3-ксилен).

Рассмотрим применение этого правила на примерах.



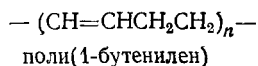
поли(этилиден)

но не поли(метилметилен), т. к. наибольший называемый радикал — это этилиден, а не метилен.



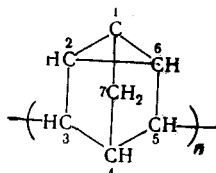
поли(пропилен)

но не поли(метилэтилен), т. к., согласно правилам ИЮПАК, название радикала «пропилен» употребляется в виде исключения в случае, когда он не замещен.



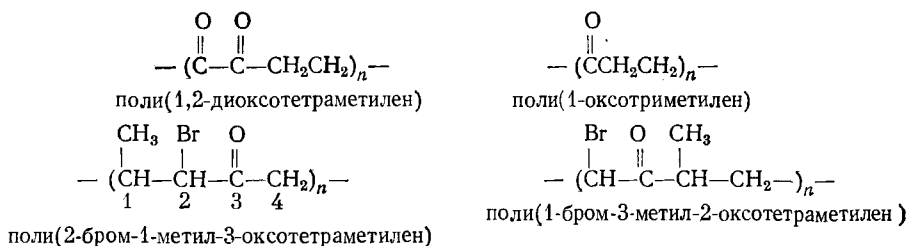
поли(1-бутенилен)

но не поли(3-бутенилен) или поли(винилэтилен), т. к. в цепи этого полимера наибольшее идентифицируемое звено с наименьшим локантом для обозначения двойной связи — это 1-бутенилен. Полностью «цис»-форма этой структуры называется поли(цис-1-бутенилен).

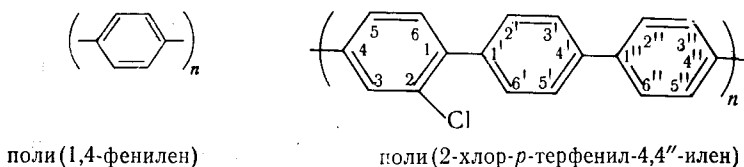


поли(трицикло[2.2.1.0<sup>2,6</sup>]гепт-3,5-илен)

При написании структуры повторяющегося фрагмента следует принимать во внимание заместители. Простейший замещенный двухвалентный радикал — это цепь из метиленовых радикалов, один или несколько из которых замещены:



Те же принципы приложимы к цепи из колец:



#### IV. ПРАВИЛО 4.

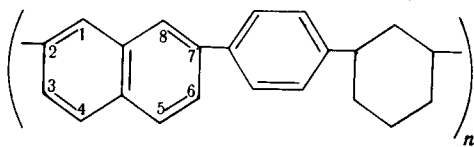
##### ПОЛИМЕРЫ СО СЛОЖНЫМИ ПОВТОРЯЮЩИМИСЯ ФРАГМЕНТАМИ. НАЧАЛО И НАПРАВЛЕНИЕ ПЕРЕЧИСЛЕНИЯ

Полимер, повторяющийся фрагмент которого состоит из более чем одного двухвалентного радикала, может быть назван различными способами. Выбор начала и направления перечисления звеньев фрагмента диктуется как традицией, так и удобством обращения с индексами. Порядок перечисления радикалов определяет название самого полимера. Для унификации номенклатуры устанавливается следующий нисходящий порядок старшинства типов двухвалентных радикалов: 1) гетероциклы, 2) цепи, содержащие гетероатомы, 3) карбоциклы и 4) цепи, содержащие только атомы углерода. Заместители не влияют на этот порядок. Например, повторяющийся фрагмент полимерной цепи, содержащий одновременно гетероцикл и карбоцикл, изображается и читается так, чтобы гетероцикл упоминался первым. Старший компонент повторяющегося фрагмента изображают в его левом конце, а чтение начинают всегда слева направо.

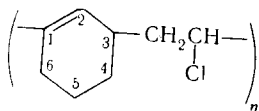
##### 1. Полимеры со сложными повторяющимися фрагментами, содержащими карбоциклы отдельно или в комбинации с ациклическими углеродными цепями

Если карбоциклическая система является частью главной полимерной цепи, не содержащей гетероатома, то повторяющийся фрагмент изображают и называют, начиная с наименьшей свободной валентности у наиболее предпочтительной циклической системы, которую помещают в левом конце повторяющегося фрагмента. Составляющие звено двухвалентные радикалы перечисляют в кратчайшем направлении к следующему наиболее предпочтительному циклу, или, если других циклов в системе нет, то к ациклическому двухвалентному радикалу, старшинство среди которых диктуется алфавитом. При наличии двух одинаковых ациклических радикалов предпочтение отдают прежде 1) радикалу с наибольшим числом заместителей, 2) заместителям с наименьшими ло-

кантами, 3) заместителям, старшим по алфавиту. Старшинство в циклических системах основано на сложности. Старшей считается (а) циклическая система, содержащая наибольшее число колец; при прочих равных условиях предпочтение следует отдать\*: (б) системе, содержащей наибольший индивидуальный цикл ближе к началу нумерации; (в) системе, в которой сросшиеся циклы имеют большее число общих атомов; (г) системе, в которой соединение колец описывается наименьшим локантом; (д) наименее насыщенной системе; (е) системе с наименьшим локантом при свободных валентностях двухвалентного радикала; (ж) заместителям в порядке, который дан для ациклических радикалов. Например:

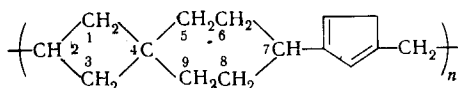


поли(2,7-нафтилен-1,4-фенилен-1,3-цикло-  
гексилен) \*\*

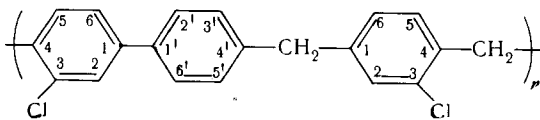


поли[1-циклогексен - 1,3-  
илен(2-хлорэтилен)]

Заместители называют при помощи приставок, помещаемых в скобки вместе с названием того звена, к которому этот заместитель присоединен:

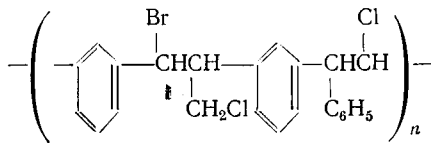


поли(спиро[3.5]нон-2,7-ксилен - 2,5-цикло-  
пентадиен-1,3-илен-метилен)



поли[(3-хлор-4,4'-бифенилилен)метилен(3-хлор-1,4-  
фенилен)-метилен]

но не поли[(3'-хлор-4,4'-бифенилилен)метилен(2-хлор-1,4-фенилен)метилен], т. к. заместитель в главной циклической системе — бифениле — указывает направление.



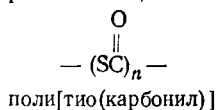
поли [1,3-фенилен(1-бром-2-(хлорметил)  
этилен]-1,3-фенилен(2-хлор-1-фенилэтилен)]

\* Более подробный анализ этих критериев — в правилах ИЮПАК для органических соединений (см. 3).

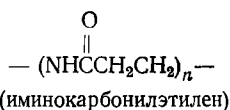
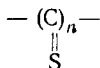
\*\* Эту цепь можно было бы перечислить и в другом порядке, например: фенилен — циклогексилен — нафтилен, или нафтилен — циклогексилен — фенилен или циклогексилен — фенилен — нафтилен. Порядок, приведенный к тексту, отвечает Правилу IV, 1 (а) и (д) (Прим. ред.)

## 2. Полимеры со сложными повторяющимися фрагментами, содержащими ациклические гетероатомы отдельно или в комбинации с карбоциклами и (или) ациклическими углеводородными цепями

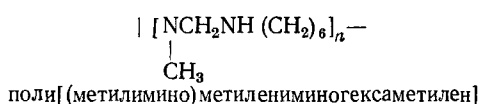
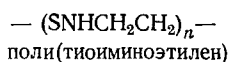
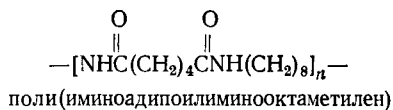
Когда гетероатомы являются частью ациклической цепи повторяющегося фрагмента, сам повторяющийся фрагмент изображают и называют так, чтобы старший гетероатом находился на левом конце повторяющегося фрагмента. Устанавливается следующий нисходящий порядок старшинства гетероатомов: O, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, В и Hg. Перечисление сложных двухвалентных радикалов направлено кратчайшим путем к (а) другому гетероатому *того же типа*; (б) другому гетероатому иного типа. В отсутствие гетероатома перечисление направлено к главному карбоциклу или ациклической цепи повторяющегося фрагмента, как это дано в правиле IV, 1. Например:



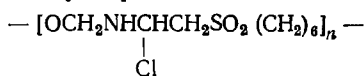
квадратные скобки требуются, чтобы отличить эту структуру от поли(тиокарбонила)



но не поли[имино(1-оксотриметилен)], т. к. карбонильную группу, прямо присоединенную к гетероатому, называют как ацильный радикал.

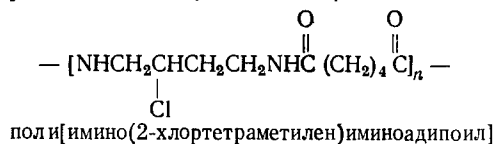


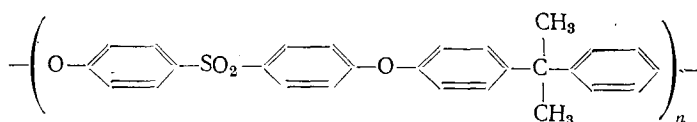
но не поли[иминометилен(метилимино)гексаметилен], или поли[(метилимино)гексаметилениминометилен]. Здесь старший бирадикал — замещенная иминогруппа, а кратчайший путь к следующему гетероатому лежит через одиночный атом углерода.



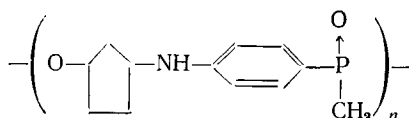
поли[оксиметилимино(1-хлорэтилен)сульфонилгексаметилен]

но не поли[оксигексаметиленсульфонил-(2-хлорэтилен)иминометилен], т. к. кратчайший путь от O к S проходит через N.

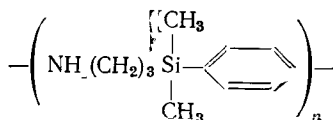




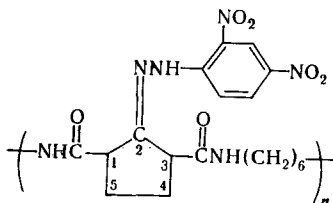
поли(окси-1,4-фениленсульфонил-1,4-фениленокси-1,4-фениленизопропилиден-1,4-фенилен)  
при равной длине пути между атомами кислорода, путь лежащий через атом  
серы, предпочтительнее.



поли[окси-1,3-циклопентиленимино-1,4-фенилен(метилфосфинилиден)]

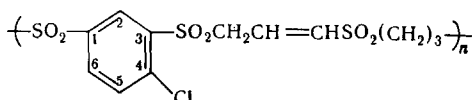


поли[иминотриметилен(диметилсилилен)-1,4-фенилен]

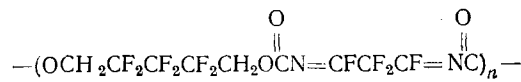


поли{иминокарбонил-[2-(2,4-динитрофенилгидразоно)-1,3-циклопентил-  
лен] карбонилиминогексаметилен}

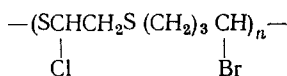
Заместители в функциональных группах называют при помощи приставок.



поли[сульфонил(4-хлор-1,3-фенилен)сульфонил-2-пропениленсульфонилтриметилен]

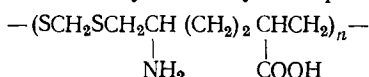


поли[окси(2,2,3,3,4,4-гексафторпентаметилен)  
оксикарбонилнитрило(тетрафторпропандиилиден)  
нитрилокарбонил]



поли[тио(1-хлорэтилен)тио(4-бромтетраметилен)]

направление выбирают по низшему локанту в первом упомянутом радикале.



поли[тиометиленттио(2-амино-5-карбоксигексаметилен)]

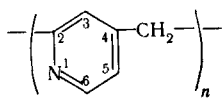
Направление выбирают по названию заместителей в алфавитном порядке.



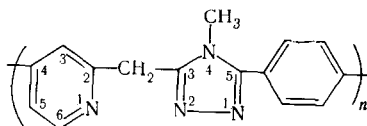
### 3. Полимеры со сложными повторяющимися фрагментами, включающими гетероциклические системы

Полимеры с гетероциклами в основной цепи называют путем упоминания в первую очередь двухвалентного радикала старшего гетероцикла. Дальнейшее перечисление направлено кратчайшим путем через наименьшее число атомов к (а) следующему гетероциклу того же типа; (б) другому гетероциклу в порядке понижающегося старшинства; (в) ациклическому двухвалентному радикалу, содержащему гетероатом (см. правило IV, 2); (г) старшей карбоциклической системе (см. правило IV, 1) и (е) старшему ациклическому радикалу (см. правило IV, 1).

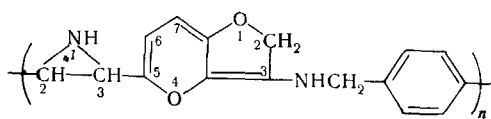
Принимается следующий нисходящий порядок старшинства в гетероциклических системах\*: (а) наибольшая циклическая система, содержащая любое число атомов азота; (б) среди циклических систем равной величины система, содержащая наибольшее число атомов азота; (в) среди циклов, не содержащих азот, цикл, содержащий наибольшее число гетероатомов в порядке, указанном в правиле IV, 3; (г) компонент с наибольшим числом циклов и т. д. по порядку старшинства для карбоциклов из правила IV, 1. Так как гетероциклы имеют фиксированную нумерацию, наиболее предпочтительный гетероцикл помещают в левом конце повторяющегося фрагмента и ориентируют так, чтобы свободная валентность с наименьшим локантом находилась слева от цикла.



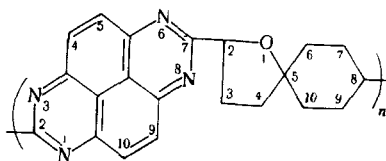
поли(2,4-пиридиндиметилен)



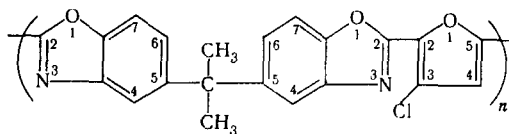
поли[4,2 - пиридиндиметилен(4-метил-4Н-1,2,4-триазол - 3,5-диил)-1,4-фенилен]



поли(2,3-азиридиндиил - 2Н - фуоро[3,2-б]пиран-5,3-диилиминометилен-1,4-фенилен)

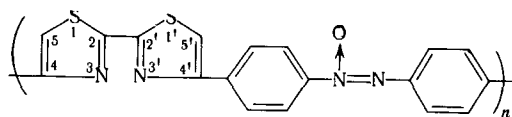


поли(хиназолино[6,5,4 - def]хиназолин-2,7-диил-1-оксапиро-[4,5]дек-2,8-илен)

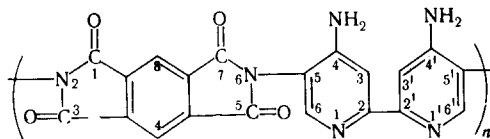


поли[2,5-бензоксазолдиилизопропилиден - 5,2-бензоксазолдиил(3-хлор-2,5-фурандиил)]

\* См. 3, правило В3.



поли([2,2'-бигиазол]4,4'-диил-1,4 - фенилен-ONN-азокси-1,4-фенилен)



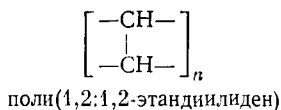
поли[(5,7-дигидро-1,3,5,7 - тетраоксобензо[1,2-с:4,5-с']-дипиррол-2,6(1H, 3H)-диил) - (4,4'-диамин-но[2,2'-бипиридин]-5,5'-диил)]

## V. ПРАВИЛО 5.

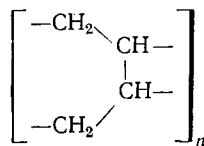
### 1. «Лестничные» или двуцепные полимеры.

#### Линейные двуцепные полимеры с четырехвалентными повторяющимися фрагментами

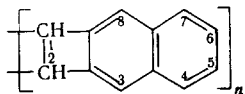
Повторяющиеся фрагменты лестничных полимеров называют, подобно двухвалентным, повторяющимся фрагментам. Отношения между четырьмя свободными валентностями обозначают парами локантов, отделяемых двоеточием. Пары локантов соответствуют «входу» и «выходу» линейных двуцепных полимеров.



поли(1,2:1,2-этандиниден)



поли(1,4:2,3-бутантетраил)

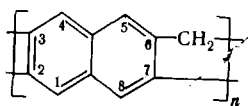


поли(1,2 - дигидроцикло-  
бута[6]нафталин - 1,2 :  
5,6-тетраил)

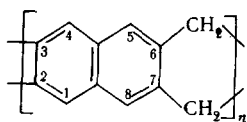
### 2. Линейные двуцепные полимеры, повторяющийся фрагмент которых состоит одновременно из двухвалентных и четырехвалентных радикалов

В тех случаях, когда повторяющийся фрагмент полимера образован сочетанием двухвалентного и четырехвалентного радикалов, его изображают, начиная с четырехвалентного радикала. Если в системе присутствуют гетероатомы, то кольцо следует мысленно разделить на части так, чтобы, во-первых, свести к минимуму число свободных валентностей и, во-вторых, поместить наибольшее возможное число старших гетероатомов в наиболее левое положение в повторяющемся фрагменте, который прочитывают слева направо. Эти положения не обязательно должны приводить к наименьшим локантам при окончательной нумерации кольца.

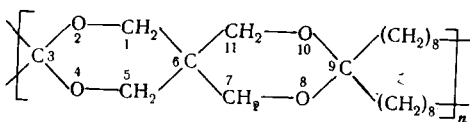
Например:



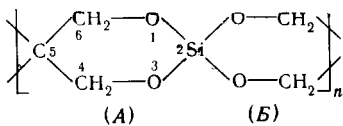
поли(2,3:6,7 - нафталин-  
тетраил-6-метилен)



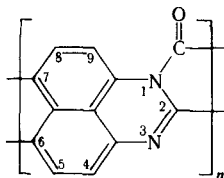
поли(2,3:6,7 - нафталин-  
тетраил-6,7 - диметилен)



поли[2,4,8,10 - тетраоксаспиро[5.5]ундекан-  
3,9-диилиден-9,9-бис(октаметилен)]



поли[1,3-диокса-2 - силициклогек-  
сан-5,2-диилиден - 2,2-бис-(оксима-  
тилен)]

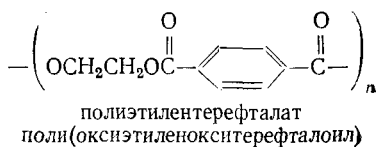
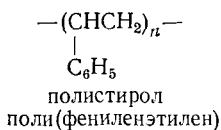


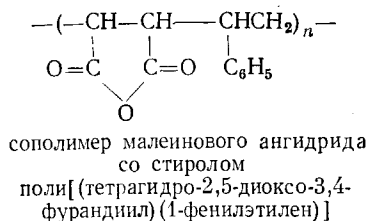
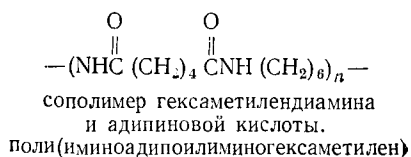
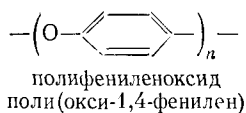
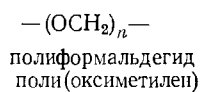
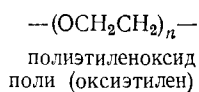
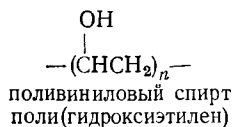
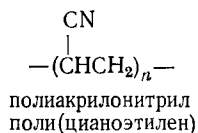
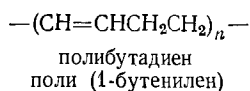
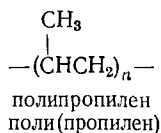
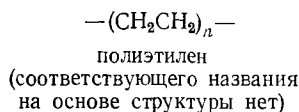
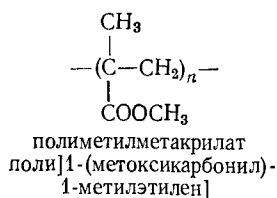
поли(пиримидин - 6,7 :  
1,2-тетраил-1 - карбонил)

положение гетероатомов в кольце А определяется кратчайшим путем от них до гетероатомов сегмента Б.

## VI. СТРОЕНИЕ И ТРИВИАЛЬНЫЕ НАЗВАНИЯ НЕКОТОРЫХ ПРОСТЫХ ПОЛИМЕРОВ

Не ожидается, что названия, образованные с помощью изложенных здесь правил, вытеснят принятые тривиальные названия простых полимеров. (Например, тривиальное название «уксусная кислота» не заменено систематическим названием этановая кислота.) Приведенные ниже примеры демонстрируют легкость, с которой могут быть написаны структурные названия для часто встречающихся простых полимеров. Первым приведено тривиальное название, а вторым — структурное. В последних двух примерах приведены названия полимеров с точно установленной структурой. Предложенная система не применима для описания беспорядочно построенных сополимеров.





## ЛИТЕРАТУРА

1. J. Polym. Sci., 8, 257 (1952).
2. J. Am. Chem. Soc., 82, 5545 (1960).
3. Pure Appl. Chem., 11, № 1—2 (1965).
4. M. L. Huggins, G. Natta, V. Desreux, H. Mark, Там же, 12, 645 (1966).
5. Chem. Abstr., 56, Introduction to the Subject Index (1962).

Комитет по номенклатуре  
Полимерного отдела Американского химического общества  
Code 6120, Naval Research Laboratory,  
Washington, D. C. 20390