



Polimeroen Nomenklaturarako Gida Laburra

Bertsio 1.1 (2012)

R. C. Hiorns (Frantzia),* R. J. Boucher (Erresuma Batua), R. Duhlev (Erresuma Batua), K.-H. Hellwich (Alemania), P. Hodge (Erresuma Batua), A. D. Jenkins[‡] (Erresuma Batua), R. G. Jones[‡] (Erresuma Batua), J. Kahovec (Txekiar Errepublika), G. Moad (Australia), C. K. Ober (EE BB), D. W. Smith (EE BB), R. F. T. Stepto (Erresuma Batua), J.-P. Vairon (Frantzia), y J. Vohlídal (Txekiar Errepublika).

*C/e: polymer.nomenclature@iupac.org; Erakunde babeslea: IUPACen Polimeroen Dibisioa, Polimeroen Terminologiari buruzko Azpibatzordea. [‡] Zendua

Itzulpena eta moldaketa: Liher Prieto (España), Efraim Reyes (España) eta Julia Sánchez Bodón (España). C/e: julia.sanchez@ehu.eus

1) Sarrera

Adostutako nomenklaturaren onarpen unibertsala ez da inoiz garrantzitsuagoa izan online bilaketetan eta argitalpenetan egitura kimikoak deskribatzeko. **Kimika Puru eta Aplikatuaren Nazioarteko Batasunak** (IUPAC, ingelesko siglak)¹ eta **Laburpen Kimikoen Zerbiztak** (CAS, ingelesko siglak)² antzeko gomendioa egiten dituzte. Puntu nagusiak jatorrizko dokumentuekiko hiperestekin erakusten dira hemen. IUPACen **Liburu Purpuran** (*Purple Book*) xehetasun gehiago aurki daitezke³.

2) Oinarritzko Kontzeptuak

Polimero eta **makromolekula** terminoek ez dute esanahi bera. Polimeroa makromolekulez osatutako substantzia bat da. Azken horiek masa molar tarte bat izan dezakete (g mol^{-1} unitatea), eta horien banaketak **sakabanatasunaren** (D) arabera adierazten dira. Sakabanatzea masazko masa molarren bataz bestekoaren (M_m) eta zenbakizko masa molarren bataz hestekoaren (M_n) arteko erlazioa da, hau da $D = M_m/M_n$ ⁴. Kantitate fisiko edo aldakorretarako sinboloak letra *etzanean* adierazten dira, aldiz unitateak edo etiketak letra biribilean daude.

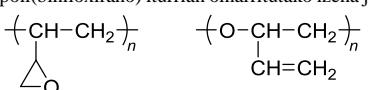
Oro har, polimeroen nomenklatura irudikapen idealizatuei aplikatzen zaie; egiturazko irregularitasun txikiak ez dira kontuan hartzen. Bi eratara izenda daiteke polimero bat. **Iturri oinarritutako nomenklatura monomeroa** identifika daitekeenean erabili daiteke. Bestela, egitura esplitzitagoa batean oinarritutako nomenklatura erabil daiteke polimeroaren egitura probatzen denean. Nahasterik ez dagoenean, izen tradizional batzuk ere **onartzentzira**.

Erabiltzen den metodoa edozein dela ere, polimeroen izen guztiak poli aurrizkia dute, eta horren jarraian, izearen inguruan taldekatze markak. Markak ordena honetan erabiltzen dira: {{()}}. **Lekutzaleek** egiturazko ezaugarrien kokapena adierazten dute, adibidez, poli(4-kloroestireno). Iturrian oinarritutako izen bat hitz bat bada eta **lekutzailerik** ez badu, orduan horiek gordezen dituzten parentesi-markak ez dira beharrezkoak, baina hasmena dagoenean erabili behar dira, adibidez, poli(kloroestirenoa) polimero bat da eta polikloroestirenoa, berriz, multiordezkatutako **molekula** txiki bat izan daiteke. **Muturretan dauden taldeak** α- eta ω-sinboloekin deskribatzen dira, adibidez α-cloro-ω-hidroxi-poliestireno.

3) Iturrian oinarritutako nomenklatura⁵

3.1 Homopolimeroak

Homopolimero bat izendatzeko, monomero errealearen edo suposiziotatik eratortzen den izena (hots, iturria) erabiltzen da, esaterako: poli(metil metakrilatoa). Monomeroak IUPACen **gomendioak** edo ondo ezarritako izen tradizionalak erabiliz izenda daitezke. Anbiguoasunen bat egotekotan, **klaseen izenak** gehi daitezke.⁶ Adibidez, poli(binoloxirano) iturrian oinarritutako izena jarraian agertzen diren egiturekin bat etor



liteke. Argiago izateko, polimeroa polimeroaren klasearen izena erabiliz izendatzeko, horren jarraian bi puntu eta monomeroaren izena agertzen da, hau da, klase-izena:monomeroaren izena. Horrela, ezkerrean eta eskuinean, polialkenoa:binoloxiranoa eta polieterra:binoloxiranoa dira, hurrenez hurren.

3.2 Kopolimeroak⁷

Kopolimero baten egitura 1. taulan agertzen den **konektore** egokiena erabiliz deskriba daiteke. Hauetako letra *etzanez* idazten dira.

3.3 Polimero ez-lineakak⁵

Polimero eta kopolimero ez-lineak eta polimero-multzoak 2. taulako letra etzaneko deskriptoreak erabiliz izendatzeko dira. Deskriptorea hala nola *branch* (adarkatua) aurrizki (A) gisa erabiltzen da (ko)polimero bat izendatzearan, edo konektibo (K) gisa, adibidez, *comb*, polimeroen bi izenen artean

1. taula. Kopolimeroentzako deskriptoreak.⁷

Kopolimeroa	deskriptorea	Adibidea
zehaztu gabe	<i>co</i>	(K) poli(estireno-co-isopreno)
estatistikoa	<i>stat</i>	(K) poli(isopreno-stat-(metil metakrilato))
hasarrazko	<i>ran</i>	(K) poli(metil metakrilato)-ran-(butil akrilatoa)
txandakako	<i>alt</i>	(K) poli(estireno-alt-(anhidrido maleiko))
periodiko	<i>per</i>	(K) poli(estireno-per-isopreno-per-(4-binilpiridina))
bloke	<i>block</i>	(K) poli(buta-1,3-dieno)-block-poli(eteno-co-propenoa)
txertozoa*	<i>graft</i>	(K) poliestireno-graft-poli(etilenoxidoa)

*Lehen izena kate nagusiarena da.

2. Taula (Ko)polimero ez-lineal eta polimero-multzoetarako deskriptoreak.⁵

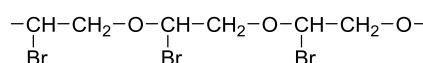
(Ko)polimeroa	Deskriptorea	Adibidea
nahaste	<i>blend</i>	(K) poli(3-hexitofeno)-blend-poliestirenoa
orrazi	<i>comb</i>	(K) poliestireno-comb-polisiopreno
konplexu	<i>compl</i>	(K) <i>b</i> [1,4]dioxina-compl-poli(azido binilbentzenosulfonikoa) ^a
ziklo	<i>cyclo</i>	(A) cyclo-poliestireno-graft-polietilenoa
adarkatua	<i>branch</i>	(K) branch-poli[(1,4-binilbentzeno)-stat-estirenoa]
selkargurutzatua	<i>net</i>	(K edo A) net-poli(fenol-co-formaldehidoa)
elkar gurutzamendua	<i>ipn</i>	(K) (net-poliestireno)-ipn-[net-polí(metil akrilato)]
erdi	<i>sipn</i>	(K) (net-poliestireno)-sipn-polisioprenoa
izarra	<i>star</i>	(A) star-polisioprenoa

^a IUPACen nomenklatura organikoaren arabera, kortexteek bateratutako eraztunaren konposatuaren zenbaketari dagozkion lekutzaleak gordetzen dituzte.

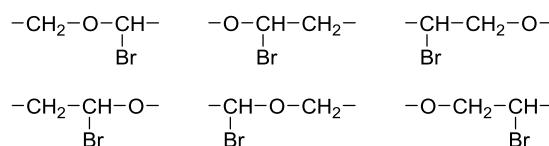
4) Egituran Oinarritutako Nomenklatura

4.1 Polimero organiko kate bakun erregularrak⁸

Iturrian oinarritutako nomenklaturan erabilitako monomeroaren izenaren ordez, egituran oinarritutako nomenklaturak **osatutako unitate errepikakor hoberena** (CRU, ingelesko siglak) erabiltzen du. Honela zehaztu daiteke: (i) polimeroaren katearen zati handi bat marratzen da egituraren errepikapena erakusteko, adibidez:



(ii) errepikatutako zatirik txikiena CRU bat da; beraz, aukera guztiak identifikatzeko dira. Kasu honetan:



(iii) hurrengo urratsa egitura horietako bakoitzak osatzen duten **azpiunitateak** identifikatzeko da, hau da, **konposatu organikoen** IUPAC nomenklatura erabiliz izenda daitekeen **talde** dibidente handienak antzematea, 3. taulan agertzen diren adibideak bezala; (iv) **lehentasun** handieneko azpiunitatetik hurrengo azpiunitatera doan biderik laburrena erabiliz, azpiunitateen ordena zuzena 1. irudia erabiliz zehazten da; (v) CRU gogokoena ahafik eta lekutzale txikienekin aukeratzen da **ordezkatzalleentzat**.

Aurreko adibidean, CRUetako oxi azpiunitateak heteroatomoen kateak dira. 1. irudian, oxi azpiunitateek karbono aziklikoaren kateko azpiunitateek baino lehentasun handiagoa dute; horietatik handienak bromozorozkutatuko -CH₂-CH₂- azpiunitateak dira. 1-bromoetano-1,2-diiloa 2-bromoetano-1,2-diiloaren aurrekin aukeratzen da, lehenak lekutzale txikiagoa baitu bromozorozkutatuko. Beraz, CRU gogokoena oxi(1-bromoetano-1,2-diilo) da, beraz, polimero poli[oxi (1-bromoetano-1,2-diilo)] deitzen da. Mesedez, kontuan izan ordezkatzaileak daraman azpiunitatearen inguruan erantsitako parentesiak

CRU bakarreko errepikapen **erregularrez** osatuta ez dauden polimeroei **polimeros irregulares** deitzen zaie. Horientzat, osatutako **unitate** (CU, ingelesko siglak) bakoitzak barra batek bereizten du, adibidez: poli(but-1-eno-1,4-diilo/1-biniletano-1,2-diilo).⁹

¹ Doan eskuragarri hemen: <https://www.iupac.org/>

² <https://www.cas.org/>

³ IUPAC. The “Purple Book”, RSC Publishing, (2008).

⁴ IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **81**, 351–352 (2009).

⁵ IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **69**, 2511–2521 (1997).

⁶ IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **73**, 1511–1519 (2001).

⁷ IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **57**, 1427–1440 (1985).

⁸ IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **74**, 1921–1956 (2002).

⁹ IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **66**, 873–889 (1994).



Polimeroen Nomenklaturarako Gida Laburra

Bertsio 1.1 (2012)

3. taula Talde dibalenteen irudikapenak polimeroetan.⁸

Izena	Taldea ^a	Izena	Taldea ^a
oxi	—O—	propilimino	—N— CH ₂ —CH ₂ —CH ₃
sulfanodiilo	—S—	hidrazina-1,2-diilo	—NH— ¹ NH— ² —
sulfonilo	—SO ₂ —	ftaloilo	
diazenudiilo	—N=N—	1,4-fenileno	
imino	—NH—	ziklohexano-1,2-diilo	
karbonilo	O —C—	butano-1,4-diilo	—CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ —
oxalilo	O O —C—C—	1-bromoetano-1,2-diilo	—CH ¹ —CH ² — Br
silanodiilo	—SiH ₂ —	1-oxopropano-1,3-diilo	—C ² — ¹ CH ₂ — ³ CH ₂ —
etano-1,2-diilo	—CH ¹ ₂ —CH ² —	eten-1,2-diilo	—CH ¹ =CH ² —
metileno	—CH ₂ —	metilmetileno	—CH ¹ — CH ₃

^a Ambiguotasuna saihesteko, lotura librearekiko perpendikularak diren lerro uhinduak, balio libreak adierazteko erabiltzen direnak,¹³ oro har, irudikapen grafikoetan ekiditen dira polimero-testuinguru batean.

4.2 Kate bakoitzeko polimero organiko erregularrak¹⁰

Kate bakoitzeko polimeroa eratzun-kate etengabeak dira. Polimero espiranikoa batean, eratzun bakoitzak atomo bat du alboko eratzunekin batera. Eskainerako polimero batean, alboko eratzunek bi atomo edo gehiago dituzte amankumunean. CRU gogokoena identifikatzeko katea hautsi egiten da, eta, horrela, maila handieneko eratzuna heteroatomo gehienekin eta **balentzia** libre kopuru txikienarekin mantentzen da.

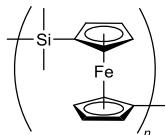
Adibide bat da. Jarraian ikus daitekeen bezala, CRU gogokoena karbono-atomoen aziklikoa da, 4 balentzia askerekin, atomo bakoitzean bat.

Ezkerreko behoko atomoa zenbakirik baxuena izateko moduan orientatuta dago. Balentzia libreko lekutzaileak atzizkiaren aurrekin idazten dira, eta erlojuaren orratzen noranzkoan apitzaten dira, behoko ezkerreko posiziokit hasiz honako hauen arabera: behoko ezkerra, goiko ezkerra; goiko eskuna, behoko eskuna. Beraz, adibide honi poli(butano-1,4:3,2-tetraloa) deitzen zaio. Egitura konplexuagoetarako, 1. irudian agertzen den lehentasun-ordena jarraitzen da.

5) Polimero Ez-organiko eta Ez-organiko-Organikoen Nomenklatura¹¹

Kate bakarreko polimero ez-organiko batzuk polimero organiko gisa izenda daitezke aurretik emandako arauak erabiliz, adibidez, $\{O-Si(CH_3)_2\}_n$ y $\{Sn(CH_3)_2\}_n$ poli[oxi(dimetilsilanodiilo)] eta poli(dimetilestannanodiilo) deitzen dira, hurrenez hurren. Polimero ez-organikoak nomenclatura ez-organikoaren arabera ere izenda daitezke, kontuan izanik elementuen lehentasuna desberdina dela nomenklatura organikoarekin alderatzu.

Hala ere, polimero ez-organiko-organiko batzuk, metalozenoaren deribatuak esaterako, hobeto izendatzeko nomenklatura organikoa erabiliz. Adibidez, ezkerreko polimeroari poli(dimetilsilanodiil)ferrozeno-1,1'-diiloa] dei dakoioke.

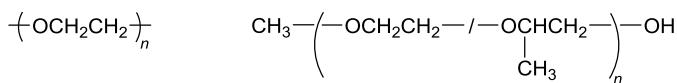


Izen tradizionalak

Nomenklatura sistemaitikoaren patroi orokorrean sartzen direnean, erabilera arrunteko polimeroen izen tradizional eta tribialak kontserbatzen dira, hala nola polietilenoa, polipropilenoa eta poliestirenoa.

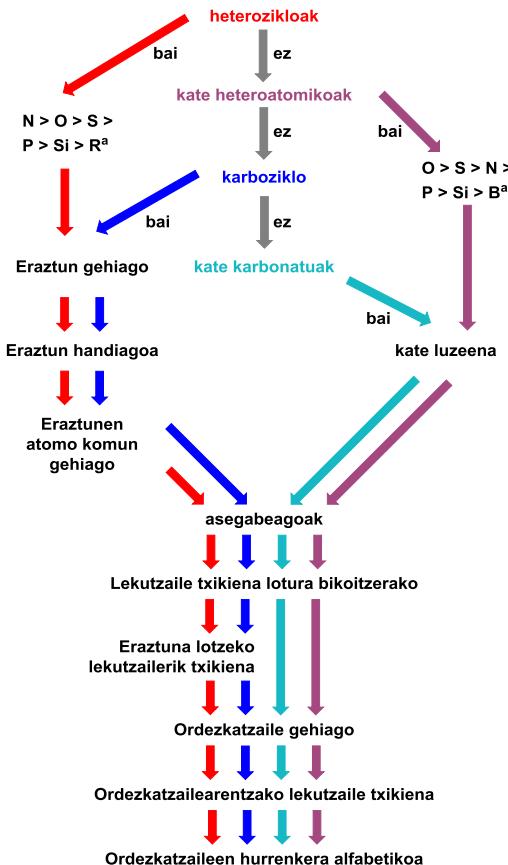
6) Irudikapen grafikoak^{12,13}

Atomoen arteko loturak alde batera utzi daitezke, baina kateen muturretarako gidoia marratzu behar dira. Ez da beharrezkoa azpiunitateen lehentasuna jarraitzea. Kate bakarreko (co)polimeroentzat, gidoia inguruko marken bidez marrazten da, adibidez, poli[oxi(etano-1,2-diilo)], behean ezkerrean dagoena. Polimero irregularren kasuan, CUak barraz bereizta daude eta gidoia inguruko marken barruan marrazten dira. Amaierako taldeak gidoi gehigarrien bidez konektatzeten dira horiek gordetzen dituzten marketatik kanpo, adibidez, α -metil- ω -hidroxi-poli[oixirano-co-(metiloxiranoa)], jarraian eskuinean agertzen dena.



7) CA Indizearen Izenak²

Laburpen Kimikoen Zerbitzuak substantzien erregistroa mantentzen du. CAS sisteman CRUari egitura errepikatzeko unitatea deitzen zaio (SRU, inglesko siglak). Alde txikiak daude lekutzaileen kokalekuan, adibidez, poli(piridina-3,5-dilutfeno-2,5-diilo) poli(3,5-piridinadiil-2,5-tiofenodiiloa) da CAS erregistroan, baina, gainerakoan, polimeroak IUPACen antzeko metodoak erabiliz izendatzetan dira.^{14,15} (Oharra: beste hizkuntzen itzulpenetan nomenklatura mota hau ez eraldatzea gomendatzen da, sistemaren jatorrizko balioa gal ez dadin).

¹⁰ IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **65**, 1561–1580 (1993).¹¹ IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **57**, 149–168 (1985).¹² IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **66**, 2469–2482 (1994).¹³ IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **80**, 277–410 (2008).¹⁴ Macromolecules, **1**, 193–198 (1968).¹⁵ Polym. Prepr. **41**(1), 6a–11a (2000).