Unió Internacional de Química Pura i Aplicada
Divisió de Polímers
Subcomitè de Terminologia de Polímers

Guia breu de la nomenclatura de polímers

Versió 1.0 (2012)

R. C. Hiorns (França),* R. J. Boucher (Regne Unit), R. Duhlev (Regne Unit), K.-H. Hellwich (Alemanya), P. Hodge (Regne Unit), A. D. Jenkins (Regne Unit), R. G. Jones (Regne Unit), J. Kahovec (República Txeca), G. Moad (Austràlia), C. K. Ober (Estats Units), D. W. Smith (Estats Units), R. F. T. Stepto (Regne Unit), J.-P. Vairon (França) i J. Vohlídal (República Txeca). *A/e: *polymer.nomenclature@iupac.org*. Organisme patrocinador: Divisió de Polímers de la IUPAC, Subcomitè de Terminologia de Polímers.

1) Introducció

L'adopció universal d'una nomenclatura consensuada no ha estat mai tan important com ara per a la descripció d'estructures químiques en publicacions i cerques en línia. La Unió Internacional de Química Pura i Aplicada (IUPAC)[1a, b] i el Chemical Abstracts Service (CAS)[2] fan recomanacions similars.
Els punts principals es mostren en aquesta guia amb referències i enllaços als documents originals. Es poden trobar més detalls al llibre porpra de la IUPAC.[3]

2) Conceptes bàsics

Els termes polímer i macromolècula no tenen el mateix significat. Un polímer és una substància formada per macromolècules. Aquestes darreres solen tenir un interval de masses molars (unitat g mol–1), les distribucions de les quals s'indiquen mitjançant la dispersitat (*Đ*). La dispersitat es defineix com la relació entre la massa molar mitjana en massa (M_m) i la massa molar mitjana en nombre (M_n), és a dir, $Đ = M_m/M_n$.[4] Els símbols de les magnituds físiques o variables es componen en lletra cursiva, però les lletres que representen unitats o etiquetes (descripcions de les magnituds) s'escriuen en lletra rodona.

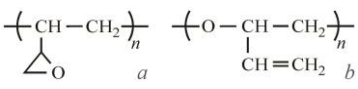
La nomenclatura dels polímers se sol aplicar a les representacions idealitzades; s'ignoren les irregularitats estructurals menors. Un polímer es pot anomenar de dues maneres. La nomenclatura basada en els productes de partida es pot utilitzar quan es pot identificar el monòmer. Alternativament, es pot utilitzar una nomenclatura més explícita basada en l'estructura pròpia del polímer. Quan no hi ha confusió, també són acceptables alguns noms tradicionals.

Sigui quin sigui el mètode que s'empri, tots els noms dels polímers tenen el prefix «poli» seguit de claus, claudàtors o parèntesis, que inclouen la resta del nom. Aquests signes d'inclusió es fan servir en l'ordre següent: {[()]}. Els localitzadors indiquen la posició dels trets estructurals, per exemple, el poli(4-cloroestirè). Si un nom basat en un monòmer és una paraula i no té localitzadors, els signes d'inclusió no són essencials, però s'han d'utilitzar quan hi pugui haver confusió, per exemple, el poli(cloroestirè) és un polímer, mentre que el policloroestirè pot ser una molècula petita polisubstituïda. Els grups terminals es descriuen utilitzant lletres α- i ω-, per exemple, α-cloro-ω-hidroxi-poliestirè.[3]

3) Nomenclatura basada en els productes de partida[5]

3.1 Homopolímers

Un homopolímer s'anomena utilitzant el nom del monòmer real (el producte de partida) o assumit del qual deriva, per exemple, poli(metacrilat de metil). Els monòmers es poden anomenar seguint les recomanacions de la IUPAC o bé utilitzant noms tradicionals ben consolidats. En cas que hi hagi ambigüitat, es poden afegir els noms dels tipus de polímers.[6] Per exemple, el nom basat en el producte de partida poli(viniloxirà) podria correspondre a qualsevol de les dues estructures (*a* i *b*) que es mostren a l'esquerra. Per a aclarir-ho, el polímer s'anomena amb el nom del tipus de polímer seguit de dos punts i el nom del monòmer, és a dir: «nom del tipus:nom del monòmer». Així, l'estructura *a* correspon al polialquilè:viniloxirà i la *b*, al polièter:viniloxirà.



a *b*

3.2 Copolímers[7]

L'estructura d'un copolímer es pot descriure utilitzant els qualificadors més adequats entre els que es mostren a la taula 1, els quals s'escriuen en lletra cursiva.

3.3 Polímers no lineals[5]

Els polímers i copolímers no lineals i els assemblatges de polímers s'anomenen utilitzant els qualificadors en cursiva de la taula 2. El qualificador és utilitzat com a prefix (P) quan s'anomena un copolímer, com en el cas de *branch* ('ramificat'), o com a connector (C), per exemple *comb* ('pinta'), entre dos noms de polímers.

Taula 1 Qualificadors per a copolímers[7]

Copolímer	*Qualificador*		*Exemple*
inespecífic	*co*	(C)	poli(estirè-*co*-isoprè)
estadístic	*stat*	(C)	poli[isoprè-*stat*-(metacrilat de metil)]
a l'atzar	*ran*	(C)	poli[(metil metacrilat)-*ran*-(acrilat de butil)]
alternat	*alt*	(C)	poli[estirè-*alt*-(anhídrid maleic)]
periòdic	*per*	(C)	poli[estirè-*per*-isoprè-*per*-(4-vinilpiridina)]
de bloc	*block*	(C)	poli(1,3-butadiè)-*block*-poli(etilè-*co*-propilè)
d'empelt[a]	*graft*	(C)	poliestirè-*graft*-poli(òxid d'etilè)

a. El primer nom és el de la cadena principal.

Taula 2 Qualificadors per a (co)polímers no lineals i assemblatges de polímers[5]

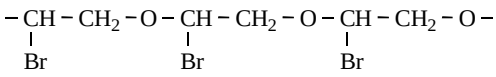
(Co)polímer	*Qualificador*		*Exemple*
mescla	*blend*	(C)	poli(3-hexiltiofè)-*blend*-poliestirè
pinta	*comb*	(C)	poliestirè-*comb*-poliisoprè
complex	*compl*	(C)	poli(2,3-dihidrotien[3,4-*b*][1,4]dioxina)-*compl*-poli(àcid vinilbenzensulfònic)[a]
cíclic	*cyclo*	(P)	*cyclo*-poliestirè-*graft*-polietilè
ramificat	*branch*	(P)	*branch*-poli[(1,4-divinilbenzè)-*stat*-estirè]
xarxa	*net*	(C o P)	*net*-poli(fenol-*co*-formaldehid)
xarxa interpenetrada	*ipn*	(C)	(*net*-poliestirè)-*ipn*-[*net*-poli(acrilat de metil)]
xarxa semiinterpenetrada	*sipn*	(C)	(*net*-poliestirè)-*sipn*-poliisoprè
estrella	*star*	(P)	*star*-poliisoprè

a. D'acord amb la nomenclatura orgànica de la IUPAC, els claudàtors inclouen localitzadors que fan referència a la numeració dels components de l'anell fusionat.

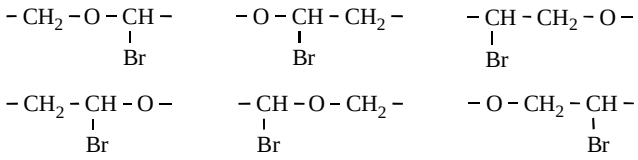
4) Nomenclatura basada en l'estructura

4.1 Polímers orgànics regulars de cadena única[8]

En comptes del nom del monòmer utilitzat en la nomenclatura basada en els productes de partida, la nomenclatura basada en l'estructura utilitza el de la unitat constitucional repetitiva (UCR, *constitutional repeating unit*, CRU) **preferida**. Aquesta unitat constitucional es pot determinar de la manera següent: I) Es dibuixa una part prou gran de la cadena del polímer per a mostrar-ne la repetició estructural, per exemple:



II) La part més petita que es repeteix és una UCR, de manera que s'identifiquen totes les possibilitats. En aquest cas:



III) El pas següent és identificar les subunitats que formen cadascuna d'aquestes estructures, és a dir, els grups divalents més grans que es poden anomenar mitjançant la nomenclatura de compostos orgànics de la IUPAC, com es veu en els exemples que es mostren a la taula 3. IV) Utilitzant el camí més curt des de la subunitat prioritària fins a la següent, es determina l'ordre correcte de les subunitats mitjançant la figura 1. V) Per acabar, es tria com a UCR preferida la que té el(s) localitzador(s) o fita(es) més baix(os) possible(s) per als substituents.

A l'exemple anterior, les subunitats oxi de les UCR són les cadenes d'heteroàtoms. A la figura 1, les subunitats oxi tenen prioritat sobre les subunitats de la cadena de carboni acíclica, les més grans de les quals són subunitats -CH_2-CH_2- amb un brom com a substituent. L'1-bromoetan-1,2-diïl té preferència respecte al 2-bromo-etan-1,2-diïl, ja que el primer té una fita inferior per al substituent bromo. Per tant, la UCR prioritària és l'oxi(1-bromoetan-1,2-diïl) i el polímer s'anomena així, poli[oxi(1-bromoetan-1,2-diïl)]. Cal tenir presents els parèntesis que enclouen la subunitat que porta el substituent.

Els polímers que no estan formats per repeticions regulars d'una única UCR s'anomenen polímers irregulars. Per a aquests, cada unitat constitucional (UC) està separada per una barra inclinada, per exemple, poli(but-1-en-1,4-diïl/1-viniletan-1,2-diïl).[9]

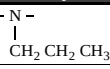
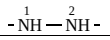
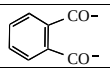
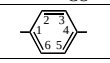
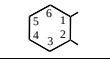
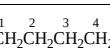
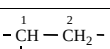
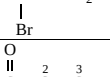
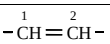
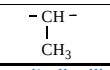
1. Disponible gratuïtament a: *a*) *https://www.degruyter.com/journal/key/pac/html*; *b*) *https://iupac.qmul.ac.uk/*.
2. *http://www.cas.org/*.
3. R. G. Jones, J. Kahovec, R. Stepto, E. S. Wilks, M. Hess, T. Kitayama i W. V. Metanomski (ed.), *Compendium of polymer terminology and nomenclature: IUPAC Recommendations 2008*, Cambridge (UK), RSC Publishing, 2008, ISBN 978-0-85404-491-7.
4. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **81**, 2 (2009), p. 351-352.
5. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **69**, 12 (1997), p. 2511-2521.
6. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **73**, 9 (2001), p. 1511-1519.
7. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **57**, 10 (1985), p. 1427-1440.
8. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **74**, 10 (2002), p. 1921-1956.
9. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **66**, 4 (1994), p. 873-889.

Unió Internacional de Química Pura i Aplicada
Divisió de Polímers
Subcomitè de Terminologia de Polímers

Guia breu de la nomenclatura de polímers

Versió 1.0 (2012)

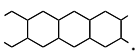
Taula 3. Representacions de grups divalents en polímers[8]

Nom	*Grup*[a]	*Nom*	*Grup*[a]
oxi	–O–	propilimino	
sulfandiïl	–S–	hydrazin-1,2-diïl	
sulfonil	$-SO_2-$	ftaloïl	
diazendiïl	–N=N–	1,4-fenilè	
imino	–NH–	ciclohexan-1,2-diïl	
carbonil		butan-1,4-diïl	
oxalil		1-bromoetan-1,2-diïl	
silandiïl	$-SiH_2-$	1-oxopropan-1,3-diïl	
etan-1,2-diïl	$-CH_2-CH_2-$	eten-1,2-diïl	
metilè	$-CH_2-$	metilmetilè	

a. Per a evitar ambigüitats, les línies ondulades traçades perpendicularment a l'enllaç lliure, que s'utilitzen convencionalment per a indicar valències lliures,[13] generalment s'ometen en les representacions gràfiques en un context polimèric.

4.2 Polímers orgànics regulars de doble cadena[10]

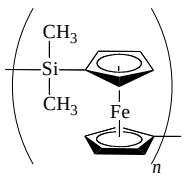
Els polímers de doble cadena consisteixen en cadenes d'anells ininterrompudes. En un polímer espiro, cada anell té un àtom en comú amb els anells adjacents. En un polímer d'escala, els anells adjacents tenen dos àtoms o més en comú. Per a identificar la UCR preferida, es trenca la cadena de manera que es conserva l'anell prioritari amb el nombre màxim d'heteroàtoms i el nombre mínim de valències lliures.

Un exemple és:  . La UCR preferida és una subunitat acíclica de quatre àtoms de carboni amb quatre valències lliures, una a cada àtom, com la

que es mostra a la figura de l'esquerra. Està orientada de manera que l'àtom inferior esquerre tingui el número més baix. Els localitzadors de valència lliure s'escriuen abans del sufix i se citen en sentit horari des de la posició inferior esquerra com: inferior-esquerra, superior-esquerra:superior-dreta, inferior-dreta. D'aquesta manera, el polímer de l'exemple s'anomena poli(butan-1,4:3,2-tetraïl). Per a estructures més complexes, l'ordre de prioritat torna a seguir el que mostra la figura 1.

5) Nomenclatura de polímers inorgànics i inorgànics-orgànics[11]

Alguns polímers inorgànics regulars de cadena única es poden anomenar com a polímers orgànics seguint les regles anteriors, per exemple, $\{O\text{-}Si(CH_3)_2\}_n$ i $\{Sn(CH_3)_2\}_n$ s'anomenen poli[oxi(dimetilsilandiïl)] i poli(dimetilestannandiïl), respectivament. Els polímers inorgànics també es poden anomenar d'acord amb la nomenclatura inorgànica, però cal tenir en compte que la prioritat dels elements és diferent en la nomenclatura orgànica. Tanmateix, certs polímers inorgànics-orgànics, per exemple, aquells que contenen derivats del metal·locè, s'anomenen preferiblement mitjançant la nomenclatura orgànica, per exemple, el polímer que es mostra a l'esquerra es pot anomenar poli[(dimetilsilandiïl)ferrocen-1,1′-diïl].



10. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **65**, 7 (1993), p. 1561-1580.
11. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **57**, 1 (1985), p. 149-168.
12. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **66**, 12 (1994), p. 2469-2482.
13. IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **80**, 2 (2008), p. 277-410.
14. *Macromolecules*, **1**, 3 (1968), p. 193-198.
15. *Polym. Prepr.*, **41**, 1 (2000), p. 6a-11a.

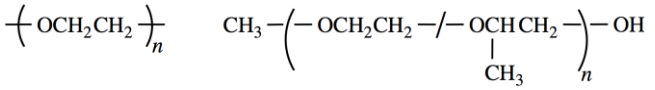
Per a citar la versió original en anglès, feu servir, si us plau: IUPAC, *Pure Appl. Chem.*, **84**, 10 (2012), p. 2167-2169.
Per a citar aquesta guia en català, feu servir, si us plau: IUPAC, *Guia breu de la nomenclatura de polímers*, 2022, <https://doi.org/10.2436/10.2003.02.1>. Es permet la publicació d'aquest document per qualsevol mitjà, sempre que es faci íntegrament i sense canvis. *Copyright* © IUPAC, 2012. I, de l'edició en català, Societat Catalana de Química (IEC), 2022. La traducció ha estat a cura d'Àngels Serra Albet.

6) Noms tradicionals

Quan s'adapten al patró general de la nomenclatura sistemàtica, es conserven alguns noms tradicionals i trivials per a polímers d'ús comú, com ara polietilè, polipropilè i poliestirè.

7) Representacions gràfiques[12,13]

Els enllaços entre àtoms es poden ometre, però cal dibuixar guions llargs als extrems de la cadena. No cal seguir la prioritat de les subunitats. Per als (co)polímers de cadena única, es dibuixa un guió llarg que travessa els parèntesis o claudàtors, per exemple, el poli[oxi(etan-1,2-diïl)] que es mostra a sota a l'esquerra. Per als polímers irregulars, les UC estan separades per barres inclinades i els guions llargs es dibuixen dins els parèntesis. Els grups terminals es connecten mitjançant guions addicionals fora dels parèntesis, per exemple, α-metil-ω-hidroxi-poli[oxiran-*co*-(metiloxirà)], tal com es mostra a sota a la dreta.



8) Noms de l'índex CA[2]

El CAS (Chemical Abstracts Service) s'encarrega de mantenir un registre de substàncies. En el sistema CAS, la UCR s'anomena unitat estructural repetitiva (UER, *structural repeating unit*, SRU). Hi ha lleugeres diferències en la col·locació dels localitzadors, per exemple, el poli(piridin-3,5-diïltiofen-2,5-diïl) és el poli(3,5-piridindiïl-2,5-tiofendiïl) en el registre CAS, però, d'altra banda, els polímers s'anomenen utilitzant mètodes similars als de la IUPAC.[14,15]

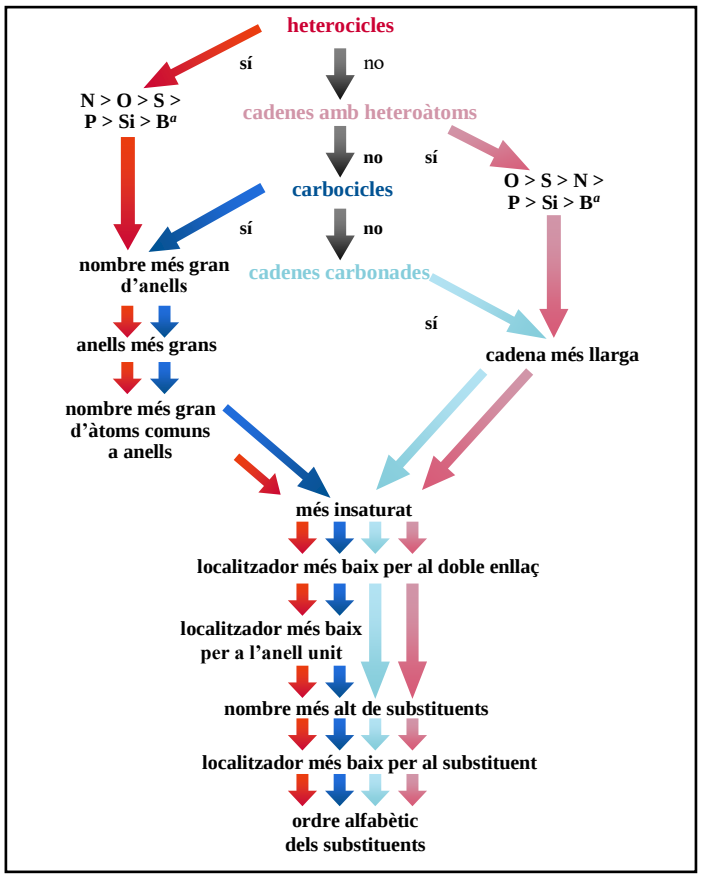


Figura 1. L'ordre de prioritat de la subunitat. La subunitat prioritària es troba al centre de la part superior. Les subunitats menys prioritàries es troben seguint les fletxes. El tipus de subunitat, ja sigui un **heterocicle**, una **cadena d'heteroàtoms**, un **carbocicle** o una **cadena carbonada**, determina el color de la fletxa que s'ha de seguir.
a. Es poden col·locar altres heteroàtoms en aquests ordres, tal com indiquen les seves posicions a la taula periòdica.[8]