



Guía Breve para a Nomenclatura de Polímeros

Versión 1.1 (2012)

R. C. Hiorns (Francia),* R. J. Boucher (RU), R. Duhlev (RU), K.-H. Hellwich (Alemaña), P. Hodge (RU), A. D. Jenkins[‡] (RU), R. G. Jones[‡] (RU), J. Kahovec (República Checa), G. Moad (Australia), C. K. Ober (EE UU), D. W. Smith (EE UU), R. F. T. Stepto (RU), J.-P. Vairon (Francia), e J. Vohlídal (República Checa).

*C/e: polymer.nomenclature@iupac.org; Organismo patrocinador: División de Polímeros da IUPAC, Subcomité sobre Terminoloxía de Polímeros. [‡] Finado

Traducido e adaptado por: Manuel R. Bermejo (España), Ana M. González Noya (España) e José Manuel Seco (España). C/e: ana.gonzalez.noya@usc.es

1) Introducción

A adopción universal dunha nomenclatura consensuada nunca ten sido máis importante para a descrición de estruturas químicas en publicacións e busca en liña. A Unión Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC, nas súas siglas inglesas)^{1a,b} e o Servizo de Resumos Químicos (CAS, nas súas siglas inglesas)² están a facer recomendacións similares. Os puntos principais amósanse aquí con hipervínculos aos documentos orixinais. Pódense atopar máis detalles no Libro Púrpura (Purple Book) da IUPAC.³

2) Conceptos Básicos

Os termos **polímero** e **macromolécula** non significan o mesmo. Un polímero é unha sustancia composta de macromoléculas. Estas últimas soen ter un intervalo de masas molares (unidade g mol^{-1}), cuxas distribucións se indican pola **dispersidade** (D). Esta defínese como a relación entre a masa molar media en masa (M_w) e a masa molar media en número (M_n) é dicir $D = M_w/M_n$.⁴ Os símbolos para cantidades físicas ou variables están en *cursiva*, pero os que representan unidades ou etiquetas, están en letra romana.

Xeralmente, a nomenclatura de polímeros aplícase a representacións idealizadas; é dicir, ignóranse as pequenas irregularidades estruturais. Un polímero pódese nomear de dúas formas. A nomenclatura **baseada na fonte** pódese utilizar cando se pode identificar o **monómero**. Alternativamente, pódese usar unha nomenclatura **baseada nunha estrutura** máis explícita cando se coñece a estrutura do polímero. Onde non hai confusión, tamén se **aceptan** algúns nomes tradicionais.

Calquera que sexa o método que se utilice, todos os nomes dos polímeros teñen o prefixo poli, seguido de marcas de agrupación arredor do resto do nome. As marcas utilízanse na orde: { [()] }. Os **localizadores** indican a posición das características estruturais, p. ex., poli(4-cloroestireno). Se un nome baseado na fonte é unha palabra e non ten **localizadores**, entón as parénteses que os pechan non son esenciais, pero débense usar cando poida haber confusión, p. ex., poli(cloroestireno) é un polímero mentres que policloroestireno podería ser unha **molécula** pequena multisubstituída. Os **grupos finais** descríbense con α - e ω -, p. ex., α -cloro- ω -hidroxipoliestireno.³

3) Nomenclatura Baseada na Fonte⁵

3.1 Homopolímeros

Un homopolímero noméase utilizando o nome do monómero real ou suposto (a "fonte") do que se deriva, p. ex., poli(metacrilato de metilo). Os monómeros pódense nomear utilizando as **recomendacións da IUPAC**, ou nomes tradicionais ben establecidos. Se xurdira algunha ambigüidade, pódense agregar **nomes de clases**.⁶ Por exemplo, o nome baseado na fonte poli(viniloxirano) podería coincidir con calquera das estruturas que se amosan a continuación. Para máis claridade, o polímero noméase utilizando o nome da clase do polímero seguido de dous puntos e o nome do monómero, é dicir, nome de clase:nome do monómero. Así, as estruturas á esquerda e á dereita son polialqueno:viniloxirano e poliéter:viniloxirano, respectivamente.

3.2 Copolímeros⁷

A estrutura dun **copolímero** pódese describir utilizando o conector máis axeitado dos que se amosan na Táboa 1. Estes escríbense en cursiva.

3.3 Polímeros non lineais⁵

Os polímeros e copolímeros non lineais e os conxuntos de polímeros noméanse empregando os descriciores en cursiva da Táboa 2. O cualificador, tal como *branch* (*ramificado*), utilízase como un prefixo (P) ao nomear un (co)polímero, ou como conectivo (C), p. ex., *comb*, entre dous nomes de polímeros.

Táboa 1. Descriciores para copolímeros.⁷

Copolímero	Descricior	Exemplo
sen especificar	<i>co</i>	(C) poli(estireno- <i>co</i> -isopreno)
estadístico	<i>stat</i>	(C) poli[isopreno- <i>stat</i> -(metacrilato de metilo)]
aleatorio	<i>ran</i>	(C) poli[(metacrilato de metilo)- <i>ran</i> -(acrilato de butilo)]
alternante	<i>alt</i>	(C) poli[estireno- <i>alt</i> -(anhídrido maleico)]
periódico	<i>per</i>	(C) poli[estireno- <i>per</i> -isopreno- <i>per</i> -(4-vinilpiridina)]
bloque	<i>block</i>	(C) poli(buta-1,3-dieno)- <i>block</i> -poli(eteno- <i>co</i> -propeno)
enxerto ^a	<i>graft</i>	(C) poli(estireno- <i>graft</i> -poli(óxido de etileno))

^a O primeiro nome corresponde ao da cadea principal.

Táboa 2. Cualificadores para co(polímeros) non lineais e conxuntos de polímeros.⁵

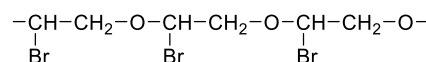
(Co)polímero	Cualificador	Exemplo
mestura	<i>blend</i>	(C) poli(3-hexiltiofeno)- <i>blend</i> -poliestireno
peite	<i>comb</i>	(C) poli(estireno- <i>comb</i> -poliisopreno)
complejo	<i>compl</i>	(C) poli(2,3-dihidrotieno[3,4- <i>b</i>][1,4]dioxina)- <i>compl</i> -poli(ácido vinilbencenosulfónico) ^a
cíclico	<i>cyclo</i>	(P) <i>cyclo</i> -poliestireno- <i>graft</i> -polietileno
ramificado	<i>branch</i>	(P) <i>branch</i> -poli[(1,4-divinilbenceno)- <i>stat</i> -estireno]
reticulado	<i>net</i>	(C ou P) <i>net</i> -poli(fenol- <i>co</i> -formaldehído)
rede interpenetrada	<i>ipn</i>	(C) (<i>net</i> -poliestireno)- <i>ipn</i> -[<i>net</i> -poli(acrilato de metilo)]
rede semi-interpenetrada	<i>sipn</i>	(C) (<i>net</i> -poliestireno)- <i>sipn</i> -poliisopreno
estrela	<i>star</i>	(P) <i>star</i> -poliisopreno

^a Dacordo coa nomenclatura orgánica da IUPAC, os corchetes abranguen os localizadores que se refiren á numeración dos compoñentes do anel fusionado.

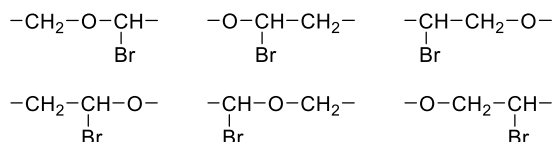
4) Nomenclatura Baseada na Estrutura

4.1 Polímeros orgánicos regulares de cadea sinxela⁸

No lugar do nome do monómero utilizado na nomenclatura baseada na fonte, a nomenclatura baseada na estrutura utiliza a **unidade de repetición constituínte preferida** (CRU, nas súas siglas inglesas). Pódese determinar da seguinte maneira: (i) débuxase unha parte suficientemente grande da cadea do polímero para mostrar a repetición estrutural, p. ex.,



(ii) a porción repetida máis pequena é unha CRU, polo que se identifican todas esas posibilidades. Neste caso:



(iii) o seguinte paso é identificar as **subunidades** que compoñen cada unha destas estruturas, é dicir, os **grupos** divalentes máis grandes que se poden nomear usando a nomenclatura da IUPAC de **compuestos orgánicos** como os exemplos que se enumeran na Táboa 3; (iv) utilizando o camiño máis curto desde a subunidade de maior **prioridade** á seguinte, a orde correcta das subunidades determínase utilizando a Figura 1; (v) a CRU preferida elixese co ou cos localizadores máis baixos posibles para os **substituíntes**.

No exemplo anterior, as subunidades oxi nas CRU son cadeas de heteroátomos. Na Figura 1, as subunidades oxi son de maior prioridade que as subunidades da cadea de carbono acíclico, delas as maiores son as subunidades $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ substituídas con bromo. O 1-bromoetano-1,2-diilo elixese con preferencia á 2-bromoetano-1,2-diilo xa que o primeiro ten un localizador menor para o substituínte bromo. Polo tanto, a CRU preferida é oxi(1-bromoetano-1,2-diilo) e o polímero denomínase así: poli[oxi(1-bromoetano-1,2-diilo)]. Por favor, ter en conta as parénteses adxuntas arredor da subunidade que leva o substituínte.

Os polímeros que non están formados por repeticións **regulares** dunha soa CRU denomínanse **polímeros irregulares**. Para estes, cada **unidade constituínte** (CU, nas súas siglas inglesas) está separada por unha barra, p. ex., poli(but-1-eno-1,4-diilo/1-viniletano-1,2-diilo).⁹

¹ Dispoñible gratuitamente en: (a) <http://www.iupac.org/publications/pac/>; (b) <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>

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).



Guía Breve para a Nomenclatura de Polímeros

Versión 1.1 (2012)

Táboa 3. Representacións de grupos divalentes en polímeros.⁸

Nome	Grupo ^a	Nome	Grupo ^a
oxi	—O—	propilimino	$\begin{array}{c} \text{—N—} \\ \\ \text{CH}_2\text{—CH}_2\text{—CH}_3 \end{array}$
sulfanodiilo	—S—	hidracina-1,2-diilo	$\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{—NH—NH—} \end{array}$
sulfonylo	—SO ₂ —	ftaloilo	
diazanodiilo	—N=N—	1,4-fenileno	
imino	—NH—	ciclohexano-1,2-diilo	
carbonilo	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{—C—} \end{array}$	butano-1,4-diilo	$\text{—CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{—}$
oxalilo	$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{O} \\ \quad \\ \text{—C—C—} \end{array}$	1-bromoetano-1,2-diilo	$\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{—CH—CH}_2\text{—} \\ \\ \text{Br} \end{array}$
silanodiilo	—SiH ₂ —	1-oxopropano-1,3-diilo	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ 1 \quad 2 \quad 3 \\ \text{—C—CH}_2\text{—CH}_2\text{—} \end{array}$
etano-1,2-diilo	$\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{—CH}_2\text{—CH}_2\text{—} \end{array}$	eteno-1,2-diilo	$\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{—CH=CH—} \end{array}$
metileno	—CH ₂ —	metilmileno	$\begin{array}{c} \text{—CH—} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$

^a Para evitar a ambigüidade, as liñas onduladas debuxadas perpendiculares ao enlace libre, que se usan convencionalmente para indicar valencias libres,¹³ xeralmente omítese das representacións gráficas nun contexto de polímero.

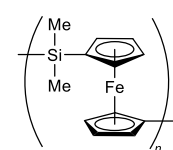
4.2 Polímeros orgánicos regulares de dobre cadea¹⁰

Os **polímeros de dobre cadea** consisten en cadeas ininterrompidas de aneis. Nun **polímero espiránico**, cada anel ten un **átomo** en común cos aneis adxacentes. Nun **polímero de escaleira**, os aneis adxacentes teñen dous ou máis átomos en común. Para identificar a CRU preferida, a cadea ráchase de modo que o anel de maior prioridade conserva o máximo número de heteroátomos e o menor número de valencias libres.

Un exemplo é . A CRU preferida é unha subunidade acíclica de átomos de **carbono** con 4 valencias libres, unha en cada átomo, como se amosa a continuación. Está orientado de maneira que o átomo inferior esquerdo teña o número máis baixo. Os localizadores de valencia libre escríbense antes do sufixo, e cítanse no sentido das agullas do reloxo desde a posición inferior esquerda como: inferior esquerda, superior esquerda, superior dereita, inferior dereita. Polo tanto, este exemplo denomínase poli(butano-1,4:3,2-tetrailo). Para estruturas máis complexas, a orde de prioridade segue novamente a Figura 1.

5) Nomenclatura de Polímeros Inorgánicos e Inorgánicos-Orgánicos¹¹

Alguns **polímeros inorgánicos** dunha soa cadea pódense nomear como polímeros orgánicos usando as regras dadas anteriormente, p. ex., $\{\text{O—Si}(\text{CH}_3)_2\}_n$ e $\{\text{Sn}(\text{CH}_3)_2\}_n$ denomínanse poli[oxi(dimetilsilanodiilo)] e poli(dimetilstannanodiilo), respectivamente. Os **polímeros inorgánicos** tamén se poden nomear de acordo coa **nomenclatura inorgánica**, pero débese ter en conta que a prioridade dos **elementos** é diferente á da **nomenclatura orgánica**. Porén, certos **polímeros inorgánicos-orgánicos**, por exemplo, os que conteñen derivados de **metaloceno**, actualmente noméanse mellor usando nomenclatura orgánica, por exemplo, o polímero da esquerda pódese denominar



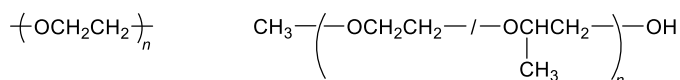
poli(dimetilsilanodiil)ferroceno-1,1'-diilo].

6) Nomes Tradicionais

Cando encaixan no patrón xeral da nomenclatura **sistemática**, **consérvanse** algúns nomes tradicionais e triviais dos polímeros de uso común, como polietileno, polipropileno e poliestireno.

7) Representacións Gráficas^{12,13}

Os **enlaces** entre átomos pódense omitir, pero débense debuxar os guiños para os extremos das cadeas. Non cómpre seguir a prioridade das subunidades. Para os (co)polímeros dunha soa cadea, débúxase un guiño a través das marcas circundantes, p. ex., poli[oxi(etano-1,2-diilo)] que se amosa debaixo á esquerda. No caso de polímeros irregulares, as CU están separadas por barras e os guiños débúxanse dentro das marcas circundantes. Os grupos terminais conéctanse mediante guiños adicionais fóra das marcas que os pechan, por exemplo, α -metil- ω -hidroxipoli[oxirano-*co*-(metiloxirano)], que se amosa a continuación á dereita.



8) Nomes do Índice CA²

O Servizo de Resumos Químicos mantén un rexistro de substancias. No sistema CAS, a CRU denomínase unidade de repetición estrutural (SRU, nas súas siglas inglesas). Existen pequenas diferenzas na ubicación dos localizadores, p. ex., poli(piridina-3,5-diiltiofeno-2,5-diilo) é poli(3,5-piridinadiil-2,5-tiofenediilo) no **rexistro CAS**, pero polo demais os polímeros noméanse utilizando **métodos similares** aos da IUPAC.^{14,15} (NOTA. Recoméndase non alterar a nomenclatura do rexistro CAS con traducións a outros idiomas).

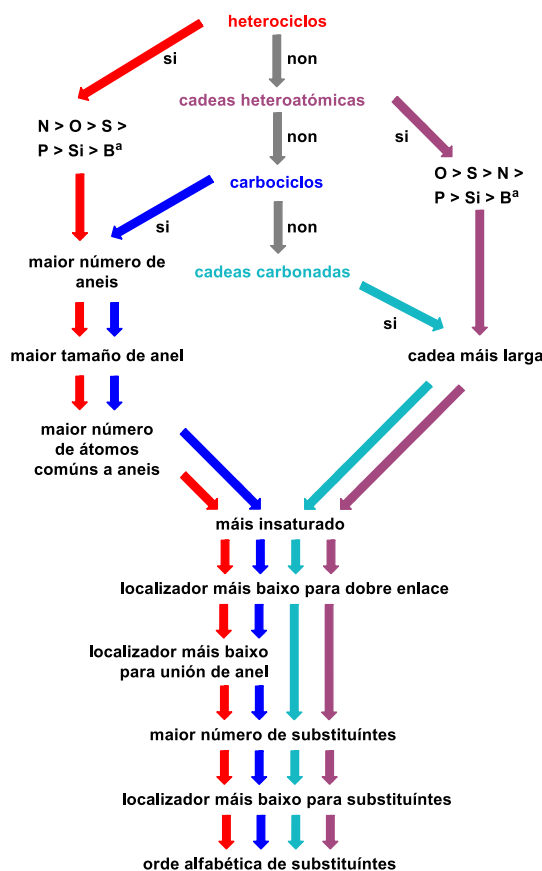


Figura 1. Orde de prioridade da subunidade. A subunidade prioritaria está no centro superior. As subunidades de menor prioridade atópanse seguindo as frechas. O tipo de subunidade, xa sexa un **heterociclo**, unha **cadea heteroatómica**, un **carbociclo**, ou unha **cadea carbonada**, determina a cor da frecha que segue. ^a Pódense colocar outros heteroátomos nestas ordes como o indican as súas posicións na táboa periódica.⁸

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).

