Guía Breve para la Nomenclatura de Polímeros

Versión 1.1 (2012)



R. C. Hiorns (Francia), * R. J. Boucher (RU), R. Duhlev (RU), K.-H. Hellwich (Alemania), 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), y J. Vohlídal (República Checa). *C/e: polymer.nomenclature@iupac.org; Organismo patrocinador: División de Polímeros de la IUPAC, Subcomité sobre Terminología de Polímeros. Fallecido Traducido y adaptado por: Efraím Reyes (España), Pascual Román Polo (España) y Leire Ruíz Rubio (España). C/e: leire.ruiz@ehu.eus

1) Introducción

La adopción universal de una nomenclatura consensuada nunca ha sido más importante para la descripción de estructuras químicas en publicaciones y búsquedas en línea. La Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, en sus siglas inglesas)¹ y el Servicio de Resúmenes Químicos (CAS, en sus siglas inglesas)² hacen recomendaciones similares. Los puntos principales se muestran aquí con hipervínculos a los documentos originales. Se pueden encontrar más detalles en el Libro Púrpura (Purple Book) de la IUPAC.3

2) Conceptos Básicos

Los términos polímero y macromolécula no significan lo mismo. Un polímero es una sustancia compuesta de macromoléculas. Estas últimas suelen tener un rango de masas molares (unidad g mol⁻¹), cuyas distribuciones se indican por la dispersidad (D). Esta se define como la relación entre la masa molar promedio en masa (M_m) y la masa molar promedio en número (M_n) es decir. $D = M_m/M_n$. 4 Los símbolos para cantidades físicas o variables están en cursiva, pero los que representan unidades o etiquetas, están en letra redonda.

Generalmente, la nomenclatura de polímeros se aplica a representaciones idealizadas; es decir, se ignoran las pequeñas irregularidades estructurales. Un polímero se puede nombrar de dos formas. La nomenclatura basada en la fuente se puede utilizar cuando se identifica el monómero. Alternativamente, se puede usar una nomenclatura basada en una estructura más explícita cuando se conoce la estructura del polímero. Donde no hay confusión, también se aceptan algunos nombres tradicionales.

Cualquiera que sea el método que se utilice, todos los nombres de los polímeros tienen el prefijo poli, seguido de marcas de agrupación alrededor del resto del nombre. Las marcas se utilizan en el orden: {[()]}. Los localizadores indican la posición de las características estructurales, p. ej., poli(4-cloroestireno). Si un nombre basado en la fuente es una palabra y no tiene localizadores, entonces los paréntesis que los encierran no son esenciales, pero deben usarse cuando pueda haber confusión, p. ej., poli(cloroestireno) es un polímero mientras que policloroestireno podría ser una molécula pequeña multisustituida. Los grupos finales se describen con α - y ω -, p. ej., α-cloro-ω-hidroxi-poliestireno.3

3) Nomenclatura Basada en la Fuente⁵

3.1 Homopolímeros

Un homopolímero se nombra utilizando el nombre del monómero real o supuesto (la "fuente") del que se deriva, p. ej., poli(metil metacrilato). Los monómeros se pueden nombrar utilizando las recomendaciones de la IUPAC, o nombres tradicionales bien

continuación. Para más claridad, el polímero se nombra utilizando el nombre de la clase del polímero seguido de dos puntos y el nombre del monómero, es decir, nombre de clase:nombre del monómero. Así, las estructuras a izquierda y a derecha son polialqueno:viniloxirano y poliéter:viniloxirano, respectivamente.

3.2 Copolímeros⁷

La estructura de un copolímero se puede describir utilizando el conector más apropiado de los que se muestran en la Tabla 1. Estos se escriben en cursiva.

3.3 Polímeros no lineales⁵

Los polímeros y copolímeros no lineales y los conjuntos de polímeros se nombran empleando los descriptores en cursiva de la Tabla 2. El calificador, tal como branch (ramificado), se utiliza como un prefijo (P) al nombrar un (co)polímero, o como conectivo (C), p. ej., comb, entre dos nombres de polímeros.

Tabla 1. Descriptores para copolímeros.⁷

Copolímero	Descrip	otor	Ejemplo
sin especificar	co	(C)	poli(estireno-co-isopreno)
estadístico	stat	(C)	poli[isopreno-stat-(metacrilato de metilo)]
aleatorio	ran	(C)	poli[(metacrilato de metilo)-ran-(acrilato de butilo)]
alternante	alt	(C)	poli[estireno-alt-(anhídrido maleico]
periódico	per	(C)	poli[estireno-per-isopreno-per-(4-vinilpiridina)]
bloque	block	(C)	poli(buta-1,3-dieno)-block-poli(eteno-co-propeno)
inierto ^a	graft	(C)	noliestireno-graft-noli(óxido de etileno)

^a El primer nombre corresponde al de la cadena principal.

Table 2. Calificadores para co(polímeros) no lineales y conjuntos de polímeros.⁵

(Co)polímero	Calificador	Ejemp	plo
mezcla	blend	poli(3- polies	-hexiltiofeno)-blend- tireno
peine	comb) polies	tireno-comb-poliisopreno
complejo	compl	b)[1,4]	,3-dihidrotieno[3,4-]dioxina)- <i>compl</i> -poli(ácido encenosulfónico) ^a
cíclico	cyclo	P) cyclo-	poliestireno-graft-polietileno
ramificado	branch		n-poli[(1,4-divinilbenceno)- stireno]
reticulado	net (C c	P) net-po	li(fenol-co-formaldehído)
red interpenetrada	ipn		oliestireno)-ipn-[net- crilato de metilo)]
red semi- interpenetrada	sipn	C) (net-po	oliestireno)-sipn-poliisopreno
estrella	star	P) star-p	oliisopreno

De acuerdo con la nomenclatura orgánica de la IUPAC, los corchetes encierran localizadores que se refieren a la numeración de los componentes del anillo fusionado.

4) Nomenclatura Basada en la Estructura

4.1 Polímeros orgánicos regulares de cadena simple⁸

En lugar del nombre del monómero utilizado en la nomenclatura basada en la fuente, la nomenclatura basada en la estructura utiliza la de la unidad de repetición constituyente preferida (CRU, en sus siglas inglesas). Se puede determinar de la siguiente manera: (i) se dibuja una parte suficientemente grande de la cadena del polímero para mostrar la repetición estructural, p. ei..

(ii) la porción repetida más pequeña es una CRU, por lo que se identifican todas esas posibilidades. En este caso:

(iii) el siguiente paso es identificar las subunidades que componen cada una de estas estructuras, es decir, los grupos divalentes más grandes que se pueden nombrar usando la nomenclatura de la IUPAC de compuestos orgánicos como los ejemplos que se enumeran en la Tabla 3; (iv) utilizando el camino más corto desde la subunidad de mayor prioridad a la siguiente, el orden correcto de las subunidades se determina utilizando la Figura 1; (v) la CRU preferida se elige con el o los localizadores más bajos posibles para los sustituventes.

En el ejemplo anterior, las subunidades oxi en las CRU son cadenas de heteroátomos. De la Figura 1, las subunidades oxi son de mayor prioridad que las subunidades de la cadena de carbono acíclico, de ellas las mayores son las subunidades -CH2-CH2sustituidas con bromo. El 1-bromoetano-1,2-diilo se elige con preferencia al 2bromoetano-1,2-diilo ya que el primero tiene un localizador menor para el sustituyente bromo. Por tanto, la CRU preferida es oxi(1-bromoetano-1,2-diilo) y el polímero se denomina así: poli[oxi(1-bromoetano-1,2-diilo)]. Por favor, tenga en cuenta los paréntesis adjuntos alrededor de la subunidad que lleva el sustituyente.

Los polímeros que no están formados por repeticiones regulares de una sola CRU se denominan polímeros irregulares. Para estos, cada unidad constituyente (CU, en sus siglas inglesas) está separada por una barra, p. ej., poli(but-1-eno-1,4-diilo/1viniletano-1,2-diilo).9

- Disponible gratuitamente en: https://www.iupac.org/
- IUPAC. Pure Appl. Chem. **69**, 2511–2521 (1997).

- IUPAC. Pure Appl. Chem. 73, 1511-1519 (2001).
- IUPAC. Pure Appl. Chem. 57, 1427-1440 (1985).
- IUPAC. Pure Appl. Chem. 74, 1921-1956 (2002). IUPAC. Pure Appl. Chem. 66, 873–889 (1994).

División de Polímeros Subcomité sobre Terminología de Polímeros

Guía Breve para la Nomenclatura de Polímeros

Versión 1.1 (2012)

Tabla 3. Representaciones de grupos divalentes en polímeros.8

Nombre	Grupo ^a	Nombre	Grupo ^a
oxi	-0-	propilimino	-N- CH ₂ -CH ₂ -CH ₃
sulfanodiilo	-s-	hidrazina-1,2-diilo	NHNH
sulfonilo	—so ₂ —	ftaloilo	co-
diazenodiilo	—N=N—	1,4-fenileno	<u> </u>
imino	—NH—	ciclohexano-1,2-diilo	5 1 4 3
carbonilo	0=U 	butano-1,4-diiilo	-CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -
oxalilo	-C-C- 0 0	1-bromoetano-1,2-diilo	-CH-CH ₂
silanodiilo	—SiH ₂ —	1-oxopropano-1,3-diilo	O = C - C + C + C + C + C + C + C + C + C +
etano-1,2-diilo	-CH ₂ -CH ₂ -	eteno-1,2-diilo	_CH=CH-
metileno	—СН ₂ —	metilmetileno	—СН— СН ₃

^a Para evitar la ambigüedad, las líneas onduladas dibujadas perpendiculares al enlace libre, que se usan convencionalmente para indicar valencias libres, ¹³ generalmente se omiten de las representaciones gráficas en un contexto de polímero.

4.2 Polímeros orgánicos regulares de doble cadena¹⁰

Los polímeros de doble cadena consisten en cadenas ininterrumpidas de anillos. En un polímero espiránico, cada anillo tiene un átomo en común con los anillos adyacentes. En un polímero de escalera, los anillos adyacentes tienen dos o más átomos en común. Para identificar la CRU preferida, la cadena se rompe de modo que el anillo de mayor prioridad conserva el máximo número de heteroátomos y el menor número de valencias libres.

Un ejemplo es

La CRU preferida es una subunidad acíclica de átomos de carbono con 4 valencias libres, una en cada átomo, como se muestra a continuación. Está orientado de modo que el átomo inferior izquierdo tenga el número más bajo. Los localizadores de valencia libre se escriben antes del sufijo, y se citan en el sentido de las agujas del reloj desde la posición inferior izquierda como: inferior izquierda, superior

izquierda:superior derecha, inferior derecha. Por tanto, este ejemplo se denomina poli(butano-1,4:3,2-tetrailo). Para estructuras más complejas, el orden de prioridad sigue nuevamente la Figura 1.

5) Nomenclatura de Polímeros Inorgánicos e Inorgánicos-Orgánicos¹¹

Algunos polímeros inorgánicos de una sola cadena se pueden nombrar como polímeros orgánicos usando las reglas dadas anteriormente, p. ej., $\{O-Si(CH_3)_2\}_n$ y $\{Sn(CH_3)_2\}_n$ se denominan poli[Oxi(dimetilsilanodiilo)] y poli[Oxi(dimetilsilanodiilo)] y



se pueden nombrar de acuerdo con la nomenclatura inorgánica, pero debe tenerse en cuenta que la prioridad de los elementos es diferente a la de la nomenclatura orgánica. Sin embargo, ciertos polímeros inorgánicos-orgánicos, por ejemplo, los que contienen derivados de metaloceno, actualmente se nombran mejor usando nomenclatura orgánica, por ejemplo, el polímero de la izquierda puede

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

- 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).

Para citar, por favor, utilice: IUPAC. *Pure Appl. Chem.* **84**, 2167–2169 (2012). La publicación de este documento por cualquier medio está permitido a condición de que sea completo y sin alterar. Copyright © IUPAC 2012.



Cuando encajan en el patrón general de la nomenclatura sistemática, se conservan algunos nombres tradicionales y triviales de los polímeros de uso común, como polietileno, polipropileno y poliestireno.

7) Representaciones Gráficas 12,13

Los enlaces entre átomos se pueden omitir, pero se deben dibujar los guiones para los extremos de las cadenas. No es necesario seguir la prioridad de las subunidades. Para los (co)polímeros de una sola cadena, se dibuja un guion a través de las marcas circundantes, p. ej., poli[oxi(etano-1,2-diilo)] que se muestra abajo a la izquierda. En el caso de polímeros irregulares, las CU están separadas por barras y los guiones se dibujan dentro de las marcas circundantes. Los grupos terminales se conectan mediante guiones adicionales fuera de las marcas que los encierran, por ejemplo, α -metil- α -hidroxi-poli[oxirano-co-(metiloxirano)], que se muestra a continuación a la derecha

$$-(OCH_2CH_2-)_n$$
 $CH_3-(OCH_2CH_2-)-OCHCH_2-)_n$ $CH_3-(OCH_2CH_2-)-OCHCH_2-)_n$

8) Nombres del Índice CA²

El Servicio de Resúmenes Químicos mantiene un registro de sustancias. En el sistema CAS, la CRU se denomina unidad de repetición estructural (SRU, en sus siglas inglesas). Existen pequeñas diferencias en la ubicación de los localizadores, p. ej., poli(piridina-3,5-diiltiofeno-2,5-diilo) es poli(3,5-piridinadiil-2,5-tiofenodiilo) en el registro CAS, pero por lo demás los polímeros se nombran utilizando métodos similares a los de la IUPAC. ^{14,15} (NOTA. Se recomienda no alterar esta nomenclatura con traducciones a otros idiomas pues se pierde el valor original del sistema).

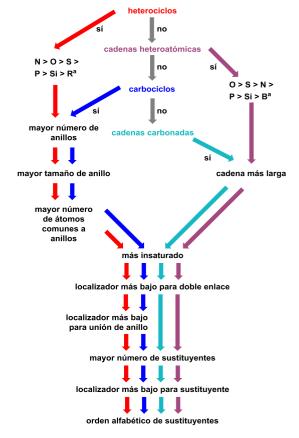


Figura 1. Orden de prioridad de la subunidad. La subunidad prioritaria está en el centro superior. Las subunidades de menor prioridad se encuentran siguiendo las flechas. El tipo de subunidad, ya sea un heterociclo, una cadena heteroátomica, un carbociclo, o una cadena carbonada, determina el color de la flecha que sigue. *Se pueden colocar otros heteroátomos en estos órdenes como lo indican sus posiciones en la tabla periódica. *S

