

Česká komise pro makromolekulární nomenklaturu* předkládá se souhlasem Českého komitétu pro chemii české znění dokumentu Mezinárodní unie čisté a užité chemie (IUPAC)** z roku 1994 jako vhodnou pomůcku pro grafický popis polymerů v běžné chemické praxi a při publikování výsledků základního i aplikovaného výzkumu. Dokument uvádí reprezentativní paletu příkladů všech druhů polymerů, včetně jejich názvů založených na struktuře i názvů založených na názvech monomerů. V názvech jsou již uplatněny nedávné změny v názvosloví organické chemie.

GRAFICKÁ ZNÁZORNĚNÍ (CHEMICKÉ VZORCE) MAKROMOLEKUL (Doporučení IUPAC 1994)

Ubi materia, ibi geometria
J. Kepler (1571–1630)

Souhrn

Jednoznačné grafické znázornění molekul je zvláště důležité u makromolekul, neboť ty často vykazují větší počet strukturních znaků než molekuly o nízké molekulové hmotnosti. Například vzorec kopolymeru by měl přímo naznačovat, zda znázorňuje kopolymer blokový nebo kopolymer s nespecifikovaným pořadím monomerních jednotek. Tak dvojblokový kopolymer, složený z bloku majícího p monomerních jednotek A a bloku obsahujícího q monomerních jednotek B se znázorní vzorcem $-(A)_p(B)_q-$ zatímco odpovídající nahodilý kopolymer se popíše vzorcem $(-A-B-)_n$, při čemž $p + q = n$.

Souhrnně řečeno, dokument uvádí pravidla a příklady pro grafické znázornění opakujících se konstitučních jednotek, monomerních jednotek, regulárních a iregulárních polymerů s jednoduchou i složitou strukturou, a to včetně homopolymerů organických i anorganických, kopolymerů střídavých a periodických, kopolymerů statistických, nahodilých a s neurčenou strukturou, kopolymerů blokových a roubovaných, včetně hvězdicových polymerů. Navržené grafické znázornění chemických vzorců polymerů je vhodné pro grafické počítačové programy.

Úvod

Grafická znázornění (chemické vzorce) makromolekul jsou široce používána ve vědecké literatuře o polymerech, včetně dokumentů IUPAC o názvosloví makromolekul¹. Předložený dokument stanoví pravidla pro jednoznačné znázornění struktury makromolekul chemickými vzorci. Pravidla se v zásadě týkají syntetických makromolekul. Pokud je to možné, jsou tato pravidla v souladu se vzorci v dokumentech IUPAC^{1–6a} se vzorci iregulárních makromolekul⁷, molekul kopolymerů^{1–3,8} a hvězdicových makromolekul.

Ve srovnání s chemickými vzorci molekul o nízké molekulové hmotnosti musí být chemické vzorce polymerů navíc schopny znázornit, že se konstituční jednotky v makromolekule opakují a různým způsobem spojují.

Termín konstituční jednotka^{2,3} se v celém textu používá jak pro opakující se konstituční jednotku^{2,3}, tak pro monomerní jednotku^{2,3}; jeden z těchto typů konstitučních jednotek by měl být použit vždy, kdykoliv je to možné a vhodné.

Chemické vzorce makromolekul by se v zásadě měly psát jen v těch případech, kdy je struktura konstitučních jednotek známa. Danou strukturu lze však pro zdůraznění specifických strukturních rysů napsat různými způsoby; takové alternativní struktury nemusí nezbytně odrážet pořadí uvádění názvů podle pravidel názvosloví založeného na struktuře⁴.

1. Obecná pravidla

Pravidlo 1.1: Znázornění konstituční jednotky vzorcem má být ve shodě se zvyklostmi v organické^{9,10} a anorganické chemii¹¹ a s pravidly IUPAC pro názvosloví polymerů^{1–8}.

Pravidlo 1.2: Pořadí uvádění konstitučních jednotek ve vzorcích je v souladu se strukturou makromolekuly libovolné, a proto nemusí vyhovovat pravidlům udaným v cit.⁴

Pravidlo 1.3: Pomlčky znázorňující chemické vazby se mohou vynechat, aby vzorec byl co nejsevěřenější. Na koncích opakujících se konstitučních jednotek musí být pomlčky připojeny.

Poznámka 1.3: Upuštění od jedné či více pomlček u chirálního nebo prochirálního atomu nebo pomlček u atomů spojených dvojnou vazbou znamená, že konfigurace odpovídajícího místa stereoizomerie není známa nebo se úmyslně nespecifikuje^{1–3,5}.

Pravidlo 1.4: Postranní skupiny nebo substituenty obsahující více než jeden symbol atomu a napsané na stejném řádku jako hlavní řetězec makromolekuly se dávají do závorek, obvykle kulatých.

Pravidlo 1.5: Závorky a indexy vyznačují opakování konstituční jednotky. Závorky jsou kulaté nebo hranaté a mohou být použity libovolně s výjimkou anorganických polymerů, pro něž se doporučuje užívat k tomu účelu výhradně kulaté závorky, aby se zabránilo záměně za hranaté závorky, označující koordinační struktury.

Pravidlo 1.6: Indexy n , p , q , r atd. vyznačují násobnost polymerních sekvencí, indexy a , b , c atd. vyznačují mnohonásobnost oligomerních sekvencí. Indexy by měly být vytištěny kursivou. Není-li kursiva k dispozici, měly by být indexy podtržené.

Pravidlo 1.7: Jsou-li koncové skupiny známy, mohou se jejich vzorce připojit k vazbám na koncích konstitučních jednotek vně závorek.

Pravidlo 1.8: Údaje o hmotnostním zlomku (w), molárním zlomku (x), molární hmotnosti (M), relativní molekulové hmotnosti

* Členové komise: M. Beneš, P. Čefelín, J. Kahovec, J. Kotas†, P. Kratochvíl, B. Meissner, J. Roda, J. Vohlídal.

** Pure Appl. Chem. 66, 2469–2482 (1994).

(M_p), polymerizačním stupni (DP) nebo o jejich průměrných hodnotách lze vyjádřit tak, že se příslušné hodnoty zapíše v kulatých závorkách za vzorcem makromolekuly obdobným způsobem, jaký se doporučuje pro pojmenování kopolymerů⁸. Použití obecných pravidel je objasněno v následujících oddílech.

2. Regulární polymery

Pravidlo 2.1: Regulární polymer (cit.^{2,3}, definice 3.1) s opakující se konstituční jednotkou (cit.², definice 3.3) —R— se znázorňuje vzorcem



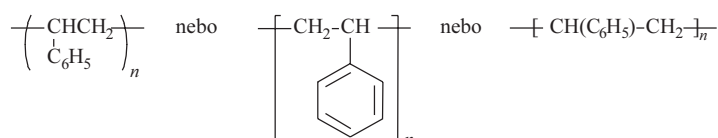
a v případech, kde jsou známy koncové skupiny E' a E'', vzorcem



Poznámka 2.1: Chemické vazby spojující opakující se konstituční jednotky se znázorňují pomlčkami protínajícími závorky.

Příklady^{,**}*

2-E1: poly(1-fenylethylen)
polystyren

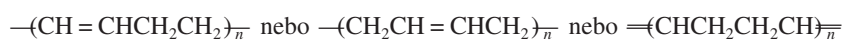


2-E2: syndiotaktický poly(1-fenylethylen)
syndiotaktický polystyren

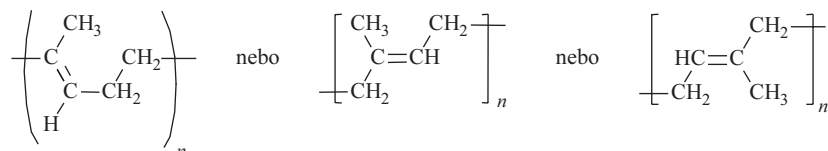


Poznámka: Analogické vzorce mohou být nakresleny pro ostatní taktické makromolekuly⁵.

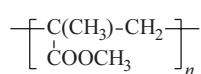
2-E3: poly(but-1-en-1,4-diyl)
1,4-polybutadien



2-E4: poly(1-methyl-*trans*-but-1-en-1,4-diyl)
trans-1,4-polyisopren



2-E5: poly[1-(methoxykarbonyl)-1-methylethylen]
poly(methyl-methakrylát)



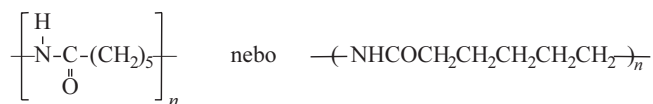
2-E6: poly(oxyethylenoxytereftaloyl)
poly(ethylen-tereftalát)



* Nejprve se uvádějí systematické názvy založené na struktuře^{1,4-6,12} a pak následují názvy odvozené od názvů monomerů, názvy semisystematické nebo názvy triviální^{1,4-6,12}, pokud existují. (Viz cit.¹⁰, pokud jde o změny od doby vydání cit.⁹)

** Zobrazené vzorce opakujících se konstitučních jednotek nejsou jediné možné.

- 2-E7: poly[imino(1-oxohexan-1,6-diyl)]
poly(ε-kaprolaktam), poly(hexano-6-laktam)

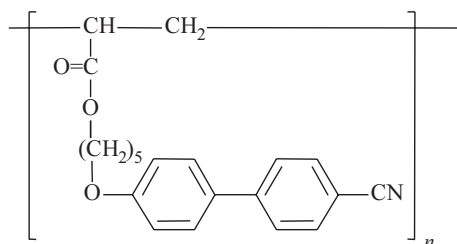


- 2-E8: poly[thio-(*R,R*)-1,2-dimethylethylen] nebo poly[thio-(*S,S*)-1,2-dimethylethylen]
poly[*cis*-(*R,S*)-dimethylthiiran]



Poznámka: Při enantioselektivní polymerizaci *cis*-(*R,S*)-2,3-dimethylthiiranu může vznikat poly[thio-(*R,R*)-1,2-dimethylethylen] nebo jeho enantiomer.

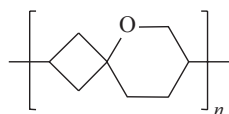
- 2-E9: poly{1-[(5-[(4'-kyanbifenyl-4-yl)oxy]pentyl)oxy]karbonyl}ethylen}



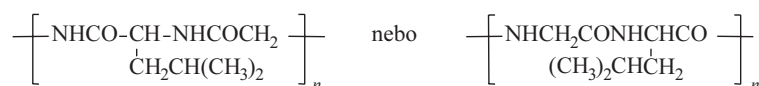
- 2-E10: α-hydro-ω-hydroxypoly(oxyethylen)
poly(ethylenglykol)



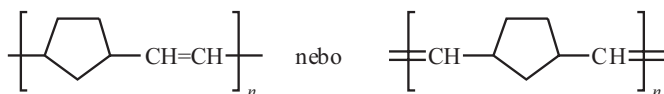
- 2-E11: poly(5-oxaspiro[3.5]nonan-2,7-diyl)



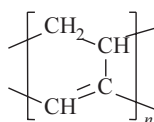
- 2-E12: poly[imino(2-isobutyl-1-oxoethylen)imino(1-oxoethylen)]
poly(glycylleucin)



- 2-E13: poly(cyklopentan-1,3-diylethen-1,2-diyl)
polynorbornen



- 2-E14: poly(but-1-en-1,4:3,2-tetrayl) (cit.¹²)
ladder-poly[methyl(vinyl)keton] (cit.¹²)

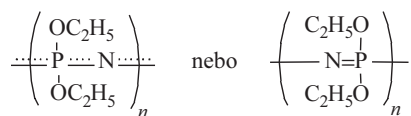


Poznámka: Název tohoto žebříkovitého polymeru, odvozený od monomeru, udává výchozí monomer pro syntézu, která spočívá ve víceetapňové reakci zahrnující kondenzaci a cyklizaci.

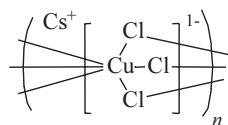
2-E15: *catena*-poly[(difenylsilicium)- μ -oxo] (cit.⁶) nebo
poly[oxy(difenylsilandiy)] (cit.^{4,9})
poly(difenylsiloxan)



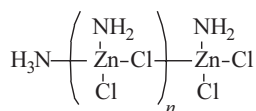
2-E16: *catena*-poly[(diethoxofosfor)- μ -nitrido] (cit.⁶) nebo
poly[nitrilo(diethoxyfosforanylyliden)]



2-E17: *catena*-poly{cesium[kuprát-tri- μ -chloro](1-)} nebo
catena-poly{cesium[kuprát(II)-tri- μ -chloro]}



2-E18: α -ammin- ω -(ammindichlorozinek)-*catena*-poly[(amminchlorozinek)- μ -chloro]



3. Iregulární polymery^{2,3,7}

Pravidlo 3.1: Iregulární polymer (cit.^{2,3}, definice 3.2) nebo irregulární blok (cit.^{2,3}, definice 3.16), obsahující konstituční jednotky – U –, – V –, – W –, atd., se popisuje vzorcem



Poznámka 3.1.1: Řada teček naznačuje přítomnost dalších konstitučních jednotek.

Poznámka 3.1.2: Pořadí konstitučních jednotek ve vzorci je libovolné.

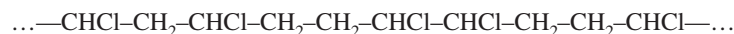
Poznámka 3.1.3: Šikmé lomítko mezi konstitučními jednotkami znamená, že pořadí těchto jednotek je nepravidelné nebo neznámé.

Poznámka 3.1.4: Pomlčky na koncích vzorce se zakreslují uvnitř závorek, protože nemusí znamenat koncové chemické vazby makromolekul*.

Poznámka 3.1.5: Správnost výběru konstitučních jednotek by měla být vždy prověřena jejich opakováním ve vzorcích, tedy vytvořením vzorců o delších sekvencích. Tímto způsobem lze vyloučit kombinace konstitučních jednotek, které se v makromolekulách nevyskytují.

*Příklady***

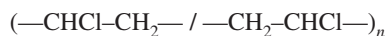
3-E1: poly(1-chlorethylen/2-chlorethylen)
(iregulární polymer odvozený od vinylchloridu, jehož jednotky jsou spojeny hlava k patě i hlava k hlavě),



s monomerními jednotkami: $\text{---CHCl---CH}_2\text{---}$, $\text{---CH}_2\text{---CHCl---}$

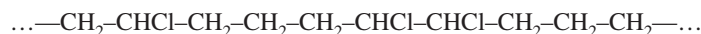
* Poznámka České komise: Pomlčky u každé konstituční jednotky se píšou dlouhé (stejně jako pomlčky vyznačující propojení bloků), neboť kterákoliv z nich může znamenat chemickou vazbu na konci bloku.

** Nejprve jsou uvedeny názvy založené na struktuře⁷ a potom vysvětlení (v závorkách), je-li nutné. Pak následují vzorec segmentu makromolekuly, monomerních nebo konstitučních jednotek nutných k popisu úplné struktury a navrhovaný vzorec. (Viz cit.¹⁰, pokud jde o změny od doby vydání cit.⁹)

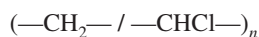


Poznámka: Řada teček vyznačuje pokračování makromolekulárního řetězce.

- 3-E2: poly(chlormethylen/methylen)
(chlorovaný polyethylen, který neobsahuje dichlormethylenové jednotky)

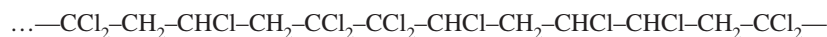


s monomerními jednotkami: $\text{—CH}_2\text{—}$, —CHCl—

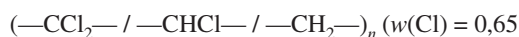


Viz poznámka k 3-E1.

- 3-E3: poly(chlormethylen/dichlormethylen/methylen)
(chlorovaný poly(vinylchlorid) s hmotnostním zlomkem chloru 0,65),

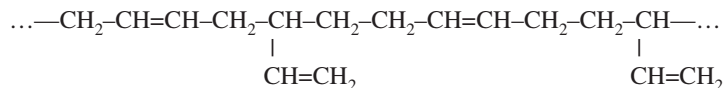


s konstitučními jednotkami: $\text{—CCl}_2\text{—}$, $\text{—CH}_2\text{—}$, —CHCl—

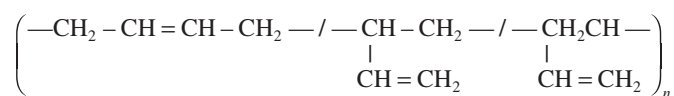


Viz poznámka k 3-E1.

- 3-E4: poly(but-2-en-1,4-diyl/1-vinylethylen/2-vinylethylen)
(iregulární polymer obsahující jednotky vzniklé polymerizací buta-1,3-dienu 1,4- a 1,2-adicí):

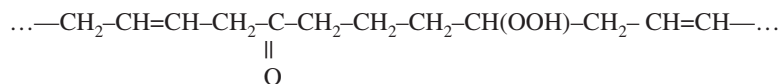


s monomerními jednotkami: $\text{—CH}_2\text{—CH=CH—CH}_2\text{—}$, $\text{—CH—CH}_2\text{—}$
 $\begin{array}{c} | \\ \text{CH=CH}_2 \end{array}$

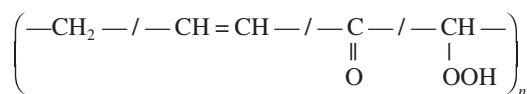


Viz poznámka k 3-E1.

- 3-E5: poly(karbonyl/hydroperoxymethylen/methylen/ethen-1,2-diyl) (oxidovaný polyethylen):

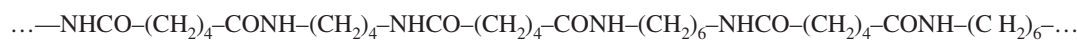


s konstitučními jednotkami: $\text{—CH}_2\text{—}$, —CH=CH— , —C— , —CH(OOH)—
 $\begin{array}{c} \text{O} \\ || \end{array}$

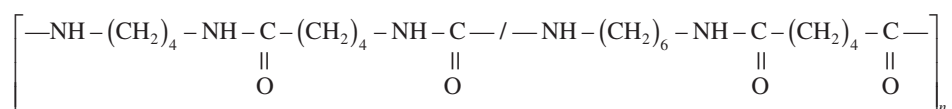


Viz poznámka k 3-E1.

- 3-E6: poly(iminohexan-1,6-diyliminoadipoyl/iminobutan-1,4-diyliminoadipoyl)
(polyamid odvozený od adipoylchloridu a směsi hexan-1,6-diaminu a butan-1,4-diaminu),

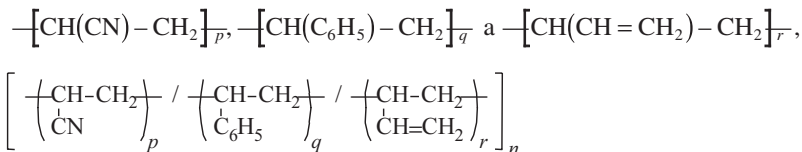


s konstitučními jednotkami: $\text{—NH—(CH}_2\text{)}_4\text{—NHCO—(CH}_2\text{)}_4\text{—CO—}$, $\text{—NH—(CH}_2\text{)}_6\text{—NHCO—(CH}_2\text{)}_4\text{—CO—}$



Viz poznámka k 3-E1.

3-E7: poly[poly(1-kyanethylen)/poly(1-fenylethylen)/poly(1-vinylethylen)] (iregulární polymer složený z regulárních bloků polyakrylonitrilu, polystyrenu a 1,2-polybutadienu s nespécifikovaným pořadím bloků^{*}



Poznámka: Volba konstitučních jednotek je diktována pravidlem 1.1 a pravidly v cit.^{1,4}, např. 1-kyanethylen má přednost před jednotkou 2-kyanethylen.

4. Kopolymery

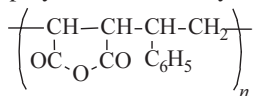
4.1. Alternující a periodické kopolymery

Pravidlo 4.1.1: Alternující a periodické kopolymery jsou, pokud je to možné, pokládány za regulární polymery.

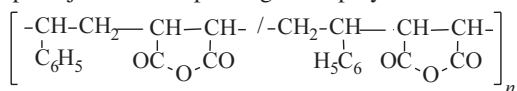
Pravidlo 4.1.2: Pseudoperiodické kopolymery, například takové, v nichž se jen některé konstituční jednotky opakují pravidelně, se považují za iregulární polymery (viz poznámka k příkladu 4.1-E1) nebo za nespécifikované kopolymery (viz příklad 4.1-E3).

Příklady^{**}

4.1-E1: poly(styren-*alt*-maleinanhydrid)
poly[2,5-dioxotetrahydrofuran-3,4-diyl](1-fenylethylen)]



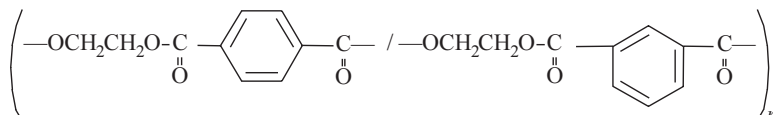
Poznámka: V případech, kdy jsou přítomny jednotky 1-fenylethylenu i 2-fenylethylenu v měřitelných množstvích, použije se vzorec pro iregulární polymer:



4.1-E2: poly(formaldehyd-*per*-ethylenoxid-*per*-ethylenoxid)^{***} nebo poly(oxymethylenoxyethylenoxyethylen)



4.1-E3: poly(ethylen glykol-*alt*-(tereftalová kyselina; isoftalová kyselina)]
poly(ethylen-tereftalát)-*co*-ethylen-isoftalát)



* Poznámka České komise: srov. Pravidlo 4.3.2.

** Nejprve se uvádějí názvy kopolymerů založené na názvech monomerů^{1,4,8}, pak systematické názvy založené na struktuře, pokud existují, a následuje navržený vzorec. (Viz cit.¹⁰, pokud jde o změny od doby vydání cit.⁹)

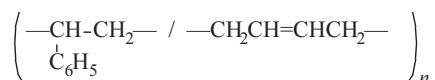
*** Poznámka České komise: Název monomeru „ethylenoxid“ by měl být nahrazen názvem „oxiran“ v souladu s doporučením IUPAC k názvosloví organických látek.

4.2. Statistické, nahodilé a nespécifikované kopolymery

Pravidlo 4.2.1: Statistické, nahodilé a nespécifikované kopolymery se považují za iregulární polymery.

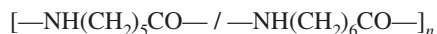
Příklady*

4.2-E1:poly(styren-*stat*-buta-1,3-dien)

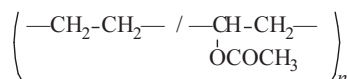


Poznámka: Buta-1,3-dien je zabudován 1,4-adicí, to však název založený na názvu monomeru není schopen postihnout.

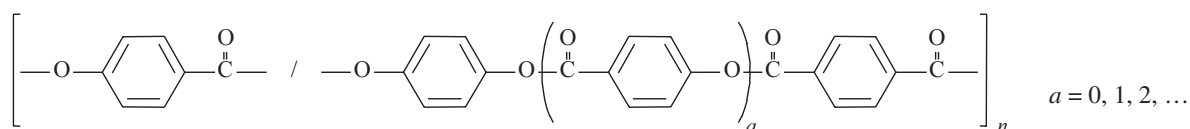
4.2-E2:poly[(6-aminohexanová kyselina)-*stat*-(7-aminoheptanová kyselina)]



4.2-E3:poly(ethylen-*ran*-vinyl-acetát)

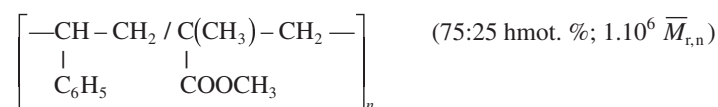


4.2-E4:poly[(4-hydroxybenzoová kyselina)-*co*-hydrochinon-*co*-tereftalová kyselina)]

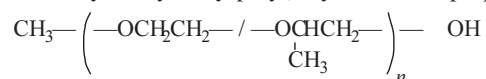


Poznámka: V tomto grafickém znázornění se předpokládá, že se uplatňují jen esterifikační reakce.

4.2-E5:poly(styren-*co*-methyl-methakrylát) (75:25 hmot. %; $1.10^6 \overline{M}_{r,n}$)



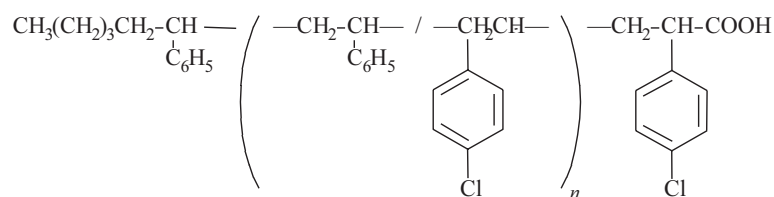
4.2-E6:α-methyl-ω-hydroxy-poly(ethylenoxid-*co*-propylenoxid)**,**



Poznámka: Pomlčky znázorňující vazby koncových skupin neprotínají závorky ve vzorci polymeru, protože vzorec nespécifikuje, která koncová skupina je připojena ke které monomerní jednotce.

4.2-E7:α-butyl-ω-karboxy-poly[styren-*co*-(4-chlorstyren)]

α-(1-fenylhexyl)-ω-[2-(4-chlorfenyl)-2-karboxyethyl]-poly[styren-*co*-(4-chlorstyren)] (cit.⁸⁾)



Viz poznámka k 4.2-E6.

* Nejprve je vždy uveden název kopolymery založený na názvech monomerů^{1,8}, pak název založený na struktuře, pokud existuje, nakonec pak navržený vzorec. (Viz cit.¹⁰, pokud jde o změny od doby vydání cit.⁹)

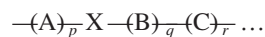
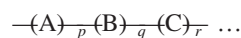
** Podle cit.¹⁰ by měl být název „propylenoxid“ nahrazen názvem „2-methyloxiran“.

*** Poznámka České komise: Podle cit.¹⁰ by měl být i název monomerní jednotky „ethylenoxid“ nahrazen názvem „oxiran“.

Poznámka: Vzorec je přesnější než udává prvý z uvedených názvů, neboť ukazuje, že koncová skupina butyl je připojena v poloze 2 skupiny 1-fenylethyl a koncová karboxylová skupina je navázána v poloze 2 skupiny 2-(4-chlorfenyl)ethyl.

4.3. Blokované kopolymery

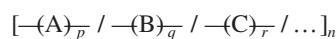
Pravidlo 4.3.1: Vzorce blokových kopolymerů (cit.^{2,3}, definice 3.35) tvořených sledem regulárních bloků (cit.^{2,3}, definice 3.15), a spojovacích jednotek (pokud jsou známy; viz⁸, pravidlo 5.5) ve známém pořadí se zapisují např. takto:



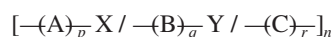
kde A, B, C atd. jsou opakující se konstituční jednotky regulárních bloků $-(A)_p$, $-(B)_q$, $-(C)_r$ atd. a $-X-$, $-Y-$ atd. jsou spojovací jednotky, které se nepovažují za součásti bloků.

Poznámka 4.3.1: Řada teček vyznačuje přítomnost dalších konstitučních jednotek nebo bloků nebo jednotek i bloků.

Pravidlo 4.3.2: Vzorce blokových kopolymerů tvořených sledem regulárních bloků a spojovacích jednotek, pokud jsou známy, v neznámém pořadí, se zapisují tak, že se vzorce bloků, a spojovacích jednotek oddělí šikmým lomítkem. Například vzorec



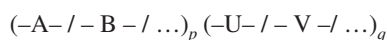
znázorňuje blokový kopolymer tvořený neznámým pořadím regulárních bloků $-(A)_p$, $-(B)_q$, $-(C)_r$ atd. a



znázorňuje blokový kopolymer tvořený neznámým pořadím regulárních bloků $-(A)_p$, $-(B)_q$ a $-(C)_r$ se spojovacími jednotkami $-X-$ nebo $-Y-$ připojenými k $-(A)_p$, respektive $-(B)_q$.

Poznámka 4.3.2: Řada teček vyznačuje přítomnost dalších konstitučních jednotek nebo bloků nebo jednotek i bloků.

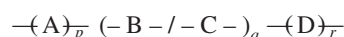
Pravidlo 4.3.3: Blokový kopolymer, tvořený sledem iregulárních bloků, se popisuje vzorcem



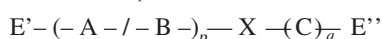
kde A, B atd. a U, V atd., jsou opakující se konstituční jednotky iregulárních bloků $(-A- / -B- / \dots)_p$ $(-U- / -V- / \dots)_q$.

Poznámka 4.3.3.1: Řada teček vyznačuje přítomnost dalších konstitučních jednotek nebo bloků nebo jednotek i bloků.

Poznámka 4.3.3.2: Vazby směřující od prvé a poslední konstituční nebo spojovací jednotky iregulárního bloku se píší uvnitř závorek, když není známo, ke kterým jednotkám iregulárního bloku jsou ostatní bloky nebo koncové skupiny připojeny. Tak



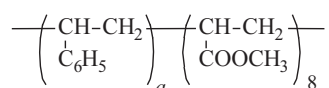
znázorňuje blokový kopolymer, v němž je iregulární blok $(-B- / -C-)_q$ (viz pravidla 3.1 a 1.6) je zapojen mezi regulární bloky $-(A)_p$ a $-(D)_r$ zatímco



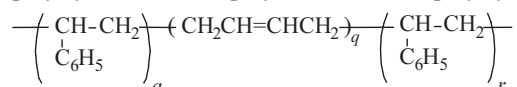
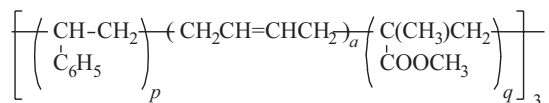
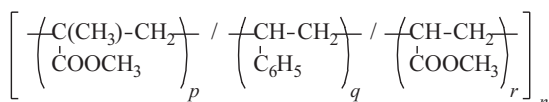
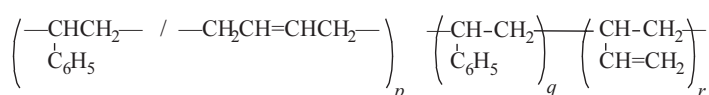
znázorňuje blokový kopolymer, v němž je iregulární blok $(-A- / -B-)_p$ připojen jedním koncem ke koncové skupině E' a druhým koncem prostřednictvím spojovací jednotky $-X-$ k regulárnímu bloku $-(C)_q$ s koncovou skupinou E''.

Příklady*

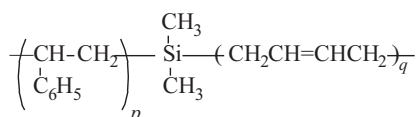
4.3-E1: oligostyren-block-oktakis(methyl-akrylát)



* Uvedeny jsou názvy založené na názvech monomerů a navrhovaný vzorec. (Viz cit.¹⁰, pokud jde o změny od doby vydání cit.⁹)

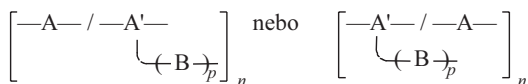
4.3-E2: polystyren-*block*-1,4-polybutadien-*block*-polystyren4.3-E3: tris[polystyren-*block*-1,4-oligobutadien-*block*-poly(methyl-methakrylát)]4.3-E4: poly[poly(methyl-methakrylát)-*block*-polystyren-*block*-poly(methyl-akrylát)]4.3-E5: poly(styren-*stat*-buta-1,3-dien)-*block*-polystyren-*block*-1,2-polybutadien

Viz poznámka k 4.2-E1.

4.3-E6: polystyren-*block*-dimethylsilandiyl-*block*-1,4-polybutadien

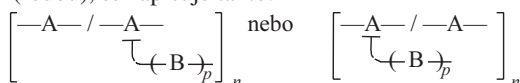
4.4. Roubované kopolymery

Pravidlo 4.4.1: Vzorec roubovaného kopolymery tvořeného hlavním polymerním řetězcem monomerních jednotek A, k níž je ve známých polohách připojen k některým monomerním jednotkám A neznámý počet bloků monomerních jednotek B (roubů), se zapisuje takto

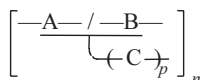


kde A' označuje monomerní jednotku A, která je modifikována substitucí roubem.

Pravidlo 4.4.2: Vzorec roubovaného kopolymery tvořeného hlavním polymerním řetězcem monomerních jednotek A, k níž je v neznámých místech připojen k některým monomerním jednotkám A neznámý počet bloků monomerních jednotek B (roubů), se zapisuje takto:



kde vodorovná úsečka pod nemodifikovanou monomerní jednotkou ** značí, že poloha připojení roubu není známa.



Poznámka: Je-li hlavní řetězec roubovaného kopolymery sám kopolymerem tvořeným monomerními jednotkami A a B a není-li známo, ve kterém místě a ke které z jednotek A, B jsou rouby -(C)-_p připojeny, zapíše se vzorec takto:

* Poznámka České komise: Uveden je obecný vzorec iregulárního polymeru, avšak pravidlo lze využít i pro regulární polymery (alternující a periodické kopolymery, blokový kopolymer s regulárními bloky ve známém pořadí).

** Poznámka České komise: Ve vzorci určitého kopolymery se formálně zakresluje nemodifikovaná monomerní jednotka, ačkoliv ve skutečnosti jde o substituovanou monomerní jednotku.

Pravidlo 4.4.3: Je-li znám, zapisuje se průměrný počet roubů v molekule kopolymeru (i) v závorkách za vzorcem

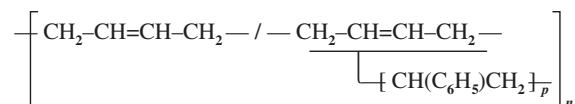


Viz Pravidla 4.4.1 (pro A') a 4.4.2.

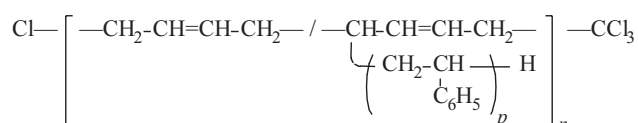
Příklady*

4.4-E1:1,4-polybutadien-*graft*-polystyren

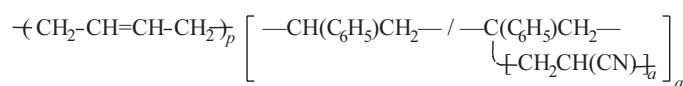
(a: bloky polystyrenu naroubované na jednotky but-2-en-1,4-diyl v neznámých polohách)



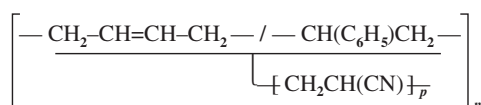
(b: bloky polystyrenu naroubované na jednotky but-2-en-1,4-diyl ve známé poloze s tím, že na jednom konci hlavního řetězce je koncovou skupinou chlor a na druhém trichlormethyl a na volné konce bloků polystyrenu jsou navázány jako koncové skupiny vodíky.

4.4-E2: 1,4-polybutadien-*block*-(polystyren-*graft*-oligoakrylonitril)

(rouby polyakrylonitrilu vázané na dvojblokovém kopolymeru 1,4-polybutadien–polystyren ve známé poloze některých monomerních jednotek odvozených od styrenu.

4.4-E3:poly(buta-1,3-dien-*stat*-styren)-*graft*-polyakrylonitril

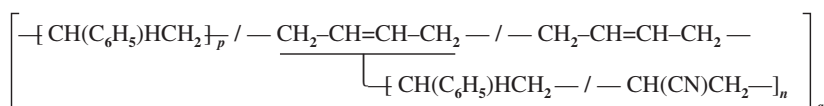
(polyakrylonitril naroubovaný na statistický kopolymér buta-1,3-dien–styren v nespecifikovaných polohách)



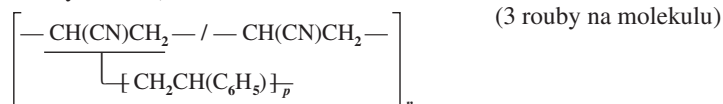
Viz poznámka k 4.2-E1.

4.4-E4: polystyren-*block*-[1,4-polybutadien-*graft*-poly(styren-*co*-akrylonitril)]

(kopolymer styrenu a akrylonitrilu naroubovaný na dvojblokový kopolymer 1,4-polybutadien-polystyren v nespecifikovaných polohách některých jednotek but-2-en-1,4-diylu)

4.4-E5:polyakrylonitril-tris(-*graft*-polystyren)

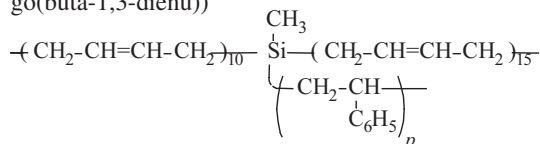
(tři rouby polystyrenu vázané na jedné molekule polyakrylonitrilu v nespecifikovaných polohách monomerní jednotky z akrylonitrilu)



* Nejprve jsou uvedeny názvy založené na názvech monomerů, pak vysvětlení v závorkách a posléze navržený vzorec. V poznámkách k příkladům 4.4-E6 a 4.4-E7 jsou uvedeny názvy hvězdicových kopolymerů založené na struktuře. (Viz cit.¹⁰, pokud jde o změny od doby vydání cit.⁹)

4.4-E6: deka(buta-1,3-dien)-*block*-(methylsilantriyl-*graft*-polystyren)-*block*-pentadeka(buta-1,3-dien)

(hvězdicový kopolymer, v němž na centrální methylsilanovou jednotku jsou navázány polystyren a dva řetězce oligo(buta-1,3-dienu))



Poznámka: Buta-1,3-dien se navazuje výhradně 1,4-adicí, což nelze vyjádřit v názvu založeném na názvech monomerů.

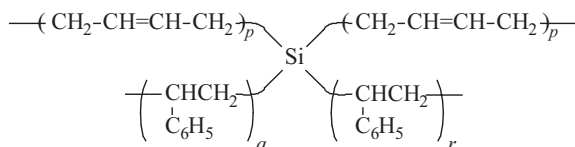
Název založený na struktuře⁷ zní:

[deka(but-2-en-1,4-diyl)][pentadeka(but-2-en-1,4-diyl)][poly(2-fenylethylen)]methylsilan.

4.4-E7: polystyren-*block*-[silantetrayl-bis[*graft*-poly(buta-1,3-dien)]]-*block*-polystyren nebo

poly(buta-1,3-dien)-*block*-[silantetrayl-bis[*graft*-polystyren]]-*block*-poly(buta-1,3-dien)

(hvězdicový kopolymer, kde na centrální Si atom jsou navázány dva řetězce polystyrenu a dva řetězce poly(buta-1,3-dienu))



Poznámka: Buta-1,3-dien se navazuje výhradně 1,4-adicí, což nelze vyjádřit v názvu založeném na názvech monomerů.

Název založený na struktuře⁷ zní:

bis[poly(but-2-en-1,4-diyl)][poly(1-fenylethylen)][poly(2-fenylethylen)silan.

LITERATURA

1. International Union of Pure and Applied Chemistry: *Compendium of Macromolecular Nomenclature* („Purple Book“). Blackwell Scientific Publications, Oxford 1991.
2. International Union of Pure and Applied Chemistry: Basic Definitions of Terms Relating to Polymers (1974), *Pure Appl. Chem.* 40, 477–491 (1974). Přetištěno jako kapitola 1 v kompendiu¹ (viz předcházející reference). Český překlad: *Chem. Listy* 79, 281 (1985).
3. International Union of Pure and Applied Chemistry: Glossary of Basic Terms in Polymer Science (1996); *Pure Appl. Chem.* 68, 2283–2311 (1996).
4. International Union of Pure and Applied Chemistry: Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers (1975), *Pure Appl. Chem.* 48, 373–385 (1976). Přetištěno jako kapitola 5 v kompendiu¹. Český překlad: *Chem. Listy* 81, 290 (1987).
5. International Union of Pure and Applied Chemistry: Stereochemical Definitions and Notations Relating to Polymers (1980), *Pure Appl. Chem.* 53, 733–752 (1981). Přetištěno jako kapitola 2 v kompendiu¹. Český překlad: *Chem. Listy* 90, 371 (1996).
6. International Union of Pure and Applied Chemistry: Nomenclature for Regular Single-Strand and Quasi-Single-Strand Inorganic and Coordination Polymers (1984), *Pure Appl. Chem.* 57, 149–168 (1985). Přetištěno jako kapitola 6 v kompendiu¹.
7. International Union of Pure and Applied Chemistry: Nomenclature for Irregular Single-Strand Organic Polymers, *Pure Appl. Chem.* 66, 873–889 (1994). Český překlad: *Chem. Listy* 90, 888 (1996).
8. International Union of Pure and Applied Chemistry: Source-Based Nomenclature for Copolymers (1985), *Pure Appl. Chem.* 57, 1427–1440 (1985). Přetištěno jako kapitola 7 v kompendiu¹. Český překlad: *Chem. Listy* 84, 843 (1990).
9. International Union of Pure and Applied Chemistry: *Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F, and H* („Blue Book“). Pergamon Press, Oxford 1979. České znění: *Nomenklatura organické chemie* (Pravidla IUPAC 1979, oddíly A, B, C, D a F). Academia, Praha 1985.
10. International Union of Pure and Applied Chemistry: *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds*, Blackwell Scientific Publications, Oxford 1993. České znění: *Průvodce názvoslovím organických sloučenin podle IUPAC (Doporučení 1993)*, Academia, Praha 2000.
11. International Union of Pure and Applied Chemistry: *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 1990* (tzv. „Red Book“). Blackwell Scientific Publications, Oxford 1990.
12. International Union of Pure and Applied Chemistry: Nomenclature of Regular Double-Strand (Ladder and Spiro) Organic Polymers, *Pure Appl. Chem.* 65, 1561–1580 (1993). Český překlad: *Chem. Listy* 92, 415 (1989).

Czech Commission for Macromolecular Nomenclature: Graphic representations (chemical formulae) of macromolecules (IUPAC Recommendations 1994)

The document provides rules and examples for the graphic representation of constitutional repeating units and monomeric units, regular and irregular polymers of simple as well as complex structures, including organic and inorganic homopolymers, alternating and periodic copolymers, statistical, random and unspecified copolymers, block copolymers and graft copolymers, including star polymers. The proposed graphic representations of chemical formulae for polymers are suitable for presentation through graphics computer programs.