

18. számú ajánlás a makromolekulák nevezéktanához

E. S. Wilks*

Nevezéktani Bizottság

Amerikai Kémiai Társaság (American Chemical Society - ACS) Polimerkémiai Részleg

Ismétlődő alapegységek szabályainak használata

Ebben a makromolekula nevezéktani jegyzetben áttekintjük annak folyamatát, hogy miként kell helyesen ábrázolni és elnevezni a polimereket alkotó, szerkezeti alapon kijelölt, ismétlődő alapegységeket — IAE (angolul: constitutional repeating unit - CRU). A szakirodalomban zavarba ejtően sok olyan szerkezet-ábrázolás található, amely nem egyezik meg a Chemical Abstract Service (CAS) és az International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC - Tiszta és Alkalmazott Kémia Nemzetközi Uniója) által meghatározott szabályokkal. Nemcsak hogy gyakran helytelenek a képi ábrázolások, hanem sokszor az elnevezések is hiányosak, hibásak vagy forrásalapúak. Egy-egy publikációban esetleg eltekinthetünk a polimerek pontos szerkezeti képletének és nevének feltüntetésétől, ha összetételük e nélkül is megérthető, de a rossz szerkezeti képletek folyamatos használata veszélyes, mivel elterjeszti a publikációk szerzői között azt az amúgy is népszerű nézetet, mely szerint vagy nincsenek szabályok, vagy elfogadható ezek be nem tartása. Igenis **vannak** szabályok és ezek mellözése akadályozza az eredményes kommunikációt. Ha nem tanuljuk meg és nem alkalmazzuk a szabályokat, ezzel a publikált szerkezeti képletek egységességét ássuk alá, valamint zavarba hozzuk azokat, akik a szakirodalomban kutatnak. Azok, akik mégha jól megszerkesztett adatbázisokban keresgélnek, mint a Chemical Abstracts Tárgymutató (Chemical Abstracts Registry File), de nem ismerik a szabályokat, nem fognak sikerrel járni, mivel nem fogják megtalálni az általuk keresett szerkezetet. Így aztán az alábbi következtetések valamelyikére juthatnak: (1) amit keresnek, az nincs benne az adatbázisban, mert nem találják; (2) ugyan sejtik, hogy benne van az adatbázisban, de nem találják és ennek okát nem tudván, feladják a keresést; (3) felismerik a problémát, de nincs elég jártasságuk ahhoz, hogy megoldják.

A CAS tárgymutatóban keresőknek saját érdekében meg kell tanulniuk a szabályokat. A IAE-kről a számítógép képernyőjén bemutatott prezentációk között számos a fordított helyzetű ábra, s ez sajnos hozzájárul a helyes elrendezéssel kapcsolatos félreértésekhez: az IAE-k elnevezési szabályai és a molekulák képernyőn való ábrázolása között nincs összefüggés.

A polimerekkel kapcsolatos publikációk szerzői is tartoznak annyival a polimerekkel foglalkozók közösségének, hogy alaposan megismerkedjenek a szabályokkal és alkalmazzák is azokat az általuk közölt szerkezetek ábrázolásakor. Jelen ajánlás során néhány gyakran előforduló lineáris polimer esetét mutatjuk be irányadó jelleggel: a téma teljeskörű tárgyalása **nem** áll szándékunkban.

A CAS és a IUPAC egymással egyetértésben szabályrendszert állított fel a IAE-k **meghatározását**, **rendezését** és **elnevezését** illetően. A CAS ezeket az *Index Guide*-ban^{1a} teszi közzé. A IUPAC ajánlások, melyeket a „szabályos, lineáris szerves polimerek nevezéktanában” (Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers)² közöl, az ACS 1968³-as alapvető ajánlásain alapulnak. A CAS „poli(ismétlődő szerkezeti egység)”-nek nevezi a polimereket, vagyis poly(SRU)-nak (poly[structural repeating unit]), míg a IUPAC a „poly(constitutional repeating unit)” azaz poly(CRU) elnevezést használja. A két fogalom gyakorlatilag ugyanazt jelenti. Ebben a makromolekula nomenklátúra ajánlásban mi a IAE (azaz a IUPAC által használt) elnevezést alkalmazzuk. A CAS és a IUPAC elnevezési elvei lényegileg megegyeznek, de a két rendszer által definiált IAE-k néha eltérőek: ezekre példákat fogunk hozni. Csak a polimerek szerkezeti alapú reprezentációját fogjuk megtárgyalni.

A teljes folyamat az alábbi lépésekből áll:

- (1) **Meghatározás:** Az ismétlődő egység meghatározása: ez lényegesen egyszerűbb, ha ábrázoljuk a lánc egy olyan nagyobb részletét, mely legalább két ismétlődő egységet foglal magába.
- (2) **Rendezés:** Az ismétlődő egység rendezése: ez a legbonyolultabb lépés. Az alábbiakban pontos iránymutatást adunk néhány egyszerű IAE esetre. Az összes szabály teljes körű áttekintése túlmutat e jegyzet keretein.
- (3) **Elnevezés:** A teljes ismétlődő egység elnevezése: a teljes IAE-t egy kétértékű szerves csoportként nevezzük el a szerves kémia szokásos nevezéktani szabályai szerint. Ez a lépés nem kötelező, de gyakran segítséget jelent azok számára, akik publikációkat írnak vagy kutatásokat végeznek.

Az alábbiakban mindhárom lépést részletesebben bemutatjuk.

- (1) **MEGHATÁROZÁS:** Rajzolja le a lánc egy részletét, amely elég hosszú ahhoz, hogy tartalmazzon legalább két teljes egységet. Először tegyen egy baloldali szögletes zárójelet bármelyik egyszeres láncközi kötésre a láncban lévő két alegység (ezeket többértékű szubsztituens csoportoknak is nevezzük) közé. Haladjon a lánc mentén (balról jobbra), amíg el nem ér egy ugyanolyan alegységhez, mint amelynek bal oldalára imént a baloldali szögletes zárójelet tette, és tegyen ennek az újabbnak a bal oldala felőli egyszeres kötésre egy jobboldali szögletes zárójelet. Írjon (alsóindexként) *n*-t kívülre, a jobboldali zárójel mellé. Ezzel **meghatározta** az IAE-t.

1.1 példa: Tegyük fel, hogy a lánc többféle különböző alegységből áll; legyenek ezek (tetszőlegesen) P, Q, R, S, T, U, és V, amelyek a következő sorrendben kapcsolódnak egymáshoz: -P-R-T-V-U-S-Q-P-R-T-V-U-S-Q-.

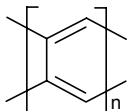
(a) Helyezzen egy baloldali szögletes zárójelet valahova a láncrészlet baloldali részén, pl. a T és V közötti egyszeres kötésen keresztül: P-R-T-[-V-U-S-Q-P-R-T-V-U-S-Q-.

(b) Haladjon a lánc mentén (balról jobbra) egészen addig, míg el nem ér egy másik V-hez és tegyen egy jobboldali szögletes zárójelet az ennek bal oldalán lévő egyszeres kötésre; ennek eredménye -P-R-T-[-V-U-S-Q-P-R-T-]-V-U-S-Q-... .

(c) Írjon egy alsóindexbe n -t kívülre, a jobb oldali zárójel mellé; ezzel **meghatározta** az IAE-t a következő képpen: -[-V-U-S-Q-P-R-T-] $_n$ - .

Megjegyzések: (1) a szögletes zárójeleket lehetőleg egyszeres és ne többszörös láncközi kötésekben keresztül helyezze el (lásd az F. szabályt később); (2) ha nincsenek egyszeres, aciklusos (nem gyűrűs) kötések a láncban, a polimert létra típusúnak nevezzük (lásd a 1.2 példát); ezek rendezésére a szabályok bonyolult rendszere szükséges, melynek áttekintése meghaladja a jegyzet kereteit.^{1,4}

1.2. példa:



(2) **RENDEZÉS:** Az IAE helyes rendezése azt jelenti, hogy az egységnek egyértelműen újrarajzolhatónak kell lennie. A helyesen rendezett IAE-ban a legbaloldalibb helyet a rangelső alegység foglalja el, míg a többi alegység ezután következik balról jobbra, amint az alábbi szabályok meghatározzák. Az előző lépésben meghatározott IAE rendezéséhez hat fontos (A.-tól F.-ig) szabályra van szükségünk.⁵

- **A. szabály:** Az elsőbbségi sorrend a különböző típusú alegységek között a következő:
(a) heterociklusos gyűrűk; (b) aciklusos heteroatomok; (c) karbociklusos gyűrűk, és
(d) csak szénatomot tartalmazó láncok. Ezen ajánlásban szereplő példákban a „>” jel bal oldalán lévő egység magasabb rangú a jobboldalinál.

1. táblázat: Példák az A. szabály illusztrálására

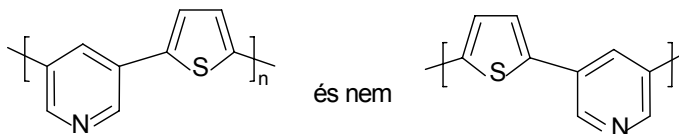
Azok számára, akik angolnyelvű szakirodalomban kutatnak, az angol elnevezéseket *ilyen formában* mutatjuk be a magyar nevek alatt

Példa szám	Példa ^a	Bemutatott szabály
2A1	tiofén-2,5-diiloxi (nem oxi-2,5-tioféndiil) <i>2,5-thiophenediyl oxy (not oxy-2,5-thiophenediyl)</i>	Heterociklikus gyűrű > aciklikus hetero atom
2A2	oxi- <i>p</i> -fenilén (nem <i>p</i> -fenilénoxi) <i>oxy-p-phenylene (not p-phenyleneoxy)</i>	aciklikus hetero atom > karbociklikus gyűrű
2A3	<i>p</i> -fenilénmetilén (nem metilén- <i>p</i> -fenilén) <i>p-phenylenemethylene (not methylene-p-phenylene)</i>	karbociklikus gyűrű > szénatomos lánc
2A4	oximetilén (nem metilénoxi) <i>oxymethylene (not methyleneoxy)</i>	aciklikus hetero atom > szénatomos lánc

^aHasználhatunk dült, kis *p* betűt a 2,5 numerikus helyzetszámok helyett a diszubsztituált benzolszármazékok esetében, de ajánlott a numerikus rendszer alkalmazása.⁶

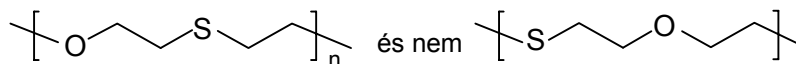
- Azokra a láncokra, melyek egynél több különböző **heterociklusos gyűrűt** tartalmaznak, az elsőbbségi sorrendet megállapító szabályok további rendszere vonatkozik^{1b}, melyek túl bonyolultak ahhoz, hogy itt részletezzük azokat; mindössze egy példát mutatunk be.

2A5. példa: piridin-3,5-diil > tiofén-2,5-diil (nitrogén-tartalmú heterociklus > nem nitrogén-tartalmú heterociklus); ezért:



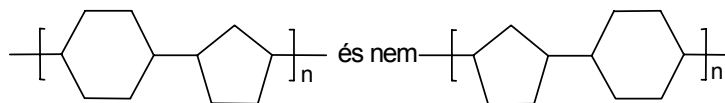
- A heteroatomokat tartalmazó **láncok** esetében az elsőbbségi sorrend a következő: O, S, Se, Te, N, P, As, Sb, Bi, Si, Ge, Sn, Pb, B, Hg.

2A6. példa: -O-C-C-S-C-C-, és nem -S-C-C-O-C-C-, mert O > S; ezért:



- Azokra a láncokra, melyek egynél több különböző **karbociklusos gyűrűt** tartalmaznak, a prioritási sorrendet megállapító szabályok további rendszere vonatkozik,^{1b} melyek túl bonyolultak ahhoz, hogy itt részletezzük azokat; csak egy példát mutatunk be.

2A7. példa: ciklohexán-1,4-diil > ciklopentán-1,3-diil (nagyobb gyűrű > kisebb gyűrű); ezért:



- B. szabály:** 2. táblázat bemutat erre néhány példát. Az A.szabály által meghatározott legmagasabb rangú alegységtől (a legmagasabb prioritású többértékű szubsztituens

csoportból) kiindulva, folyamatosan haladjunk a legrövidebb útvonalon (a legkevesebb közbelső atom érintésével) (i) ugyanazon alegység újabb előfordulásáig (ha van ilyen) az IAE-n belül, ezután (ii) a elsőbbségi sorban utána következő alegység felé és így tovább.^{1a} Ez a szabály ily módon megadja azt az irányt, amely mentén a láncot követni kell, ha a legmagasabb rangú alegységet már meghatároztuk. A 2. táblázat bemutat erre néhány példát.

2. táblázat: Példák a B. szabály illusztrálására

Példa szám	Példa	Bemutatott szabály
2B1	-O-C-O-C-C- (nem -O-C-C-O-C-)	B(a): a legrövidebb útvonal az ugyanazon alapegységhez
2B2	-O-C-S-C-C- (nem -O-C-C-S-C-)	B(b): az elsőbbségi alapegységtől a következő rangú alapegységhez

Ha a B. szabály alkalmazása során egynél több lehetséges útvonal adódik, a legmagasabban szubsztituált útvonalat kell választani; erre jó példát ad a nylon 66 esete (lásd a 3. táblázatot).

3. táblázat: Az „egyenlő hosszúságú utak” problémájának megoldása

Példa szám	Példa	Bemutatott szabály
2B3	-NH-CO-(CH ₂) ₄ -CO-NH-(CH ₂) ₆ - [nem -NH-(CH ₂) ₆ -NH-CO-(CH ₂) ₄ -CO-; nem -CO-(CH ₂) ₄ -CO-NH-(CH ₂) ₆ -NH-]	N-től N-ig az úthossz azonos az adipoil vagy a hexametilén csoporton keresztül; a magasabb rendű (O > H) szubsztituens tartalmazó út a preferált.

- **C. szabály:** Egy alegységen belül az atomok bármilyen elrendezése esetén a telítetlenség magasabb rangú a telítettségénél.^{1a}

4. táblázat: Példák a C. szabály illusztrálására

Példa szám	Példa
2C1	-CF=CF-CH=CH- > -CF=CF-CH ₂ -CH ₂ - > -CHF-CHF-CH ₂ -CH ₂ -
2C2	1,4-fenilén > cyclohexa-2,5-dién-1,4-diil > cyclohex-2-én-1,4-diil > cyclohexán-1,4-diil
2C3	furán-2,5-diil > 2,5-dihidrofuran-2,5-diil > tetrahidrofuran-2,5-diil

- **D. szabály:** Ha szubsztituensek vannak jelen, akkor az IAE-ban lévő, egyébként megegyező alap-alegységeket (szubsztituens csoportokat) az alábbi elvek szerint rendezzük, rendre, a szubsztituensek (a) gyakorisága, (b) legalacsonyabb helyzettszáma, és (c) az ábécében elfoglalt helyük szerint.^{1a}

5. táblázat: Példák a D. szabály illusztrálására

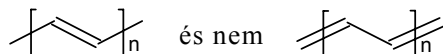
Példa szám	Példa	Bemutatott szubsztituens szabály
2D1	2,5-diklór- <i>p</i> -fenilén > 2-bróm- <i>p</i> -fenilén	D(a): több szubsztituens
2D2	2,5-dimetil- <i>p</i> -fenilén > 2,6-diklór- <i>p</i> -fenilén	D(b): legkisebb helyzettszám
2D3	2-bróm- <i>p</i> -fenilén > 2-klór- <i>p</i> -fenilén	D(c): ábécé sorrend szerint

- **E. szabály:** A szénláncban lévő többszörös kötések kapják a lehető legalacsonyabb helyezetszámokat, ha erre van mód az IAE rendezési szabályainak megsértése nélkül.^{1a}

Az E. szabályt illusztráló **példák:**

- (a) A poli(1,3-butadién)-t, melyet az 1,3-butadién úgynevezett „1,4” polimerizációjával állítják elő, a publikációkban gyakran rosszul ábrázolják az alábbi módon $-(CH_2-CH=CH-CH_2)_n-$, a helyes $-(CH=CH-CH_2-CH_2)_n-$ ábrázolás helyett.
A kettős kötést a lehető legalacsonyabb helyezetszámú pozícióba kell tenni, így a vegyület IAE neve poli(1-butén-1,4-diil).
 - (b) A poli(2-metil-1,3-butadién)-t, amelyet „poliizoprénnek” neveznek, helyesen így kell ábrázolni: $-[C(CH_3)=CH-CH_2-CH_2]_n-$.
 - (c) Hasonlóképpen, $-(O-CH_2-CH=CH-CH_2-CH_2-CH_2)_n-$ a helyesebb ábra inkább mint $-(O-CH_2-CH_2-CH_2-CH=CH-CH_2)_n-$ (az O itt is az első helyen álló atom; a kettős kötés pedig a lehető legalacsonyabb helyezetszámot kapja).
- **F. szabály:** Az IAE definiálásakor, a kapcsos zárójelek soha nem metszhetnek többszörös lánc-kötéseket, ha azokat egyszeres lánc-kötéseken át is el lehet helyezni (a CAS nem mondja ki, hogy ez szabály lenne, de felhossa az alábbi példát^{1a}).

2F1. példa:



- (3) **ELNEVEZÉS:** Nevezze el az alegységeket abban a sorrendben, ahogy azok megjelennek a rendezett IAE-ban (balról jobbra); írja le az alegységek neveit sorrendben (balról jobbra); tegye ki a megfelelő kapcsos vagy szögletes zárójeleket; végül egészítse ki az így kapott alegységeket a „poli” szóval. Mivel a CAS és a IUPAC nómenklaturák kissé különböznek, a fenti 1., 2. és 3. táblázatban adott példákat megismételjük a 6. táblázatban CAS és IUPAC nevükkel is, az összehasonlítás kedvéért.

6. táblázat: Néhány polimer CAS 9CI^a és IUPAC nevének összehasonlítása

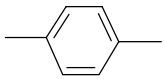
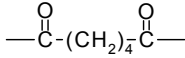
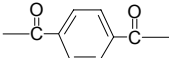
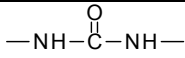
(A CAS nevek, természetesen, változatlanul maradnak – angolul;
a IUPAC oszlopban a magyar nevek alatt az angol neveket is mutatjuk)

Példa szám	Szerkezet	Polimer neve CAS szerint ^a	Polimer magyar neve IUPAC szerint angol neve
2A1		poly(2,5-thiophenediyl-2,5-diyl-1,4-phenylene-1,2-ethanediyl)	poli(tiofén-2,5-diiloxi- <i>p</i> -fenilénetilén) poly(thiophene-2,5-diyl- <i>p</i> -phenyleneethylen)
2A2		poly(oxy-1,4-phenylene)	poli(oxi- <i>p</i> -fenilén) poly(oxy- <i>p</i> -phenylene)
2A3		poly(1,4-phenylenemethylene)	poli(<i>p</i> -fenilénmetilén) poly(<i>p</i> -phenylenemethylene)
2A4		poly(oxymethylene)	poli(oximetilén) poly(oxymethylene)
2A5		poly(3,5-pyridinediyl-2,5-thiophenediyl)	poli(piridin-3,5-diil-tiofén-2,5-diil) poly(pyridine-3,5-diylthiophene-2,5-diyl)
2B1		poly(oxymethyleneoxy-1,2-ethanediyl)	poli(oximetilénoxietilén) poly(oxymethyleneoxyethylene)
2B2		poly(oxy-1,2-ethanediylthio-1,2-ethanediyl)	poli(oxietiléntioetilén) poly(oxyethylenethioethylene)
2B3		poly[imino(1,6-dioxo-1,6-hexanediyl)imino-1,6-hexanediyl] ^b	poli(iminoadipoiliminohexán-1,6-diil) poly(iminoadipoyliminohexane-1,6-diyl)

^a E jegyzetben használt CAS nómenklátúra az úgynevezett „9CI nómenklátúra”, melyet a Ninth (kilencedik) Collective Index által felölelt időszak kezdetekor vezettek be (1972). Az alkalmazás okait a Ninth Collective *Index Guide*-ben és egy folyóiratcikkben⁷ ismertették.

Mivel a folyamatnak ez a része szükségképpen feltételezi az alegységek nevének ismeretét, ezek hosszú listája segítséget jelentene azok számára, akik nem ismerik azokat. Ez azonban nyilvánvalóan megoldhatatlan e helyen, vagyis ahogy korábban jeleztük, egy bevezető és korántsem teljes áttekintés keretei között. Az iránymutatás kedvéért csak néhány példát mutatunk be a 7. táblázatban. A CAS közölt egy nagyobb (de mégsem teljes) listát,^{1c} melynek számos tagja felhasználható az IAE nómenklátúrában az alegységek elnevezésére. Felhívjuk a figyelmet a 7. táblázat két lényeges pontjára: (1) egyes kétszeres szubsztituens csoportok CAS és IUPAC neve megegyezik, míg mások különböznek (hasonlítsa össze a 1–11 sorokat); (2) a CAS, szemben a IUPAC-kal, felhagyott a két vagy több alegységet tartalmazó elemek triviális neveinek használatával,⁸ (hasonlítsa össze a 12–14 sorokat).

7. táblázat: Gyakran előforduló kétértékű szubsztituens csoportok CAS 9CI és IUPAC elnevezéseinek összehasonlítása

Példa szám	Szerkezet	Polimer csoport neve CAS szerint	Polimer csoport magyar neve IUPAC szerint angol neve
1	-O-	oxy	oxi oxy
2	-S-	thio	tio thio
3	-NH-	imino	imino imino
4	-N=	nitriilo	nitriilo nitriilo
5	-CH ₂ -	methylene	metilén methylene
6	-CH=	methylidyne	metilidin methylidyne
7	-CH ₂ -CH ₂ -	1,2-ethanediyl	etilén ethylene
8	-CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	1,3-propanediyl	propán-1,3-diil propane-1,3-diyl
9	-CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₂ -	1,4-butanediyl	bután-1,4-diil butane-1,4-diyl
10	-CH=CH-	1,2-ethenediyl	vinilén vinylene
11		1,4-phenylene ^a	<i>p</i> -fenilén vagy 1,4-fenilén <i>p</i> -phenylene ^a
12		(1,6-dioxo-1,6-hexanediyl) ^b	adipoil adipoyl ^d
13		carbonyl-1,4-phenylenecarbonyl ^c	tereftaloil terephthaloyl ^{c,d}
14		iminocarbonylimino ⁸	ureilén ureylene ^d

^a A sorozat másik két tagja az 1,2-fenilén (= *o*-fenilén) és az 1,3-fenilén (= *m*-fenilén).

^b A sorozat többi tagjának neve ebből értelemsszerűen származtatható, úgy mint (1,2-dioxo-1,2-etándiil) = oxalil; (1,3-dioxo-1,3-propándiil) = glutaril; stb. Az ezekhez hasonló vegyes (azaz „komplex”) neveket, ha szubsztituenseket is tartalmaznak, zárójelbe kell tenni.

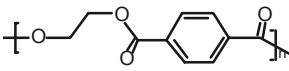
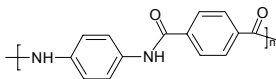
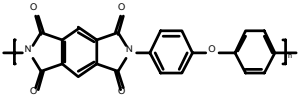
^c A sorozat másik két tagja a karbonil-1,2-fenilénkarbonil (= ftaloil) és a karbonil-1,3-fenilénkarbonil (= izoftaloil).

^d Az olyan IUPAC nevek, mint adipoil, tereftaloil, ureilén, stb. csak akkor megengedettek, ha az így kapott név nem ellenkezik a rendezési szabállyal.

A példák sorát folytatva, a 8. táblázatban néhány kereskedelmi forgalomban kapható polimer helyes IAE reprezentációját és IUPAC nevét adtuk meg. A CAS elnevezést csak ott tüntettük fel, ahol van ilyen. A CAS az acetilén, akril, metakril, etilén és vinil polimerek esetében a forrásalapú reprezentáció elvét követi és ezek szerint nevezi el a származékokat. Így a poli(vinilalkohol) CAS elnevezése (No. 8) etenol, homopolimer; a CAS reprezentáció (CH₂=CH-OH)_x, vagyis forrás- és nem szerkezet-alapú.

8. táblázat: Példák a kereskedelmi forgalomban kapható polimerekre

(lásd még a 2B3. példát a 6. táblázatban)

No.	Ismétlődő Alap Egység	Köznapi név; polimer neve CAS szerint ^a	Tipikus polimer magyar neve IUPAC szerint angol neve
1	$\left[\text{CH}_2 \right]_n$	Polyethylene; Not structured or named as a CRU	poli(metilén) poly(methylene)
2	$\left[\begin{array}{c} \text{Me} \\ \\ \text{CH} - \text{CH}_2 \end{array} \right]_n$	Polypropylene; Not structured or named as a CRU	poli(1-metiletilén) poly(1-methylethylene)
3	$\left[\text{O} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 \right]_n$	poly(oxy-1,2-ethanediyl)	poli(oxietilén) poly(oxyethylene)
4	$\left[\text{O} - (\text{CH}_2)_4 \right]_n$	poly(oxy-1,4-butanediyl)	poli(oxibután-1,4-diil) poly(oxybutane-1,4-diyl)
5		Poly(ethylene terephthalate) (PET); poly(oxy-1,2-ethanediylloxycarbonyl- 1,4-phenylenecarbonyl) ^b	poli(oxietilénoxitereftaloil) poly(oxyethyleneoxyterephthaloyl)
6	$\left[\text{NH} - \text{C}(=\text{O}) - (\text{CH}_2)_5 \right]_n$	Nylon-6; poly[imino(1-oxo-1,6-hexanediyl)]	poli[imino(1-oxohexán-1,6-diil)] poly[imino(1-oxohexane-1,6-diyl)]
7	$\left[\text{S} - \text{C}_6\text{H}_4 \right]_n$	RYTON® PPS ^C poly(phenylene sulfide); poly(thio-1,4-phenylene)	poli(tio- <i>p</i> -fenilén) poly(thio- <i>p</i> -phenylene)
8	$\left[\begin{array}{c} \text{OH} \\ \\ \text{CH} - \text{CH}_2 \end{array} \right]_n$	Elvanol® ^C poly(vinyl alcohol); Not structured or named as a CRU	poli(1-hidroxietilén) poly(1-hydroxyethylene)
9		Kevlar® ^C poly(imino-1,4-phenyleneimino= =carbonyl-1,4-phenylenecarbonyl)	poli(imino- <i>p</i> -fenilénimino- tereftaloil) poly(imino- <i>p</i> -phenylene= =iminoterephthaloyl)
10		Kapton® ^C poly[(5,7-dihidro-1,3,5,7- tetraoxobenzol[1,2- <i>c</i> :4,5- <i>c'</i>]dipyrrole- 2,6(1 <i>H</i> ,3 <i>H</i>)-diyl)-1,4-phenyleneoxy- 1,4-phenylene]	poli[(5,7-dihidro-1,3,5,7- tetraoxobenzol[1,2- <i>c</i> :4,5- <i>c'</i>]= =dipirrol-2,6(1 <i>H</i> ,3 <i>H</i>)-diil)- <i>p</i> - fenilénoksi- <i>p</i> -fenilén] poly[(5,7-dihidro-1,3,5,7- tetraoxobenzol[1,2- <i>c</i> :4,5- <i>c'</i>]= =dipyrrole-2,6(1 <i>H</i> ,3 <i>H</i>)-diyl)- <i>p</i> - phenyleneoxy- <i>p</i> -phenylene]

^a A keresőknek tudniuk kell, hogy a CAS a tárgymutatóban gyakran a forrásalapú és a szerkezeti alapú reprezentációt is szerepelteti az egy- és kétkomponensű kondenzációs polimerek esetében. A két bejegyzésnél általában nincs kereszthivatkozás egymásra (egy kivétel található a *b* megjegyzésben). Így a 9. sorban található poliamidnak két reprezentációja van (forrásalapú és szerkezeti-alapú), mindkettő saját CAS regisztrációs számmal rendelkezik (CAS Registry Number, RN). Ha biztosak akarunk lenni az összes hivatkozás megtalálásában, **mindkét** RN-t meg kell keresni.

^b E polimer esetében szokatlan helyzet áll fenn; IAE regisztrációs száma 25038-59-9, ez az **elsődleges** regisztrációs szám (Preferred Registration Number: PR); de a tárgymutató három további RN-t idéz az alternatív regisztrációk mezőjében [alternate registration (AR) és számos törölt RN-t (deleted RN = DR)]. A PR keresése a tárgymutatóban, majd a sorszám keresése a File CAPlus-ban kiad minden hivatkozást a

PR, AR és DR bejegyzésre. Ha csak a PR-t vagy a PR-t és a három AR-t keressük, *nem* kapjuk meg az összes hivatkozást.

^c Bejegyzett márkanevek: Phillips Petroleum Company (RYTON® PPS); DuPont (Elvanol®, Kevlar®, Kapton®).

A IAE végcsoportokat, ha ismertek, a megfelelő többértékű szubsztituens csoportok elnevezési szabályai szerint adjuk meg, a nevet egy „α-” és „ω-” görög betűvel kiegészítve. A CAS által ajánlott polimer névben, melyet index-névnek hívunk, a végcsoportokat jelölő kifejezéseket a polimer neve után írjuk. Az α- végcsoport az a csoport, mely a IAE bal oldalához kapcsolódik, ha a szerkezetet a fent megadott szabályok szerint rendeztük. Ezt a csoportot írjuk elsőnek, függetlenül az ábécé sorrendtől.^{1a} A 9. táblázatban bemutatunk erre néhány példát.

9 táblázat: Példák végcsoporttal rendelkező IAE-kra

Példa szám	Ismétlődő Alap Egység	Polimer neve CAS szerint	Polimer magyar neve IUPAC szerint angol neve
1	$H-(O-CH_2-CH_2)_n-OH$	α-hydro-ω-hydroxy-poly(oxy-1,2-ethanediyl)	α-hidro-ω-hidroxi-poli(oxietilén) α-hydro-ω-hydroxy-poly(oxyethylene)
2	$Cl-(CH_2)_n-CCl_3$	α-chloro-ω-(trichloromethyl)-poly(methylene)	α-klór-ω-(triklórmetil)-poli(metilén) α-chloro-ω-(trichloromethyl)-poly(methylene)
3	$Cl_3C-(CF_2-CH_2)_n-Cl$	α-(trichloromethyl)-ω-chloro-poly(1,1-difluoro-1,2-ethanediyl)	α-(triklórmetil)-ω-klór-poli(1,1-difluoretilén) α-(trichloromethyl)-ω-chloro-poly(1,1-difluoroethylene)

^a A IUPAC nevekkkel való könnyebb összehasonlíthatóság érdekében a megfordítatlan CAS elnevezéseket adtuk meg. A polimerek CAS index nevei általában fordítottak, pl. poli(oxy-1,2-etándiil), α-hidro-ω-hidroxi-.

Köszönet nyilvánítás

A szerző hálás köszönetét fejezi ki Prof. Dr. Nyitrai Józsefnek, Dr. Rác Györgynek (Budapesti Műszaki Egyetem), és Dr. Földi Andrásnak (Wilmington, Delaware, USA), akik szak- és nyelvtudásukkal hozzájárultak a fordítás sikeréhez.

Hivatkozások

1. CAS: *Index Guide, Appendix IV* (© 1998). Chemical Abstracts Service, 2540 Olentangy River Road, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210: (a) Section 222 – Description of CAS Polymer Indexing Rules; (b) Section 138 – Description of Ring Seniority; (c) Section 294 – Illustrative List of Substituent Prefixes.

CAS: Indexjegyzék, IV. függelék (© 1998). Chemical Abstracts Service, 2540 Olentangy River Road, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210: (a) 222. fejezet – A polimerek indexelésére vonatkozó CAS szabályok leírása; (b) 138. fejezet – A gyűrűk elsőbbsége; (c) 294. fejezet – A szubsztituensek előtagjainak jegyzéke ábrákkal.

2. IUPAC. „Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers”. *Pure Appl. Chem.* **1976**, 48, 373-385. Reprinted as Chapter 5 in „Compendium of Macromolecular Nomenclature” (The Purple Book). Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991.
IUPAC. „Szabályos, lineáris szerves polimerek nevezéktana”. *Pure Appl. Chem.* **1976**, 48, 373-385. V. fejezetként utánn nyomva a „Makromolekuláris nómenklatúra összesítő jegyzéké”-ben. (Lila könyv). Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1991.
3. ACS. „A Structure-Based Nomenclature for Linear Polymers”. *Macromolecules* **1968**, 1, 193-198.
ACS. „Lineáris polimerek szerkezeti nevezéktana”. *Macromolecules* **1968**, 1, 193-198.
4. IUPAC. „Nomenclature of Regular Double-Strand (Ladder and Spiro) Organic Polymers”. *Pure Appl. Chem.* **1993**, 65, 1561-1580.
IUPAC. „Szabályos, kétszálú (Létra és Spiro) szerves polimerek. nevezéktana”. *Pure. Appl. Chem.* **1993**, 65, 1561-1580.
5. A szabályok ily módon, betűkkel történő megkülönböztetése csak a könnyebb áttekinthetőséget szolgálja e jegyzet keretein belül, ilyen azonosítás sem a CAS-ban, sem a IUPAC-ban nem létezik.
6. Panico, R.; Powell, W. H.; Richer, J.-C. „A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993)”. Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993 [ISBN 0-63203-488-2]; see section R-0.1.6.1.
Panico, R.; Powell, W. H.; Richer, J.-C. „Útmutató az IUPAC (1993-ban javasolt) szerves vegyületek nómenklaturájához”. Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1993 [ISBN 0-63203-488-2]; lásd az R-0.1.6.1. fejezetet.
7. Donaldson, N.; Powell, W. H.; Rowlett, R. J.; White, R. W.; Yorka, K. V. „Chemical Abstracts Index Names for Chemical Substances in the Ninth Collective Period (1972-1976)”. *J. Chem. Doc.* **1974**, 14, 3-15.
Donaldson, N.; Powell, W. H.; Rowlett, R. J.; White, R. W.; Yorka, K. V. „CAS jegyzék szerinti nevek a kilencedik gyűjtőperiódusban található vegyi anyagokra (1972-1976)”. *J. Chem. Doc.* **1974**, 14, 3-15.
8. A 294. fejezetben (lásd az 1c. hivatkozást) található összetett vagy „komplex” nevek közül néhányat a szubsztituens csoportok kettőzésének céljából alkottak a szubsztitúciós nómenklatúra keretein belül, és nem azért, hogy IAE alegységek sorozatának leírására alkalmazzák azokat; például a -NHCONH-molekularész neve (karbonildiimino) használatára olyan nevek esetén kerül sor, mint pl. a (karbonildiimino)-dicetsav. Ezt a nevet azonban semmi esetre sem lehet használni egy IAE-ban található -NH-C(=O)-NH- sorozat esetén. Emiatt a 294. fejezetből átvett nevek csak kellő körültekintéssel használhatók.

* Levélcím: E. S. Wilks, CR&DD, Barley Mill Plaza P-14/1288,
E. I. du Pont de Nemours and Co. (Inc.), P. O. Box 80014, Wilmington, DE 19880-0014.
Andrew P. Foldi, C&C Consultants, 2833 W. Oakland Drive, Wilmington, DE 19808-242233.

Ezen publikációt az Amerikai Kémiai Társaság (American Chemical Society) engedélyezte.

Acknowledgments

The author thanks Dr. Andrew P. Foldi, Wilmington, Delaware, USA, and Dr. József Nyitrai and Dr. György Rácz in Hungary for expertise with Hungarian technical names and phrases, and for the proofreading of the text.