

## ZÁKLADNÍ DEFINICE TERMÍNŮ VZTAHUJÍCÍCH SE K POLYMERŮM

Tento text je českou verzí dokumentu Mezinárodní unie pro čistou a užitou chemii (IUPAC) z roku 1974†. Jako svůj první příspěvek ke zpřesnění a případnému dotvoření české nomenklatury a terminologie v oblasti polymerů jej předkládá Česká komise pro makromolekulární nomenklaturu, ustavená z popudu vědeckého kolegia chemie ČSAV††.

Hlavní zásadou při přípravě české verze bylo neměnit při převodu smysl originálu, zejména u definic. Nedoplňovali jsme také některé základní termíny, které nejsou v původním dokumentu definovány. Chceme zdůraznit, že – jak se praví v úvodu dokumentu – definice jsou nutně idealizované a nemohou plně postihnout všechny odstíny vlastností vyskytující se u skutečných polymerů. Pokud existuje pro daný termín více užívaných českých ekvivalentů, byla dána přednost tomu, který má blíže k mezinárodnímu termínu (např. polymerizace, nikoliv polymerace).

Některé zde uvedené termíny jsou obsaženy také v normě Plastikářské a gumárenské názvosloví (ČSN 640 001), určené pro aplikovanou oblast a vycházející z doporučení Mezinárodní normalizační organizace (ISO). Odlišné východisko vedlo k rozdílům, někde i zásadním, ve významu některých termínů definovaných v obou dokumentech; jde zejména o termíny polymerizace (2.2), blokovaná polymerizace (3.21) a adiční polymerizace (3.29). Na rozdíly upozorňujeme na příslušných místech textu poznámkami pod čarou (poznámky pod čarou převzaté z originálního dokumentu budou označovány hvězdičkou, poznámky české komise křížkem).

### Předmluva

S rozvojem vědy o polymerech získaly v posledních desetiletích na důležitosti pojmy odvozené ze struktury. V důsledku toho je třeba zpřesnit řadu základních definic.

† Basic definitions of terms relating to polymers, Pure Appl. Chem. 40, 479 (1974).

†† Komise pracovala při přípravě dokumentu v tomto složení: M. Beneš, P. Čefelín, J. Kálal, P. Kratochvíl, M. Kučera, B. Meissner, J. Pouchlý, J. Zachoval.

V předloženém dokumentu\* jsou novelizovány části zpráv z r. 1952 a pozdějších, vydaných nomenklaturní subkomisí při komisi IUPAC pro makromolekuly<sup>1</sup>, a zprávy nynější komise IUPAC<sup>2</sup>.

Dokument má sloužit potřebám těch, kdo pracují v základních oblastech vědy o polymerech, i když jsme si vědomi, že základní a aplikovaná věda o polymerech se do značné míry překrývají. Pokud jde o definice v oboru plastů, odkazujeme čtenáře na doporučení ISO<sup>3</sup>.

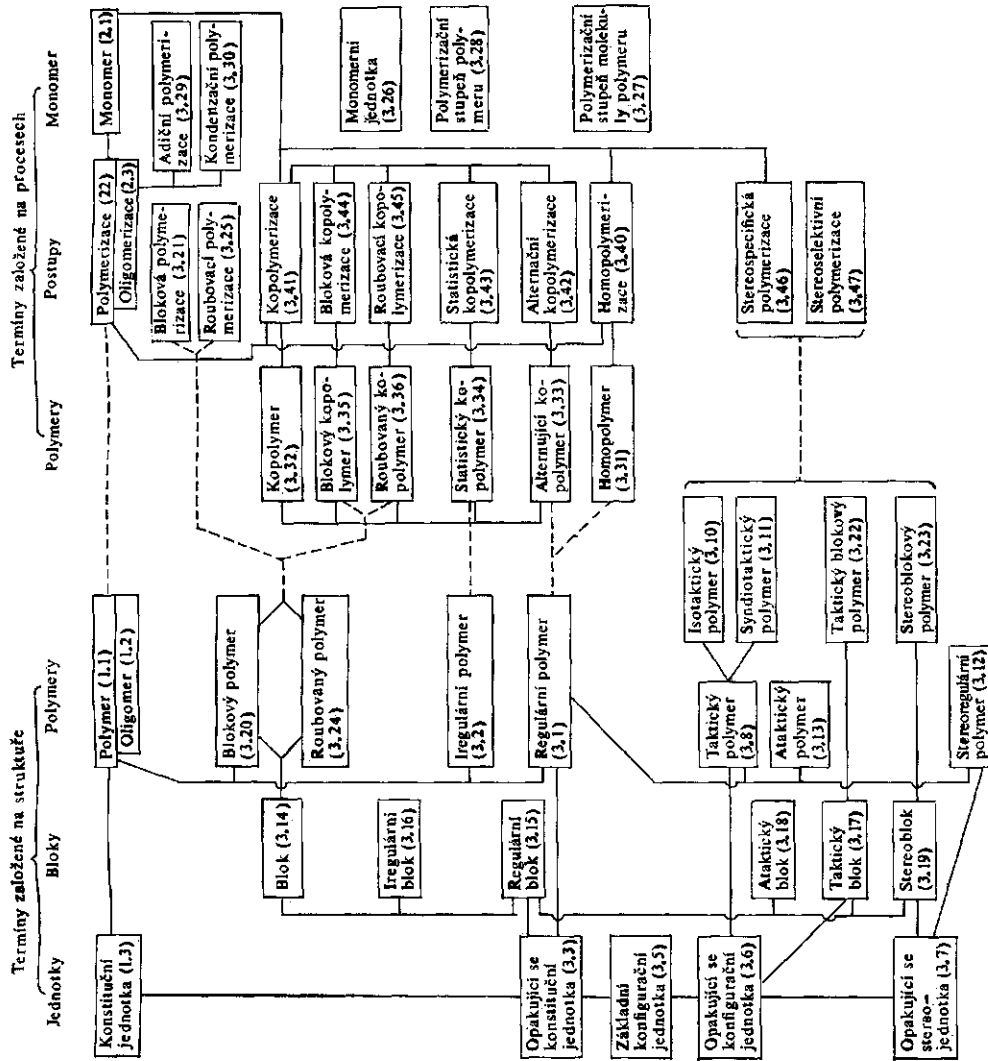
Mají-li být pojmy vyjasněny, je nutné použít idealizovaných definic. Přitom ovšem nelze nevidět reálnou situaci: Skutečné polymery se více méně odchyľují od ideální představy jak na molekulární, tak na makroskopické úrovni. Tyto odchylky se v idealizovaných definicích zanedbávají. Nicméně definice zde uvedené platí i pro převládající strukturální rysy reálných molekul polymerů.

V dokumentu jsou podány dva rozsáhlé soubory definic. Definice prvního typu vycházejí ze struktury makromolekul a budeme je nazývat „strukturální“. Definice druhého typu jsou založeny na procesech, jimiž polymerní látky vznikají, a tyto definice budeme zkráceně nazývat „procesní“. Definice polymeru, jakožto primární definice, je odvozena ze struktury. Soubor procesních definic je spojen s primární definicí polymeru prostřednictvím (sekundárních) definic termínů polymerizace a monomer. Všechny ostatní definice jsou od těchto termínů odvozeny.

---

\* Během přípravy tohoto dokumentu se práce Komise pro makromolekulární nomenklaturu při Makromolekulární divizi IUPAC účastnili K. L. Loening (předseda), P. Corradini, L. C. Cross, R. B. Fox, V. V. Koršak, N. A. Platé, W. Ring, G. J. Smets, C. Suhr a T. Tsuruta, jako pozorovatelé N. Bikales, W. E. Cohn, G. Kline, C. Liébecq a O. Wichterle.

Vzájemné vztahy mezi základními definicemi názvů vztahujících se k polymerům



Termín	Definice
<b>1 - Primární definice</b>	
1.1 Polymer	Látka sestávající z molekul charakterizovaných mnohonásobným opakováním jedného nebo více druhů atomů nebo skupin atomů (konstitučních jednotek, viz definici 1.3) navzájem spojených v tak velkém počtu, že existuje řada vlastností, které se znatelně nezmění přičáním nebo odstraněním jedné nebo několika konstitučních jednotek. (strukturní)
1.2 Oligomer	Látka sestávající z molekul, které obsahují několik atomů nebo skupin atomů (konstitučních jednotek) jednoho nebo více druhů, opakovaně spojených mezi sebou. Fyzikální vlastnosti oligomeru se změní, přidáme-li k molekule nebo z ní odstraníme jednu nebo více konstitučních jednotek. (strukturní)
1.3 Konstituční jednotka	Atom nebo skupina atomů, které jsou přítomné v řetězci polymeru nebo oligomerní molekuly. (strukturní)
<b>2 - Sekundární definice</b>	
2.1 Monomer	Sloučenina sestávající z molekul, z nichž každá může poskytnout jednu nebo více konstitučních jednotek. (procesní)
2.2 Polymerizace (polymerace)†	Proces, jímž se monomer nebo směs monomerů přeměňuje na polymer. (procesní)
2.3 Oligomerizace (oligomerace)	Proces, jímž se monomer nebo směs monomerů přeměňuje na oligomer. (procesní)
<b>3 - Odvozené definice</b>	
3.1 Regulární (pravidelný) polymer	Polymer, jehož molekuly mohou být popsány jen jedním druhem konstituční jednotky v jediném sekvencním uspořádání. (strukturní)
3.2 Irregularní (nepravidelný) polymer	Polymer, jehož molekuly nemohou být popsány jen jedním druhem konstituční jednotky v jediném sekvencním uspořádání. (strukturní)
3.3 Opakující se konstituční jednotka	Nejmenší konstituční jednotka, jejímž opakováním je popsán regulární polymer. (strukturní)

- 3.4 Konfigurační jednotka s jedním nebo více místy definované stereoisomerie.  
(strukturní)
- 3.5 Základní konfigurační jednotka  
Opakující se konstituční jednotka, jejíž konfigurace je definována alespoň v jednom místě stereoisomerie hlavního řetězce polymerní molekuly.  
Poznámka 1: V regulárním polymeru odpovídá základní konfigurační jednotka opakující se konstituční jednotce.  
Poznámka 2: Dvě základní konfigurační jednotky se nazývají enantiomerní, jsou-li navzájem zrcadlovými obrazy v rovině, ve které leží vazby hlavního řetězce.  
(strukturní)
- 3.6 Opakující se konfigurační jednotka  
Nejmenší soubor sestávající z jedné, dvou nebo více za sebou umístěných základních konfiguračních jednotek, jímž je určeno opakování konfigurace v jednom nebo více místech stereoisomerie hlavního řetězce polymerní molekuly.  
(strukturní)
- 3.7 Opakující se stereojednotka  
Opakující se konfigurační jednotka s definovaným uspořádáním ve všech místech stereoisomerie hlavního řetězce polymerní molekuly.  
(strukturní)
- 3.8 Taktický polymer  
Regulární polymer, jehož molekuly mohou být popsány jen jedním druhem opakující se konfigurační jednotky v jediném sekvenčním uspořádání.  
(strukturní)
- 3.9 Takticita  
Pořádek v posloupnosti opakujících se konfiguračních jednotek hlavního řetězce polymerní molekuly.  
(strukturní)
- 3.10 Isotaktický polymer  
Regulární polymer, jehož molekuly mohou být popsány jen jedním druhem základní konfigurační jednotky (s chirálními nebo prochirálními atomy v hlavním řetězci) v jediném sekvenčním uspořádání.†  
Poznámka: V isotaktické polymerní molekule je opakující se konfigurační jednotka totožná se základní konfigurační jednotkou.  
(strukturní)

† Doporučujeme používat termín „polymerizace“, protože je odvozen od mezinárodně používaného názvu. Vžitý termín „polymerace“ považujeme za přípustný, ale méně vhodný.

Polymerizace je chápána jako obecný pojem zahrnující jak adiční, tak kondensační polymerizaci (viz definice 3.29 a 3.30). Definice polymerizace v ČSN 640 001 odpovídá definici adiční polymerizace v tomto dokumentu.

† Definice chiralita a prochiralita lze nalézt v článku Nomenklatura pravidla organické chemie Mezinárodní unie pro čistou a užitou chemii (Pravidla IUPAC, oddíl E): Základní stereochemická nomenklatura, Chem. listy 65, 823 (1971), odstavce E-5.1 a E-5.12.

Termín	Definice
3.11 Syndiotaktický polymer	Regulární polymer, jehož molekuly mohou být popsány pravidelným střídáním enantiomerních základních konfiguračních jednotek. Poznámka: V syndiotaktickém polymeru sestává opakující se konfigurační jednotka ze dvou enantiomerních základních konfiguračních jednotek. (strukturní)
3.12 Stereoregulární polymer	Regulární polymer, jehož molekuly mohou být popsány jen jedním druhem opakující se stereojednotky v jediném sekvenčním uspořádání. (strukturní)
3.13 Ataktický polymer	Regulární polymer, jehož molekuly mají nahodilě rozmístění stejných počtů možných základních konfiguračních jednotek. (strukturní)
3.14 Blok	Část polymerní molekuly, obsahující mnoho konstitučních jednotek a vyznačující se alespoň jednou konstituční nebo konfigurační vlastností, kterou nemají sousední části. Poznámka: Definite, které se vztahují k polymeru, je možné použít také u bloku. (strukturní)
3.15 Regulární (pravidelný) blok	Blok, který lze popsat jen jedním druhem opakující se konstituční jednotky v jediném sekvenčním uspořádání. (strukturní)
3.16 Iregulární (nepravidelný) blok	Blok, který nelze popsat jen jedním druhem opakující se konstituční jednotky v jediném sekvenčním uspořádání. (strukturní)
3.17 Taktický blok	Regulární blok, který je možné popsat jen jedním druhem opakující se konfigurační jednotky v jediném sekvenčním uspořádání. (strukturní)
3.18 Ataktický blok	Regulární blok, který má nahodilě rozmístění stejných počtů možných základních konfiguračních jednotek. (strukturní)
3.19 Stereoblokt	Regulární blok, který je možné popsat jedním druhem opakující se stereojednotky v jediném sekvenčním uspořádání. (strukturní)

- 3.20 Blokový polymer  
Polymer, jehož molekuly se skládají z lineárně spojených bloků. Bloky jsou spojeny přímo nebo pomocí konstituční jednotky, která není součástí bloků.
- 3.21 Bloková polymerizace  
Polymerizace, při které vzniká blokový polymer††  
(procesní)
- 3.22 Taktický blokový polymer  
Polymer, jehož molekuly jsou složeny z lineárně spojených taktických bloků.  
(strukturní)
- 3.23 Stereoblokový polymer  
Polymer, jehož molekuly jsou složeny z lineárně spojených stereobloků.  
(strukturní)
- 3.24 Roubovaný polymer  
Polymer, jehož molekuly obsahují jeden nebo více druhů bloků připojených k hlavnímu řetězci jako boční řetězce, přičemž tyto boční řetězce se vyznačují, s výjimkou spojovacích bodů, konstitučními nebo konfiguračními vlastnostmi odlišnými od konstitučních jednotek hlavního řetězce.  
(strukturní)
- 3.25 Roubovací polymerizace  
Polymerizace, při které vzniká roubovaný polymer.  
(procesní)
- 3.26 Monomerní jednotka  
Mer  
Největší konstituční jednotka vzniklá z jediné monomerní molekuly v průběhu polymerizace.  
(procesní)
- 3.27 Polymerizační stupeň  
(stupeň polymerizace)  
polymerní molekuly  
Počet monomerních jednotek v polymerní molekule.  
(procesní)
- 3.28 Polymerizační stupeň (stupeň polymerizace) polymeru  
Průměrná hodnota polymerizačního stupně molekul polymeru.  
(procesní)  
Poznámka: Metoda průměrování musí být uvedena; např. početní průměr polymerizačního stupně.  
(procesní)

† Název „stereoblok“ odpovídá mezinárodnímu termínu doporučenému v originále dokumentu; s termínem 3.12 (stereoregulární polymer) by však byl konzistentní termín „stereoregulární blok“.

†† V české literatuře se občas používá termínů polymerizace v bloku nebo bloková polymerizace pro polymerizační reakce probíhající v kapalně fázi tvořené v podstatě samotným monomerem, tj. v nepřítomnosti disperzního prostředí. Termínem blokový polymer se pak někdy označuje produkt takovéto reakce. Používání všech tří termínů v popsaném smyslu je nevhodné a vede k nedorozumění. Pro uvedené pojmy doporučujeme používat jednoznačných, byť delších opisů jako např. „polymerizace v nepřítomnosti rozpouštědla“ nebo „polymer připravený v nepřítomnosti rozpouštědla“.

Termín	Definice
3.29 Adiční polymerizace (polyadice)	Polymerizace opakovaným adičním procesem.† (procesní)
3.30 Kondenzační polymerizace; polykondenzace	Polymerizace opakovaným kondenzačním procesem (tj. prováděná odštěpováním jednotlivých molekul). (procesní)
3.31 Homopolymer	Polymer odvozený z jednoho druhu monomeru. (procesní)
3.32 Kopolymer	Polymer odvozený z více než jednoho druhu monomeru. (procesní)
3.33 Alternující kopolymer	Kopolymer, v jehož molekulách se pravidelně střídají dva druhy monomerních jednotek. (procesní)
3.34 Statistický kopolymer	Kopolymer, v jehož molekulách se nahodile střídá dva nebo více druhů monomerních jednotek. (procesní)
3.35 Blokový kopolymer	Blokový polymer odvozený z více než jednoho druhu monomeru. (procesní)
3.36 Roubovaný kopolymer	Roubovaný polymer odvozený z více než jednoho druhu monomeru. (procesní)
3.37 Binární kopolymer	Polymer odvozený ze dvou druhů monomeru. (procesní)
3.38 Ternární kopolymer	Polymer odvozený ze tří druhů monomeru. (procesní)



3.39	Kvaternární kopolymer	Polymer odvozený ze čtyř druhů monomerů. (procesní)
3.40	Homopolymerizace	Polymerizace, při které se tvoří homopolymer. (procesní)
3.41	Kopolymerizace	Polymerizace, při které se tvoří kopolymer. (procesní)
3.42	Alternanční kopolymerizace	Polymerizace, při které se tvoří alternující kopolymer. (procesní)
3.43	Statistická kopolymerizace	Polymerizace, při které se tvoří statistický kopolymer. (procesní)
3.44	Bloková kopolymerizace	Polymerizace, při které se tvoří blokový kopolymer.††
3.45	Roubovací kopolymerizace	Polymerizace, při které se tvoří roubovaný kopolymer. (procesní)
3.46	Stereospecifická polymerizace	Polymerizace, při které se tvoří taktický polymer. (procesní)
3.47	Stereoselektivní polymerizace	Polymerizace, při které se tvoří polymerní molekula ze směsi molekul stereoizomerního monomeru tak, že se včlení pouze jeden stereoizomer.††† (procesní)

† Definice tedy zahrnuje nejen vznik polymeru reakcí nenasycených nebo cyklických sloučenin s molekulami obsahujícími atomy aktivního vodíku, ale také polymerizaci monomerů s násobnými vazbami, případně monomerů cyklických.

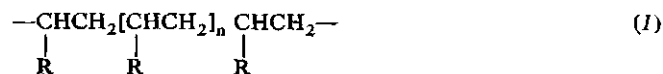
†† Pro tento termín platí obdobná poznámka jako pro termín 3.21.

††† Redefinice termínu stereoselektivní polymerizace je předmětem připravovaného dokumentu IUPAC.

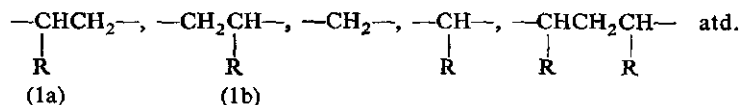
## PŘÍKLADY

### Konstituční jednotka

Polymerní řetězec (1)



obsahuje tyto *konstituční jednotky\**



Z nich pouze první dvě (1a a 1b) jsou nejmenší konstituční jednotky, které úplně popisují uvedený polymerní řetězec.

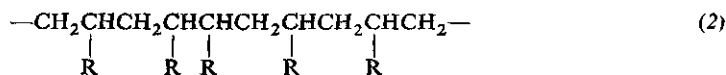
Opakující se konstituční jednotka

Regulární polymer

Obě konstituční jednotky (1a) a (1b) jsou *opakující se konstituční jednotky*. Polymer, jehož molekuly je možné popsat vzorcem (1), je *regulární polymer*.

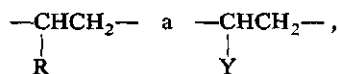
Iregulární polymer

Úsek polymerní molekuly (2)

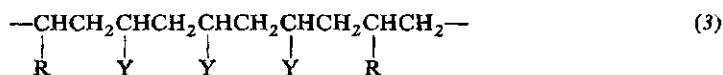


není možné popsat s použitím jenom jedné konstituční jednotky, jako je (1a) nebo (1b), v jediném sekvenčním uspořádání. Polymer, v jehož molekulách se konstituční jednotky (1a) a (1b) nahodile střídají, jako je tomu ve vzorci (2), je *iregulární polymer*.

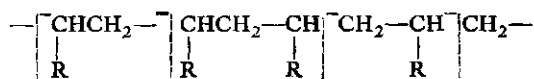
Polymer, v jehož molekulách se nahodile střídají konstituční jednotky



obsahuje úseky řetězce typu (3):

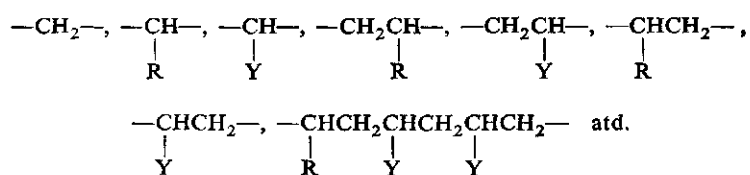


\* V tomto dokumentu je použito dohody, podle které se polymerní struktury (a příslušné konstituční a konfigurační jednotky) orientují zleva doprava. Proto je například nutno ty konstituční jednotky, které jsou ve vzorci



vyznačeny závorkami, považovat za rozdílné, a to bez ohledu na to, že by opakováním každé z nich vznikl tentýž regulární polymer.

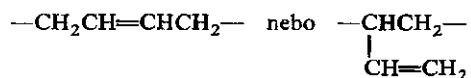
V tomto úseku jsou obsaženy konstituční jednotky



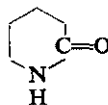
Konstituci úseku řetězce (3) není možné popsat žádnou z uvedených konstitučních jednotek samotnou. Polymerní molekuly obsahující úseky typu (3) jsou proto rovněž molekulami iregulárního polymeru.

Monomer

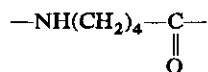
Z molekuly monomeru  $\text{CH}_2=\text{CHCH}=\text{CH}_2$  mohou vzniknout dvě konstituční jednotky:



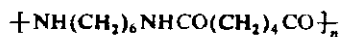
Z molekuly monomeru  $\text{CH}_2\text{N}_2$  může vzniknout konstituční jednotka  $-\text{CH}_2-$ .  
Z molekuly monomeru



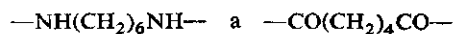
může vzniknout konstituční jednotka



Z molekul monomerů  $\text{H}_2\text{N}(\text{CH}_2)_6\text{NH}_2$  a  $\text{ClCO}(\text{CH}_2)_4\text{COCl}$  může kondenzačním procesem vzniknout molekula regulárního polymeru



která obsahuje konstituční jednotky

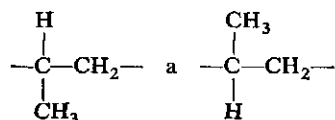


Základní konfigurační jednotka

V molekule regulárního polymeru



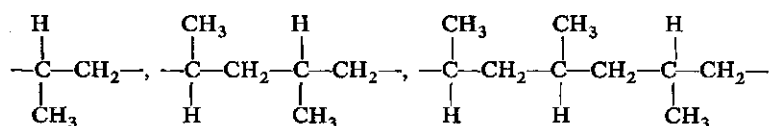
je opakující se konstituční jednotkou skupina  $-\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2-$ . Základní konfigurační jednotky jsou\*



Tyto dvě základní konfigurační jednotky jsou navzájem enantiomerní.

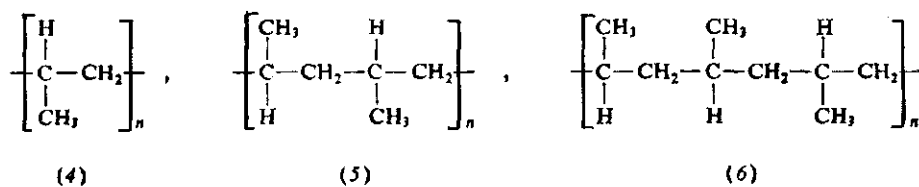
Opakující se stereojednotka

V stereoregulárním poly(propylenu) se mohou vyskytovat např. tyto opakující se stereojednotky:



Stereoregulární polymer

Příslušné stereoregulární polymery jsou:



(isotaktický  
polymer)

(syndiotaktický  
polymer)

Opakující se konfigurační jednotka

Taktický polymer

Isotaktický polymer

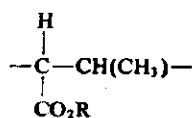
Syndiotaktický polymer

Je-li v každé opakující se konstituční jednotce polymeru  $-\{\text{CH}(\text{CO}_2\text{R})\text{CH}(\text{CH}_3)\}_n-$

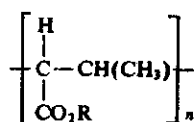
\* Při znázorňování konfigurací jsou vodorovné vazby pod rovinou papíru a svislé vazby nad ní. [Viz IUPAC Rules on Fundamental Stereochemistry, J. Org. Chem. 35, 2849 (1970), Rule E-7.1, note 2. Odpovídající český dokument: Základní stereochemická nomenklatura, Chem. listy 65, 823 (1971).] Vazby hlavního řetězce polymerních molekul jsou zakreslovány jako vodorovné. Vzorci základní konfigurační jednotky, opakující se konfigurační jednotky a opakující se stereojednotky poskytují informaci o *relativních* konfiguracích, pokud není výslovně uvedeno jinak.

Není-li ve vzorci uvedena některá z vodorovných nebo svislých vazeb u chirálního nebo prochirálního uhlíkového atomu, anebo není-li vyznačena konfigurace *cis* či *trans*, znamená to, že konfigurace příslušného místa stereoisomerie není známa.

definováno pouze jedno místo stereoisomerie, jako je tomu například ve vzorci (7):



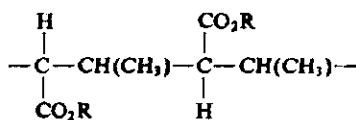
(7)



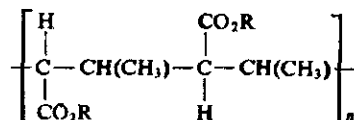
(8)

pak (7) představuje *opakující se konfigurační jednotku* a příslušný polymer (8) je *taktický (isotaktický) polymer*.

Jiným příkladem opakující se konfigurační jednotky je (9):

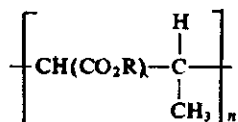


(9)

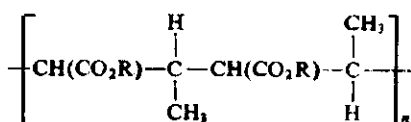


(10)

a příslušný polymer (10) je *taktický (syndiotaktický) polymer*. Polymery uvedené v příkladech (8) a (10) nejsou stereoregulární, protože konfigurace místa stereoisomerie  $-\text{CH}(\text{CH}_3)-$  není definována. Podobně nejsou stereoregulární ani polymery (11) a (12)



(11)



(12)

protože nejsou k dispozici informace o místě stereoisomerie  $-\text{CH}(\text{CO}_2\text{R})-$ . Polymery uvedené v příkladech (4), (5), (6), (8), (10), (11) a (12) jsou *taktické polymery*. Stereoregulární polymer je vždy taktický, ale taktický polymer není vždy stereoregulární, protože u taktického polymeru nemusí být definována všechna místa stereoisomerie.

**Ataktický polymer**

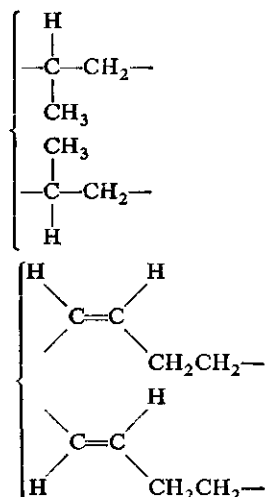
V regulárním polymeru, který je *ataktický*, se nahodile střídají stejné počty různých možných základních konfiguračních jednotek příslušejících opakující se konstituční jednotce.

Některé příklady:

Opakující se konstituční jednotka



Základní konfigurační jednotka



Blok

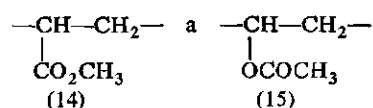
Regulární blok

Blokový polymer

V polymerní molekule



označují symboly  $\text{A}_k$ ,  $\text{B}_1$ ,  $\text{A}_m$  a  $\text{B}_n$  *bloky*. Jednotlivé bloky jsou *regulární*. V molekule blokového polymeru (13) mohou A a B být



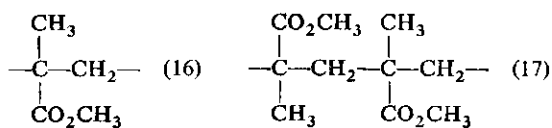
Blokový kopolymer

Blokový polymer, jehož molekuly jsou složeny z jednotek (14) a (15), je *blokový kopolymer*, protože konstituční jednotky (14) a (15) vznikly z různých monomerů.

Taktický blok

Stereoblok

V molekule blokového polymeru (13) A a B mohou být



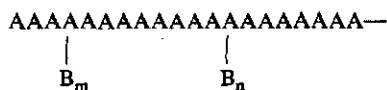
Tyto bloky jsou *stereobloky*. Blokový polymer, jehož molekuly jsou složeny z jedno-

tek (16) a (17), není blokový kopolymer, protože konstituční jednotky (16) a (17) vznikly z téhož monomeru.

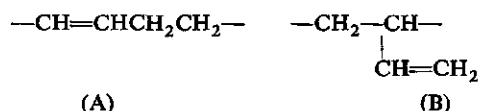
Roubovaný polymer

Roubovaný kopolymer

V molekule roubovaného polymeru



jsou  $B_m$ ,  $B_n$  i řetězec složený z jednotek A regulární bloky. Blok složený z jednotek A je hlavní řetězec, bloky  $B_m$  a  $B_n$  jsou postranní řetězce – rouby. Jednotky —A— jsou spojovací body a pokládají se za součást hlavního řetězce. Jsou-li jednotky A a B odvozeny od téhož monomeru, jako například



pak polymer je roubovaný polymer. Polymer, jehož molekuly jsou složeny z jednotek A = (14) a B = (15), je roubovaný kopolymer.

#### Literatura

1. a. IUPAC: J. Polym. Sci. 8, 257 (1952).
- b. Huggins M. L., Natta G., Desreux V., Mark H.: J. Polym. Sci. 56, 153 (1962).
- c. Huggins M. L., Natta G., Desreux V., Mark H.: Makromol. Chem. 82, 1 (1965), též Pure Appl. Chem. 12, 645 (1966).
- d. Huggins M. L., Corradini P., Desreux V., Kratky O., Mark H.: J. Polym. Sci., Part B. Polymer Letters 6, 257 (1968).
2. IUPAC Information Bulletin, Appendices on Tentative Nomenclature, Symbols, Units, and Standards, No 13 (February 1971).
3. ISO Recommendation R 472 (1969).

#### Basic Definitions of Terms Related to Polymers

The paper is a Czech version of the document of the International Union for Pure and Applied Chemistry (IUPAC): Basic definitions of terms relating to polymers, Pure Appl. Chem. 40, 479 (1974).