

Nomenklaturbericht über sterische Anordnung in Hochpolymeren

Von M. L. HUGGINS, G. NATTA, V. DESREUX und H. MARK *

(Eingegangen am 1. November 1964)

ZUSAMMENFASSUNG:

Der vorliegende Bericht befaßt sich mit der Klassifizierung und Benennung von Hochpolymeren, die aus sterisch regelmäßig gebauten Makromolekülen bestehen, und mit verwandten Nomenklaturproblemen. Er wurde von der Kommission für Makromoleküle der internationalen Union für reine und angewandte Chemie endgültig angenommen und empfohlen.

SUMMARY:

This report deals with the classification and naming of high polymers composed of molecules possessing steric regularity, and with related problems of nomenclature. It has been finally accepted and recommended by the Commission on Macromolecules of the International Union of Pure and Applied Chemistry.

Dieser Bericht ist eine erweiterte Fassung des Nomenklaturberichtes auf dem Gebiet der Makromoleküle¹⁾, der von der International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) am 15. September 1951 gebilligt wurde. Er stützt sich zu einem beträchtlichen Teil auf Vorschläge von NATTA und DANUSSO²⁾ sowie von NATTA, FARINA und PERALDO³⁾.

Allgemeine Grundlagen und Definitionen

Es handelt sich hier um die systematische Beschreibung und Bezeichnung sterischer Regelmäßigkeiten in Hochpolymeren, besonders in line-

*) Die Autoren bilden ein Unterkomitee der Kommission für Makromoleküle der IUPAC. Dieser Bericht erschien in englischer Sprache in *J. Polymer Sci.* **56** (1962) 153; er wurde von der Kommission am 28. Juli 1961 auf die Dauer eines Jahres zur Probe und am 2. Juli 1963 endgültig angenommen. Die Übersetzung enthält eine Reihe von Änderungen, die von den Autoren im Mai 1963 vorgeschlagen und ebenfalls am 2. Juli 1963 angenommen, aber noch nicht publiziert wurden.

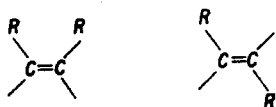
Die Übersetzung in die deutsche Sprache erfolgte von H. SCHNECKO und W. KERN, Organisch-chemisches Institut der Universität Mainz, BRD.

ren Kopf-Schwanz-Polymeren. Unterschiede in der Konformation molekularer Strukturen, die sich durch bloße Drehung um Einfachbindungen ineinander überführen lassen, bleiben unberücksichtigt. Darüber hinaus werden der hier vorgeschlagenen Terminologie Idealstrukturen ohne chemische Unregelmäßigkeiten und ohne Berücksichtigung der Kettenenden zugrunde gelegt; es versteht sich jedoch von selbst, daß diese Begriffe auf reale Polymere Anwendung finden können, die den angegebenen Definitionen und Regeln im wesentlichen entsprechen.

Bestimmte Strukturtypen in einem Kettenmolekül können verschiedenartige sterische Anordnungen haben; daher der Begriff der Isomerie. Zum Beispiel tritt Stereoisomerie auf, wenn 2 verschiedenartige Atome oder Gruppen (R, R') an ein Kettenatom (C) (tetraedrisch) gebunden sind, unter der Voraussetzung, daß die beiden Teile der Hauptkette, die außerdem noch an dieses Kettenatom gebunden sind, strukturell nicht gleichwertig sind; Unterschiede in der Konformation bleiben dabei unberücksichtigt:



In ähnlicher Weise kann *cis-trans*-Isomerie stets dort auftreten, wo eine C=C-Doppelbindung in der Kette eingebaut ist:



Andere Arten von Isomerie treten bei Ringstrukturen in der Kette auf. Die gleichen Isomeriemöglichkeiten bestehen natürlich auch bei entsprechenden Strukturanordnungen in den Seitenketten; die Einteilung sterisch regelmäßig gebauter Polymerer in diesem Bericht bezieht sich aber nur auf die Stereoisomerie in den Hauptketten.

Asymmetrische Kettenatome, Doppelbindungen, Ringe entsprechender Art usw. kann man als *Zentren sterischer Isomerie* oder *Stereoisomeriezentren* bezeichnen. Der konventionelle Grundbaustein des Polymeren (definiert ohne Berücksichtigung der sterischen Isomerie) kann ein oder mehr Stereoisomeriezentren in der Kette enthalten.

Die sterische Ordnung in der Hauptkette kann auch als *Taktizität* bezeichnet werden. Ein *taktisches Polymeres* ist ein Polymeres mit einer geordneten Struktur hinsichtlich der Konfiguration an mindestens einem Stereoisomeriezentrum pro konventionellem Grundbaustein in der Haupt-

kette. Ein *holotaktisches Polymeres* ist ein Polymeres, bei dem eine geordnete Struktur hinsichtlich aller Stereoisomeriezentren der Hauptkette vorliegt. Entsprechend bedeuten *monotaktisch*, *ditaktisch* usw. Ordnungen, bezogen auf 1, 2 usw. Stereoisomeriezentren pro konventionellem Grundbaustein in der Hauptkette.

Ein *ataktisches Polymeres* ist dadurch gekennzeichnet, daß völlige Willkür in der Konfiguration aller Stereoisomeriezentren in der Hauptkette herrscht. Polymere mit einem niedrigen Ordnungsgrad, deren makroskopische Eigenschaften praktisch nicht von denen eines völlig ataktischen Polymeren zu unterscheiden sind, werden gewöhnlich ebenfalls als ataktisch bezeichnet. Die Ausdrücke taktisch, holotaktisch, monotaktisch, ditaktisch, ataktisch ebenso wie *cis*-taktisch, *trans*-taktisch, isotaktisch, syndiotaktisch, di-isotaktisch usw. werden in diesem und auch im nächsten Abschnitt, wo letztere noch näher erklärt werden, für Polymere definiert und benutzt; sie können jedoch auch in entsprechendem Sinne auf Molekülketten, Segmente, Blöcke usw. angewendet werden, schließlich auch auf Reaktionen zur Synthese von Polymeren des angegebenen Typs.

Der allgemeine Ausdruck *stereospezifische Polymerisation* beschreibt die Bildung eines taktischen Polymeren aus Monomeren (z. B. aus Vinylverbindungen), die theoretisch in der Lage sind, Polymere mit Stereoisomeriezentren zu bilden.

Stereoselektive Polymerisation bedeutet die Bildung eines taktischen Polymeren aus einer Mischung stereoisomerer Monomere durch selektive Addition der verschiedenen Typen in regelmäßiger Anordnung an die wachsende Polymerkette.

Einige Arten von taktischen Polymeren

Wenn ein *cis-trans*-Isomeriezentrum im konventionellen Grundbaustein eines Polymeren vorhanden ist, kann man es als *cis*-taktisch bzw. als *trans*-taktisch bezeichnen, vorausgesetzt, daß an allen Doppelbindungen *cis*- oder *trans*-Gruppierungen vorliegen.

Ein isotaktisches Polymeres ist ein taktisches Polymeres, dessen Grundbaustein als Bestandteil der Hauptkette ein C-Atom *) mit 2 verschiede-

*) Hier und an anderen Stellen dieses Berichts steht der Begriff „C-Atom“ als sterisches Isomeriezentrum auch für andere Atome (z.B. Si-Atome), die dem C-Atom sterisch entsprechen.

Dieses C-Atom (oder ein ähnliches Atom) braucht nicht asymmetrisch zu sein. So enthält ein Makromolekül eines idealen isotaktischen Polymeren $(\text{CH}_2\text{CHR})_n$ mit un-

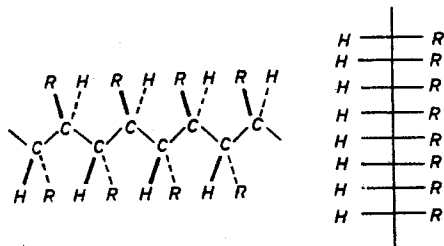
nen seitenständigen Substituenten besitzt; diese sind so angeordnet, daß ein Beobachter, wenn er an den Bindungen der Hauptkette entlang gehen könnte, jedes dieser Kettenatome mit allen seinen Substituenten in gleicher sterischer Anordnung vorfände. (Hier und in den nachfolgenden Definitionen wird H als Substituent gezählt.)

Anders ausgedrückt läßt sich ein *isotaktisches Polymeres* als ein Polymeres definieren, dessen Makromoleküle an entsprechenden Stellen der Grundbausteine ein C-Atom in der Hauptkette mit zwei verschiedenen seitenständigen Substituenten aufweisen; dabei sind diese so festgelegt, daß in der FISCHER-Projektion gleichartige Substituenten in aufeinanderfolgenden Grundbausteinen stets auf derselben Seite der Geraden zu liegen kommen, welche die Hauptkette darstellt.

Es sei bemerkt, daß bei einem isotaktischen Polymeren der konventionelle Grundbaustein und die eigentliche Grundeinheit identisch sind.

Zur Verdeutlichung sind hier Teile der hypothetisch gestreckten Zick-Zack-Kette von 3 isotaktischen Polymeren mit 1, 2 und 3 Kettenatomen pro Grundbaustein abgebildet. R bedeutet in jedem Fall eine Methylgruppe. Die entsprechende FISCHER-Projektion ist ebenfalls angegeben.

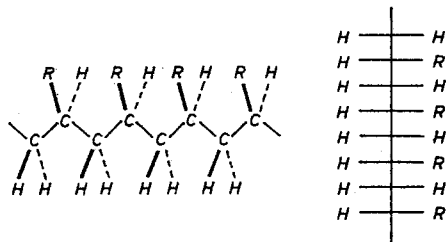
Isotaktisches Polyäthyliden oder *isotaktisches Poly(methyl)methamer*, $it-[CH(CH_3)]_n$:



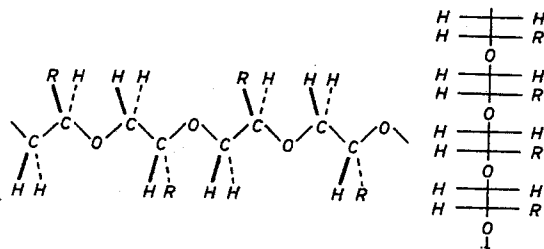
endlicher Kettenlänge kein asymmetrisches C-Atom, da die beiden anhängenden Kettenteile als äquivalent angesehen werden müssen. Wenn man die absolute Konfiguration nach dem Vorschlag von CAHN, INGOLD und PRELOG⁴⁾ definiert, so hat die eine Hälfte der asymmetrischen C-Atome in einem idealen isotaktischen Vinylpolymermolekül *endlicher* Länge die R-Konfiguration, die andere Hälfte hat die S-Konfiguration, vorausgesetzt, daß Unterschiede in den Endgruppen entweder nicht vorhanden sind oder vernachlässigt werden. Nach der Regel dieser Autoren ist die absolute Konfiguration einer Anordnung Xabcd bestimmt durch die räumliche Konfiguration dieser Anordnung. Die Buchstaben a, b, c, d bezeichnen hier Atome oder Gruppen am Zentralatom X, die in der Reihenfolge ihrer Priorität, d.h. nach abnehmender Ordnungszahl der unmittelbar an X gebundenen Atome angeordnet sind. Haben davon 2 die gleiche Ordnungszahl, so ist ihre relative Priorität gegeben durch die Ordnungszahl derjenigen Atome, die an die beiden Atome gebunden sind, usw.

Nomenklaturbericht über sterische Anordnung in Hochpolymeren

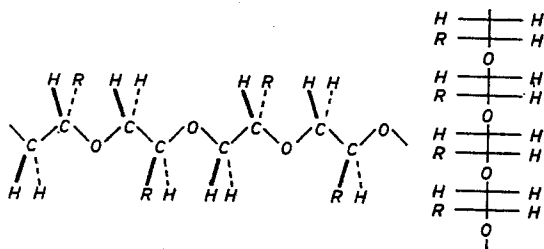
Isotaktisches Polypropylen oder **isotaktisches Poly(methyl)äthamer**, $it\text{-}[\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)]_n$:



Isotaktisches Poly(propylenoxid) oder **isotaktisches Poly(methyl)äthoxamer**, $it\text{-}[\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{O}]_n$:

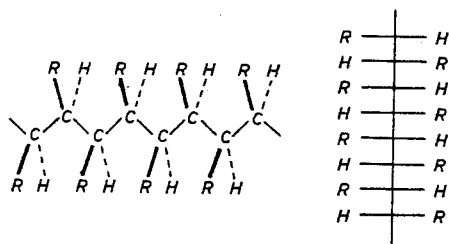


und/oder

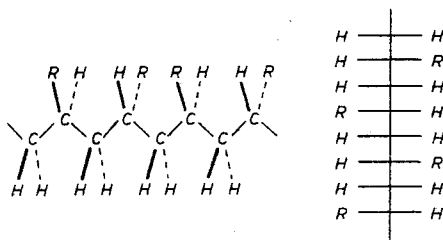


Ein syndiotaktisches Polymeres ist ein taktisches Polymeres, in dem der konventionelle Grundbaustein als Bestandteil der Hauptkette ein C-Atom mit 2 verschiedenen seitenständigen Substituenten besitzt; diese sind so angeordnet, daß einem Beobachter beim Entlanggehen an den Bindungen der Hauptkette stets entgegengesetzte sterische Konfigurationen dieser Kettenatome in aufeinanderfolgenden Grundbausteinen erscheinen. (Die eigentliche Grundeinheit ist daher doppelt so groß wie der konventionelle Grundbaustein); z. B.:

Syndiotaktisches Polyäthyliden oder **syndiotaktisches Poly(methyl)methamer**, $st\text{-}[\text{CH}(\text{CH}_3)]_n$:



Syndiotaktisches Polypropylen oder *syndiotaktisches* Poly(methyl)äthamer, *st*-[CH₂CH(CH₃)]_n:



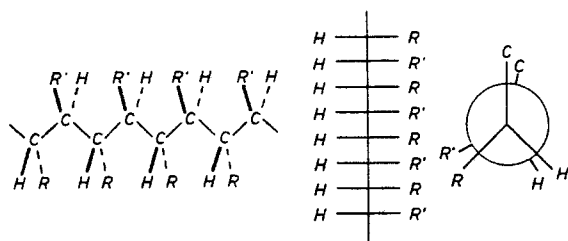
Ein *di-isotaktisches Polymeres* ist ein Polymeres, dessen konventioneller Grundbaustein als Bestandteil der Hauptkette 2 C-Atome besitzt, von denen jedes 2 verschiedene seitenständige Substituenten trägt; hier ist die sterische Anordnung in aufeinanderfolgenden Grundbausteinen derart, daß das Makromolekül isotaktisch ist in bezug auf die Konfiguration entsprechender Kettenatome einer jeden Art, wenn man diese getrennt betrachtet.

Es gibt 2 Arten di-isotaktischer Polymerer, die sich im Hinblick auf die sterische Konfiguration an beiden C-Atomen unterscheiden. Um zwischen ihnen zu unterscheiden, benutzen wir die *threo-erythro*-Terminologie, die bereits bei niedermolekularen organischen Verbindungen angewendet wird.

Ein *erythro-di-isotaktisches Polymeres* ist ein di-isotaktisches Polymeres, in dem die Konfigurationen an den beiden Stereoisomeriezentren der Hauptkette des konventionellen Grundbausteins, vom hypothetischen Betrachter aus gesehen, gleich sind. In einem hypothetisch gestreckten Molekül (Zick-Zack-Konformation) eines *erythro-di-isotaktischen* Polymeren der allgemeinen Formel (—CHR—CHR'—)_n befinden sich die Substituenten der einen Art (R) alle auf einer Seite der Ebene der Kettenatome, die Substituenten der anderen Art (R') alle auf der anderen Seite. Bei der FISCHER-Projektion sind alle R- und R'-Substituenten auf derselben Seite der Geraden, welche die Hauptkette darstellt. In der NEWMANSchen Darstellung⁵⁾ der ekliptischen Konformation zweier aufeinanderfolgender Kettenatome mit den zugehörigen Atomen oder Gruppen, in welcher das nachfolgende Kettenatom sich mit dem vorhergehenden deckt, liegt R über R' und H über H, z. B.:

Erythro-di-isotaktisches Poly-2-penten oder *erythro-di-isotaktisches* Poly(1-äthyl)(2-methyl)äthamer, *eit*-[CH(CH₃)CH(C₂H₅)]_n:

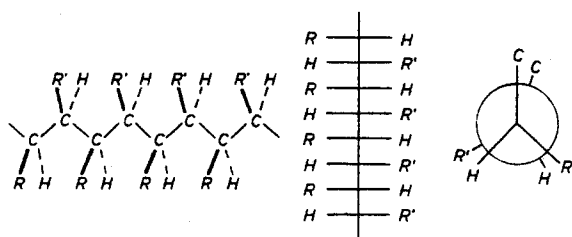
Nomenklaturbericht über sterische Anordnung in Hochpolymeren



(Hier und in den folgenden Beispielen bezeichnet R' eine Äthylgruppe, R wie bisher eine Methylgruppe.)

Ein *threo-di-isotaktisches Polymeres* ist ein di-isotaktisches Polymeres, bei dem die Konfiguration beider Stereoisomeriezentren der Hauptkette in jedem konventionellen Grundbaustein, vom hypothetischen Betrachter aus gesehen, entgegengesetzt ist. In einem hypothetisch gestreckten Makromolekül (Zick-Zack-Konformation) eines *threo-di-isotaktischen* Polymeren der allgemeinen Formel $(-CHR-CHR'-)_n$ liegen beide Arten von Substituenten R und R' auf ein und derselben Seite der Ebene der Kettenatome. Bei der FISCHER-Projektion sind R und R' auf entgegengesetzten Seiten der Geraden, welche die Hauptkette darstellt, angeordnet. In der NEWMANSchen Darstellung der ekliptischen Konformation zweier aufeinanderfolgender Kettenatome mit den zugehörigen Atomen oder Gruppen, in welcher das nachfolgende Kettenatom sich mit dem vorhergehenden deckt, liegt R über H und H über R' , z. B.:

Threo-di-isotaktisches Poly-2-penten oder *threo-di-isotaktisches* Poly-(1-äthyl)(2-methyl)äthamer, *tit*- $[CH(CH_3)CH(C_2H_5)]_n$:

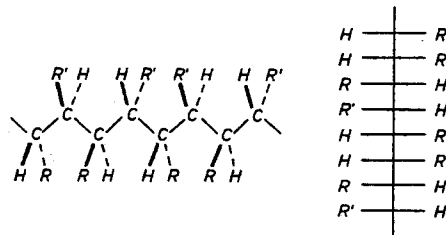


Ein *di-syndiotaktisches Polymeres* ist ein Polymeres, dessen konventioneller Grundbaustein als Bestandteil der Hauptkette 2 C-Atome besitzt, von denen jedes 2 verschiedene seitenständige Substituenten trägt; die sterische Orientierung in aufeinanderfolgenden Grundbausteinen ist so, daß das Molekül syndiotaktisch ist in bezug auf die Konfiguration an entsprechenden Kettenatomen einer jeden Art, wenn man sie getrennt betrachtet.

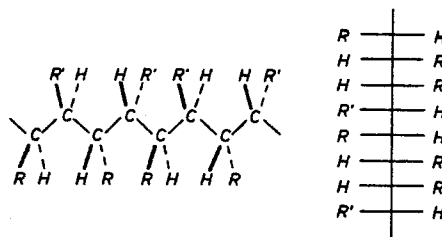
Erythro-di-syndiotaktische und *threo-di-syndiotaktische* Polymere können in ähnlicher Weise wie die entsprechenden Arten von di-isotaktischen

Polymeren definiert, beschrieben und dargestellt werden, mit der Ausnahme, daß sich die sterische Anordnung einer jeden Art nicht durch eine einzige NEWMAN-Formel wiedergeben läßt; in dieser Darstellung sind die beiden Hälften der eigentlichen Grundeinheit entgegengesetzt konfiguriert, z. B.:

Erythro-di-syndiotaktisches Poly-2-penten oder *erythro-di-syndiotaktisches* Poly(1-äthyl)(2-methyl)äthamer, *est*-[CH(CH₃)CH(C₂H₅)]_n:



Threo-di-syndiotaktisches Poly-2-penten oder *threo-di-syndiotaktisches* Poly(1-äthyl)(2-methyl)äthamer, *ist*-[CH(CH₃)CH(C₂H₅)]_n:



Es ist zu beachten, daß die beiden Polymeren selbst identisch sind, wenn man von den Endgruppen absieht; die Terminologie hängt nur ab von der willkürlichen Wahl der Abgrenzung des Mers sowie von der Beziehung zwischen Kettenrichtung und Substituenten-Numerierung. Setzt man voraus, daß die Orientierung entsprechender Atome in aufeinanderfolgenden Mers jeweils entgegengesetzt ist (d. h., daß die Struktur syndiotaktisch ist), so ergibt die Polymerisation von 2-Penten dasselbe Polymere, gleichgültig, ob die 2 Kohlenstoffatome jedes Monomerbausteins, die mit dem Rest der Kette verbunden sind, dieselbe oder entgegengesetzte sterische Orientierung haben. In den meisten Fällen sollte es ausreichen, diese Polymeren, die auf einem der beiden Wege dargestellt wurden, als di-syndiotaktisch zu bezeichnen, mit der Abkürzung *st*.

Die zusätzlichen Vorsilben *erythro*- oder *threo*- können dann benutzt werden, wenn in einer gegebenen Folge von Atomen die relativen Orientierungen an den beiden Atomen jedes Mers, die direkt mit den Resten der Kette verknüpft sind, gekennzeichnet werden sollen. (Diese Unterteilung wird jedoch sinnlos, wenn diese relativen Anordnungen nicht bestimmbar

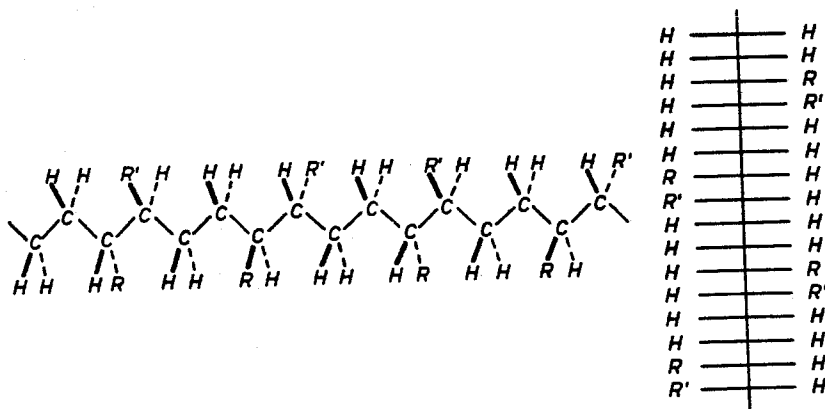
sind.) Eine ähnlich unbestimmbare Situation entsteht, wenn aufeinanderfolgende asymmetrische Kettenatome durch andere Kettenatome getrennt sind und wenn diese unterbrechenden Teilstücke alle gleich sind und keine Orientierung bewirken.

Entstehen jedoch durch solche angefügten Kettenstücke Unterschiede, je nachdem ob sie zwischen asymmetrischen Kettenatomen des Typs A und B oder entsprechend zwischen B und A eingeschoben werden (vorausgesetzt, daß man die Kette in gleicher Richtung betrachtet)*), so ist die Vorsilbe *erythro-* oder *threo-* zur Vermeidung von Verwechslungen notwendig. Dieser Fall tritt z. B. ein bei einem alternierenden syndiotaktischen Copolymeren von 2-Penten und Äthylen:

Erythro-di-syndiotaktisches Poly(2-penten-co-äthylen)

oder

erythro-di-syndiotaktisches Poly(1-äthyl)(2-methyl)butamer:



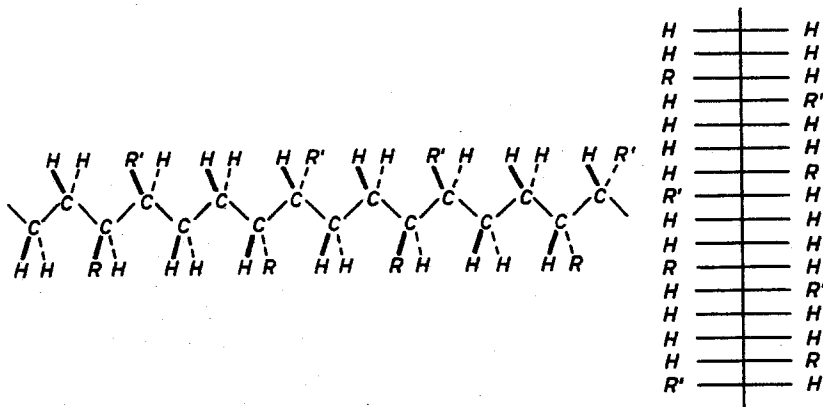
Threo-di-syndiotaktisches Poly(2-penten-co-äthylen)

oder

threo-di-syndiotaktisches Poly(1-äthyl)(2-methyl)butamer:

*) Anmerkung der Übersetzer:

A und B bedeuten 2 aufeinanderfolgende Ketten-C-Atome (mit ihren Substituenten) des Grundbausteins, in diesem Falle von Poly-2-penten; die hier dargestellten Unterschiede entstehen entweder, wenn man von einer der Konfigurationen dieses Polymeren ausgeht und das Äthylen zwischen A und B bzw. zwischen B und A z. B. des erythro-di-syndiotaktischen Poly-2-pentens (S. 8) einschleibt; oder sie entstehen in gleicher Weise, wenn man das Äthylen an der gleichen Stelle des Grundbausteins (z. B. jeweils zwischen A und B) einmal am erythro-, zum andern am threo-di-syndiotaktischen Poly-2-penten (S. 8) einschleibt; letztere Darstellung ist hier angegeben.



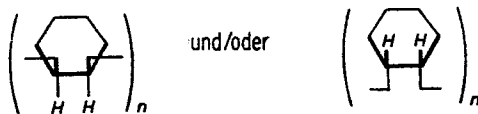
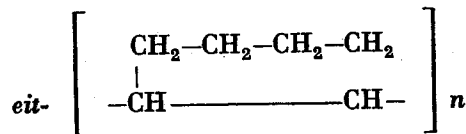
Befinden sich in der Hauptkette sterisch regelmäßiger Polymerer Ringe mit asymmetrischen Atomen an den Ein- und Austrittsstellen der Kette, so kann die Taktizität wie bei anderen ditaktischen Polymeren ohne Ringe angegeben und definiert werden.

Nimmt man an, daß die Kette über den kürzeren Teil des Ringes verläuft (falls die beiden möglichen Teile ungleich lang sind), so können die beiden Ringatome, die nicht in der Kette selbst liegen, aber direkt an Atome der Kette gebunden sind, als seitenständige Substituenten angesehen werden. Die einfachsten Arten sterisch regelmäßiger asymmetrischer Ringpolymerer können so als *erythro*- und *threo*-di-isotaktische sowie als *erythro*- und *threo*-di-syndiotaktische Polymere bezeichnet werden. In den *erythro*-Typen haben die Hauptbindungen, welche Ein- und Austrittsstelle der Kette am Ring bilden, *cis*-Orientierung. Bei den *threo*-Typen haben Ein- und Austrittsbindungen am Ring *trans*-Orientierung, z. B. (vgl. auch das 3. und 5. Beispiel der Regel 16¹⁾, s. auch 6²⁾):

Erythro-di-isotaktisches Polycyclohexen

oder

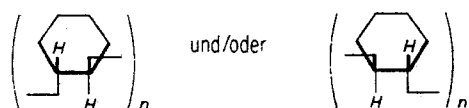
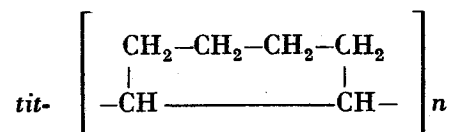
erythro-di-isotaktisches Polycyclohexyl-enamer-2:



Threo-di-isotaktisches Polycyclohexen

oder

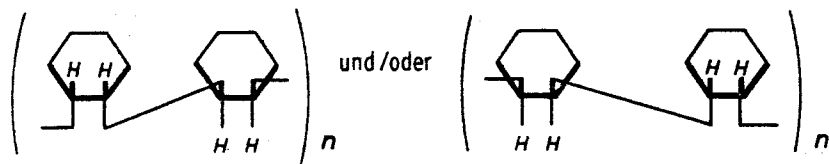
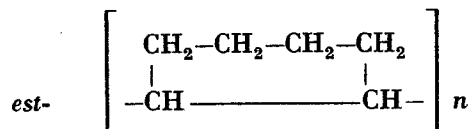
threo-di-isotaktisches Polycyclohexyl-enamer-2:



Erythro-di-syndiotaktisches Polycyclohexen

oder

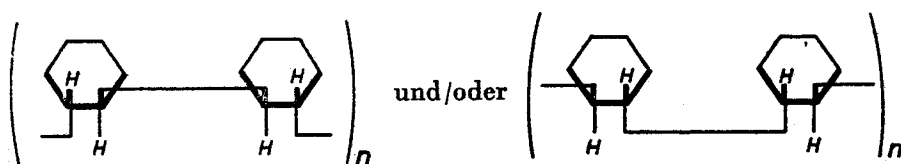
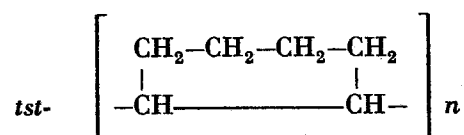
erythro-di-syndiotaktisches Polycyclohexyl-enamer-2:



Threo-di-syndiotaktisches Polycyclohexen

oder

threo-di-syndiotaktisches Polycyclohexyl-enamer-2:



Strukturnamen und Formeln

Ein lineares Polymeres kann auf eine der beiden folgenden Arten benannt und formelmäßig beschrieben werden:

- (1) auf Grund der tatsächlichen oder hypothetischen Darstellungsmethode aus einem Monomeren oder
- (2) mit Hilfe des Grundbausteins des Makromoleküls (vgl. ¹⁾, S. 272—273).

So kann beispielsweise ein Polymeres, das aus Molekülen von der Zusammensetzung hochmolekularer normaler Paraffine besteht, als (lineares) Polyäthylen, $(\text{CH}_2\text{CH}_2)_n$, oder als Polymethamer, $(\text{CH}_2)_n$, bezeichnet werden. Lineares Polypropylen $[\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)]_n$ kann auch Poly(methyl)-ethamer mit gleicher Formel genannt werden *).

Um eine systematische Bezeichnungsweise für die sterische Regelmäßigkeit in Hochpolymeren zu ermöglichen, schlagen wir folgende Regeln vor, die sich den vorhergehenden anschließen.

Regel 17: Die Art der sterischen Regelmäßigkeiten in einem isotaktischen, syndiotaktischen, *erythro*-di-isotaktischen, *threo*-di-isotaktischen, *erythro*-di-syndiotaktischen oder *threo*-di-syndiotaktischen Polymeren oder das Fehlen von sterischer Regelmäßigkeit in einem ataktischen Polymeren kann im Namen durch entsprechende Adjektive ausgedrückt werden und in der Formel durch entsprechende (*kursiv gesetzte*) Vorsilben: *it-*, *st-*, *eit-*, *tit-*, *est-*, *tst-* oder *at-*. Als Grundbausteine für syndiotaktische und ataktische Polymere werden die konventionellen Grundbausteine angesehen. Sie sind unter Nichtberücksichtigung sterischer Konfigurationen definiert, obwohl der tatsächliche Grundbaustein, das Strukturelement, eines syndiotaktischen Polymeren doppelt so groß ist und obwohl eigentlich bei einem ataktischen Polymeren kein Strukturelement existiert. Beispiele für Namen und Formeln entsprechend dieser Regel enthalten die vorhergehenden Abschnitte.

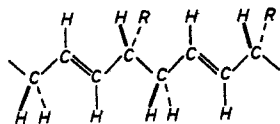
Regel 18: Zeigt ein Polymeres Taktizität infolge Stereoisomerie sowohl an tetraedrisch substituierten Atomen als auch an *cis-trans*-Gruppierungen, so wird im Namen und in der Formel die erste Gruppierung zuerst bezeichnet.

Beispiele:

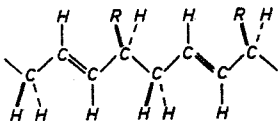
Iso-trans-taktisches Poly(1-methyl)but-2-enamer,
it- $[\textit{trans}\text{-CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}(\text{CH}_3)]_n$:

*) Im vorangehenden Bericht¹⁾ war eine große Zahl von Grundbausteinen in der Formel mit dem Index *p* bezeichnet worden. Hier benutzen wir, dem allgemeinen Brauch folgend, *n*.

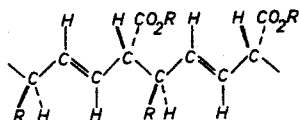
Nomenklaturbericht über sterische Anordnung in Hochpolymeren



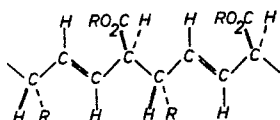
und/oder



Erythro-di-iso-trans-taktisches Poly-(1-methoxycarbonyl)(4-methyl)-but-2-enamer, *et*-[*trans*-CH(CH₃)CH=CHCH(CO₂CH₃)]_n:



und/oder



Regel 19: Befinden sich in der Hauptkette sterisch regelmäßiger Polymerer Ringe mit asymmetrischen Atomen an den Ein- und Austrittsstellen der Kette am Ring, so kann die Taktizität wie bei anderen ditaktischen Polymeren angegeben und definiert werden. Nimmt man an, daß die Kette über den kürzeren Teil des Ringes verläuft (falls die beiden möglichen Teile ungleich lang sind), so wird die Bindung zwischen jedem Ring-Kettenverbindungsatom und dem nächsten Ringatom, das nicht zur Kette zählt, zur Beschreibung der Taktizität so behandelt, als ob die Kette an diesem Atom einen seitenständigen Substituenten trüge.

Beispiele dazu sind im vorhergehenden Abschnitt behandelt.

Regel 20*): Geht die Taktizität eines isotaktischen Polymeren zurück auf asymmetrische Atome mit nicht mehr als 4 kovalenten Bindungen (dabei entsteht die Asymmetrie durch Unterschiede zwischen benachbarten Atomen oder Atomgruppen, nicht durch Unterschiede der Länge der Hauptkette in den beiden Richtungen des Makromoleküls und nicht durch Unterschiede zwischen den Kettenenden), dann kann man die absolute sterische Konfiguration dieser Atome bestimmen und mit den

*) Im ursprünglichen Text (s. J. Polymer Sci. 56 (1962) 153) ist dies Regel 19.

kursiven Buchstaben *R* und *S* bezeichnen (oder *r* und *s* im Falle pseudoasymmetrischer Atome) entsprechend den Regeln von CAHN, INGOLD und PRELOG⁴).

Die Anwendung dieser Bezeichnungen auf einfache isotaktische oder syndiotaktische Vinylpolymere ist nicht vorteilhaft, und zwar wegen des Fehlens lokal asymmetrischer Atome. Auch lassen sie sich nicht sinngemäß anwenden, sofern nicht die absolute Konfiguration einander entsprechender Atome in jedem Grundbaustein über die ganze Polymerkette und in allen Polymermolekülen identisch ist. Wie in entsprechenden Fällen niedermolekularer Verbindungen kann man jedoch ein racemisches Gemisch aus gleicher Anzahl von Molekülen der 2 enantiomorphen Formen im Namen und in der Formel durch die Bezeichnungen beider Formen kennzeichnen; diese sollten im Namen vor „poly“- und in der Formel vor die Klammer um den Grundbaustein gesetzt werden, da andernfalls fälschlicherweise angenommen werden könnte, daß es sich um ein ataktisches Polymeres handle. Andererseits wird aber empfohlen, für Polymere mit nur einem einzigen Zentrum der *R*-*S*-Isomerie pro Grundbaustein die kursive Vorsilbe *racemisch* an Stelle der Bezeichnung *RS* zu benutzen.

Beispiele:

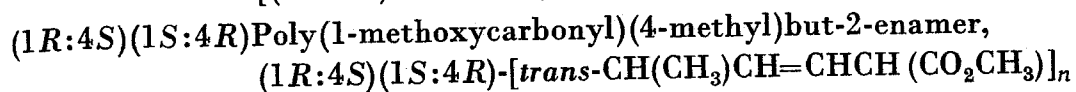
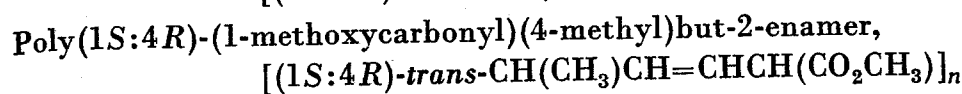
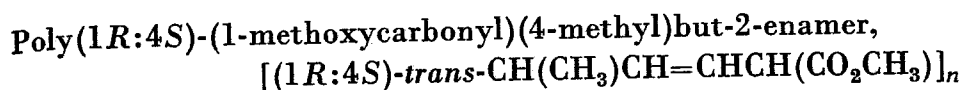
Poly- <i>R</i> -(methyl)äthoxamer	$[R-CH_2CH(CH_3)O]_n$
Poly- <i>S</i> -(methyl)äthoxamer	$[S-CH_2CH(CH_3)O]_n$
<i>racemisches</i> Poly(methyl)äthoxamer	<i>racemisch</i> - $[CH_2CH(CH_3)O]_n$

Diese Namen bzw. Formeln stellen dar: Ein Polymeres, das ausschließlich aus Molekülen der hier in der ersten Strukturformel für isotaktisches Polypropylenoxid angegebenen Struktur besteht; ein Polymeres, das ausschließlich aus Molekülen gemäß der 2. Strukturformel besteht, und als letztes ein Polymeres, das die gleiche Anzahl von Makromolekülen dieser beiden Arten enthält.

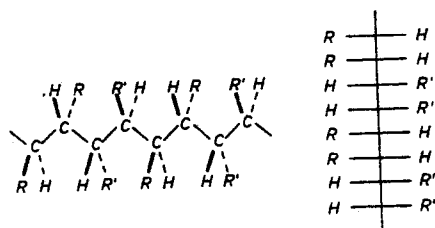
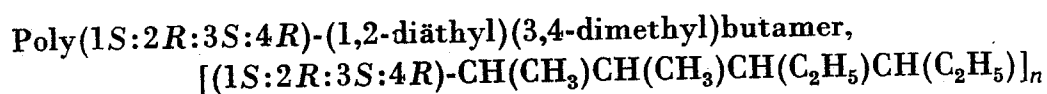
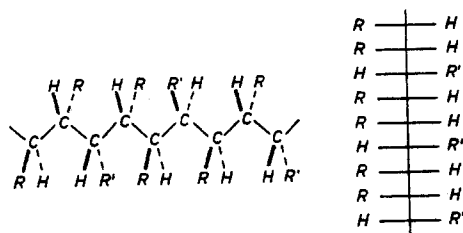
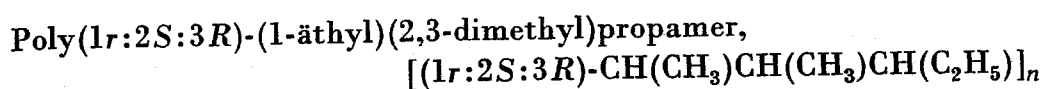
Poly- <i>R-trans</i> -(1-methyl)but-2-enamer	$[R-trans-CH_2CH=CHCH(CH_3)]_n$
Poly- <i>S-trans</i> -(1-methyl)but-2-enamer	$[S-trans-CH_2CH=CHCH(CH_3)]_n$
<i>racemisches</i> Poly- <i>trans</i> -(1-methyl)but-2-enamer	<i>racemisch</i> - $[trans-CH_2CH=CHCH(CH_3)]_n$

Die obigen Namen und Formeln beziehen sich auf die zwei Polymeren, die in den beider ersten Strukturformeln als Beispiele der Regel 18 aufgeführt sind, sowie auf ein racemisches Gemisch der beiden.

Nomenklaturbericht über sterische Anordnung in Hochpolymeren



Hier sind Polymere aufgeführt, die in den beiden anderen Strukturformeln als Beispiele der Regel 18 angegeben sind, ferner ein racemisches Gemisch der beiden.



- 1) J. Polymer Sci. **8** (1952) 257; Makromolekulare Chem. **9** (1953) 195. Eine französische Übersetzung wurde als Supplement zum Bulletin de la Société Chimique de France 1952 publiziert; der entsprechende Bericht in deutscher Sprache erschien in Makromolekulare Chem. **33** (1960) 1; vgl. auch H. STAUDINGER, Makromolekulare Chem. **9** (1953) 221.
- 2) G. NATTA und F. DANUSSO, J. Polymer Sci. **34** (1959) 3.
- 3) G. NATTA, M. FARINA und M. PERALDO, Bericht an die International Commission on Macromolecules in Wiesbaden, Oktober 1959; Chim. e Ind. [Milano] **42** (1960) 255; J. Polymer Sci. **43** (1960) 289; Makromolekulare Chem. **38** (1960) 13.
- 4) R. S. CAHN, C. K. INGOLD und V. PRELOG, Experientia [Basel] **12** (1956) 81.
- 5) M. S. NEWMAN, Steric Effects in Organic Chemistry, Wiley, New York 1956, S. 10.
- 6) O. KRATKY und M. L. HUGGINS, Makromolekulare Chem. **9** (1953) 219.