

Phannomenklatur Teil II: Änderung des Hydrierungsgrades und Substitutionsderivate von Phanstammverbindungen**

Obmann: *Karl-Heinz Hellwich*,* Übersetzer: *Kerstin Ibrom*, Braunschweig

Cyclophane und lineare, nach den Regeln der Phannomenklatur benannte Verbindungen werden als Stammverbindungen betrachtet. Ihre Derivate werden in Übereinstimmung mit den für die Benennung organischer Verbindungen festgelegten Prinzipien, Regeln und Konventionen benannt. In dieser Empfehlung werden folgende Nomenklaturmerkmale beschrieben: indizierter und ad-dierter Wasserstoff, die Rangfolge bei der Bezifferung, als Suffixe ausgedrückte Substituenten, als Präfixe angegebene Substituenten, Phanstammverbindungen, die durch Hinzufügen oder Entfernen von Wasserstoffatomen verändert wurden, und polyfunktionelle Derivate.

Einleitung

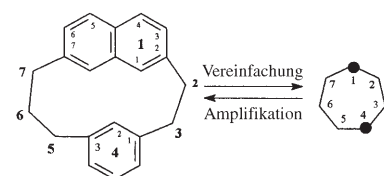
Die Phannomenklatur ist eine neue Methode zur Benennung organischer Verbindungen, bei der Namen, die jeweils einen Teil der komplexen Struktur beschreiben, zum Gesamtnamen zusammengefügt werden.^[1] Sie beruht auf der Vorstellung, dass man ein verhältnismäßig einfaches Grundgerüst einer Stammverbindung durch eine als Amplifikation

(Erweiterung) bezeichnete Operation verändern kann, einen Vorgang, bei dem ein oder mehrere besondere Atome (Superatome) des vereinfachten Grundgerüsts durch mehratomige Strukturen ersetzt werden (Schema 1).^[*]

Die mehratomigen Strukturen sind gesättigte oder man-kude Ringe oder Ringsysteme. Ein mankuder Ring oder ein

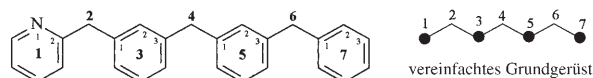
[*] Dr. K.-H. Hellwich
Beilstein-Institut zur Förderung der chemischen Wissenschaften
Trakehner Straße 7–9, 60487 Frankfurt am Main (Deutschland)
Fax: (+49) 69-716731-19
E-Mail: khellwich@beilstein-gmbh.de

[**] Copyright© der englischen Fassung, die unter dem Titel „Phane nomenclature. Part II. Modification of the degree of hydrogenation and substitution derivatives of phane parent hydrides“ von H. A. Favre (Kanada), D. Hellwinkel (Deutschland), W. H. Powell (USA), H. A. Smith, Jr. (USA) und S. S.-C. Tsay (Taiwan) für die Veröffentlichung in *Pure Appl. Chem.* **2002**, 74, 809–834^[9] vorbereitet wurde: International Union of Pure and Applied Chemistry, 2002. Die englische Fassung ist auch im Internet unter der Adresse <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/phane2/> zugänglich. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation. K.-H. H. dankt Dr. W. H. Powell für die elektronische Fassung des englischen Manuskripts sowie Frau Dipl.-Chem. G. Kruse†, Dr. W. Liebscher und Prof. R. Neier für umfangreiche Diskussionen zur Terminologie im Zusammenhang mit der Übertragung neuer Fachbegriffe aus dem Englischen ins Deutsche. Größere Korrekturen und Anmerkungen zur englischen Originalfassung sind in den Fußnoten zu finden, kleinere Korrekturen und Ergänzungen sind durch ein hochgestelltes K in Klammern kenntlich gemacht.



Phanstammverbindung vereinfachtes Grundgerüst

Name des vereinfachten Grundgerüsts: Cycloheptaphan
Name der Phanstammverbindung: 1(2,7)-Naphthalena-4(1,3)-benzenacycloheptaphan



Phanstammverbindung vereinfachtes Grundgerüst

Name des vereinfachten Grundgerüsts: Heptaphan
Name der Phanstammverbindung: 1(2)-Pyridina-3,5(1,3),7(1)-tribenzenaheptaphan

Schema 1. Zwei Beispiele für das prinzipielle Vorgehen bei der Anwendung der Phannomenklatur. Der fett gezeichnete Punkt kennzeichnet hier und im Folgenden ein Superatom.

[*] Die im Deutschen üblichen Trivialnamen Benzol und Naphthalin sollen nicht anstelle von Benzen bzw. Naphthalen zur Ableitung von Namen für Amplifikanten verwendet werden.

mankudes Ringsystem enthält die maximale Anzahl nichtkumulierter Doppelbindungen.^[2] Bei der Amplifikation wird jedes Superatom durch einen Amplifikanten ersetzt, der durch ein Amplifikantenpräfix^[*] angezeigt wird und einem Stammnamen, dem Namen des vereinfachten Grundgerüsts, vorangestellt wird. Letzterer endet mit der Silbe -phan und wird gemäß den Prinzipien zur Benennung gesättigter Kohlenwasserstoffe gebildet. Folglich sind alle durch den Gerüstnamen implizierten Atome mit Ausnahme der Superatome vereinbarungsgemäß gesättigte Kohlenstoffatome. Ein Amplifikantenpräfix leitet sich vom Namen der entsprechenden cyclischen Stammverbindung durch Anhängen des Buchstabens „a“ ab.^[1a] Amplifikantenpräfixe gleichen daher Präfixen wie Oxa-, Aza- usw., die den Ersatz eines einzelnen Atoms, gewöhnlich eines Kohlenstoffatoms, durch ein anderes Atom anzeigen.

Die Lokanten vor den Klammern im Namen einer Phanstammverbindung kennzeichnen die Positionen der Superatome im vereinfachten Grundgerüst, die durch Ringstrukturen ersetzt werden, die das jeweils direkt darauf folgende Amplifikantenpräfix genauer beschreibt. Sie kennzeichnen somit auch die Positionen der Ringe und Ringsysteme in der Phanstammverbindung. Diese Lokanten sind durch die Bezifferungsregeln für das jeweilige vereinfachte Grundgerüst und die Rangfolge der Ringe und Ringsysteme der Phanstammverbindung festgelegt. Lokanten innerhalb einer Klammer kennzeichnen die Atome der durch das folgende Amplifikantenpräfix beschriebenen Ringstruktur, die mit benachbarten normalen Atomen des vereinfachten Grundgerüsts verknüpft sind.

Zusätzlich zu den Grundprinzipien, Regeln und Konventionen der Phannomenklatur beschreibt Teil I der Phannomenklatur^[1] das prinzipielle Vorgehen bei der Bezifferung

von Phanstammverbindungen und die Anwendung der Austauschnomenklatur („a“-Nomenklatur) bei der Benennung von Phanstammverbindungen mit Heteroatomen. Der hier vorgestellte Teil II beschreibt die Benennung von Derivaten von Phanstammverbindungen mithilfe der Substitutionsnomenklatur.^[3a] Als Stammverbindungen sind Phansysteme^[*] vollständig in die Substitutionsnomenklatur eingebunden, sodass deren allgemeine Regeln gelten. Sofern erforderlich werden weitere Nomenklaturverfahren zur Benennung von Derivaten verwendet, beispielsweise die Funktionsklassennomenklatur^{[3p](K)} (radikofunktionelle Nomenklatur^(K)) zur Benennung von Estern,^[3b] Anhydriden^[3c] und Säurehalogeniden.^[3d]

PhII-1 Bezifferung

PhII-1.1 Ausgangspunkt und Richtung der Bezifferung

Soweit die allgemeinen Regeln der Substitutionsnomenklatur eine Wahlmöglichkeit lassen, werden bei der Bezifferung einer nach der Phannomenklatur zu benennenden Verbindung der Ausgangspunkt und die Richtung so gewählt, dass die nachstehenden Strukturmerkmale, falls vorhanden, sukzessive in der aufgeführten Reihenfolge möglichst niedrige Lokanten erhalten:^[3e] 1. Bezifferung der Phanstammverbindung; 2. durch Austauschnomenklatur eingeführte Heteroatome; 3. indizierter Wasserstoff; 4. nicht abtrennbare Hydro-/Dehydropräfixe; 5. ranghöchste funktionelle Gruppe (benannt als Suffix); 6. Unsättigung (Endungen -en und -in sowie Hydro/Dehydropräfixe); 7. als Präfixe genannte Substituenten (in alphabetischer Reihenfolge).

PhII-1.2 Hydro- und Dehydropräfixe

In diesen Empfehlungen werden Hydro- und Dehydropräfixe als nicht abtrennbar behandelt.^[3f] Da nicht abtrennbare (De)hydropräfixe^(K) Stammverbindungen definieren, haben sie bei der Vergabe niedriger Lokanten Vorrang vor Substituenten, aber nicht vor indiziertem Wasserstoff. Sie werden direkt vor dem Namen der Phanstammverbindung oder, falls vorhanden, vor den Austauschpräfixen aufgeführt.

PhII-1.3 Niedrigste Lokanten

Bei Wahlmöglichkeiten wird das gängige Verfahren zur Vergabe möglichst niedriger Lokanten angewendet. Der Satz mit den niedrigsten Lokanten^[3g] ist derjenige, der den niedrigsten numerischen Wert an der ersten Stelle eines Unterschieds aufweist, wenn die in aufsteigender alphanumerischer Reihenfolge geordneten Sätze Schritt für Schritt verglichen werden.

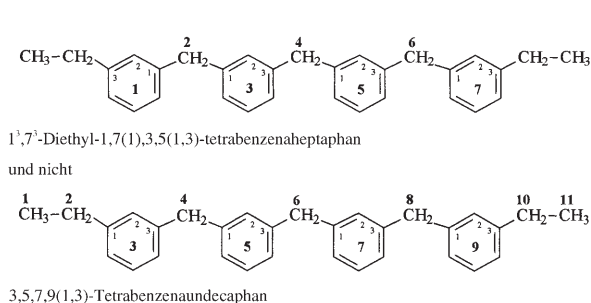
[*] In dieser Übersetzung wird die englische Bezeichnung „amplification prefix“ durchgängig mit „Amplifikantenpräfix“ statt „Amplifikationspräfix“ wiedergegeben – analog zum Anellandenpräfix in der Anellierungsnomenklatur. Der Ausdruck Amplifikantenpräfix ist genauer, denn ein Amplifikantenpräfix beschreibt einen Amplifikanten und nicht die Amplifikation, die erst durch die Gesamtheit aller Amplifikantenpräfixe beschrieben wäre. Die beiden Bezeichnungen können daher nur dann als äquivalent angesehen werden, wenn es nur ein einziges Amplifikantenpräfix in einem Namen gibt.

Die *Angewandte Chemie* veröffentlicht Übersetzungen von Recommendations und Technical Reports der IUPAC, um die chemische Fachsprache im Deutschen zu fördern. Sauber definierte Begriffe und klare Nomenklaturregeln bilden die Basis für eine Verständigung zwischen den Wissenschaftlern einer Disziplin und sind für den Austausch zwischen Wissenschafts- und Fachsprache sowie Alltagssprache essenziell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Die nächste Übersetzung („Praktische Anleitung zur Messung und Interpretation magnetischer Eigenschaften“) ist für Heft 47/2006 vorgesehen. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

[*] Der Ausdruck „Phansystem“, wie er hier verwendet wird, soll „eine nach den Regeln der Phannomenklatur benannte Verbindung“ bedeuten. Er sollte soweit möglich zugunsten der vollständigen Beschreibung vermieden werden.

PhII-1.4 Abschluss acyclischer Phanstammverbindungen

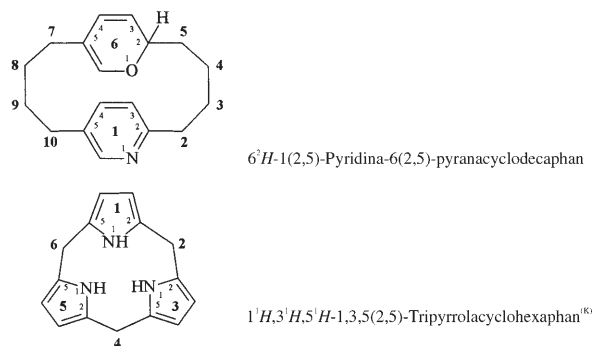
Acyclische Phanstammverbindungen haben definitionsgemäß an jedem Ende einen Amplifikanten. Alkylsubstituenten an diesen terminalen Amplifikanten vergrößern das Phansystem nicht über die terminalen Amplifikanten hinaus.^[*] Die Namen werden gemäß den Regeln PhI-3.1.2^(K) und PhI-3.3^[1] gebildet (Schema 2).



Schema 2. Beispiel für die Bezifferung und Benennung einer acyclischen Phanstammverbindung.

PhII-2 Angabe von indiziertem Wasserstoff

Gegebenenfalls in einem Amplifikanten vorhandener indizierter Wasserstoff wird mit entsprechenden vorangestellten Lokanten vor den Namen der Phanstammverbindung gestellt (Schema 3).^[3h]



Schema 3. Beispiele für die Angabe von indiziertem Wasserstoff.

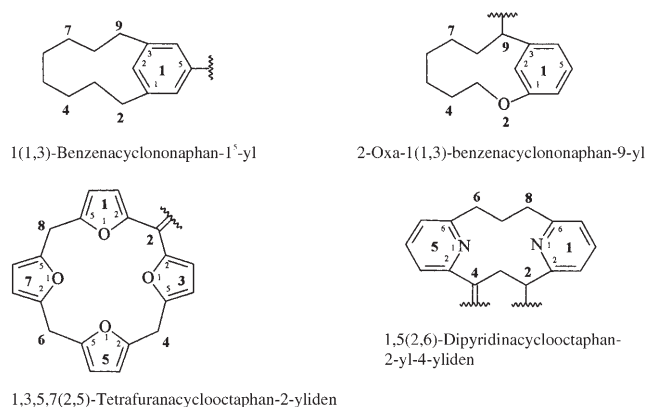
PhII-3 Von Phanstammverbindungen abgeleitete Substituenten

PhII-3.1 Allgemeine Methode

Die Namen von Substituenten, die sich von Phanstammverbindungen ableiten, werden mithilfe der allgemeinen Methoden gebildet.^[3j] Die Suffixe -yl und -yliden werden mit den entsprechenden Lokanten an den Namen der Phan-

[*] Alkylgruppen an terminalen Amplifikanten werden, wie das Beispiel in Schema 2 zeigt, als Substituenten behandelt.

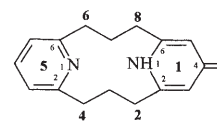
stammverbindung angehängt. Diesen Suffixen ordnet man in Übereinstimmung mit der festgelegten Bezifferung der Phanstammverbindung oder der mithilfe der Austauschnomenklatur benannten veränderten Phanstammverbindung möglichst niedrige Lokanten zu. Falls man die Wahl hat, erhält das Suffix -yl den niedrigeren Lokanten. In Namen steht das Suffix -yl vor dem Suffix -yliden (Schema 4).



Schema 4. Beispiele für die Benennung von Substituenten, die sich von Phanstammverbindungen ableiten.

PhII-3.2 Methode des addierten Wasserstoffs

Die Methode des addierten Wasserstoffs wird dann angewendet, wenn sich freie Yliden-Valenzen^[*] an einem mankuden Ring oder Ringsystem befinden.^[3h] Bei dieser Methode werden die Wasserstoffatome angegeben, die wegen eines Suffixes, das zur Beschreibung einer Strukturänderung erforderlich ist, notwendigerweise hinzugefügt werden müssen. Addierter Wasserstoff wird nach dem Lokanten für das Suffix in Klammern angegeben. Diese Art von Substituenten kann auch mithilfe nicht abtrennbarer Hydropräfixe benannt werden (Schema 5).^[3f]



Methode des addierten Wasserstoffs: 1,5(2,6)-Dipyridinacyclooctaphan-1'(1'H)-yliden
Benennung mithilfe nicht abtrennbarer Hydropräfixe: 1',1'-Dihydro-1,5(2,6)-dipyridinacyclooctaphan-1'-yliden

Schema 5. Beispiel für zwei Arten, hinzugefügten Wasserstoff in einem Namen anzugeben.

[*] Diese Einschränkung entspricht nicht der allgemeinen Regel zur Verwendung von addiertem Wasserstoff, wie sie auch im nachfolgenden Satz formuliert ist. Befindet sich demnach eine einfache freie Valenz, die durch die Endung -yl benannt wird, an einer Position, die zuvor die Hydrierung einer Doppelbindung erforderlich macht, kann anstelle von Hydropräfixen addierter Wasserstoff ebenfalls verwendet werden.

PhII-4 Substitutionsnomenklatur bei Phanstammverbindungen

PhII-4.1 Phanstammverbindungen mit Suffixen für charakteristische Gruppen

Als Suffixe angegebene charakteristische Gruppen erhalten die niedrigstmöglichen Lokanten, die mit der festgelegten Bezifferung einer Phanstammverbindung oder einer mithilfe der Austauschnomenklatur benannten veränderten Phanstammverbindung vereinbar sind (siehe Abschnitt PhII-1.1; Schema 6).

PhII-4.2 Von Phanstammverbindungen abgeleitete Radikale und Ionen

Radikale werden auf die gleiche Weise wie Substituenten benannt (siehe Abschnitt PhII-3). Ionen können unter Verwendung von Suffixen oder durch Austauschpräfixe für Ionen benannt werden. Suffixe für Ionen wie -ylium werden der Verwendung von Austauschpräfixen für Ionen vorgezogen (Schema 7^[*]).^[4]

PhII-4.3 Mit Präfixen benannte Substituenten an Phanstammverbindungen

PhII-4.3.1

Durch abtrennbare in alphabetischer Reihenfolge sortierte Präfixe benannte Atome und/oder Gruppen werden Lokanten zugeordnet, die mit der feststehenden Bezifferung der Phanstammverbindung^(K) oder der mithilfe der Austauschnomenklatur benannten veränderten Phanstammverbindung^(K) vereinbar sind (Schema 8).^[3]

PhII-4.3.2

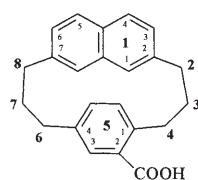
Falls nach der Anwendung von PhII-4.3.1 eine Wahl in Bezug auf niedrige Lokanten getroffen werden muss, werden die folgenden zwei Kriterien der Reihe nach angewendet.

- Man vergleicht mögliche Lokantensätze für die Präfixe als Sätze in aufsteigender numerischer Reihenfolge und verwendet denjenigen, der die niedrigsten Lokanten enthält; vgl. PhII-1.3^[**] (dritte Verbindung in Schema 8^[***]).
- Niedrige Lokanten werden den Substituenten^(K) in der Reihenfolge ihrer Nennung im Namen zugewiesen (vierte Verbindung in Schema 8).

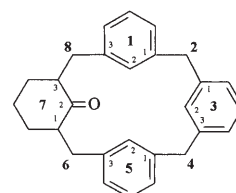
[*] Man beachte, dass die Stammverbindung, von der das im als bevorzugt bezeichneten Namen in Schema 7 benannte Ion formal abgeleitet ist, nicht existiert. Da die Endung -ylium formal die Abspaltung von H⁺ beschreibt, müsste die korrespondierende Stammverbindung, wie durch die λ-Symbole im Namen ausgedrückt, fünfbündigen Stickstoff enthalten. Eine derartige Benennung ist daher aus didaktischer Sicht fragwürdig.

[**] Der Satz wurde zwecks besseren Verständnisses gegenüber dem Original umformuliert.

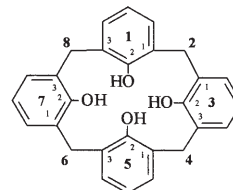
[***] Der falsche Name und die Erklärung wurden gegenüber dem englischen Original hinzugefügt.



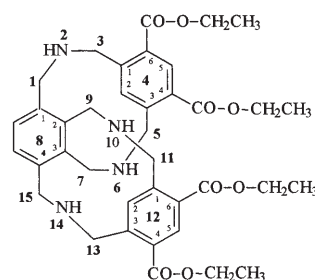
1(2,7)-Naphthalena-5(1,4)-benzenacyclooctaphan-5'-carbonsäure



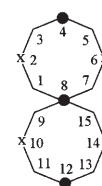
1,3,5(1,3)-Tribenzena-7(1,3)-cyclohexanacyclooctaphan-7'-on



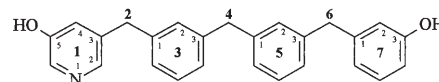
1,3,5,7(1,3)-Tetrabenzenacyclooctaphan-1',3',5',7'-tetrol



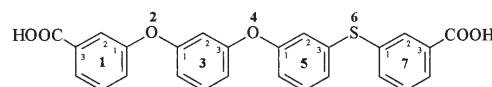
Tetraethyl-2,6,10,14-tetraaza-4,12(1,3),8(1,3,2,4)-tribenzenaspiro[7.7]pentadecaphan-4',4'',12'',12'''-tetracarboxylat



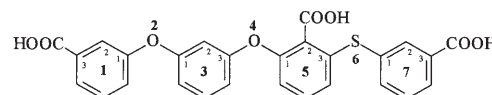
vereinfachtes Grundgerüst



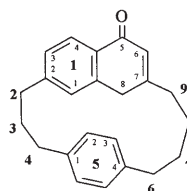
1(3)-Pyridina-3,5(1,3),7(1)-tribenzenaheptaphan-1',7'-diol



2,4-Dioxa-6-thia-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenaheptaphan-1',7'-dicarbonsäure

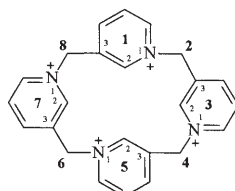


2,4-Dioxa-6-thia-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenaheptaphan-1',5',7'-tricarbonsäure



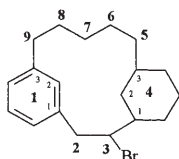
Methode des addierten Wasserstoffs:
1(2,7)-Naphthalena-5(1,4)-benzenacyclonaphan-1'(1'H)-on
Benennung mithilfe nicht abtrennbarer Hydropäfixe:
1',1'-Dihydro-1(2,7)-naphthalena-5(1,4)-benzenacyclonaphan-1'-on

Schema 6. Beispiele für die Anwendung der Substitutionsnomenklatur: Namen mit Suffixen für charakteristische Gruppen. x steht hier und im Folgenden in Formeln von vereinfachten Grundgerüsten für ein Heteroatom.

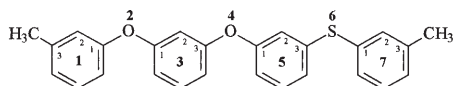


1¹,3¹,5¹,7¹-Tetraazacyclooctaphan-1¹,3¹,5¹,7¹-tetrakis(ylum) (bevorzugt)
1¹,3¹,5¹,7¹-Tetraazonia-1,3,5,7(1,3)-tetrabenzenacyclooctaphan
(die Bezifferung für diesen Austauschnamen bezieht sich auf den Phanstammkohlenwasserstoff)

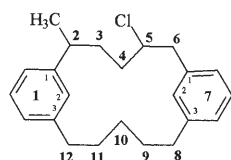
Schema 7. Beispiel für die Benennung eines von einer Phanstammverbindung abgeleiteten Ions.



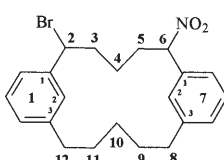
3-Brom-1(1,3)-benzena-4(1,3)-cyclohexanacyclononaphan



1¹,3¹-Dimethyl-2,4-dioxa-6-thia-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenaheptaphan



5-Chlor-2-methyl-1,7(1,3)-dibenzenacyclododecaphan
nicht 3-Chlor-6-methyl-1,7(1,3)-dibenzenacyclododecaphan
(der Lokantensatz 2,5 ist niedriger als 3,6)



2-Brom-6-nitro-1,7(1,3)-dibenzenacyclododecaphan

Schema 8. Beispiele für die Anwendung der Substitutionsnomenklatur bei Namen mit Präfixen für Substituenten.

PhII-5 Phanstammverbindungen, die durch das Hinzufügen oder Entfernen von Wasserstoff verändert wurden

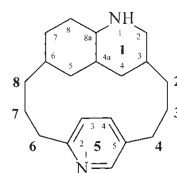
Phanstammverbindungen setzen sich aus gesättigten und mankuden Amplifikanten und aus sie verbindenden^(K) Ketten zusammen. Der Hydrierungsgrad jeder Komponente kann durch Anwendung der allgemeinen Regeln, die in der *Nomenklatur der Organischen Chemie*^{[3](K)} empfohlen wurden, verändert werden, indem man das Präfix Hydro-^[3k] verwendet, um auf das Hinzufügen von Wasserstoff hinzuweisen, und das Präfix Dehydro-, um auf sein Entfernen hinzuweisen,^[3l] sowie die Endungen -en und -in,^[3m] um das Abspalten von Wasserstoff zu kennzeichnen. Wie nachfolgend in speziellen Fällen ausdrücklich angegeben, gilt die Regel niedrigster Lokanten immer.

Die unter PhII-5.1–PhII-5.5 aufgeführten Regeln werden in dieser Reihenfolge so lange angewendet, bis eine Entscheidung erreicht ist.

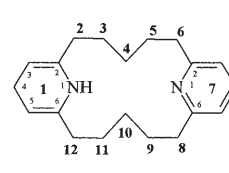
PhII-5.1 Hydropräfixe

Wenn der Name eines Amplifikanten die Gegenwart der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen impliziert, kann auf andere Hydrierungszustände durch die Verwendung des Präfixes Hydro- zusammen mit einem entsprechenden numerischen Präfix hingewiesen und dadurch das Hinzufügen von Wasserstoff angezeigt werden. Formal handelt es sich dabei um die Reduktion von Doppelbindungen, weshalb Wasserstoffatome nur paarweise addiert werden können, worauf durch die Verwendung der numerischen Präfixe di-, tetra-, hexa- usw. vor dem Präfix Hydro- hingewiesen wird.^[3k] Indizierter Wasserstoff wird, sofern er in der Stammverbindung erforderlich ist, vor dem Namen der Phanstammverbindung aufgeführt (siehe Abschnitt PhII-2). Die Methode ist wie folgt anzuwenden (zwei Beispiele sind in Schema 9 zu finden):

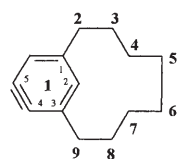
- Hydropräfixe werden verwendet, um Veränderungen mankuder Heteromonocyclen, die beibehaltene Trivialnamen haben oder nach dem erweiterten Hantzsch-Widman-System^{[3q](K)} benannt sind, zu bezeichnen.^[3k] Jedoch werden beibehaltene Trivialnamen oder Hantzsch-Widman-Namen der entsprechenden gesättigten Heteromonocyclen denen mit Hydropräfixen vorgezogen, beispielsweise die Namen Oxolan und Piperidin den Namen Tetrahydrofuran bzw. Hexahydropyridin.^[1a]
- Hydropräfixe werden verwendet, um Veränderungen des Sättigungsgrades aller carbocyclischen oder heterocyclischen mankuden Stammverbindungen mit Ausnahme von Benzol und den oben genannten Heteromonocyclen^(K) anzugeben. Beibehaltene Trivialnamen partiell hydrierter Stammverbindungen wie Indan, Chroman, Isochroman, Indolin und Isoindolin^[8] werden nicht zur Ableitung von Amplifikantennamen in der Phannomenklatur empfohlen.^[1a]



1¹,1¹,1¹,1¹,1¹,1¹,1¹,1¹,1¹,1¹-Decahydro-1(3,6)chinolina-5(5,2)-pyridinacyclooctaphan

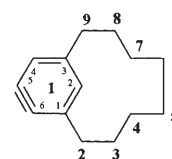


1¹,1¹-Dihydro-1,7(2,6)-dipyridinacyclododecaphan



1¹,1⁴-Didehydro-1(1,3)-benzenacyclononaphan

nicht



1¹,1⁵-Didehydro-1(1,3)-benzenacyclononaphan

Schema 9. Beispiele für die Verwendung von Hydro- und Dehydropräfixen.

PhII-5.2 Dehydropräfixe

Dehydropräfixe werden verwendet, um das Entfernen zweier Wasserstoffatome von benachbarten Atomen eines

[8] Der im englischen Original zusätzlich genannte Name Pyrrolin wurde weggelassen, weil er seit 1993 kein zulässiger Name mehr ist (siehe Regel R-9.1, Tabelle 24 in Lit. [3j]).

mankuden Amplifikanten einer Phanstammverbindung anzugeben (drittes Beispiel in Schema 9).^[3]

PhII-5.3 Die Endungen -en und -in

PhII-5.3.1 Doppel- und Dreifachbindungen

Die Anwesenheit einer oder mehrerer Doppel- oder Dreifachbindungen in einer ansonsten gesättigten Phanstammverbindung wird außer in Amplifikanten mit Hantzsch-Widman-Namen^[*] durch Hinzufügen der Endungen -en und -in, versehen mit etwaigen erforderlichen multiplikativen Präfixen für die Häufigkeit der jeweiligen Mehrfachbindungsart, gekennzeichnet.^[3m]

In der Phannomenklatur dienen die Endungen -en und -in dazu, die Gegenwart von Doppel- bzw. Dreifachbindungen in vereinfachten Grundgerüsten und in Amplifikanten, die als gesättigte Ringe oder Ringsysteme benannt wurden, anzugeben.

Anmerkung: Die allgemeine Methode muss jedoch an die sich aus der Phannomenklatur ergebenden Namen angepasst werden, in denen die Endung -phan als unveränderlich gilt, damit die Spezifität der Klasse erhalten bleibt. Folglich werden die Endungen -en und -in gemeinsam mit den entsprechenden multiplikativen Präfixen an den Phannamen angefügt.^[**]

PhII-5.3.2 Doppelbindungen in Amplifikanten und in vereinfachten Grundgerüsten

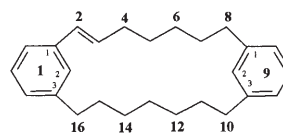
Doppelbindungen werden möglichst niedrige Lokanten in Übereinstimmung mit der feststehenden Bezifferung der Phanstammverbindung oder der mithilfe der Austauschnomenklatur benannten veränderten Phanstammverbindung zugewiesen. Wie üblich wird der veränderte Sättigungsgrad bei einem Benzolring niemals durch Hydropräfixe angegeben; stattdessen wird als Amplifikantenname Cyclohexana verwendet, und nachträglich werden, je nach Bedarf, die Endungen -en und -in angefügt.^[***] Beispiele für die Anwendung der folgenden Regeln enthält Schema 10.^[****]

[*] Diese Einschränkung gilt gleichermaßen für Heterocyclen mit beibehaltenen Trivialnamen, wenn der entsprechende mankude Ring ebenfalls einen beibehaltenen Trivialnamen hat, z. B. Piperidina/Pyridina.

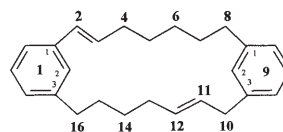
[**] Diese Regel widerspricht dem elementarsten Grundprinzip der sonstigen Nomenklaturregeln, nach dem die Endungen -en und -in stets die Endung -an ersetzen. Ausnahmen davon gibt es aber bereits in der Nomenklatur der Spiroverbindungen (Regeln SP-2.1 und SP-2.4 in Lit. [7]). Zu dem im Regeltext als Erklärung aufgeführten Argument kommt noch hinzu, dass in Phanstammverbindungen mit einer einzigen Doppelbindung die Endung -phen entstünde, die bereits in der Nomenklatur der anellierten Kohlenwasserstoffe und bei einigen Trivialnamen mit anderer Bedeutung verwendet wird.

[***] Die Formulierung dieses Satzes wurde gemäß PhII-5.3.1 gegenüber dem englischen Original korrigiert.

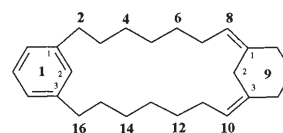
[****] Die Erklärung, die bei der Benennung der dritten Verbindung in Schema 10 gegeben wird, ist nur für den Lokanten 9³(10) richtig, da hier die Alternative 9³(9⁴) besteht. Für 8(9¹) könnte jedoch ohne Verlust der Eindeutigkeit auch einfach der Lokant 8 stehen. Der Doppellokant 8(9¹) ist nur wegen des so formulierten Regeltextes erforderlich.



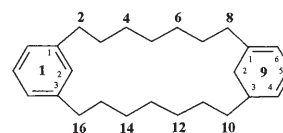
1,9(1,3)-Dibenzenacyclohexadecaphan-2-en (2 ist ein Grundlokant)



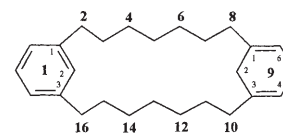
1,9(1,3)-Dibenzenacyclohexadecaphan-2,11-dien (2 und 11 sind Grundlokanten)



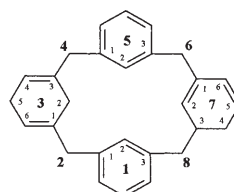
1(1,3)-Benzena-9(1,3)-cyclohexanacyclohexadecaphan-8(9'),9'(10)-dien
[9¹ und 9³ sind zusammengesetzte Lokanten; 8(9¹) und 9³(10) sind Doppellokanten, die notwendig sind, um die Stellung der Doppelbindungen genau anzugeben]



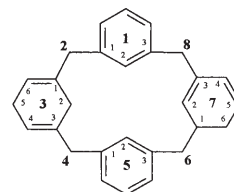
1(1,3)-Benzena-9(1,3)-cyclohexanacyclohexadecaphan-9(9'),9'(9'-dien



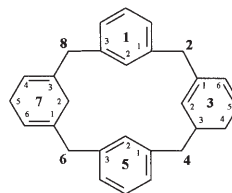
1(1,3)-Benzena-9(1,3)-cyclohexanacyclohexadecaphan-9(9'),9'(9'-dien



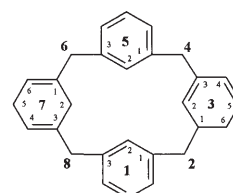
A (richtige Bezifferung)



B (falsche Bezifferung)



C (falsche Bezifferung)



D (falsche Bezifferung)

1,5(1,3)-Dibenzena-3,7(1,3)-dicyclohexanacyclooctaphan-3'(3'),3'(3'),7'(7'),7'-tetraen (A) nicht 1,5(1,3)-Dibenzena-3,7(1,3)-dicyclohexanacyclooctaphan-3'(3'),3'(3'),7'(7'),7'-tetraen (B) nicht 1,5(1,3)-Dibenzena-3,7(1,3)-dicyclohexanacyclooctaphan-3'(3'),3',7'(7'),7'(7')-tetraen (C) nicht 1,5(1,3)-Dibenzena-3,7(1,3)-dicyclohexanacyclooctaphan-3'(3'),3',7'(7'),7'(7')-tetraen (D) [der Satz der Grundlokanten 3,3,7,7 ist bei allen Namen identisch, aber der Satz zusammengesetzter Lokanten 3',3',7',7' bei Name A (die Lokanten in Klammern werden ignoriert) enthält die niedrigeren Lokanten als die Lokantensätze 3',3',7',7' bei B, 3',3',7',7' bei C oder 3',3',7',7' bei D]

Schema 10. Beispiele für die Benennung von Phanstammverbindungen mit Doppelbindungen in Amplifikanten und in vereinfachten Grundgerüsten.

Um von Phanstammverbindungen abgeleitete Verbindungen vollständig zu beschreiben, sind drei Arten von Lokanten erforderlich:^[*]

- Grundlokanten: Das sind die Lokanten, die sich auf Atome und Superatome im vereinfachten Grundgerüst^(K) der Phanstammverbindung beziehen; sie werden von den in den hier abgebildeten Formeln fett gedruckten arabischen Nummern abgeleitet.^[1b]
- Zusammengesetzte Lokanten: Das sind Grundlokanten mit einem hochgestellten Lokanten, der die Stellung innerhalb eines Amplifikanten kennzeichnet; die hochgestellten Lokanten werden von den in den hier abgebildeten Formeln gezeigten kleinen arabischen Nummern abgeleitet.^[1b]
- Doppellokanten:^[**] Sie bestehen aus einem Grundlokanten oder einem zusammengesetzten Lokanten und einem darauf folgenden anderen, in Klammern gesetzten Lokanten und weisen darauf hin, dass sich eine Doppelbindung nicht zwischen zwei Atomen mit aufeinanderfolgenden Nummern befindet.^[3m] ^[***]

Doppelbindungen werden in der Phannomenklatur auf zwei Arten angegeben:

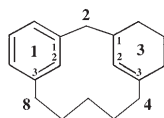
- durch den Lokanten für das niedrigernummerierte Atom der Doppelbindung, falls die Atome zwei aufeinanderfolgende Nummern haben und entweder beide keine hochgestellten Lokanten haben oder beide hochgestellte Lokanten haben und nicht an ein Atom mit einer Nummer ohne hochgestellten Lokanten gebunden sind,
- durch einen aus den Nummern beider Atome zusammengesetzten Doppellokanten, wenn eines der Atome eine Verknüpfungsstelle eines Amplifikanten ist.

Möglichst niedrige Lokanten werden in der nachstehenden Reihenfolge zugeordnet: Als erstes werden nur die Grundlokanten betrachtet, danach die zusammengesetzten Lokanten, jedoch ohne die Lokanten zu berücksichtigen, die in Klammern stehen, und schließlich der vollständige Lokantensatz.^[***]

[*] Die folgenden Abschnitte wurden dort, wo es um Lokanten geht, neu formuliert, weil es Lokanten nur in Namen, nicht dagegen in Formeln gibt.

[**] Die Bezeichnung Doppellokant für die in Regel VB-8.3^[8] ebenfalls zusammengesetzter Lokant genannte Angabe beider Lokanten für eine Doppelbindung wird hier neu vorgeschlagen, um diese Art von Lokanten auch begrifflich von den aus Grundlokant und hochgestelltem Lokanten bestehenden zusammengesetzten Lokanten zu unterscheiden.

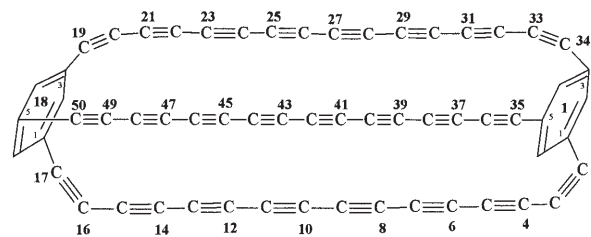
[***] Diese Aussage ist nicht richtig, denn der nachfolgende Regeltext – belegt durch einige der vorgestellten Beispiele – verlangt, dass für Doppelbindungen, die von einer Verknüpfungsstelle eines Amplifikanten ausgehen, stets der in Klammern angefügte Lokant zu verwenden ist. Ein sehr offensichtliches Beispiel ist 1(1,3)-Benzena-3(1,3)-cyclohexanacyclooctaphan-2³(3³)-en:



[***] Die Formulierung dieses Satzes wurde zwecks besseren Verständnisses gegenüber dem Original geändert. Wie die dennoch sehr knappe Formulierung zu verstehen ist, wird vor allem durch das sechste Beispiel in Schema 10 veranschaulicht. Weitere zum Verständnis beitragende Ausführungen und Beispiele finden sich in den Regeln PhI-3.3 und PhI-4.5 in Lit. [1] sowie VB-8.3 in Lit. [8].

PhII-5.3.3 Dreifachbindungen

In der Phannomenklatur werden Dreifachbindungen durch die Endung -in ausgedrückt. Dreifachbindungen, die sich in verbindenden Ketten befinden, werden durch Grundlokanten gekennzeichnet (Schema 11).^[3m] Sollte ein



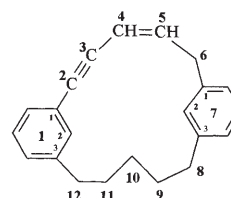
1,18(1,3,5)-Dibenzenabicyclo[16.16.16]pentacontaphan-2,4,6,8,10,12,14,16,19,21,23,25,27,29,31,33,35,37,39,41,43,45,47,49-tetracosain

Schema 11. Beispiel für die Benennung einer Phanstammverbindung mit Dreifachbindungen.

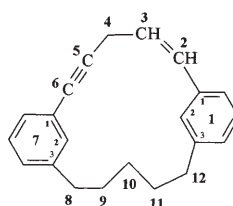
Amplifikant eine oder mehrere Dreifachbindungen enthalten, wie es in einem großen Ring der Fall sein könnte, würden zusammengesetzte und eventuell auch Doppellokanten benötigt. Dreifachbindungen werden möglichst niedrige Lokanten auf die gleiche Art zugewiesen wie Doppelbindungen.

PhII-5.3.4 Doppel- und Dreifachbindungen in einer Phanstammverbindung

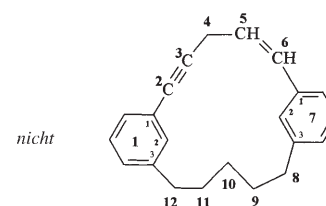
Den Doppel- und Dreifachbindungen werden zuerst in Form eines gemeinsamen Satzes möglichst niedrige Lokanten zugewiesen und, falls das kein eindeutiges Ergebnis liefert, den Doppelbindungen allein (Schema 12).^[3m]



1,7(1,3)-Dibenzenacyclododecaphan-4-en-2-in



1,7(1,3)-Dibenzenacyclododecaphan-2-en-5-in



1,7(1,3)-Dibenzenacyclododecaphan-5-en-2-in

Schema 12. Beispiele für die Benennung von Phanstammverbindungen mit Doppel- und Dreifachbindungen.

PhII-5.4 Doppelbindungen zwischen mankuden Amplifikanten und sie verbindenden^(K) Atomen oder Ketten

Doppelbindungen zwischen mankuden Amplifikanten, die gesättigte Positionen^(K) haben, und Ringe verbindenden^(K) Atomen oder Ketten werden durch die Endung -en gekenn-

zeichnet. Alle noch vorhandenen Wasserstoffatome an gesättigten Positionen^(K) des mankuden Amplifikanten werden durch indizierten Wasserstoff vor dem Namen angegeben und haben für die Vergabe von niedrigen Lokanten Vorrang vor der Endung -en. Dieses Verfahren wird auch bei Doppelbindungen zwischen benachbarten Amplifikanten angewendet. Beispiele sind in Schema 13 zu finden.^[*]

PhII-5.5 Doppelbindungen zwischen hydrierten, von mankuden Systemen abgeleiteten Amplifikanten und verbindenden^(K) Atomen oder Ketten

Doppelbindungen, die sich zwischen teilweise oder vollständig hydrierten, von mankuden Systemen abgeleiteten Amplifikanten und acyclischen Bestandteilen einer Phanstammverbindung befinden, werden durch die Endung -en gekennzeichnet, und auf die Hydrierung des mankuden Amplifikanten wird wie üblich durch Hydropräfixe hingewiesen. Die Namen können mithilfe der im Folgenden vorgestellten und in Schema 14 illustrierten Methoden gebildet werden, wobei Methode (a) bevorzugt wird. Zur Erklärung der Ableitung der beiden Beispielnamen dienen die Formeln I–IV in Schema 14.

Methode (a):

1. Man setze die durch die Endungen -en bezeichneten Doppelbindungen ein;
2. man füge die maximale Zahl noch möglicher Doppelbindungen in den Amplifikanten-Ringen ein;
3. man gebe indizierten Wasserstoff in Übereinstimmung mit der Bezifferung des Amplifikanten an;
4. man bezeichne die Entfernung der entsprechenden Doppelbindungen durch Verwendung von Hydropräfixen.

Diese Methode, d.h. die Einführung von durch die Endung -en gekennzeichneten Doppelbindungen und die nachfolgende Einfügung der maximalen Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen, ist der in FR-8.1.2 in Lit. [6] beschriebenen Methode zur Benennung überbrückter Ringsysteme analog, bei der erst die Brücke eingeführt und danach die maximale Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen hinzugefügt wird.

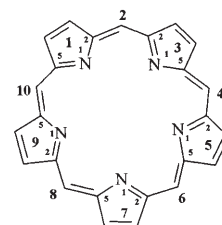
Bei Methode (b) werden nicht abtrennbare Hydropräfixe verwendet. Möglichst niedrige Lokanten werden zuerst gegebenfalls vorhandenem indiziertem Wasserstoff, danach Hydropräfixen und schließlich durch die Endung -en bezeichneten Doppelbindungen zugewiesen (siehe Abschnitt PhII-1.1).

PhII-6 Mehrfach substituierte Derivate von Phanstammverbindungen

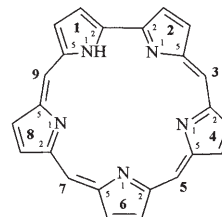
PhII-6.1 Ranghöchste charakteristische Gruppen

Für die Auswahl der ranghöchsten charakteristischen Gruppe wird die Rangfolge der Klassen (siehe Tabelle 10 in

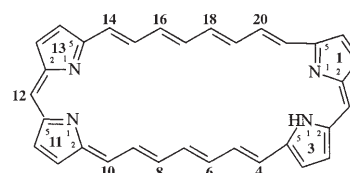
[*] Name und Bezifferung der dritten und der letzten Formel in Schema 13 wurden gegenüber dem englischen Original korrigiert.



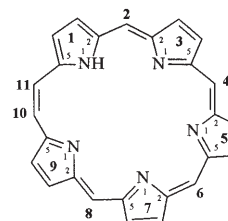
1,3,5,7,9(2,5)-Pentapyrrolacyclodecaphan-1²(2),3³(4),5⁵(6),7⁷(8),9⁹(10)-pentaen



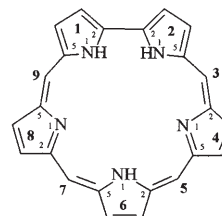
1¹H-1,2,4,6,8(2,5)-Pentapyrrolacyclononaphan-2³(3),4⁴(5),6⁶(7),8⁸(9)-tetraen



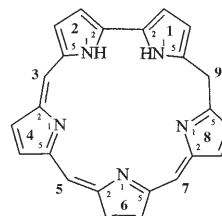
3¹H-1,3,11,13(2,5)-Tetrapyrrolacyclohenicosaphan-1²(2),4,6,8,10(1¹),12(1³),14,16,18,20-decaen



1¹H-1,3,5,7,9(2,5)-Pentapyrrolacycloundecaphan-2(3),4(5),6(7),8(9),10-pentaen

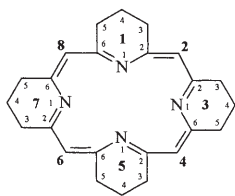


1¹H,2¹H,6¹H-1,2,4,6,8(2,5)-Pentapyrrolacyclononaphan-3(4²),5(6²),6⁶(7),8⁸(9)-tetraen (der Trivialname dieses Pentapyrrol-Makrocyclus lautet Sapphyrin; zur Bezifferung dieser Struktur gemäß dem System für cyclische Tetrapyrrole siehe Lit. [5])



1¹H,2¹H-1,2,4,6,8(2,5)-Pentapyrrolacyclononaphan-3(4²),5(6²),7(8²)-trien, nicht 1¹H,2¹H,3H-1,2,4,6,8(2,5)-Pentapyrrolacyclononaphan-4⁵(5),6⁶(7),8⁸(9)-trien (in dieser Phanstammstruktur ist Position 3 definitionsgemäß gesättigt, und somit ist indizierter Wasserstoff, also 3H, nicht erlaubt; man beachte die dadurch bedingte umgekehrte Bezifferung für den richtigen Namen⁽⁵⁾)

Schema 13. Beispiele für die Benennung von Verbindungen mit Doppelbindungen zwischen mankuden Amplifikanten und sie verbindenden Atomen oder Ketten.



Methode (a): 1¹,1¹,3³,3³,5⁵,5⁵,7⁷,7⁷-Octahydro-1¹H,3³H,5⁵H,7⁷H-1,3,5,7(2,6)-tetrapyrindinacyclooctaphan-1¹(2),3³(4),5⁵(6),7⁷(8)-tetraen, abgeleitet über:

I: 1,3,5,7(2,6)-Tetrapyrindinacyclooctaphan

II: 1¹H,3³H,5⁵H,7⁷H-1,3,5,7(2,6)-Tetrapyrindinacyclooctaphan-1¹(2),3³(4),5⁵(6),7⁷(8)-tetraen

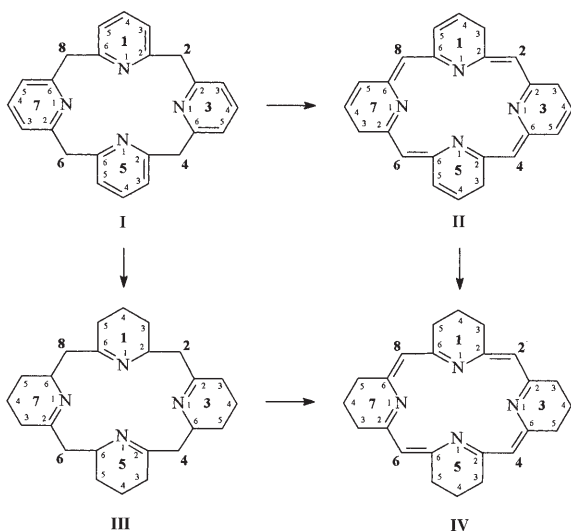
IV: 1¹,1¹,3³,3³,5⁵,5⁵,7⁷,7⁷-Octahydro-1¹H,3³H,5⁵H,7⁷H-1,3,5,7(2,6)-tetrapyrindinacyclooctaphan-1¹(2),3³(4),5⁵(6),7⁷(8)-tetraen

Methode (b): 1¹,1¹,1¹,1¹,3³,3³,3³,3³,5⁵,5⁵,5⁵,5⁵,7⁷,7⁷,7⁷,7⁷-Hexadecahydro-1,3,5,7(2,6)-tetrapyrindinacyclooctaphan-1¹(2),3³(4),5⁵(6),7⁷(8)-tetraen, abgeleitet über:

I: 1,3,5,7(2,6)-Tetrapyrindinacyclooctaphan

III: 1¹,1¹,1¹,1¹,3³,3³,3³,3³,5⁵,5⁵,5⁵,5⁵,7⁷,7⁷,7⁷,7⁷-Hexadecahydro-1,3,5,7(2,6)-tetrapyrindinacyclooctaphan

IV: 1¹,1¹,1¹,1¹,3³,3³,3³,3³,5⁵,5⁵,5⁵,5⁵,7⁷,7⁷,7⁷,7⁷-Hexadecahydro-1,3,5,7(2,6)-tetrapyrindinacyclooctaphan-1¹(2),3³(4),5⁵(6),7⁷(8)-tetraen

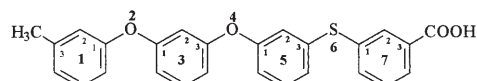


Schema 14. Beispiel für die Benennung von Phanstammverbindungen nach Methode (a) und (b).

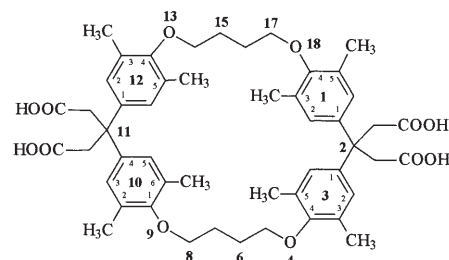
Lit. [3n]) verwendet. Charakteristische Gruppen, die nicht als ranghöchste charakteristische Gruppe ausgewählt wurden, werden mit Präfixen benannt. Die Bezifferung von Phanstammverbindungen beruht in erster Linie auf dem Ort und der Art ihrer Amplifikanten und auf der Art des vereinfachten Grundgerüsts (monocyclisch, spiro-, bi- und polycyclisch). In Übereinstimmung mit dieser Bezifferung werden möglichst niedrige Lokanten zuerst^[*] der ranghöchsten charakteristischen Gruppe und anschließend den als Präfixen genannten Gruppen zugeordnet (Schema 15^[**]).

[*] Indizierter Wasserstoff hat als Bestandteil der Stammverbindung bei der Vergabe niedriger Lokanten Vorrang vor der ranghöchsten charakteristischen Gruppe; vgl. PhII-1.1.

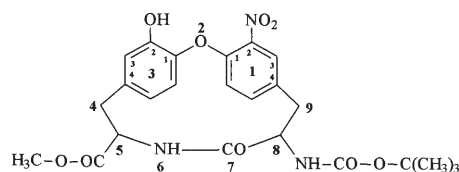
[**] Der alternative Name des im Schema gezeigten Anthracena-tetrazabenabicyclo[9.3.3]heptadecaphandions wurde unter Verwendung nicht abtrennbarer Hydropräfixe erhalten und gegenüber dem englischen Original ergänzt. Der Name der letzten Verbindung wurde gemäß Regel SP-1.4^[7] korrigiert.



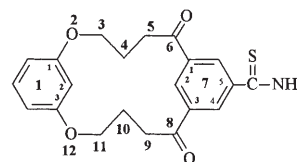
1¹-Methyl-2,4-dioxa-6-thia-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenaheptaphan-7⁷-carbonsäure



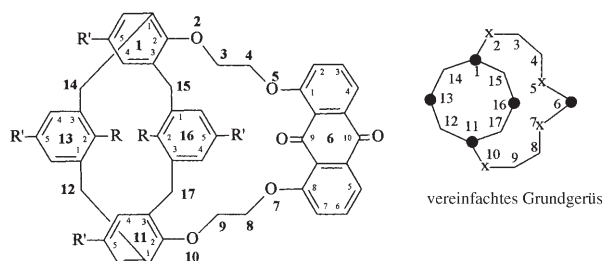
2,2',2'',2'''-[1³,1⁵,3³,3⁵,10²,10⁶,12³,12⁵-Octamethyl-4,9,13,18-tetraoxa-1,3,10,12(1,4)-tetrabenzenacyclooctadecaphan-2,2,11,11-tetra]tetraessigsäure



Methyl-8-[(*tert*-butoxycarbonyl)amino]-3³-hydroxy-1¹-nitro-7-oxo-2-oxa-6-aza-1,3(1,4)-dibenzenacyclononaphan-5-carboxylat



6,8-Dioxa-2,12-dioxa-1,7(1,3)-dibenzenacyclododecaphan-7⁷-carbothioamid

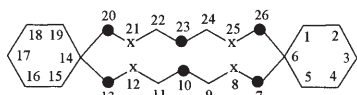
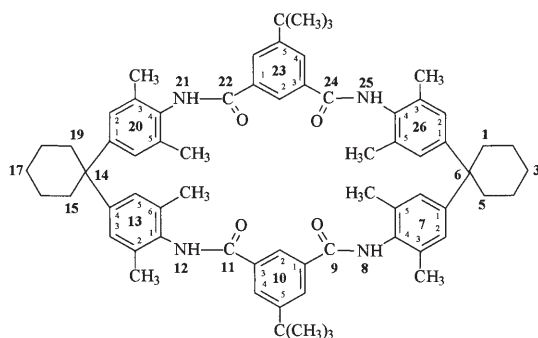


vereinfachtes Grundgerüst

R = OH; R' = C(CH₃)₃; 1¹,11¹,13³,16⁵-Tetra-*tert*-butyl-13²,16²-dihydroxy-2,5,7,10-tetraoxa-6(1,8)-anthracena-1,11(2,1,3),13,16(1,3)-tetrabenzenabicyclo[9.3.3]-heptadecaphan-6⁶,6⁶-dion oder 1¹,11¹,13³,16⁵-Tetra-*tert*-butyl-13²,16²-dihydroxy-6⁶,6⁶-dihydro-2,5,7,10-tetraoxa-6(1,8)-anthracena-1,11(2,1,3),13,16(1,3)-tetrabenzenabicyclo[9.3.3]heptadecaphan-6⁶,6⁶-dion (zur Nomenklatur von Chinonen siehe Lit. [3o])

R = CH₂-COO-CH₂-CH₂-CH₃; R' = C(CH₃)₃; Dipropyl-2,2'-[1¹,11¹,13³,16⁵-tetra-*tert*-butyl-6⁶,6⁶-dioxo-6⁶,6⁶-dihydro-2,5,7,10-tetraoxa-6(1,8)-anthracena-1,11(2,1,3),13,16(1,3)-tetrabenzenabicyclo[9.3.3]-heptadecaphan-13²,16²-diyl]diacetat

Schema 15. Beispiele für die Benennung von substituierten Phanstammverbindungen mit zumindest einer als Suffix zu benennenden charakteristischen Gruppe.



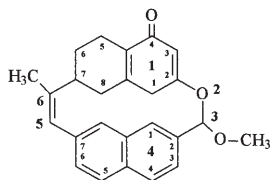
vereinfachtes Grundgerüst

10¹,23⁵-Di-*tert*-butyl-7⁷,7⁷,13³,13³,20³,20³,26⁵,26⁵-octamethyl-8,12,21,25-tetraaza-7,13,20,26(1,4),10,23(1,3)-hexabenzenadisp[5.7.5.7]hexacosaphan-9,11,22,24-tetron^(K)

Schema 15. (Fortsetzung)

PhII-6.2 Reihenfolge der Namensbestandteile bei mehrfach substituierten Derivaten von Phanstammverbindungen

Die Reihenfolge der Namensbestandteile mehrfach substituierter Phane^[**] folgt der in den Namen organischer Verbindungen üblichen, d. h., es gilt folgende Reihenfolge (in Schema 16 ist ein Beispiel gezeigt): abtrennbare Präfixe (in alphabetischer Reihenfolge) – nicht abtrennbare Hydro-/Dehydropräfixe – nicht abtrennbare Austauschpräfixe – Name der Phanstammverbindung – Endungen -en und -in – Suffixe.



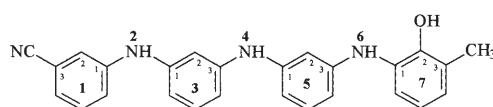
Methode des addierten Wasserstoffs (siehe PhII-3.2): 3-Methoxy-6-methyl-1¹,1¹,1¹,1¹-tetrahydro-2-oxa-1,4(2,7)-dinaphthalenacyclohexaphan-5-en-1¹(1¹H)-on
Benennung mithilfe nicht abtrennbarer Hydropräfixe (siehe PhII-3.2): 3-Methoxy-6-methyl-1¹,1¹,1¹,1¹,1¹,1¹-hexahydro-2-oxa-1,4(2,7)-dinaphthalenacyclohexaphan-5-en-1¹-on

Schema 16. Beispiel für die Reihenfolge der Namensbestandteile bei mehrfach substituierten Derivaten von Phanstammverbindungen.

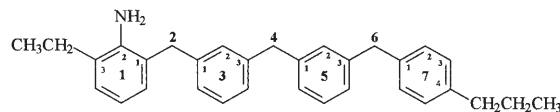
PhII-6.3 Reihenfolge für die Zuordnung möglichst niedriger Lokanten bei Derivaten von Phanstammverbindungen

Falls nötig werden möglichst niedrige Lokanten den folgenden Strukturelementen nacheinander in der aufgeführten Reihenfolge zugewiesen (siehe Abschnitt PhII-1.1): 1. Als Suffix genannte ranghöchste Gruppe; 2. Unsatigung (En-

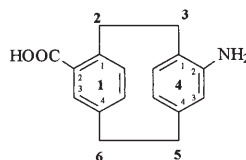
[*] Der Begriff „Phan“, wie er hier eingeführt wird, bedeutet „eine nach den Regeln der Phannomenklatur benannte Verbindung“ und ist analog dem Begriff „Cyclophan“ auch als Name für die Verbindungsklasse zu verwenden.



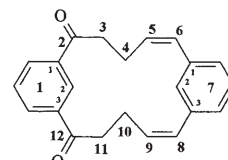
7'-Hydroxy-7'-methyl-2,4,6-triaza-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenaheptaphan-1'-carbonitril



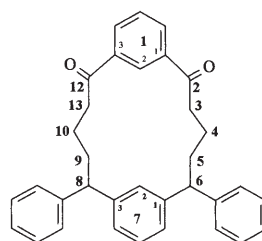
1'-Ethyl-7'-propyl-1,7(1),3,5(1,3)-tetrabenzenaheptaphan-1'-amin



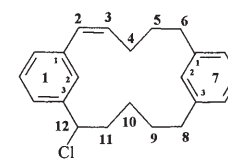
4'-Amino-1,4(1,4)-dibenzenacyclohexaphan-1'-carbonsäure



1,7(1,3)-Dibenzenacyclododecaphan-5,8-dien-2,12-dion



6,8-Diphenyl-1,7(1,3)-dibenzenacyclododecaphan-2,12-dion^(K)



12-Chlor-1,7(1,3)-dibenzenacyclododecaphan-2-en

Schema 17. Beispiele für die Reihenfolge der Zuordnung möglichst niedriger Lokanten bei Derivaten von Phanstammverbindungen.

dungen -en und -in); 3. als Präfixe genannte Substituenten. In Schema 17 ist dieses Vorgehen an einigen Beispielen illustriert.

Anhang: Berichtigung zur Übersetzung des ersten Teils der Phannomenklatur

Durch ein Versehen wurde der zweite Satz im dritten Absatz von Regel PhI-2.3.1^[1] ungenau formuliert. Er lautet richtig: „Wenn unterschiedliche Lokantensätze für die Verknüpfungsstellen gleicher Amplifikanten mehrfach vorkommen, werden diese Lokantensätze für die Verknüpfungsstellen in aufsteigender numerischer Reihenfolge der entsprechenden jeweils zuerst aufgeführten Superatomlokanten angeordnet.^[*]“ Daraus folgt, dass z. B. die Reihenfolge der Lokantensätze 7,13,20,26(1,4),10,23(1,3) durch die Superatomlokanten 7 und 10 festgelegt ist.

Eingegangen am 6. Juni 2006

[1] „Phane nomenclature. Part I: Phane parent names“: *Pure Appl. Chem.* **1998**, 70, 1513–1545; <http://chem.qmul.ac.uk/iupac/phane/>; deutsche Ausgabe: „Phannomenklatur Teil I: Phanstammna-

- men“: *Angew. Chem.* **2006**, *118*, 3967–3984. a) PhI-2.2; b) PhI-3.3.
- [2] „Glossary of class names of organic compounds and reactive intermediates based on structure“: *Pure Appl. Chem.* **1995**, *67*, 1307–1375; <http://chem.qmul.ac.uk/iupac/class/>.
- [3] *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993* (Hrsg.: International Union of Pure and Applied Chemistry), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1993**; siehe auch: <http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/>; deutsche Ausgabe: *Nomenklatur der Organischen Chemie, eine Einführung* (Hrsg.: G. Kruse), VCH, Weinheim, **1997**. a) R-4.1; b) R-5.7.4.2; c) R-5.7.7; d) R-5.7.6; e) siehe Lit. [3a]; f) R-0.1.8; g) R-0.2.4.2; h) R-1.3; i) R-2.5; j) R-0.1.8.3; k) R-3.1.2; l) R-3.1.3; m) R-3.1.1; n) R-4.1, Tabelle 10; o) R-5.6.2.1; p) R-0.2.3.3.3; q) R-2.3.3.1; man beachte auch die zur englischen Ausgabe publizierten Korrekturhinweise (die in der deutschen Ausgabe weitestgehend berücksichtigt wurden): „Corrections to *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (IUPAC Recommendations 1993)*“: *Pure Appl. Chem.* **1999**, *71*, 1327–1330; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/bibliog/errata.html>; <http://www.iupac.org/reports/1999/7107favre/index.html>
- [4] Regel RC-82.4 in „Revised nomenclature for radicals, ions, radical ions and related species“: *Pure Appl. Chem.* **1993**, *65*, 1357–1455; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/ions/>.
- [5] „Nomenclature of tetrapyrroles“: *Eur. J. Biochem.* **1988**, *178*, 277–328; auch in: *Pure Appl. Chem.* **1987**, *59*, 779–832^(K); *Biochemical Nomenclature and Related Documents, A Compendium*, 2. Aufl. (Hrsg.: IUBMB), Portland Press, London, **1992**, S. 278–329; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/>; siehe Regel TP-5.4.
- [6] „Nomenclature of fused and bridged fused ring systems“: *Pure Appl. Chem.* **1998**, *70*, 143–216; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/fusedring>.
- [7] „Extension and revision of the nomenclature for spiro compounds“: *Pure Appl. Chem.* **1999**, *71*, 531–558; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/spiro/>; deutsche Ausgabe: „Erweiterung und Revision der Nomenklatur der Spiroverbindungen“: *Angew. Chem.* **2002**, *114*, 4073–4089.^(K)
- [8] „Extension and revision of the von Baeyer system for naming polycyclic compounds (including bicyclic compounds)“: *Pure Appl. Chem.* **1999**, *71*, 513–529; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/vonBaeyer/>; deutsche Ausgabe: „Erweiterung und Revision des von-Baeyer-Systems zur Benennung polycyclischer Verbindungen (einschließlich bicyclischer Verbindungen)“: *Angew. Chem.* **2002**, *114*, 3423–3432.^(K)
- [9] Die Commission on Nomenclature of Organic Chemistry der Organic Chemistry Division der International Union of Pure and Applied Chemistry umfasste während der Erarbeitung dieser Empfehlungen (1998–2001) folgende Personen: Ordentliche Mitglieder: B. J. Bossenbroek, F. Cozzi (seit 1996), H. A. Favre (seit 1989, Vorsitzender seit 1991), B. J. Herold (1994–1997 und ab 2000, Schriftführer ab 2000), J. G. Traynham (1991–1999, Schriftführer 1994–1999), J. L. Wiśniewski (seit 1991), A. Yerin; assoziierte Mitglieder: A. A. Formanovsky, L. Goebels (ab 2000), K.-H. Hellwich, B. J. Herold (1998–1999), M. V. Kisakürek (1987–1993 und ab 1998), A. J. Lawson (seit 1991), J. Nyitrai (seit 1994), H. A. Smith, Jr. (seit 1994), J. H. Stocker (1991–1999), S. S.-C. Tsay; nationale Vertreter: O. Achmatowicz (Polen, 2000–2001), Q.-Y. Chen (China, seit 1991), S. Ikegami (Japan, 1986–1999), J. Kahovec (Tschechische Republik, seit 1989), Eun Lee (Korea, seit 1994), L. Maat (Niederlande, 1989–1991 und seit 1996), G. P. Moss (Großbritannien), J. A. R. Rodrigues (Brasilien), M. S. Wadia (Indien, seit 1996).