

ZUR NOMENKLATUR DER PHANE—II¹

F. VÖGTLE* und P. NEUMANN

Institut für Organische Chemie der Universität Heidelberg

(Received in Germany 17 July 1970; Received in the UK for publication 14 August 1970)

Zusammenfassung—Für den neuen Begriff "PHANE" wird eine klare Definition gegeben. Ein in sich geschlossenes, sehr allgemein anwendbares und dabei doch vergleichsweise einfaches und berschaubares Nomenklatorsystem für alle Phane wird entwickelt. Die Termini "Kern", "Brücke", "Brückengliederzahl" und "Ringgliederzahl" werden definiert. Zur eindeutigen Charakterisierung von Phanen mit carbocyclischem Kern sowie carbocyclischer und heterocyclischer Brücke werden die Bezeichnungen "Carbophan", "Carba-phan" und "Hetera-phan" neu eingeführt. Das Präfix "hetera-" wird als allgemeiner Ausdruck und Oberbegriff für die Silben "aza-", "oxa-", "thia-" usw. vorgeschlagen, die sogenannte "a-Nomenklatur" wird eindeutiger "Hetera-Nomenklatur" genannt. Die neuen Begriffe "heteralog" und "substitutolog" werden erläutert. Anhand von Beispielen wird gezeigt, dass die "Phan-Nomenklatur" auch komplizierte "Metallocenophane" zwanglos zu benennen gestattet.

Abstract—The new term "Phanes" has been clearly defined and a nomenclature system tentatively developed. This system is comprehensible and of general application and at the same time relatively simple. The notations "nucleus", "bridge", "number of bridge members" and "number of ring members" are defined. In order to get a definite characterisation of the phanes which contain a carbocyclic nucleus, a carbocyclic and heterocyclic bridge the following terms: "carbophanes", "carba-phanes" and "hetera-phanes" have been newly introduced. The prefix "hetera-" has been proposed as a general expression and as a representative term for the syllables "aza-", "oxa-", "thia-" and so on. The so called "a-nomenclature" is clearly called "hetera-nomenclature". The new expressions "heteralogous" and "substitutologous" are explained. As the various examples will show, the "Phane-Nomenclature" can also be applied to the naming of complicated metallocenophanes.

1. EINLEITUNG

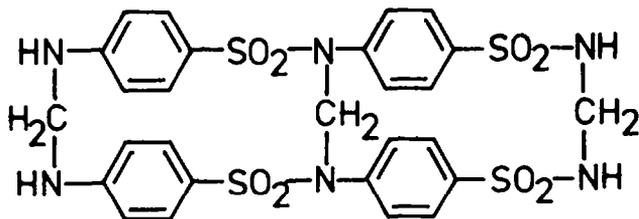
1.1. *Problematik*. Die rasch ansteigende Zahl der überbrückten Aromaten hat in den letzten Jahren eine Reihe von Problemen aufgeworfen, was die Nomenklatur dieser Verbindungen betrifft. Wenngleich für alle, auch polycyclische Ringverbindungen, eine eindeutige und systematische Bezeichnung und Bezifferung nach dem IUPAC-System^{2a-d} grundsätzlich möglich ist, so sind dennoch die danach gebildeten Namen selbst für hochsymmetrische überbrückte Aromaten oft lang, schwerfällig und unübersichtlich.† Hinzu kommt, dass die Anzahl der tatsächlich vorhandenen Ringe nicht ohne weiteres aus den IUPAC-Bezeichnungen hervorgeht.³ Darüber hinaus lassen diese Namen meist nicht das Charakteristische jener Verbindungen, nämlich das überbrückte aromatische System, erkennen. Aus der in Abbildung 1—wiedergegebenen Bezeichnung, wie sie in den "Chemical Abstracts"⁴ angegeben wird, ist beispielsweise sicher nicht sofort zu ersehen, dass es sich bei der zugrundeliegenden Verbindung um ein überbrücktes Sulfonamid der Struktur 1⁵ handelt.

* Neue Adresse: Institut für Organische Chemie der Universität Würzburg, 87 Würzburg, Landwehr.



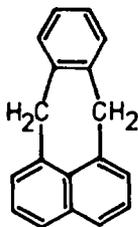
2,8,12,18-Tetrathia-3,9,11,17,23,25-hexaazahexacyclo[24.2.2.2⁴.7.2¹³.16.2¹⁹.22.1³.1⁷]heptatriaconta-4,6,13,15,19,21,26,28,29,31,33,35-dodecaene. 2.2.8.8.12.12.18.18-octaoxide

ABB 1. Bezeichnung für 1 laut "Chemical Abstracts"

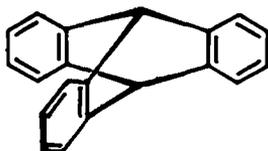


1

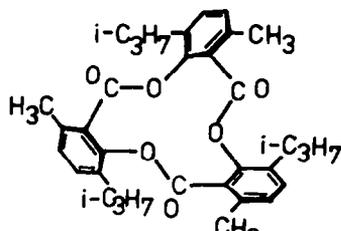
Die angeführten Schwierigkeiten machen es auch verständlich, dass das konventionelle Nomenklatur-System wegen seiner komplizierten Handhabung im Falle der überbrückten *aromatischen* Verbindungen leicht zu Fehlern führt.⁶ Um die Mühe einer systematischen Benennung zu umgehen, wurde für eine Reihe von zum Teil recht einfachen, symmetrischen überbrückten aromatischen Verbindungen Trivialnamen eingeführt, so etwa für die Pleiadene (vgl. z.B. 7,12-Dihydropleiaden 2), Triptycenen (3), Tri-o-thymotid (4) und andere.



2*



3*

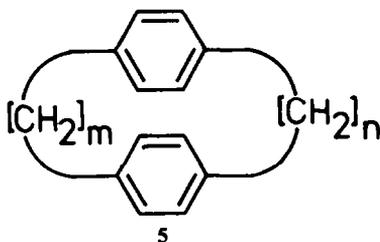


4*

Weitere in der Literatur anzutreffende Bezeichnungsweisen für überbrückte Aromaten, die zur Vereinfachung geschaffen wurden, sind meist nur für einige spezielle einfache Verbindungen geeignet und erlauben nicht den Aufbau eines umfassenden, allgemein gültigen Nomenklatorsystems. Sie werden deshalb auch nur vereinzelt angewandt.⁷

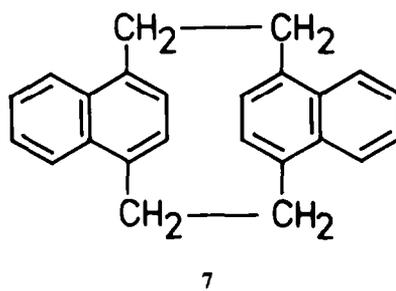
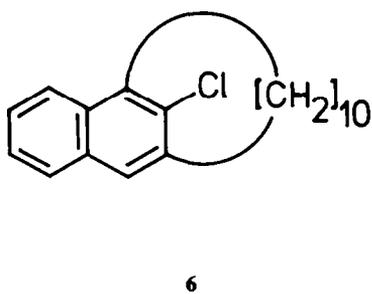
1.2. *Historisches.* Den ersten Versuch zu einer zufriedenstellenden Lösung des Nomenklaturproblems unternahmen Cram und Steinberg⁸ 1951, indem sie von ihnen synthetisierte Verbindungen des Typs 5, bei denen zwei Benzolringe in *p*-Stellung über Methylenbrücken verknüpft sind, als *Paracyclophane* bezeichneten. Schubert *et al.*⁹ wandten den Vorschlag auf in beliebiger Stellung (*o,m,p*) durch Methylengruppen überbrückte Benzolkerne an. Cram und Abell¹⁰ verbesserten schliesslich noch einige Unzulänglichkeiten.

* Die nach der Phan-Nomenklatur¹ sich ergebenden (Phan-) Bezeichnungen für die Verbindungen 1 bis 36 sind in Tabelle 2 zusammengestellt.



Auf der Grundlage dieser Arbeiten nahm Smith⁷ eine grundsätzliche Erweiterung vor. Sein Nomenklaturvorschlag umfasste nun auch überbrückte *heterocyclische Aromaten*, *Heteroatome in der aliphatischen Brücke* und *mehrfach überbrückte Systeme mit aromatischen Brückenkopfaten*. Trotz dieser praktikablen Nomenklaturvorschläge blieb allerdings die Bezeichnung und Bezifferung der seither in der Literatur beschriebenen überbrückten Aromaten unsystematisch und wenig einheitlich. Insbesondere bedurfte es noch der *präzisen Definition* unterschiedlich verwendeter Begriffe wie beispielsweise "Cyclophan", Heterophan" usw. und der qualitativen Erweiterung des Nomenklaturvorschlags von Smith, insbesondere auf *unmittelbar* cyclisch verknüpfte aromatische Ringe und auf solche mit zusätzlichen *aliphatischen* Brückenkopfaten.

Die Notwendigkeit einer Präzisierung mögen einige Beispiele illustrieren: Die überbrückte Naphthalinverbindung 6 wurde trotz ihres Naphthalingerüsts zu den Metacyclophanen gezählt: 12,13-Benzo-16-chlor[10]metacyclophan.¹¹ Für die



symmetrische Verbindung 7 sind in der Literatur sogar fünf verschiedene Bezeichnungen zu finden:

6,7,14,15-Tetrahydro-5,16:8,13-diethenodibenzo[a,g]cyclododecen¹²

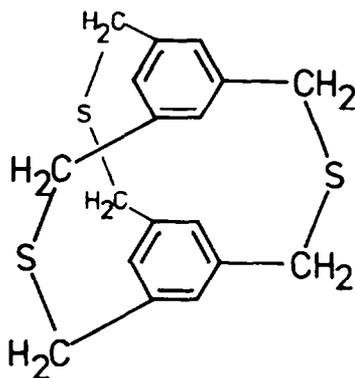
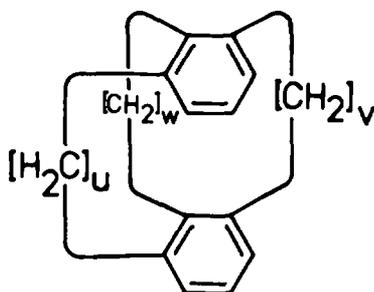
4,5,12,13-Dibenzo[2.2]paracyclophan¹³

[2.2]Paracyclonaphthan^{14a,b,c}

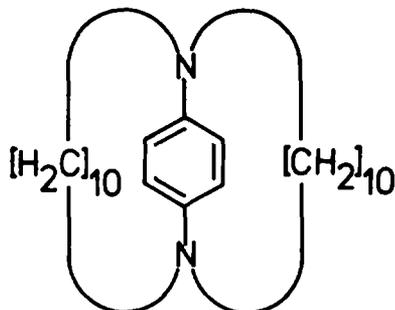
[2.2]Paracyclonaphthalin¹⁵

[2.2](1,4)Naphthalinophan.¹⁶

Während sich nun dreifach überbrückte Aromaten wie 8 und 9 noch in Anlehnung an die Vorschläge von Smith⁷ benennen lassen, ist dies beispielsweise für die von Lüttringhaus und Simon¹⁷ dargestellte Verbindung 10 nicht mehr ohne qualitative Erweiterung des Systems möglich:

8¹⁸

9



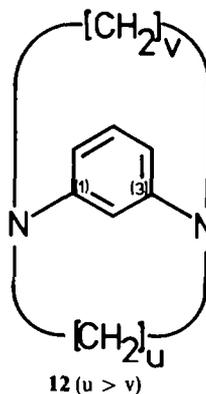
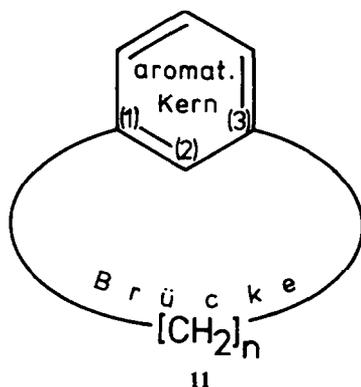
10

In einer vor kurzem erschienenen vorläufigen Mitteilung¹ wurden Unklarheiten, Mängel und Lücken des Smithschen Systems zu beseitigen versucht. Im folgenden werden darüber hinaus klare Definitionen für die verwendeten neuen Begriffe gegeben; sodann wird eine neue zweckmäßige Einteilung der Phane in Untergruppen vorgeschlagen. Hierauf wird das als Phan-Nomenklatur¹ (nomenclature of phanes) bezeichnete Benennungssystem in Form von Regeln systematisch zusammengefasst. Dabei wurde besonderer Wert darauf gelegt, bestehende IUPAC-Regeln bzw. Empfehlungen weitgehend zu berücksichtigen und die Phan-Regeln diesen anzupassen. Ausgewählte Beispiele aus dem gesamten Bereich der Phane sind zur Erleichterung der praktischen Anwendung angefügt.

2. DEFINITIONEN

2.1. *Definition und Strukturelemente der Phane.*¹⁹ Wir bezeichnen als *Phane* alle (bi-, oligo- oder polycyclischen) Verbindungen, die wenigstens einen *aromatischen Kern* und wenigstens eine *Brücke* enthalten, wobei die Brückengliederzahl alle ganzzahligen Werte $n \geq 0$ (null) annehmen kann.

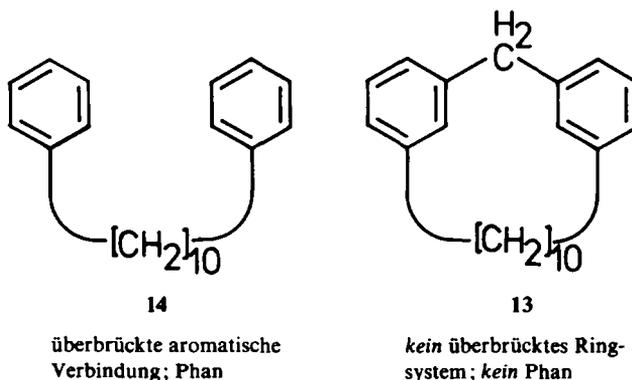
Einen der einfachsten Phan-Typen stellt dementsprechend 11 dar.



Gleichbedeutend mit der Bezeichnung *aromatischer Kern* sind die Begriffe *aromatischer Ring*, *aromatische Grundeinheit* und *Stamm-Kern* (aromatic parent compound, aromatic ring, aromatic nucleus). Die Nomenklatur dieser aromatischen Grundeinheiten ist durch die IUPAC-Regeln^{2a} A-21.1 bis A-22.5 festgelegt.

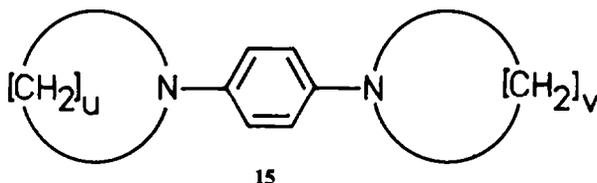
Unter einer *Brücke* versteht man nach den "IUPAC 1957 Rules" A-31.1(1) "eine Valenzbindung oder ein Atom oder eine unverzweigte Kette von Atomen, die zwei verschiedene Teile eines Moleküls miteinander verbinden".^{2a} Die beiden durch die *Brücke* verbundenen Atome werden *Brückenköpfe* genannt. Bei den Phanen empfiehlt sich eine Differenzierung zwischen *aromatischen*--C(1) und C(3) in **11** und **12**-- und *aliphatischen* Brückenkopfatomen (Stickstoffatome in **12**).

Aus einer aliphatischen *Kette* { -- [CH₂]₁₀ -- in 1,10-Diphenyl-decan (**13**)} wird demnach erst dann eine *Brücke*, wenn sie Glied eines cyclischen Systems wie in [10.1]Metacyclophan (**14**) ist.



Da in der IUPAC-Definition der *Brücke* bereits der Sinn "cyclisch" impliziert ist, scheint es unter Berücksichtigung der gegebenen Definitionen nun auch nicht mehr erforderlich, den cyclischen Charakter der *Phane* durch Verwendung des Ausdrucks "cyclisch überbrückt" besonders zu betonen; es genügt der Terminus "*überbrückte aromatische Verbindungen*".

Verbindungen des Typs **15**¹⁷ sind nicht zu den Phanen zu rechnen, da eine *Brücke* im Sinn obiger Definition nicht vorliegt.

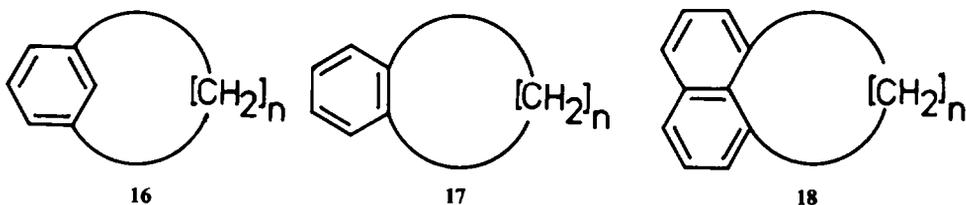


Die *Brückengliederzahl* (bridge members) gibt die Anzahl der Atome in der Brücke an, wobei die Brückenkopfatome nicht mitgezählt werden. Das Phan 14 weist beispielsweise je eine Brücke der Gliederzahlen zehn und eins auf.

Unter der *Ringgliederzahl* (ring members) verstehen wir die Summe aus Brückengliederzahl, Zahl der Brückenkopfatome und der geringsten Zahl der Atome zwischen diesen Brückenkopfatomen des aromatischen Kerns (bzw. der aromatischen Kerne). Bei 11 beträgt die Ringgliederzahl $n + 3$, bei 14 siebzehn.

2.2. *Die Phane als Verbindungsklasse.* Mit dem Namen Phane erhalten alle überbrückten aromatischen Verbindungen eine einheitliche charakteristische Klassenbezeichnung, die ihre Besonderheit und Individualität heraushebt.

Der Oberbegriff *Phane* ist viel weiter gefasst als der von Lüttringhaus und Gralheer²⁰ 1942 vorgeschlagene Terminus der "*Ansa-Verbindungen*". Mit letzterem wurden Ringsysteme bezeichnet, "die mit aromatischen Kernen in anderer als der gewöhnlichen *ortho*- oder *peri*-Stellung kondensiert sind". Das Verhältnis der Ansa-Verbindungen zu den Phanen ist so zu beschreiben, dass zwar alle Ansa-Verbindungen zu den Phanen gehören, nicht jedoch umgekehrt alle Phane zu den Ansa-Verbindungen. Auf Grund der ersichtlichen strukturellen Analogie der Verbindungen 16 {[*n*]-Metacyclophan}, 17 {[*n*]Orthocyclophan} und 18 {[*n*](1,8)Naphthalinophan}

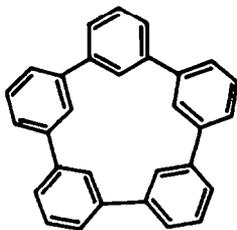


halten wir es für zweckmässig, auch die *ortho*- und *peri*-überbrückten Aromaten zu den Phanen zu zählen, zumal die IUPAC-Definition der *Brücke* gleichfalls nicht auf die $1, \omega$ -Position ($\omega \geq 2$) beschränkt ist.*

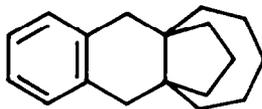
Schon Schubert *et al.*⁹ wandten den Begriff Cyclophan gleichberechtigt auf in *o*-, *m*- und *p*-Stellung mit aliphatischen Ketten überbrückte Benzolkern an. Der Ausdruck "Orthocyclophan" wurde kürzlich in Anschluss an unseren Vorschlag¹ in der Literatur verwendet.²¹

Zur Klasse der Phane sind—gemäss der IUPAC-Definition, dass eine Brücke im Grenzfall *null* Glieder ($n = 0$) aufweisen kann—auch rein aromatische Cyclen

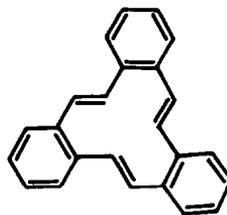
* Aus demselben Grunde verwenden wir das Wort "überbrückt" auch für den Fall der *ortho*- und *peri*-ankondensierten Ringe; vgl. hierzu jedoch E. L. Eliel, *Stereochemie der Kohlenstoffverbindungen*, übersetzt von A. Lüttringhaus und R. Cruse, Weinheim/Bergstr. 1966, S.325.



19



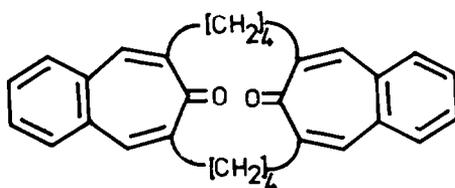
20



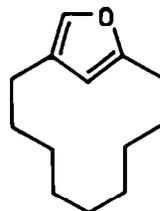
21

wie **19**²² zu rechnen. Als weitere wichtige Gruppe können die Pleiade (z.B. 7.12-Dihydro-pleiaden **2**) sowie die einen—oder mehrere ankondensierte aromatische Kerne enthaltenden Propellane z.B. **20**) und Annulene (z.B. **21**) zu den Phanen gerählt werden.

Das für die Zugehörigkeit zur Klasse der Phane angewandte Kriterium der Aromatizität, deren Grenzen ja recht fließend sind, soll dabei nicht zu eng ausgelegt

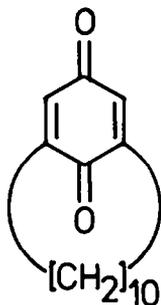


22

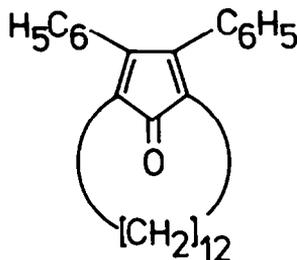


23

werden. Verbindungen wie **22**²³ und **23**²⁴ werden trotz der geringen Delokalisierungsenergie der zugrundeliegenden Stammaromaten zu den Phanen gerechnet. Auch gekreuzt konjugierte Verbindungen wie **24**²⁵ und **25**,²⁶ für deren überbrückten Ring eine enge strukturelle Verwandtschaft zu den eigentlichen Aromaten besteht, können ebenfalls nach der Phan-Nomenklatur benannt werden.



24



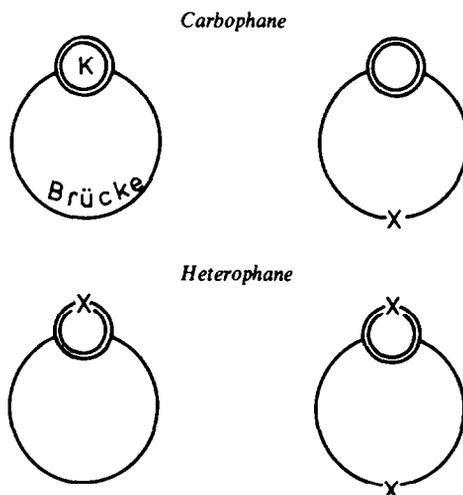
25

2.3. Unterteilung der Phane. Eine systematische Unterteilung der Phane in kleinere Gruppen und Untergruppen erscheint bei der Vielfalt der in den letzten Jahren dargestellten Vertreter notwendig und sinnvoll.

Bei der im folgenden vorgeschlagenen Unterteilung gehen wir von dem Begriff "Heterophan" aus, der sich als Bezeichnung all derjenigen Phane bewährt hat, deren

aromatischer Kern durch wenigstens einen aromatischen Heterocyclus—beispielsweise Pyridin oder Thiophen—repräsentiert wird. Es lag infolgedessen nahe, den Phanen mit carbocyclischem aromatischem Kern—beispielsweise mit Naphthalinkern—den Namen "Carbophane" zu geben.

Wie das Schema 1 zeigt, sagen die *Gruppen-Namen Heterophan* und *Carbophan* nun noch nichts darüber aus, ob die *Brücke* Heteroatome enthält oder nicht.



SCHEMA 1.* Zur Definition der Carbophane und der Heterophane.
K = aromatischer Kern; X = Heteroatom

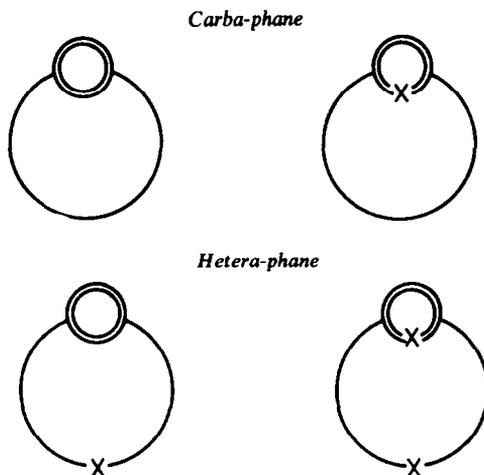
Zur Bezeichnung von Phanen mit einem oder mehreren in der Brücke befindlichen Heteroatomen gehen wir von der IUPAC-Regel B-1.1 aus, die Heteroatome in cyclischen Verbindungen mit den Präfixen aza-, oxa-, thia- usw. charakterisiert. Phane mit Heteroatomen in der Brücke können demnach zweckmässig als "Heteraphane"—je nach der Anzahl der Heteroatome als Monohetera-, Dihetera-, Triheteraphane usw. bezeichnet werden. Für Phane mit carbocyclischer Brücke lässt sich zwanglos der Gruppen-Name "Carbaphane" ableiten. Wie das Schema 2 zum Ausdruck bringt, geben die beiden neuen Begriffe keinen Aufschluss über den Charakter des aromatischen Kerns; sie beziehen sich ausschliesslich auf die Verhältnisse in der Brücke.

Der Deutlichkeit halber schreiben wir Carbophan und Heterophan *ohne*, Carbaphan und Heteraphan *mit* Bindestrich. Dies entspricht auch der bisher üblichen Schreibweise für "Heterophan" und beispielsweise "Aza-cyclophan".

Wir möchten in diesem Zusammenhang für die IUPAC-Regeln B-1.1 und B-4.1, die manchmal als "a"- oder "A-Nomenklatur"^{2b}, manchmal als "aza-oxa-Nomenklatur" bezeichnet werden, die aussagekräftigeren Termini "Hetera-Regel" bzw. "Hetera-Nomenklatur" vorschlagen.

Verbindungen—auch nichtcyclische—, die sich nur in der Art eines in gleicher Position aliphatisch gebundenen Heteroatoms (O, S, NH usw.) unterscheiden,

* Die konzentrischen Kreise symbolisieren ein aromatisches Ringsystem, der grössere Kreis stellt die Brücke des Phans dar.



SCHEMA 2 Zur Definition der Carba-phane und der Hetera-phane.
X = Heteroatom.

nennen wir "*heteralog*". Sind in einer Verbindungsreihe mehrere Heteroatome durch andere in identischer Position ersetzt, so wäre von di-, tri-, tetra-heteralogen Verbindungen usw. zu sprechen (vgl. Abb 2).

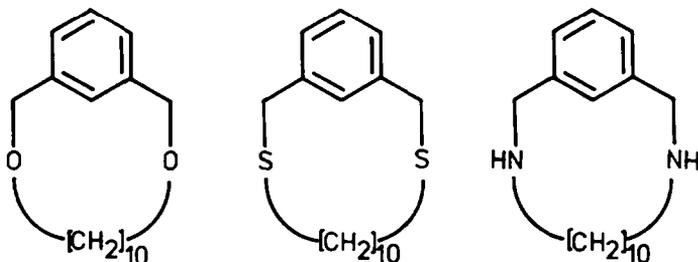


ABB 2. Eine (di-) heteraloge Reihe aus dem Bereich der Phane.

Dagegen verstehen wir unter einer "*substitulogen Reihe*"²⁸ (vgl. Abbildung 3) eine Serie von Verbindungen, deren Vertreter sich nur durch einen einfach gebundenen Substituenten (H, F, Cl, Br, J, CH₃, OCH₃, NO₂ usw.) in gleichbleibender Stellung unterscheiden. Di- und tri-substituloge Reihen enthalten folglich Verbindungen mit zwei und drei variierten Substituenten.

Durch Kombination der auf a- und o- endigenden Präfixe erhält man konsequenterweise die in den Schemata 3 und 4 zusammengestellten weiteren Unterteilungen.

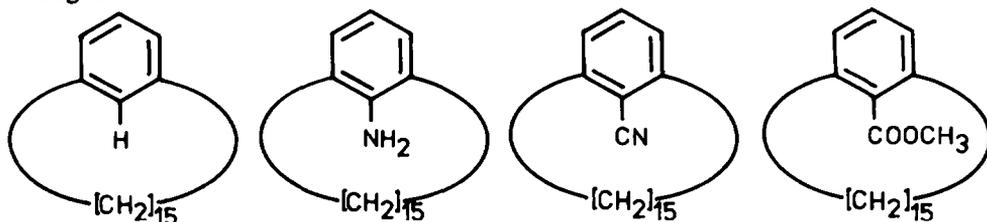


ABB 3. Eine substituloge Reihe aus dem Bereich der Phane

SCHEMA 3. Einteilung der Phane in Gruppen und Untergruppen.

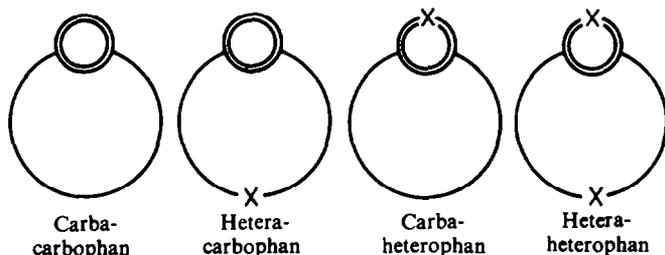
Klasse	Phane			
Gruppen	Carba-phane	Carbophane	Heterophane	Hetera-phane
Untergruppen	Carba-carbophane	Carba-heterophane	Hetera-carbophane	Hetera-heterophane

Die Präfixe *Carba-* und *Hetera-* sollen dabei der Einheitlichkeit halber grundsätzlich vor die auf o- endigenden Silben Carbo und Hetero gestellt werden.

SCHEMA 4. Zur Unterteilung der Phane.

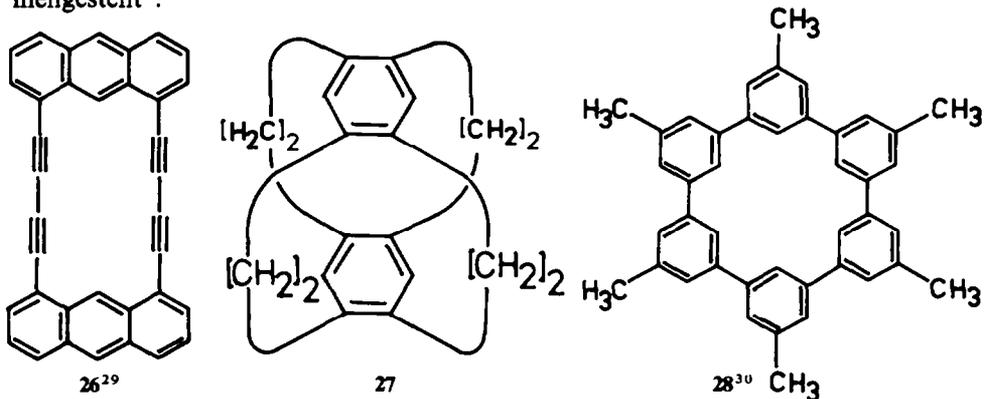
Brücke	Kern →	carbocyclisch oder heterocyclisch	carbocyclisch	heterocyclisch
	carbocyclisch oder heterocyclisch		Phan	Carbophan
carbocyclisch		Carba-phan	Carba-carbophan	Carba-heterophan
heterocyclisch		Hetera-phan	Hetera-carbophan	Hetera-heterophan

In Schema 5 sind die Untergruppen der Phane in symbolischer Form zusammengefasst.



SCHEMA 5. Symbolische Darstellung der Untergruppen der Phane

Zur Veranschaulichung sind in den Abbildungen 4 bis 7 konkrete, teilweise der Literatur entnommene Beispiele für die einzelnen Untergruppen der Phane zusammengestellt*.



* Auch die Phan-Bezeichnungen dieser Verbindungen sind in Tabelle 2 aufgeführt.

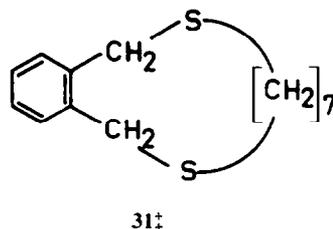
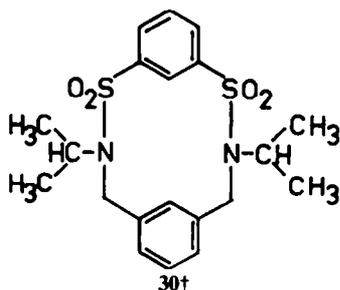
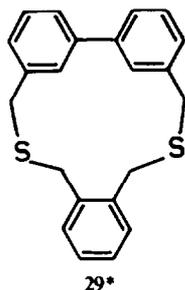


ABB 5. Hetera-carbophane

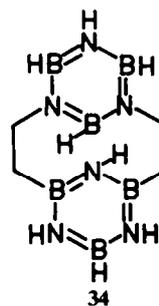
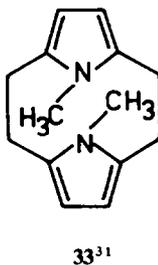
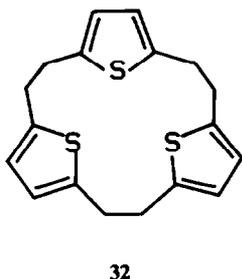


ABB 6. Carba-heterophane

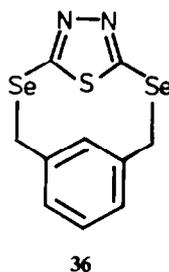
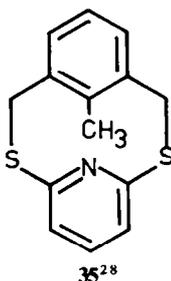


ABB 7. Hetera-heterophane

3. REGELN DER PHAN-NOMENKLATUR

P. § Phane

P-1. Die Phane als Verbindungsklasse

1.1. Zur Klasse der *Phane* gehören alle cyclischen Verbindungen, die wenigstens einen *aromatischen Kern* und wenigstens eine *aliphatische Brücke* enthalten, wobei die Brückengliederzahl alle ganzzahligen Werte $n \geq 0$ annehmen kann.

1.2. Die *Phane* können in *Gruppen* unterteilt werden: *Carbophane* enthalten einen carbocyclischen, *Heterophane* einen heterocyclischen aromatischen Kern. *Carbaphane* zeichnen sich durch eine carbocyclische Brücke aus, *Heteraphane* durch eine

* Schmp. 182–183°. F. Vögtle und L. Schunder, unveröffentlicht.

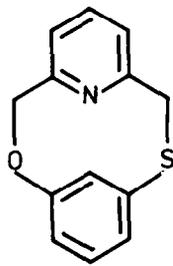
† Schmp. 216–218°. Über cyclische Sulfonamide dieses Typs berichten wir an anderer Stelle; F. Vögtle und P. Neumann, in Vorbereitung.

‡ Schmp. 153–155°. F. Vögtle und R. Lichtenthaler, unveröffentlicht.

§ P von Phan.

heterocyclische. Eine noch weitergehende Einteilung in Untergruppen erlauben die Begriffe *Carba-carbophan*, *Hetera-carbophan* und *Carba-heterophan*, *Hetera-heterophan* (s.o.).

1.3. Sind in einem Phan sowohl carbocyclische als auch heterocyclische aromatische Kerne und Brücken enthalten, so haben bei der Klassifizierung in Untergruppen die Heterocyclen die Priorität vor den Carbocyclen. 37 ist demzufolge ein *Hetera-heterophan*. Zur *Benennung* solcher gemischt-kerniger Phane vgl. Regel P-2.25.

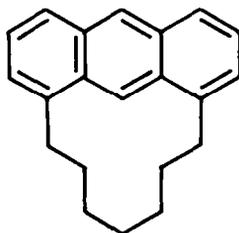


37

2-Oxa-9-thia[2]metacyclo[2](2,6)pyridinophan

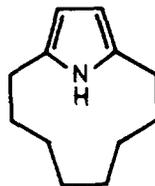
P-2. Bezeichnung der nur aromatische Brückenkopfatome enthaltenden Phane

2.11. Bei der Bezeichnung eines Phans geht man von dem IUPAC-Namen des vorliegenden aromatischen Kerns (IUPAC-Regeln A-21 bis A-23) aus, an den man—unter Einfügen des Buchstabens o—das Suffix *phan* anhängt: Naphthalinophan, Pyridinophan, Thiophenophan, Imidazolophan. Beispiele:



38

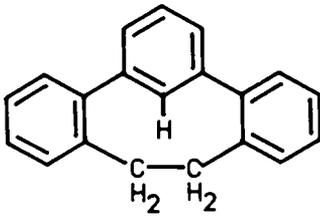
[7](1,8)Anthracenophan

39²⁷

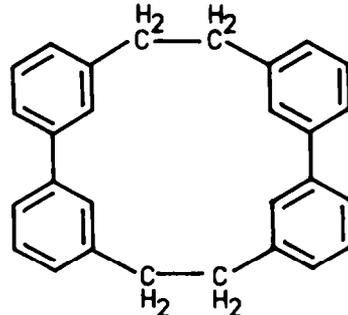
[8](2,5)Pyrrolophan

2.12. Ist der aromatische Kern ein *Benzolring*, so lautet die Bezeichnung grundsätzlich *Cyclophan*.⁷

2.13. Besteht die aromatische Grundeinheit eines Phans aus zwei oder mehr aromatischen Ringen [einzelne Ringe oder kondensierte Systeme (fused systems)], die direkt aneinander gebunden sind (aromatic ring assemblies; IUPAC-Regel A-51.1 bis A-54.3), so kann die Phan-Bezeichnung auch von *deren* (IUPAC-)Namen abgeleitet werden. Im Zweifelsfalle ist die kürzere oder einfachere Bezeichnung vorzuziehen, wenn man nicht aus Vergleichsgründen direkt auf das besondere aromatische System hinweisen möchte. Beispiele:

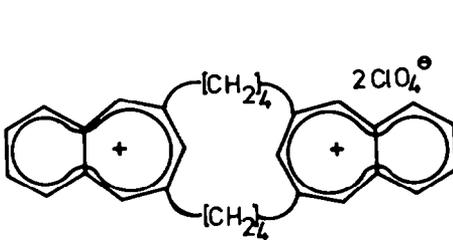
40³²

[2](2,2')m-Terphenylophan

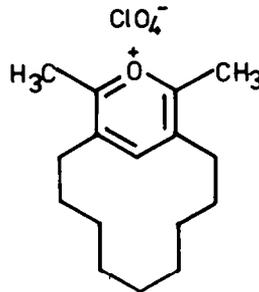
41¹³

[2.0.2.0]Metacyclophan

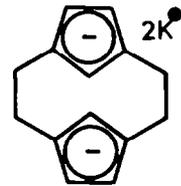
2.14. Trägt der aromatische Kern eine positive Ladung, dann wird an den auf -o endigenden Namen der aromatischen Grundeinheit das Suffix *-phanium* angehängt;⁷ die Namen negativ geladener Phane enden auf *-phanat*. Beispiele:

42²⁴

42: [4.4]Benzo[d]tropylophanium-diperchlorat

43³⁴

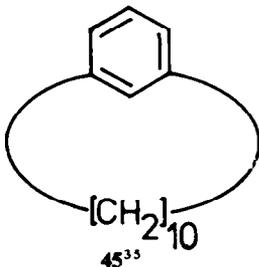
43: 11,13-Dimethyl[9](2,6)pyrylophanium-perchlorat



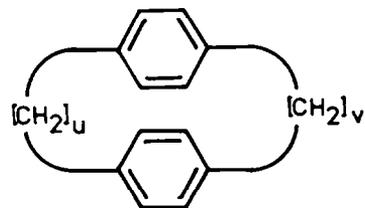
44

44: Di-Kalium[2.2](1,3)cyclopentadienylophanat

2.21. Vor den Namen des aromatischen Kerns wird in eckigen Klammern die Anzahl der aliphatischen Brückenatome, für jede Brücke getrennt, gesetzt; die Anzahl dieser—durch Punkte getrennten—Zahlen gibt dann die Zahl der vorhandenen Brücken wieder. Die unmittelbare Verknüpfung von aromatischen Ringen wird durch 0 (null) ausgedrückt. Beispiele:

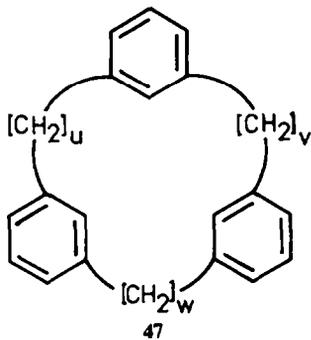
45³⁵

[10]Metacyclophan

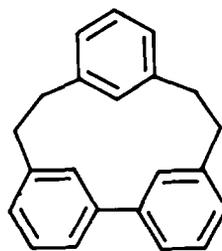


46

[u.v]Paracyclophan

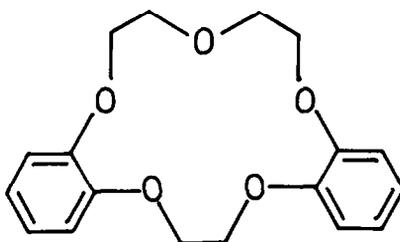


[u.v.w]Metacyclophan



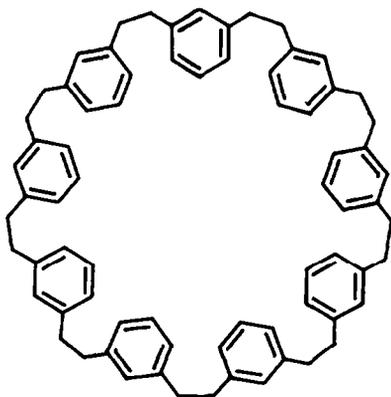
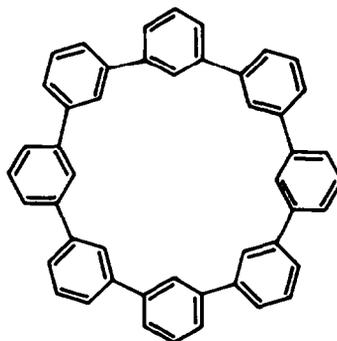
[2.2.0]Metacyclophan

2.22. Heteroatome in den Brücken werden wie üblich durch aza-, oxa-, thia- usw. ausgedrückt (Hetera-Regel, s.o.). Beispiel:



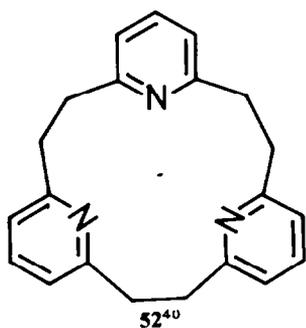
1,4,7,14,17-Pentaoxa[7.4]orthocyclophan

2.23. Bei höhergliedrigen Phanen mit mehr als drei gleichlangen Brücken kann die Anzahl der im Ringsystem enthaltenen Brückenglieder durch eine tiefgestellte Ziffer angegeben werden: $[r_n]$. Beispiele:

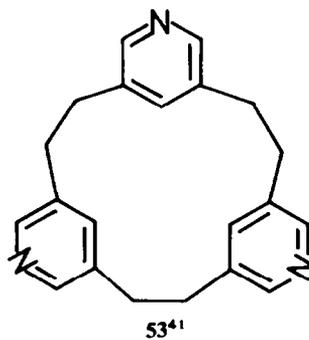
[2₉]Metacyclophan[0₈]Metacyclophan

Die von anderer Seite³⁹ vorgeschlagene und angewandte³⁷ Schreibweise $[n^m]$ ist in diesem grösseren Zusammenhang gesehen weniger zweckmässig, da leichter Verwechslungen sowohl mit der IUPAC- als auch mit der Phan-Nomenklatur auftreten können, wo übereinstimmend hochgestellte Indizes zum Bezeichnen von Brückenkopfspositionen verwendet werden (s.u.).

2.24. Zwischen die eckigen Klammern und den Stamm-Namen werden die Verknüpfungsstellen am Aromaten unter Zugrundelegen des konventionellen Bezifferungssystems^{2a} des Stammeromaten in *runde Klammern*—durch Kommata getrennt—gesetzt. Bei Cyclophanen werden statt der Indizierung 1,2; 1,3; 1,4 die Präfixe *ortho*, *meta*, *para* verwendet. Beispiele:

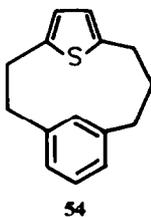


[2.2.2](2,6)Pyridinophan



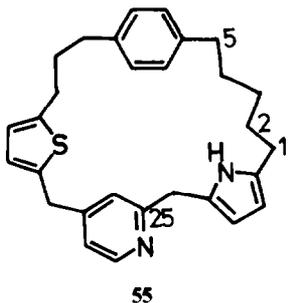
[2.2.2](3,5)Pyridinophan

2.25. Bei der Bezeichnung eines Phans, bei dem wie in **54** mehrere Brücken zwischen zwei ungleichen aromatischen Kernen vorliegen, geht man zunächst von der längsten aliphatischen Brücke aus und schreibt dann den nach der alphabetischen Reihenfolge bevorzugten aromatischen Kern vor dem anderen an.

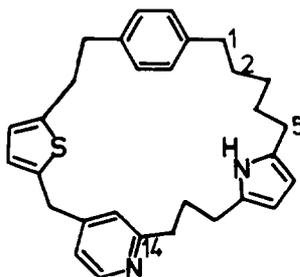


[3]Metacyclo[2](2,5)thiophenophan

2.26. Bei Vorhandensein von mehr als zwei aromatischen Kernen wird gleichfalls mit der längsten Brücke begonnen. Ob mit der Bezeichnung (und Bezifferung) nun im Uhrzeigersinn oder entgegengesetzt fortgefahren wird, richtet sich nach der Länge derjenigen Brücken, die der längsten Brücke im Ringsystem benachbart sind. Die weitere Benennung und Numerierung erfolgt in der auf diese Weise durch die längere der beiden Brücken festgelegten Richtung, wobei die im Molekül vorhandene Verknüpfungs-Reihenfolge eingehalten wird, auch wenn sie nun nicht mehr mit der Reihenfolge abnehmender Brückenlänge konform geht. Beispiele:



55



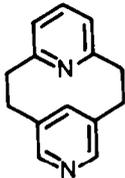
56

55: [5]Paracyclo[3](2,5)thiopheno[1](4,6)pyridino[1](2,5)pyrrolophan

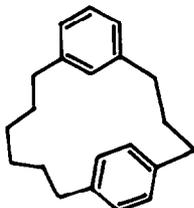
56: [5](2,5)Pyrrolo[3](2,4)pyridino[1](2,5)thiopheno[2]paracyclophan

2.27. In den runden Klammern der Phan-Bezeichnung wird das aromatische Brückenkopffatom mit der niedrigsten *Phan*-Ziffer zuerst angegeben (vgl. 55 und 56).

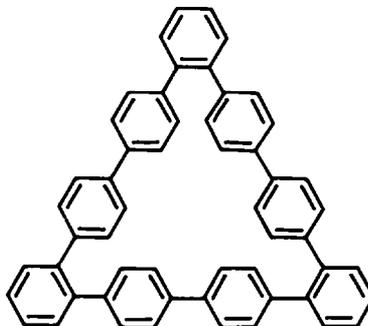
2.28. Unterscheiden sich in einem Phan die aromatischen Kerne nur in den Verknüpfungspositionen, so können die eckigen Klammern zu einer einzigen zusammengezogen werden. Beispiele:



57



58

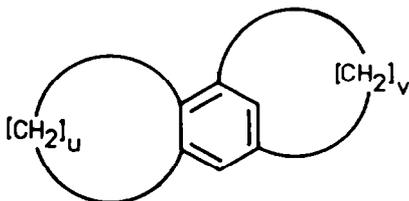
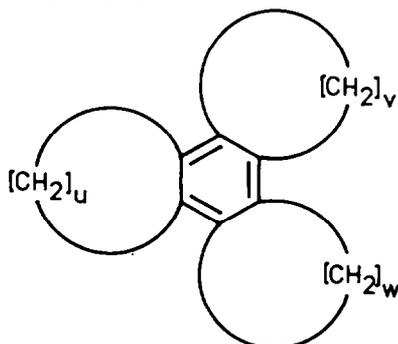
59⁴²

57: [2.2](2,6)(3,5)Pyridinophan

58: [6.3]Metaparacyclophan

59: [0.₉](op₂)₃Cyclophan

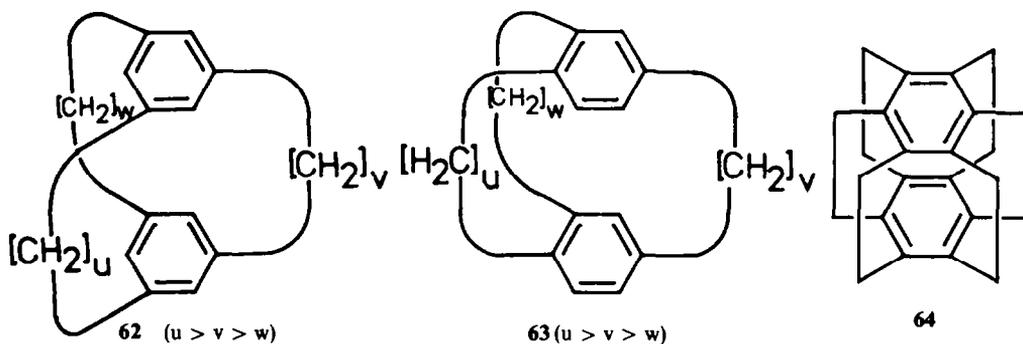
2.29. Wird derselbe Kern von mehreren Brücken überspannt, so werden die Ziffern, die die Kettenlänge angeben, einzeln in eckige Klammern gesetzt; die Verknüpfungsstellen werden jeweils direkt nach der Kettenlänge angegeben. Beispiele:

60 ($u > v$)61 ($u > v > w$)

60: [u](1,2)[v](3,5)Cyclophan

61: [u](1,2)[v](3,4)[w](5,6)Cyclophan

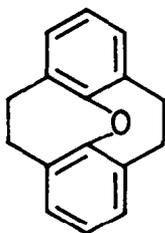
2.30. Liegen wie in **62** bis **66** mehrere Brücken zwischen zwei aromatischen Kernen vor, so werden die Ziffern, die die Brückenlänge angeben, in der Reihenfolge abnehmender Brückengliederzahl—durch Punkte getrennt—in *eine* eckige Klammer gesetzt. Die Verknüpfungsstellen an den aromatischen Kernen werden anschließend—in der Reihenfolge abnehmender Brückenlänge—in runden Klammern angegeben. Beispiele:



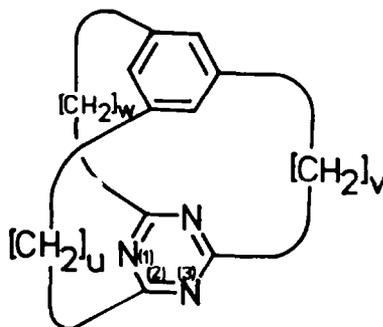
62: [u.v.w](1,3,5)Cyclophan

63: [u.v.w](1,4,2)Cyclophan

64: [2.6.6](1,2,3,4,5,6)Cyclophan



65⁴³

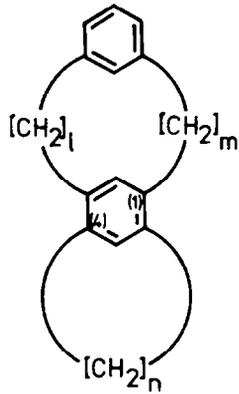


66 ($u > v > w$)

65: 17-Oxa[2.2.1](1,2,3)cyclophan

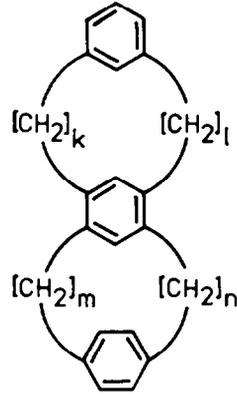
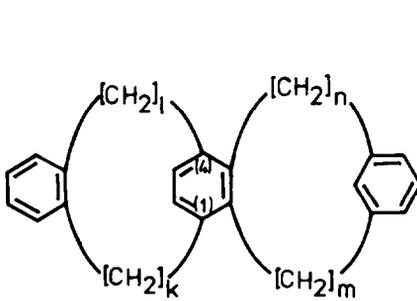
66: [u.v.w](1,3,5)Cyclo(2,4,6)triazinophan

2.31. Bei der Bezeichnung polycyclischer Phane der Typen **67** bis **72** bildet derjenige aromatische Kern, dessen Brückenkopfpositionen jeweils zuletzt in den runden Klammern angegeben wurden, das Anfangsglied des nächsten Brückensystems; er wird bei dessen Bezifferung als erster angeführt. Beispiele:

67 ($l > m > n$)

67: [1.m](1,3)(1,3)[n](4,6)Cyclophan

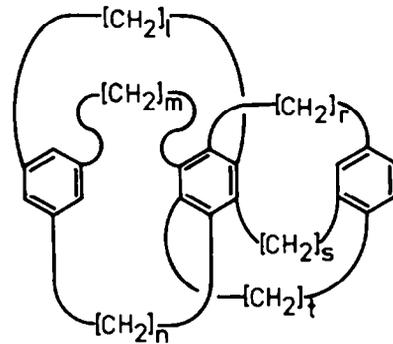
68: [k.1](1,3)(1,3)[m.n](4,6)(1,4)Cyclophan

68 ($k > l > m > n$)

69

($k > l > m > n$)

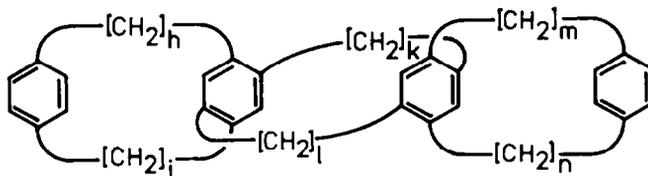
69: [k.1](1,2)(1,4)[m.n](2,3)(1,3)Cyclophan



70

($l > m > n > r > s > t$)

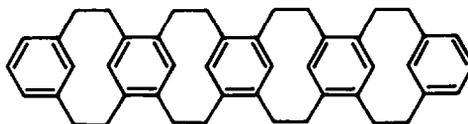
70: [1.m.n](1,3,5)(1,3,5)[r.s.t](2,6,4)(1,3,4)Cyclophan



71

($h > i > k > l > m > n$)

71: [h.i](1,4)(1,4)[k.1](2,5)(1,4)[m.n](2,5)(1,4)Cyclophan



72

72: [2.2](1,3)(1,3)[2.2](4,6)(1,3)[2.2](4,6)(1,3)[2.2](4,6)(1,3)Cyclophan*

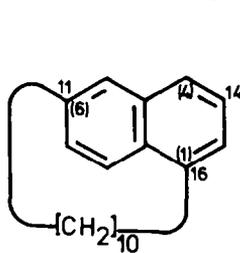
* Abgekürzt: [2.2](1,3)(1,3){[2.2](4,6)(1,6)}Cyclophan

P-3. *Bezifferung der Phane*

3.1. Die Bezifferung eines Phans beginnt am Anfang der längsten Brücke, d.h. an demjenigen Brückenatom, das dem aromatischen Brückenkopfatom direkt benachbart ist. Die Phan-Bezifferung der Brücke wird fortgeführt, bis das nächste Aromatenatom (Brückenkopfatom) erreicht ist.

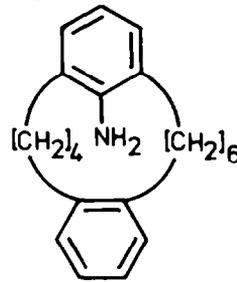
3.2. Das aromatische Brückenkopfatom, an dem die längste Brücke *beginnt*, erhält nach der IUPAC-Nomenklatur die niedrigste Ziffer. Es hat sich als zweckmässig erwiesen, in den Formeln die *IUPAC-Bezifferung der aromatischen Kerne* in runden Klammern *ins Innere* der Aromaten zu schreiben (vgl. die Formeln 73 und 76).

3.3. Die *Phan-Bezifferung* der aromatischen Kerne erfolgt über ihre längere Seite zuerst, ausser wenn Heteroatome im Aromaten vorhanden sind. Sind die zu beziffernden Seiten eines aromatischen Kerns gleich lang, so hat die höher substituierte die Priorität. Die Phan-Bezifferung der aromatischen Ringe wird zweckmässig an der Peripherie der einzelnen Kerne angeschrieben. Beispiele:



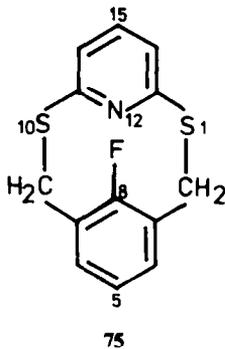
73

73: [10](1,6)Naphthalinophan



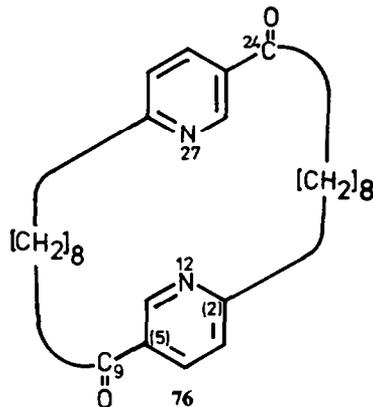
74

74: 22-Amino[6.4]orthometacyclophan



75

75: 8-Fluor-1,10-dithia[2]metacyclo[2]pyridinophan



76

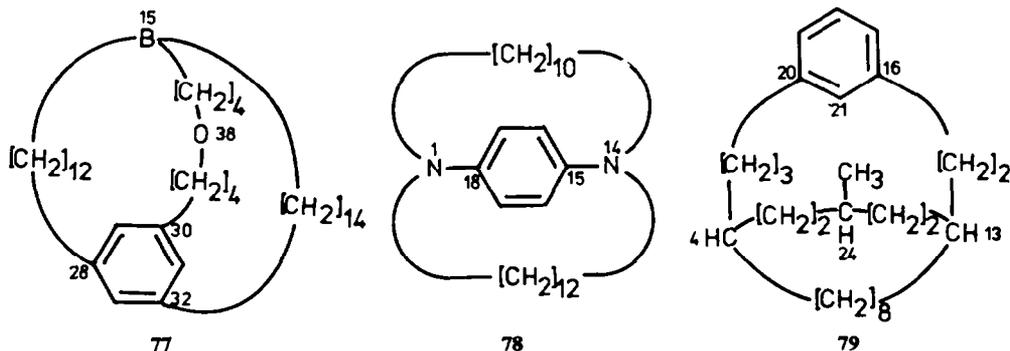
76: 9,24-Dioxo[9.9](2,5)pyridinophan

P-4. *Bezeichnung der Phane, die sowohl aromatische als auch aliphatische Brückenkopf-atome enthalten*

4.1. Phane, die zusätzlich zum aromatischen Kern nichtaromatische Brückenkopf-atome enthalten, werden nach einem System benannt, das eine kombinierte Anwendung der—bei aromatischen Brückenköpfen bewährten—Phan-Nomenklatur und der

IUPAC-Nomenklatur (Regeln A-31 bis A-32)—die für aliphatische Brückenköpfe entworfen wurde—darstellt.

Als Stamm-Name wird hier anstelle des aromatischen Kerns der Name des [n]-Phans mit der längsten Brücke verwendet; dieses wird durchgehend nach den Regeln der Phan-Nomenklatur (s.o.) beziffert. Die Anzahl der davor in eckigen Klammern stehenden, durch Punkte getrennten Zahlen gibt die Anzahl weiterer Brücken an; die einzelnen Zahlenwerte, in abnehmender Reihenfolge angeordnet, geben die Länge der zwischen aromatischem Kern und aliphatischem Brückenkopfatom bzw. zwischen zwei aliphatischen Brückenkopfatom befindlichen Brücken wieder. Zur Festlegung der Brückenkopfpositionen werden in Anlehnung an die IUPAC-Nomenklatur^{2a} hochgestellte, durch Kommata getrennte Indizes verwendet. Beispiele:



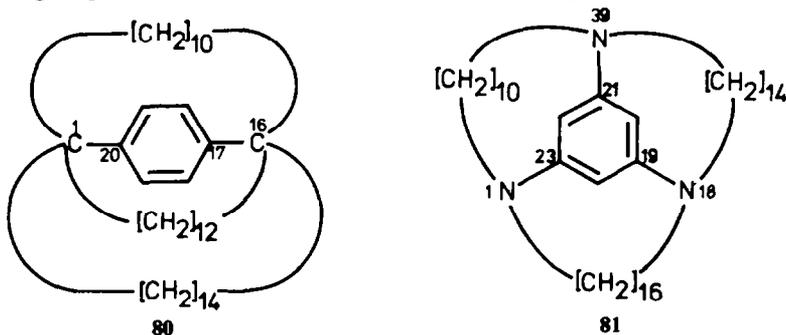
77: 15-Bora-38-oxa[9^{15,30}][27]metacyclophan

78: 1,14-Diaza[10^{1,14}][14]paracyclophan

79: 24-Methyl[5^{4,13}][15]metacyclophan

(1) Zu diesem Phan-Typ gehört auch das Triptycens (3), dessen Phan-Bezeichnung [0^{1,15,0^{8,20}}][1.1]Orthocyclophan lautet. Einfache, eingeführte und bewährte Trivialnamen wie im Falle des Triptycens sollen selbstverständlich—im Einklang mit den IUPAC-Empfehlungen—nicht durch kompliziertere systematische Bezeichnungen ersetzt werden.

4.2 Für die *Bezifferung* sind die allgemeinen Richtlinien der Phan-Nomenklatur ausschlaggebend: Das erste Atom der längsten Kette erhält die Ziffer 1; dann wird fortlaufend unter Einschluss des aromatischen Kerns weiternumeriert. Auf dessen Bezifferung folgt die der nächst kürzeren Kette usw. Beispiele:



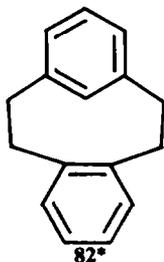
80: [12^{1,16,10^{1,16}}][16]Paracyclophan

81: 1,18,39-Triaza[25^{1,18,0^{21,39}}][18]metacyclophan

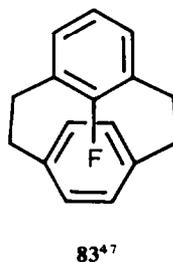
P-5. Zusammenstellung der Prioritäten bei der Bezeichnung und Bezifferung der Phane, nach abnehmender Vorrangstellung angeordnet .

5.1. Längere Brücken haben grundsätzlich den Vorrang vor kürzeren. Beispiel: [3.2]Metacyclophan; nicht: [2.3]Metacyclophan.

5.2. Bei gleicher Länge der Brücken gilt für die aromatischen Kerne die alphabetische Reihenfolge (C für Cyclophan; innerhalb der Cyclophane *ortho* vor *meta* und *para*).



[2.2]Orthometacyclophan



8-Fluor[2.2]metaparacyclophan

5.3. Diejenige Seite eines aromatischen Kerns wird zuerst beziffert, die eines oder mehrere Heteroatome enthält; ist kein Heteroatom im Aromaten vorhanden, so hat die längere Seite den Vorrang, unabhängig von anhaftenden Substituenten.

5.4. Bei gleichlangen Seiten wird diejenige Seite, die Substituenten trägt, zuerst beziffert.

5.5. Im endgültigen Namen des Phans ist für die Aufzählung der Substituenten die alphabetische Reihenfolge massgebend.

5.6. Hat man mit der Bezifferung der längsten Kette in der durch die Prioritäten festgelegten Richtung begonnen, so werden die Brücken in der im vorliegenden Ringsystem vorhandenen, natürlichen Reihenfolge weiter benannt und beziffert. Zur Festlegung des Anfangs des Phan-Namens und der Reihenfolge der Bezifferung sind also im allgemeinsten Fall drei Brücken—nämlich die längste und die beiden ihr benachbarten—hinsichtlich ihrer Länge zu berücksichtigen.

In Tabelle 1 sind zu Vergleichszwecken für einige einfache Phane die nach der beschriebenen Phan-Nomenklatur gebildeten Namen den nach den IUPAC-Regeln entwickelten Bezeichnungen gegenübergestellt.

In Tabelle 2 sind die Phan-Bezeichnungen für alle diejenigen Phane aufgeführt, deren Formeln oben wiedergegeben, die jedoch nicht benannt worden sind.

4. METALLOCENOPHANE

Als Oberbegriff für alle überbrückten Metallocene (Ferrocen, Osmocen, Ruthenocen usw.) schlagen wir die Bezeichnung "*Metallocenophane*" vor. Das oben beschriebene Nomenklatorsystem lässt sich, wie im folgenden gezeigt werden soll, ohne Schwierigkeiten in gleicher Weise auf homoanular wie auf heteroanular überbrückte Metallocene anwenden.⁴⁸

Zweckmässig fasst man das ganze Metallocengerüst als aromatische Grundeinheit (s.o.) auf. Bei Systemen vom Typ des Ferrocens werden zur Bezifferung innerhalb des Metallocengerüsts für den einen Fünfring die Zahlen 1 bis 5. für den anderen 1' bis 5' verwendet. Diese Stellungsbezeichnungen, die den IUPAC-Ziffern der übrigen

* Versuche zur Darstellung dieser Verbindung durch Sulfonypyrolyse⁴⁶ führten bisher nicht zum Erfolg; F. Vögtle und L. Schunder, unveröffentlicht.

TABELLE 1. PHAN- UND IUPAC-BEZEICHNUNGEN FÜR EINIGE ÜBERBRÜCKTE AROMATISCHE VERBINDUNGEN*

PHAN-Nomenklatur	IUPAC-Nomenklatur
[8]Orthocyclophan	(a) Bicyclo[8.4.0]tetradeca-1(10),11,13-trien (b) 2,3,4,5,6,7,8,9-Octahydro-benzo[1,2]cyclododecen
[8]Metacyclophan	Bicyclo[8.3.1]tetradeca-1(14),10,12-trien
[8]Paracyclophan	Bicyclo[8.2.2]tetradeca-10,12,13-trien
[2.2]Metacyclophan	Tricyclo[9.3.1.1 ^{4,8}]hexadeca-1(15),4,6,8(16),11,13-hexaen
[2.2]Paracyclophan	Tricyclo[8.2.2.2 ^{4,7}]hexadeca-4,6,10,12,13,15-hexaen
[3.2]Metacyclophan	Tricyclo[10.3.1.1 ^{4,8}]heptadeca-1(16),4,6,8(17),12,14-hexaen
[2.2](1,4)Naphthalinophan	6,7,14,15-Tetrahydro-5,16:8,13-diethenodibenzo[a,g]cyclododecen
[2.2](2,5)Thiophenophan	13,14-Dithiatriicyclo[8.2.1.1 ^{4,7}]tetradeca-4.6.10.12-tetraen
[2.2](2,6)Pyridinophan	15,16-Diazatriicyclo[9.3.1.1 ^{4,8}]hexadeca-1(15),4,6,8(16),11,13-hexaen
[2.2](2,6)(3,5)Pyridinophan	6,15-Diazatriicyclo[9.3.1.1 ^{4,8}]hexadeca-1(15),4,6,8(16),11,13-hexaen
[2.2.0]Metacyclophan	Tetracyclo[14.3.1.1 ^{4,8,19,13}]docosa-1(20),4,6,8(21),9,11,13(22),16,18-nonaen
[2.2.2](2,6)Pyridinophan	22,23,24-Triazatetracyclo[16.3.1.1 ^{4,8,11,15}]tetracosa-1(22),4,6,8(23),11,13,15(24),18,20-nonaen
[2.2.2](2,4)Pyridinophan	5,12,19-Triazatetracyclo[16.3.1.1 ^{4,8,11,15}]tetracosa-1(22),4,6,8(23),11,13,15(24),18,20-nonaen
[2.0.2.0]Metacyclophan	Pentacyclo[19.3.1.1 ^{2,6,9,13,14,18}]octacosa-1(25),2,4,6(26),9,11,13(27),14,16,18(28),21,23-dodecaen
[2.1.1.1.1]Paracyclophan	Hexacyclo[22.2.2.2 ^{3,6,28,11,213,16,218,21}]hexatriaconta-3,5,8,10,13,15,18,20,24,26,27,29,31,33,35-pentadecaen
[2,7]Metacyclophan	Octacyclo[44.3.1.1 ^{4,8,11,15,18,22,25,29,32,36,39,43}]hexapentaconta-1(50),4,6,8(51),11,13,15(52),18,20,22(53),25,27,29-(54),32,34,36(55),39,41,43(56),46,48-heneicosaen
[3.3.3](1,3,5)Cyclophan	Tetracyclo[7.7.3.1 ^{3,15,17,11}]heneicosa-1,3(20),7,9,11(21),15-hexaen
[12.12.12]Orthocyclophan-6,20,34-triin	(a) Tetracyclo[28.12.0.0 ^{2,15,016,29}]dotetraconta-1,15,29-trien-8,22,36-triin (b) 6,7,18,19,30,31-Hexadehydro-1,2,3,4,5,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,20,21,22,23,24,25,26,27,28,29,32,33,34,35,36-triacontahydro-benzo[1,2:3,4:5,6]triscyclotetradecen

* Einige der konventionellen Namen wurden dem Register der "Chemical Abstracts" entnommen.

TABELLE 2. PHAN-BEZEICHNUNGEN FÜR DIE PHANE 1–12, 14, 16–36

1	2,4,12,20,22,30-Hexaaza-1,5,13,29-tetrathia[1 ^{12,30}][5.2.3.2]paracyclophan-tetrakis-dioxid-(1,1;5,5;13,13;29,29)
2	[1]Orthocyclo[1](1,8)naphthalinophan
3	[0 ^{1,15,0^{8,20}}][1.1]Orthocyclophan
4	4,12,20-Trimethyl-7,15,23-triisopropyl-1,9,17-trioxa-2,10,18-trioxo[2.2.2]orthocyclophan
5	[m.n]Paracyclophan
6	18-Chlor[10](1,3)naphthalinophan
7	[2.2](1,4)Naphthalinophan
8	2,11,20-Trithia[3.3.3](1,3,5)cyclophan
9	[u.v.w](1,3,2)(1,4,2)Cyclophan
10	1,12-Diaza[10 ^{1,12}][12]paracyclophan
11	[n]Metacyclophan
12	1,(u + 2)-Diaza[v ^{1,(u+2)}][u]metacyclophan
14	[10.1]Metacyclophan
16	[n]Metacyclophan
17	[n]Orthocyclophan
18	[n](1,8)Naphthalinophan
19	[0 _s]Metacyclophan
20	[3 ^{2,8,0^{2,8}}][9]Orthocyclophan
21	[2.2.2]Orthocyclophan-1,9,17-trien
22	[4.4](2,7)Benzo[d]troponophan
23	[9](2,4)Furanophan
24	[10](2,6)Benzochinonophan
25	14,15-Diphenyl[12](2,5)cyclopentadienonophan
26	[4.4](1,8)Anthracenophan-1,3,15,17-tetraïn
27	[2.2.2.2](1,2,4,5)Cyclophan
28	3,9,15,21,27,33-Hexamethyl[0 ₆]metacyclophan
29	2,17-Dithia[3](3,3')biphenylo[3]orthocyclophan
30	N,N'-Diisopropyl-2,11-diaza-1,12-dithia[3.3]metacyclophan-bis-dioxid-(1,1;12,12)
31	2,10-Dithia[11]orthocyclophan
32	[2.2.2](2,5)Thiophenophan
33	4,11-Dimethyl[2.2](2,5)pyrrolophan
34	[2.2](N,N)(B,B)Borazolophan
35	8-Methyl-1,10-dithia[2]metacyclo[2](2,6)pyridinophan
36	1,10-Diselena[2]metacyclo[2](2,5)thiadiazolophan

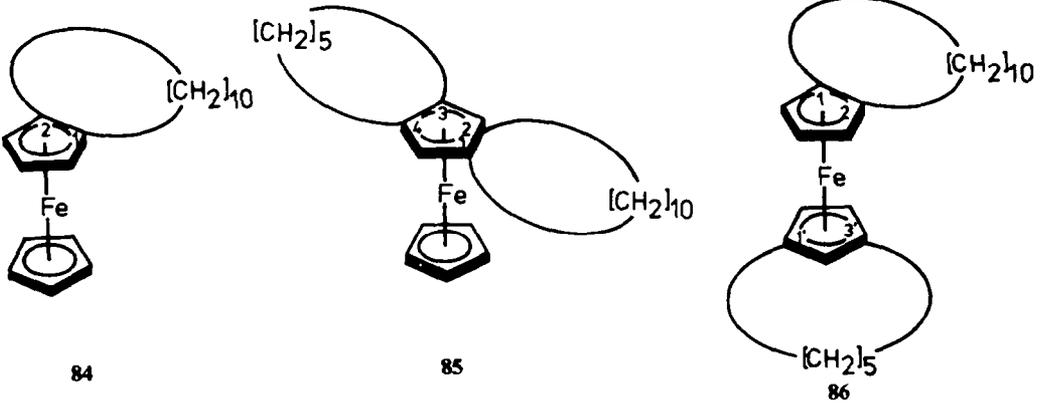
Phane entsprechen, werden ganz analog in runde Klammern gesetzt. Aus der Indizierung mit nicht-gestrichenen und gestrichenen Ziffern ist die homo- bzw. heteroanulare Überbrückung klar ersichtlich.

P-6. Regeln zur Bezeichnung der Metallophenane

6.1. Für die Bezeichnung der Metallophenane gelten sinngemäss die Regeln der Phan-Nomenklatur.

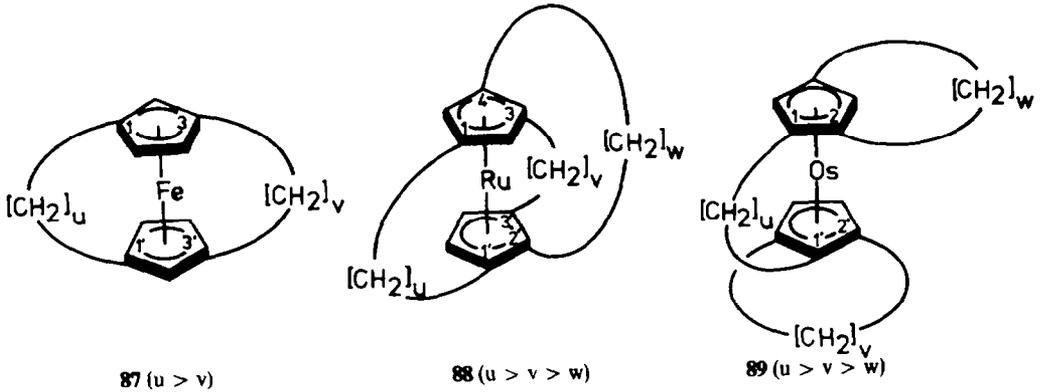
6.2. Als aromatische Grundeinheit gilt das gesamte Metallophenengerüst.

6.3. Derjenige Cyclopentadien-Ring einer homoanular überbrückten Metallophen-Einheit, an dem die längste Kette haftet, erhält zur Bezeichnung der Verknüpfungspositionen ungestrichene Zahlen (die in runde Klammern gesetzt werden), der andere Cyclopentadien-Ring wird mit gestrichenen Zahlen beziffert. Beispiele:



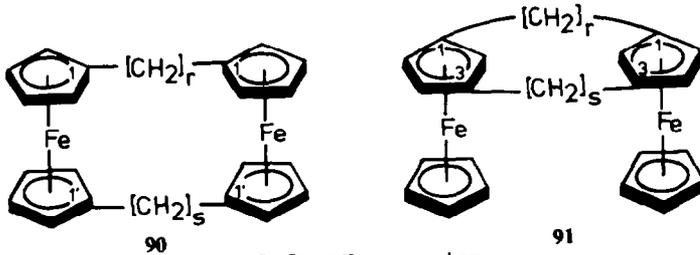
84: [10](1,2)Ferrocenophan
 85: [10](1,2)[5](3,4)Ferrocenophan
 86: [10](1,2)[5](1',3')Ferrocenophan

6.4. Für heteroanular überbrückte Metallocene wird dieselbe Art der Indizierung mit ungestrichenen und gestrichenen Ziffern verwendet. Beispiele:

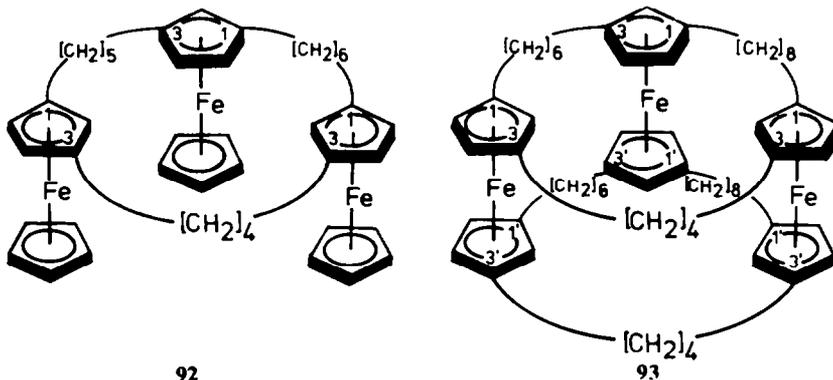


87: [u](1,1')[v](3,3')Ferrocenophan
 88: [u](1,1')[v](3,3')[w](4,2')Ruthenocenophan
 89: [u](1,1')[v](2,5')[w](2,4)Osmocenophan

Auf der Grundlage der Regeln 6.1. bis 6.4. lassen sich die folgenden, aus mehreren Grundeinheiten aufgebauten Metallocenophane bezeichnen:



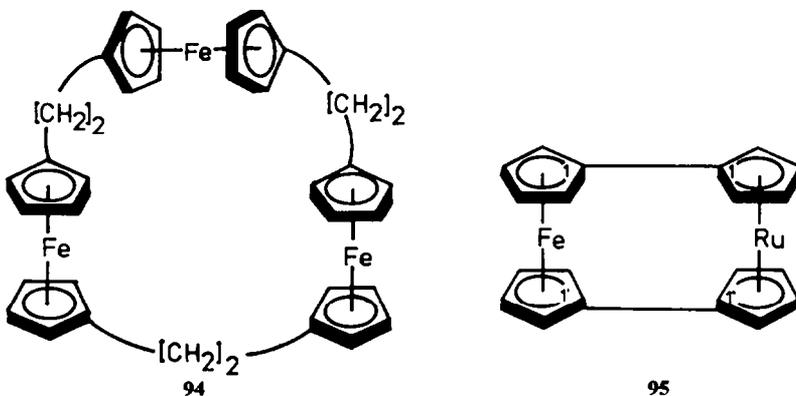
90: [r,s](1,1')Ferrocenophan
 91: [r,s](1,3)Ferrocenophan



92

92: [6.5.4](1,3)Ferrocenophan

93: [8.6.4](1,3)[8.6.4](1',3')Ferrocenophan



94

94: [2.2.2](1,1')Ferrocenophan

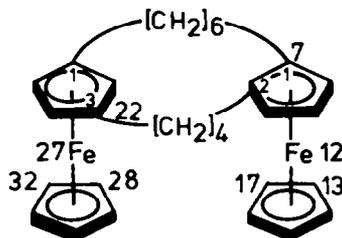
95

95: [0](1,1')Ferroceno[0](1,1')ruthenocenophan

6.5. Bezifferung der Metallocenophane.

6.5.1. Die Phane-Bezifferung der Metallocenophane beginnt am ersten Atom der längsten Brücke und wird fortgeführt, bis ein anderes (Brückenkopf-)Atom eines anderen Cyclopentadien-Rings erreicht ist.

6.5.2. In die nun folgende Phane-Bezifferung des *gesamten* Metallocengerüsts wird das Metallatom mit einbezogen. Beispiel:



96

[6.4](1,2)(1,3)Ferrocenophan

LITERATURVERZEICHNIS

- ¹ I. Mitteilung: F. Vögtle und P. Neumann, *Tetrahedron Letters*, 5329 (1969)
- ² ^a International Union of Pure and Applied Chemistry, Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A and B, 2nd Ed., London (1966);
^b *The Naming and Indexing of Chemical Compounds by Chemical Abstracts*, Chemical Abstracts **56** (1962), Subject Index, 1N (Jan.–June);
^c A. M. Patterson, L. T. Capell und D. F. Walker, *The Ring Index* (2nd Edition), American Chemical Society, Washington, D.C. (1960);
^d IUPAC Commission on the Nomenclature of Organic Chemistry und IUPAC–IUB Commission on Biochemical Nomenclature, Nomenklatur der Steroide, *Hoppe-Seyler's Z. physiol. Chem.* **351**, 663 (1970)
- ³ E. L. Eliel, *Stereochemie der Kohlenstoffverbindungen*, (übersetzt und bearbeitet von A. Lüttringhaus und R. Cruse) S. 359. Weinheim/Berstr (1966)
- ⁴ *Chem. Abstrs* **55** (1961), Formula Index, 745 F (July–Dec)
- ⁵ I. A. Korshunov und L. N. Vertyulina, *Zh. Obshei Khim.* **31**, 1056 (1961); *Chem. Abstrs* **55**, 24727 h (1961); B. N. Afanas'ev und A. I. Kruzhevnikova, *Trudy Sverdlovsk. Sel'skokhoz. Inst.* **7**, 357 (1960); *Chem. Abstrs* **55**, 20332 g (1961)
- ⁶ P. A. Temussi, A. Segre und F. Bottino, *Chem. Commun.* 1645 (1968); *Nachr. Chem. Techn.* **17**, 26 (1969); **17**, 62 (1969)
- ⁷ B. H. Smith, *Bridged Aromatic Compounds*, Kap. 1. New York—London (1964)
- ⁸ D. J. Cram und H. Steinberg, *J. Am. Chem. Soc.* **73**, 5691 (1951)
- ⁹ W. M. Schubert, W. A. Sweeney und H. K. Latourette, *Ibid.* **76**, 5462 (1954)
- ¹⁰ D. J. Cram und J. Abell, *Ibid.* **77**, 1179 (1955)
- ¹¹ W. E. Parham und J. K. Rinehart, *Ibid.* **89**, 5668 (1967)
- ¹² *Chem. Abstrs* **56–65** (1962–1966), Formula Index, 5209 F
- ¹³ Ref. 7, S.110, 458
- ¹⁴ Vgl. z.B. ^a G. W. Brown und F. Sondheimer, *J. Am. Chem. Soc.* **89**, 7116 (1967);
^b A. V. Fratini, *Ibid.* **90**, 1688 (1968);
^c H. H. Wasserman und P. M. Keehn, *Ibid.* **91**, 2374 (1969)
- ¹⁵ L. N. Ferguson, *J. Chem. Educ.* **46**, 404 (1969)
- ¹⁶ H. H. Wasserman und P. M. Keehn, *Tetrahedron Letters* 3227 (1969); J. M. McBride, P. M. Keehn und H. H. Wasserman, *Ibid.* 4147 (1969)
- ¹⁷ A. Lüttringhaus und H. Simon, *Liebigs Ann.* **557**, 120 (1947)
- ¹⁸ F. Vögtle, *Ibid.* **735**, 193 (1970)
- ¹⁹ Die Bezeichnung "Phane" wurde erstmals vorgeschlagen in: F. Vögtle, *Tetrahedron Letters* 3193 (1969); vgl. auch 1)
- ²⁰ A. Lüttringhaus und H. Gralheer, *Liebigs Ann.* **550**, 67 (1942)
- ²¹ R. H. Mitchell und V. Boekelheide, *J. heterocyclic Chem.* **6**, 981 (1969)
- ²² H. A. Staab und F. Binnig, *Chem. Ber.* **100**, 889 (1967)
- ²³ R. E. Harmon, R. Suder und S. K. Gupta, *Chem. Commun.* 1170 (1969)
- ²⁴ S. Bradamante, R. Fusco, A. Marchesini und G. Pagani, *Tetrahedron Letters* 11 (1970)
- ²⁵ V. Prelog und K. Wiesner, *Helv. Chim. Acta* **31**, 870 (1948)
- ²⁶ J. C. Dignan und J. B. Miller, *J. Org. Chem.* **32**, 490 (1967)
- ²⁷ Vgl. z.B. H. Nozaki, T. Koyama, T. Mori und R. Noyori *Tetrahedron Letters* 2181 (1968)
- ²⁸ F. Vögtle, unter Mitarbeit von P. Neumann, *Tetrahedron* **27**, 5299 (1970)
- ²⁹ S. Akiyama, S. Misumi und M. Nakagawa, *Bull. chem. Soc. Japan* **35**, 1829 (1962)
- ³⁰ H. Bräunling, F. Binnig und H. A. Staab, *Chem. Ber.* **100**, 880 (1967)
- ³¹ H. H. Wasserman und D. T. Bailey, *Chem. Commun.* 107 (1970)
- ³² F. Vögtle, *Chem. Ber.* **102**, 1449 (1969)
- ³³ F. Vögtle, *Liebigs Ann.* **728**, 17 (1969)
- ³⁴ A. T. Balaban, *Tetrahedron Letters* 4643 (1968)
- ³⁵ A. T. Blomquist, R. E. Stahl, Y. C. Meinwald und B. H. Smith, *J. Org. Chem.* **26**, 1687 (1961)
- ³⁶ C. J. Pedersen, *J. Am. Chem. Soc.* **89**, 7017 (1967)
- ³⁷ R. Paioni und W. Jenny, *Helv. Chim. Acta* **52**, 2041 (1969)
- ³⁸ H. A. Staab und F. Binnig, *Chem. Ber.* **100**, 293 (1967)
- ³⁹ T. J. Katz, N. Acton und G. Martin, *J. Am. Chem. Soc.* **91**, 2804 (1969)

- ⁴⁰ W. Jenny und H. Holzrichter, *Chimia* **23**, 158 (1969)
- ⁴¹ W. Jenny und H. Holzrichter, *Ibid.* **22**, 139 (1968)
- ⁴² H. Meyer und H. A. Staab, *Liebigs Ann.* **724**, 30 (1969)
- ⁴³ B. A. Hess Jr., A. S. Bailey und V. Boekelheide, *J. Am. Chem. Soc.* **89**, 2746 (1967)
- ⁴⁴ F. Vögtle und A. H. Effler, *Chem. Ber.* **102**, 3071 (1969)
- ⁴⁵ H. Gerlach und E. Huber, *Helv. Chim. Acta* **51**, 2027 (1968)
- ⁴⁶ F. Vögtle, *Angew. Chem.* **81**, 258 (1969); *Ibid.* Internat. Edit. **8**, 274 (1969)
- ⁴⁷ F. Vögtle, *Chem. Ber.* **102**, 3077 (1969)
- ⁴⁸ Vgl. hierzu jedoch H. Falk, O. Hofer und K. Schlögl, *Mh. Chem.* **100**, 624 (1969); siehe auch W. E. Watts, *Organometallic Chem. Rev.* **2**, 231 (1967)