

NEUARTIGE NOMENKLATUR FÜR PROTOPHANE, PHANE, POLYARENE UND CYCLOPOLYARENE¹

TH. KAUFFMANN

Organisch-Chemisches Institut der Universität Münster/Westdeutschland

(Received in Germany 6 June 1972; Received in UK for publication 21 June)

Zusammenfassung— Für Protophane, Phane, Polyarene und Cyclopolyarene wird eine Nomenklatur ("a[Aren]-Nomenklatur") vorgeschlagen, die den Ersatz von C-Atomen in Kohlenwasserstoffen durch Aren-Kerne mit "arena-Bezeichnungen" wie "phena", "pyrida" oder "thiena" ausdrückt, analog wie bei der a-Nomenklatur von R. Stelzner der Ersatz von C-Atomen in Kohlenwasserstoffen durch Heteroatome mit Bezeichnungen wie "aza", "oxa" oder "thia" ausgedrückt wird. Die neue Nomenklatur, die wegen ihrer Anschaulichkeit und engen Verwandtschaft mit geläufigen Nomenklatorsystemen leicht in die Formelsprache übersetzbar ist und eine ausserordentliche Anwendungsbreite besitzt, dürfte dort nützlich werden, wo bei den genannten Substanzklassen die IUPAC-Nomenklatur oder auch die "Phan-Nomenklatur" von Vögtle und Neumann unanwendbar oder zu schwerfällig sind. Sie kann zur Bezeichnung von Heteraprotophanen und Heteraphanen mit Stelzner's a-Nomenklatur (Bezeichnungsvorschlag: a[Atom]-Nomenklatur) zu einer noch universelleren "a[Atom/Aren]-Nomenklatur" kombiniert werden.

Abstract— Principally keeping closely to the a-nomenclature of Stelzner that describes the substitution of C-atoms in hydrocarbons by means of hetero-atoms with designations such as "aza", "oxa" or "thia", a nomenclature (a[arene]-nomenclature) is being proposed for protophanes, phanes, polyarenes and cycloarenes in which the substitution of C-atoms in hydrocarbons by means of arene-cores is being indicated with "arena-designations" such as "phena", "pyrida" or "thiena". The new nomenclature that is easily translated into the language of formulas because of its clear description and close resemblance to frequently used systems of nomenclature and which disposes of an extraordinarily large variety of possibilities of application, ought to be of use in those cases where in the abovementioned substance classes the IUPAC-nomenclature or the phane-nomenclature of Vögtle and Neumann just as well is too sluggish or inapplicable. It can be combined as description of heteraprotophanes and heteraphanes with the a-nomenclature of Stelzner (proposition of designation: a[atom]-nomenclature) to an even more universal a[atom]/arene]-nomenclature.

1. Prinzip der a[Aren]-Nomenklatur

AUF kompliziertere Protophane² (offenkettig verbrückte Arene),* Phane³ (cyclisch verbrückte Arene), Polyarene⁴ und Cyclopolyarene⁴ ist die IUPAC-Nomenklatur⁵ praktisch nicht anwendbar. Für die Phane wurde von Vögtle und Neumann³ eine eigene Nomenklatur ("Phan-Nomenklatur") vorgeschlagen, mit der auch Cyclopolyarene benannt werden.†

Ausgehend von einem 1971 in knapper Form von uns mitgeteilten² ganz anderen Nomenklaturprinzip wird in der vorliegenden Arbeit eine Nomenklatur entwickelt,

* Als Protophane werden offenkettig verbrückte Arene bezeichnet, die mindestens 3 über aliphatische Gruppen verknüpfte Areneinheiten (Einzelkerne oder kondensierte Arensysteme) besitzen.² Sie stehen zu den Phanen (cyclisch verbrückte Arene) im gleichen Verhältnis wie die Alkane zu den Cycloalkanen.

† Möglichkeiten zur Erweiterung der Phan-Nomenklatur auf Protophane wurden kürzlich von G. Beissner⁶ angegeben. Die Phan-Nomenklatur ist mit dem unnötigen Makel behaftet (vgl. 1. c. 2, Anmerkung 3), dass aus historischen Gründen Benzolkerne anders als üblich durch "cyclo" gekennzeichnet werden.

die sowohl auf Protophane und Polyarene als auch auf Phane und Cyclopolyarene anwendbar ist.* Sie kann durch Kombination mit der sogenannten a-Nomenklatur (IUPAC-Regel B-4⁵) auch zur Bezeichnung von Heteraprotophanen (vgl. 4. Abschnitt) und Heteraphanen³ herangezogen werden.

Dieses als *a[Aren]-Nomenklatur* bezeichnete Nomenklatorsystem basiert darauf, dass Protophane, Polyarene, Phane und Cyclopolyarene verhältnismässig einfach benannt werden können, wenn man sie als Alkane oder Cycloalkane auffasst, in denen einzelne C-Atome durch Areneinheiten (Einzelkerne oder kondensierte Arensysteme) ersetzt sind. Die Areneinheiten werden durch Bezeichnungen angegeben, die auf "a" endigen. Diese Endung zeigt eine spezielle Nomenklatur an, so dass sich eine besondere Klassenbezeichnung (z. B. "protophan") am Ende der Gesamtbezeichnung erübrigt.

Die *a[Aren]-Nomenklatur* hat in der *a-Nomenklatur* von Stelzner (IUPAC-Regel B-4-1; Bezeichnungsvorschlag: *a[Atom]-Nomenklatur*) ein bewährtes Vorbild. Beiden liegt das gleiche universelle Prinzip zugrunde. Es besagt, dass die Nomenklatur für Kohlenwasserstoffe auf einfache Weise durch Austausch von C-Atomen gegen "Ersatzteile"—sprachlich gekennzeichnet durch die Endung "a"—erweitert werden kann. Als "Ersatzteile" kommen nicht nur Fremdatome (*a[Atom]-Nomenklatur*) oder Areneinheiten (*a[Aren]-Nomenklatur*), sondern im Prinzip Gruppen beliebiger Art (z. B. Cyclophane) in Betracht.

Mit der *a[Aren]-Nomenklatur* können auch sehr komplizierte Vertreter der genannten Substanzklassen mit vernünftigem Schreib- und Zeitaufwand benannt werden. Vor der erwähnten Phan-Nomenklatur,³ die bei einfachen Phanen praktikabel und sinnvoll ist und dort ihren festen Platz finden wird, besitzt sie ausser der Anwendungsmöglichkeit auf offenkettige Systeme den Vorzug der weit einfacheren und daher sicheren Anwendung bei *komplizierten* Systemen.

Während bei der *a[Atom]-Nomenklatur* (IUPAC-Regel B-4-1) die Bezifferung durch das Kohlenstoff-Gerüst bestimmt wird, das den zu benennenden Verbindungen formal zugrunde liegt, hat es sich bei der Erprobung der *a[Aren]-Nomenklatur* an Molekülen mit mehreren Arenekernen, Seitenketten und Makroringen weit günstiger erwiesen, die *Bezifferung* in erster Linie an den in Protophanen und Phanen vorliegenden Arenekernen zu orientieren. Um die *a[Aren]-Nomenklatur* auch bei hochdifferenzierten Strukturen (vgl. Beispiele (11) und (16)) so bequem als möglich anwenden zu können und die Übersetzung in die Formelsprache zu erleichtern, wurde ausserdem die *Reihenfolge bei der Nennung* der einzelnen Strukturelemente gegenüber dem sonst Üblichen vereinfacht (vgl. 2.12). Infolge dieser spezifischen Anpassungen hat die *a[Aren]-Nomenklatur* mehr als die *a[Atom]-Nomenklatur* eigenständigen Charakter.

2. Protophane und Polyarene

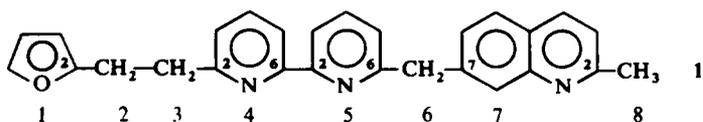
2.1 Unverzweigte

Bei der Anwendung der *a[Aren]-Nomenklatur* auf unverzweigte Protophan- und Polyaren-Ketten sowie auf monocyclische, unverzweigte Phane und Cyclopolyarene treten keinerlei Schwierigkeiten auf: Jede Areneinheit (Definition: aromati-

* Verbesserungsvorschläge und Kritik werden vom Autor (44 Münster, Organisch-Chemisches Institut der Universität, Orléans-Ring 23) gerne entgegengenommen.

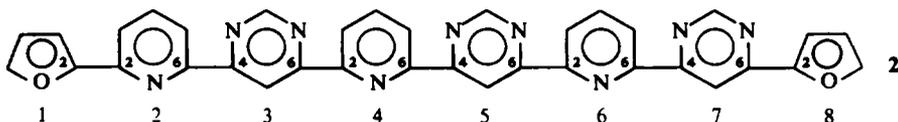
scher Einzelkern oder kondensiertes aromatisches System*) der Kette wird formal durch eine CH_2 - oder CH_3 -Gruppe ersetzt, und so der Name des "Grundalkans" ermittelt. In den Beispielen (1) und (2) ist jeweils Octan das Grundalkan.

Vor dem Namen des Grundalkans werden nach 2.11 mit Zahlen ("Positionsziffern") die Positionen der Areneinheiten angegeben, ausserdem nach 2.12 deren Namen einschliesslich der Haftstellen an den Ringen ("Ringziffern"). Sind identische Areneinheiten mit identischen Haftstellen vorhanden, wird dies wie bei (1) und (2) durch die Präfixe di, tri, tetra, penta usw. ausgedrückt.



Grundalkan: Octan

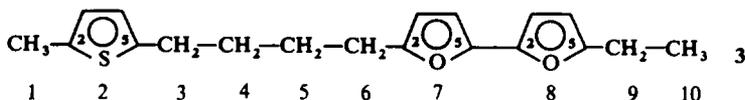
Name: 1-(2)Fura-4,5-di(2,6)pyrida-7-(7,2)quinola-octan



Grundalkan: Octan

Name: 1,8-Di(2)fura-2,4,6-tri(2,6)pyrida-3,5,7-tri(4,6)pyrimidina-octan

2.11 Bezifferung des Grundalkans; Rang der Areneinheiten. Die C-Atome des Grundalkans werden von einem Ende zum anderen mit arabischen Buchstaben durchgehend beziffert. Die Richtung wird wie bei Beispiel (3) so gewählt, dass die Areneinheiten ohne Rücksicht auf ihre Art möglichst niedrige Positionsziffern erhalten. Entscheidend ist die niedrigere Ziffer beim ersten Unterschied.

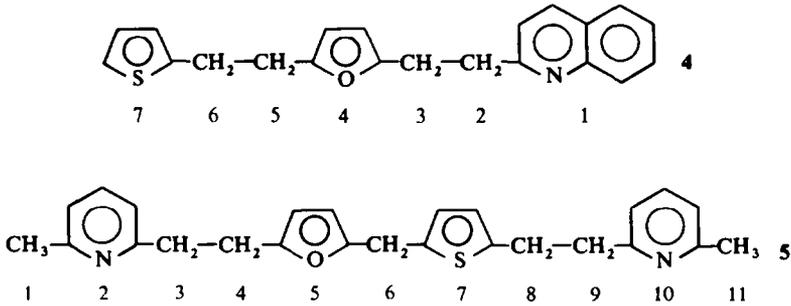


2-(2,5)Thiena-7,8-di(2,5)fura-decan

(nicht: 3,4-Di(2,5)fura-9-(2,5)thiena-decan)

Ist so keine Entscheidung möglich, wird so beziffert, dass gemäss (4) und (5) beim ersten Unterschied die ranghöchste Areneinheit die niedrigste Positionsziffer erhält.

* Grosszügige Anwendung des Begriffs aromatisch erweitert den Anwendungsbereich der a[Aren]-Nomenklatur, ohne dass Nachteile in Kauf genommen werden müssen.



Der Rang einer Areneinheit ist folgendermassen geregelt

- Ein Arensystem hat um so höheren Rang, je früher seine "arena-Bezeichnung" in der alphabetischen Reihenfolge der arena-Bezeichnungen (vgl. 2.12) auftritt.
- Bei gleicher Buchstabenfolge der arena-Bezeichnung (z. B. 1,2,3-triazola und 1,3,4-triazola) hat dasjenige Arensystem Vorrang, bei dem für die Bezeichnung der Heteroatome die niedrigeren Ziffern auftreten (erster Unterschied entscheidet).
- Bei gleichartigen Areneinheiten aber ungleichen Halftstellen ("Ringsziffern") hat die Areneinheit mit den niedrigeren Ringziffern Vorrang (erster Unterschied entscheidet).

2.12 *Benennung und Bezifferung der Areneinheiten.* Die Benennung der in Protophanen, Phanen, Polyarenen und Cyclopolyarenen enthaltenen Areneinheiten erfolgt so, dass bei den *angelsächsischen* Bezeichnungen der Arylreste (IUPAC-Regel B-5-11) die Endsilbe "yl" durch "a" ersetzt wird. Die so gebildeten "arena-Bezeichnungen" entsprechen im allgemeinen den Normalbezeichnungen der Arensysteme mit angefügtem "a" (unter Auslassung von endständigem "e", sofern dieses vorhanden).

Aren	Angelsächsische Aryl-Bezeichnung	Arena-Bezeichnung
Chinazolin	quinazolyl-	quinazola
Indol	indolyl-	indola
Pyrazol	pyrazolyl-	pyrazola
1,2,4-Triazol	1,2,3-triazolyl	1,2,3-triazola

Bei den wichtigsten Arenen sind die IUPAC-Bezeichnungen⁵ der Arylreste durch Kürzungen unregelmässig gebildet. Entsprechend sind daher auch die aus den Aryl-Bezeichnungen abgeleiteten arena-Bezeichnungen gemäss der folgenden Tabelle unregelmässig zu bilden.

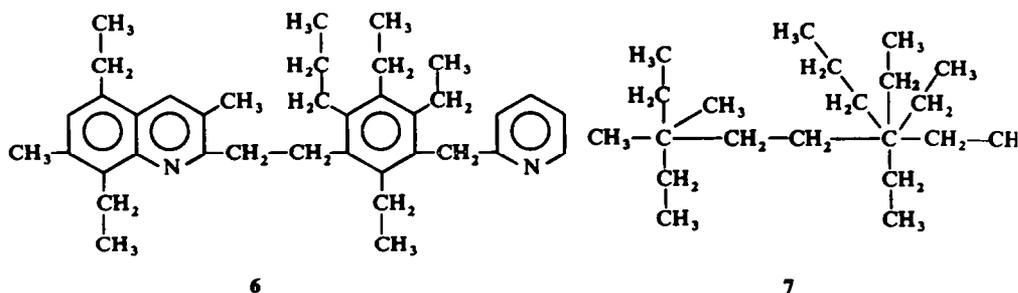
Aren	Arena-Bezeichnung	Aren	Arena-Bezeichnung
Anthracen	anthra	Benzol	phena
Furan	fura	Phenanthren	phenantha
Isochinolin	isquinola	Pyridin	pyrida
Naphthalin	naphtha	Thiophen	thiena

Die Nennung der Areneinheiten erfolgt im allgemeinen in der Reihenfolge aufsteigender Positionsziffern (vgl. 1.). Sind aber zwei oder mehrere gleiche Areneinheiten mit gleichen Haftstellen vorhanden, werden diese gemäss den Beispielen (1), (2) und (3) bei der frühest möglichen Positionsziffer zusammengefasst.

Zur Angabe der Stellen ("Ringsziffern"), an denen die Areneinheiten mit den aliphatischen Gruppen oder Ketten verbunden sind, werden die Areneinheiten nach den IUPAC-Regeln B-1, B-2 und B-3 und den Regeln in "The Ring Index" beziffert. Diejenige Ringsziffer, die in Richtung absteigender Positionsziffern des Grundalkans liegt, wird grundsätzlich zuerst aufgeführt (z. B. "(7.2)quinola" in Beispiel (1)). Sind Haftstellen hinsichtlich der Areneinheit gleichwertig, so erhält diejenige die niedrigere Ziffer, die in Richtung absteigender Ziffern des Grundalkans liegt (z. B. "(2.6)pyrida" in Beispiel (1)).

2.2 Verzweigte Protophane und Polyarene

Auf den ersten Blick erscheint es hier am einfachsten, zunächst durch Ersatz aller Arenkerne durch CH_3 -, CH_2 - und CH -Gruppen oder durch C-Atome die Bezeichnung des zugrundeliegenden verzweigten Kohlenwasserstoffs zu ermitteln und dann mit entsprechender Bezifferung die Bezeichnungen der Arenkerne einzuführen. Dieser Weg erweist sich jedoch als ungünstig, wenn Verbindungen wie (6) bezeichnet werden müssen, in denen 5- oder mehrbindige Areneinheiten* enthalten sind, da es die formal zugrundeliegenden Kohlenwasserstoffe, z. B. (7), wegen der Beschränkung des Kohlenstoffs auf nur 4 Bindungen nicht gibt.



* Unter der Bindigkeit von Arenen wird die Zahl der Bindungen verstanden, die von einer Areneinheit zu Liganden betätigt werden, wobei Wasserstoff und seine Isotope nicht als Liganden zählen.

Diese Komplikationen werden umgangen, wenn man bei verzweigten Verbindungen unter Verwendung der arena-Bezeichnungen den Namen der darin enthaltenen längsten linearen Protophan- bzw. Polyaren-Kette ermittelt und diesem die Namen aller Seitenketten voransetzt.

2.21 Bestimmung, Bezifferung und Benennung der Hauptkette

Bestimmung. Jede Areneinheit des verzweigten Protophans oder Polyarens wird durch eine CH_3 -, CH_2 -, CH -Gruppe oder ein C-Atom ersetzt. In dem so ermittelten "Grundalkan" (in dem formale C-Atome mit einer Bindigkeit grösser als 4 auftreten können, wird die Kette mit dem *niedrigsten* Rang (=komplizierteste Kette) zur Hauptkette.

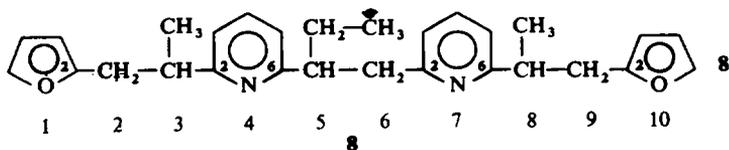
Der Rang einer Kette steigt:

- mit abnehmender Länge der Kette (Summe tatsächlicher* und formaler C-Atome),
- mit abnehmender Komplexität hinsichtlich des Verzweigungsgrades (gemäss IUPAC-Regel A-2.3a),
- mit abnehmender Zahl von Areneinheiten,
- mit zunehmendem Rang (vgl. 2.11) der enthaltenen Areneinheiten (entscheidend ist der erste Unterschied beim Durchgehen der Seitenketten-Positionsziffern beginnend bei 1).

Bezifferung und Benennung. Die Hauptkette wird beziffert und benannt, wie es für unverzweigte Protophane und Polyarene angegeben ist (vgl. 2.1). Ist es aufgrund der Areneinheiten der Hauptkette wie in (8) oder (9) nicht möglich, die Bezifferungsrichtung eindeutig festzulegen, verfährt man analog der IUPAC-Regel A-2-2 für die Bezifferung der Hauptkette von Alkanen:

- Die Hauptkette wird so numeriert, dass wie in Beispiel (8) die anhaftenden Seitenketten (Alkyl-, Protophanyl- und Polyarenylreste†) ohne Rücksicht auf die Art möglichst niedrige Positionsziffern erhalten.
- Ist so keine Entscheidung möglich, wird die Hauptkette so beziffert, dass beim ersten Unterschied die ranghöhere anhaftende Kette (Rangfestlegung gemäss 2.21) wie bei Beispiel (9) die niedrigere Positionsziffer erhält.

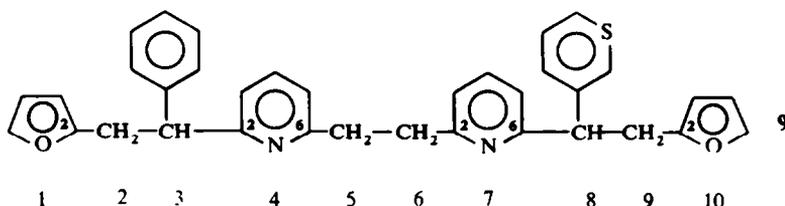
Die Bezifferung (Positions- und Ringsziffern) der Areneinheiten in der Hauptkette und die Benennung der Hauptkette erfolgt wie bei 2.1.



(bei umgekehrter Bezifferung hätte die Äthylgruppe die Positionersziffer 6)

* Dazu zählen nicht die C-Atome der Areneinheiten.

† Protophanylrest: Protophan mit einer freien Valenz. Polyarenylrest: Polyaren mit einer freien Valenz.

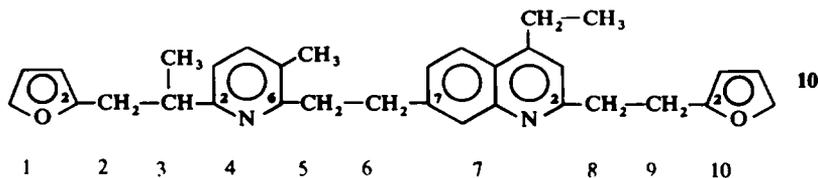


2.22 *Bezeichnung der Seitenketten.* Alkylreste werden nach den IUPAC-Regeln² bezeichnet. Unverzweigte Protophanyl- und Polyarenylreste bezeichnet man analog den unverzweigten Protophanen und Polyarenen, wobei die Endung "an" durch "yl" ersetzt wird und die Bezifferung an der Verknüpfungsstelle mit der Hauptkette beginnt. Verzweigte Protophanyl- und Polyarenylreste werden analog den verzweigten Protophanen und Polyarenen benannt.

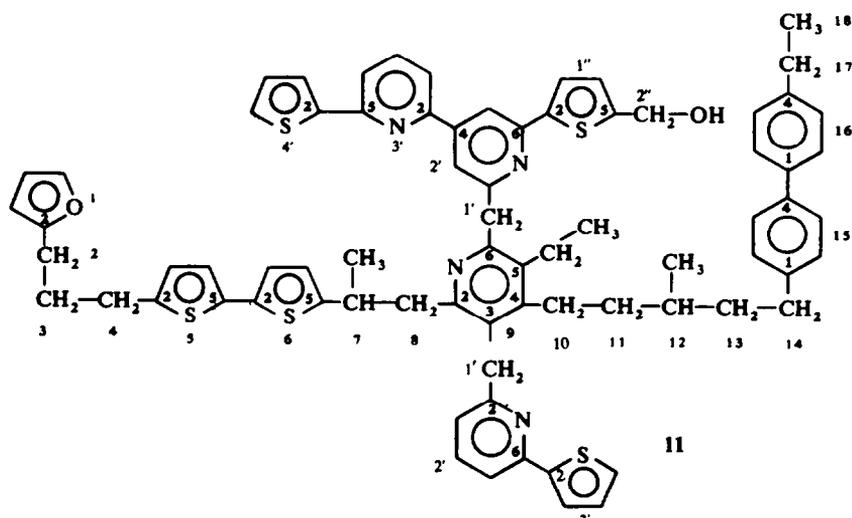
Muss wie bei Beispiel (11) zwischen einer *Seitenkette 1. Grades* (mit einem Strich markierte Positionsziffern) und einer *Seitenkette 2. Grades* (mit zwei Strichen markierte Positionsziffern) unterschieden werden, wird analog wie bei der Wahl der Hauptkette verfahren. Seitenkette 1. Grades wird also die Kette mit dem niedrigeren Rang (Rangfestlegung gemäss 2.21).

2.23 *Bildung der Gesamtbezeichnung.* Gemäss den Beispielen (10) und (11) setzt man vor den Namen der Hauptkette Positionsziffern, die die Stellung der Seitenketten bezeichnen, sowie die Namen der verschiedenen Seitenketten. Dabei werden gemäss (11) Seitenketten 2. Grades vor denen 1. Grades aufgeführt. Bei der Bezifferung der Seitenketten werden mit Ausnahme der Ringziffern mit Strichen markierte Ziffern verwendet (Positionsziffern bei Seitenketten 1. Grades mit einem Strich, bei Seitenketten 2. Grades, mit zwei Strichen). Die Bezeichnung der Seitenketten werden zur optischen Abtrennung von der Hauptkette in eckige Klammern gesetzt.

Die Nennung der Seitenketten (gleichen Grades) erfolgt im allgemeinen in der Reihenfolge ihrer Stellung an der Hauptkette (bei gleicher Positionsziffer wird die Seitenkette mit der niedrigeren Ringziffer zuerst genannt). Sind aber zwei oder mehr gleichartige Seitenketten vorhanden, werden diese gemäss den Beispielen (10) und (11) ("7,12-dimethyl") bei der frühest möglichen Positions- und Ringziffer zusammengefasst. Kleine Seitenketten an Arenkernen oder Seitenketten (Substituentencharakter) können wie bei (11) ("9-(2,4)(5-äthylpyrida)") zusammen mit den arena-Bezeichnungen oder Seitenkettenbezeichnungen angegeben werden.



3,4²[Dimethyl]-7⁴[äthyl]-1,10-di(2)fura-4-(2,6)pyrida-7-(7,2)quinola-decan

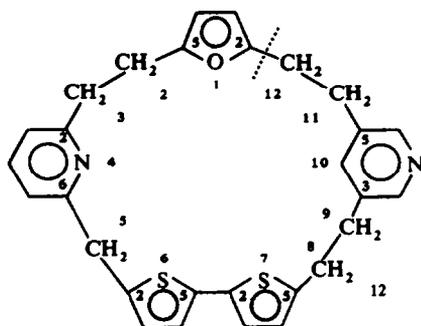


9⁶, 2¹⁴[1''-(2,5)thiena-2''-hydroxy-äthyl]-7, 12[dimethyl]-9³[2'-(2, 6)pyrida-3'-(2)thiena-propyl]-9⁶[2',3'-di(2, 6)pyrida-4(2)thiena-butyl]-1-(2)fura-5,6-di(2,5)thiena-9-(2,4)(5-äthyl-pyrida)-15,16-di(1,4)phena-octa-decan

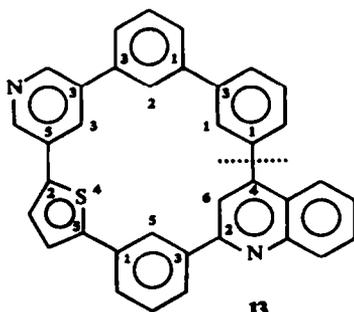
3. Phane und Cyclopolyarene

3.1 Phane und Cyclopolyarene ohne Seitenketten

3.11 Mit einem Ring. Jede Areneinheit des Makrorings wird formal durch eine CH₂-Gruppe ersetzt und so der Name des Grundcycloalkans ermittelt.



Grundcycloalkan: Cyclododecan
Name: 1-(2, 5)Fura-4-(2,6)pyrida-6,7-di(2,5)-thiena-10-(3, 5)pyrida-cyclododecan

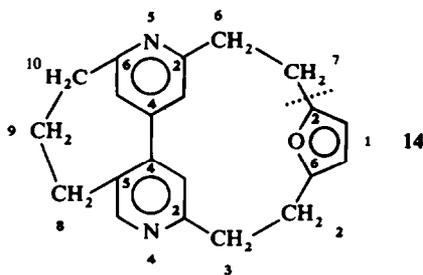


Grundcycloalkan: Cyclohexan
Name: 1, 2, 5-Tri(1,3)phena-3-(3,5)pyrida-4-(2,5)-thiena-6-(2,4)quinola-cyclohexan

Vor den Namen des Grundcycloaklans werden die Positions- und Ringziffern sowie die Namen der Areneinheiten gesetzt. Sind identische Areneinheiten mit identischen Haftstellen vorhanden, wird dies durch die Präfixe di-, tri-, tetra- usw. angegeben. Die Bezifferung ("Positions-ziffern") des Makrorings beginnt mit 1 bei der ranghöchsten Areneinheit (vgl. 2.11). Die Richtung der Bezifferung wird so gewählt, dass die weiteren Areneinheiten möglichst niedrige Ziffern erhalten, wobei wieder der erste Unterschied entscheidet. Die Haftstellen der Areneinheiten ("Ringziffern") werden wie bei den Protophanen angegeben, d. h. die zuerst genannte Ringziffer liegt gemäss den Beispielen (12) und (13) in Richtung kleinerer Positions-ziffern des Makrorings. Die Nennung der Areneinheiten erfolgt analog zu 2.12.

3.12 *Mit zwei und mehr Ringen.* Bei komplizierteren Phanen und Cyclopolyarenen gibt es Nomenklatur-schwierigkeiten, wenn man die formal zugrundeliegenden Cycloalkane nach dem Baeyer-Prinzip (IUPAC-Regel A-31) bezeichnen will. Dienen nämlich, wie in (14), Arene als Brückenköpfe, lassen sich die Haftstellen der Brücken nur sehr umständlich eindeutig angeben. Es ist daher günstiger, in Anlehnung an die zweite IUPAC-Methode zur Bezeichnung von Cycloalkanen (IUPAC-Regel A-34) zu verfahren, d. h. den Namen des in der Verbindung enthaltenen grössten Ringes ("Hauptcyclus") zu ermitteln und diesem Angaben über *Brücken* volanzustellen. Dieser Weg wird hier beschriftet.

Eine Brücke muss mindestens *ein* Brückenglied enthalten. Daher ist z. B. in (14) der Hauptcyclus nicht 10gliedrig mit einer Brücke zwischen den 4-Positionen der Pyridinkerne, sondern 7gliedrig mit einer Brücke zwischen der 3- bzw. 5-Position der Pyridinkerne.



Sind zwei oder mehrere gleichgrosse Makroringe (gleiche Zahl an tatsächlichen* + formalen C-Atomen) vorhanden, hat *Vorrang der Ring*:

- mit der grösseren Zahl von Areneinheiten,
- mit den im Rang niedrigeren Areneinheiten (entscheidend ist der erste Unterschied beim Durchgehen der arena-Bezeichnungen in alphabetischer Reihenfolge),
- mit mehr Seitenketten.

Die Bezeichnung und Bezifferung des Hauptcyclus erfolgt wie bei 3.1.1. Ist es aufgrund der enthaltenen Areneinheiten nicht möglich, die Bezifferungsrichtung eindeutig festzulegen, wird so beziffert, dass:

- gemäss Beispiel (15) die anhaftenden Brücken ohne Rücksicht auf ihre Natur an möglichst niedrig bezifferten Gliedern des Hauptcyclus haften (erster Unterschied entscheidet),

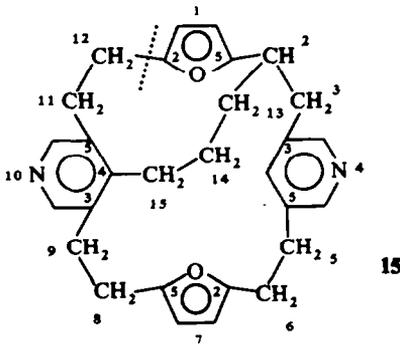
* Dazu zählen nicht die C-Atome der Areneinheiten.

- (b) beim ersten Unterschied die kürzere Brücke (tatsächliche* + formale C-Atome) die niedrigere erste (im Zweifelsfall zweite) Positionsnummer am Hauptcyclus erhält,
- (c) beim ersten Unterschied die Brücke mit weniger (im Zweifelsfall mit den ranghöchsten) Areneinheiten die niedrigere erste (im Zweifelsfall zweite) Positionsnummer am Hauptcyclus erhält.

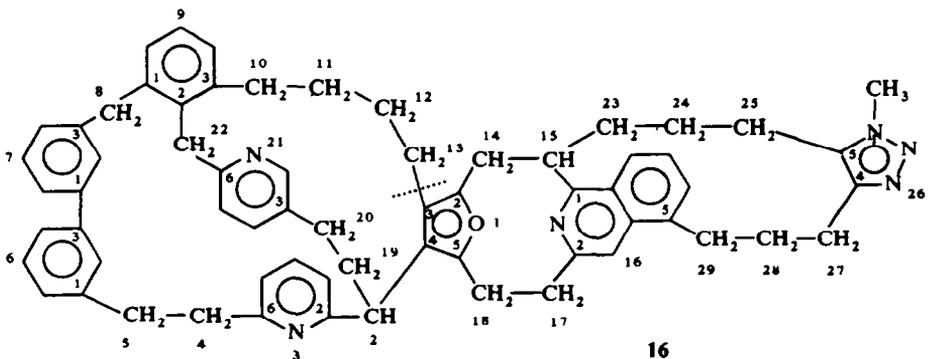
Der Bezeichnung des Hauptcyclus werden gemäss (15) und (16) Angaben über die Art der Brücken zwischen den Gliedern des Hauptcyclus vorangestellt. Analog wird bei Phänen und Cyclopolyarenen mit spiroverknüpften Ringen verfahren (Beispiel (16)). Analog werden auch Brücken zwischen einer Brücke und dem Hauptcyclus oder zwischen zwei Brücken bezeichnet.

Im Einzelnen werden die Brücken analog den Seitenketten bezeichnet (vgl. 2.22), wobei entsprechend der IUPAC-Regel A-34 die Endung "yl" durch "ano" ersetzt wird. Die Bezifferung der Brücken beginnt an der Verknüpfungsstelle, die im Hauptcyclus die kleinere Positionsnummer trägt. Sie setzt die Bezifferung des Hauptcyclus, wie bei (14)–(16) angegeben, fort. Im Gegensatz zu den Seitenketten (vgl. 2.22) werden keine mit Strichen markierten Ziffern verwendet.

Eine Brücke erscheint im Namen umso früher, je niedriger ihre Positionsnummern sind (erster Unterschied entscheidet). Die Ausdrücke für die Brücken werden, wie bei den Beispielen (15) und (16), zwischen eckige Klammern gesetzt.



2.10⁴[Propano]-1.7-di(2,5)fura-4.10-di(3,5)-pyrida-cyclododecan



1².1⁵[16-(1,3)isoquinola,pentano]-2, 9²[21-(3,6)pyrida-butano]-15, 16³[26-(5,4)(1-methyl-1,2,3-triazola)heptano]-1-(3,4)fura-3-(2,6)pyrida-6,7,9-tri(1,3)phena-cyclotridecan

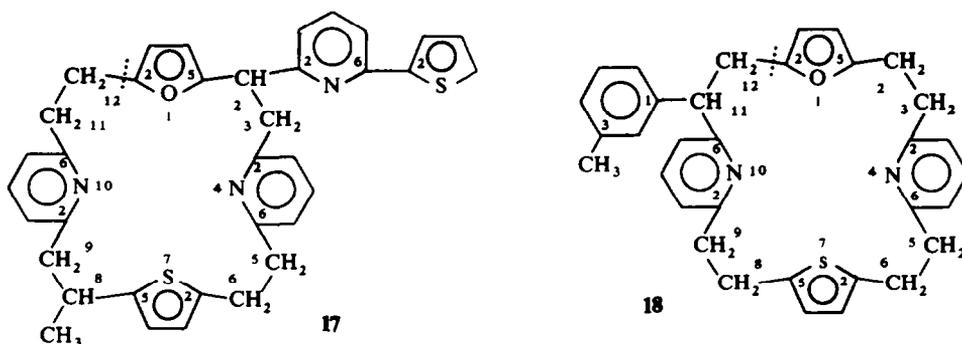
* Dazu zählen nicht die C-Atome der Areneinheiten.

3.2 Phane und Cyclopolyarene mit Seitenketten

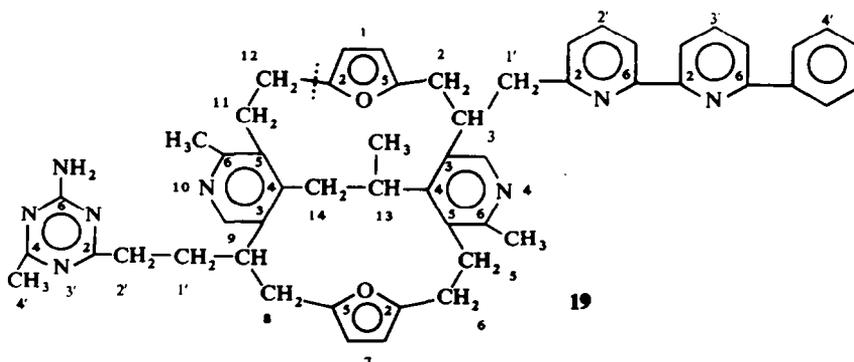
3.21 *Mit einem Ring.* Der makrocyclische Ring wird wie bei 3.1 bezeichnet. Ist es aufgrund der enthaltenen Areneinheiten wie in (17) und (18) nicht möglich, die Bezifferungsrichtung eindeutig festzulegen, wird die Richtung so gewählt, dass:

- Seitenketten (Alkyl-, Protophanyl- und Polyarenylreste) ohne Rücksicht auf ihre Natur möglichst niedrige Positionsziffern erhalten,
- beim ersten Unterschied die ranghöhere Kette (vgl. 2:21) die niedrigere Positionsziffer erhält.

Die Bezeichnungen der Seitenketten werden wie bei 2.22 gebildet und wie bei Beispiel (19) der Bezeichnung des makrocyclischen Ringsystems vorangestellt.



3.22 *Mit zwei und mehr Ringen.* Die Wahl und Bezeichnung des Hauptcyclus erfolgt wie bei 3.11. Ist es aufgrund der Areneinheiten und Brücken wie bei (19) nicht möglich, die Bezifferungsrichtung eindeutig festzulegen, bieten die Seitenketten analog zu 3.21 ein weiteres Kriterium. Die Bezeichnung der Seitenketten erscheinen, wie am Beispiel (19) gezeigt, in der Gesamtbezeichnung vor der Bezeichnung der Brücken. Kleine Seitenketten (Substituentencharakter) an den Areneinheiten, Brücken oder Seitenketten können wie im Beispiel (19) angegeben werden.

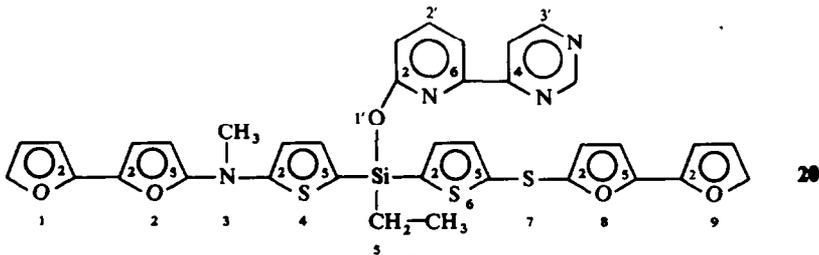


3[2',3'-Di(2,6)pyrida-4'-phena-butyl]-9[3'-(2,4(6-amino-s-triazina)-butyl)-4',10⁴[13-methyl-äthanol]-1,7-di(2,5)fura-4, 10-di(2,5(6-methyl-pyrida)-cyclododecan

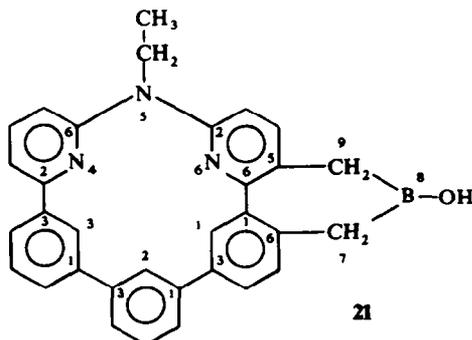
4. Kombination der a[Atom]-mit der a[Aren]-Nomenklatur
(= a[Atom/Aren]-Nomenklatur)

Neben den Phanen (= cyclisch) gibt es Heteraphane,³ in denen einzelne C-Atome in den aliphatischen Brücken durch Heteroatome ersetzt sind. Entsprechend leiten sich von den Protophanen (= offenkettig) die Heteroprotophane* ab.

Solche Verbindungen sind verhältnismässig einfach durch Kombination der a[Atom]-Nomenklatur mit der a[Aren]-Nomenklatur zu bezeichnen: Sämtliche durch Heteroatome gebildeten Ketten- bzw. Ringglieder in den aliphatischen Teilen der Heteroprotophane und Heteraphane werden formal durch Kohlenstoffatome ersetzt. Dann werden nach 2. und 3. die Bezeichnungen für die zugrundeliegenden Protophane und Phane gebildet. Die ersetzten Heteroatome werden nach dem Prinzip der a[Atom]-Nomenklatur (IUPAC-Regel B-4) bezeichnet. Die hetera-Bezeichnungen³ aza, oxa usw. erscheinen dabei, wie an den Beispielen (20) und (21) gezeigt, in der Gesamtbezeichnung vor den arena-Bezeichnungen und werden in alphabetischer Reihenfolge aufgeführt.—Ist wie bei Beispiel (20) durch Anwendung der Regeln der a[Aren]-Nomenklatur hinsichtlich der Bezifferungsrichtung keine Entscheidung möglich, wird so beziffert, dass die im Alphabet frühere hetera-Bezeichnung die niedrigere Positionsziffer erhält, wobei wieder der erste Unterschied massgeblich ist. Bei gleichen hetera-Bezeichnungen wird so beziffert, dass die hetera-Bezeichnungen möglichst niedrige Positionsziffern erhalten; auch hier entscheidet der erste Unterschied.



3-Methyl-5-äthyl-5[1'-oxa-2'(2,6)pyrida-3'(4)pyrimidina-propyl]-3-aza-5-sila-7-sulfa-1, 9-di(2)fura-2,8-di(2, 5)fura-4, 6-di(2, 5)thiena-nonan



5-Äthyl-8-hydroxy-1⁶, 6⁵[8-bora-propano]-5-aza-1, 2, 3-tri(1, 3)phena-4, 6-di(2, 6)pyrida-cyclohexan

* Diese Bezeichnung wird hiermit vorgeschlagen.

LITERATURVERZEICHNIS

- ¹ Protophane und Polyarene, 6. Mitteilung.—5. Mitteilung: Th. Kauffmann, J. Jackisch, H. -J. Streitberger und E. Wienhöfer, *Angew. Chem.* **83**, 799 (1971); *ibid.* internat. Edit. **10**, 744 (1971)
- ² Th. Kauffmann, G. Beissner und R. Maibaum, *ibid.* **83**, 795 (1971); *ibid.* internat. Edit. **10**, 740 (1971)
- ³ F. Vögtle und P. Neumann, *Tetrahedron Letters*, 5329 (1969); *Tetrahedron* 5847 (1970)
- ⁴ Th. Kauffmann, E. Wienhöfer und A. Woltermann, *Angew. Chem.* **83**, 796 (1971); *ibid.* internat. Edit. **10**, 741 (1971)
- ⁵ *International Union of Pure and Applied Chemistry, Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A and B* (2nd Edition) London (1966)
- ⁶ G. Beissner, Dissertation Universität Münster (1971)
- ⁷ A. M. Patterson, L. T. Capell und D. F. Walker, *The Ring Index* (2nd Edition), American Chemical Society, Washington, D.C. (1960)