

# Nomenklatur der Fullerene $C_{60}$ - $I_h$ und $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ \*\*

Obmann und Übersetzer: Carlo Thilgen\*

## Fu-o Einleitung

1997 veröffentlichte eine vom Präsidenten der IUPAC, Alan Bard, berufene Arbeitsgruppe einen vorläufigen Überblick über die Bezifferung und Nomenklatur von Fullerenen.<sup>[1]</sup> Darin werden zwei Verfahren zur Benennung von Fullerenen beschrieben: Eines wurde von Forschern auf dem Gebiet vorgeschlagen, das andere wird vom *Chemical Abstracts Service* (CAS) verwendet. Außerdem werden zwei Systeme zur Bezifferung von Fullerengerüsten vorgestellt: eines von R. Taylor,<sup>[2]</sup> das andere vom CAS.<sup>[3]</sup> Daneben werden alternative Verfahren zur Benennung von Fullerenderivaten diskutiert. Dieser vorläufige Überblick<sup>[1]</sup> enthält jedoch keine von der IUPAC verabschiedeten Empfehlungen. Dies wird mit dem hier vorliegenden Bericht nachgeholt, und zwar für die Fullerene  $C_{60}$ - $I_h$  und  $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$  sowie deren Derivate. Er beschränkt sich auf diese beiden Fullerene, da nur von wenigen anderen Fullerenen überhaupt Derivate bekannt sind. Dies reicht daher für eine fast vollständige Darstellung der Fullerenomenklatur. Eine Ausnahme ist die Unterscheidung zwischen Fullerenen gleicher Symmetrie und gleicher Zahl an Kohlenstoffatomen, zu deren eindeutiger Kennzeichnung kompliziertere Regeln erforderlich sein werden.

[\*] Dr. C. Thilgen  
Laboratorium für Organische Chemie der ETH Zürich  
ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich (Schweiz)  
Fax: (+41) 44-6321109  
E-mail: thilgen@org.chem.ethz.ch

[\*\*] Copyright© der englischen Fassung, die unter dem Titel „Nomenclature for the  $C_{60}$ - $I_h$  and  $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$  Fullerenes“ von W. H. Powell (USA), F. Cozzi (Italien), G. P. Moss (Großbritannien), C. Thilgen (Schweiz), R. J.-R. Hwu (Taiwan) und A. Yerin (Russland) für die Veröffentlichung in *Pure Appl. Chem.* **2002**, *74*, 629–695<sup>[22]</sup> vorbereitet wurde und auch im Internet unter der Adresse [www.chem.qmul.ac.uk/iupac/fullerene/](http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/fullerene/) zugänglich ist: International Union of Pure and Applied Chemistry, 2002. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation. Der Obmann dankt Dr. K.-H. Hellwich, Frankfurt, für die großzügige Unterstützung bei der Übersetzung allgemeiner Nomenklaturbegriffe, das sorgfältige Korrekturlesen sowie die ausführlichen Diskussionsbeiträge und Korrekturvorschläge und Dr. W. H. Powell für eine elektronische Fassung des englischen Manuskripts. Gegenüber dem Original korrigierte Namen sind mit einem Stern versehen; sonstige größere Korrekturen sowie Kommentare von Dr. Hellwich sind in den Fußnoten zu finden. Auch einige Literaturverweise wurden zusätzlich aufgenommen, sei es, um neuere Quellen aufzuführen, Korrekturen zu begründen oder auf deutsche Texte hinzuweisen. In diesem Regelwerk werden einige Gepflogenheiten des Chemical Abstracts Service (CAS) erwähnt – dies geschieht nur informationshalber, es handelt sich also in solchen Fällen nicht notwendig um Empfehlungen der Kommission.

## Fu-1 Definitionen

### Fu-1.1 Fullerene

Nach der klassischen Definition ist ein Fulleren ein käfigartiger anellierter Polycyclus, der ausschließlich aus einer geraden Zahl von Kohlenstoffatomen besteht und dessen anelliertes Ringsystem neben Sechsringen exakt zwölf Fünfringe enthält. Das Urbild ist der aus 60 Kohlenstoffatomen bestehende Ikosaederstumpf.<sup>[4,5]</sup> Diese Definition ist jedoch erweitert worden und schließt im weiteren Sinn alle geschlossenen Käfigstrukturen aus mindestens 20 ausschließlich dreifach koordiniert vorliegenden Kohlenstoffatomen ein.<sup>[3]</sup>

### Fu-1.2 Fullerane

Fullerane sind vollständig gesättigte Fullerene, z. B. der Kohlenwasserstoff  $C_{60}H_{60}$ .

### Fu-1.3 Fulleroide

Heterofullerene, Norfullerene, Homofullerene und Secofullerene wurden als Fulleroide („Fullerenartige“) bezeichnet, da sie in ihrer Struktur den Fullerenen ähneln, ohne aber der obigen Definition zu entsprechen. Es bietet sich an, sie unter dem Oberbegriff Fulleroide zusammenzufassen und als modifizierte Fullerene zu benennen.

## Fu-2 Namen

### Fu-2.1 Systematische Namen

Die empfohlenen systematischen Namen für das ikosaedrische  $C_{60}$  und für  $D_{5h(6)}$ - $C_{70}$  lauten ( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]Fulleren und

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 Allgemeinsprache essenziell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Die nächste Übersetzung („Natural Products“) ist für Heft 47/2005 vorgesehen. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

( $C_{70}-D_{5h(6)}$ )[5,6]Fulleren. Das in runden Klammern angegebene Präfix enthält die Zahl der Kohlenstoffatome und das Punktgruppensymbol, die Zahlen in eckigen Klammern die Größen der im Fulleren vorkommenden Ringe. Diese Angabe ist wichtig bei Fullerenen mit Ringen, deren Gliederzahl von fünf oder sechs abweicht. Die im zweiten Namen auf das Punktgruppensymbol folgende tiefgestellte „6“ in runden Klammern bedeutet, dass die Fünfringe, auf denen die fünfzählige Symmetrieachse steht, von Sechsringen umgeben sind. Dies ermöglicht die Unterscheidung von einem möglichen isomeren ( $C_{70}-D_{5h(5)}$ )[5,6]Fulleren, bei dem die entsprechenden Fünfringe von weiteren Fünfringen umgeben sind und dessen Name ( $C_{70}-D_{5h(5)}$ )[5,6]Fulleren lautet. Dieses Verfahren wird derzeit weiter auf seine Tauglichkeit bezüglich der Unterscheidung zwischen anderen Fullerenisomeren gleicher Symmetrie geprüft. Die empfohlenen Namen enthalten die gleiche Information wie die entsprechenden CAS-Namen, aber sie haben einen anderen Aufbau.

## Fu-2.2 Trivialnamen

Die in dem vorläufigen IUPAC-Überblick<sup>[1]</sup> aufgeführten Bezeichnungen [60- $I_h$ ]Fulleren und [70- $D_{5h}$ ]Fulleren entsprechen den anfänglich in der Literatur für die Fullerene  $C_{60}-I_h$  und  $C_{70}-D_{5h(6)}$  verwendeten Namen. Da in ihnen wichtige Strukturinformationen fehlen, sind sie als Trivialnamen zu betrachten und nur für diese speziellen Verbindungen zu verwenden.

## Fu-3 Bezifferung

### Fu-3.1 Systematische Bezifferung

Die systematische Bezifferung von ( $C_{60}-I_h$ )[5,6]Fulleren und ( $C_{70}-D_{5h(6)}$ )[5,6]Fulleren beruht auf den folgenden angepassten Regeln der CAS-Veröffentlichung.<sup>[3]</sup> Die Regeln reichen aus, um diese beiden Fullerene systematisch zu beziffern. Zur Bezifferung anderer Fullerene werden weitere Regeln benötigt. Die entsprechenden CAS-Regeln<sup>[3]</sup> sind derzeit Gegenstand einer Prüfung und werden bei Eignung in einen Folgebericht aufgenommen werden.<sup>[20]</sup>

#### Fu-3.1.1

Drehachsen ( $C_n$ ) werden in der Reihenfolge abnehmen der Zähligkeit geprüft, bis mindestens ein zusammenhängender helicaler Pfad für die Nummerierung der Atome gefunden wird, der in einem Ring, an einer Bindung oder an einem Atom, deren Mittelpunkte auf der Drehachse liegen, beginnt. Die Bezifferung beginnt am Ende einer solchen Helix.

#### Fu-3.1.2

Besteht bezüglich des Bezifferungsbeginns eine Wahlmöglichkeit zwischen mehreren Bezugsachsen oder deren Enden, so hat ein Ring Vorrang gegenüber einer Bindung und diese wiederum gegenüber einem Atom.

#### Fu-3.1.2.1

Besteht eine Wahlmöglichkeit zwischen verschiedenen Ringen, so wird ein größerer Ring einem kleineren vorgezogen. Kann immer noch keine Entscheidung gefällt werden, so hat derjenige Ring Vorrang, der an der Stelle des ersten Unterschieds das ranghöchste Atom (siehe Regel Fu-3.1.2.3) enthält.

#### Fu-3.1.2.2

Besteht eine Wahlmöglichkeit zwischen verschiedenen Bindungen, so ist die gemeinsame Kante der größten Ringe die ranghöchste Bindung, z. B. 66 > 65 > 55. Kann immer noch keine Entscheidung gefällt werden, so hat diejenige Bindung Vorrang, die an der Stelle des ersten Unterschieds das ranghöchste Atom (siehe Regel Fu-3.1.2.3) enthält.

#### Fu-3.1.2.3

Besteht eine Wahlmöglichkeit zwischen verschiedenen Atomen, ist das ranghöchste Atom dasjenige, das den größten Ringen gemeinsam ist, z. B. 666 > 665 > 655 > 555.

#### Fu-3.1.3

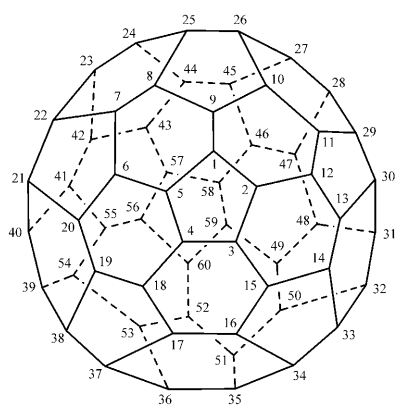
Besteht eine Wahlmöglichkeit zwischen verschiedenen Nummerierungspfaden, so endet der bevorzugte so nahe wie möglich an einem Schnittpunkt von Fulleren und Bezugsachse (die Entfernung wird durch die Zahl dazwischenliegender Bindungen beschrieben).

### Fu-3.2 Systematische Bezifferung von ( $C_{60}-I_h$ )[5,6]Fulleren

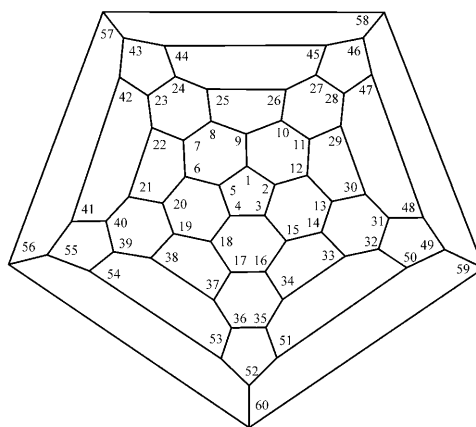
Dieses Fulleren (Abbildung 1) hat 6 äquivalente  $C_5$ -Achsen, die jeweils senkrecht auf den sich an zwei Polen gegenüberliegenden Fünfringen stehen. Ausgehend von einem beliebigen Atom eines beliebigen Fünfrings lassen sich in beiden Drehrichtungen äquivalente zusammenhängende helicale Nummerierungspfade konstruieren, d. h., jede  $C_5$ -Achse kann als Bezugsachse dienen. Gemäß Regel Fu-3.1.1 erübrigt sich somit das Prüfen der 10 äquivalenten  $C_3$ -Achsen, die jeweils senkrecht auf gegenüberliegenden Sechsringen stehen, oder der 15 äquivalenten  $C_2$ -Achsen, die jeweils gegenüberliegende 66-Bindungen (gemeinsame Kante zweier anellierter Sechsringe) schneiden, und die alle zu zusammenhängenden helicalen Nummerierungspfaden führen. Die systematische Bezifferung ist aus der 3D-Darstellung und dem Schlegel-Diagramm in Abbildung 1 ersichtlich.

### Fu-3.3 Systematische Bezifferung von ( $C_{70}-D_{5h(6)}$ )[5,6]Fulleren

Bei diesem Fulleren (siehe Abbildung 3) steht die Hauptachse ( $C_5$ ) senkrecht auf den sich an den Polen gegenüberliegenden Fünfringen. Da es ausgehend von diesen Fünfringen keine zusammenhängenden helicalen Nummerierungs-



3D-Darstellung



Schlegel-Diagramm

**Abbildung 1.** Systematische Bezeichnung von  $(C_{60}-I_h)[5,6]$ Fulleren. (In diesem Dokument wird das zentrale Vieleck eines Schlegel-Diagramms als dem Betrachter zugewandt angesehen, und die Fullerenstrukturen sind aus Gründen der Klarheit ohne Doppelbindungen dargestellt.)

pfade gibt, kann die  $C_5$ -Achse nicht als Bezugsachse dienen. Deshalb muss die Existenz zusammenhängender helicaler Nummerierungspfade für die fünf äquivalenten  $C_2$ -Achsen geprüft werden. Diese schneiden jeweils die am Äquator liegenden Sechsecke und die diametral gegenüber liegenden 66-Bindungen in ihren Mittelpunkten (Abbildung 2a). Da gemäß Regel Fu-3.1.2 ein Ring gegenüber einer Bindung Vorrang hat, muss die Suche nach einem zusammenhängenden helicalen Nummerierungspfad in einem der äquatorialen Sechsringe beginnen. Dafür gibt es jeweils zwölf Möglichkeiten: Von jedem Atom eines jeden dieser Sechsringe aus kann man sich im Uhrzeigersinn oder gegen den Uhrzeigersinn

Achse schneidenden Bindung entfernt sind. Gemäß Regel Fu-3.1.3 ist somit der bevorzugte helicaler Nummerierungspfad der Weg „bab“ (Uhrzeigersinn) (Abbildung 2b) und die systematische Bezeichnung von  $(C_{70}-D_{5h(6)})[5,6]$ Fulleren ist in Abbildung 3 gezeigt.

#### Fu-3.4 Trivialbezeichnung

In Verbindung mit den unter Regel Fu-2.2 angegebenen Trivialnamen  $[60-I_h]$ Fulleren und  $[70-D_{5h}]$ Fulleren sind die in Abbildung 4 bzw. 5 gezeigten Trivialbezeichnungen zu verwenden; sie beginnen jeweils an der „reaktivsten“ Bindung.<sup>[2]</sup>

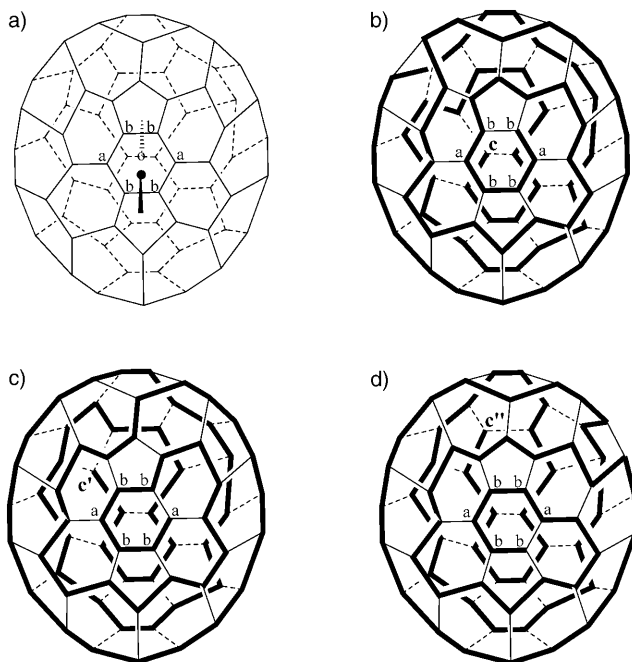
*Anmerkung:* Ein Kriterium wie „die reaktivste Bindung“ ist nicht für das Aufstellen eines systematischen Verfahrens zur Bezeichnung anderer Fullere – insbesondere solcher, die noch nicht charakterisiert wurden – geeignet.

#### Fu-4 Strukturell modifizierte Fullerene

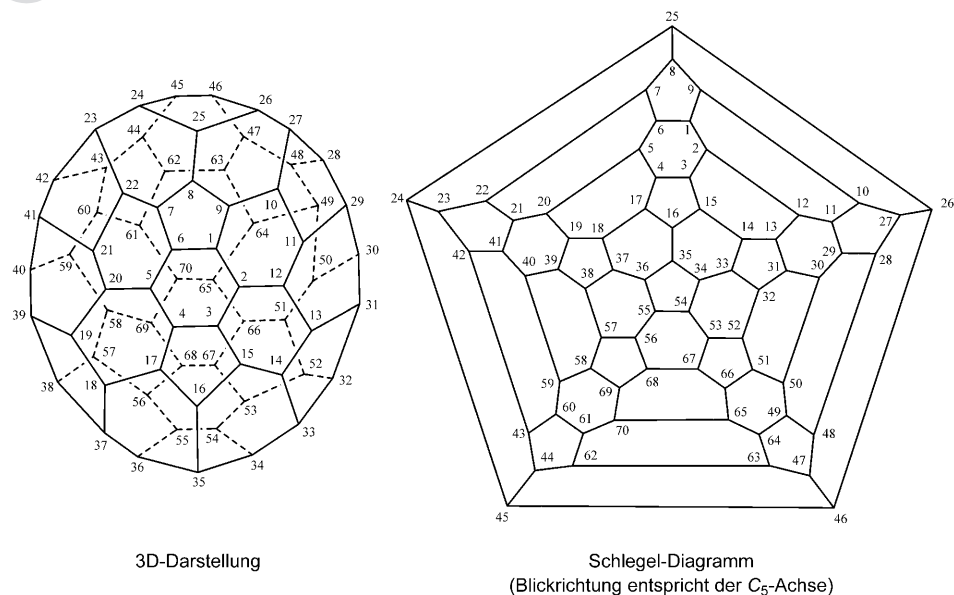
Die Modifizierung von Fullerenstrukturen durch Hinzufügen oder Entfernen von Atomen oder durch Brechen oder Knüpfen von Bindungen wird wie in der Naturstoffnomenklatur<sup>[6]</sup> durch die Präfixe „Homo“, „Nor“, „Seco“ und „Cyclo“ beschrieben. Diese können auch kombiniert werden.

##### Fu-4.1 Homofullerene

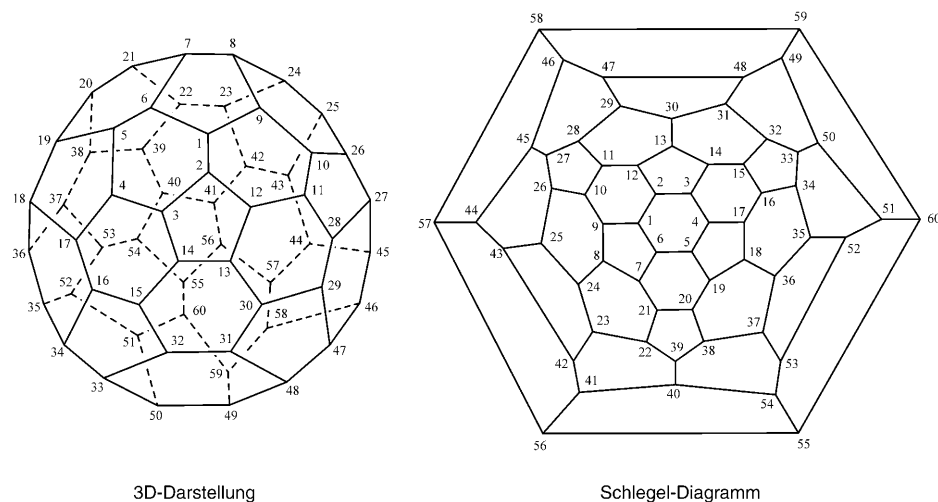
Der Ersatz einer Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindung eines Fulleren durch eine Methylengruppe wird beschrieben, indem man dem Namen des Stamfullerens das nicht abtrennbare Präfix „Homo“ voranstellt. Die ursprüngliche Bezeichnung des Stamfullerens wird beibehalten. Die Lage der „Homo“-Modifizierung wird durch einen zusammengesetzten Lokanten beschrieben, der wie beim Einschub einer Methylengruppe in einen Bindungskonnektor einer Grund-



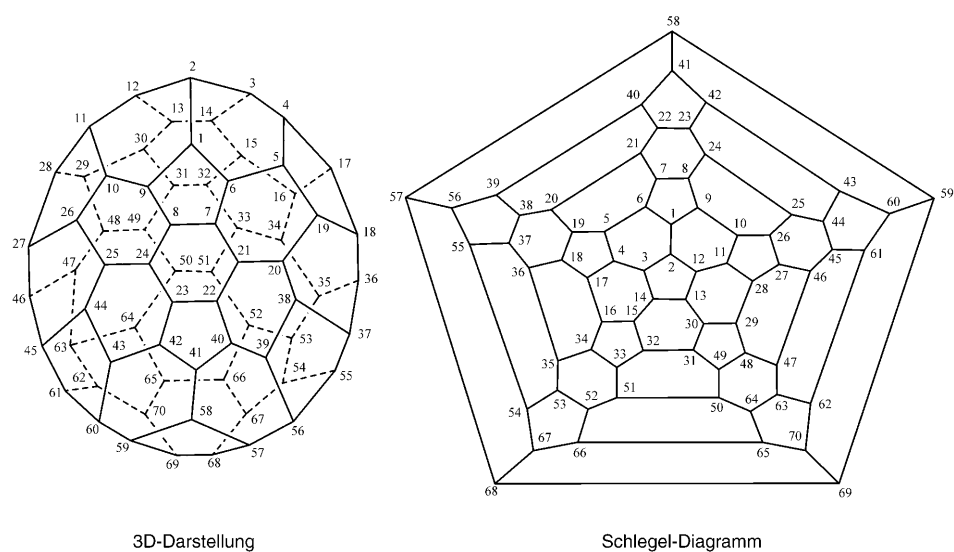
**Abbildung 2.** Ableitung des zusammenhängenden helicalen Nummerierungspfades für die Bezeichnung von  $(C_{70}-D_{5h(6)})[5,6]$ Fulleren.



**Abbildung 3.** Systematische Bezifferung von  $(C_{70}-D_{5h(6)})[5,6]$ Fulleren.



**Abbildung 4.** Trivialbezifferung von  $[60-I_h]$ Fulleren.



**Abbildung 5.** Trivialbezifferung von  $[70-D_{5h}]$ Fulleren.

stammstruktur gebildet wird.<sup>[6]</sup> Diesen zusammengesetzten Lokanten erhält man durch Anhängen der Buchstaben „a“, „b“ usw. an das Lokantenpaar für die ersetzte Bindung, wobei dieses Paar die niedrigsten Lokanten sind, die in Einklang mit der Bezifferung des Fulleren sind, und der höhere von beiden dem niedrigeren in Klammern angefügt wird, z.B. „1(9)a“. In Stammnamen müssen diese zusammengesetzten Lokanten verwendet werden; falls Mehrdeutigkeiten ausgeschlossen sind, kann man in Strukturformeln, bei der Angabe von Substituentenpositionen usw. auch einfache Lokanten verwenden, die durch Anhängen des Buchstabens „a“ an den niedrigeren Lokanten gebildet werden (im obigen Fall „1a“).

Wegen möglicher Umlagerung der Doppelbindungen in Homofullerenstrukturen verwendet man indizierten Wasserstoff zur Kennzeichnung des „zusätzlichen“ Wasserstoffs am Homoatom, und das selbst bei Di-, Tri-, Tetra- usw. -homofullerenen, die als Hydroderivate mankuder<sup>[\*]</sup> Strukturen<sup>[4]</sup> angesehen werden könnten (siehe 2 und 3).

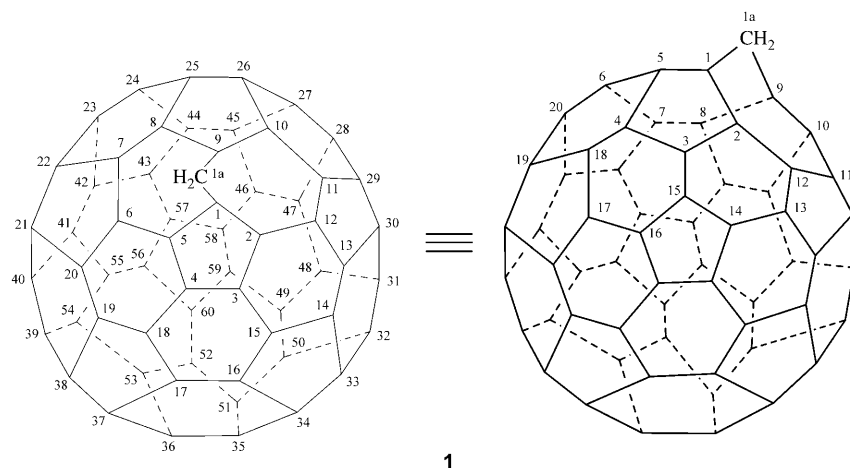
*Anmerkung:* Der CAS verwendet für die zusammengesetzten Lokanten ein Format, bei dem auf die Lokanten der ersetzten Bindung eine Klammer mit dem höheren Lokanten und dem Buchstaben „a“ folgt, z.B. „1,2(2a)“;<sup>[3]</sup> die eingeschobene Methylengruppe erhielte in diesem Fall die Nummer „2a“. Damit sollten Mehrdeutigkeiten bei Dihomofullerenen vermieden werden, in denen zwei Homo-Bindungen vom gleichen Atom ausgehen (3) und bei denen gemäß Lit. [1] beiden Homo-Atomen sonst die gleiche Nummer zugewiesen würde. Obwohl sich Mehrdeutigkeiten auf diese Weise oft vermeiden lassen, gelingt dies nicht immer, z.B. im Fall des CA-Indexnamen 3,15(15a):14,15(15a)-dihomo-1,9-dinor[5,6]fullerene- $C_{60}-I_h$ , in dem beide eingeschobenen Methylengruppen den einfachen Lokanten „15a“ haben. (In CAS-Indexnamen wird das gesamte Punktgruppensymbol

[\*] Mankud (engl.: mancude) ist ein Kunstwort und bedeutet „die maximale Anzahl nichtkumulierter Doppelbindungen enthaltend“. Die Ableitung ist im Deutschen offensichtlicher als die entsprechende Ableitung im Englischen für „mancude“.

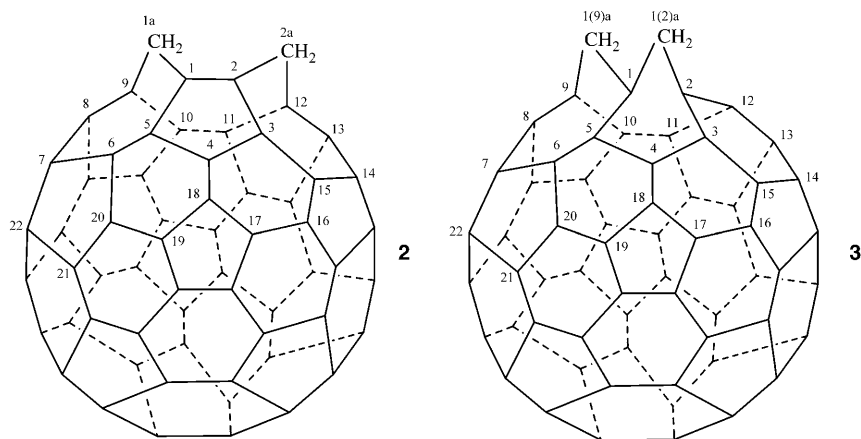


kursiv gestellt, während dies in IUPAC-Namen nur für den Großbuchstaben gilt und die tiefgestellten Zahlen oder Buchstaben in Normalschrift erscheinen [Fußnote g des englischen Originals].) Der von der IUPAC empfohlene Name für dieses modifizierte Fulleren lautet 3(15)a,14(15)a-Dihomo-1,9-dinor( $C_{60-I_h}$ )[5,6]fulleren, und die zugehörigen Nummern für die Homo-Atome sind „3a“ und „14a“.

Beispiele:



1: 1aH-1(9)a-Homo( $C_{60-I_h}$ )[5,6]fulleren (die Nummer für das Homo-Atom ist „1a“)



2: 1aH,2aH-1(9)a,2(12)a-Dihomo( $C_{60-I_h}$ )[5,6]fulleren [nicht: 1a,2a-Dihydro-1(9)a,2(12)a-dihomo( $C_{60-I_h}$ )[5,6]fulleren; die Methylengruppen dieser Struktur erhalten die Nummern „1a“ und „2a“]

3: 1(2)aH,1(9)aH-1(2)a,1(9)a-Dihomo( $C_{60-I_h}$ )[5,6]fulleren [nicht: 1(2)a,1(9)a-Dihydro-1(2)a,1(9)a-dihomo( $C_{60-I_h}$ )[5,6]fulleren; \* die Methylengruppen erhalten die Nummern „1(2)a“ und „1(9)a“, da beide dieselbe einfache Form „1a“ hätten]

#### Fu-4.2 Norfullerene<sup>[\*]</sup>

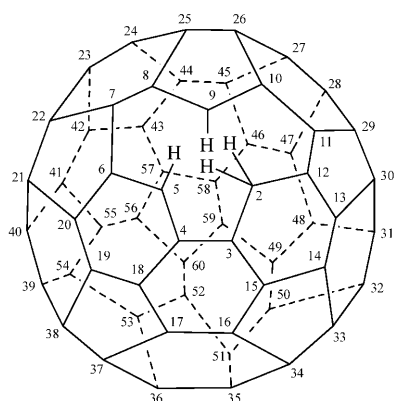
Das nicht abtrennbare Präfix „Nor“ beschreibt das Entfernen von Kohlenstoffatomen aus einer Fullerenstruktur;

[\*] Die Formulierung des folgenden Abschnitts wurde gegenüber der englischen Druckausgabe verbessert.

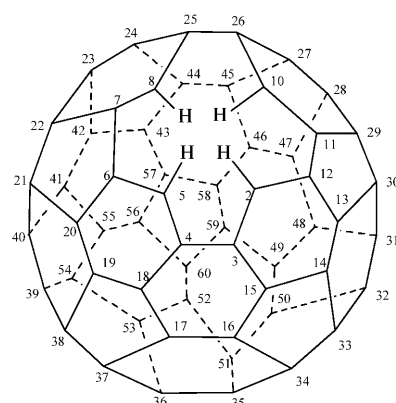
anders als bei der Naturstoffnomenklatur<sup>[6]</sup> werden aber die zum entfernten Atom hinführenden Bindungen nicht verschmolzen. Das bedeutet eine scheinbare Abnahme der Konnektivität der verbleibenden Atome, was das Einführen von Wasserstoffatomen erforderlich macht. Wenn nach Anwendung der „Nor“-Operation eine ungerade Zahl von Kohlenstoffatomen Wasserstoffatome bindet, wird mindestens eines davon  $sp^3$ - statt  $sp^2$ -hybridisiert sein. Dessen Position wird durch indizierten Wasserstoff vor dem Namen angegeben.  $sp^3$ -Hybridisierung ist auch mit Heteroatomen wie N, B, O oder S möglich. Bei Auswahlmöglichkeit erhalten die entfernten Atome sowie der indizierte Wasserstoff die niedrigstmöglichen Lokanten.

**Anmerkungen:** 1) In der Naturstoffnomenklatur sind die durch die „Nor“-Operation entfernten Atome die mit der höchstmöglichen Nummer innerhalb des Ring- oder Kettenabschnitts.<sup>[6]</sup> 2) Das Hauptproblem bei der „Nor“-Operation besteht im Festlegen der Höchstzahl von Kohlenstoffatomen, die aus einer bestimmten Fullerenstruktur entfernt werden können. Ab einem gewissen Punkt wird die systematische Ringnomenklatur einen Namen liefern, der leichter verständlich ist als der eines Polynorfullerens. Allerdings ist es wenig hilfreich, für die zulässige Zahl von „Nor“-Operationen eine präzise Obergrenze festzulegen; eine realistische Zahl hängt entscheidend davon ab, ob ganze Blöcke von Kohlenstoffatomen oder isolierte Atome entfernt werden. In der CA-Indexnomenklatur dürfen nicht mehr als 20% der Kohlenstoffatome eines Fullerens durch die „Nor“-Operation entfernt werden, es sei denn, es handelt sich um eine besondere Situation. Bei ( $C_{60-I_h}$ )[5,6]Fulleren und ( $C_{70-D_{5h(6)}}$ )[5,6]Fulleren wird empfohlen, dass nach der „Nor“-Operation mindestens zwei Gürtel aus Ringen oder die Hälfte der Atome der Stammstruktur übrig bleiben.

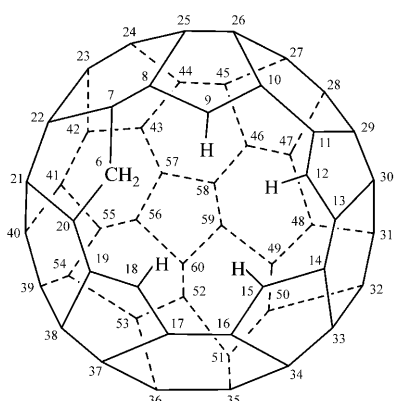
Beispiele:



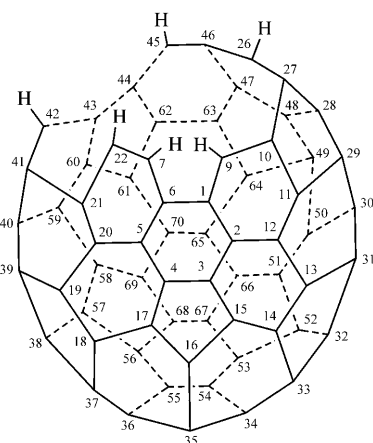
4



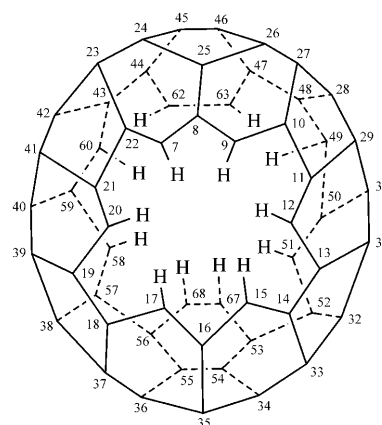
5



6



7



8

4: 2H-1-Nor( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren

5: 1,9-Dinor( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren

6: 6H-1,2,3,4,5-Pentanor( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren

7: 8,23,24,25-Tetranor( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren

8: 1,2,3,4,5,6,61,64,65,66,69,70-Dodecanor( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren

## Fu-4.3 Secofullerene<sup>[\*]</sup>

Das nicht abtrennbare Präfix „Seco“ beschreibt das Entfernen von Fullerenbindungen. Die Bezifferung des Stammfulleren wird beibehalten; bei Wahlmöglichkeiten erhalten die „Seco“-Positionen möglichst niedrige Lokanten. Die von der „Seco“-Operation betroffenen Kohlenstoffatome werden – gegebenenfalls nach geeigneter Umlagerung von

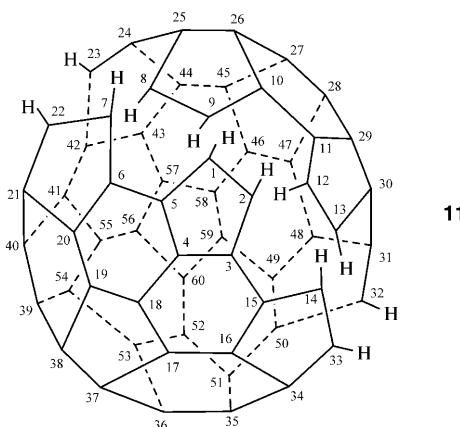
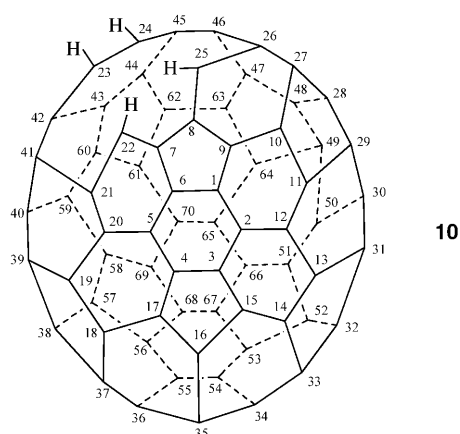
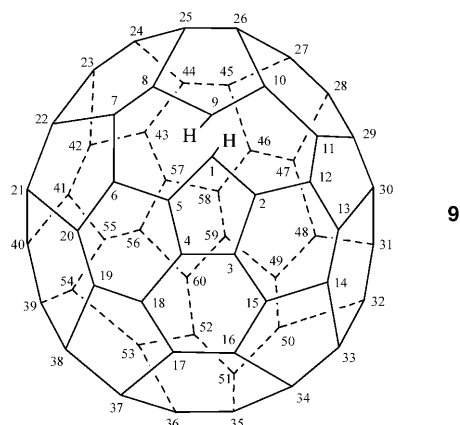
Doppelbindungen – mit Wasserstoff auf eine Konnektivität von 3 ergänzt.<sup>[\*]</sup> Diese Wasserstoffatome sind implizit Teil des Namens.

*Anmerkung:* Wie bei der „Nor“-Operation besteht auch bei der „Seco“-Operation das Hauptproblem darin, eine Obergrenze für die Zahl der Bindungen festzulegen, die aus einer gegebenen Fullerenstruktur entfernt werden können. Ab einem gewissen Punkt wird die systematische Ringnomenklatur einen Namen liefern, der leichter verständlich ist als der eines Polysecofulleren. Allerdings ist es wenig hilfreich, für die zulässige Zahl von „Seco“-Operationen eine präzise Obergrenze festzulegen; eine realistische Zahl würde entscheidend davon abhängen, welche Fullerenbindungen entfernt werden. Selbstverständlich sollte ein Stammfulleren nicht in getrennte Teile zerlegt werden.

[\*] Die Formulierung des folgenden Abschnitts wurde gegenüber der englischen Druckausgabe verbessert.

[\*] Bei der „Seco“-Operation wird kein gesättigtes ( $sp^3$ -hybridisiertes) Kohlenstoffatom erzeugt.

Beispiele:



- 9: 1,9-Seco( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren  
 10: 22,23:24,25-Diseco( $C_{70}-D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren  
 11: 1,9:2,12:7,8:13,14:22,23:32,33-Hexaseco( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

#### Fu-4.4 Cyclofullerene

Das nicht abtrennbare Präfix „Cyclo“ beschreibt die Bildung einer Bindung zwischen zwei Atomen eines modifizierten Fulleren oder einer aus mehreren Fullereinheiten zusammengesetzten Verbindung (siehe Regel Fu-11). Bei

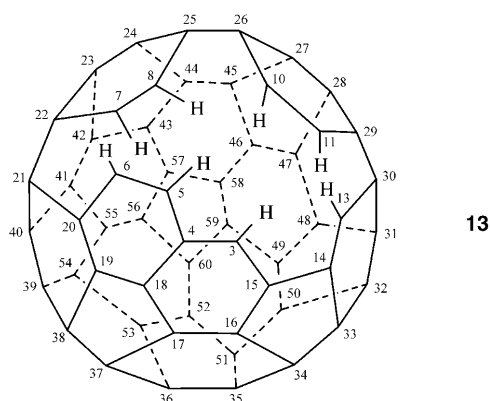
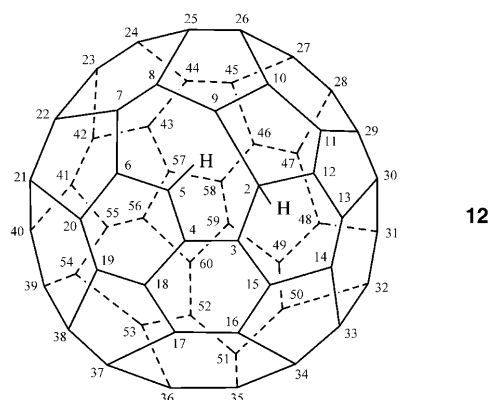
einer Struktur, die aus einem einzelnen Käfig besteht, kommt das Präfix „Cyclo“ fast immer in Verbindung mit einem oder mehreren der in den Regeln Fu-4.1–Fu-4.3 beschriebenen strukturmodifizierenden Präfixe vor.

#### Fu-4.5 Kombinationen strukturmodifizierender Präfixe

Die oben beschriebenen strukturmodifizierenden Präfixe lassen sich kombinieren und werden ausgehend vom Namen des Stamfullerens von rechts nach links in der Reihenfolge „Nor“, „Homo“, „Seco“, „Cyclo“ aufgeführt, d.h., indem man rückwärts vom Namen des Stamfullerens fortschreitet. In dieser Reihenfolge werden den Präfixen auch die niedrigstmöglichen Lokanten zugeordnet, da die Nummern der „Homo“-Atome gegebenenfalls als Lokantensatz zur Beschreibung der „Seco“- oder „Cyclo“-Operationen benötigt werden. „Seco“- oder „Cyclo“-Lokanten werden zunächst durch den niedrigsten Lokantensatz und anschließend durch die Reihenfolge ihrer Erwähnung im Namen festgelegt.

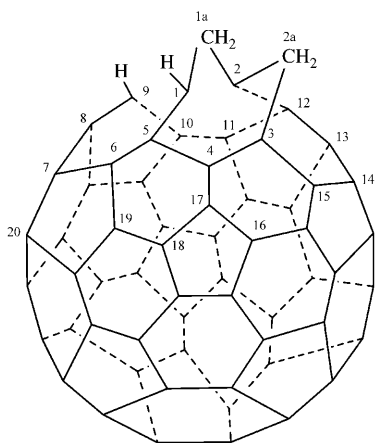
Anmerkung: Die Reihenfolge der Erwähnung im Namen entspricht in diesem Fall der in der Regel RF-4.7.4<sup>[6]</sup> empfohlenen.<sup>[\*]</sup> Der CAS verwendet die alphabetische Reihenfolge von links nach rechts.

Beispiele:

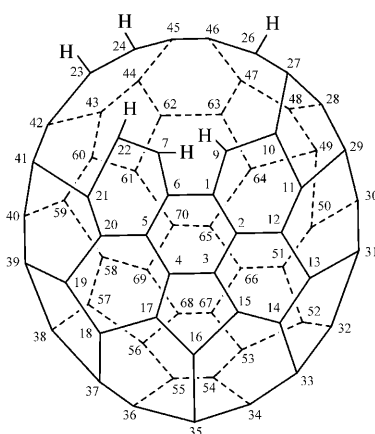


- 12: 2H-2,9-Cyclo-1-nor( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren  
 13: 6,7-Seco-1,2,9,12-tetranor( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

[\*] Der Text wurde gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.



14



15

14: 1aH,2aH-1,9-Seco-1(2)a,2(3)a-dihomo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

15: 22,23-Seco-8,25-dinor(C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren

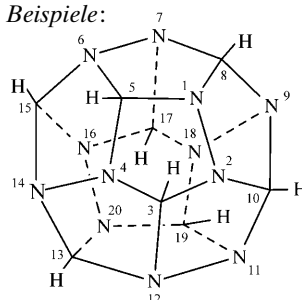
## Fu-5 Heterofullerene

### Fu-5.1 Austauschnomenklatur (a-Nomenklatur) für Fullerene

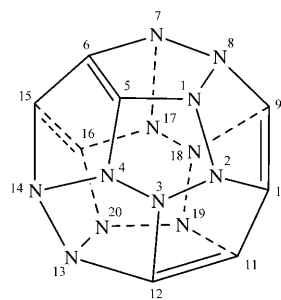
Ersetzt man Kohlenstoffatome eines Fulleren durch Heteroatome mit Standardbindungszahl oder durch Heteroatome, deren Bindungszahl mithilfe der  $\lambda$ -Konvention<sup>[7]</sup> angegeben wird, so stellt man bei der Namensbildung die entsprechenden Austauschpräfixe (a-Präfixe; Regel R-9.3 in Lit. [8]) vor den Namen des Fulleren.

Der Stammname lautet „Fulleren“, wenn die Struktur Doppelbindungen enthält. Falls keine Doppelbindungen enthalten oder möglich sind, lautet der Stammname „Fulleran“. Dies wird durch die Strukturen von Dodecaaza(C<sub>20</sub>-I<sub>h</sub>)[5]fulleran (16) und Dodecaaza(C<sub>20</sub>-I<sub>h</sub>)[5]fulleren (17) verdeutlicht.<sup>[\*]</sup> (In der Formel von 17 sind abweichend zur sonstigen Gepflogenheit in diesem Dokument die Doppelbindungen zur besseren Veranschaulichung eingezeichnet.)

Beispiele:



16



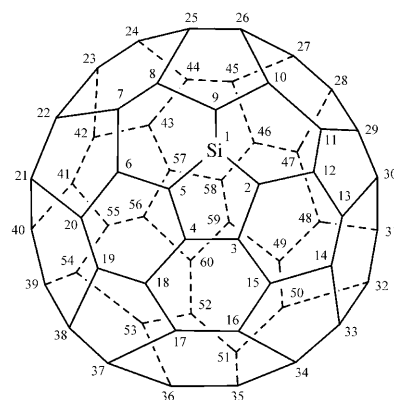
17

16: 1,2,4,6,7,9,11,12,14,16,18,20-Dodecaaza(C<sub>20</sub>-I<sub>h</sub>)[5]fulleran

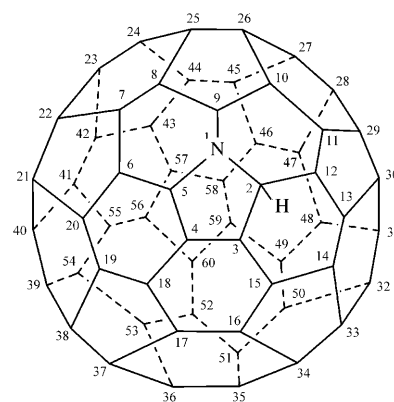
17: 1,2,3,4,7,8,13,14,17,18,19,20-Dodecaaza(C<sub>20</sub>-I<sub>h</sub>)[5]fulleren

Als Heteroatome kommen alle Elemente mit der möglichen Koordinationszahl 3 in Frage, Metalle und Halbmetalle inbegriffen; an keines der Heteroatome ist Wasserstoff gebunden. Alle Kohlenstoffatome eines Fulleren können durch das gleiche oder durch verschiedene Heteroatome ersetzt werden. Der Ersatz von Kohlenstoffatomen durch dreiwertige Heteroatome erfordert eventuell die Angabe von indiziertem Wasserstoff. (In den Formeln von 23 und 24 sind abweichend zur sonstigen Gepflogenheit in diesem Dokument die Doppelbindungen zur besseren Veranschaulichung eingezeichnet.)

Beispiele:



18



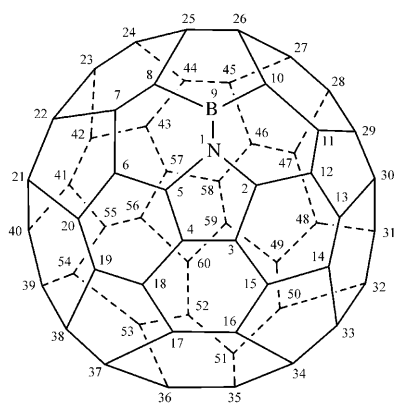
19

18: Sila(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

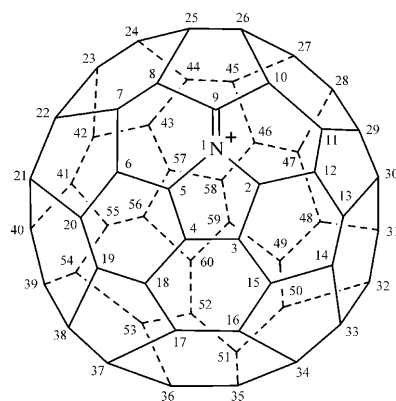
19: 2H-1-Aza(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

[\*] Dieser Abschnitt wurde gemäß Regel Fu-1.2 und Regel Fu-6.1 gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.

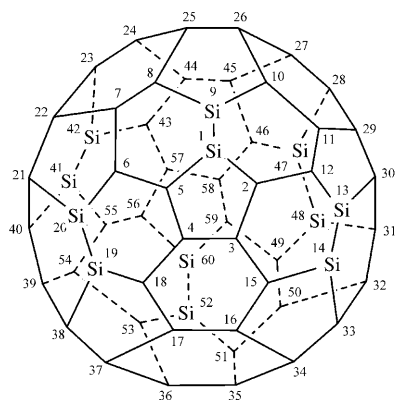




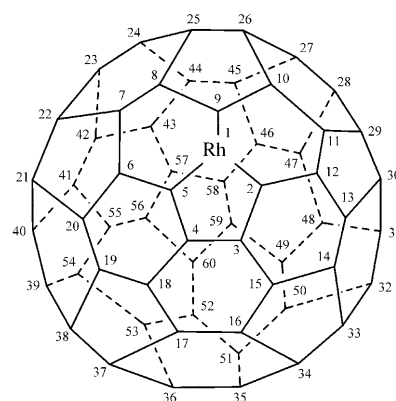
20



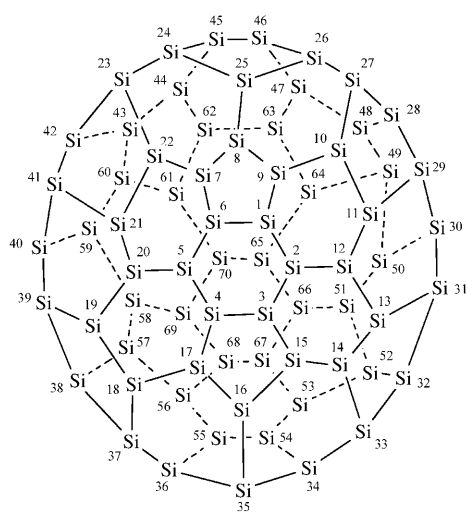
24



21



25



22

**20:** 1-Aza-9-bora( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

**21:** 1,9,13,14,19,20,41,42,47,48,52,60-Dodecasila( $C_{60}-I_h$ )-[5,6]fulleren

**22:** Heptacontasila( $C_{70}-D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren

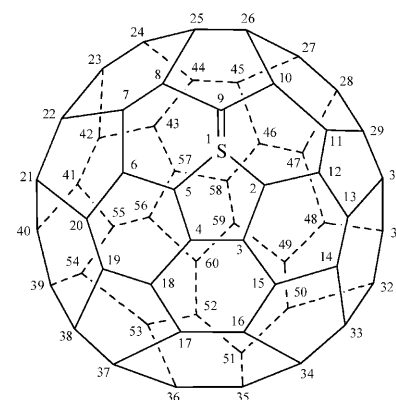
**23:**  $1\lambda^4$ -Thia( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

**24:** Azonia( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

**25:** Rhoda( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

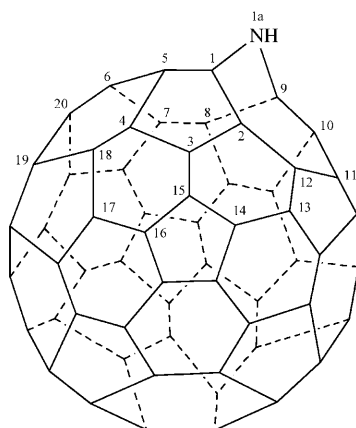
### Fu-5.2 Austauschnomenklatur (a-Nomenklatur) für strukturell modifizierte Fullerene

Wenn die Präfixe „Nor“, „Homo“, „Seco“ oder „Cyclo“ mit Austauschtermen wie „Aza“ oder „Oxa“ zusammentreffen, werden die Austauschpräfixe in der Reihenfolge abnehmenden Ranges der Heteroatome (Regel R-9.3 in Lit. [8]) und zwar vor den strukturmodifizierenden Präfixen genannt. Strukturmodifizierende Präfixe haben bezüglich niedrigster Lokanten Vorrang vor Austauschpräfixen.

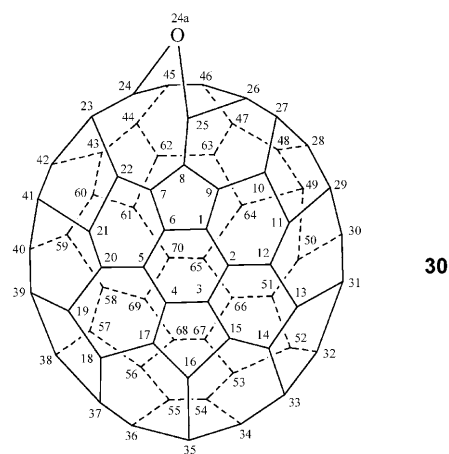


23

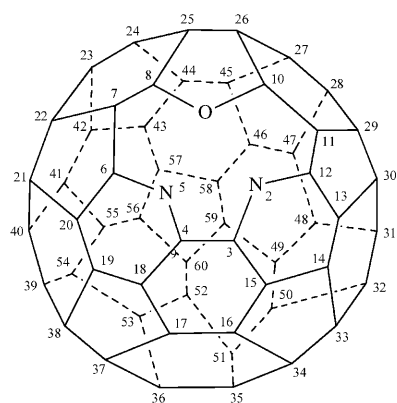
Beispiele:



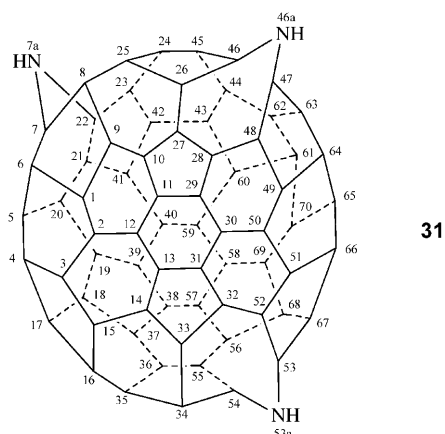
26



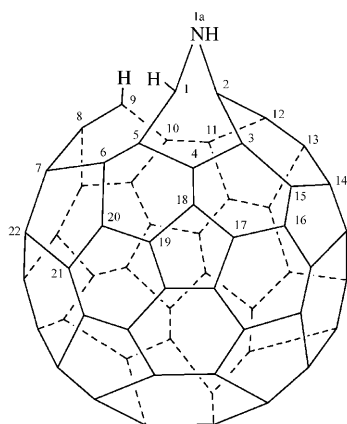
30



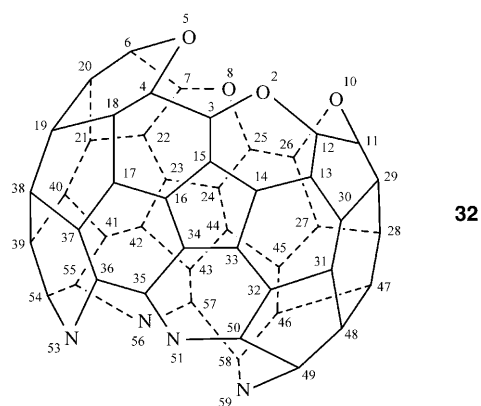
27



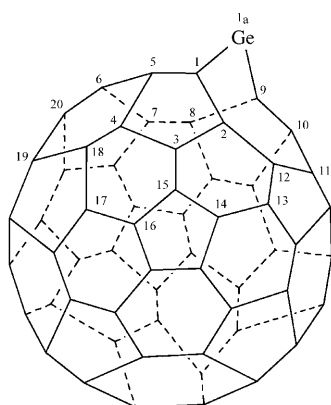
31



28



32



29

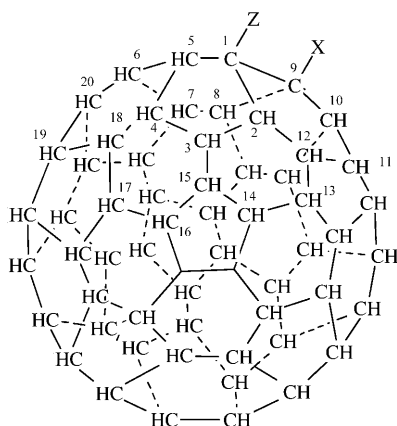
- 26: 1aH-1a-Aza-1(9)a-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren  
 27: 9-Oxa-2,5-diaza-1-nor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren  
 28: 1aH-1a-Aza-1,9-seco-1(2)a-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren  
 29: 1aλ<sup>2</sup>-Germa-1(9)a-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren  
 30: 24a-Oxa-24(25)a-homo(C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren  
 31: 7aH,46aH,53aH-7a,46a,53a-Triaza-7(22)a,46(47)a,53(54)a-trihomo(C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren  
 32: 2,5,8,10-Tetraoxa-51,53,56,59-tetraaza-1,9,52,60-tetranor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

## Fu-6 Fullerenderivate

### Fu-6.1 Fullerane

Fullerane sind vollständig gesättigte Fullerene (Summenformel  $C_nH_n$ ). Ihre Derivate, Radikale und Ionen können nach den Prinzipien der Substitutionsnomenklatur für gesättigte Kohlenwasserstoffe benannt werden.

Beispiele:



- 33 Z = •, X = H  
 34 Z = +, X = H  
 35 Z = •, X = +  
 36 Z = -, X = H  
 37 Z = •, X = -  
 38 Z = OH, X = H

- 33: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleran-1-yl  
 34: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleran-1-ylum  
 35: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleran-9-ylum-1-yl  
 36: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleran-1-id  
 37: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleran-9-id-1-yl  
 38: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleran-1-ol

### Fu-6.2 Fullerene

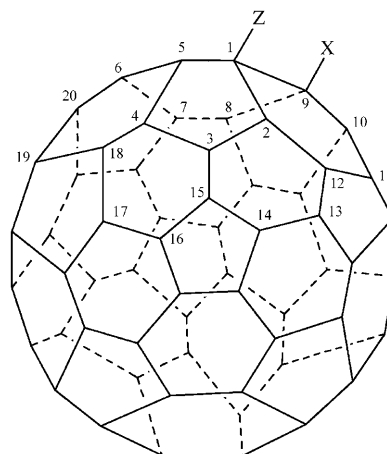
Im Gegensatz zu Fulleranen enthalten Fullerene keine direkt substituierbaren Wasserstoffatome. Deshalb werden ihre Derivate, Radikale und Ionen nach den gleichen Prinzipien der Substitutionsnomenklatur benannt wie polycyclische Ringsysteme, die an den Anellierungspositionen substituiert sind (z.B. an den Positionen 4a und 8a substituierte Naphthalinderivate). Dabei bedient man sich der in der Substitutionsnomenklatur üblichen Gruppennamen und Substituentenpräfixe.

*Anmerkung:* Das Fehlen substituierbarer Wasserstoffatome in Fullerenen führte in Lit. [1] zu der Schlussfolgerung, dass an Fullerene gebundene Atome und Atomgruppen als Addenden und nicht als Substituenten bezeichnet werden sollten. Dies hätte eine Anwendung der Prinzipien der additiven Nomenklatur zur Folge, was zu Namen wie Dibromo[60-I<sub>h</sub>]fulleren führen würde. Dabei tritt allerdings das Problem auf, dass sich solche Namen eigentlich aus der Koordinationsnomenklatur ergeben („Bromo“ ist der derzeitige Ligandename für „Br“), einem Nomenklaturverfahren, das nicht auf Kohlenstoffverbindungen angewendet werden darf. Die Additionsnomenklatur der organischen Chemie wiederum würde zu Namen wie [60-I<sub>h</sub>]Fullerendibromid (für C<sub>60</sub>Br<sub>2</sub>) führen, wurde aber wegen der Bevorzugung substi-

tutiver Namen für organische Verbindungen abgeschafft. Folglich ist der Gebrauch der Substitutionsnomenklatur die einzig akzeptable Lösung. Dabei werden Atome und Atomgruppen in Form von Präfixen genannt, die eine Substitution zuvor addierter und durch das Präfix „Hydro“ angezeigter Wasserstoffatome ausdrücken. Als Suffix genannte Gruppen erfordern die gleichzeitige Addition von Wasserstoffatomen, was durch „addierten Wasserstoff“ ausgedrückt wird. Auf diese Weise gelangt man zu Namen wie 1,9-Dibrom-1,9-dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren und (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1(9H)-ol,<sup>[\*]</sup> die völlig in Einklang mit den Prinzipien, Regeln und Konventionen der Substitutionsnomenklatur sind. Dieser Ansatz liefert ein einheitliches Verfahren zur Benennung von Fullerenen, bei denen Atome oder Atomgruppen mit Gerüst-Kohlenstoffatomen verknüpft sind, sowie für alle davon abgeleiteten Derivate.

Beispiele (Radikale, Ionen und Radikationen):

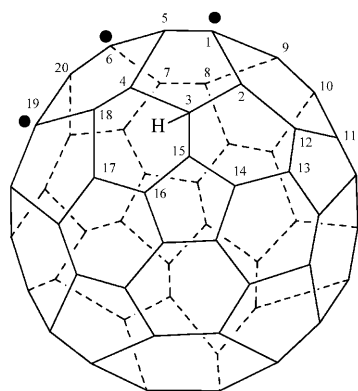
(Der bei den Verbindungen **41** und **43** für die Suffixe „-ylum“ bzw. „-id“ benötigte Wasserstoff entstammt dem durch das Suffix „-yl“ erforderlichen addierten Wasserstoff. Bei der Benennung von **44** wird kein addierter Wasserstoff benötigt, da durch die multiplen Suffixe einfach eine Doppelbindung entfernt wird (wie in „Naphthalin-4a,8a-diol“).)



- 39 Z = •, X = H  
 40 Z = +, X = H  
 41 Z = •, X = +  
 42 Z = -, X = H  
 43 Z = •, X = -  
 44 Z = •, X = •

- 39: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren-1(9H)-yl  
 (1,9-Dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1-yl)  
 40: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren-1(9H)-ylum  
 (1,9-Dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1-ylum)  
 41: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren-9-ylum-1(9H)-yl  
 (1,9-Dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-9-ylum-1-yl)  
 42: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren-1(9H)-id  
 (1,9-Dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1-id)  
 43: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren-9-id-1(9H)-yl  
 (1,9-Dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-9-id-1-yl)  
 44: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren-1,9-diyl  
 (1,9-Dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1,9-diyl)

[\*] Eine alternative Regel führt zum Namen 1,9-Dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1-ol. In den folgenden Beispielen sind die Alternativnamen in Klammern ergänzt.

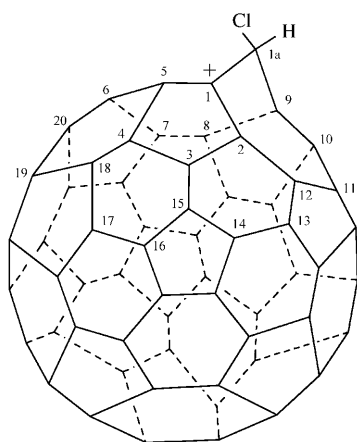


45

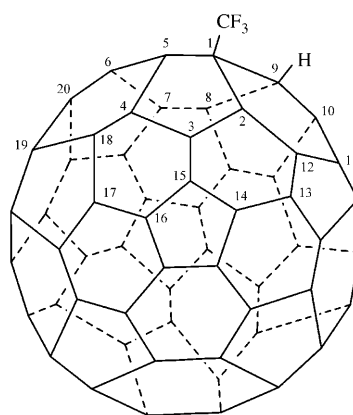
45: (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren-1,6,19(3H)-triyl  
(1,3,6,19-Tetrahydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1,6,19-triyl)

Beispiele (substituierte Derivate):

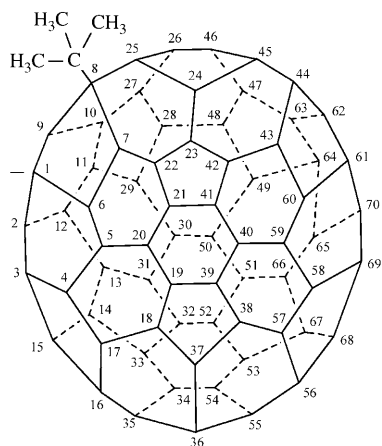
(Bei der Benennung von 48 ist zu beachten, dass Hydropräfixe als nicht abtrennbar behandelt werden.)



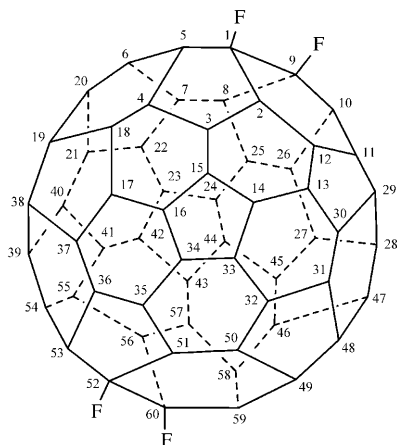
46



48



47



49

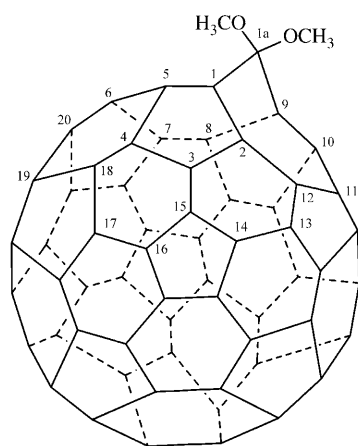
46: 1a-Chlor-1aH-1(9)a-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1(9H)-ylium (1a-Chlor-1a,9-dihydro-1H-1(9)a-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1-ylium)

47: 8-tert-Butyl(C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren-1(8H)-id  
(8-tert-Butyl-1,8-dihydro(C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren-1-id)<sup>[\*]</sup>

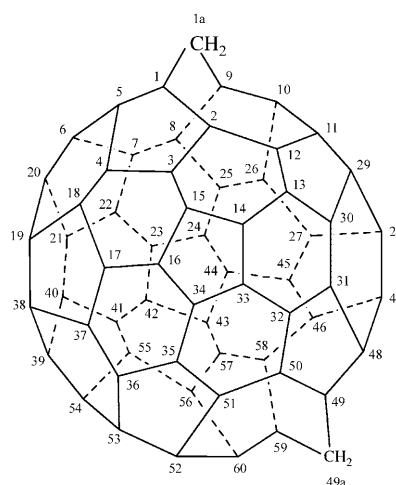
48: 1-(Trifluormethyl)-1,9-dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

49: 1,9,52,60-Tetrafluor-1,9,52,60-tetrahydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

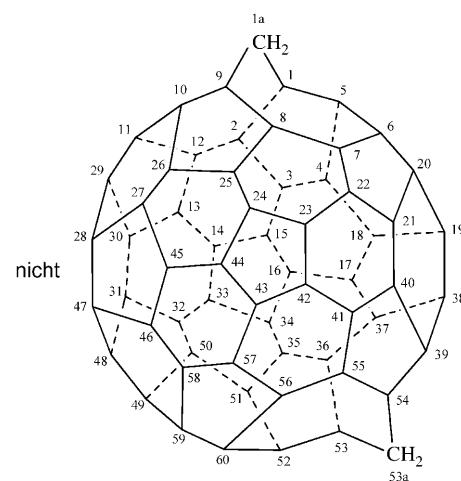
[\*] Der CA-Indexname ist 8-(1,1-dimethylethyl)-1,8-dihydro[5,6]fullerene-C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub> ion(1-).



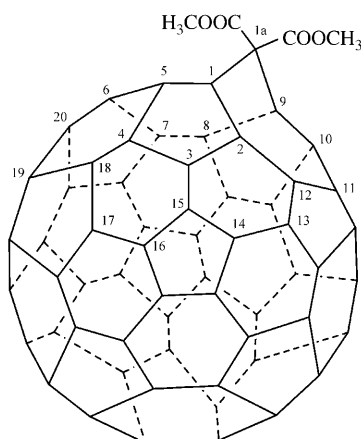
50



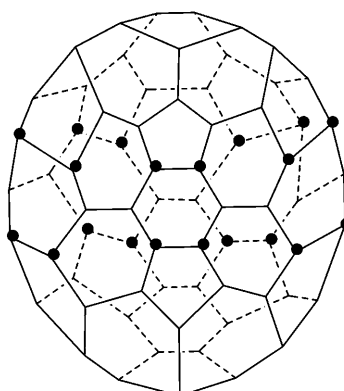
52a



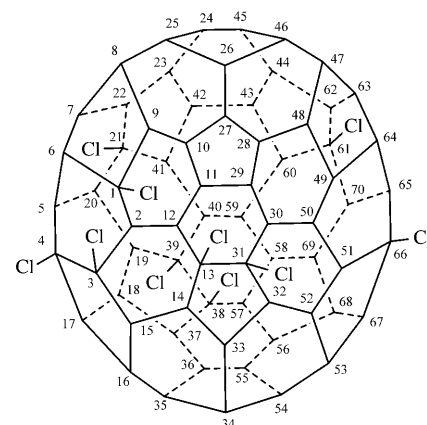
52b



51



53a



53b

korrekte Nummerierung

**50:** 1a,1a-Dimethoxy-1aH-1(9)a-homo( $C_{60}$ - $I_h$ )-[5,6]fulleren

**51:** Dimethyl-1aH-1(9)a-homo( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren-1a,1a-dicarboxylat

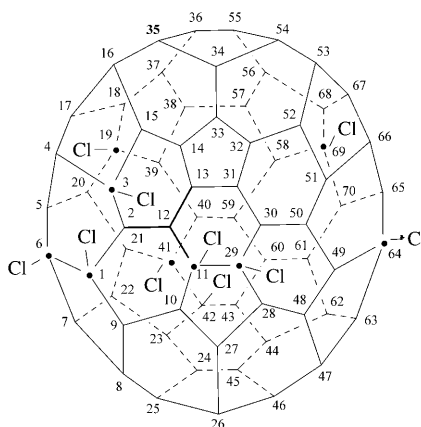
### Fu-6.3 Niedrigste Lokanten

Bei Derivaten der hoch symmetrischen Fullerene  $C_{60}$ - $I_h$  und  $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$  oder der entsprechenden Fullerane kann es zu Schwierigkeiten bei der Bestimmung der niedrigsten Lokanten kommen. Die Nummerierung der Atome von ( $C_{60}$ - $I_h$ )-[5,6]Fulleren kann an jedem beliebigen Atom beginnen und innerhalb des Fünfrings im Uhrzeigersinn oder entgegen dem Uhrzeigersinn fortgesetzt werden.

**Beispiel:**

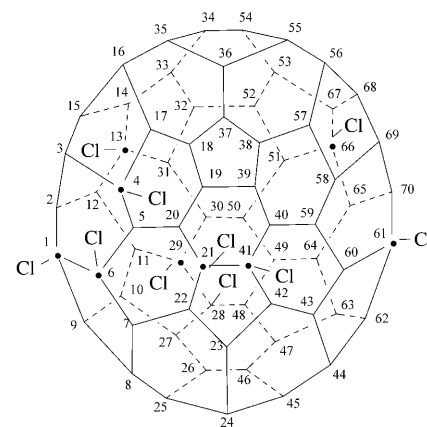
1aH,49aH-1(9)a,49(59)a-Dihomo( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren (**52a**) [nicht: 1aH,53aH-1(9)a,53(54)a-Dihomo( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren (**52b**) – der Lokantensatz 1,49 ist niedriger als 1,53<sup>[\*]</sup>]

Bei ( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]Fulleren kann die Bezifferung jeweils an vier Positionen der fünf senkrecht zu den  $C_2$ -Achsen angeordneten Sechsringe am Äquator der Fullerenstruktur



53c

falsche Nummerierung



53d

falsche Nummerierung

beginnen (siehe fette Punkte in **53a**), aber sie kann von jedem Punkt aus nur in eine Richtung fortgesetzt werden. Die korrekte Nummerierung für Verbindung **53** ist in **53b** gezeigt, während die Nummerierungen in **53c** und **53d** falsch sind:

1,3,4,13,21,31,38,39,61,66-Decachlor-1,3,4,13,21,31,38,39,61,66-decahydro( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren (**53b**) [nicht: 1,3,6,11,19,29,41,42,64,69-Decachlor-1,3,6,11,19,29,41,42,64,69-deca-

[\*] Die Erläuterung wurde gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.



hydro( $C_{70}-D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren (**53c**) – der Lokantensatz 1,3,4,... ist niedriger als 1,3,6,...; auch nicht: 1,4,6,13,21,28,29,41,61,66-Decachlor-1,4,6,13,21,28,29,41,61,66-decahydro( $C_{70}-D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren (**53d**) – der Lokantensatz 1,3,4,... ist niedriger als 1,4,6,...]

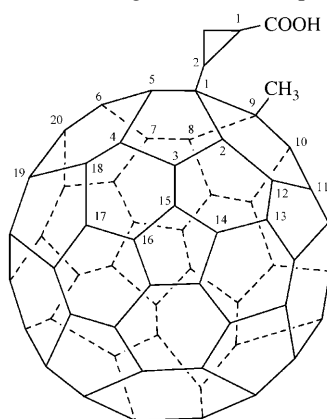
**Erklärung:** Bis auf eine Ausnahme fallen alle Chlorsubstituenten auf einen möglichen Anfangspunkt der Bezifferung von ( $C_{70}-D_{5h(6)}$ )[5,6]Fulleren (siehe **53a**). Aber nur in einem einzigen der entsprechenden Sechsringe sind drei Chlorsubstituenten vorhanden, was die niedrigsten Anfangslokanten liefert. Von den immer noch möglichen drei Anfangslokanten sind 1,3,4 niedriger als 1,3,6 oder 1,4,6.

## Fu-6.4 Fullerene und Fullerane als Substituenten

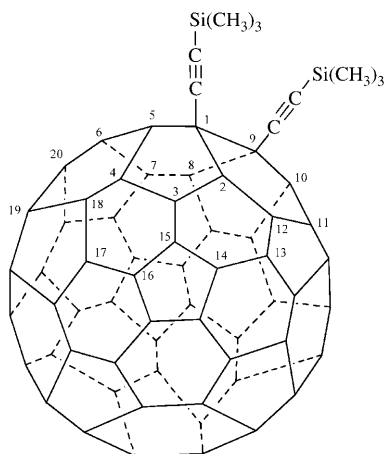
Wenn ein Fulleren Substituent einer höherrangigen Stammverbindung ist, wird der Name des entsprechenden (freien) Fullerenradikals (siehe Regel Fu-6.2; Fu-6.1 für Fulleranderivate) als Substituentenpräfix verwendet.

### Beispiele:

(Der erste Name von **55** ist ein nach dem derzeit von der IUPAC empfohlenen Verfahren, der zweite ein analog dem CA-Index-Verfahren gebildeter multiplikativer Name.)



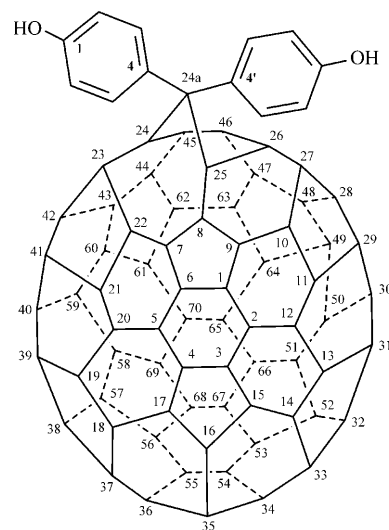
**54**



**55**

**54:** 2-[9-Methyl( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren-1(9*H*)-yl]cyclopropan-1-carbonsäure

**55:** Hexamethyl[( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren-1,9-diyl]diethin-2,1-diyl]bis(silan)\* oder [( $C_{60}-I_h$ )[5,6]Fulleren-1,9-diyl]diethin-2,1-diyl]bis(trimethylsilan)\*



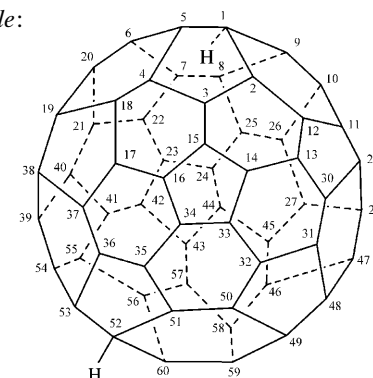
**56**

**56:** 4,4'-[24*aH*-24(25)*a*-Homo( $C_{70}-D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren-24*a*,24*a'*-diyl]diphenol

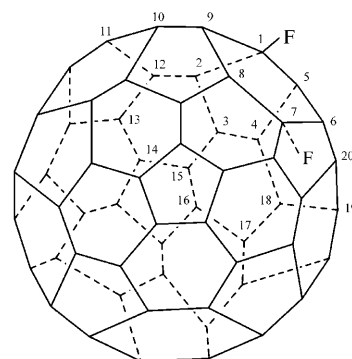
## Fu-6.5 endo-Substituierte Fullerene und Fullerane

Generell wird vorausgesetzt, dass alle Substituenten des Fullengerüsts nach außen gerichtet sind. Einige Substituenten sind jedoch klein genug, um ins Käfiginnere ragen zu können. Derartige Substituenten beschreibt man durch Anhängen der Bezeichnung „(endo)“ an den entsprechenden Lokanten.

### Beispiele:



**57**



**58**

**57:** 1(endo),52-Dihydro( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

**58:** 1,7(endo)-Difluor-1,7-dihydro( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

## Fu-7 Fullerene und modifizierte Fullerene, die an organische Ringe oder Ringsysteme anelliert sind

Fullerene, die zwei benachbarte Atome mit einem organischen Ring oder Ringsystem teilen, werden durch Anpassung und Erweiterung der Prinzipien der Anellierungs-nomenklatur<sup>[9]</sup> benannt. Wie bei anellierten Ringsystemen üblich wird das Atompaar, das dem Fulleren und dem organischen Ring oder Ringsystem angehört, als Teil beider Komponenten betrachtet. Doch anders als dort üblich behält jede Komponente ihr getrenntes Bindungssystem und ihre Bezifferung. Wegen der Bindungssituation in Fullerenen handelt es sich bei der gemeinsamen Bindung immer um eine Einfachbindung, und die Atome der Anellierungsstellen können auch nicht an „exo“-Doppelbindungen beteiligt sein. Nach der Anellierung haben Nicht-Fullerenkomponenten, die keine alicyclischen bi- oder polycyclischen Ringsysteme sind, die maximale Zahl nichtkumulierter Doppelbindungen, und indizierter Wasserstoff wird nach Bedarf angeführt. Dementsprechend kann der indizierte Wasserstoff in den Namen von **59** und **60** auch weggelassen werden.<sup>[\*]</sup>

**Anmerkung:** Wenn es sich bei der Nicht-Fullerenkomponente um einen einfachen Ring wie Cyclopropan oder Oxiren handelt, können die zusätzlichen Atome im Prinzip auch durch Bücken-Präfixe wie „Methano“ oder „Epoxy“ erfasst werden; aus Gründen der Einheitlichkeit wird jedoch empfohlen, alle derartigen Verbindungen als anellierte Systeme zu benennen. Beide Verfahren sind in Lit. [1] enthalten. Es ist offensichtlich, dass Brückennamen mit zunehmendem Komplexitätsgrad des angehängten organischen Rests unhandlicher werden. Das *Ring Systems Handbook* des CAS<sup>[10]</sup> enthält viele Beispiele von Fullerenen mit zwei daran anellierten organischen Ringen, die ihrerseits wiederum über eine Brücke verbunden sind. Zur Benennung überbrückter Fullere-ne siehe Regel Fu-8.

Organische Ringe und Ringsysteme einschließlich monocyclischer und aller polycyclischer Systeme mit Ausnahme spiroverknüpfter Ringsysteme werden immer als Präfixe zu den Namen von Fullerenen oder modifizierten Fullerenen benannt. Systeme, bei denen man von einer Anellierung eines Spirosystems mit einem Fulleren ausgehen könnte, behandelt man als Spirosysteme, in denen modifizierte Fullerene oder anellierte Fulleren-systeme mit anderen Komponenten spiroverknüpft sind (siehe Regel Fu-9). Jedes System behält seinen Namen und seine Bezifferung, und zwar für die Angabe der Anellierungs- wie der Substituentenpositionen. Die Lokanten, die sich auf das Fulleren beziehen, sind dabei immer ungestrichen und die der anellierten organischen Ringe erhalten Striche in der im Folgenden angegebenen Reihenfolge. Bei der Beschreibung der Anellierung folgen auf die gestrichenen Lokanten für die organische Ringkomponente die ungestrichenen Lokanten für das Fulleren; die beiden Lokantensätze werden durch einen Doppelpunkt getrennt, und der ganze Ausdruck wird in eckige Klammern eingeschlossen. Die Lokanten monocyclischer Kohlenwasserstoffkomponenten werden üblicherweise weggelassen.

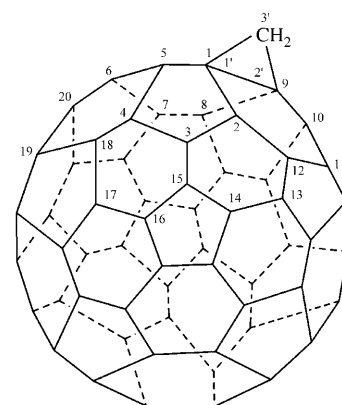
[\*] Dieser Satz wurde gegenüber der englischen Druckausgabe ergänzt.

**Anmerkung:** In den Chemical Abstracts wird, wenn ein heterocyclisches System eine Heteroatomkomponente enthält, deren Rang höher als der des Fulleren ist, der Name des Fulleren als Anelland vor den Namen des heterocyclischen Systems gestellt.<sup>[3]</sup> So wird eine Fullerenkomponente ohne Heteroatome jedem beliebigen Heterocyclus, aber eine stickstoffhaltige Heterocycluskomponente einer stickstoffhaltigen Fullerenkomponente vorangestellt. Dieses Verfahren wurde in Anlehnung an die sonst übliche Anellierungs-nomenklatur gewählt, bei der Heterocyclus als Basiskomponenten Vorrang haben. Ist der Heterocyclus ein Monocyclus, ein anelliertes Ringsystem, das bei der gewöhnlichen Nomenklatur anellierter Systeme als Basiskomponente dient, oder ein überbrücktes heterocyclisches System, dann beschreibt man die Anellierung durch Angabe der ungestrichenen Lokanten der Fullerenkomponente und nachfolgend des Buchstabenlokan-ten der Anellierungsseite des Heterocyclus. Ist der Heterocyclus hingegen ein anelliertes Ringsystem, ein überbrücktes anelliertes System, das nicht als Basiskomponente dient, oder ein überbrückter, nicht anellierter Heterocyclus, dann erhält die Fullerenkomponente gestrichene Anellierungslokan-ten und der Heterocyclus ungestrichene. Dieser Fall führt zu der verwirrenden Situation, dass unterschiedliche Lokanten für Anellierungsstellen und Substituenten verwendet werden: letztere sind für die Fullerenkomponente ungestrichen und für die Nicht-Fullerenkomponente gestrichen. Diese Vorgehensweise wird mit der Regel begründet, dass sich von eckigen Klammern eingeschlossene Lokanten in Namen anellierter Ringsysteme auf die Komponenten und nicht auf das Gesamtsystem beziehen. Fungiert das Fulleren immer als Basiskomponente, so kommt es nicht zu dieser Verwirrung. Bei der gewöhnlichen Anellierungs-nomenklatur wird das anellierte Gesamtsystem neu beziffert, so dass dort keine Verwechslung möglich ist.

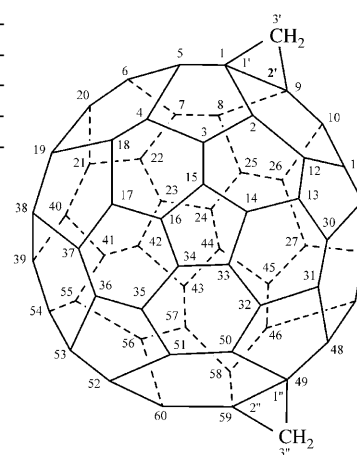
### Beispiele:

**59:** 3'*H*-Cyclopropa[1,9]-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup>

**60:** 3'*H*,3''*H*-Dicyclopropa[1,9:49,59](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup>

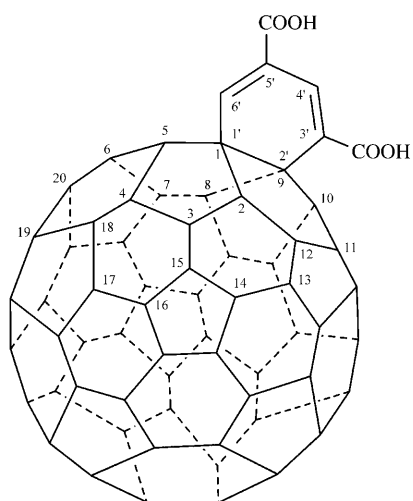


**59**

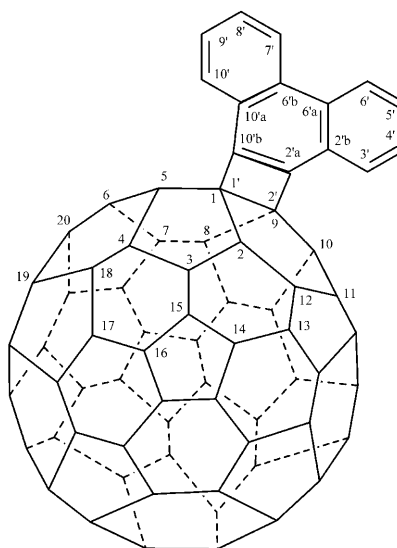


**60**

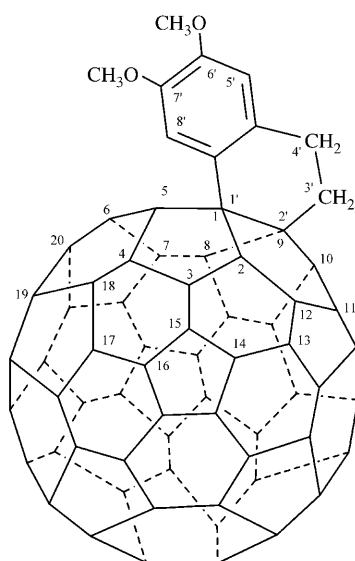
[\*] Da hier keine Mehrdeutigkeit möglich ist, kann auf die Angabe indizierten Wasserstoffs verzichtet werden, was zu den Alternativnamen Cyclopropa[1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren für **59** und Dicyclopropa[1,9:49,59](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren für **60** führt.



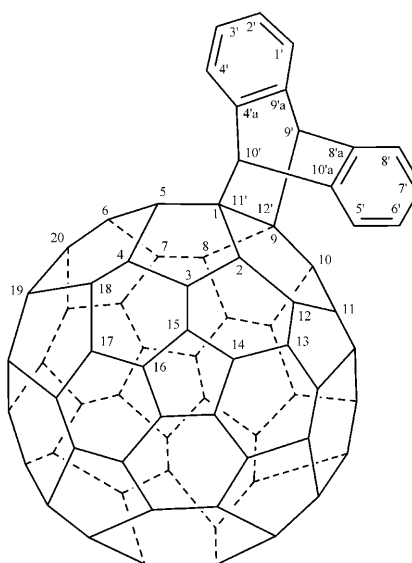
61



63



62



64

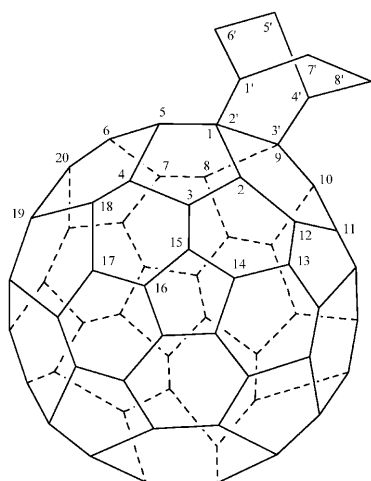
**61:** Benzo[1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-3',5'-dicarbonsäure

**62:** 6',7'-Dimethoxy-3',4'-dihydronaphtho[1',2':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren (siehe Anmerkung zu **48**)

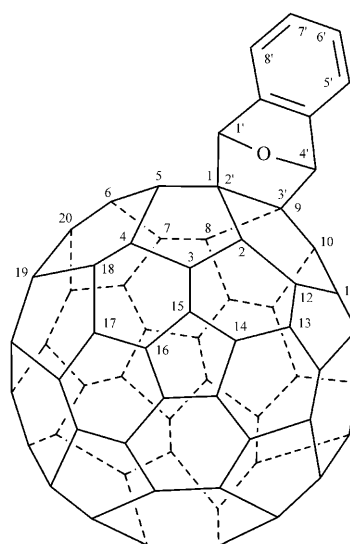
**63:** (Cyclobuta[1]phenanthro)[1',2':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\*

**64:** 9',10'-Dihydro[9,10]ethanoanthra[11',12':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren<sup>\*,[\*]</sup>

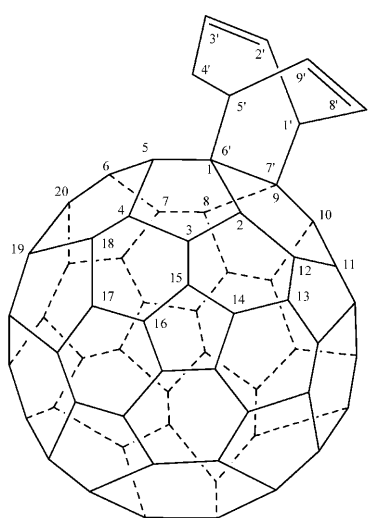
[\*] Durch das Einfügen der runden Klammern um den Namen des zusammengesetzten (überbrückten) Anellanden (9,10-ethanoanthra) wären die Klammern um die Lokanten für die Brücke nicht erforderlich. In einigen Fällen würden sie sogar zur Verwirrung führen, z. B. bei **112**.



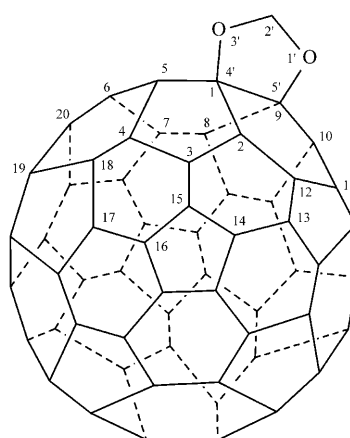
65



67



66



68

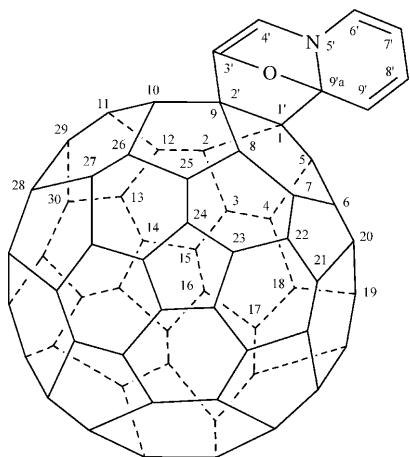
**65:** Bicyclo[2.2.2]octano[2',3':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

**66:** Bicyclo[3.2.2]nona[2,8]dieno[6',7':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren [nicht: Bicyclo[3.2.2]nona[2,6]dieno[8',9':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren; es gibt eine Wahlmöglichkeit bei der Nummerierung, und die Anellierungsstelle hat Vorrang bezüglich niedrigster Lokanten]

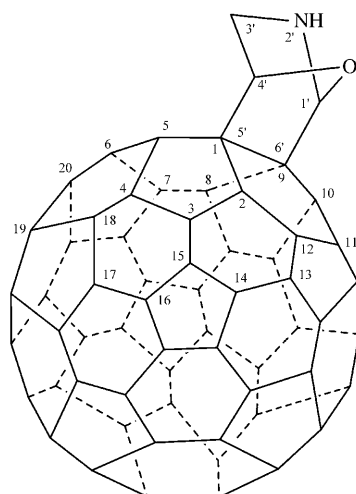
**67:** 1',4'-Dihydro([1,4]epoxynaphtho)[2',3':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren\* (siehe Fußnote zu **64**)

**68:** [1,3]Dioxolo[4',5':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren[\*]

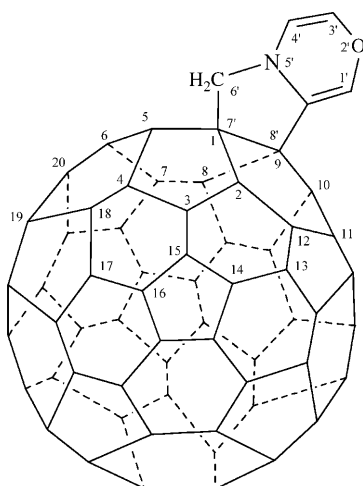
[\*] Der CA-Indexname ist [5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[1,9-d][1,3]dioxole.



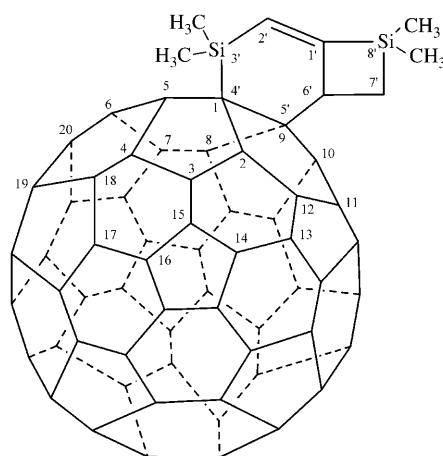
69



71



70



72

**69:** ([3,9a]Epoxyquinolizino)[1',2':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\*[\*]

**70:** 6'H-(Pyrrolo[2,1-c][1,4]oxazino)[7',8':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\*[\*]

**71:** ([7]Oxa[2]azabicyclo[2.2.1]heptano)[5',6':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\*[\*]

**72:** 3',3',8',8'-Tetramethyl[3,8]disilabicyclo[4.2.0]oct[1]eno-[4',5':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\*[\*]

Wenn zwei oder mehr *gleiche* Nicht-Fullerenkomponenten an ein Fulleren anelliert sind, erhalten die Lokanten, die sich auf die Nicht-Fullerenkomponente beziehen, Striche und zwar nach steigendem Wert der niedrigsten Anellierungslokanten der Fullerenkomponente. Wenn es sich um *verschiedene* Nicht-Fullerenkomponenten handelt, erhalten die Lokanten, die sich auf die Nicht-Fullerenkomponente beziehen, Striche, und zwar gemäß der alphabetischen Auflistung der Anellierungspräfixe im Namen von links nach rechts und unter Berücksichtigung der Regeln für das Benennen anellierter Fullerenverbindungen mit mehreren gleichen Nicht-Fullerenkomponenten.

[\*] Der CA-Indexname ist [5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[1',9-a][3,9a]epoxy[9aH]-quinolizine. Außerdem gilt das bei **64** Angemerkt.

[\*\*] Der CA-Indexname ist [5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[1',9':7,8]pyrrolo[2,1-c]-[1,4]oxazine.

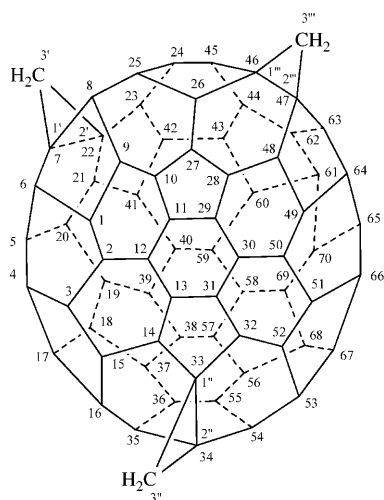
[\*] Der CA-Indexname ist [5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[1',9':5,6][7]oxa[2]azabicyclo[2.2.1]heptane. Außerdem gilt das bei **64** Angemerkt.

[\*\*] Der CA-Indexname ist 3',3',8',8'-tetramethyl[5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[1',9':4,5][3,8]disilabicyclo[4.2.0]oct-1-ene. Außerdem gilt das bei **64** Angemerkt.

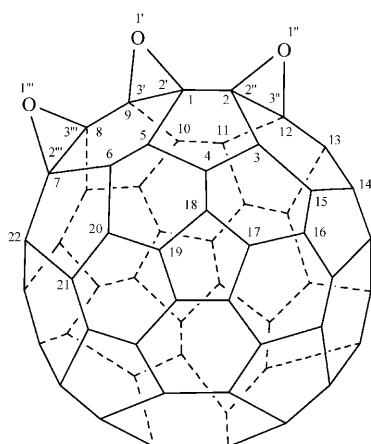


**Anmerkungen:** 1) Wie in den Beispielen **77** und **78** gezeigt, werden die Anellierungslokanten des Fulleren durch den niedrigsten Lokantensatz bezüglich aller Anellierungspositionen festgelegt. Dazu werden mögliche Lokantensätze – jeweils in aufsteigender Reihenfolge der Lokanten geordnet – Ausdruck um Ausdruck verglichen; der niedrigste Lokantensatz ist derjenige mit dem niedrigsten Lokanten an der Stelle des ersten Unterschieds. 2) Die Zuteilung der Anellierungslokanten des Fulleren erfolgt nicht nach dem Prinzip niedrigster Lokanten für die im Namen zuerst erwähnten Nicht-Fullerenkomponenten.

**Beispiele:**



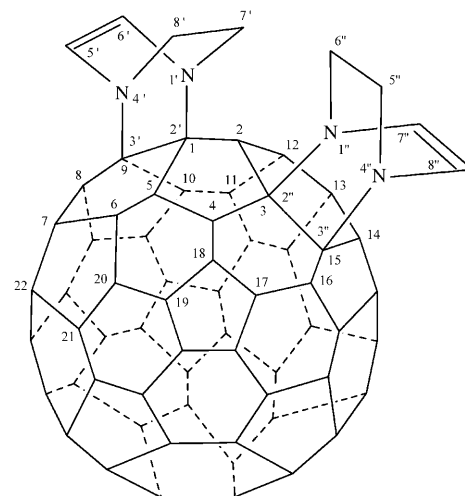
**73**



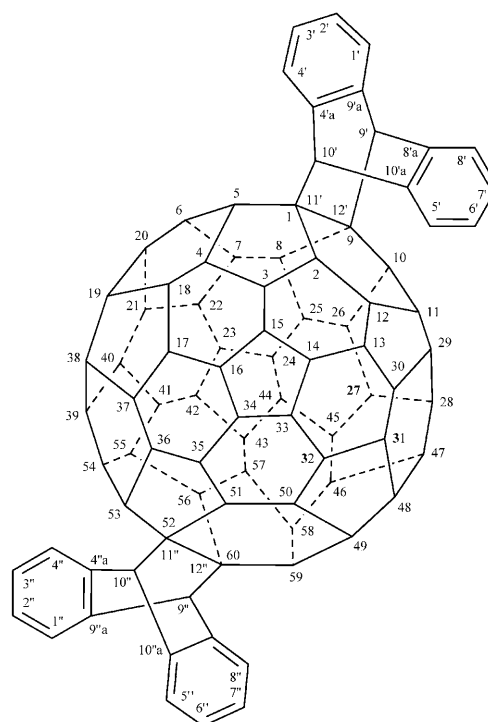
**74**

**73:** 3'*H*,3''*H*,3'''*H*-Tricyclopropa[7,22:33,34:46,47](C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)-[5,6]fulleren (siehe Fußnote zu **59** und **60**)

**74:** Trisoxireno[2',3':1,9;2'',3'':2,12;2''',3''':7,8](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup>



**75**



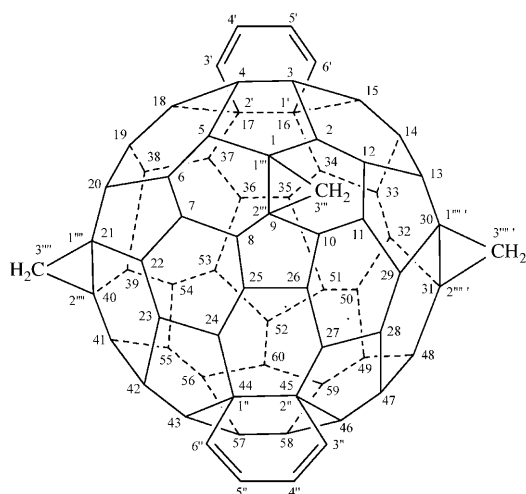
**76**

**75:** Bis([1,4]diazabicyclo[2.2.2]oct[5]eno)[2',3':1,9;2'',3'':3,15]-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup>

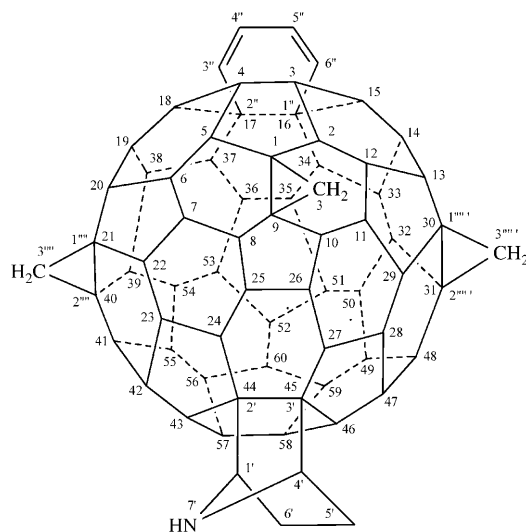
**76:** 9',9'',10',10''-Tetrahydrobis([9,10]ethanoanthra)[11',12':1,9;11'',12'':52,60](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren<sup>\*</sup> (siehe Fußnote zu **64**)

[\*] Gewöhnlich folgen auf das numerische Präfix „Tris“ runde Klammern, siehe **108**. Der – gegenüber der englischen Druckausgabe korrigierte – CA-Indexname für **74** ist [5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[1,9-*b*:2,12-*b'*:7,8-*b''*]trisoxirene.

[\*] Der CA-Indexname ist [5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[1'',9'':2,3;3'',15'':2',3']bis-[1,4]diazabicyclo[2.2.2]oct[5]ene. Außerdem gilt das bei **64** Anmerkungen.



77



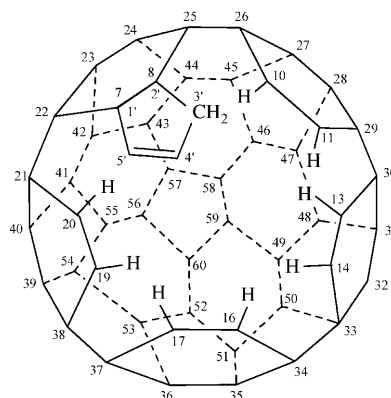
78

**77:** 3'''H,3'''H,3'''H-Dibenzo[16,17:44,45]tricyclopropa-[1,9:21,40:30,31](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren (siehe Fußnote zu **59** und **60**)<sup>[\*]</sup>

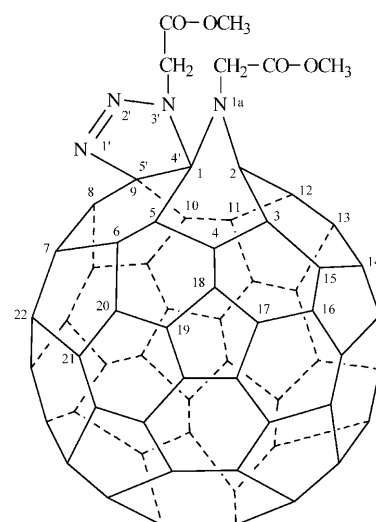
**78:** 3'''H,3'''H,3'''H-([7]Azabicyclo[2.2.1]heptano)-[2',3':44,45]benzo[16,17]tricyclopropa[1,9:21,40:30,31](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\* (siehe Fußnoten zu **59/60** und **64**)<sup>[\*\*]</sup>

Die für Fullerene beschriebenen Anellierungsprinzipien sind in vollem Umfang auf modifizierte Fullerene anwendbar.

Beispiele:



79



80

**79:** 3'H-Cyclopenta[7,8]-1,2,3,4,5,6,9,12,15,18-decanor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

**80:** Dimethyl-2,2'-[1aH,3'H-[1,2,3]triazolo[4',5':1,9]-1a-aza-1(2)a-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1a,3'-diyl]diacetat oder: Dimethyl-1aH,3'H-[1,2,3]triazolo[4',5':1,9]-1a-aza-1(2)a-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1a,3'-diacetat (konjunk-tiver Name)<sup>[\*]</sup>

## Fu-8 Überbrückte Fullereene

Brücken zwischen nicht benachbarten Atomen eines Fulleren oder eines modifizierten Fulleren werden nach

[\*] In der Nomenklatur der Spiroverbindungen<sup>[1]</sup> wurde festgelegt, dass ein Zwischenraum nach je vier Strichen an Lokanten folgt (Regel SP-6.4).

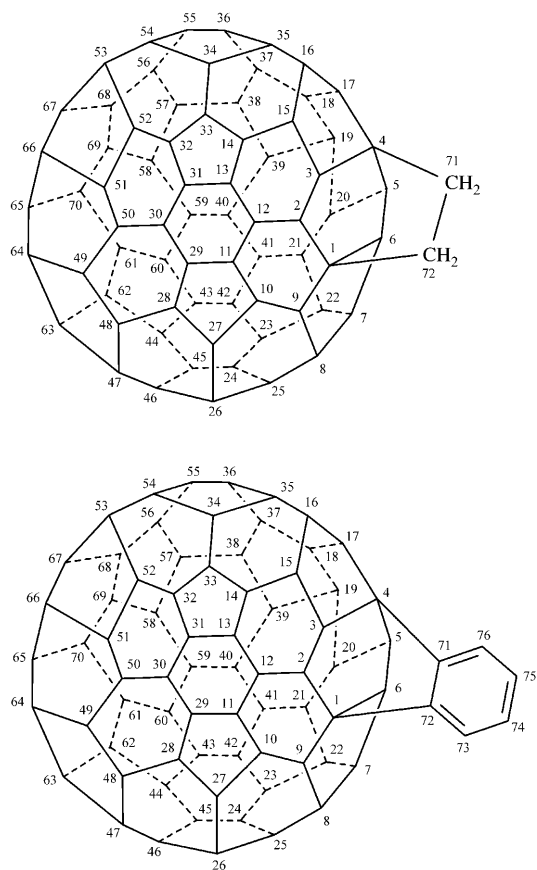
[\*\*] Der – gegenüber der englischen Druckausgabe korrigierte – CA-Indexname ist 3'''H,3'''H,3'''H-benzo[16',17']tricyclopropa[1',9':21',40':30',31']-[5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[44',45':2,3][7]azabicyclo[2.2.1]heptane.

[\*] Der erste Name ist eindeutig zu bevorzugen, da er gemäß der von der IUPAC bevorzugten Substitutionsnomenklatur gebildet ist. Der – gegenüber der englischen Druckausgabe korrigierte – CA-Name für **80** ist dimethyl 3'H-[1,2,3]triazolo[4',5':1,9]-2a-aza-1,2(2a)-homo-[5,6]fullerene-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-2a,3'-diacetate.

den üblichen Regeln für überbrückte anellierte Ringsysteme<sup>[9]</sup> benannt und beziffert. Die Nummerierung der Brückenatome beginnt am Nachbaratom eines möglichst hoch nummerierten Fullerenatoms, und zwar mit der Nummer, die auf die höchste Nummer im bereits bezifferten Fulleren folgt. Für Brücken zwischen einem Ring, der mit einem Fulleren anelliert ist, und dem Stamfulleren oder für Brücken zwischen zwei verschiedenen Ringen, die mit dem gleichen

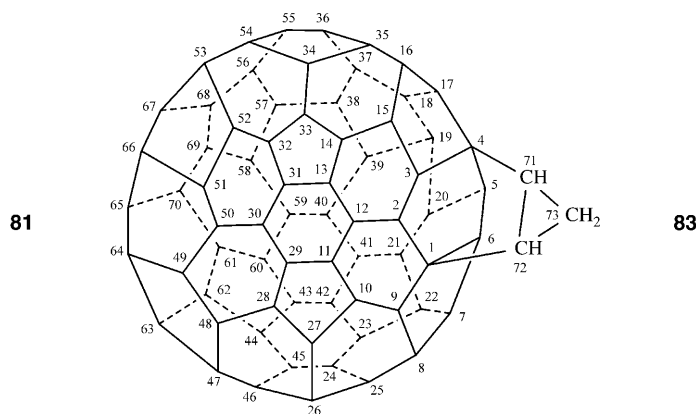
Fulleren anelliert sind, verwendet man die gebräuchlichen Brücken-Präfixnamen. Im letztgenannten Fall beginnen die Aufzählung der Brückenkomponenten und die Bezifferung mit dem Brückenatom, das an die anellierte Komponente mit den niedrigstgestrichenen Nummern (niedrigstmögliche Nummer) gebunden ist. Es erhält die auf die höchste Nummer in dieser Anellierungskomponente folgende gestrichene Nummer.

Beispiele:

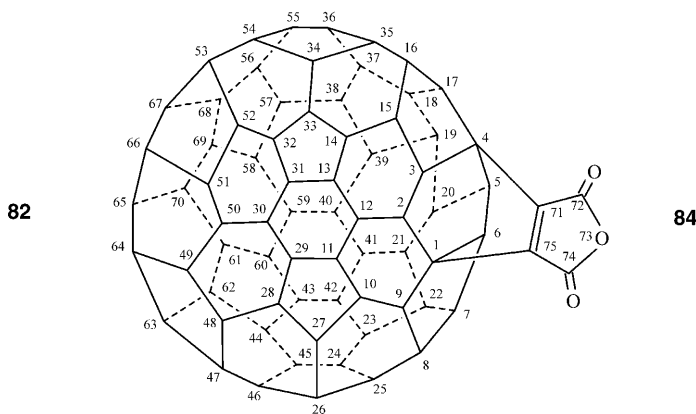


**81:** 1,4-Ethano( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren

**82:** 1,4-[1,2]Benzeno( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup>



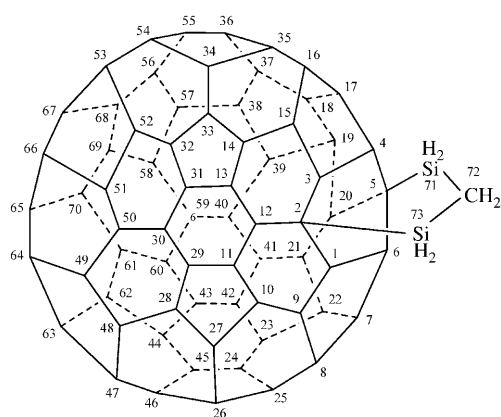
**83:** 72,73-Dihydro-71H-1,4-epicyclopropa( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup>



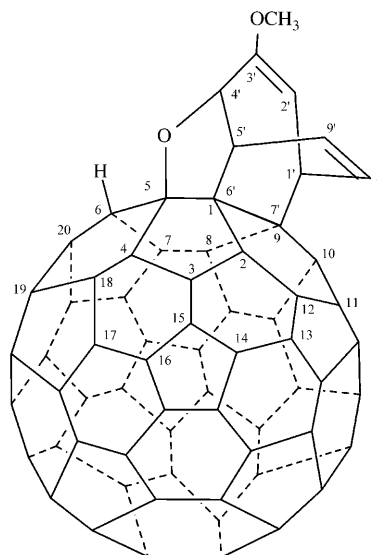
**84:** 1,4-[3,4]Furano( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren-72,74-dion (72,74-Dihydro-1,4-[3,4]furano( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren-72,74-dion)<sup>[\*]</sup>

[\*] Der CA-Indexname ist 1,4[1',2']-benzeno[5,6]fullerene- $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ .

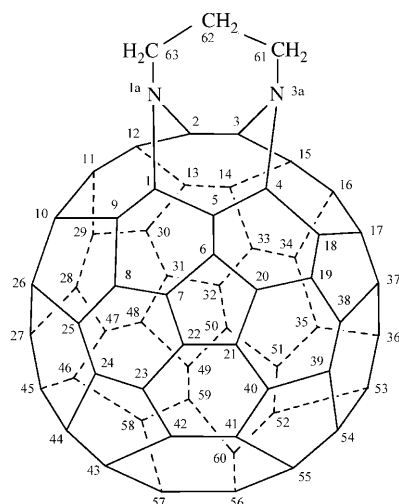
[\*] Der CA-Indexname von **83** ist 72,73-dihydro-71H-1,4-endo-cyclopropa[5,6]fullerene- $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ , und der CA-Indexname von **84** ist 1,4[3',4']-furano[5,6]fullerene- $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ -72,74-dione.



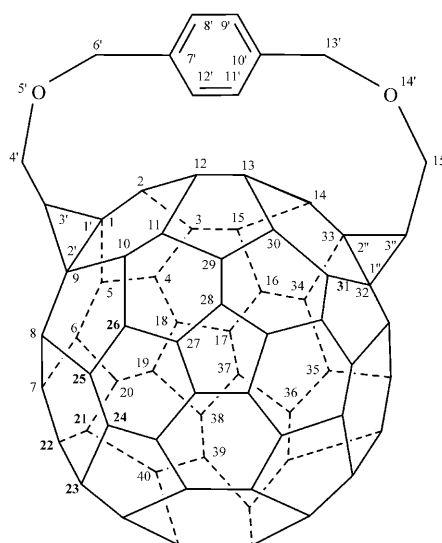
85



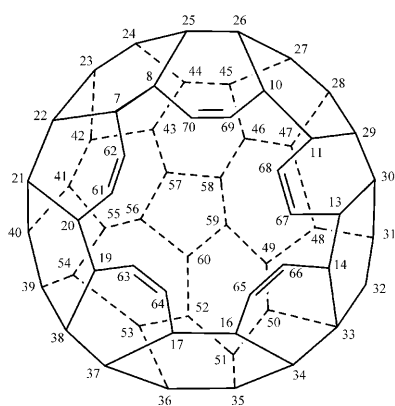
89



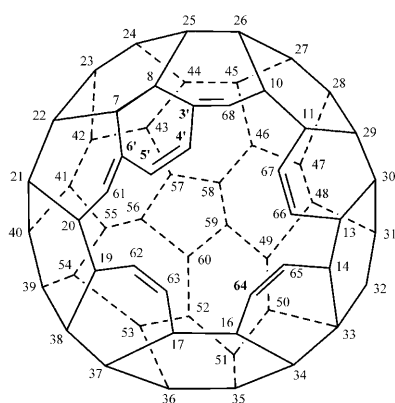
86



90



87



88

**85:** 2,5-(Silanomethanosilano)(C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren

**86:** 1a,3a-Propano-1a,3a-diaza-1(2)a,3(4)a-dihomo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup>

**87:** 7,20:8,10:11,13:14,16:17,19-Pentaetheno-1,2,3,4,5,6,9,12,15,18-decanor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren (siehe Anmerkung zu **17**)

**88:** 11,13:14,16:17,19-Trietheno-3',10:6',20-dimethenobenzo[7,8]-1,2,3,4,5,6,9,12,15,18-decanor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren (siehe Anmerkung zu **17**)<sup>[\*\*]</sup>

**89:** 3'-Methoxy-6H-4',5'-epoxybicyclo[3.2.2]nona[2,8]dieno-[6',7':1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

**90:** 3'H,3''H-3',3''-(Methanooxymethano[1,4]benzenomethanooxymethano)dicyclopropa[1,9:32,33](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren<sup>[\*\*\*]</sup>

[\*] Der CA-Indexname ist 3a,5a-propano-3a,5a-diaza-1,5(5a):2,3(3a)-dihomo[5,6]fullerene-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>.

[\*\*] Der derzeitige CA-Indexname ist 6,7(7a):8,9(9a):11,12(12a):14,15(15a):17,18(18a)-pentahomo-1,2,3-trinor[5,6]fullerene-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>.

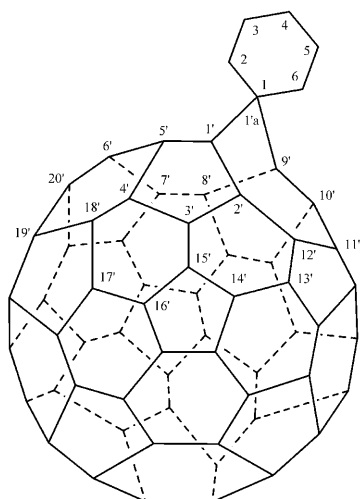
[\*\*\*] Der Name wurde gemäß der Regel FR-9.1<sup>[9]</sup> gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert. Ein alternativer Name kann gemäß der Phannomenklatur<sup>[12,19]</sup> gebildet werden: 1<sup>3'</sup>H,1<sup>3''</sup>H-3,7-Dioxa-1(3',3'')-dicyclopropa[1,9:32,33](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullerena-5(1,4)-benzenacyclooctaphan. Siehe auch die Fußnote zu **59/60**.

## Fu-9 Spirofullerene

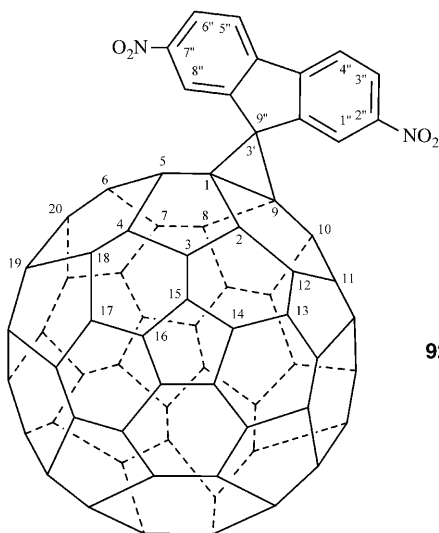
Fullerene können selbst keine Spiroverbindungen bilden und, wie in Regel Fu-7 erwähnt, dürfen Spirosysteme *nicht* als Anellierungskomponenten von Fullerenen behandelt werden.

Spirofullerene, die von Homofullerenen oder Fullerenen, die mit organischen Ringen anelliert sind, gebildet werden, werden nach den üblichen Regeln für organische Spiroverbindungen mit mindestens einem polycyclischen Ringsystem benannt.<sup>[11]</sup> Spirofulleren-Stammverbindungen haben nicht notwendigerweise ungestrichene Lokanten für ein Spiroatom.

Beispiele:

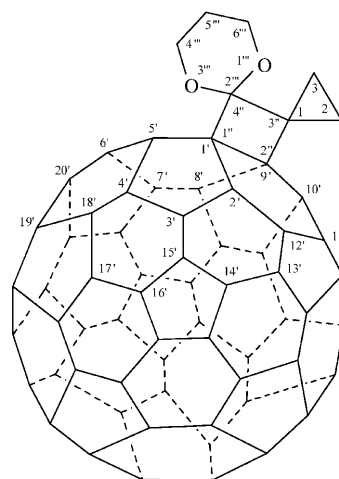


91

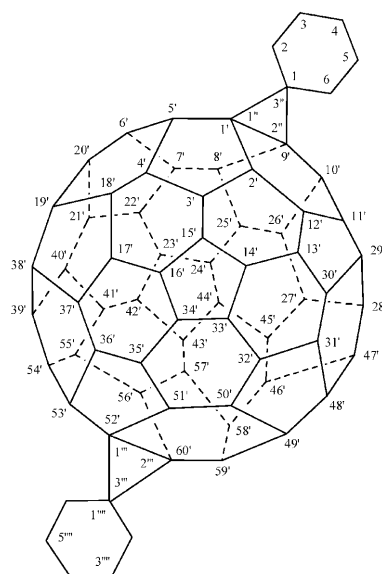


92

- 91: Spiro[cyclohexan-1,1'a-[1(9)a]homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren]  
92: 2'',7''-Dinitrospiro[cyclopropa[1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-3',9'-fluoren]



93



94

- 93: Dispiro[cyclopropan-1,3''-cyclobuta[1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-4'',2'''-[1,3]dioxan]  
94: Dispiro[cyclohexan-1,3''-dicyclopropa[1,9:52,60](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren-3''',1''''-cyclohexan\* (siehe Fußnote zu 77)

## Fu-10 Fullerenstrukturen mit zwei Fullerenkomponenten

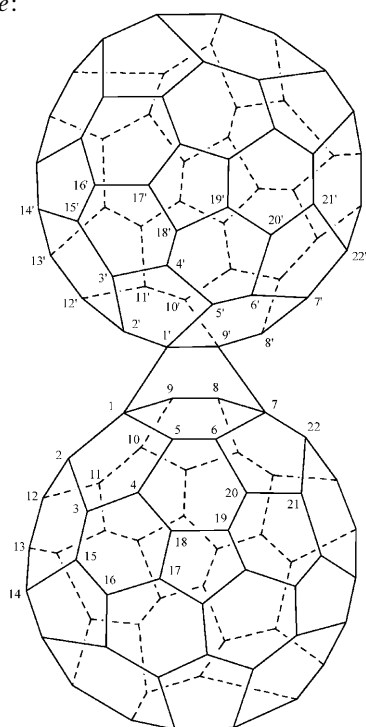
Fullerene und/oder Fulleroide können in mannigfacher Weise zu sehr großen Strukturen verknüpft werden, die durch Erweitern, Anpassen oder Abändern gängiger Prinzipien der organischen Nomenklatur benannt werden können.

### Fu-10.1 Überbrückte und anellierte Verbindungen mit zwei Fullerenkomponenten

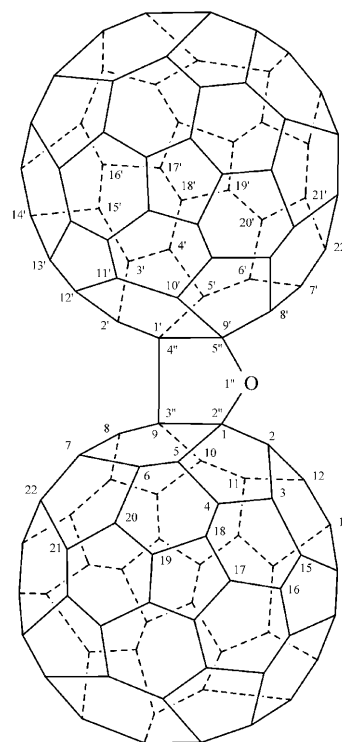
Bei solchen Strukturen kann man annehmen, dass ein Fullerene das andere überbrückt, mit dem anderen über eine Nicht-Fulleren-Anellierungskomponente verbunden ist oder Teil einer Anellierungskomponente ist.



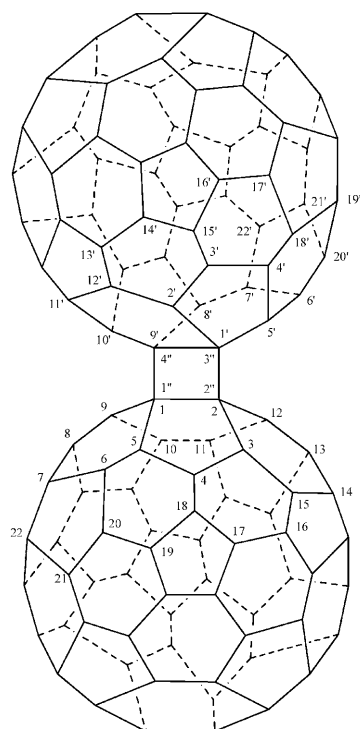
Beispiele:



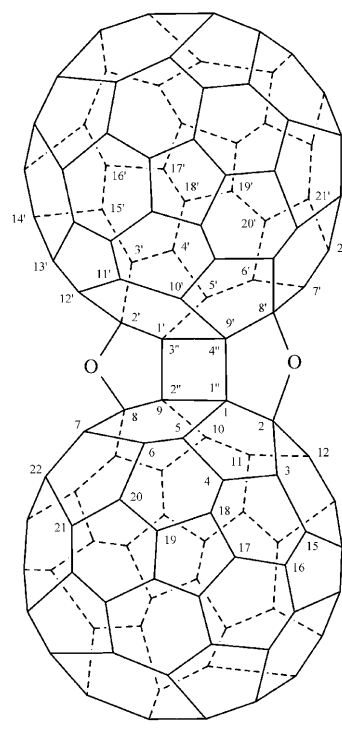
95



97



96

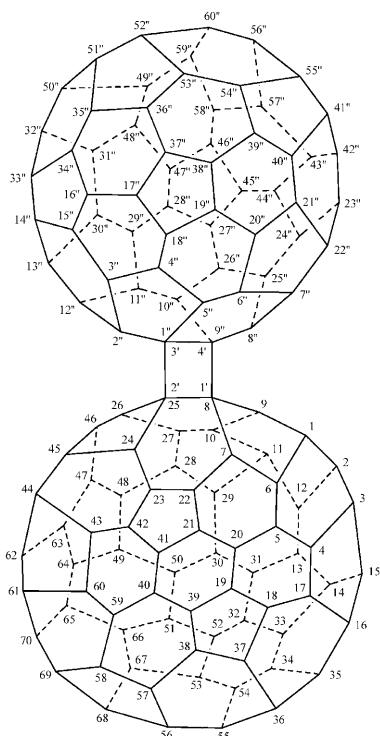


98

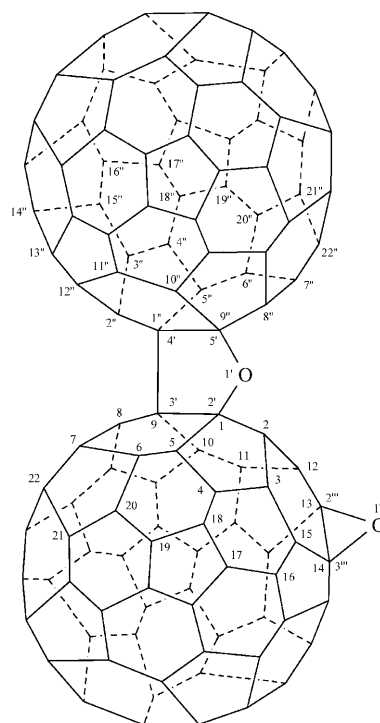
- 95:** 1,7-([1,9]Epi(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullereno)(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren  
[ein (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren überbrückt ein anderes (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-  
[5,6]Fulleren] (Ein überbrückendes Fulleren wird nicht  
neu nummeriert, deshalb erhalten die Nummern seiner  
Atome Striche [Fußnote gg des englischen Originals].)
- 96:** Cyclobuta[1'',2'':1,2;3'',4'':1',9']di(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren  
[zwei (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullerene sind an einen Cyclobutanring  
anelliert]

- 97:** Furano[2'',3'':1,9;4'',5'':1',9']di(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren [zwei  
(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullerene sind an einen Furanring anelliert]<sup>[\*]</sup>
- 98:** 2,8':2',8-Diepoxcyclobuta[1'',2'':1,9;3'',4'':1',9']di(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-  
[5,6]fulleren [zwei an einen Cyclobutanring anellierte  
(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullerene sind zusätzlich durch zwei Sauer-  
stoffatome verbrückt]

[\*] Der CA-Indexname von **97** ist di[5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>[1,9-b:1',9'-d]-  
furan.



99



100

**99:** ( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]Fullereno[1'',9'':3',4']cyclobuta[1',2':8,25]-( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )fulleren [ein ( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]Fulleren ist mit einem ( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]Fulleren über einen mit ihnen anellierten Cyclobutanring verbunden]

**100:** ( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]Fullereno[1'',9'':4',5']furano[2',3':1,9]oxireno[2''',3''':13,14]( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup> [ein ( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]Fulleren und ein Oxireno( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren sind an einen Furanring anelliert<sup>[\*\*]</sup>]

[\*] Die Bezifferung des Dreirings wurde gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.

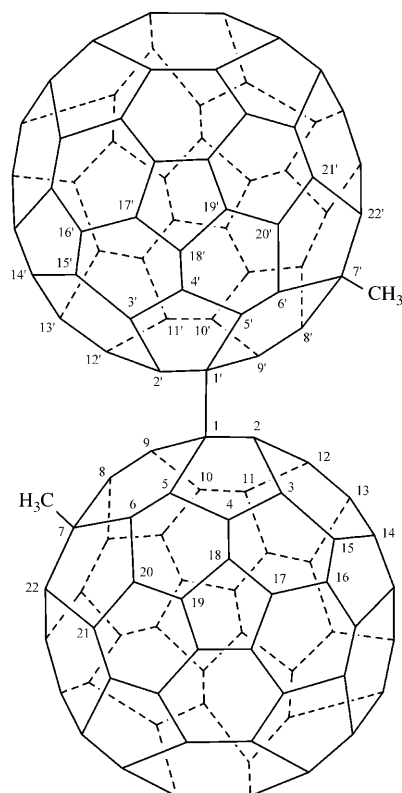
[\*\*] Die Erklärung wurde gegenüber dem Original neu formuliert.

(Da eine anellierte Fullerenstruktur nicht neu nummeriert wird, muss bei der Benennung von **99** und **100** jede Komponente durch geeignet gestrichene Lokanten gekennzeichnet werden [Fußnote ii des englischen Originals].)

## Fu-10.2 Fulleren-Ringverbände

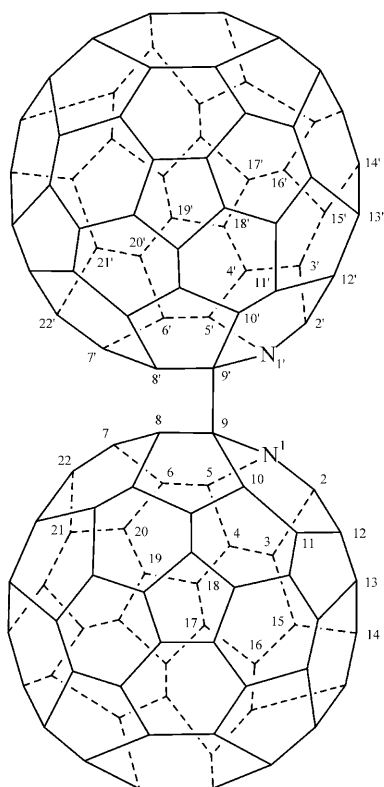
Zwei identische Fullerene oder modifizierte Fullerene, die über eine Einfach- oder eine Doppelbindung verbunden sind, können anhand der Nomenklaturregeln für Ringverbände benannt werden (Regel R-2.4.4 in Lit. [8]). Bei zwei verschiedenen Fullerenen wird eine Fullerenstruktur als Substituent der anderen betrachtet.

Beispiele:

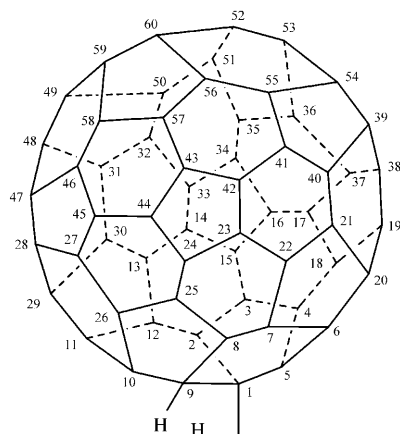


101

**101:** 7,7'-Dimethyl-7*H*,7'*H*-1,1'-bi( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren [ein Ringverband-Name; zwei ( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]Fullerene sind über eine Einfachbindung verbunden]

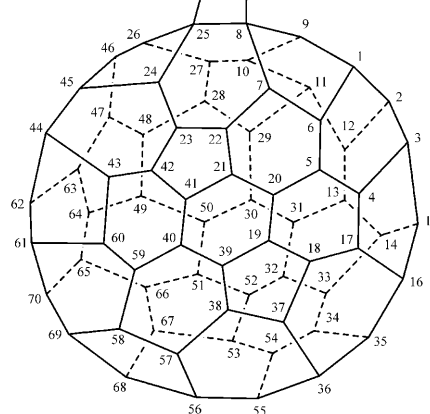


102



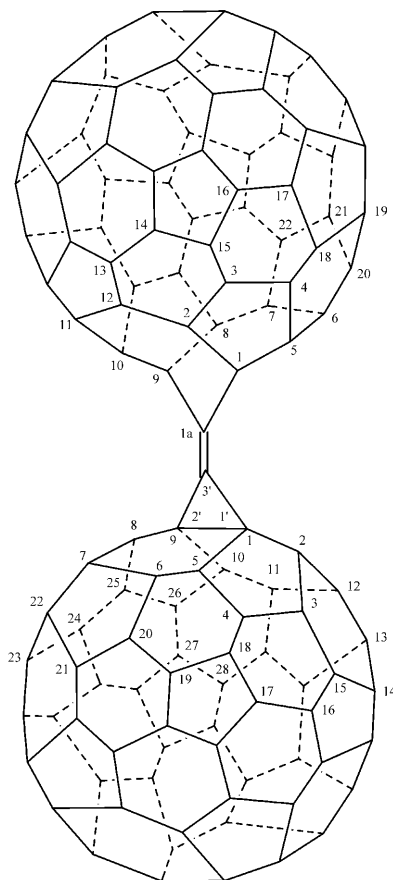
103

**102:** 9,9'-Bi(1-aza( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren)\* [ein Ringverband-Name; zwei 1-Aza( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fullerene sind über eine Einfachbindung verbunden; obwohl der Name des Azafullerens 9*H*-1-Aza( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren lautet, muss im Namen des Ringverbands kein indizierter Wasserstoff angegeben werden]

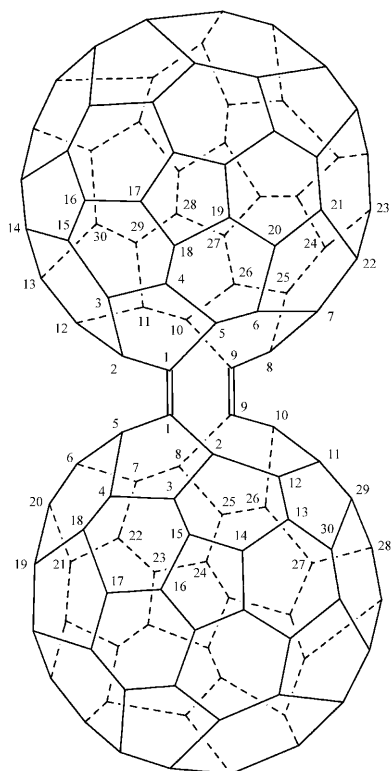
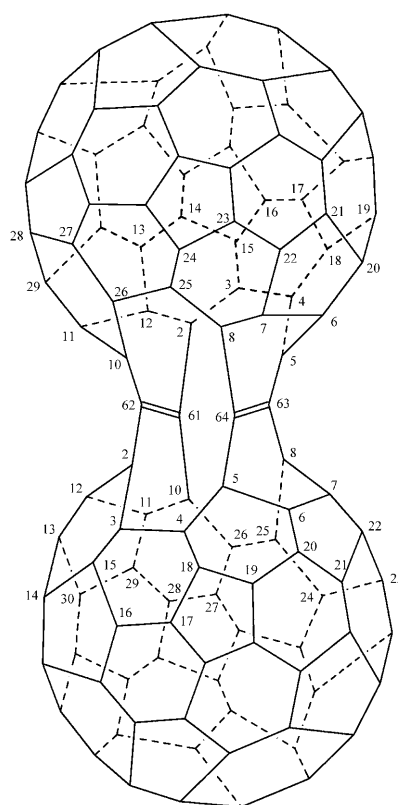


**103:** 8-[( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]Fulleren-1(9*H*)-yl]-8,25-dihydro( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )-[5,6]fulleren (8-[1,9-Dihydro( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren-1-yl]-8,25-dihydro( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )[5,6]fulleren) [ein ( $C_{70}$ - $D_{5h(6)}$ )-[5,6]Fulleren ist mit einem ( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]Fulleren substituiert]

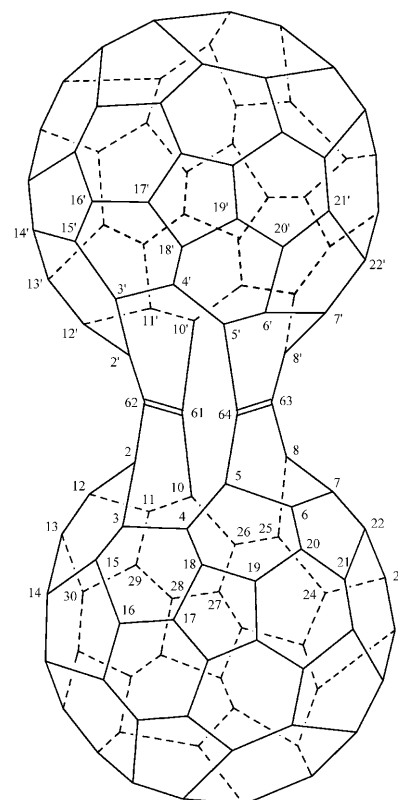
**104:** 3'-[1*aH*-1(9)*a*-Homo( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren-1*a*-yliden]-3'*H*-cyclopropa[1,9]( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren [ein Cyclopropa( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren ist mit einem HOMO( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren substituiert; das Cyclopropa( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren hat wegen der größeren Zahl an Ringen Vorrang als Stammsystem]



104


**105**

**106a**

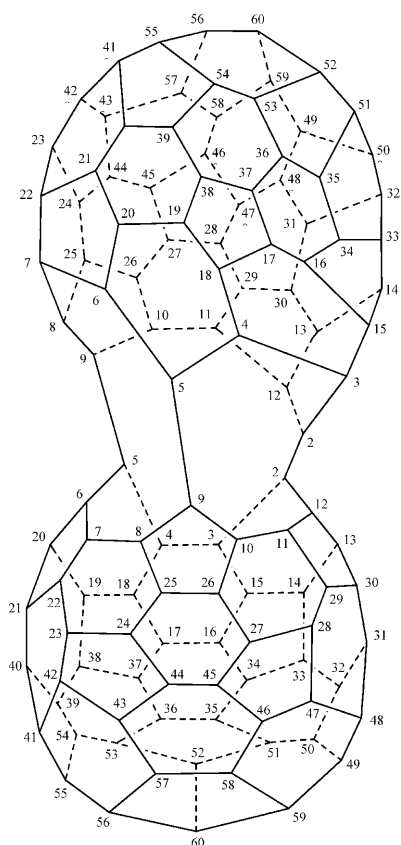
**105:** 1,9-[1,9-Seco( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren-1,9-diyli-1,9-seco- $(C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren [ein Seco( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren ist mit einem identischen Seco( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren substituiert, oder ein Seco( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren ist mit einem identischen Seco( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren überbrückt]


**106b**

**106a:** 61,63,64,62-(1,9-Dinor( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren-2,5,8,10-tetrayl)-2,10:5,8-bis(ethen-1,2-diyl)-1,9-dinor( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren [ein bis(ethendiyl)-überbrücktes 1,9-Dinor( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren ist mit einem 1,9-Dinor( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren substituiert]<sup>[\*]</sup>

**106b:** 2,2',10,10':5,5',8,8'-Bis(ethen-1,1,2,2-tetrayl)bis[1,9-dinor( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren]<sup>[\*]</sup> [zwei Dinor( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fullerene sind durch zwei Ethentetrayl-Gruppen überbrückt]

[\*] Die Bezifferung der Formeln **106a** und **106b** wurde gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.



107

**107:** 2,9,5-[1-Nor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-2,5,9-triyl]-1-nor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup> [ein 1-Nor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren ist mit einem 1-Nor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren substituiert (Bezifferung wie abgebildet) oder ein 1-Nor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren überbrückt ein 1-Nor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren (die Atomnummern der Brückenkompente erhalten Striche)]

### Fu-10.3 Fulleren-Ringverbände in Verbindung mit dem Präfix „Cyclo“

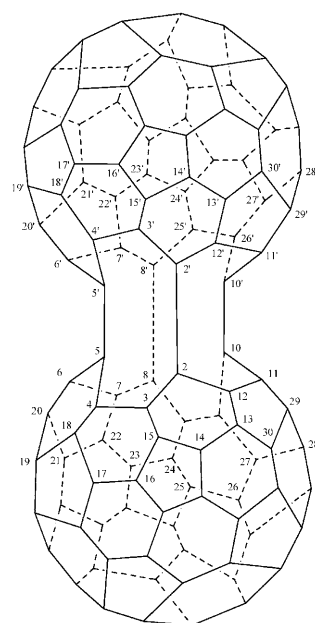
Einige durch mehrere Bindungen verbundene Zweikomponenten-Fullerene kann man bequem als Ringverbände mit zusätzlichen Verknüpfungen, die durch das Präfix „Cyclo“ gekennzeichnet werden, benennen.

Beispiele:[\*\*]

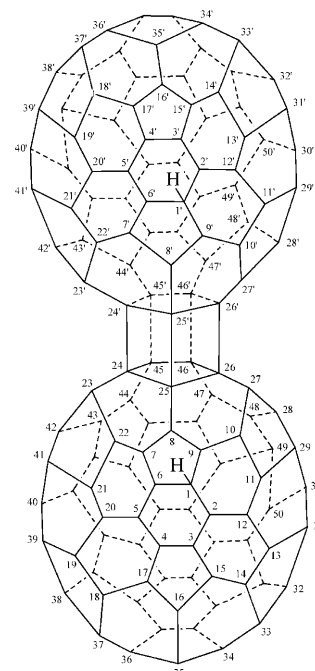
**108:** 5,5':8,8':10,10'-Tris(cyclo)-2,2'-bi(1,9-dinor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren) [ein Ringverband-Name für zwei 1,9-Dinor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullerene mit drei zusätzlichen Einfachbindungen, die durch das strukturmodifizierende Präfix „Cyclo“ berücksichtigt werden]  
oder: 2,5,8,10-[1,9-Dinor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-2,5,8,10-tetrayl]-1,9-dinor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren [ein 1,9-Dinor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren, das mit einem anderen 1,9-Dinor(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren substituiert oder überbrückt ist]

[\*] Der Name und die Bezifferung der Formel (obere Hälfte) wurden gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.

[\*\*] Bei der Benennung von **108** und **109** wurde „Tri/Tetracyclo“ gegen „Tris/Tetrakis(cyclo)“ ausgetauscht, um eine Verwechslung mit dem Von-Baeyer-Präfix auszuschließen.



108



109

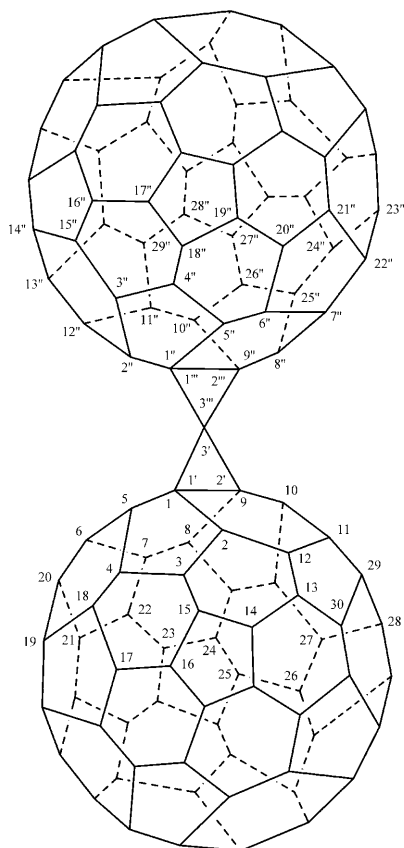
**109:** 1H,1'H-25,25':26,26':45,45':46,46'-Tetrakis(cyclo)-24,24'-bi(C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren [ein Ringverband-Name für zwei (C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]Fullerene mit vier zusätzlichen Einfachbindungen, die durch das strukturmodifizierende Präfix „Cyclo“ berücksichtigt werden]  
oder: 1H,1'H-Hexacyclo[4.4.0.0<sup>2,5</sup>.0<sup>3,9</sup>.0<sup>4,8</sup>.0<sup>7,10</sup>]decano-[1'',2'',3'',9'',10'':24,25,26,46,45;4'',5'',6'',7'',8'':24',25',26',46',45']di(C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren [zwei (C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)-[5,6]Fullerene, die über das Von-Baeyer-Ringsystem Hexacyclo[4.4.0.0<sup>2,5</sup>.0<sup>3,9</sup>.0<sup>4,8</sup>.0<sup>7,10</sup>]decan verbunden sind]



#### Fu-10.4 Spiroverknüpfte Homofullerene und spiroverknüpfte anellierte Fullerene

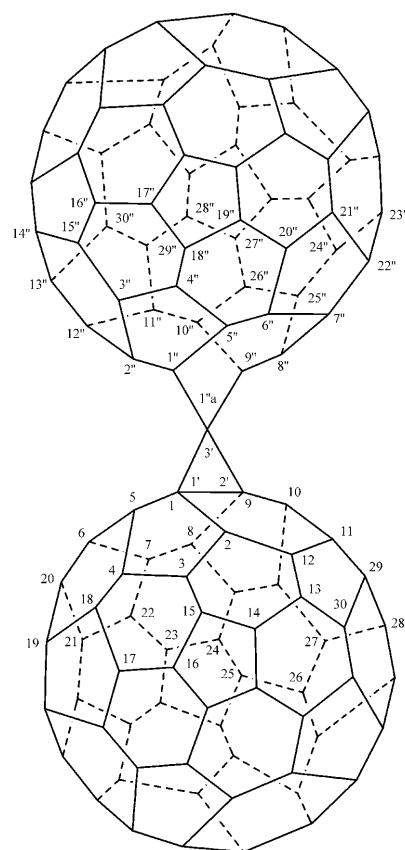
Spiroverknüpfte Homofullerene und spiroverknüpfte anellierte Fullerene werden nach den üblichen Regeln für organische Spirosysteme, die mindestens ein polycyclisches Ringsystem enthalten, benannt.<sup>[11]</sup>

Beispiele:



110

**110:** 3',3''-Spirobi[cyclopropa[1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren] [zwei spiroverknüpfte Cyclopropa(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullerene]



111

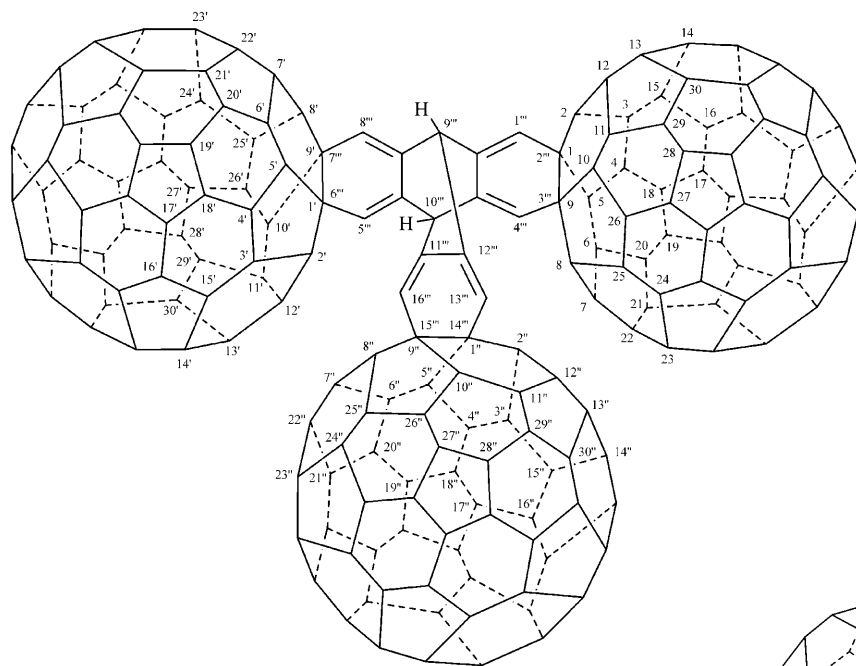
**111:** Spiro[cyclopropa[1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-3',1''a-[1(9)a]-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren]\* [ein Cyclopropa(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren ist mit einem Homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren spiroverknüpft]

#### Fu-11 Fullerenstrukturen mit drei oder mehr Fullerenkomponenten

Fullerenstrukturen mit drei oder mehr Komponenten können als anellierte Verbindungen, überbrückte Verbindungen oder – in Kombination mit dem strukturmodifizierenden Präfix „Cyclo“ – als Ringverbände oder als Phane<sup>[\*]</sup> benannt werden.<sup>[12]</sup>

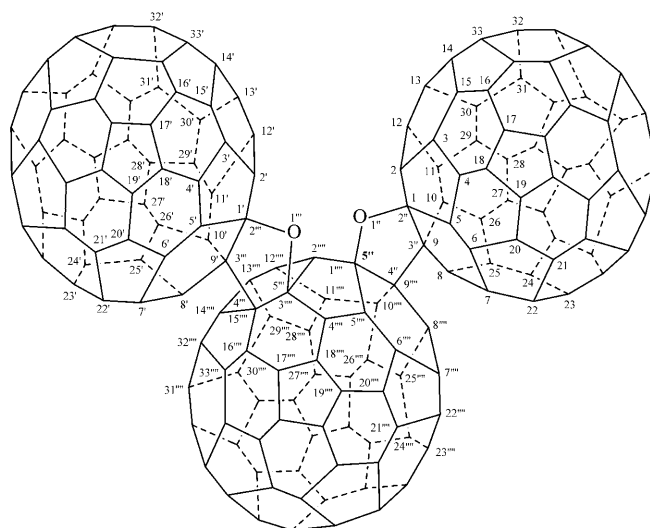
[\*] Der Begriff „Phan“, wie er hier eingeführt wird, bedeutet „eine nach den Regeln der Phannomenklatur<sup>[12,19]</sup> benannte Verbindung“ und ist analog dem Begriff „Cyclophan“ auch als Name für die Verbindungsklasse zu verwenden.

Beispiele:



**112**

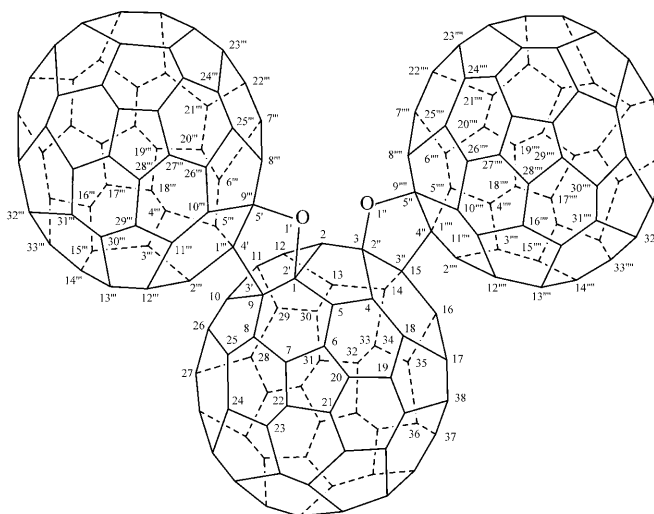
**112:** 9''H,10'''H-(9,10-[1,2]Benzenoantra)[2''',3''':1,9;6'',7''':1',9';14'',15''':1'',9'']tri(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\* [drei (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]Fullerene sind durch das überbrückte anellierte Ringsystem 9,10-[1,2]Benzenoanthracen verbunden]



**113a**

**113a:** (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullereno[9''',1''':4'',5'';15''',3''':4'',5''']-difuro[2'',3'':1,9;2''',3''':1',9']di(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\* (siehe Fußnote zu **77**) [drei (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullerene sind über zwei Furanringe verbunden; ein Anellierungsname mit den endständigen Fullerenen als Basiskomponenten][\*]

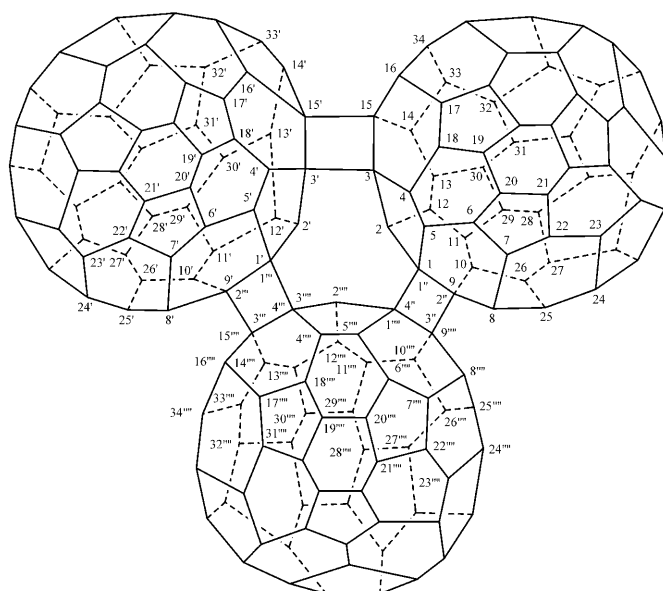
**113b:** Bis[(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullereno[1',9':4,5]furo][2',3':1,9;2'',3'':3,15](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\* [drei (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullerene sind über zwei Furanringe verbunden; ein Anellierungsname mit dem zentralen Fulleren als Basiskomponente][\*\*]



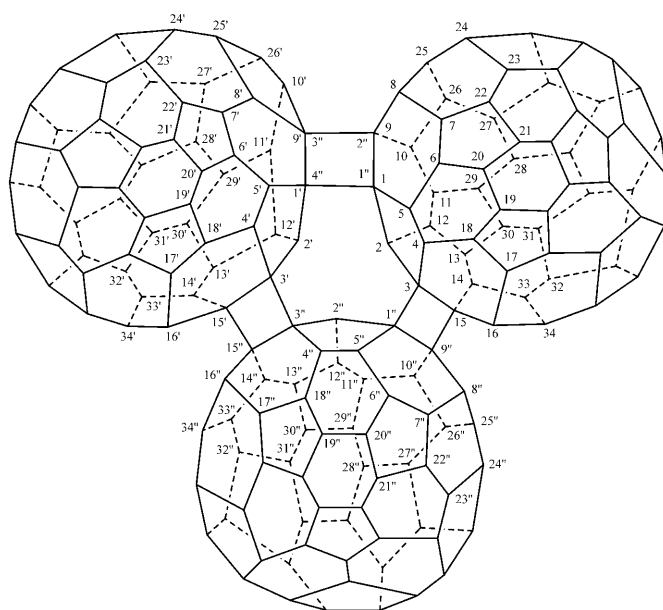
**113b**

[\*] Der auf Furan basierende CA-Indexname ist di[5,6]fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[1,9-d:1',9'-d']fullereno-C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>-[1,9-b:3,15-b']difuran.

[\*\*] Gemäß Regel FR-3.3.1<sup>[9]</sup> ist für Beispiel **113** der Name **113b** zu wählen.



114a



114b

Die Dreikomponenten-Fullerenstruktur **114** kann nicht gemäß den Prinzipien der Anellierungs-nomenklatur<sup>[9]</sup> benannt werden; nichtsdestoweniger gibt es drei Möglichkeiten der Benennung:

1. Der Anellierungsname für drei (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullerene, die über zwei mit ihnen anellierte Vierringe verbunden sind, wird mit dem strukturmodifizierenden Präfix „Cyclo“ kombiniert:  
3,3':15,15'-Bis(cyclo)(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullereno[9''',1''':3'',4''':15''':3''':3''',4''']dicyclobuta[1'',2'':1,9;1''',2''':1',9']di-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\* (**114a**) [drei (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullerene sind über zwei Cyclobutanringe verbunden; der Anellierungsname mit den terminalen Fullerenen als Basiskomponenten wird ergänzt durch das strukturmodifizierende

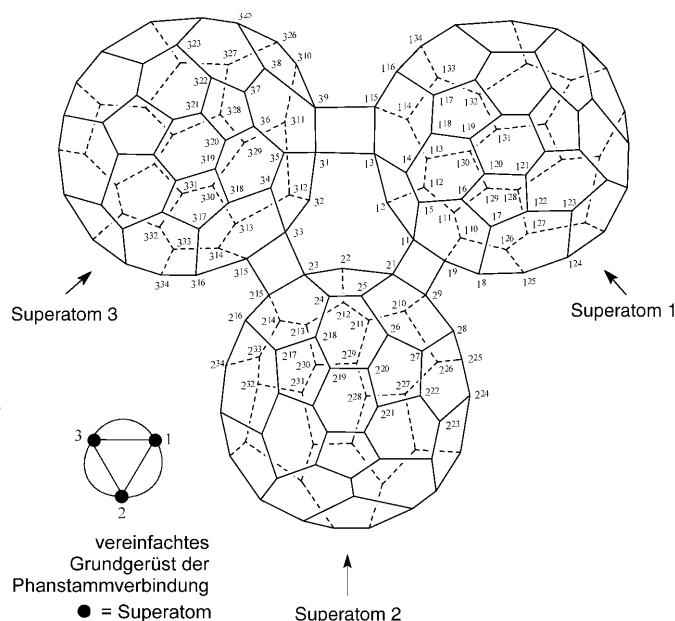
Präfix „Cyclo“, das die beiden zusätzlichen Einfachbindungen angibt] (siehe Fußnoten zu **77** und **108**)

2. Ein Fulleren fungiert als Brücke zwischen den anderen beiden, die mit dem gleichen Cyclobutanring anelliert sind:

3,3',15,15'-([1,3,9,15]Epi(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullereno)cyclobuta[1'',2'':1,9;4'',3'':1',9']di(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren (**114b**) [das verbrückende Fulleren wird gestrichen (im vorliegenden Fall doppelt gestrichen) beziffert]

3. Die Phänomenklatur<sup>[12]</sup> kann wie folgt angepasst und angewendet werden:

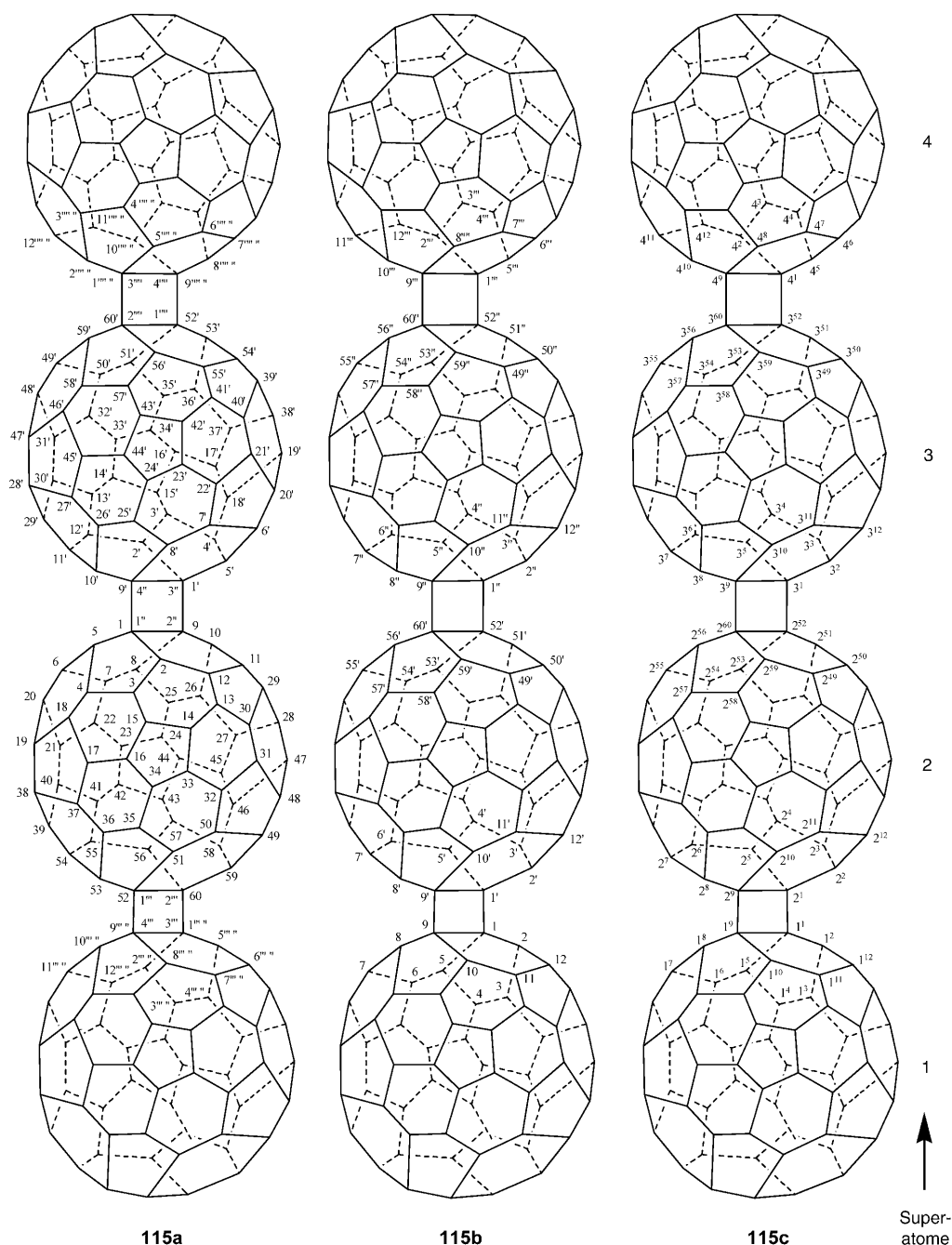
1,2,3(1,9,3,15)-Tri(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullerenatetracyclo-[1.0.0.0<sup>1,2</sup>.0<sup>2,3</sup>]triphän (**114c**)



114c

Es gibt drei Möglichkeiten, das Multikomponentenfulleren **115** zu benennen, das aus vier Fullerenen besteht, die über drei Cyclobutanringe verbunden sind.

1. Anellierungs-nomenklatur:  
Bis[(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullereno[1',9':3,4]cyclobuta[1''',2''':52,60;1''',2''':52',60']cyclobuta[1'',2'':1,9;3'',4'':1',9']di(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren\* (**115a**) [zwei (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullerenocyclobuta-Komponenten sind mit einem Cyclobutadi(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren anelliert] (siehe Fußnote zu **77**)



2. Nomenklatur für Ringverbände in Kombination mit dem Präfix „Cyclo“:  
9,9':9'',60':9''',60''-Tris(cyclo)-1,1':52',1'':52'',1'''-quater-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren\* (**115b**) [der Name für einen Ringverband aus vier (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fullerenen wird ergänzt durch das strukturmodifizierende Präfix „Cyclo“, das die drei zusätzlichen Einfachbindungen angibt] (siehe Fußnote zu **108**)

3. Die Phannomenklatur<sup>[12]</sup> kann wie folgt angepasst und angewendet werden:  
1,4(1,9),2,3(1,9,52,60)-Tetra(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fullerenadisprio-[1.0.1<sup>3</sup>.0<sup>2</sup>]tetraphan (**115c**)<sup>[\*]</sup>

Vereinfachtes Grundgerüst der Phanstammverbindung zu **115c**:

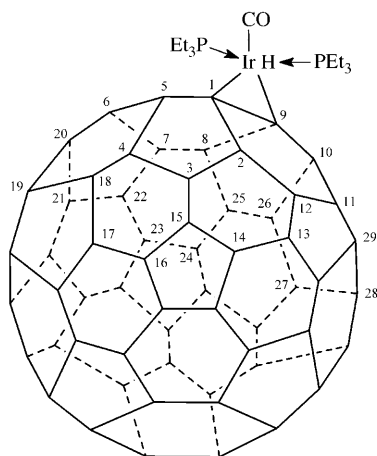


[\*] Gemäß den Empfehlungen zur Spironomenklatur<sup>[11]</sup> sollte der Von-Baeyer-Deskriptor eines Dispirosystems keine hochgestellten Lokanten enthalten. Im Namen von **115c** werden die entsprechenden Lokanten angegeben, um die ungewöhnliche Natur des Dispiro-tetraphan-Systems zu verdeutlichen.

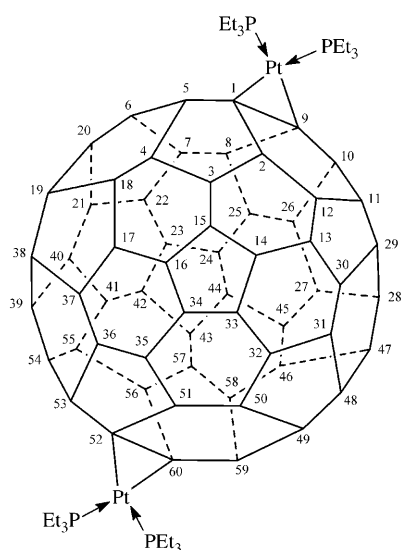
## Fu-12 Fullerene in Koordinationsverbindungen

Die Prinzipien der Koordinationsnomenklatur<sup>[13]</sup> werden bei Fullerenen und Fullerenen angewendet, die extern mit Metallatomen verbunden sind, für die die Austauschnomenklatur nicht geeignet ist.

Beispiele:



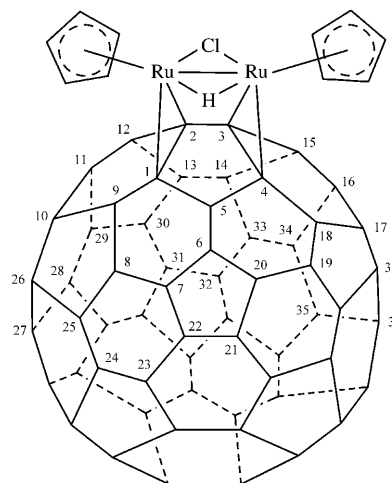
116



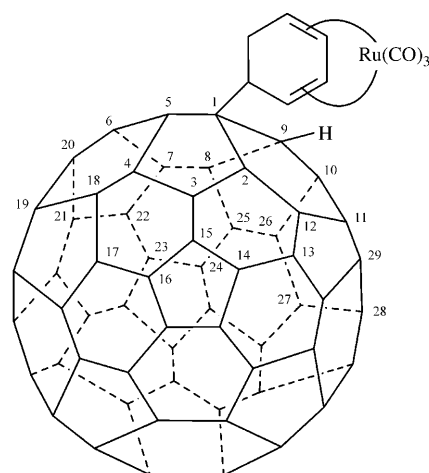
117

**116:** Carbonyl[(1,9- $\eta$ )-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren]hydridobis(triethylphosphan)iridium\*

**117:** { $\mu$ -[(1,9- $\eta$ :52,60- $\eta$ )-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren]}bis[bis(triethylphosphan)platin]



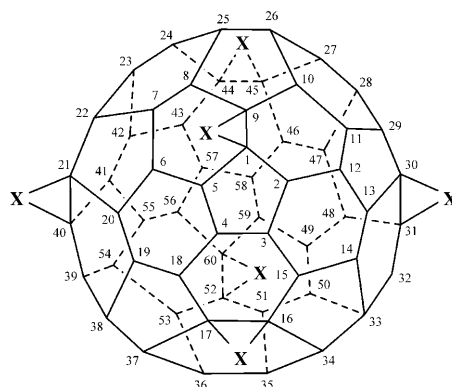
118



119

**118:**  $\mu$ -Chloro- $\{\mu$ -[(1,2- $\eta$ :3,4- $\eta$ )-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren]- $\mu$ -hydridobis( $\eta^5$ -cyclopentadienylruthenium)(Ru-Ru)\*

**119:** Tricarbonyl{1-[(2,3,4,5- $\eta$ )-cyclohexa-2,4-dien-1-yl]-1,9-dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren}ruthenium



**120** X = Pd(PEt<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

**120:** {[ $\mu_6$ -(1,9- $\eta$ :16,17- $\eta$ :21,40- $\eta$ :30,31- $\eta$ :44,45- $\eta$ :52,60- $\eta$ )]-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren}-hexakis[bis(triethylphosphan)palladium]<sup>[\*]</sup>

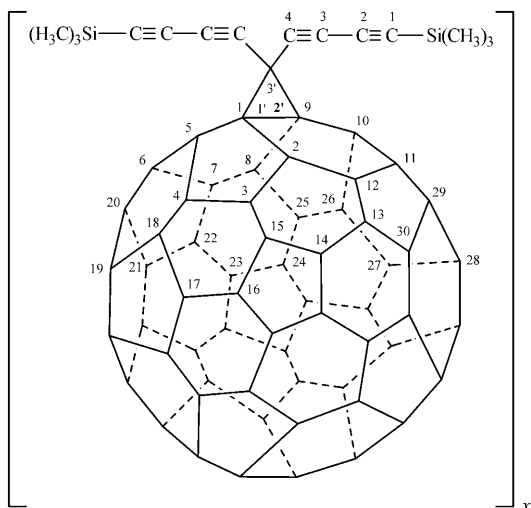
oder: {[ $\mu_6$ -(1,9- $\eta$ :16,17- $\eta$ :21,40- $\eta$ :30,31- $\eta$ :44,45- $\eta$ :52,60- $\eta$ )]-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren}-dodecakis(triethylphosphan)-hexapalladium

[\*] Die Struktur wurde gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert. Der Bindestrich vor hexakis setzt gemäß Regel I-10.8.2 den Brückenliganden ab.

## Fu-13 Fullere in Polymeren

Fullerenhaltige Polymere werden nach den Prinzipien der herkunftsbezogenen<sup>[14]</sup> und der strukturbezogenen<sup>[15]</sup> Nomenklatur für organische Polymere benannt.

**Beispiele** (Obwohl die IUPAC empfiehlt, eine chemische Formel für ein Makromolekül nur dann anzugeben, wenn die Struktur der konstitutionellen Einheit(en) bekannt ist,<sup>[21]</sup> werden **121** und **122** der besseren Veranschaulichung halber hier durch Formeln dargestellt, die CAS-Konventionen entsprechen.<sup>[\*]</sup>):



**121**

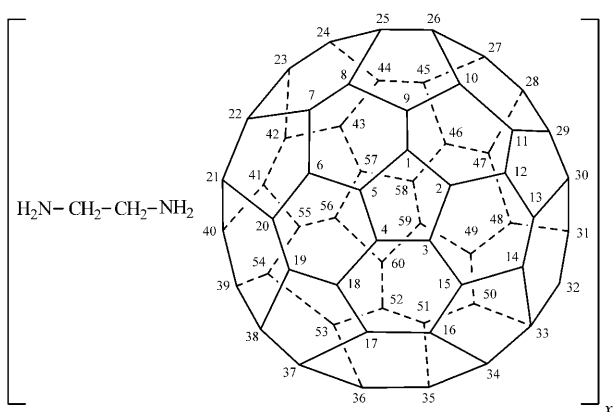
Ein Homopolymer (**121**):

Poly{hexamethyl[(3'*H*-cyclopropa[1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-3',3'-diyl)dibuta-1,3-diin-4,1-diyl]bis(silan)}<sup>[\*\*]</sup>

(ein herkunftsbezogener Name)

Poly{[(3'*H*-cyclopropa[1,9](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-3',3'-diyl)dibuta-1,3-diin-4,1-diyl]bis(trimethylsilan)}<sup>[\*\*\*]</sup>

(ein herkunftsbezogener Name)



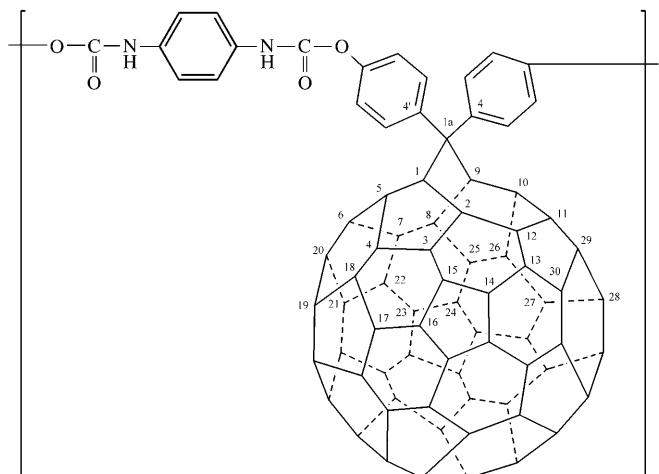
**122**

[\*] Der Text wurde gegenüber der englischen Druckausgabe gemäß Lit. [21] geändert.

[\*\*] Dieser Name wurde gegenüber dem Original analog zu Beispiel 55 in Regel Fu-6.4 ergänzt.

[\*\*\*] Dieser Name entspricht dem Verfahren der CAS-Indexnomenklatur.

Ein Copolymer (**122**): Poly[ethan-1,2-diamin-*co*-(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)-[5,6]fulleren] (ein herkunftsbezogener Name)

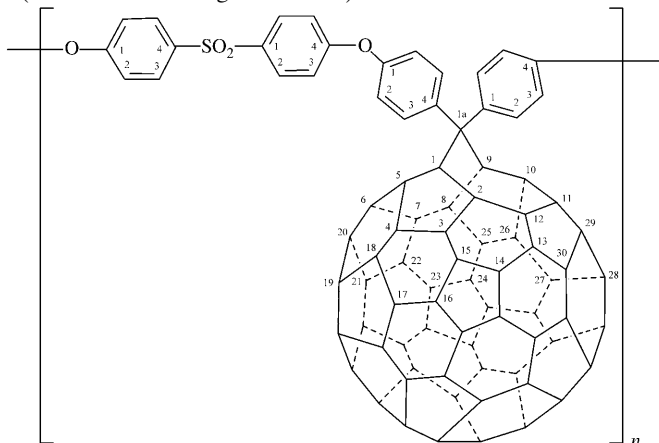


**123**

Ein alternierendes Copolymer (**123**):

Poly[oxycarbonylimino-1,4-phenyleniminocarbonyloxy-1,4-phenylen-1*aH*-1(9)*a*-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1*a*,1*a*-diyl-1,4-phenylen]<sup>[\*]</sup> (ein strukturbezogener Name)

Poly[4,4'-(1*aH*-1(9)*a*-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1*a*,1*a*-diyl)di-phenol-*alt*-1,4-diisocyanatobenzol]<sup>\*</sup> (ein herkunftsbezogener Name)



**124**

Eine konstitutionelle Wiederholungs- oder Repetiereinheit (KRE; englisch CRU) eines Polymers (**124**): Poly[oxy-1,4-phenylensulfonyl-1,4-phenylenoxy-1,4-phenylen-1*aH*-1(9)*a*-homo(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-1*a*,1*a*-diyl-1,4-phenylen] (ein strukturbezogener Name)

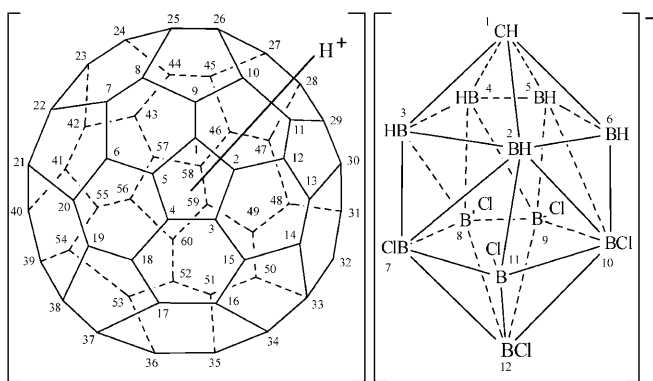
## Fu-14 Fulleren-Kationen

Kationen, die durch Addition eines Protons an ein Fulleren, ein Fulleren-Analogon oder ein Fullenderivat entstehen, werden durch Anhängen der Endung „ium“ an den Fullerenamen oder gemäß den Regeln der Austauschnomenklatur benannt.

[\*] Die Formel wurde gegenüber der englischen Ausgabe gemäß Lit. [21] geändert und der strukturbezogene Name ergänzt.

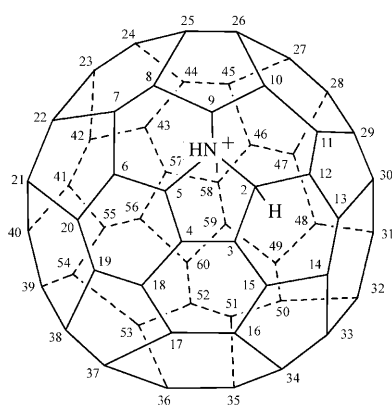


Beispiele:

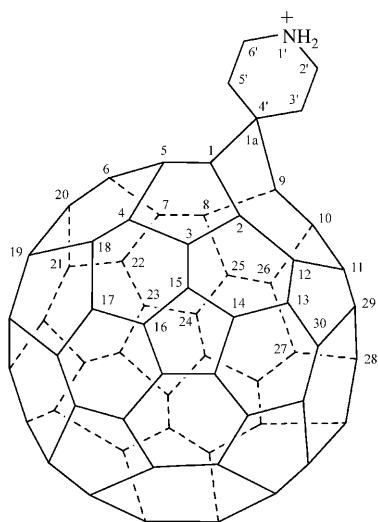


125

**125:**  $(C_{60}-I_h)[5,6]$ Fullerenium-7,8,9,10,11,12-hexachlor-1-carbadodecaborat(1-)\*



126



127

**126:** 2H-1-Aza( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren-1-ium  
oder: 1,2-Dihydro-1-azonia( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

**127:** Spiro[1(9)a-homo( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren-1a,4'-piperidin]-1'-ium\*

[\*] Struktur und Name wurden gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.

## Fu-15 Fulleren-Radikationen

Die Namen von Radikationen, die durch Addition eines Elektrons an den Fullerenkäfig oder Entfernen eines Elektrons aus diesem entstehen, werden durch Anhängen der Endungen „elid“, „bis(elid)“ usw. oder „elium“, „bis(elium)“ usw. an den Fullerenennamen gebildet.[\*]

Beispiele:

$[C_{60}]^-$  (**128**):  $(C_{60}-I_h)[5,6]$ Fullerenelid

$[C_{60}]^+$  (**129**):  $(C_{60}-I_h)[5,6]$ Fullerenelium

## Fu-16 Metallderivate von Fullerenen

Das Symbol „@“ und der Ausdruck „Incarceran“ wurden vielfach verwendet, um Fullere mit einem im Käfig eingeschlossenen Komponente, z. B.  $La@C_{60}$ , zu beschreiben. Das kursive Infix „*incar*“ beschreibt ein Fulleren mit einem eingeschlossenen Element. In einer Formel wird der Einschluss durch ein kursives „i“ auf der linken Seite des Symbols des eingeschlossenen Elements dargestellt.

Beispiel:

$iLa[C_{60}-I_h]$  (**130**):  $(C_{60}-I_h)[5,6]$ Fulleren-*incar*-lanthan oder Lanthan-*incar*-( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren

Die Formel kann die Zahl der eingeschlossenen Metallatome – selbst in Form von Bruchteilen – enthalten, aber auch der Name muss diese Information wiedergeben. CAS behandelt derartige Zusammensetzungen als „compd. (compound) with“ („Verbindung mit“), wobei dieser Ausdruck an den Namen des Fulleren angehängt wird; das Verhältnis von Fulleren zu Metall wird in runden Klammern angegeben. Die Ladungsverteilung zwischen Fulleren und Metall kann durch Angabe der Oxidationsstufe des Metalls a>ngezeigt werden.

Beispiele:

$iLa_2[C_{60}-I_h]$  (**131**):  $(C_{60}-I_h)[5,6]$ Fulleren-*incar*-dilanthan oder Dilanthan-*incar*-( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fulleren[\*\*\*]

$iCa[C_{84}]^{2-}$  (**132**): Calcium(2+)-*incar*-( $C_{84}$ )[5,6]fullerid(2-) oder  $(C_{84})[5,6]$ Fulleren-*incar*-calcium[\*\*\*]

$iLa^{III}[C_{82}]^{3-}$  (**133**): Lanthan(3+)-*incar*-( $C_{82}$ )[5,6]fullerid(3-) oder  $(C_{82})[5,6]$ Fulleren-*incar*-lanthan(III)[\*\*\*]

Befindet sich das Metall außerhalb des Fullerenkäfigs, wird die Verbindung als Salz des Fulleren benannt. Der Name der Fullerenkomponente lautet „Fullerid“, und die entsprechende negative Ladung wird in runden Klammern angegeben.

Beispiel:

$K_3[C_{60}]$  (**134**): Trikalium-( $C_{60}-I_h$ )[5,6]fullerid(3-)

[\*] Die Suffixe „elid“ und „elium“ sind von der IUPAC anerkannt, wurden aber bisher in keiner Veröffentlichung verwendet. Sie wurden eingeführt, um die zweiteiligen Suffixe „uidyl“ und „iumyl“ bei Radikationen, die innerhalb der gleichen Stammstruktur lokalisiert sind, zu ersetzen.

[\*\*] Der CA-Indexname ist [5,6]fullerene- $C_{60}-I_h$ , compd. with lanthanum (1:2).

[\*\*\*] Die Formeln von **132** und **133** und damit auch ihre jeweils zweiten Namen wurden gegenüber der englischen Druckausgabe geändert.

## Fu-17 Die Beschreibung der Konfiguration chiraler Fullerene und chiraler Derivate der Fullerene $C_{60}-I_h$ und $C_{70}-D_{5h(6)}$

Im Folgenden werden nur Derivate der Fullerene  $C_{60}-I_h$  und  $C_{70}-D_{5h(6)}$  behandelt. Die Empfehlungen beruhen auf einer Veröffentlichung von C. Thilgen, A. Herrmann und F. Diederich.<sup>[16]</sup>

### Fu-17.1 Klassen chiraler Fullerene

Chirale Fullerene und/oder chirale Fullerenderivate lassen sich je nach dem Ursprung der Chiralität einer von vier Klassen zuordnen. Obwohl die folgende Diskussion sich nur auf substituierte Fullerene (siehe Regel Fu-6.2) bezieht, kann sie ohne Weiteres auch auf chirale Heterofullerene und isotopensubstituierte Fullerene und deren Derivate angewendet werden. Die Beschreibung der Konfiguration strukturell modifizierter Fullerene (Fulleroide) wird an dieser Stelle nicht behandelt.

1. Klasse: *inhärent chirale Stammfullerene*. Da die Stammfullerene  $C_{60}-I_h$  und  $C_{70}-D_{5h(6)}$  nicht inhärent chiral sind, gehören sie nicht zu dieser Klasse, die deshalb hier nur kurz erwähnt wird.

2. Klasse: Derivate mit *inhärent chiraalem Substitutionsmuster*. Das sind Derivate von achiralen (und chiralen) Stammfullerenen, deren Substituenten (siehe Regel Fu-6.2) auf dem Fullerengerüst ein chirales Substitutionsmuster erzeugen – und zwar unabhängig davon, ob die Substituenten selbst chiral oder achiral, identisch oder verschieden sind.

3. Klasse: Derivate mit *nicht inhärent chiraalem Substitutionsmuster*. Hier handelt es sich um Derivate achiraler Stammfullerene, bei denen ein chirales Substitutionsmuster (siehe Regel Fu-6.2) ausschließlich auf der Verschiedenartigkeit von Substituenten beruht.

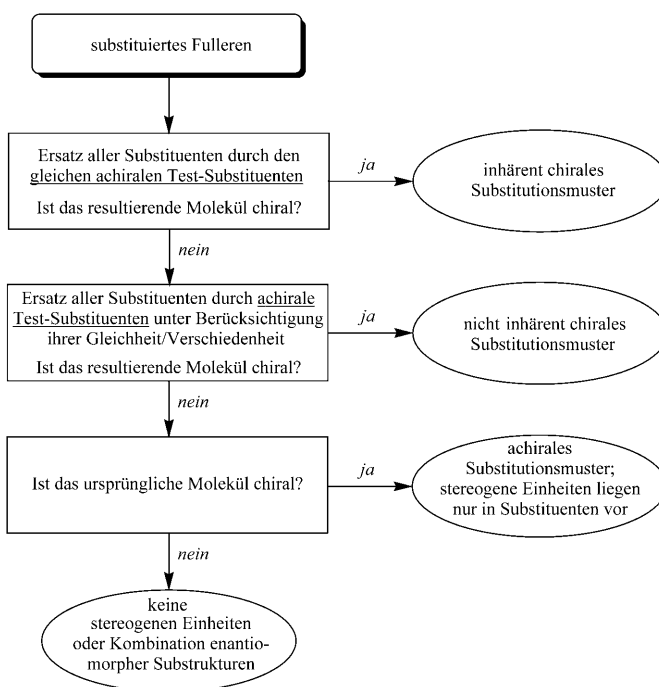
4. Klasse: Derivate achiraler Stammfullerene ohne chirales Substitutionsmuster, aber mit stereogenen Einheiten in den Substituenten.

### Fu-17.2 Der Substitutionstest

Eine Fullerenverbindung kann gleichzeitig mehreren der in Regel Fu-17.1 erwähnten Klassen angehören, wenn unterschiedliche stereogene Einheiten in ihr zusammentreffen. Die Chiralitätsklassen können leicht anhand des in Schema 1 gezeigten einfachen Substitutionstests zugeordnet werden, wobei der Test auf jede Fullereineinheit separat anzuwenden ist. Falls mehrere chirale Fullereineinheiten vorliegen, erhält jede ihren eigenen Deskriptor.

### Fu-17.3 Prinzipien des Deskriptorensystems

Das Deskriptorensystem beruht auf der Tatsache, dass die hier empfohlenen Nummerierungsschemata helicale, also chirale Pfade beschreiben und daher ein ideales Bezugssystem zur Unterscheidung der Enantiomere von chiralen



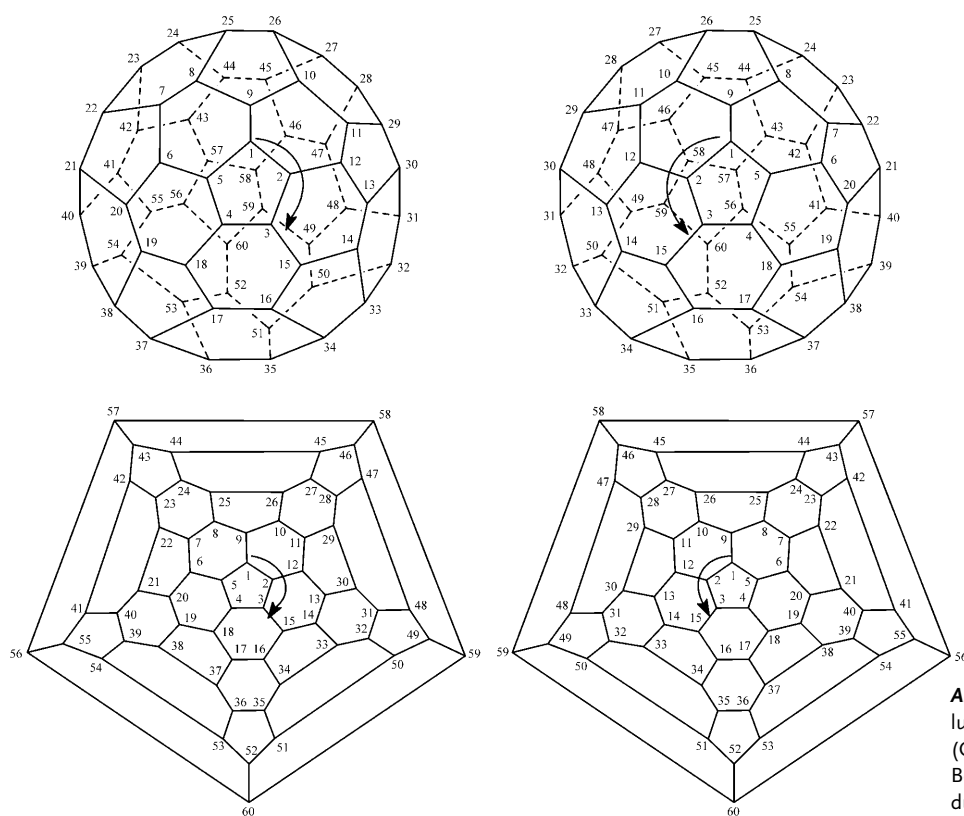
**Schema 1.** Klassifizierung der Fulleren-Chiralität durch einen schrittweisen Substitutionstest.

Kohlenstoffkäfigen und Fullerenderivaten mit einem chiralen Substitutionsmuster sind. (Dieser Ansatz gilt auch für andere Nummerierungsschemata, in denen fortlaufend nummerierte Atome eine Helix bilden [Fußnote mm im englischen Original].) Ein einziger Deskriptor reicht aus, um die Konfiguration eines chiralen Fulleren oder eines chiralen Fulleren-Substitutionsmusters zu beschreiben, und zwar unabhängig vom Grad der Substitution oder des Skelett-Austauschs.

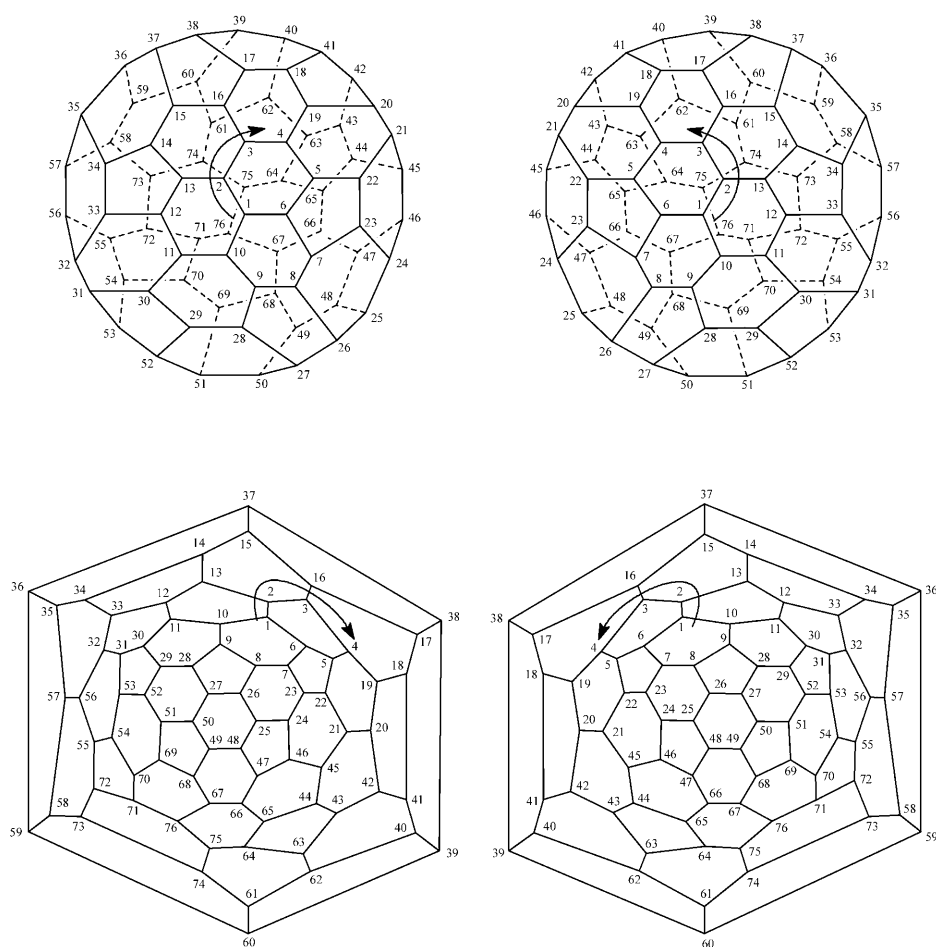
In einem dreidimensionalen Fullerenmodell entspricht die Abfolge nummerierter Kohlenstoffatome einer Helix oder helicalen Abschnitten und ist deshalb chiral. Somit können auf ein achirales Stammfulleren zwei isometrische, spiegelbildliche Nummerierungspfade angewendet werden, wie dies in Abbildung 6 für  $(C_{60}-I_h)[5,6]$ Fulleren gezeigt ist. Die Pfeile geben dabei die Richtung, d. h. den Drehsinn des Nummerierungspfads an: Uhrzeigersinn auf der linken Seite und Gegenuhrzeigersinn auf der rechten Seite, wobei der Betrachter sich jeweils außerhalb des Käfigs befindet.

Dagegen ist bei einem Enantiomer eines inhärent chiralen Fulleren nur ein einziges von zwei spiegelbildlichen Nummerierungsschema (ein einziger helicaler Pfad der Nummerierung) möglich, und dessen Spiegelbild gehört zum anderen Enantiomer. Dies ist in Abbildung 7 für das chirale  $(C_{70}-D_2)[5,6]$ Fulleren gezeigt, wobei die Pfeile wiederum den Drehsinn des Pfads der Nummerierung angeben. Bei den 3D-Darstellungen entspricht die Blickrichtung der Bezugssachse der Nummerierung.

Wegen der fehlenden Spiegelsymmetrie dieses Fulleren passt jeder der beiden spiegelbildlichen Nummerierungspfade nur zu einem Enantiomer. Die Beschreibung des Drehsinns des entsprechenden Nummerierungspfads reicht aus, um die absolute Konfiguration des Enantiomers eindeutig zu beschreiben. Der Betrachter befindet sich dabei außerhalb



**Abbildung 6.** Dreidimensionale Darstellungen und Schlegel-Diagramme von  $(C_{60}-I_h)[5,6]$ Fulleren mit spiegelbildlichen Bezifferungen; siehe Legende zu Abbildung 1.



**Abbildung 7.** 3D-Darstellungen (entlang einer der  $C_2$ -Achsen) und Schlegel-Diagramme der Enantiomere des inhärent chiralen  $(C_{76}-D_2)[5,6]$ Fullerens mit entsprechenden spiegelbildlichen Bezifferungen. (Siehe Lit. [20], S. 852.)

des Fullerenkäfts, schaut auf den Ring, in dem die Nummerierung beginnt, und zieht einen Bogen von C(1) über C(2) nach C(3), die in einer Fullerenstruktur nie auf einer Geraden liegen. Verläuft diese Bewegung im Uhrzeigersinn, so wird die Konfiguration durch den wie üblich in runde Klammern eingeschlossenen Deskriptor ( $^{\text{f},\text{x}}\text{C}$ ) beschrieben, wobei „C“ für „clockwise“ („im Uhrzeigersinn“) steht und das hochgestellte „f“ andeutet, dass der Deskriptor sich auf eine Fullerenstruktur bezieht. Was das hochgestellte „x“ anbelangt, so gilt  $x = \text{s}$  bei Verwendung der systematischen Bezifferung (siehe Regel Fu-3.2 oder Regel Fu-3.3) und  $x = \text{t}$  bei Verwendung der Trivialbezifferung (siehe Regel Fu-3.4). Wenn der Weg von C(1) über C(2) nach C(3) entgegen dem Uhrzeigersinn verläuft, so lautet der entsprechende Deskriptor ( $^{\text{f},\text{x}}\text{A}$ ), wobei „A“ für „anticlockwise“ („entgegen dem Uhrzeigersinn“) steht. Entsprechend handelt es sich bei der linken Struktur in Abbildung 7 um ( $^{\text{f},\text{s}}\text{C}$ )-(C<sub>76</sub>-D<sub>2</sub>)[5,6]Fulleren und bei der rechten Struktur um ( $^{\text{f},\text{s}}\text{A}$ )-(C<sub>76</sub>-D<sub>2</sub>)[5,6]Fulleren.

Dieses Verfahren gilt auch für Derivate von inhärent chiralen Fullerenen, da die helicalen Nummerierungspfade für das Stammfulleren und seine Derivate identisch sind.<sup>[\*]</sup>

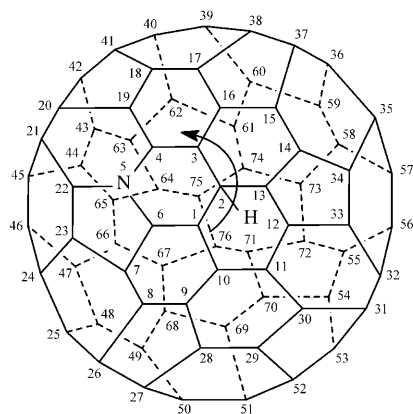
**Beispiele** (zur Bezifferung von **135** und **136** siehe Legende zu Abbildung 7):

**135:** ( $^{\text{f},\text{s}}\text{A}$ )-2H-5-Aza(C<sub>76</sub>-D<sub>2</sub>)[5,6]fulleren\*

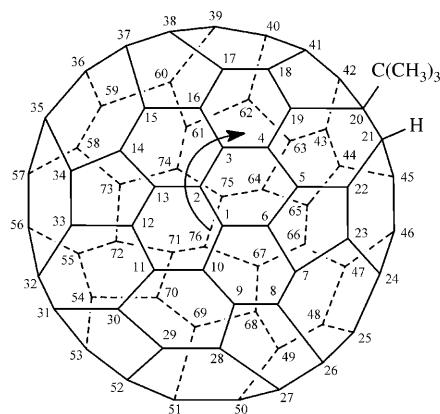
**136:** ( $^{\text{f},\text{s}}\text{C}$ )-20-*tert*-Butyl-20,21-dihydro(C<sub>76</sub>-D<sub>2</sub>)[5,6]fulleren

## Fu-17.4 Achirale Stammfullerene mit inhärent chiralen Substitutionsmustern

Alle Fullerenverbindungen dieser Kategorie sind substituierte Derivate achiraler Stammfullerene. Sie haben dann ein inhärent chirales Substitutionsmuster, wenn allein die geometrische Anordnung der Substituenten auf der Fullerenoberfläche für das Vorkommen chiraler Spezies ausreicht, egal ob die Substituenten selbst identisch oder verschieden sind. Bei solchen Fullerenderivaten gibt es einen



**135**

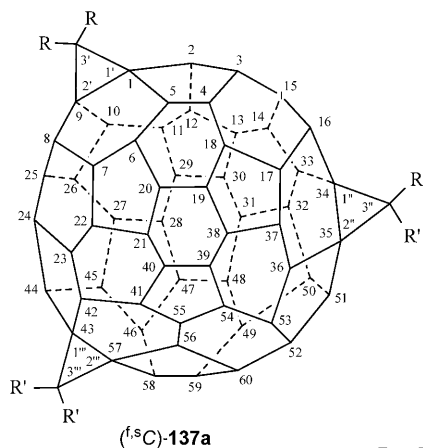


**136**

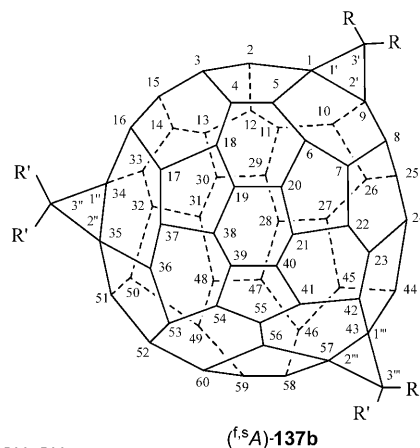
einigen helicalen Nummerierungspfad (entweder rechts- oder linksgängig), der zum niedrigsten Lokantensatz für die Substituenten führt. Wie oben beschrieben, reicht die Angabe des Drehsinns dieses Nummerierungspfads zur eindeutigen Beschreibung der absoluten Konfiguration ( $^{\text{f},\text{x}}\text{C}$  oder  $^{\text{f},\text{x}}\text{A}$ ) des substituierten Fulleren.

**Beispiel 1:**

**137:** 3',3'-Diethyl-3'',3'',3''',3'''-tetramethyl-[3H,3''H,3'''H-tricyclop[1,9:34,35:43,57](C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren-3',3'',3'',3'''-hexacarboxylat]<sup>[\*]</sup>



( $^{\text{f},\text{s}}\text{C}$ )-**137a**

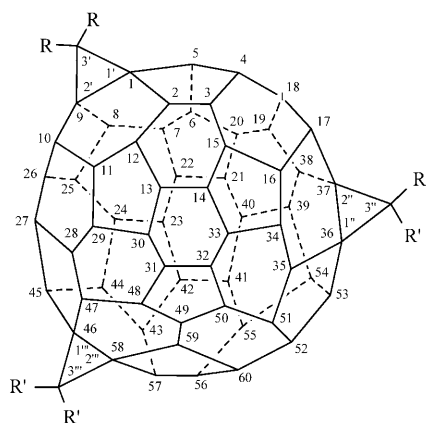


( $^{\text{f},\text{s}}\text{A}$ )-**137b**

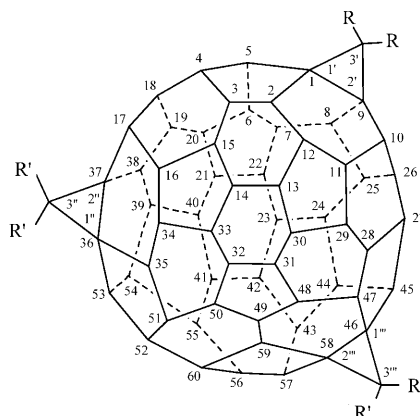
R = CO<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>  
R' = CO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>

[\*] Die Konfiguration von Derivaten der Fullerene C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub> und C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub> mit einem inhärent chiralen oder nicht inhärent chiralen Substitutionsmuster kann leicht interaktiv auf der Website <http://www.diederich.chem.ethz.ch/chirafull/> bestimmt werden.

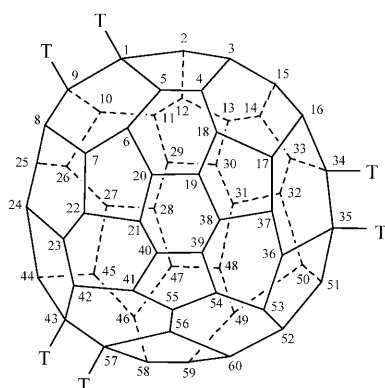
[\*] Die Bezifferung mehrerer Cyclopropanringe wurde gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.



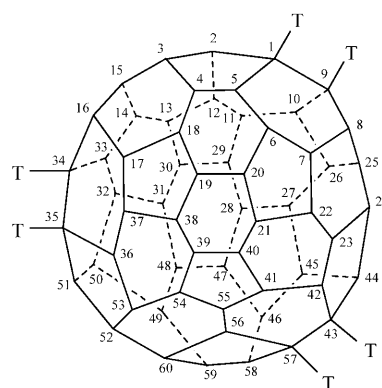
**137c**  
(spiegelbildliche  
Nummerierung zu **137a**)



**137d**  
(spiegelbildliche  
Nummerierung zu **137b**)



(<sup>t,s</sup>C)-**137a** (T)



(<sup>t,s</sup>A)-**137b** (T)

#### Erklärung:

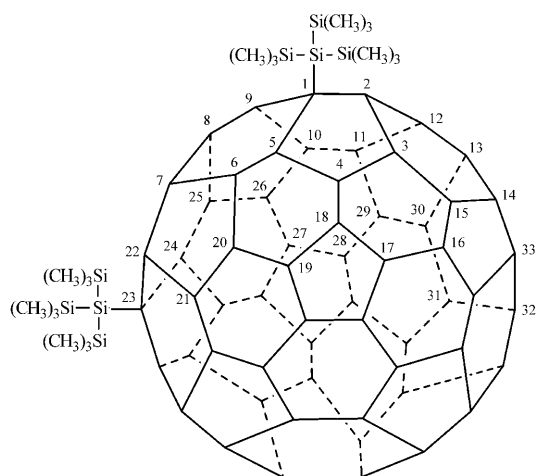
- a) Beim Enantiomerenpaar **137a** und **137b** führt die Bezifferung im Uhrzeigersinn (**137a**) bzw. entgegen dem Uhrzeigersinn (**137b**) zum gleichen Satz niedrigster Lokanten, nämlich 1,9:34,35:43,57. Bei jeweils spiegelbildlicher Bezifferung (**137c** bzw. **137d**) erhält man einen Satz höherer Lokanten (1,9:36,37:46,58), der im Widerspruch zur Nomenklaturregel der niedrigstmöglichen Lokanten (Regel R-2.4.2 in Lit. [8]) steht.
- b) Das Stammfulleren, (C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]Fulleren, ist achiral, aber das Derivat ist wegen seines Substitutionsmusters chiral.

Es hat ein inhärent chirales Substitutionsmuster, da die Struktur nach Ersatz aller Substituenten durch den gleichen achiralen Test-Substituenten „T“ immer noch chiral ist (siehe **137a**(T), **137b**(T) und Schema 1).

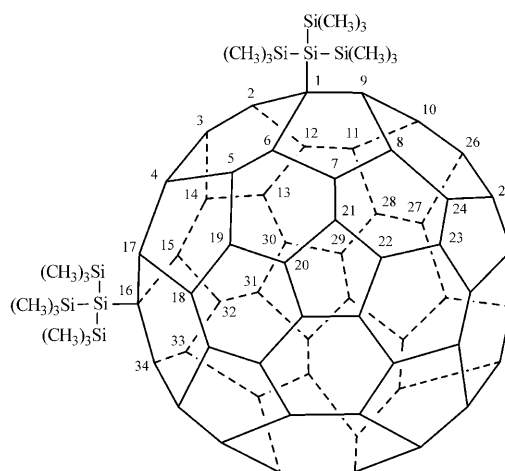
#### Beispiel 2:

**138a**: (<sup>t,s</sup>C)-1,23-Bis[1,1,1,3,3,3-hexamethyl-2-(trimethylsilyl)trisilan-2-yl]-1,23-dihydro(C<sub>60</sub>-I<sub>h</sub>)[5,6]fulleren

**138b**: (<sup>t,t</sup>A)-1,16-Bis[1,1,1,3,3,3-hexamethyl-2-(trimethylsilyl)trisilan-2-yl]-1,16-dihydro[60-I<sub>h</sub>]fulleren



**138a**  
(systematische  
Bezifferung)



**138b**  
(Trivial-  
bezifferung)



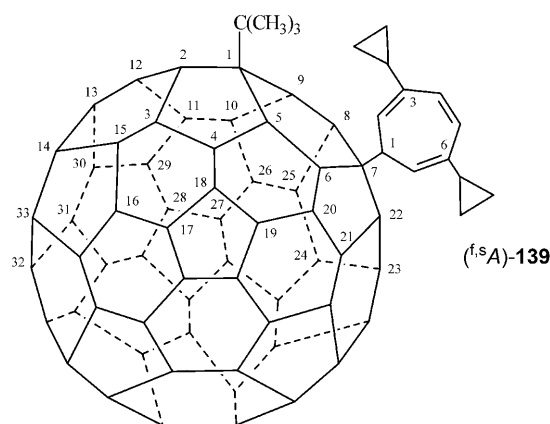
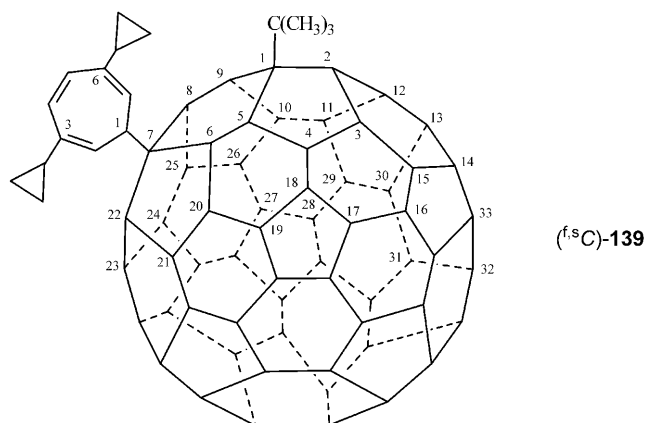
*Anmerkung:* Diese einfache Verbindung mit inhärent chiralem Substitutionsmuster illustriert die Tatsache, dass der Stereodeskriptor unterschiedlich sein kann, je nachdem ob die systematische Bezifferung oder die Trivialbezifferung verwendet wird.

## Fu-17.5 Achirale Stammfullerene mit nicht inhärent chiralen Substitutionsmustern

Bei den Fullerenen dieser Kategorie handelt es sich um substituierte Derivate achiraler Stammfullerene, deren Chiralität weder auf dem Stammfulleren noch auf einem inhärent chiralen Substitutionsmuster beruht, sondern auf der geometrischen Anordnung von Substituenten, die nicht alle identisch sein können.

In diesen Fällen ist keine Unterscheidung zwischen Enantiomeren aufgrund der oben aufgeführten Kriterien möglich, denn beide spiegelsymmetrischen Nummerierungspfade führen zum gleichen Satz niedrigster Lokanten. Um eine Unterscheidung zu ermöglichen, müssen die Substituenten in eine Rangfolge gebracht werden. Dies geschieht am besten mithilfe des CIP(Cahn-Ingold-Prelog)-Verfahrens, indem die Atome jedes Substituenten schrittweise untersucht werden.<sup>[17]</sup> Bei Fullerenen mit nicht inhärent chiralem Substitutionsmuster beginnt die vergleichende CIP-Untersuchung der Substituenten an dem Atom des Fullengerüsts, das den Substituenten trägt, und wird dann schrittweise nach außen fortgesetzt, bis ein Rangunterschied zwischen den Substituenten festgestellt wird. (Falls zwei enantiomorphe substituierte Fullerene anhand des CIP-Verfahrens verglichen werden sollen, wird vorgeschlagen, dass <sup>f,x</sup>C Vorrang hat gegenüber <sup>f,x</sup>A (Zusatz zu  $R > S$  und  $M > P$ , Unterregel 5 in Lit. [17] [Fußnote tt im englischen Original].) Von den beiden spiegelsymmetrischen Bezifferungen, die zum gleichen Satz niedrigster Lokanten führen, wird diejenige bevorzugt, die an der Stelle des ersten Unterschieds den niedrigeren Lokanten einem Atom oder einer Atomgruppe mit höherem CIP-Rang zuordnet; der Drehsinn des bevorzugten Nummerierungspfad bestimmt dann den Deskriptor des betrachteten Enantiomers.

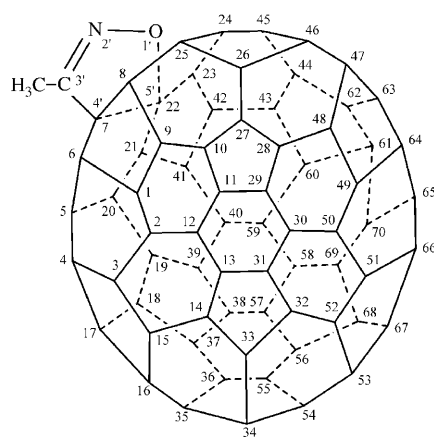
Beispiel 1:



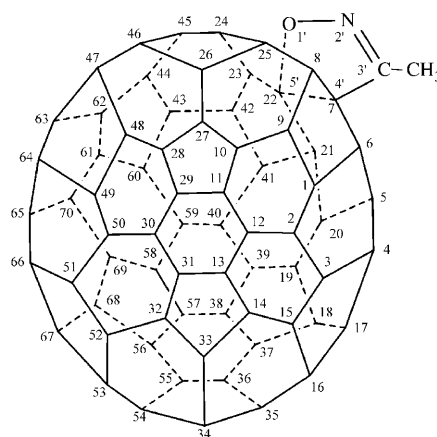
**139:** 1-*tert*-Butyl-7-(3,6-dicyclopropylcyclohepta-2,4,6-trien-1-yl)-1,7-dihydro( $C_{60}$ - $I_h$ )[5,6]fulleren

*Erklärung:* Die Chiralität dieser Verbindung beruht auf der (konstitutionellen) Verschiedenheit der Substituenten. Das Stammfulleren ist achiral, und die Verbindung hat kein inhärent chirales Substitutionsmuster, da der Ersatz beider Substituenten durch den gleichen achiralen Test-Substituenten „T“ eine achirale Struktur liefert. Somit ist das Substitutionsmuster nicht inhärent chiral. Die *tert*-Butylgruppe erhält für Zwecke der Konfigurationsbestimmung den Lokanten „1“, da ihr CIP-Rang höher ist als derjenige der 3,6-Dicyclopropylcyclohepta-2,4,6-trien-1-yl-Gruppe.

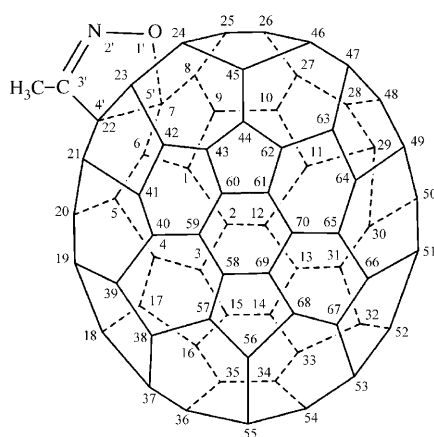


Beispiel 2:<sup>[\*]</sup>


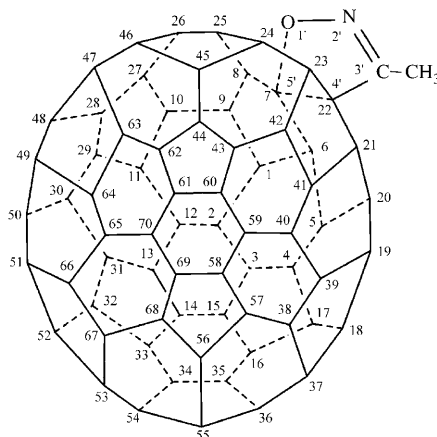
(f.s.A)-140



(f.s.C)-140



(f.s.A)-140



(f.s.C)-140

**140:** 3'-Methyl[1,2]oxazolo[4',5':7,22](C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren<sup>[\*\*]</sup>

## Erklärung:

- Die Chiralität dieser Verbindung beruht darauf, dass der anellierte Ring nicht symmetrisch ist. Das Stammfulleren ist achiral, und die Verbindung hat ein nicht inhärent chirales Substitutionsmuster, da der Ersatz beider Substituenten durch den gleichen achiralen Test-Substituenten „T“ eine achirale Struktur liefert.
- In diesem Beispiel beruht die zur Namensgebung verwendete Bezifferung auf dem Nomenklaturprinzip der niedrigsten Lokanten (Regel R-2.4.2 in Lit. [8]) für die Anellierungsstellen (obere Nummerierung von **140**) und eignet sich nicht zur Zuordnung der Stereodeskriptoren. Für die Konfigurationsbestimmung wird der Nummerie-

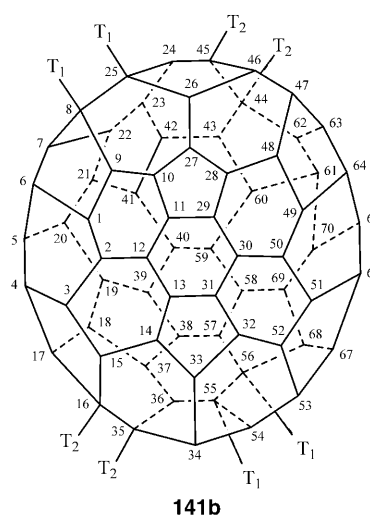
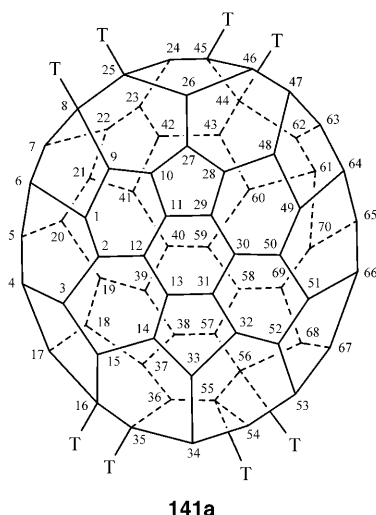
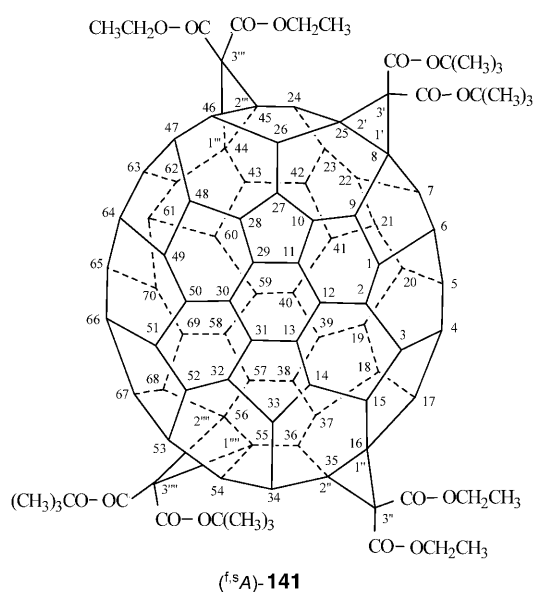
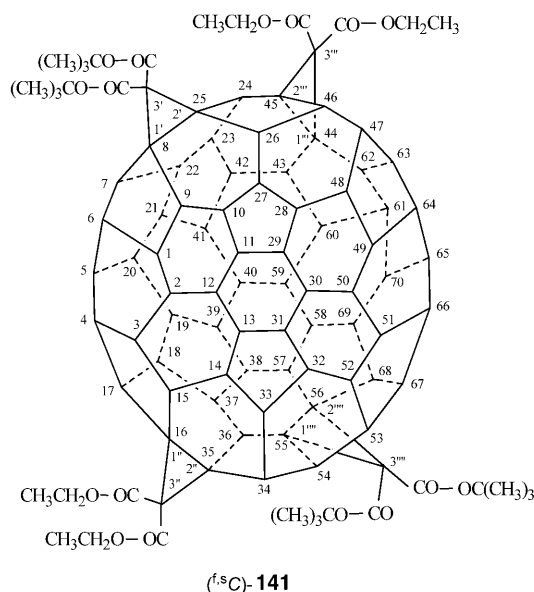
runbspfad (untere Nummerierung von **140**) so gewählt, dass der niedrigste Fullerenlokant („7“) dem ranghöchsten (gemäß CIP-System) Atom des 1,2-Oxazolrings<sup>[\*]</sup> („O“) zugeordnet wird. Diese Bezifferung würde zum falschen Namen 3'-Methyl[1,2]oxazolo[4',5':22,7](C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren<sup>[\*]</sup> führen, da der entsprechende Lokantensatz für die Anellierungsstellen höher als der oben angegebene ist. Die Stereodeskriptoren lauten (f.s.A) bzw. (f.s.C).

**Anmerkung:** Es muss klar im Auge behalten werden, dass die Bestimmung der Konfiguration und die Namensbildung zwei unabhängige Arbeitsgänge sind.

[\*] Die Zuordnung der Stereodeskriptoren wurde gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.

[\*\*] Der Name wurde gegenüber der englischen Druckausgabe gemäß FR-2.2.1<sup>[9]</sup> korrigiert.

[\*] Dieser Name wurde gegenüber der englischen Druckausgabe gemäß FR-2.2.1<sup>[9]</sup> korrigiert.



**141:** 3',3',3''',3''''-Tetra-*tert*-butyl-3'',3'',3''',3''''-tetraethyl-(3'*H*,3''*H*,3'''*H*,3''''*H*-tetracyclopropa[8,25:16,35:44,45:55,56](C<sub>70</sub>-D<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren-3',3',3'',3''',3''',3''',3''',3''''-octacarboxylat)\* (siehe Fußnote zu 77)

## Erklärung:

- Bei dieser Verbindung ist das Stammfulleren achiral, und auch der Ersatz der Substituenten durch den gleichen achiralen Test-Substituenten „T“ (**141a**) liefert eine achirale Struktur.
- Daher wird die zweite Stufe des Substitutionstests (siehe Schema 1) angewendet, d.h., die Substituenten werden durch die achiralen Test-Substituenten T<sub>1</sub> und T<sub>2</sub> ersetzt (**141b**), wobei Gleichheiten und Unterschiede zwischen

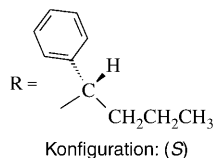
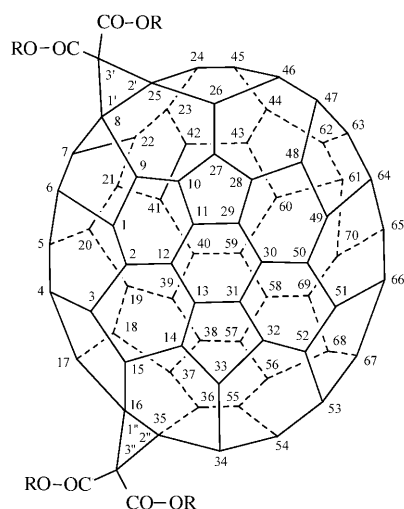
ursprünglichen Substituenten zu berücksichtigen sind. Dabei gelangt man zu einer chiralen Struktur, d.h., die Verbindung hat ein nicht inhärent chirales Substitutionsmuster. Die Cyclopropanringe mit den *tert*-Butylestergruppen haben den höheren CIP-Rang, und die entsprechenden Anellierungsstellen erhalten die niedrigsten Lokanten.<sup>[\*]</sup>

[\*] Die Formel wurde gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.

[\*] Da die *tert*-Butylgruppe auch in der alphabetischen Reihenfolge vor der Ethylgruppe steht, sind in diesem Beispiel die zur Namensbildung und zur Ermittlung der Konfiguration verwendeten Nummerierungsschemata zufällig deckungsgleich.

# Fu-17.6 Fullerenderivate mit achiralen Substitutionsmustern und chiralen Substituenten

Beispiel:



142

**142:** Tetrakis[(1*S*)-1-phenylbutyl]-3'*H*,3''*H*-dicyclopropa[8,25:16,35](*C*<sub>70</sub>-*D*<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren-3',3',3'',3''-tetracarboxylat<sup>[\*]</sup>

Erklärung:

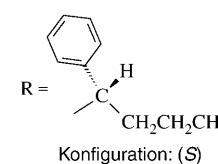
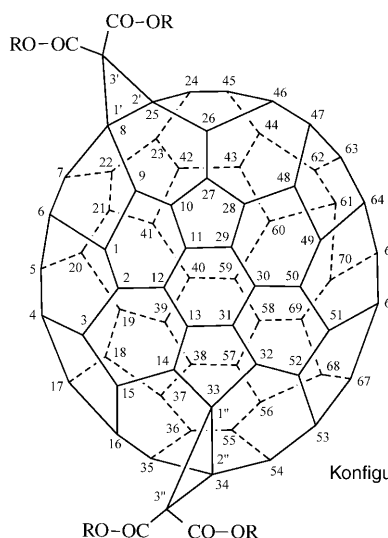
- Dieses Fullerenderivat ist chiral, obwohl Stammfulleren und Substitutionsmuster achiral sind. Ersatz aller Substituenten durch die achirale Testgruppe „T“ (siehe Schema 1) liefert eine achirale Struktur, und da die ursprünglichen Substituenten identisch sind, erübrigt sich die 2. Stufe des Substitutionstests. Bei dessen 3. Stufe (siehe Schema 1) wird danach gefragt, ob die ursprüngliche Verbindung chiral ist. Im vorliegenden Fall lautet die Antwort „ja“ und damit sind die stereogenen Einheiten ausschließlich in den Substituenten angesiedelt. Die Konfiguration dieser stereogenen Einheiten wird durch die üblichen Deskriptoren der organischen Nomenklatur beschrieben.<sup>[17,18]</sup>
- Würden sich in obigem Beispiel die Estergruppen an einem der Cyclopropanringe von denen am anderen unterscheiden, dann enthielte die aus der zweiten Stufe des Substitutionstests hervorgehende Struktur die achiralen Substituenten T<sub>1</sub> und T<sub>2</sub>. Auch in diesem Fall wären Stammfulleren und Substitutionsmuster achiral, und eine etwaige Chiralität der ursprünglichen Verbindung wäre auf stereogene Einheiten in den Substituenten zurückzuführen.

[\*] Die Struktur und die Bezifferung im unteren Dreiring wurden gegenüber der englischen Druckausgabe korrigiert.

# Fu-17.7 Zusammentreffen mehrerer stereogener Einheiten in einem Fullerenmolekül

Gibt es in einem Fullerenderivat mit inhärent chiralem oder nicht inhärent chiralem Substitutionsmuster zusätzlich chirale Substituenten,<sup>[\*]</sup> so ist die Konfiguration beider Arten von stereogenen Einheiten anzugeben. Beide sind unabhängig voneinander, und eine vollständige Konfigurationsbeschreibung umfasst die Angabe beider Arten von Deskriptoren.

Beispiel:



143

**143:** Tetrakis[(1*S*)-1-phenylbutyl]-(<sup>f,s</sup>*C*)-3'*H*,3''*H*-dicyclopropa[8,25:33,34](*C*<sub>70</sub>-*D*<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren-3',3',3'',3''-tetracarboxylat

**Erklärung:** Die stereogenen Zentren der Estergruppen treffen mit dem inhärent chiralen Substitutionsmuster des Fullerenens zusammen. Dieser Umstand wird durch eine Kombination entsprechender Deskriptoren berücksichtigt. Das nicht dargestellte Enantiomer von **143** heißt Tetrakis[(1*R*)-1-phenylbutyl]-(<sup>f,s</sup>*A*)-3'*H*,3''*H*-dicyclopropa[8,25:33,34](*C*<sub>70</sub>-*D*<sub>5h(6)</sub>)[5,6]fulleren-3',3',3'',3''-tetracarboxylat, und entsprechende Namen gelten – mutandis mutatis – für die anderen Stereoisomere.

[\*] Dies gilt auch für Substituenten, die stereogene Einheiten enthalten, aber dennoch achiral sind.

- [1] „Nomenclature and Terminology of Fullerenes: A Preliminary Survey“: *Pure Appl. Chem.* **1997**, 69, 1411–1434.
- [2] „C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>, C<sub>76</sub>, C<sub>78</sub> and C<sub>84</sub>: Numbering,  $\pi$ -Bond Order Calculations and Addition Pattern Considerations“: R. Taylor, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* **1993**, 813–824.
- [3] „Numbering and Naming of Fullerenes by Chemical Abstracts Service“: A. L. Goodson, C. L. Gladys, D. E. Worst, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1995**, 35, 969–978.
- [4] „Glossary of Class Names of Organic Compounds and Reactive Intermediates Based on Structure“: *Pure Appl. Chem.* **1995**, 67, 1307–1375; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/class/>.
- [5] *Compendium of Chemical Terminology, IUPAC Recommendations*, 2. Aufl. (Hrsg.: A. D. McNaught, A. Wilkinson), Blackwell Science, Oxford, **1997**, S. 459.
- [6] „Revised Section F: Natural Products and Related Compounds“: *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 587–643; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>; Ergänzungen und Errata: „Revised Section F: Natural Products and Related Compounds (IUPAC Recommendations 1999). Corrections and Modifications (2004): H. A. Favre, P. M. Gilles, Jr., K.-H. Hellwich, A. D. McNaught, G. P. Moss, W. H. Powell, *Pure Appl. Chem.* **2004**, 76, 1283–1292; deutsche Ausgabe: vorgesehen für *Angew. Chem.* **2005**, 117 (47); deutsche Ausgabe der vorherigen Fassung in Lit. [18].
- [7] „Treatment of Variable Valence in Organic Nomenclature (Lambda Convention)“: *Pure Appl. Chem.* **1984**, 56, 769–778; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/>.
- [8] *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds, Recommendations 1993* (Hrsg.: International Union of Pure and Applied Chemistry), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1993**; deutsche Ausgabe: *Nomenklatur der Organischen Chemie, Eine Einführung* (Hrsg.: G. Kruse), VCH, Weinheim, **1997**. Man beachte auch die zur englischen Ausgabe publizierten Korrekturhinweise: „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>.
- [9] „Nomenclature of Fused and Bridged Fused Ring Systems“: *Pure Appl. Chem.* **1998**, 70, 143–216; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/fusedring/>.
- [10] *Ring Systems Handbook, 1998 Edition*, American Chemical Society, Washington, DC, **1998**.
- [11] „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.
- [12] „Phane Nomenclature Part I: Phane Parent Names“: *Pure Appl. Chem.* **1998**, 70, 1513–1545; <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/pane/>; deutsche Ausgabe: *Angew. Chem.*, in Vorbereitung.
- [13] *Nomenclature of Inorganic Chemistry, Recommendations 1990* (Hrsg.: G. J. Leigh), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1990**; zweiter, korrigierter Nachdruck **1992**; deutsche Ausgabe: *Nomenklatur der Anorganischen Chemie, Deutsche Fassung der Empfehlungen 1990* (Hrsg.: W. Liebscher), VCH, Weinheim, **1994**; korrigierte Ausgabe **1995**, siehe Kapitel 10; siehe auch: „Nomenclature of organometallic compounds of the transition elements“: *Pure Appl. Chem.* **1999**, 71, 1557–1585; deutsche Ausgabe: „Nomenklatur metallorganischer Verbindungen der Übergangsmetalle“: *Angew. Chem.* **2002**, 114, 2043–2058.
- [14] „Source-Based Nomenclature for Copolymers“: *Pure Appl. Chem.* **1985**, 57, 1427–1440; Nachdruck als Kapitel 7 in *Compendium of Macromolecular Nomenclature* (Hrsg.: W. V. Metzomski), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1991**; siehe auch „Generic Source-Based Nomenclature for Polymers“: *Pure Appl. Chem.* **2001**, 73, 1511–1519; deutsche Übersetzung: *Angew. Chem.* **2004**, 116, 652–656.
- [15] „Nomenclature of Regular Single-Strand Organic Polymers“: *Pure Appl. Chem.* **2002**, 74, 1921–1956; in der englischen Ausgabe wurde noch die frühere Fassung – *Pure Appl. Chem.* **1976**, 48, 373–385 – zitiert, von der es eine deutsche Ausgabe gibt: „Nomenklatur der regelmäßigen einsträngigen organischen Polymere“: *Internationale Regeln für die chemische Nomenklatur und Terminologie, Band 2, Gruppe 3, Internationale Union für Reine und Angewandte Chemie (IUPAC), Regeln für die Nomenklatur der Polymere* (Hrsg.: Deutscher Zentrallausschuß für Chemie), Verlag Chemie, Weinheim, **1978**, S. 25–56.
- [16] „Configurational Description of Chiral Fullerenes and Fullerene Derivatives with a Chiral Functionalization Pattern“: C. Thilgen, A. Herrmann, F. Diederich, *Helv. Chim. Acta* **1997**, 80, 183–199.
- [17] „Spezifikation der molekularen Chiralität“: R. S. Cahn, C. K. Ingold, V. Prelog, *Angew. Chem.* **1966**, 78, 413–447; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1966**, 5, 385–414 (Berichtigung: R. S. Cahn, C. K. Ingold, V. Prelog, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1966**, 5, 511). „Grundlagen des CIP-Systems und Vorschläge für eine Revision“: V. Prelog, G. Helmchen, *Angew. Chem.* **1982**, 94, 614–631; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1982**, 21, 567–583.
- [18] *Nomenclature of Organic Chemistry, Sections A, B, C, D, E, F and H, 1979 edition* (Hrsg.: International Union of Pure and Applied Chemistry) Pergamon, Oxford, **1979**; siehe Section E, S. 473–490; die deutsche Ausgabe – *Internationale Regeln für die chemische Nomenklatur und Terminologie, Bd. 1, Internationale Union für Reine und Angewandte Chemie (IUPAC), Regeln für die Nomenklatur der organischen Chemie, Abschnitte A und B* (Hrsg.: Deutscher Zentrallausschuß für Chemie), Verlag Chemie, Weinheim, **1975**, Abschnitt C, VCH, Weinheim, **1990**, Abschnitt F, Verlag Chemie, Weinheim, **1978** – enthält Abschnitt E nicht; eine deutlich gekürzte Fassung findet sich in Abschnitt R-7;<sup>[8]</sup> siehe auch Lit. [17].
- [19] „Phane Nomenclature Part II: Modification of the Degree of Hydrogenation and Substitution Derivatives of Phane Parent Hydrides“: *Pure Appl. Chem.* **2002**, 74, 809–834; deutsche Ausgabe: *Angew. Chem.*, in Vorbereitung.
- [20] „Numbering of Fullerenes“: *Pure Appl. Chem.* **2005**, 77, 843–923.
- [21] „Graphic Representations (Chemical Formulae) of Macromolecules“: *Pure Appl. Chem.* **1994**, 66, 2469–2482.
- [22] Der Originaltext wurde von der Commission on Nomenclature of Organic Chemistry der Organic and Biomolecular Chemistry Division der International Union of Pure and Applied Chemistry betreut. – Dieser Kommission gehörten während der Vorbereitung des Berichts (1998–2001) folgende Personen an: Titular-Mitglieder: B. J. Bossenbroek, F. Cozzi, H. A. Favre (Vorsitzender), B. J. Herold (2000–2001 als Sekretär), J. G. Traynham (bis 1999 als Sekretär), J. L. Wiśniewski, A. Yerin (2000–2001); assoziierte Mitglieder: A. A. Formanovsky, L. Goebels (2000–2001), K.-H. Hellwich, B. J. Herold (1998–1999), M. V. Kisakürek (bis 1999), A. J. Lawson (bis 1999), J. Nyitrai, H. A. Smith, Jr., J. H. Stocker (bis 1999), Susan S.-C. Tsay, A. Yerin (bis 1999); nationale Vertreter: O. Achmatowicz (Polen, 2000–2001), Q.-Y. Chen (China), S. Ikegami (Japan, bis 1999), J. Kahovec (Tschechische Republik), Eun Lee (Korea), L. Maat (Niederlande), G. P. Moss (Großbritannien), J. A. R. Rodrigues (Brasilien), M. S. Wadia (Indien).