

北京大学化学科学译丛-7

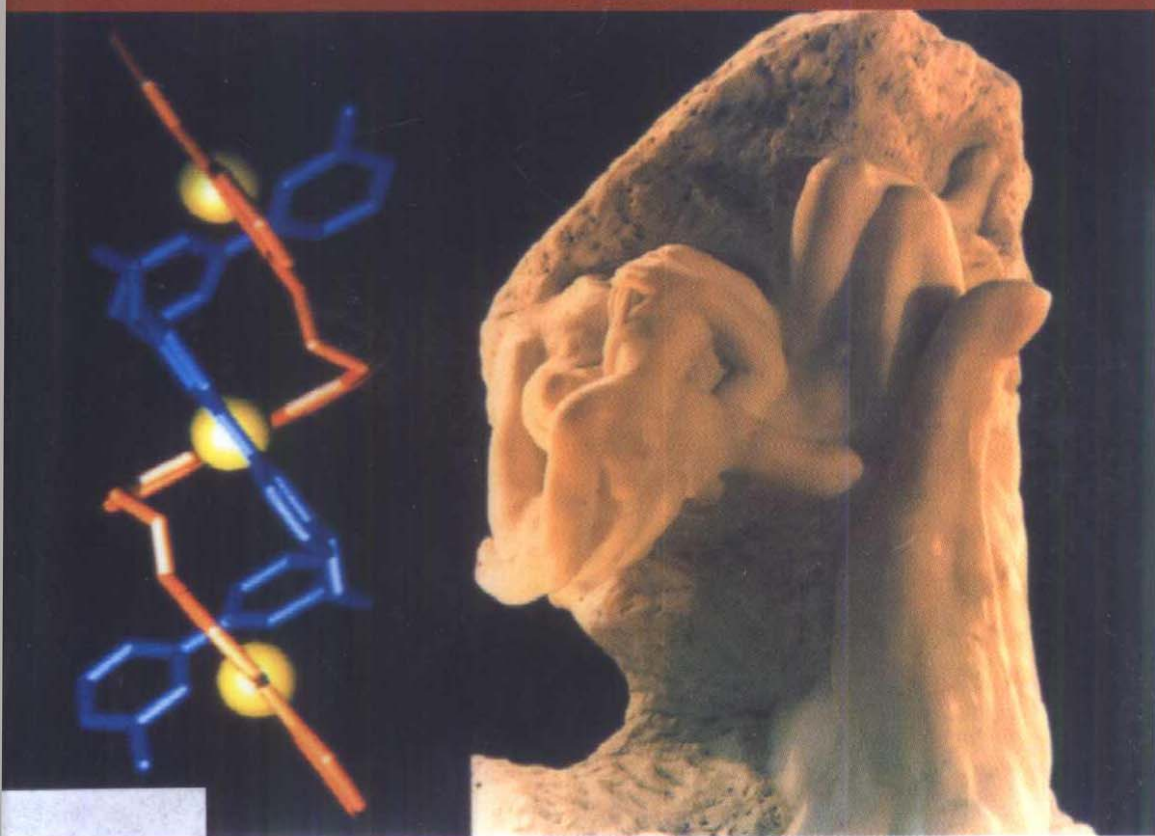
超分子化学

——概念和展望

〔法〕 Jean-Marie Lehn 著

沈兴海等 译

叶宪曾 审校



北京大学出版社

著作权合同登记 图字:01-2001-2162

图书在版编目(CIP)数据

超分子化学:概念和展望/(法)莱恩(Lehn, J.-M.)著;沈兴海等译. —北京:北京大学出版社, 2002. 7

ISBN 7-301-05471-8

I. 超... II. ①莱... ②沈... III. 超分子结构—化学—研究 IV. 0631.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2002) 第 014229 号

书 名: 超分子化学

著作责任者: [法]Jean-Marie Lehn 著, 沈兴海等译, 叶宪曾审校

责任编辑: 赵学范

标准书号: ISBN 7-301-05471-8/O·0536

出版者: 北京大学出版社

地址: 北京市海淀区中关村北京大学校内 100871

网址: <http://cbs.pku.edu.cn>

电话: 出版部 62754962 发行部 62754140 编辑部 62752021

电子信箱: zpup@pup.pku.edu.cn

排版者: 兴盛达打字服务社 62549189

印刷者: 中国科学院印刷厂

发行者: 北京大学出版社

经销者: 新华书店

850 毫米×1168 毫米 32 开本 11.5 印张 300 千字

2002 年 7 月第 1 版 2002 年 7 月第 1 次印刷

定 价: 20.00 元

目 录

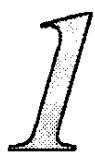
1. 从分子化学到超分子化学	(1)
2. 分子识别	(12)
2.1 识别, 信息, 互补	(12)
2.2 分子受体——设计原理	(14)
2.3 球形识别——金属阳离子穴状配合物	(18)
2.4 大三环穴醚配合物的四面体识别	(27)
2.5 铵离子和有关底物的识别	(29)
2.6 中性分子的结合和识别	(32)
3. 阴离子配位化学和阴离子底物的识别	(34)
4. 共受体分子和多重识别	(39)
4.1 二核和多核金属离子穴状配合物	(41)
4.2 双位点共受体对分子长度的线性识别	(43)
4.3 多位点共受体——环芳受体, 两亲受体, 大分子笼	(46)
4.4 金属受体的多重识别	(53)
4.5 超分子动力学	(54)
5. 超分子的反应性能和催化作用	(58)
5.1 活性的大环阳离子受体分子的催化	(60)
5.2 活性阴离子受体分子的催化作用	(62)
5.3 环芳类受体的催化	(64)
5.4 超分子金属催化	(64)
5.5 共催化: 合成反应的催化	(65)
5.6 生物分子和非生物催化	(69)

6. 传输过程与载体设计	(71)
6.1 载体调节传输	(72)
6.2 阳离子传输过程——阳离子载体	(73)
6.3 阴离子传输过程——阴离子载体	(75)
6.4 耦合传输过程	(77)
6.4.1 氧化还原梯度下的电子耦合传输	(77)
6.4.2 pH 梯度下的质子耦合传输	(79)
6.4.3 光耦合传输过程	(80)
6.5 跨膜通道传输	(82)
7. 从超分子到超分子有序体	(84)
7.1 非均相的分子识别, 超分子固体材料	(84)
7.2 从内受体到外受体——表面分子识别	(86)
7.3 分子和超分子成型	(88)
7.4 超分子异相催化	(89)
8. 分子和超分子器件	(91)
8.1 分子识别、信息和信号及信息化学	(92)
8.2 超分子光化学, 分子和超分子光器件	(93)
8.2.1 光转化和能量转移器件	(94)
8.2.2 对光敏感的分子受体	(98)
8.2.3 光活性器件中的光诱导电子迁移	(100)
8.2.4 超分子物种的光诱导反应	(102)
8.2.5 超分子物种的非线性光学特征	(103)
8.2.6 光化学空穴氧化中的超分子效应	(106)
8.3 分子和超分子电子器件	(107)
8.3.1 超分子电化学	(108)
8.3.2 电子导电器件和分子导线	(109)
8.3.3 极化的分子导线, 检波器件	(114)
8.3.4 修饰的和可开关的分子导线	(115)

8.3.5	分子磁器件	(115)
8.4	分子和超分子离子器件	(117)
8.4.1	管状中间相	(119)
8.4.2	离子响应单分子层	(120)
8.4.3	“束”形分子和分子通道的“管束”通道	(120)
8.4.4	分子质子学	(124)
8.4.5	离子和分子传感器	(127)
8.5	转换器件和信号,信息化学	(128)
8.5.1	转换器件:信号和信息	(128)
8.5.2	光转换器件	(132)
8.5.3	电转换器件	(136)
8.5.4	离子和分子过程的转变	(138)
8.5.5	机械转换过程	(141)
9.	自发过程——程序化的超分子体系	(144)
9.1	自组装和自组织	(144)
9.2	程序化的超分子体系	(149)
9.3	无机结构的自组装	(150)
9.3.1	双链螺旋和三链螺旋金属复合物的自组装: 螺旋复合物	(152)
9.3.2	多组分的自组装	(161)
9.3.3	金属离子的超分子阵列:书架结构、梯子 结构和栅栏结构	(166)
9.4	有机超分子结构的自组装	(168)
9.4.1	通过氢键自组装 Janus 分子	(169)
9.4.2	分子识别引导的组织化相的组装	(173)
9.4.3	超分子聚合物化学	(181)
9.4.4	有序固态结构中的分子识别引导自组装	(182)
9.4.5	物理化学的研究方法	(188)

9.5	自我识别:智能化体系范例	(189)
9.6	超分子的合成,辅助作用及复制	(194)
9.6.1	超分子合成	(194)
9.6.2	超分子的辅助合成	(195)
9.6.3	复制,自我复制	(197)
9.7	超分子的手性和自组装	(200)
9.8	超分子材料——纳米化学	(203)
9.9	化学离子学	(205)
10.	展望	(208)
10.1	从结构到信息——化学智能化的挑战	(208)
10.2	通向复杂化的步骤	(210)
10.3	化学和生物,创造和艺术	(213)
11.	动态组合化学和虚拟组合库	(217)
11.1	前言	(217)
11.2	讨论	(218)
11.2.1	成分和过程	(221)
11.2.2	互补形态形成——铸造和成型	(224)
11.2.3	动态组合方法的实施	(226)
11.2.4	动态组合材料	(229)
11.3	结 论	(232)
	参考文献	(233)
12.	程序化化学体系——分子信息的多重子程序 和多重处理/表达	(236)
12.1	前言	(236)
12.2	程序化化学体系	(237)
12.3	从相同配体绳股产生两种不同的螺旋物	(238)
12.4	从相同配体绳股产生两种不同的金属大环	(240)
12.5	从相同分子绳股产生两种不同的氢键有序体	(242)

12.6 推测—蕴涵—展望	(243)
参考文献	(246)
13. 超分子化学/科学 —— 一些推测和展望	(249)
13.1 前言	(249)
13.2 从凝聚态物质到组织化物质:信息范例	(250)
13.3 动态化学——超分子材料:可编程的, 动态的,组合的材料	(255)
13.3.1 动态化学	(255)
13.3.2 超分子材料,动态材料	(256)
13.3.3 超分子聚合物化学	(257)
13.3.4 纳米化学和纳米材料	(258)
13.3.5 动态器件	(259)
13.4 面向适应化学	(260)
13.5 结论:信息物质科学	(261)
参考文献	(262)
附录	(264)
A. 专论,编辑的书目,专刊	(265)
B. 参考文献	(267)
C. 参考文献中的注释	(319)
D. 汉-英专业词汇对照表	(324)
E. 英-汉专业词汇对照表	(337)



从分子化学到超分子化学

在宇宙大爆炸之初,物理占主导地位。当温度较为温和时,化学随之产生。基本粒子形成原子,这些原子组合成越来越复杂的分子,分子接着缔合成聚集体和膜——由此确定了产生生命的原始细胞。

化学是关于物质及其变化的一门科学,而生命是其最高的表现形式。它提供了具有特定性质的结构,并发展了结构合成的方法。化学为我们理解物质现象,并有能力驾驭、改变、控制这些现象,进而发现它们新的表现形式起到了最原初的作用。

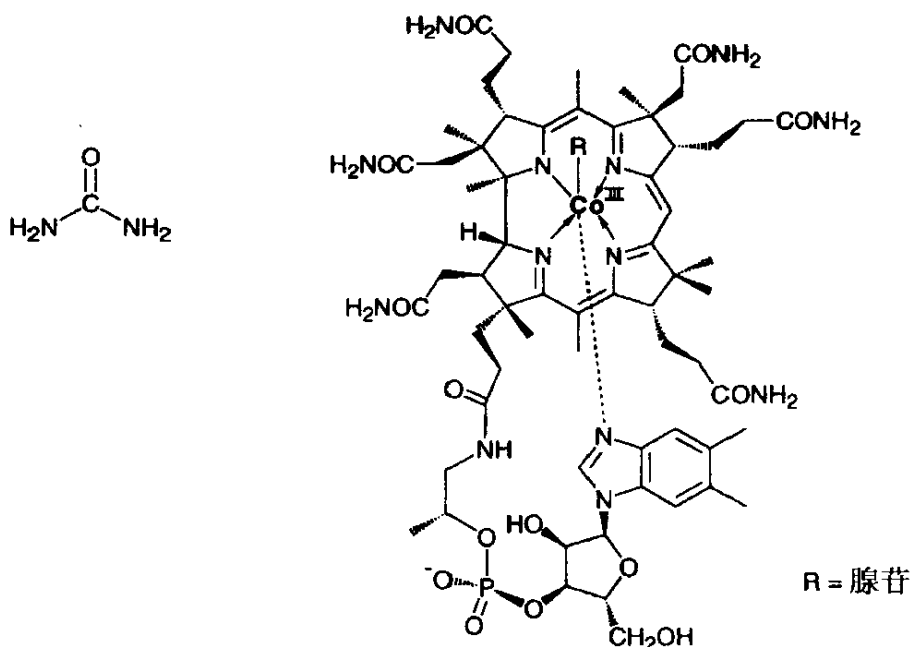
化学也是一门关于转化的科学,是信息中心,是简单和复杂、物理定理和生命规律、基础和应用之间的交汇点。因此,如果可以从学科交叉性来定义化学的话,同样也可以从其研究的客体和方法来定义它。

就方法而言,化学是关于(物质)相互作用、变化和模拟的科学。而就其研究客体——分子和材料而言,化学体现出了它的创造力。化学合成具有产生带有新性质的新分子、新材料的威力。之所以说其新,是因为它们在通过原子排列的重组生成各式各样的新组合、新结构,而被创造出来之前是不存在的^[1.1]。

自从 1828 年 Friedrich Wöhler^[1.2]合成出尿素分子 150 年以来,分子化学已发展了一系列高度复杂、有效的方法来构筑具有前所未有的复杂性的分子结构,而这是在准确无误的被控条件下,通过打破或形成原子间共价键得以实现的。

有机合成以压倒一切的姿态迅速发展,产生了一系列辉煌的成

就,这就是过去 50 年中完成的重要的合成。在这些合成中,包含着精美的策略以及巧夺天工的效率和选择性。从 Wöhler 合成尿素到 Robert B. Woodward^[1.3]和 Albert Eschenmoser^[1.4]在上百位合作者的参与下合成维他命 B₁₂,化学已走过了漫长的历程。



由此可见,分子化学已在共价键基础上建立了起来。如今已到了考虑非共价分子间作用力的时代了。在基于共价键的分子化学之外形成了超分子化学的领域,其目标是控制分子间价键。

超分子化学的下一步目标是增加分子之外的、通过非共价相互作用而形成的超分子和有组织的多分子体系的复杂性。

超分子化学如同关于分子的“社会学”。非共价相互作用决定了组分间的价键、相互作用和反应,简言之,即是分子的个体和整体的行为:它们作为众多具有自身组织的分子个体组成的整体的“社会结构”;它们的稳定性和易破损性;它们缔合或析离的倾向;它们的选择性、“可选择亲和力”、种类结构、互相识别的能力;它们的动力学,对排列、分级、张力、运动、重新取向的柔性或刚性;它们彼此之间的相互作用和转换。

分子间的相互作用是形成高度专一性识别、反应、输运、调控等过程的基础。这些过程是在生物学中出现的,诸如底物与受体蛋白的结合、酶反应、多蛋白质复合物的组装、免疫学的抗原-抗体结合、分子信息的读出、基因编码的翻译和转录、DNA 结合蛋白的基因表达的调控、病毒进入细胞、神经转换信号的感应、细胞识别等等。要设计出高效率、高选择性的人造无生命体系,则需要在特定的分子建筑内实现非共价分子间作用力(静电作用力、氢键、范德华力等)在能量和立体化学特征上的恰当的处置。在这样做的过程中,化学家从巧妙无比的生物过程中得到了灵感,并证实如此的高效率、高选择性、高速率是能够真正实现的,对此,化学家倍受鼓舞。然而,化学家不局限于那些具有生物相似性的体系,而仍在努力创造出新物种、探索新过程。

超分子化学是一门高度交叉的学科,它涵盖了比分子本身复杂得多的化学物种的化学、物理和生物学特征,并通过分子间(非共价)键合作用聚集、组织在一起的。这个相对年轻的领域已被定义和概念化成一个结构严谨的体系,其基础涉及到有机化学及构造分子的合成路线、配位化学及金属离子-配体复合物、物理化学及对相互作用力的实验和理论研究、生物化学及一切起源于底物缔合和识别的生物过程、材料科学及固体的机械性质。处于化学、生物学和物理的交汇点的超分子化学研究可从多种学科中汲取营养,因而具有广阔的发展前景是它的主要特点。超分子化学与凝聚态物理有渊源关系,并在大分子有序体生物学的基础上扩展,现已发展成了超分子科学。超分子科学的范围如此广阔,对化学家的创造性想像力是一种挑战,也是一种激励。

因此,超分子化学作为包含物理和生物现象的化学学科的前沿领域,已得到快速发展。考虑到该领域的异常活跃以及庞大的文献资料,在这里不可能对已取得的大量结果做出评判,也不太可能对整个领域以全面的考虑^[1.5, 1.6]。本书侧重于概念上的框架、物种的分

类、过程的类型,并对以前的综述(特别是[1.7~1.9])作进一步补充。书中的例证主要(但不仅仅)取材于我们自己的工作。

在任何科学领域,新旧事物总是相关的。超分子化学的基础可追溯到哪里?正如 Paul Ehrlich 所认识到的:分子如不结合,就不会起作用(*“Corpora non agunt nisi fixata”*),由此他引入了受体的概念^[1.10]。但结合一定是有选择的——这是 Emil Fischer 在 1894 年明确提出的观点^[1.11],其著名的表明几何互补性的“锁和钥匙”立体匹配原理是对此观点的形象描述,从而为分子识别打下了基础。选择确定性最终需要相互作用,即参与者之间的亲和力,这可能与 Alfred Werner 提出的配位的观点^[1.12]相关。在这一点上,可以把超分子化学看成是广义的配位化学^[1.13]。

上述三个概念,即“确定”(fixation)、识别(recognition)和配位(coordination),构成了超分子化学的基础。但为什么超分子化学的诞生经历了如此长的时间呢?分子的缔合已被认识和研究了很长时间^[1.14],“*Übermoleküle*”这一术语甚至早在 20 世纪 30 年代中期就已造出来,用于描述那些由饱和配位物种的缔合而形成的更高组织的客体(如醋酸的二聚体)^[1.15]。超分子组织也早已被知道在生物学中起重要作用^[1.16]。但一个新领域的出现和快速发展需要同时符合至少三个因素:(i) 对新概念的内涵,对分散的、似乎不相关的观察、数据、结果的意义,以及它们在新概念下作为一整体的认识。(ii) 要有工具来研究该领域中的对象。由于非共价作用的低能量,超分子物种的相对不稳定使它们较难以表征,而当今用于分析结构和性质的方法(IR, UV, 尤其是 NMR, 质谱和 X 射线衍射等)起了主要作用。(iii) 科学领域的成熟,使得对新领域产生的共鸣非但在本学科中能看到,而且在密切相关的、以及只在一定程度上相关的领域中也能看到。简言之,新领域一经展现,就会以“我找到了”一声惊呼那样的明显性来宣称自己的成立。超分子化学正是这种情况,这从 25 年来其发展和渗透到别的科学领域的速度中可见一斑。

超分子化学的概念和术语 Roland Barthes 曾写道:“*Le langage est une législation, la langue en est le code*”^[1.17]。就我们现在的目的而言,如将化学比做“立法”,则用于命名对象的词汇构成了“法规”,由此可通向某个具体领域,化学就有了传递信息的手段。

化学最根本的语言是由化学式和结构式组成的,并用它们的相互转化这种“句法”相互联系。它描述的是一个客观实在,它是词汇和书本的“具体化”,其标识被“铭刻”在了物体上^[1.18, 1.19]。

在一个新的科学领域出现、成长、成熟的过程中,基本概念会相继出现,新的术语也会产生,用来定义这些概念和描述新领域中的对象。

这样的概念化和命名对塑造这个新领域起到了非常重要的作用,也为富有创造性的想像力提供了基础。事实上,人们可能因那些充满魅力的词汇而让自己的想像力得以延伸,也会被那些概念所具有的激动人心的力量所吸引。

一个定义的核心通常是清晰、准确的,但其边界往往是模糊的,不同领域的相互渗透由此产生。这些模糊的地方实际上起到了正面的作用,不同领域间可以互相吸取有用的东西而得到丰富。很显然,超分子化学及其术语正是属于这种情况^[1.20]。

正如我们现在所知道的,这个领域起源于碱金属阳离子被天然^[1.21~1.23]和人工合成的大环和多环配体,即冠醚^[1.24, 1.25]和穴醚^[1.26, 1.27]的选择性结合。它拓展后导致了分子识别^[1.27]的出现和证明为一新的化学研究领域,进一步延伸到分子间相互作用和过程,并广泛扩展到其他领域后诞生了超分子化学。分子识别化学也是“主客体化学”^[1.28]的核心内容。

超分子化学的概念和术语是在 1978 年^[1.29](又见[1.17])引入的,作为对先前工作的总结归纳和发展,而超分子化学的种子已经植根于其中^[1.27, 1.30]。超分子化学定义的表述是:正如基于共价键存在着分子化学领域,基于分子有序体和分子间价键而存在着超分子

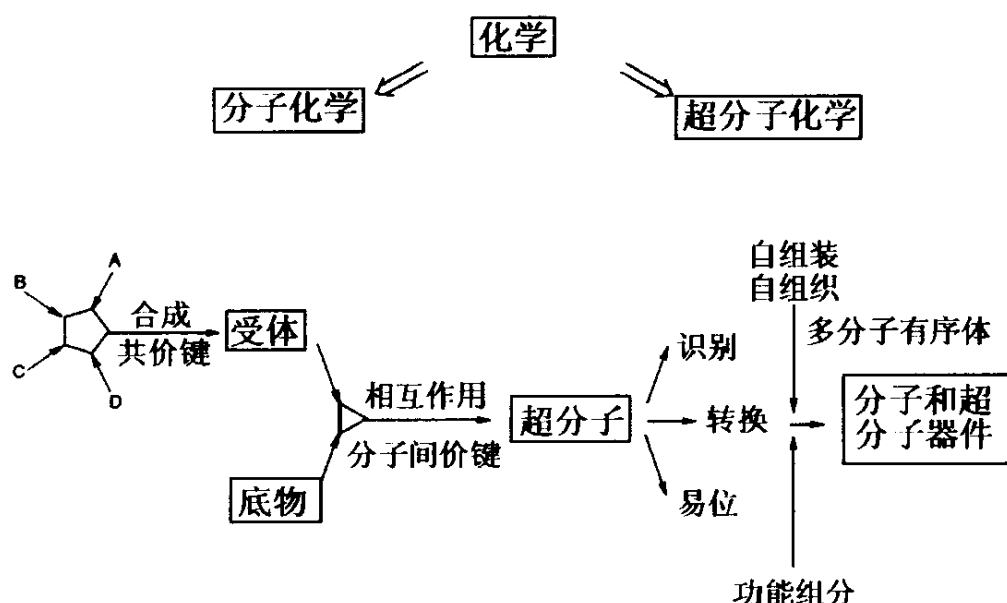


图 1.1 从分子化学到超分子化学:分子、超分子、分子和超分子器件

化学。该定义又见下图(图 1.1)^[1.29]所示:

之后,超分子化学的概念在不同情形下被重新表述过,例如:超分子化学可定义为“分子之外的化学”,是有关于两个或两个以上的化学物种通过分子间作用力缔合在一起而形成的具有更高复杂性的有组织实体^[1.7]。

概念之宽广,尤其是其凝聚力变得越来越明显,以至于近年来加入该领域的实验室和研究人员在很大范围内的出版物、书籍、期刊、会议和专题研讨会(其部分参见附录)上发表的工作,其数量以爆炸性的速率增长。

超分子化学的发展使其概念和对象充满活力,浑然一体,并逐渐生长出或渗入到新的研究领域。然而作为一整体,其词汇用语仍然不完全,尽管它们已得到发展,而且被越来越广泛地接受和使用。一些名词是从现有别的领域,尤其是从配位化学和生物学中借鉴并采用的。

一个化学物种是通过其组分、通过把这些组分连在一起的价键

的性质,以及由此产生的空间(几何、拓扑)特征而被定义的。超分子化学的研究对象是:“超分子实体(supramolecular entities),即具有分子本身的特征并由这些特征来定义的超分子(supermolecule)。可以这样说,超分子之于分子和分子间价键,就如同分子之于原子和共价键”^[1.7, 1.8]。因此,超分子代表了继基本粒子、原子核、原子和分子之后的下一个层次的物质的复杂性。用普通语言来表述,则可以说,化学术语中的原子、分子、超分子相当于字母、单词和句子。

超分子物种是由其组分、建筑或超结构的排列,和把组分连在一起的分子间价键的性质来表征的。它们具有非常确定的结构、构象、化学热力学、动力学和分子动力学性质。不同类型的相互作用力是可区分的,它们代表了不同程度的强度、取向、以及对距离和角度的依赖性。这些作用力是:金属离子配位键、静电引力、氢键、范德华相互作用和给体-受体相互作用等等。它们的强度分布由氢键的弱到中等,到金属离子配位键的强或非常强。前者可使得类似于酶-底物这样的结合达到稳定;而后者通过单个金属离子,其强度可达到包含有很多独立相互作用的抗原-抗体作用的强度范围(或更强一些)。然而,分子间作用力通常比共价键要弱,因此超分子物种的热力学稳定性不如分子,但动力学上更易变,因而更具动态柔顺性。所以,超分子化学涉及的是软化学键,代表了一门“软化学”。

鉴于配体这个不是很专一的术语常使用于一个复合物中的组分,超分子化合物中的组分被命名为受体(ρ)和底物(σ)^[1.27, 1.31],其中底物通常指被结合的较小组分。通过这一术语,与生物学上受体-底物相互作用以及它们高度确定的结构和功能性质联系了起来。而且,很容易从一种术语转到另一种术语。“包合物”和“主客体”这两个名词也包括仅在固态下存在且不属于严格意义上的分立超分子的那些物种(称之为笼形包合物)^[1.32, 1.33, A.18],但它们确实应属于超分子固态物种。

一个特定的底物 σ 与受体 ρ 选择性地结合后产生了超分子 $\rho\sigma$,

其中包含了分子识别过程。如果受体除了有结合位点外,还有反应功能,则它可能在被束缚的底物上产生一化学变化而起超分子试剂或催化剂作用。亲油的膜溶性受体可作为载体使被束缚的底物易位。因此,分子识别、转换、易位代表了超分子物种的基本功能。多位点共受体的几个结合亚单元的交互作用则产生更复杂的功能。结合组织化的多分子有序体和相(层结构、膜、囊泡、液晶等),功能超分子可以导致分子和超分子器件的发展。以上整体情况如图 1.1 所示。近期的研究方向涉及到自发过程(自组装、自组织、复制)和程序化的超分子体系的设计。所有这些特征预示了分子信息是存在的,并在起作用,这一观点在超分子化学中是基本的,也是关键性的原则。上述及别的一些概念和术语将在以下的有关章节中描述和说明。

需要提出来的一点是如何使用“supramolecular”和“super-molecule”这两个词。超分子化学已成为有凝聚力和吸引力的概念,在此那些独立发展的领域已很自然地找到了自己的位置。“supramolecular”一词已特别用于大的多蛋白结构体系和组织化的分子有序体^[1.16]。另一方面,在理论化学中,将水二聚体这样的分子缔合物作为单一实体来处理的计算机程序被称为超分子(super-molecule)方法^[1.34, 1.35]。考虑到这两个词已经存在且单独使用,或许可以认为“supramolecular chemistry”是一个更广义的术语,涉及到所有类型的超分子实体,从含义很明确的超分子(supermolecules)到引申后的或多或少组织化的多分子缔合物。“supermolecular chemistry”一词则可限定在特指(含义确定的)超分子本身的化学。

因此,超分子化学分成部分交叉的两大领域:

(1) 超分子

指几个组分(一个受体及一个或多个底物)在分子识别原理的基础上按照内装的构造方案通过分子间缔合而形成的含义明确的、分立的寡聚分子物种。

(2) 超分子有序体

指数目不定的大量组分自发缔合产生某个特定的相而形成的多分子实体。这里,特定的相(诸如薄膜、层结构、膜结构、囊泡、胶束、液晶相、固态结构等)或多或少具有确定的微观组织和取决于本性的宏观性质。这样,分子缔合就涵盖了合理的、连贯的方法,从最小的二聚体,到最大的组织化的相以及对它们有目的的操纵。继续上面所作的与普通语言的比较,多分子超分子实体应是一本书。

由于超分子化学概念的出现,新术语被引入,旧概念被重新改造,以此来描述不同种类的化合物及不同类型的性质。正如这个领域自身所表明的,从分子化学到超分子化学的过渡导致了对象和目标从结构和性质变成了体系和功能。

在命名超分子化学的对象,即超分子的时候,造成了一些特殊的问题。受体和底物本身是共价键结构,遵守日内瓦会议系统命名,但有必要确立前后一致的一套规则来描述一个超分子物种组分之间的关联。用于过渡金属配位化合物的一些惯例可作为出发点,如表示配位原子的符号 κ , 用于配位基团符号 η , 桥联配体符号 μ [1.36]。

描述被结合底物与受体间的相对空间位置也需要一些方式。外部加合复合物可以表示成 $[A, B]$ 或 $[A//B]$, 而包含的数学符号 $\subset$ [1.27] 和交叉的数学符号 $\cap$ [1.37] 已被引入, 分别表示 σ 与 ρ 的包含, 即 $[\sigma \subset \rho]$, 及部分交叠, 即 $[\sigma \cap \rho]$ 。

分子识别的高度选择过程必然具有立体化学的性质。因此,超分子立体化学可以限定在从超分子一直到多分子有序体这样一个范围内。超分子组分之间不同的空间排布导致了超分子立体异构体的出现。它们最终的内转换依赖于将它们结合在一起的作用力的性质,即分子间作用能随距离和角度的变化。于是出现了分子间构象分析,正如分子内的构象分析。目前,整合出一个内在联系密切的全貌的时机已成熟,由此可在实验和理论的基础上呈现、描述超分子化学领域。有关超分子手性的特别之处在于受体-底物结合中的手性

识别(参见 2.5 节), 以及与超分子(如超分子旋光异构体)和超分子有序体(参见 9.7 节)的形成相关的手性特征。

用于分子设计的计算方法^[1.38~1.41]的发展为建立详尽而又有预测能力的理论超分子化学提供了途径。现在已经有了重要的见解, 而更多的见解将在研究超分子特征(相互作用力、结构、动力学、结合常数、介质效应等)的理论和实验的共同作用下得到^[1.35, 1.42~1.50, A.37]。

超分子化学的产生和发展使人清楚地看到, 概念、术语和实际的研究是如何平行地演化, 同步成长, 并互相反馈。由新的结果提出了概念, 对术语也有需求; 新的概念和名词引导新的研究方向, 使富有创造性的想像延伸到未经探索的领域。

Roland Barthes 也注意到语言是带有压制性的: “... *toute langue est un classement et (que) tout classement est oppressif*”, 和 “*un idiome se définit moins par ce qu’il permet de dire que par ce qu’il oblige à dire*”^[1.17] (“...每一种语言都是一种归类, 而每一种归类都是带有压制性的”; “成语之所以成为成语, 更多的是通过它不得不说的来实现的, 而不是通过它被允许说的来实现的”)。因此, 塑造一个新领域的术语必须避免成为一个负担, 使想像力受到约束, 而应该在活跃的化学研究和编纂命名系统之间实质性的相互关联中建立起来。

目前, 超分子化学的术语正在形成之中, 其词汇和句法正逐步发展, 一个由概念、术语和琐碎的名词组成的体系正在产生之中。发展出系统的专有名词将成为必需, 它能以全面的方式命名超分子物种, 并使它们能存入数据库或从中检索出来。这种方法与分子物种相似, 化学信息学的实际操作中也有类似需要。特别是随着这个领域的发展和延伸, 需要有规则来指明作用对、结合位点和相互作用的类型、数目和排布, 以及超分子结构体系的类型等。这同样适合于受限的物种, 如内锁型结构或多分子有序体。我们可以建议把超分子物