

Nomenklatur der Rotaxane und Pseudorotaxane**

Obmann und Übersetzer: *Ida Schomburg**

Dieser Text bietet ausführliche Definitionen von Rotaxanen, Pseudorotaxanen, ihren Komponenten und anderen sie betreffenden Begriffen. Einheitliche Prinzipien zur Klassifizierung und Benennung der Rotaxan- und Pseudorotaxantypen werden beschrieben und mit Beispielen illustriert. Des Weiteren werden Empfehlungen für eine eindeutige Benennung von Rotaxan-isomeren mit speziellen Deskriptoren gegeben, die Informationen zu den Positionen der Rotaxankomponenten enthalten.

Einleitung

Die erste zeichnerische Darstellung eines Rotaxans findet man in einer Veröffentlichung von 1958,^[1] in der solche Verbindungen als in situ gebildete Zwischenstufen bei der Synthese von [2]Catenanen postuliert wurden. 1961 wurden sie als neue Verbindungsklasse vorgeschlagen, jedoch damals noch nicht mit der Bezeichnung Pseudorotaxane oder Rotaxane,^[2] und 1967 wurde ihre Existenz bewiesen.^[3–5] Erst 1971 wurde von Schill^[6] ein Nomenklatorsystem eingeführt. Im Jahr 2000 schlugen Vögtle et al.^[7] ein generisches Nomenklatorsystem vor, in dem Schills Beschreibung um Informationen zu mechanischen oder kovalenten Bindungen zwischen den Komponenten erweitert wurde, um so eine Unterscheidung zwischen intermolekularen und intramolekularen Rotaxanen zu ermöglichen. Doch auch mit dieser Nomenklatur ist es nicht möglich, die Gesamtheit aller beschriebenen Rotaxane eindeutig zu benennen. Im Folgenden wird eine systematische Nomenklatur für Rotaxane vorgestellt, mit der deren Strukturen, Zusammensetzungen und Isomeren beschrieben werden können.

Diese Dokument beschränkt sich auf Rotaxane, bei denen keine der Komponenten ein Makromolekül ist, jedoch können die Regeln ebenso auf makromolekulare Strukturen angewendet werden. Spezielle Empfehlungen für Rotaxane mit mindestens einer polymeren Komponente werden gesondert veröffentlicht werden.

Da Rotaxanstrukturen oft sehr groß sind, wird im Folgenden meist eine schematische Darstellung gewählt. Vollständige chemische Formeln von Rotaxanen und die zugehörigen systematischen Namen sind im Abschnitt ROT-6 zu finden.

Einen ausführlichen Überblick über die Rotaxanliteratur bieten die Zitate [8–19].

ROT-1 Glossar

ROT-1.1 Rotaxan (generisch)

Als Rotaxan wird eine molekulare Anordnung bezeichnet, die mindestens ein Molekül mit einem linearen Bereich enthält, der durch mindestens einen makrocyclischen Teil eines anderen oder desselben Moleküls gefädelt ist, wobei große Endgruppen das Herausgleiten aus dem Makrocyclus verhindern. In Abbildung 1 ist ein Beispiel für ein Rotaxan gezeigt.

[*] Dr. I. Schomburg
Technische Universität Braunschweig
Bioinformatik und Biochemie
Langer Kamp 19b, 38106 Braunschweig (Deutschland)
Fax: (+49) 531-391-83
E-Mail: i.schomburg@tu-bs.de

[**] Copyright© der englischen Fassung, die unter dem Titel „Nomenclature for Rotaxanes and Pseudorotaxanes“ von A. Yerin (Moskau) für die Veröffentlichung in *Pure Appl. Chem.* **2008**, *80*, 2041–2068^[27] vorbereitet wurde: International Union of Pure and Applied Chemistry, 2008. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation.

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. Empfehlungen von Themen und Ableuten sind willkommen.

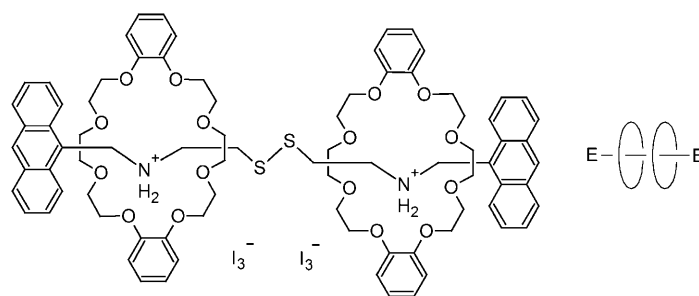


Abbildung 1. Ein [3]Rotaxan und seine schematische Darstellung. Die Endgruppen der Achsenkomponente sind mit E bezeichnet.

Anmerkung: Das *Compendium of Chemical Terminology* der IUPAC definiert Rotaxane als Moleküle, in denen ein Ring ein anderes, stabförmiges Molekül umschließt, dessen Endgruppen zu groß sind, um durch die Ringöffnung zu passen; das stabförmige Molekül wird also ohne kovalente Bindungen in Position gehalten.^[20] Die hier verwendete Definition ist allgemeiner, um für die große Vielfalt beschriebener Rotaxanstrukturen geeignet zu sein.

ROT-1.2 Makrocyclische Komponente (makrocyclisches Molekül)

Sie verfügt über mindestens einen Ring, der groß genug ist, um auf den linearen Bereich eines anderen Moleküls aufgefädelt zu werden. Solche großen Ringe können „auffädelfar“ genannt werden, um sie von anderen, kleineren Ringen innerhalb einer komplexen makrocyclischen Komponente zu unterscheiden. Eine makrocyclische Rotaxan Komponente wird mitunter als „Rad“ bezeichnet. Beispiele für makrocyclische Moleküle enthält Abbildung 2.

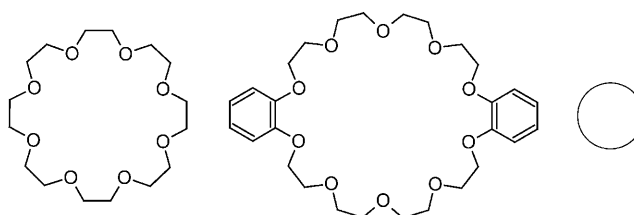


Abbildung 2. Makrocyclische Moleküle und ihre schematische Darstellung.

Anmerkung 1: Während einfache makrocyclische Komponenten nur einen auffädelfaren Ring enthalten, können komplexere makrocyclische Komponenten auch mehrere miteinander verbundene Ringe enthalten. Einige generische Typen sind in den Abschnitten ROT-3 und ROT-5 beschrieben, konkrete Beispiele finden sich in Abschnitt ROT-6.

Anmerkung 2: In der Rotaxanliteratur wird häufig der Begriff „Makrocyclus“ verwendet, der hier eine Kurzform (und Abkürzung) für makrocyclisches Molekül ist und nicht für cyclisches Makromolekül. Cyclische Makromoleküle werden fast nie als cyclische Komponente in Rotaxanen eingesetzt. Der Gebrauch des Wortes Makrocyclus in der Rotaxanterminologie ist unvereinbar mit der IUPAC-Definition eines Makrocyclus als eines cyclischen Makromoleküls oder eines makromolekularen cyclischen Bereichs eines Makromoleküls.^[21] Abbildung 3 zeigt ein Beispiel eines cyclischen Makromoleküls. Wegen der Mehrdeutigkeit des Begriffs „Makrocyclus“ sollte dieser in der Rotaxanliteratur daher nicht verwendet werden.

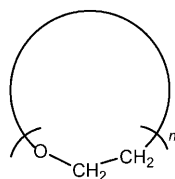


Abbildung 3. Ein Beispiel für eine cyclisches Makromolekül.

ROT-1.3 Achsenkomponente (generisch)

Bei ihr handelt es sich um ein Molekül mit mindestens einem linearen Bereich, auf den mindestens ein makrocyclisches Molekül aufgefädelt ist.

Anmerkung 1: Die einfachste Achsenkomponente besteht aus einem linearen Bereich und Endgruppen, die groß genug sind, um ein Herausgleiten aus der makrocyclischen Komponente zu verhindern; solche Komponenten werden oft als Hantel oder manchmal als Radachse bezeichnet. Abbildung 4 zeigt ein Beispiel.

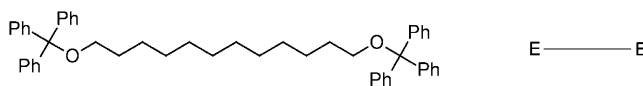


Abbildung 4. Ein Beispiel für eine Achsenkomponente und ihre schematische Darstellung.

Anmerkung 2: Der Begriff „linear“ hat bei Rotaxanen eine ziemlich breite Bedeutung. Der lineare Bereich der eingefädelten Achsenkomponente kann eine unverzweigte Kette sein, aber auch kleine cyclische Fragmente und Substituenten, die das Einfädeln in das makrocyclische Molekül nicht verhindern, enthalten.

Komplexere Achsenkomponenten können mehrere lineare Bereiche aufweisen, die durch Verzweigungspunkte oder innere große Gruppen, oft „Stopper“ genannt, getrennt sind. Stopper verhindern die Fortbewegung der makrocyclischen Komponente von einem linearen Bereich zu einem anderen. Achsenkomponenten mit mehreren linearen Bereichen wie „Y“- , „X“- oder „H“-förmige Komponenten, die drei, vier bzw. fünf lineare Bereiche enthalten, werden in den Abschnitten ROT-3 und ROT-5 diskutiert. Konkrete Beispiele finden sich im Abschnitt ROT-6.

ROT-1.4 Pseudorotaxane (generisch)

Ein Pseudorotaxan ist eine Rotaxan-ähnliche molekulare Anordnung mit Achsenkomponenten, deren Ende(n) klein genug ist/sind, um ein Auffädeln und Ausfädeln der makrocyclischen Komponente(n) zu ermöglichen. In Abbildung 5 sind zwei Achsenkomponenten gezeigt, die sich für den Aufbau von Pseudorotaxanen eignen. Die Stabilität eines Pseudorotaxans kann nicht nur auf durch räumliche Enge verhindertem Ausfädeln beruhen, sondern auch auf Wechselwirkungen zwischen der Achse und der makrocyclischen Komponente, z. B. Donor-Akzeptor- oder elektrostatische Wechselwirkungen.

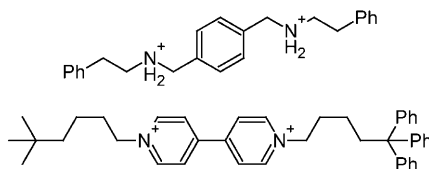


Abbildung 5. Beispiele für Pseudorotaxan-Achsenkomponenten; die erste hat zwei kleine Endgruppen, die zweite eine kleine und eine große Endgruppe.

Anmerkung: Pseudorotaxane, bei denen nur ein Achsenende klein genug ist, um ein Auf- und Ausfädeln der makrocyclischen Komponente zu ermöglichen, werden manchmal als Semirotaxane oder halbgeschlossene Rotaxane bezeichnet.

ROT-1.5 Erkennungsstelle

Die Erkennungsstelle ist der Teil der Achsenkomponente, mit dem die makrocyclische Komponente vorzugsweise assoziiert.

Anmerkung: Beispiele für Erkennungsstellen von Achsenkomponenten sind Ammonium- oder Bipyridinium-Einheiten. Bei Achsenkomponenten mit mehr als einer Erkennungsstelle können diese identisch oder verschieden sein.

ROT-1.6 Molekulares Shuttle

Als molekulares Shuttle bezeichnet man ein Rotaxan- oder Pseudorotaxansystem mit einer Achse, die eine spezielle Erkennungsstelle (siehe Abschnitt ROT-1.5) für die makrocyclische Komponente enthält.

Anmerkung: In Abhängigkeit von den konkreten Strukturmerkmalen und Bedingungen können solche Rotaxane entweder in einer Form vorliegen, in der die makrocyclische Komponente mit einem speziellen Fragment der Achse assoziiert, oder in einer nichtassoziierten Form, in der die makrocyclische Komponente sich entlang des linearen Fadens bewegen kann. Abbildung 6 zeigt typische molekulare Shuttles. Die beiden Erkennungsstellen im zweiten Beispiel können gleich oder verschieden sein.

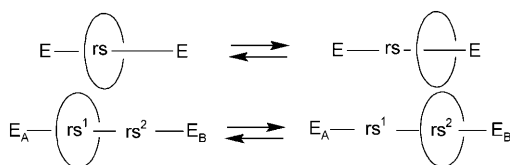


Abbildung 6. Beispiele für [2]Rotaxane, die als molekulare Shuttles fungieren; rs = Erkennungsstelle.

ROT-2 Die Geschichte der Rotaxannomenklatur

Das erste Nomenklatorsystem für Rotaxane wurde 1971 von Schill vorgeschlagen.^[6] In ihm besteht der Name eines Rotaxans aus vier Teilen:

- einem Präfix in Form einer ganzen Zahl in eckigen Klammern, die die Gesamtzahl der Komponenten angibt,
- dem Namen der Achsenkomponente,
- dem Namen jedes makrocyclischen Moleküls, ungeachtet ob es chemisch identisch mit oder verschieden von anderen vorhandenen makrocyclischen Molekülen ist,
- dem nicht kursiv gesetzten Wortbestandteil rotaxan.

Dieses Nomenklaturprinzip führt zu folgenden generischen Namen: $[x]$ -[Name der Achsenkomponente]-[Name des (makrocyclischen Moleküls)₁]-[Name des (makrocyclischen Moleküls)₂]-[Name des (makrocyclischen Moleküls)₃]-...-rotaxan.

Anmerkung: Im Präfix $[x]$ steht die ganze Zahl x für die Gesamtzahl der Achsen- und makrocyclischen Komponenten; (makrocyclisches Molekül)₁, (makrocyclisches Molekül)₂, (makrocyclisches Molekül)₃ etc. sind strukturell identische oder verschiedene makrocyclische Moleküle.

Im Jahr 2000 schlugen Vögtle et al.^[7] ein generisches Nomenklatorsystem vor, in dem Schills Präfix um Informationen über mechanische (mec) oder kovalente (cov) Bindungen zwischen den Rotaxankomponenten erweitert wurde, um so zwischen intermolekularen und intramolekularen Rotaxanen unterscheiden zu können. Für ein [3]Rotaxan vom Typ 2.1 (siehe Tabelle 1) führt Vögtles System zum Präfix $[3^{ax1mecy2,cy2mecax3}]$ (Abbildung 7), für ein [1]Rotaxan vom Typ 9 (siehe Tabelle 1) zum Präfix $[2^{1cov2,1mec2}]$ (Abbildung 8).

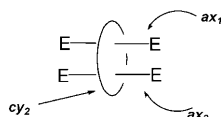


Abbildung 7. Ein [3]Rotaxan vom Typ 2.1 (aus Tabelle 1); ax_1, ax_3 = Achsenkomponenten (Komponente 1 bzw. 3); cy_2 = makrocyclisches Molekül (Komponente 2).

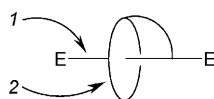


Abbildung 8. Ein [1]Rotaxan vom Typ 9; $ax=1$, $cy=2$.

Das im Folgenden beschriebene Nomenklatorsystem nutzt als Grundlage Schills Beschreibung der Rotaxanzusammensetzung und die Idee von Vögtle et al., mit einem Präfix eine spezifische Anordnung der Rotaxankomponenten für jeden generischen Rotaxantyp zu beschreiben.

ROT-3 Rotaxantypen

In Tabelle 1 sind die elf generischen Rotaxantypen schematisch wiedergegeben, die seit der ersten graphischen Darstellung eines Pseudorotaxans im Jahr 1958^[1] beschrieben wurden. Die IUPAC-Empfehlungen für eine systematische Nomenklatur

Tabelle 1: Idealisierte Darstellung der elf bekannten generischen Rotaxantypen.

Typ/charakteristische Strukturmerkmale	generische Struktur	Typ/charakteristische Strukturmerkmale	generische Struktur
1.1/[2]Rotaxan: ein einzelnes lineares Molekül, auf das eine einzelne makrocyclische Komponente aufgefädelt ist		5/Achsenkomponente mit zwei linearen Bereichen, die durch eine Gruppe getrennt sind, die groß genug ist, um eine Verlagerung der makrocyclischen Komponente zwischen den beiden linearen Bereichen zu verhindern. Gezeigt ist ein [3]Rotaxan.	
1.2/[3]Rotaxan: ein lineares Molekül, auf das zwei makrocyclische Komponenten aufgefädelt sind		6/Y-förmiges Molekül mit drei linearen Bereichen; die makrocyclischen Komponenten können in jedem linearen Bereich positioniert sein. Gezeigt sind ein [3]- und ein [4]Rotaxan.	
1.3/[4]Rotaxan: ein lineares Molekül, auf das drei makrocyclische Komponenten aufgefädelt sind		7/X-förmiges Molekül mit vier linearen Bereichen; die makrocyclischen Komponenten können in jedem linearen Bereich positioniert sein. Gezeigt ist ein [3]Rotaxan. ^[a]	
2.1/[3]Rotaxan: zwei lineare Moleküle, auf die eine makrocyclische Komponente aufgefädelt ist		8/H-förmige Achsenkomponente mit fünf linearen Bereichen, in denen makrocyclische Komponenten positioniert sein können. Gezeigt ist ein [3]Rotaxan. ^[b]	
2.2/[4]Rotaxan: zwei lineare Moleküle, auf die zwei makrocyclische Komponenten aufgefädelt sind		9/[1]Rotaxan: Ein linearer Teil eines Moleküls ist in einen makrocyclischen Teil desselben Moleküls eingefädelt.	
3/Zwei kovalent verknüpfte makrocyclische Moleküle, in die zwei lineare Moleküle eingefädelt sein können. Zwei mögliche Isomere sind dargestellt. ^[a]		10/Cyclische und acyclische „Blümchenkettens“-[3]Rotaxane: Jedes Molekül enthält einen linearen Bereich und einen großen Ring. Der lineare Bereich eines Moleküls ist in den cyclischen Bereich des anderen Moleküls eingefädelt.	
4/Drei makrocyclische Moleküle sind kovalent zu einem Y-förmigen Molekül verbunden. Jedes makrocyclische Fragment kann auf ein lineares Molekül aufgefädelt sein. Gezeigt ist ein [4]Rotaxan.		11/[4]Catenarotaxan oder [4]Rotacatenan: Zwei Komponenten, von denen jede aus zwei kovalent verbundenen großen Ringen besteht, bilden ein Catenan; die beiden nicht an der Catenanbildung beteiligten Ringe sind auf je ein lineares Molekül aufgefädelt, d. h., man hat ein [3]Rotaxan. ^[c]	

[a] In dieser Tabelle wie im gesamten Beitrag bedeuten Unterschiede in der Länge der abgebildeten linearen Bereiche nicht, dass sie strukturell unterschiedlich sind. [b] Dieser Typ kann nach dem Nomenklatorsystem von Vögtle et al.^[7] als [2-2]Rotaxan bezeichnet werden. [c] Catenarotaxane wurden früher „Catrotane“ oder „Rotacatenane“ genannt.^[7] Die Bezeichnung [2rot-2cat-2rot]Catenan wurde im Nomenklatorsystem von Vögtle et al. vorgeschlagen.^[7]

dieser elf Rotaxantypen sind in den Abschnitten ROT-4 bis ROT-6 zusammengestellt, wobei in Abschnitt ROT-6 die Prinzipien anhand von in Veröffentlichungen vorgestellten Rotaxanen erläutert werden.

ROT-4 Allgemeine Prinzipien der Rotaxannomenklatur

Da die in Tabelle 1 aufgeführten Typen strukturell unterschiedlich sind, reicht eine einzige Nomenklaturempfehlung nicht aus. Dennoch können für alle Rotaxantypen mithilfe der gleichen Grundprinzipien Namen erstellt werden, wenn diese um kleine Variationen für die einzelnen Rotaxantypen ergänzt werden.

ROT-4.1 Namen für Rotaxane und Pseudorotaxane

Auch wenn Rotaxan und Pseudorotaxan Begriffe für Substanzklassen sind, ist es unter Nomenklaturgesichtspunkten unbedeutend, ob die Enden einer Achsenkomponente groß genug sind, ein Ausfädeln zu verhindern, oder nicht. Jeder systematische Name definiert eine spezifische chemische Struktur, im Falle von Rotaxanen und Pseudorotaxanen eine Anordnung der Komponenten zueinander. Informationen zur Stabilität einer molekularen Anordnung sind normalerweise nicht Bestandteil eines chemischen Namens. Daher kann für Rotaxane und Pseudorotaxane das gleiche Nomenklatorsystem verwendet werden.

ROT-4.2 Namenstypen

ROT-4.2.1 Verwendung der systematischen Nomenklatur

Der Name eines Rotaxans sollte mithilfe der hier vorgestellten Empfehlungen erzeugt werden. Die makrocyclische und die Achsenkomponente sollten jeweils gemäß den IUPAC-Empfehlungen zur Benennung der entsprechenden Verbindungstypen benannt werden.

ROT-4.2.2 Verwendung nichtsystematischer Namen und Akronyme

Systematische Namen für makrocyclische und Achsenkomponenten sind gewöhnlich lang oder komplex oder beides. Die Verwendung von semisystematischen Namen, Trivialnamen oder Akronymen für die Komponenten ist daher akzeptabel, vorausgesetzt, dass hierdurch keine Mehrdeutigkeit entsteht.

Namen, die mithilfe der IUPAC-Empfehlungen erstellt wurden, sind allerdings vorzuziehen.

ROT-4.3 Generierung des Namens

ROT-4.3.1 Reihenfolge der Komponentennamen im Gesamtamen

Es wird empfohlen, im Gesamtamen des Rotaxans den/die Namen der Achsenkomponente(n) dem/den Namen der makrocyclischen Komponente(n) voranzustellen. Es gibt zwar keine Präzedenz für einen Vorrang der Achsenkomponente gegenüber der makrocyclischen Komponente, doch ein möglichst konsequentes Einhalten dieser Empfehlung wird den generierten Namen Konsistenz verleihen.

Wenn mehrere Achsenkomponenten oder makrocyclische Komponenten aufgelistet werden müssen, sollten sie in absteigender Rangfolge entsprechend ihren Stoffklassen nach den IUPAC-Empfehlungen für die Benennung von organischen Verbindungen^[22,23] aufgeführt werden. Die Reihenfolge hängt nicht davon ab, wie oft und wo eine Komponente im Rotaxan vorkommt.

ROT-4.3.2 Generischer Name für die Rotaxantypen 1–8

Die systematischen Namen für alle Rotaxantypen aus Tabelle 1 werden gemäß den gleichen Prinzipien erzeugt und enthalten den Namen und die Zahl jeder Komponente des Rotaxans. Wenn mehrere Anordnungen der Komponenten möglich sind, schließt der Name auch ein die Anordnung beschreibendes Präfix ein, das spezifisch für jeden Rotaxantyp ist.

Systematische Namen für die Rotaxantypen 1–8 haben den generischen Aufbau (*Präfix*)-[*v*][[*w*][Name(n) der Achsenkomponente(n)]-rotaxa-[*x*][Name(n) der makrocyclischen Komponente(n)]], wobei *Präfix* die Position und Orientierung der Rotaxankomponenten zueinander beschreibt, falls Varianten möglich sind, und somit das Rotaxanischer gemäß den Abschnitten ROT-5 und ROT-6 charakterisiert. Wenn lediglich die Zusammensetzung des Rotaxans bekannt ist oder keine Isomere möglich sind, wird das Präfix weggelassen.

Der Hauptteil des Namen beschreibt die Strukturen der Rotaxankomponenten und die Zusammensetzung des Rotaxans. Dieser Namensteil wird für die meisten Rotaxantypen gleichartig generiert:

- Das Verbindungselement *-rotaxa-* verknüpft die Namen der Achsenkomponenten und der makrocyclischen Komponenten.
- Die Buchstaben *v*, *w* und *x* stehen für positive ganze Zahlen, die die Gesamtzahl der Rotaxankomponenten, die Zahl der Achsenkomponenten bzw. die Zahl der makrocyclischen Komponenten wie unten detaillierter beschrieben angeben.

Anmerkung: Die Verwendung von *-pseudorotaxa-* zur Unterscheidung zwischen Rotaxanen und Pseudorotaxanen ist unlogisch, weil dies bedeuten würde, dass eine cyclische Komponente auf eine lineare Komponente „pseudoaufgefädelt“ ist, was eindeutig unmöglich ist.

Wenn ein Rotaxan Achsenkomponenten oder makrocyclische Komponenten mehrfach enthält, wird jede im Namen nur einmal aufgeführt, und ihre Zahl wird in eckigen Klammern dem Namen vorangestellt. Bei einer nur einmal vorkommenden Komponente kann auf die Angabe „[1]“ verzichtet werden.

Der generische Name eines Rotaxan mit einer Achsenkomponente und mehreren unterschiedlichen makrocyclischen Komponenten ist damit $[v][\text{Name der Achsenkomponente}]\text{-rotaxa-}[x_1][\text{Name der (makrocyclischen Komponente)}_1]\text{-}[x_2][\text{Name der (makrocyclischen Komponente)}_2]\text{-}\dots$. Die Gesamtzahl der Rotaxankomponenten in diesem Beispiel ist $v = 1 + x_1 + x_2 + \dots$. Für ein Rotaxan mit mehreren Achsenkomponenten und einer makrocyclischen Komponente ergibt sich als generischer Name $[v][w_1][\text{Name der Achsenkomponente}_1]\text{-}[w_2][\text{Name der Achsenkomponente}_2]\text{-}\dots\text{-rotaxa-}[\text{Name der makrocyclischen Komponente}]$. Die Gesamtzahl der Rotaxankomponenten in diesem Beispiel ist $v = w_1 + w_2 + \dots + 1$.

Die folgenden zehn Schritte führen zum Namen für die Rotaxantypen 1–8:

1. Die Achsenkomponente(n) benennen.
2. Den/die so erzeugten Namen in eckige Klammern setzen. (*Anmerkung:* IUPAC [Lit. [22], R-0.1.5.1] empfiehlt eine Schachtelung von runden, eckigen und geschweiften Klammern wie folgt: $\{[()]\}$. Da jedoch Rotaxannamen oft komplex sind, wird für die Benennung der Einzelkomponenten und des gesamten Komplexes eine begrenzte Auswahl von Klammern empfohlen.)
3. Eine ganze Zahl in eckigen Klammern, $[w]$, dem/den Namen für die Achsenkomponente(n) voranstellen; sie zeigt die Zahl der Achsenkomponenten an.
4. Das kursiv gesetzte Verbindungselement *-rotaxa-* anfügen.
5. Den/die Namen für die makrocyclische(n) Komponente(n) hinter dem Verbindungselement *-rotaxa-* anfügen.
6. Den/die Namen der makrocyclischen Komponente(n) in eckige Klammern fassen.
7. Eine ganze Zahl in eckigen Klammern, $[x]$, dem/den Namen für die makrocyclische(n) Komponente(n) voranstellen; sie zeigt die Zahl der makrocyclischen Komponenten an.
8. Den gesamten in den Schritten 1–7 erzeugten Namen in geschweifte Klammern einfassen.
9. Eine ganze Zahl, die die Gesamtzahl der Komponenten bedeutet, eingefasst in eckige Klammern, $[v]$, dem Gesamtnamen voranstellen.
10. Das kursiv gesetzte Präfix in runden Klammern voranstellen, das die Anordnung der Rotaxankomponenten beschreibt. Dessen Erzeugung wird in den folgenden Abschnitten für jeden Rotaxantyp einzeln beschrieben.

Mithilfe der Schritte 1–10 lassen sich die Rotaxantypen 1–8 benennen. Die generischen Namensformate für die Typen 9–11 sind in den Abschnitten ROT-4.3.3 bis ROT-4.3.5 beschrieben. Die systematischen Namen konkreter Verbindungen sind im Abschnitt ROT-6 aufgeführt.

ROT-4.3.3 Generischer Name für den Rotaxantyp 9

Rotaxane des Typs 9 bestehen aus einer makrocyclischen Komponente und einem linearen Bereich, die miteinander verbunden sind. Das in ROT-4.3.2 beschriebene allgemeine Format des Namens muss modifiziert werden, da es innerhalb des Namens keinen logischen Platz für das Verbindungselement *-rotaxa-* gibt. Hier wird deshalb das Anfügen von *-rotaxa-* als Präfix empfohlen, sodass sich für den systematischen Namen das generische Format $[1]\{\text{rotaxa-}[\text{Name der Komponente}]\}$ ergibt. Auf die Angabe von $[1]$ kann hier nicht verzichtet werden, die Komponenten, die einen makrocyclischen und einen linearen Bereich enthalten, auch andere Rotaxane, z. B. vom Typ 10 (Blümchenkettens-Rotaxane), bilden können.

ROT-4.3.4 Generische Namen für den Rotaxantyp 10

Die Namen für Rotaxane vom Typ 10 werden in ähnlicher Weise generiert. Mehrere identische Komponenten, die sowohl einen linearen Bereich als auch einen auffädelbaren Ring enthalten, können eine cyclische oder eine acyclische Anordnung bilden, wobei der lineare Bereich einer Komponente in den makrocyclischen Bereich einer anderen Komponente eingefädelt wird, was zu einer „Blümchenkettens“-artigen Anordnung führt. Für den systematischen Namen ergibt sich somit das generische Format $[n]\{\text{rotaxa-}[\text{Name der Komponente}]\}$ bei acyclischer Anordnung und $[\text{cyclo-}n]\{\text{rotaxa-}[\text{Name der Komponente}]\}$ bei cyclischer Anordnung. In beiden Fällen ist n die Zahl der Rotaxankomponenten. Abbildung 9 zeigt Beispiele für acyclische und cyclische [4]Rotaxane vom Typ 10.



Abbildung 9. Beispiele für acyclische und cyclische [4]Rotaxane vom Typ 10.

ROT-4.3.5 Generischer Name für den Rotaxantyp 11

Rotaxane vom Typ 11 bestehen aus einem Zweikomponentencatenan, bei dem an jeden großen Ring ein weiterer großer Ring gebunden ist, und dieser kann/diese können Achsenkomponenten aufnehmen (siehe Tabelle 1). Dieser Typ wird als [4]Catenarotaxan oder als [4]Rotacatenan bezeichnet.

Anmerkung 1: Das *Compendium of Chemical Terminology* der IUPAC definiert Catenane oder Catena-Verbindungen als Moleküle, in denen zwei oder mehr Ringe kettenartig ohne kovalente Bindung miteinander verbunden sind.^[20]

Die gesamte Catenankomponente kann wie eine komplexe makrocyclische Komponente behandelt werden. Daher können Catenarotaxane vom Typ 11, die zwei Achsenkomponenten und eine makrocyclische Komponente enthalten, mithilfe des generischen Formats [3][[2][Name der Achsenkomponente]-rotaxa-[Name des [2]Catenans]] benannt werden.

Es wurden mehrere Nomenklatorsysteme für Catenane vorgeschlagen, jedoch gibt es bisher kein universell empfohlenes System. Die Verwendung des kursiv gestellten Verbindungselements *-catena-* für die [2]Catenankomponente im generischen Format wird in Übereinstimmung mit der Verwendung des Verbindungselements *-rotaxa-* empfohlen. Die in Abschnitt ROT-4.3.4 beschriebenen Regeln für „Blümchenkettens“-Rotaxane können auf Catenane, die aus identischen Komponente zusammengesetzt sind, angewendet werden. So ergibt sich der systematische Name eines [2]Catenans aus zwei identischen Komponenten aus dem generischen Format [2][*catena*-(Name der Catenankomponente)].

Analog lässt sich bei [3]Rotaxanen vom Typ 11 das generische Format [3][[2][Name der Achsenkomponente]-rotaxa-[2][*catena*-(Name der Catenankomponente)]] anwenden. Dieser generische Name beschreibt eindeutig alle Komponenten und die Zusammensetzung von Catenarotaxanen vom Typ 11. Die Spezifizierung von möglichen Isomeren eines Catenarotaxans mittels Präfixen ist in Abschnitt ROT-5.4 beschrieben.

Anmerkung 2: Da eine systematische Nomenklatur der Catenane noch nicht entwickelt ist, ist das hier vorgestellte Namensformat für [2]Catenane und [3]Rotaxane vom Typ 11 als vorläufig zu betrachten.

ROT-5 Spezifizierung der Isomerie von Rotaxanen

ROT-5.1

Während der Hauptteil des Rotaxannamens eindeutig die Zusammensetzung des Rotaxans und die Isomerie seiner Komponenten angibt, beschreibt das kursiv gestellte Präfix die Isomerie des Rotaxans selbst. Daher schließt der Begriff „Isomerie von Rotaxanen“ nicht die Isomerie der Komponenten ein, sondern beschreibt unterschiedliche Anordnungen der Komponenten zueinander.

Rotaxanisomere können sich unterscheiden in

- den Positionen der makrocyclischen Komponenten auf den linearen Bereichen komplexer Achsenkomponenten und/oder den Positionen der Achsenkomponenten bezüglich der makrocyclischen Teile komplexer makrocyclischer Komponenten,
- der Reihenfolge von verschiedenen makrocyclischen Komponenten auf dem linearen Bereich einer Achsenkomponente,
- der Position einer makrocyclischen Komponente bezüglich verschiedener Erkennungsstellen innerhalb eines linearen Bereichs einer Achsenkomponente,
- der Anordnung von unsymmetrischen Rotaxankomponenten zueinander.

Abbildung 10 zeigt Beispiele für mögliche Isomeren bei Rotaxanen. Die Isomerietypen a–c können unabhängig von den Symmetrieeigenschaften der Rotaxankomponenten existieren. Die Konventionen zu Benennung der entsprechenden Rotaxane sind in den folgenden Abschnitten zu finden. Die seltenen Rotaxanisomere vom Typ d sind nur möglich, wenn Rotaxankomponenten mit speziellen Symmetrieeigenschaften vorliegen. Empfehlungen zur Benennung dieses und anderer Typen von stereoisomeren Rotaxanen werden derzeit entwickelt.^[24]

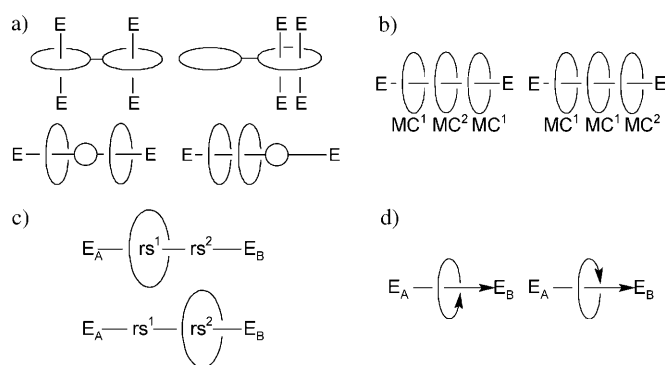


Abbildung 10. Mögliche Rotaxanisomeren; E_A und E_B stehen für nichtäquivalente Enden, Pfeile definieren spezifische Symmetrieeigenschaften einer Komponente, und MC steht für makrocyclische Komponente.

ROT-5.2 Position der Achsenkomponenten bei mehreren auffädelbaren Ringen (Typ 3 und 4)

Bei Rotaxanen vom Typ 3 (siehe Tabelle 1) sind Isomere möglich, die sich in der Position der Achsenkomponenten in den makrocyclischen Komponenten unterscheiden. Die Positionen der auffädelbaren Komponenten werden eindeutig mithilfe des kursiv gestellten Präfixes in Form zweier Zahlen in abnehmender Reihenfolge spezifiziert, die die Zahl der Achsenkomponenten in jedem Ring der makrocyclischen Komponente angeben. Beispiele für Rotaxane vom Typ 3 sind in Abbildung 11 zu sehen.

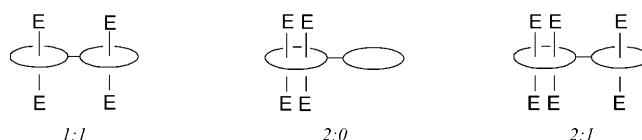


Abbildung 11. Beispiele für isomere Rotaxane vom Typ 3 und ihre Präfixe.

Die Isomere der Rotaxane vom Typ 4 (siehe Tabelle 1), die sich in der Position der Achsenkomponenten in drei Ringen unterscheiden, werden in gleicher Weise benannt, nur dass das Präfix hier aus drei Zahlen besteht, die die Zahl der Achsenkomponenten in jedem auffädelbaren Ring angeben. Abbildung 12 zeigt Beispiele für [4]Rotaxane vom Typ 4.

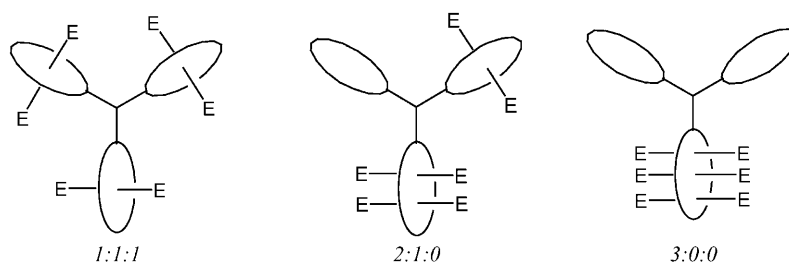


Abbildung 12. Beispiele für isomere [4]Rotaxane vom Typ 4 und ihre Präfixe.

Die Präfixe für komplexere makrocyclische Komponenten können nach den oben und in Abschnitt ROT-5.3.2 (für Rotaxane mit komplexen Achsenkomponenten) beschriebenen Prinzipien generiert werden.

Anmerkung 1: Die Zahl der Achsenkomponenten wird absteigend aufgeführt, wenn die auffädelbaren Ringe identisch sind. Sind sie nicht identisch, wird die Zahl der Komponenten in abnehmender Rangfolge der Ringe angegeben. So sind für [3]Rotaxane vom Typ 3 mit identischen symmetrischen Achsenkomponenten drei Isomere mit den Präfixen 2:0, 0:2 und 1:1 möglich. Das Verfahren zur Bestimmung der Rangfolge auffädelbarer Ringe wird in einer gesonderten Veröffentlichung zur Stereoisomerie von Rotaxanen definiert werden.

Anmerkung 2: Zur Kennzeichnung von nichtäquivalenten Achsenkomponenten sei auf Abschnitt ROT-5.5.2 verwiesen.

ROT-5.3 Position der makrocyclischen Komponenten bei mehreren linearen Bereichen (Typen 5–8)

Die Position einfacher makrocyclischer Komponenten auf Achsenkomponenten mit mehreren linearen Bereichen wird ähnlich wie in Abschnitt ROT-5.2 beschrieben angegeben. In diesem Fall steht das Präfix für die Zahl der Komponenten, die auf jeden linearen Bereich aufgefädelt sind.

ROT-5.3.1 Spezifizierung der Position der makrocyclischen Komponenten für Rotaxane vom Typ 5

Rotaxane vom Typ 5 (siehe Tabelle 1) haben unverzweigte Achsenkomponenten mit zwei oder mehr linearen Bereichen, die durch große Gruppen getrennt sind, was die Bewegung der makrocyclischen Komponente zwischen den Bereichen verhindert. Bei solchen Rotaxanen wird die Zahl der aufgefädelten Komponenten nacheinander angegeben, beginnend an einem endständigen linearen Bereich, weiter durch alle inneren Bereiche bis schließlich zum anderen endständigen Bereich. Die Bereiche mit mehr Komponenten sollten so früh wie möglich genannt werden. Beispiele für Rotaxane vom Typ 5 sind in Abbildung 13 zu sehen. Für die Benennung nichtäquivalenter makrocyclischer Komponenten siehe Abschnitt ROT-5.5.1.

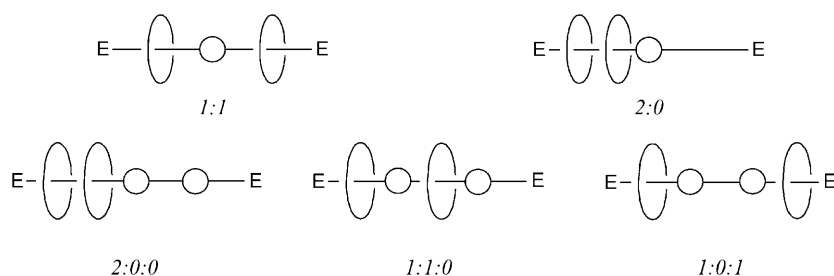


Abbildung 13. Beispiele für isomere [3]Rotaxane vom Typ 5 und ihre Präfixe.

ROT-5.3.2 Spezifizierung der Position der makrocyclischen Komponenten für Rotaxane mit verzweigten Achsenkomponenten (Typ 6–8)

Die Isomere der Rotaxane vom Typ 6 mit Y-förmigen Achsenkomponenten (siehe Tabelle 1) werden in ähnlicher Weise wie oben für Rotaxane vom Typ 5 beschrieben spezifiziert. Wenn die linearen Bereiche äquivalent sind, besteht das Präfix aus drei Zahlen in absteigender Reihenfolge. Beispiele für isomere [4]Rotaxane vom Typ 6 sind in Abbildung 14 dargestellt.

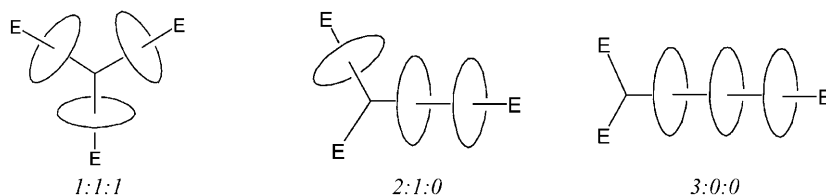


Abbildung 14. Beispiele für isomere [4]Rotaxane vom Typ 6 und ihre Präfixe.

Bei Rotaxanen vom Typ 7 mit X-förmigen Achsenkomponenten (siehe Tabelle 1), die vier topologisch äquivalente Bereiche enthalten, besteht das Präfix aus vier Zahlen, die die Zahl der makrocyclischen Komponenten in jedem Bereich angeben. Die Reihenfolge, in der diese vier Zahlen genannt werden, hängt von der Raumstruktur der X-förmigen Komponente ab: Bei einer tetraedrischen Achsenkomponente werden die Zahlen einfach in absteigender Reihenfolge aufgeführt, bei einer quadratisch-planaren dagegen nacheinander im oder gegen den Uhrzeigersinn. Bereiche mit der höchsten Zahl an Komponenten sollten so früh wie möglich genannt werden. Abbildung 15 zeigt Beispiele für [3]Rotaxane vom Typ 7.

Wenn Rotaxane der Typen 5–7 mit äquivalenten Achsenkomponenten eine einzige makrocyclische Komponente enthalten, werden die Präfixe 1:0, 1:0:0 bzw. 1:0:0:0 nicht angegeben, vorausgesetzt, es gibt keine Möglichkeit der Isomerie.

Das Präfix für Rotaxane vom Typ 8, die eine H-förmige Achsenkomponente mit fünf topologisch nicht äquivalenten linearen Bereichen enthalten (siehe Tabelle 1), besteht aus fünf Zahlen. Für eine eindeutige Spezifizierung der Isomere müssen die Zahlen der makrocyclischen Komponenten in einer festen Reihenfolge angegeben werden: 1) zwei benachbarte terminale Bereiche, 2) der innere Bereich, 3) die restlichen zwei benachbarten terminalen Bereiche. Bei mehreren möglichen Präfixen wird dasjenige gewählt, das den am dichtesten besetzten Bereich frühestmöglich beschreibt. In Abbildung 16 ist oben die so definierte Rangfolge der Bereiche angedeutet und sind unten Beispiele für [3]Rotaxane vom Typ 8 gegeben.

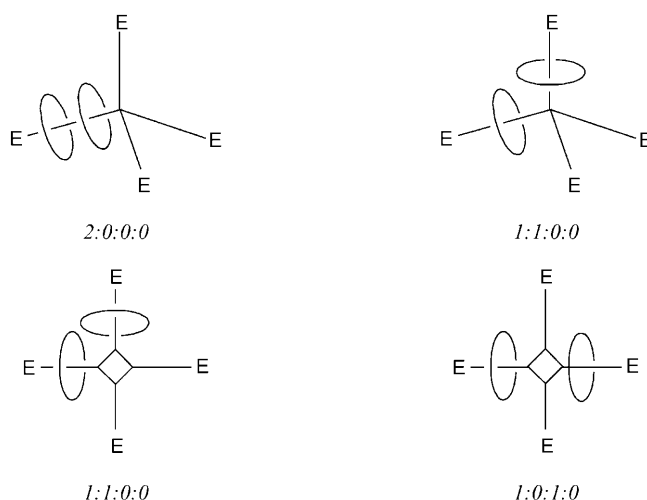


Abbildung 15. Beispiele für tetraedrische und quadratisch-planare [3]Rotaxane vom Typ 7 und ihre Präfixe (das Quadrat im Zentrum der X-förmigen Komponente soll die quadratisch-planare Konfiguration verdeutlichen).

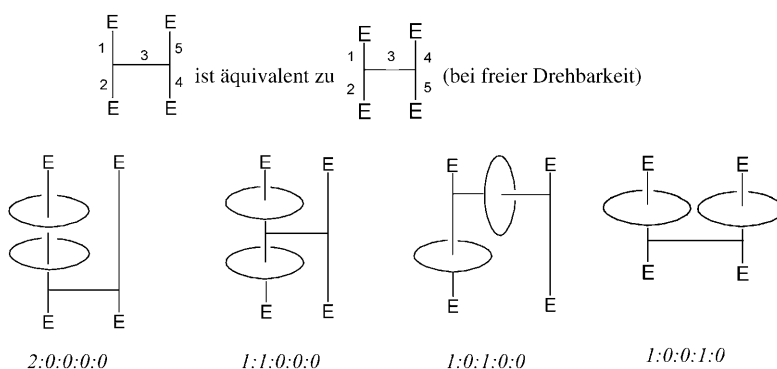


Abbildung 16. Reihenfolge der Nennung der linearen Bereiche einer H-förmigen Achsenkomponente (oben) sowie isomere [3]Rotaxane vom Typ 8 und ihre Präfixe (unten). Das Präfix $1:0:0:1:0$ im letzten Beispiel impliziert eine freie Rotation um den inneren linearen Bereich. Wenn diese Rotation nicht möglich ist, wird das Präfix in Einklang mit der Reihenfolge der Zitierung der linearen Bereiche zu $1:0:0:0:1$.

Anmerkung 1: Die in diesem Abschnitt dargelegten Prinzipien setzen voraus, dass topologisch äquivalente Bereiche auch strukturell äquivalent sind. Bei Rotaxanen der Typen 5–8 mit strukturell nichtäquivalenten Bereichen werden die Zahlen der Komponenten zunächst gemäß der hier beschriebenen topologischen Rangfolge und danach in absteigender Rangfolge der linearen Bereiche angegeben. Die Prinzipien für die Bestimmung der Rangfolge strukturell nichtäquivalenter Bereiche werden in einer gesonderten Veröffentlichung zur Stereoisomerie von Rotaxanen beschrieben werden.^[24]

Anmerkung 2: Für die Benennung nichtäquivalenter makrocyclischer Komponenten siehe Abschnitt ROT-5.5.1.

ROT-5.4 Position der Achsenkomponenten bei Catenarotaxanen vom Typ 11

Die vier großen Ringe von Catenarotaxanen vom Typ 11 (siehe Tabelle 1) können alle potenziell auf lineare Komponenten aufgefädelt sein, und das Präfix besteht hier aus vier Zahlen, die angeben, wie viele Achsenkomponenten in jeden dieser Ringe eingefädelt sind. Abbildung 17 zeigt zwei Beispiele für isomere [3]Rotaxane vom Typ 11.

Jede Catenakomponente dieses Rotaxantyps enthält zwei große Ringe; daher sind zwei isomere Catenane möglich. Um anzuzeigen, dass nur ein großer Ring jeder Komponente eine Catenabindung bildet, kann das Präfix $(1-1)$ dem Catenannamen vorangestellt werden. Dieses Präfix deutet an, dass der erste Ring der einen Komponente mit dem ersten Ring der zweiten Komponente eine Catenabindung eingeht. Daher lautet der komplette Name eines [2]Catenans $(1-1)$ -[2][catena-(Name der Catenakomponente mit zwei großen Ringen)], und als generischer Name für das erste Isomer in Abbildung 17 ergibt sich $1:0:0:1$ -[3][[2][Name der Achsenkomponente]-rotaxa-[(1-1)-[2][catena-(Name der Catenakomponente mit zwei großen Ringen)]]].

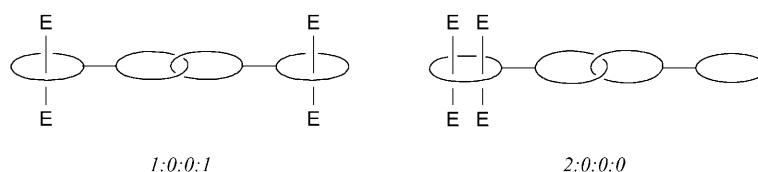


Abbildung 17. Beispiele für [3]Rotaxane vom Typ 11 und ihre Präfixe.

Anmerkung 1: Bei Catenakomponenten mit zwei gleichen Ringen kennzeichnet dieser Name die Catenanstruktur eindeutig. Die Prinzipien für die Benennung von Isomeren bei nichtäquivalenten Komponenten werden in einer gesonderten Veröffentlichung beschrieben werden.^[24]

Anmerkung 2: Da eine systematische Nomenklatur für Catenane bisher noch nicht entwickelt wurde, sollte das Namensformat für [2]Catenane und damit auch für [3]Rotaxane vom Typ 11 als vorläufig betrachtet werden.

ROT-5 Position und Reihenfolge von nichtäquivalenten Komponenten desselben Typs

Bei Rotaxanen aus unterschiedlichen Komponenten desselben Typs kann es Isomere geben, die sich in den Positionen oder in der Reihenfolge der Komponenten unterscheiden. Zur eindeutigen Beschreibung der Positionen der Rotaxankomponenten muss daher das Präfix, wie im Folgenden beschrieben, Bezeichnungen für die Rotaxankomponenten in Übereinstimmung mit der Reihenfolge, in der sie im Namen vorkommen, einschließen.

ROT-5.5.1 Spezifizierung der Anordnung von nichtäquivalenten makrocyclischen Komponenten

Bei Rotaxanen vom Typ 1 (siehe Tabelle 1) mit mehr als einer Art makrocyclischer Komponenten sind Isomere möglich, die sich in der Reihenfolge der makrocyclischen Komponenten unterscheiden. Um die Anordnung dieser Komponenten zu definieren, werden sie mittels MC^n -Kennzeichnung unterschieden. MC steht für „macrocyclic component“, und n ist die Position dieser Komponente im Gesamtnamen des Rotaxans. Somit wird die erste makrocyclische Komponente im Namen im Präfix mit MC^1 bezeichnet, die zweite mit MC^2 etc.

Bei einem [4]Rotaxan vom Typ 1.3 (siehe Tabelle 1), das aus zwei gleichen makrocyclischen Komponenten besteht, die früh im Namen des Rotaxans erscheinen, und einer dritten von ihnen verschiedenen Komponente und das den generischen Namen [4]((Name der Achsenkomponente)-rotaxa-[2](Name der (makrocyclischen Komponente)₁)-[1](Name der (makrocyclischen Komponente)₂)] hat, sind zwei Isomere möglich (Abbildung 18). Das Präfix des Namens enthält die Kennzeichnung der Komponenten in der Reihenfolge, in der sie auf der Achsenkomponente aufgefädelt sind. Gibt es mehrere Möglichkeiten, soll das Präfix so gewählt werden, dass die Komponenten mit den niedrigeren Indizes zuerst erscheinen (siehe das Präfix der linken Struktur in Abbildung 18).

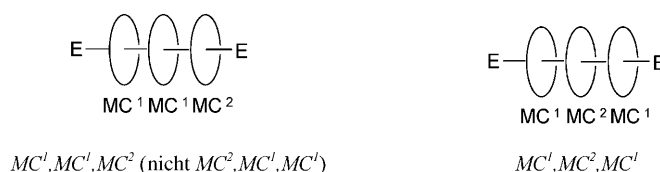


Abbildung 18. Beispiele für isomere [4]Rotaxane vom Typ 1.3 und ihre Präfixe.

Bei Rotaxanen der Typen 5–8 (siehe Tabelle 1), die aus Achsenkomponenten mit mehreren linearen Bereichen und verschiedenen makrocyclischen Komponenten bestehen, wird jedes mögliche Isomer durch ein Präfix spezifiziert, das die Kennzeichnung MC^n für jede makrocyclische Komponente statt Zahlen für jeden linearen Bereich enthält. Die linearen Bereiche werden dabei in der in Abschnitt ROT-5.3 definierten Reihenfolge aufgeführt. Wenn es mehrere Möglichkeiten gibt, ist das erste Sortierkriterium, wie dicht die Bereiche besetzt sind, und das zweite die Reihenfolge der makrocyclischen Komponenten im Namen. Bei Rotaxanen vom Typ 5 werden die makrocyclischen Komponenten beginnend mit der äußersten nacheinander aufgeführt. Bei Rotaxanen der Typen 6–8 werden die Komponenten beginnend bei der äußersten für jeden linearen Bereich aufgelistet. Abbildung 19 illustriert dies für Rotaxane vom Typ 5 und 6.

Es sei darauf hingewiesen, dass es beim letzten [4]Rotaxan vom Typ 6 in Abbildung 19 keine Möglichkeit der Isomerie gibt, wenn die Achsenkomponente symmetrisch ist, sodass in diesem Fall das vereinfachte Präfix gemäß Abschnitt ROT-5.3 die Struktur eindeutig beschreibt. Wenn keine Isomere möglich sind oder wenn die exakte Position der einzelnen Komponenten

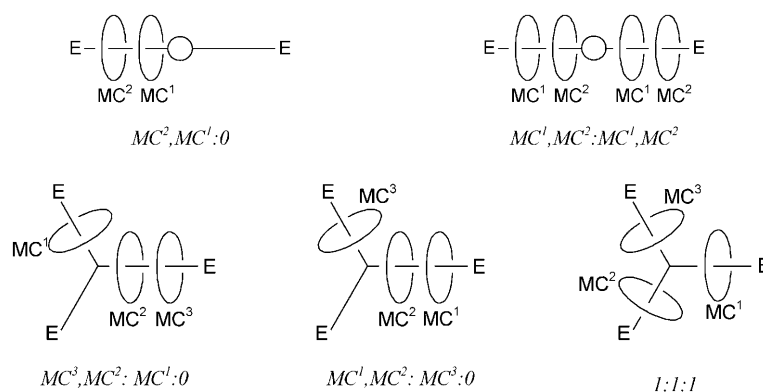


Abbildung 19. Beispiele für Rotaxane vom Typ 5 und 6 mit verschiedenen makrocyclischen Komponenten und ihre Präfixe.

nicht bekannt ist, können auch bei anderen Rotaxanen mit nichtäquivalenten Komponenten die vereinfachten Präfixe verwendet werden.

ROT-5.5.2 Spezifizierung der Positionen von nichtäquivalenten Achsenkomponenten

Die Positionen der Achsenkomponenten in isomeren Rotaxanen mit mehreren auffädelbaren Ringen werden durch eine Modifizierung der Präfixe aus Abschnitt ROT-5.2 beschrieben. Anstelle von Zahlen, die die Zahl der Achsenkomponenten in jedem auffädelbaren Ring angeben, werden die kursiv gestellten Kennzeichnungen TC^n verwendet, wobei TC für „threading component“ (Achsenkomponente) steht und n die Position der Achsenkomponente innerhalb des Gesamt Namens des Rotaxans angibt. In Abbildung 20 sind zwei isomere [4]Rotaxane vom Typ 3 gezeigt.

Wenn die auffädelbaren Ringe in einer komplexen makrocyclischen Komponente äquivalent sind, beginnt die Kennzeichnung der Achsenkomponenten mit dem am dichtesten besetzten auffädelbaren Ring, wobei die Achsenkomponenten mit niedrigeren Nummern möglichst früh genannt werden.



Abbildung 20. Beispiele für isomere [4]Rotaxane vom Typ 3 und ihre Präfixe.

ROT-5.5.3 Spezifizierung von Rotaxanen, die als molekulare Shuttles fungieren

Um die Assoziation einer makrocyclischen Komponente mit einer spezifischen Erkennungsstelle zu beschreiben, wird ein Präfix mit den kursiv gestellten Angaben rs^n-MC empfohlen, in dem rs für „recognition site“ (Erkennungsstelle) steht und n für die Zahl, die der Erkennungsstelle durch fortlaufende Nummerierung von einem Ende der Achsenkomponente zugewiesen wird. Die Prinzipien für die Benennung im Fall nichtäquivalenter Erkennungsstellen werden in einer gesonderten Veröffentlichung beschrieben werden.^[24] Abbildung 21 zeigt einige Beispiele für molekulare Shuttles. Bei Rotaxanen mit nur einer Erkennungsstelle oder mit zwei identischen Erkennungsstellen ist diese Kennzeichnung überflüssig. Will man zwischen assoziierten und nichtassoziierten Rotaxanformen unterscheiden, wird das Präfix $rsn-MC$ angefügt, um anzuzeigen, dass sich die makrocyclische Komponente an einer Erkennungsstelle befindet (siehe Abschnitt ROT-1.6).

Unterschiedliche makrocyclische Komponenten werden durch Verwenden von MC^n spezifiziert, das wie in Abschnitt ROT-5.5.1 beschrieben erstellt wird (siehe die letzte Struktur in Abbildung 21).

ROT-6 Beispiele für Rotaxane und ihre systematischen Namen

Im Folgenden werden die oben dargelegten Grundsätze der Rotaxannomenklatur zur Benennung einiger in der Literatur beschriebener Rotaxane genutzt. Die Namen der Rotaxankomponenten werden gemäß den IUPAC-Empfehlungen für die

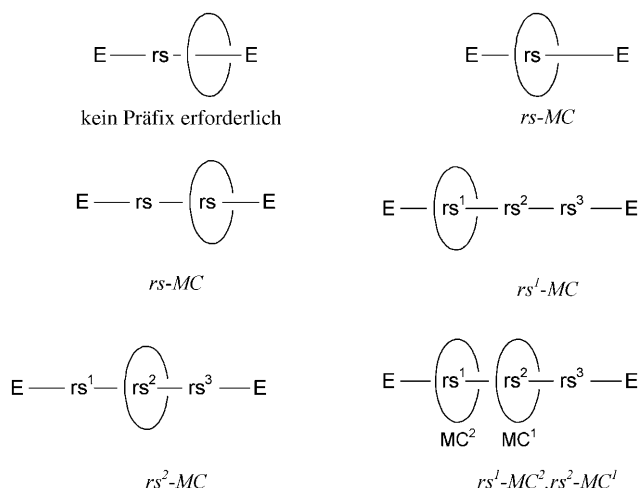
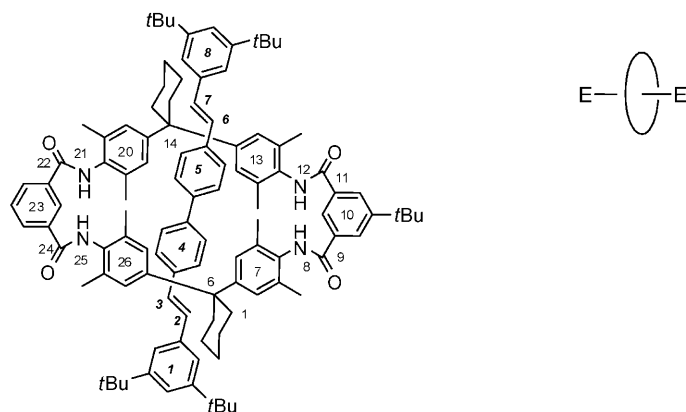


Abbildung 21. Beispiele für Rotaxane, die als molekulare Shuttles fungieren, und ihre Präfixe.

Benennung organischer Verbindungen erstellt.^[22,23] Da die Rotaxan­komponenten häufig mehrere cyclische Fragmente enthalten, wurden viele Verbindungen mithilfe der Phänomenklatur benannt.^[25,26] In allen Fällen, in denen die neuen Nomenklaturregeln zu anderen systematischen Namen führen, wurden diese neuen Regeln^[23] befolgt.

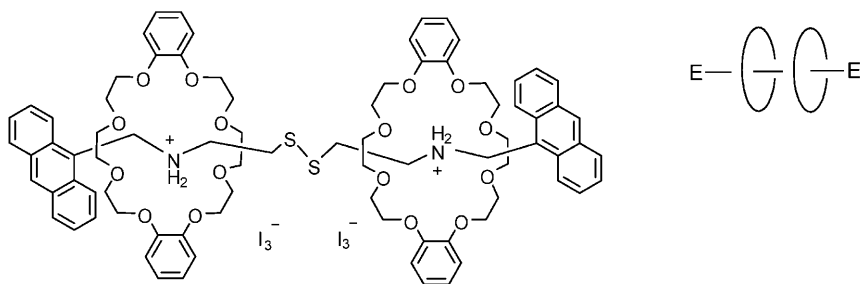
Alternativ sind weniger formale Namen für komplette Rotaxane für den Allgemeingebrauch akzeptabel, wenn für eine oder mehrere Komponenten semisystematische Namen, Trivialnamen oder Akronyme in der wissenschaftlichen Literatur allgemeingebäuchlich und die Akronyme definiert sind.

Beispiel 1: ein [2]Rotaxan vom Typ 1.1 aus symmetrischen Komponenten; es können keine Isomere auftreten.



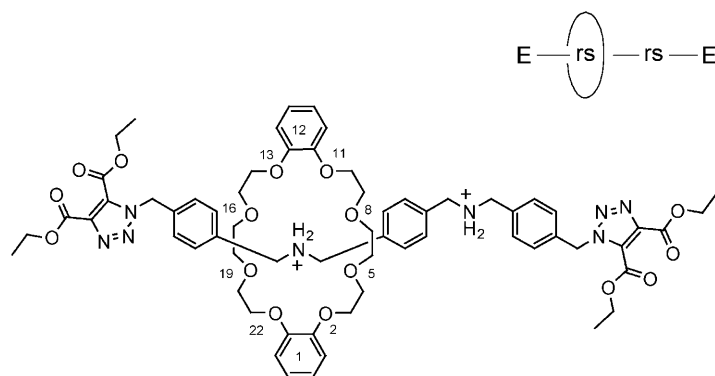
[2]{[(2*E*,6*E*)-1³,1⁵,8³,8⁵-Tetra-*tert*-butyl-1,8(1),4,5(1,4)-tetrabenzenaocaphan-2,6-dien]-rotaxa-[10⁵-*tert*-butyl-7³,7⁵,13²,13⁶,20³,20⁵,26³,26⁵-octamethyl-8,12,21,25-tetraaza-7,13,20,26(1,4),10,23(1,3)-hexabenzendispiro[5.7.5.7]hexacosaphan-9,11,22,24-tetron]}

Beispiel 2: ein [3]Rotaxan vom Typ 1.2 mit symmetrischen Komponenten; es können keine Isomere auftreten. In diesem Fall können neben dem exakten Namen (1) auch weniger formale Namen (2 und 3) verwendet werden; DB24C8 ist dabei ein Akronym für Dibenzo[24]krone-8.



- 1) [3]{[2,2'-Disulfandiylbis{N-[(anthracen-9-yl)methyl]ethan-1-aminium}]-
rotaxa-[2][6,7,9,10,12,13,20,21,23,24,26,27dodecahydrodibenzo[*b,n*]
[1,4,7,10,13,16,19,22]octaoxacyclotetracosin]}bis(triiodid)
- 2) [3]{[2,2'-Disulfandiylbis{N-[(anthracen-9-yl)methyl]ethan-1-aminium}]-
rotaxa-[2][dibenzo[24]krone-8]}bis(triiodid)
- 3) [3]{[2,2'-Disulfandiylbis{N-[(anthracen-9-yl)methyl]ethan-1-aminium}]-
rotaxa-[2][DB24C8]}bis(triiodid)

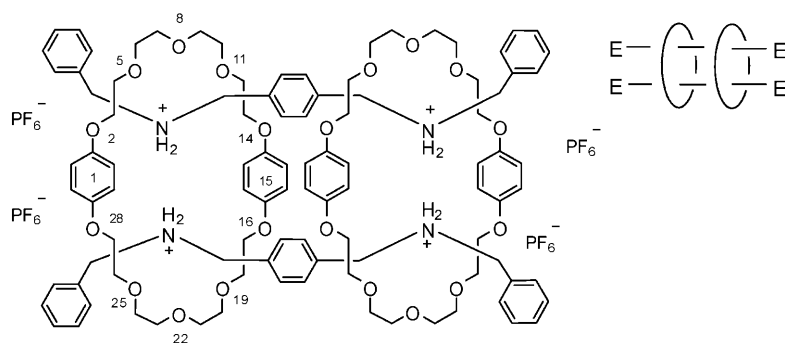
Beispiel 3: ein [2]Rotaxan vom Typ 1.1 aus symmetrischen Komponenten, das als molekulares Shuttle fungieren kann. Die Erkennungsstellen sind äquivalent; es können keine Isomere auftreten.



- [2]{[1,1'-(1,4-Phylen)bis[N-(4-{[4,5-bis(ethoxycarbonyl)-1*H*-1,2,3-triazol-1-yl]-
methyl}benzyl)methanaminium]]-rotaxa-[6,7,9,10,12,13,20,21,23,24,26,27-
dodecahydrodibenzo[*b,n*][1,4,7,10,13,16,19,22]octaoxacyclotetracosin]}

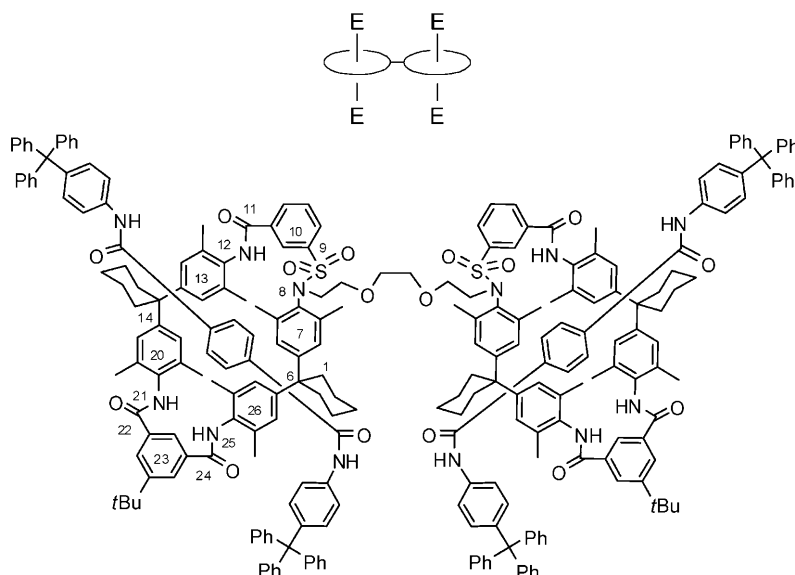
Anmerkung: Um zu betonen, dass die makrocyclische Komponente mit einer der beiden äquivalenten Erkennungsstellen assoziiert ist, kann das Präfix (*rs-MC*) angefügt werden.

Beispiel 4: ein [4]Pseudorotaxan vom Typ 2.2 mit symmetrischen Komponenten; es können keine Isomere auftreten.



[4]{[2][1,1'-(1,4-Phenylen)bis(*N*-benzylmethanaminium)]-rotaxa-[2][2,5,8,11,14,16,19,22,25,28-decaoxa-1,15(1,4)dibenzenacyclooctacosaphan]} tetrakis(hexafluoridophosphat)

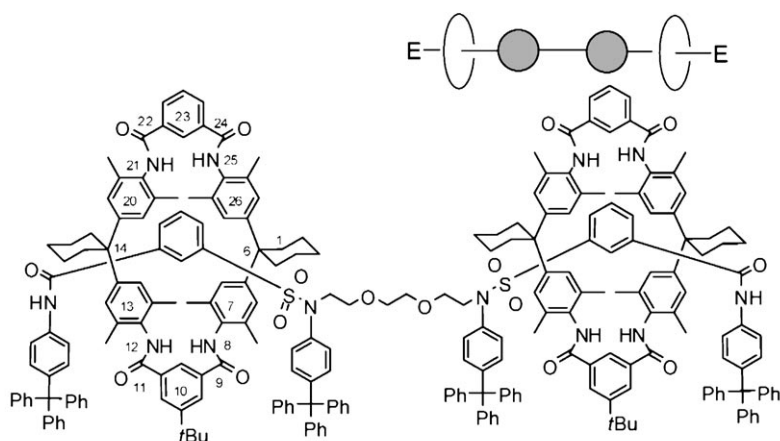
Beispiel 5: ein [3]Rotaxan vom Typ 3. Isomere mit unterschiedlichen Positionen der Achsenkomponenten sind möglich (siehe Tabelle 1). Das Präfix (*1:1*) wird zur Kennzeichnung des Isomers benötigt.



(*1:1*)-[3]{[2][*N,N'*-Bis(4-tritylphenyl)benzol-1,4-dicarboxamid]-rotaxa-[8,8'-[ethan-1,2-diylbis(oxyethan-1,2-diyl)]bis[23⁵-*tert*-butyl-7³,7⁵,13²,13⁶,20³,20⁵,26³,26⁵-octamethyl-9 λ ⁶-thia-8,12,21,25-tetraaza-7,13,20,26(1,4),10,23(1,3)-hexabenzendispiro[5.7.5.7]-hexacosaphan-9,9,11,22,24-penton]]}

Anmerkung: Hier und in anderen Beispielen wird der Name Ethan-1,2-diyl^[23] statt des traditionellen Namens Ethylen^[22] für die häufige Gruppe -CH₂-CH₂- verwendet. Die Angabe von Oxogruppen an Schwefelatomen als Suffixe entspricht den neuen Nomenklaturregeln.^[23]

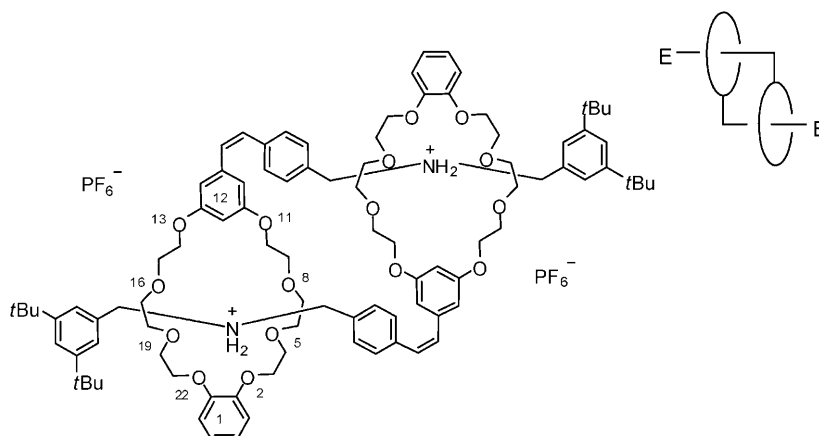
Beispiel 6: ein [3]Rotaxan vom Typ 5 aus zwei symmetrischen makrocyclischen Komponenten und einer Achsenkomponente mit drei linearen Bereichen. Isomere sind möglich. Die Zahl der makrocyclischen Komponenten in jedem linearen Bereich muss angegeben werden.



(1:0:1)-[3]{[3,3'-(Ethan-1,2-diylbis{oxyethan-1,2-diyl[(4-tritylphenyl)azandiyl]sulfonyl})-bis[*N*-(4-tritylphenyl)benzamid]]-rotaxa-[2][10⁵-*tert*-butyl-7³,7⁵,13²,13⁶,20³,20⁵,26³,26⁵-octamethyl-8,12,21,25-tetraaza-7,13,20,26(1,4),10,23(1,3)-hexabenzenadispiro[5.7.5.7]hexacosaphan-9,11,22,24-tetron]}

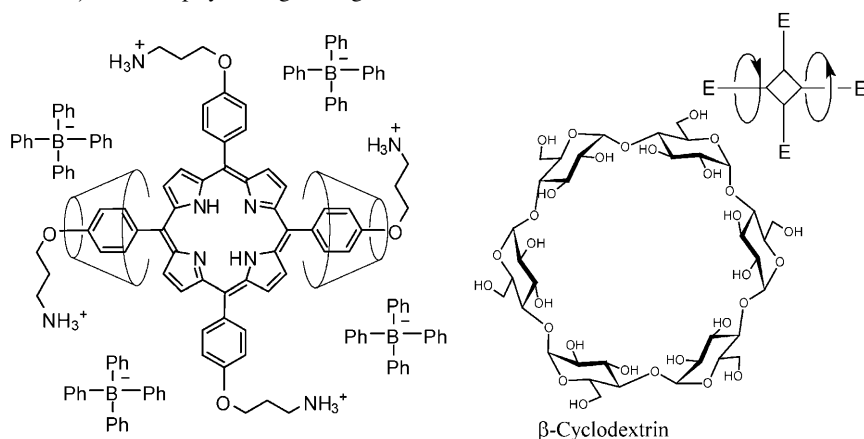
Anmerkung: Wenn die Achsenkomponente in diesem Fall behandelt würde, als habe sie nur zwei lineare Bereiche, in denen die makrocyclischen Komponenten positioniert sein können, wäre das Präfix (1:1).

Beispiel 7: ein cyclisches Blümchenkettens-[2]Rotaxan vom Typ 10 aus zwei symmetrischen Komponenten; es können keine Isomere auftreten.



[cyclo-2]{rotaxa-[*N*-(3,5-Di-*tert*-butylbenzyl)-1-(4-{(Z)-2-[2,5,8,11,13,16,19,22-octaoxa-1(1,2),12(1,3)-dibenzenacyclodocosaphan-12⁵-yl]ethenyl}phenyl)-methanaminium]}bis(hexafluoridophosphat)

Beispiel 8: ein [3]Pseudorotaxan vom Typ 7 aus zwei makrocyclischen Komponenten und einer X-förmigen Achsenkomponente mit vier linearen Bereichen und einer quadratisch-planaren Topologie. Isomere mit unterschiedlichen Positionen der makrocyclischen Komponenten sind möglich. Die Zahl und die Positionen der makrocyclischen Komponenten müssen spezifiziert werden. Die Kegel im linken Formelbild symbolisieren β -Cyclodextrinmoleküle, deren größere Öffnung mit zwei Hydroxygruppen (2,3-Kante) zum Porphyrinfragment gerichtet ist.

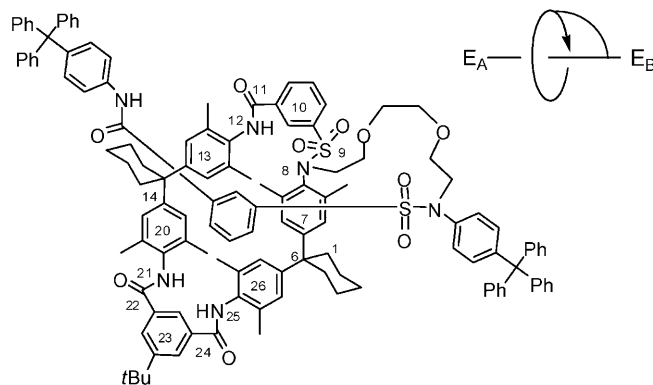


(1:0:1:0)-[3]{[3,3',3'',3''']-(Porphyrin-5,10,15,20-tetrayl)tetrakis(4,1-phenylenoxy)}-tetra(propan-1-aminium)]-rotaxa-[2][β -cyclodextrin]} tetrakis(tetraphenylboranuid)

Anmerkung 1: Es sei darauf hingewiesen, dass Isomere mit unterschiedlicher Orientierung der β -Cyclodextrinkomponenten möglich sind. Die Spezifizierung solcher Isomere und eine detailliertere Diskussion von Cyclodextrinkomponenten werden in einer gesonderten Veröffentlichung zu finden sein.^[24]

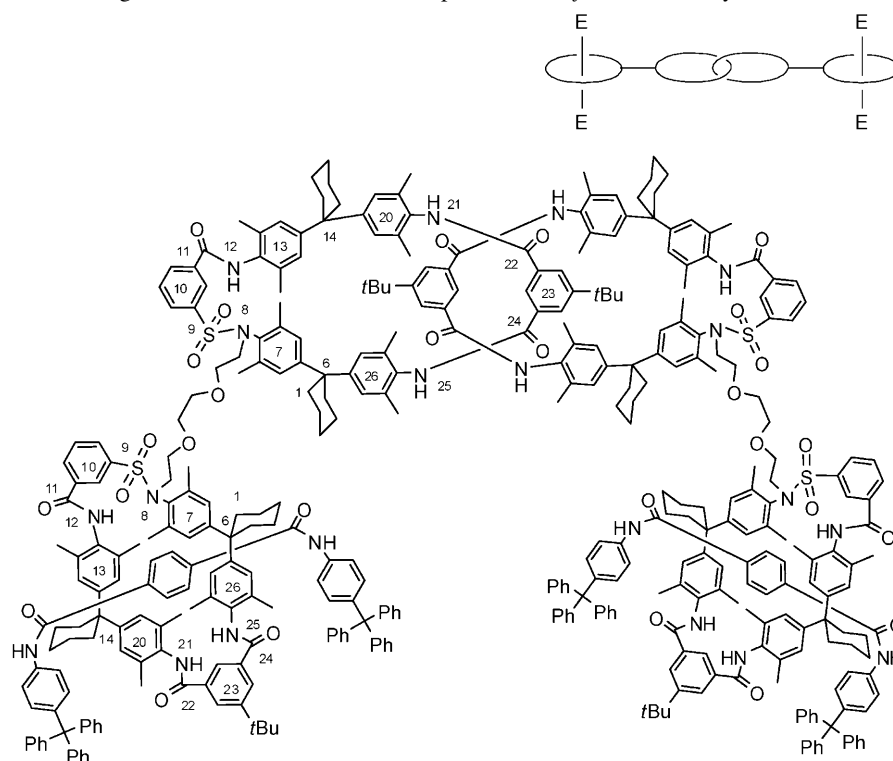
Anmerkung 2: Der gebräuchlichere Name „Tetraphenylborat“ kann als alternativer Name für das Anion verwendet werden.

Beispiel 9: ein [1]Rotaxan vom Typ 9; Stereoisomere sind möglich. Die Spezifizierung dieser Isomere wird in einer gesonderten Veröffentlichung beschrieben werden.^[24]



rotaxa-[1][3-{[2-(2-{2-[23⁵-tert-Butyl-7³,7⁵,13²,13⁶,20³,20⁵,26³,26⁵-octamethyl-9,9,11,22,24-pentaoxo-9 λ ⁶-thia-8,12,21,25-tetraaza-7,13,20,26(1,4),10,23(1,3)-hexabenzonadispiro[5.7.5.7]hexacosaphan-8-yl}ethoxy}ethoxy)ethyl]-[(4-tritylphenyl)amino]sulfonyl]-N-(4-tritylphenyl)benzamid]

Beispiel 10: ein [3]Rotaxan vom Typ 11 ([4]Catenarotaxan) aus zwei symmetrischen Achsenkomponenten und einem Catenan aus zwei Komponenten als makrocyclischer Komponente. Die Catenankomponente hat vier makrocyclische Bereiche. Isomere sind möglich. Die Angabe der Zahl der Achsenkomponenten in jedem makrocyclischen Bereich ist notwendig.



(1:0:0:1)-[3]{[2][N,N'-Bis(4-tritylphenyl)benzol-1,4-dicarboxamid]-rotaxa-
[(1-1)-[2](catena-{8,8'-[ethan-1,2-diylbis(oxyethan-1,2-diyl)]bis[23⁵-tert-butyl-
7³,7⁵,13²,13⁶,20³,20⁵,26³,26⁵-octamethyl-9 λ ⁶-thia-8,12,21,25-tetraaza-7,13,20,26(1,4),
10,23(1,3)-hexabenzonadisp[5.7.5.7]hexacosaphan 9,9,11,22,24-penton}})]}

- [1] A. Lüttringhaus, F. Cramer, H. Prinzbach, F. M. Henglein, *Liebigs Ann. Chem.* **1958**, 613, 185.
- [2] H. L. Frisch, E. Wasserman, *J. Am. Chem. Soc.* **1961**, 83, 3789.
- [3] I. T. Harrison, S. Harrison, *J. Am. Chem. Soc.* **1967**, 89, 5723.
- [4] G. Schill, H. Zöllenkopf, *Nachr. Chem. Tech.* **1967**, 79, 149.
- [5] G. Schill, H. Zöllenkopf, *Liebigs Ann. Chem.* **1969**, 721, 53.
- [6] „Nomenclature of catenanes and rotaxanes“: G. Schill in *Catenanes, Rotaxanes, and Knots* (Hrsg.: J. Boeckmann), Academic Press, New York, **1971**.
- [7] O. Safarowsky, B. Windisch, A. Mohry, F. Vögtle, *J. Prakt. Chem.* **2000**, 342, 437.
- [8] D. Walba, *Tetrahedron* **1985**, 41, 3161.
- [9] H. W. Gibson, M. C. Bheda, P. T. Engen, *Prog. Polym. Sci.* **1994**, 19, 843.
- [10] C. Reuter, R. Schmieder, F. Vögtle, *Pure Appl. Chem.* **2000**, 72, 2233.
- [11] „Templated synthesis of catenanes and rotaxanes“: F. M. Raymo, J. F. Stoddart in *Templated Organic Synthesis* (Hrsg.: F. Diederich, P. J. Stang), Wiley-VCH, Weinheim, **2000**, S. 75–104.
- [12] J.-C. Chambron, *Perspect. Supramol. Chem.* **1999**, 5, 225.
- [13] „Mechanically Linked Oligorotaxanes“: M. P. L. Werts, Dissertation, Universität Groningen, Niederlande, **2001**. Die Arbeit mit einem Überblick über die unterschiedlichen generischen Rotaxantypen in Kapitel 1 ist auch online erhältlich: <http://irs.ub.rug.nl/ppn/229353703/>.
- [14] a) D. Philp, J. F. Stoddart, *Angew. Chem.* **1996**, 108, 1242; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1996**, 35, 1154.
- [15] D. B. Amabilino, J. F. Stoddart, *Chem. Rev.* **1995**, 95, 2725.
- [16] „Rotaxanes“: H. W. Gibson in *Large Ring Molecules* (Hrsg.: J. A. Semlyen), Wiley, New York, **1996**, S. 191–262.
- [17] A. Harada, *Adv. Polym. Sci.* **1997**, 133, 141.
- [18] *Molecular Catenanes, Rotaxanes and Knots* (Hrsg.: J.-P. Sauvage, C. Dietrich-Buchecker), Wiley-VCH, Weinheim, **1999**.
- [19] I. G. Panova, I. N. Topchieva, *Russ. Chem. Rev.* **2001**, 70, 23.
- [20] IUPAC, *Compendium of Chemical Terminology*, 2. Aufl. („The Gold Book“), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1997**. Das „Gold Book“ ist auch online verfügbar: <http://goldbook.iupac.org>.
- [21] IUPAC, *Pure Appl. Chem.* **1996**, 68, 2287; online verfügbar unter <http://www.iupac.org/reports/1996/6812jenkins/index.html>.

- [22] IUPAC, *A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds* (IUPAC Recommendations 1993) („The Blue Book“). Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1993**; siehe auch: „*Corrections to A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds* (IUPAC Recommendations 1993)“: *Pure Appl. Chem.* **1999**, *71*, 1327; siehe auch IUPAC, *Nomenklatur der Organischen Chemie*, VCH, Weinheim, **1997**.
- [23] IUPAC, *Preferred names in the nomenclature of organic compounds*; eine vorläufige Version ist verfügbar unter http://www.iupac.org/reports/provisional/abstract04/favre_310305.html.
- [24] IUPAC, Nomenclature for stereoisomeric rotaxanes and pseudorotaxanes, in Vorbereitung.
- [25] IUPAC, *Pure Appl. Chem.* **1998**, *70*, 1513; deutsche Übersetzung: K.-H. Hellwich, *Angew. Chem.* **2006**, *118*, 3967–3984.
- [26] IUPAC, *Pure Appl. Chem.* **2002**, *74*, 809; deutsche Übersetzung: K.-H. Hellwich, *Angew. Chem.* **2006**, *118*, 6023–6033.
- [27] Der Originaltext wurde von einer Arbeitsgruppe der Chemical Nomenclature and Structure Representation Division der International Union of Pure and Applied Chemistry erarbeitet. Ihr gehörten A. Yerin (Moskau), E. S. Wilks (USA), G. P. Moss (Großbritannien) und A. Harada (Japan) an. Dem Divisionskomitee gehörten zum Zeitpunkt der Annahme der Empfehlung folgende Personen an: G. P. Moss (Präsident), R. M. Hartshorn (Vizepräsident), T. Damhus (Sekretär); Titularmitglieder: J. Brecher, K. Degtyarenko, S. R. Heller, K.-H. Hellwich, P. Hodge, A. T. Hutton, G. J. Leigh, J. Wilson; assoziierte Mitglieder: J. Kahovec, R. G. Jones, A. Lawson, E. Norlander, J. Nyitrai, W. H. Powell, A. Yerin; nationale Vertreter: F. L. Ansari (Pakistan), Y. Do (Korea), I. L. Dukov (Bulgarien), Md. A. Hashem (Bangladesh), L. H. J. Lajunen (Finnland), H. Ogino (Japan), J. Reedijk (Niederlande); ex officio: D. Schomburg. Weitere Beiträge zu dieser Empfehlung kamen von W. H. Powell (USA), W. V. Metanowski (USA), K.-H. Hellwich (Deutschland), H. A. Favre (Kanada) und G. Eller (Österreich).
-