

# Vorlesung Physikalisch-Organische und Supramolekulare Chemie

Prof. Dr. Christoph A. Schalley

## Quickie Nr. 21:

Das unten abgebildete C-förmige Molekül (R ist *p*-Heptylphenyl und dient nur dazu, das Molekül in organischen Lösemitteln löslich zu machen) kann über insgesamt 16 Wasserstoffbrücken dimere Kapseln bilden, die in ihrem Hohlraum Gastmoleküle aufnehmen. Ein Modell der Kapsel ist unten gezeigt.

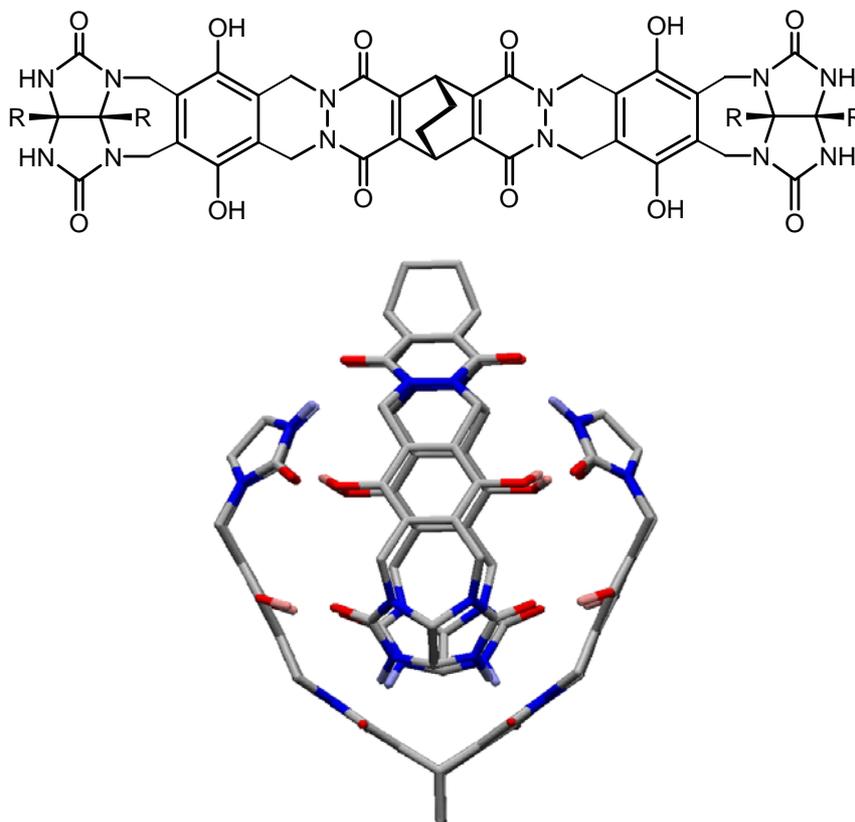


Table 1: Guest binding data in benzene-*d*<sub>6</sub>

Guest	$\Delta G$ (kJ/mol)	$\Delta H$ (kJ/mol)	$\Delta S$ (J/molK)
1-adamantane carboxylic acid	-7.6	+13.4	+70.6
1-ferrocene carboxylic acid	-10.1	+45.6	+186.8

- a) Nur der Klarheit zuliebe: Machen Sie sich bewusst, welche funktionellen Gruppen jeweils miteinander über H-Brücken verknüpft sind!
- b) Woran erkennen Sie den Einschluss eines Gastmoleküle im Inneren? Welche Methode würden Sie heranziehen, um diese Vermutung zu belegen?
- c) Unter der Grafik sind thermodynamische Daten für den Einschluss einiger Gäste zusammengestellt. Wie Sie sehen, ist der Einschluss enthalpisch ungünstig. Letztlich treibt die Entropie den Gast in die Kapsel. Geben Sie eine Erklärung wie das sein kann, obwohl zwei Teilchen zu einem Komplex vereinigt werden!
- d) Erklären Sie, warum der Gasteinschluss ungünstig wird, wenn 1. die Form nicht zur Form des Hohlraums passt, oder wenn 2. der Gast zwar von der Form her passen würde, aber entweder nach unten oder oben deutlich von einem Füllgrad von 55% abweicht!

The C-shaped molecule shown above (R is *p*-heptyl phenyl and is needed to make the capsule soluble in organic solvents) can form dimeric capsules through a seam of 16 hydrogen bonds. In their cavity, the capsules can bind guest molecules. A model of the capsule is shown above.

- a) Just for clarity: Identify which functional groups are involved in the formation of hydrogen bonds with which other functional groups!
- b) How can you recognize whether a guest is inside or outside? Which method would you use?
- c) In the Table above, you find thermodynamic data for the encapsulation of two guest molecules. As you will see, encapsulation is enthalpically unfavorable. Entropy is driving guest inclusion, although two molecules are combined into one complex. Explain this finding!
- d) Explain, why the encapsulation of guests becomes unfavorable, if 1. the shape is not congruent with the shape of the cavity, 2. the guest would fit with respect to its shape, but is significantly smaller or larger than 55% of the cavity volume!