

Quantification de molécules invitées dans différents hôtes : une étude combinée DRXm/Analyse Élémentaire

Grégory EXCOFFIER (Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, FSCM, Spectropole, Marseille)

David BARDELANG (Aix Marseille Univ, CNRS, ICR, Marseille)

Abstract

Depuis quelques décennies, la chimie à l'état liquide des complexes hôte/invité s'est beaucoup développée (pharmaceutique, environnement, catalyse, chimie analytique, ...). C'est aussi le cas pour l'état solide, mais plus récemment. Pour étudier ces complexes, il est nécessaire de connaître la quantité de molécule invitée piégée dans la molécule hôte.

Quelques techniques instrumentales peuvent permettre de quantifier les molécules invitées. Nous nous intéressons ici à la Diffraction des Rayons X sur monocristal (DRXm) et à l'Analyse Élémentaire (AE).

Nous avons pris comme exemples un complexe hôte/invité, le bTbk*/toluène, et un complexe avec un hôte et deux types d'invité : le CB[8]*/TMB-AZAP*/eau et CB[8]/TMB-AZAP/iode^[1,2]. Le bTbk est une molécule organique qui permet de piéger des molécules dans des canaux, dus à son packing (porosité extrinsèque). Le CB[8] est une molécule organique macrocyclique qui permet de piéger des molécules dans sa cavité (porosité intrinsèque). Les complexes CB[8]/TMB-AZAP/eau et iode ont une porosité intrinsèque et extrinsèque.

Nous comparons leurs résultats de quantification et montrons la complémentarité des deux techniques.

*bTbk : bis(TEMPO) bisketal ; CB[8] : cucurbit[8]uril ; TMB-AZAP : trimethoxybenzyl-azaphosphatane

[1] : Bardelang, D. et al. Cryst. Growth Des. 2014, 14, 467-476

[2] : Xue Yang et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202214039