

REINHARD MECKE und WERNER KUTZELNIGG

Über Harnstoffadduktbildung stellungsisomerer n-Alkanderivate

Notiz zur Arbeit von G. Geiseler und P. Richter¹⁾

Aus dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Freiburg i. Br. und dem
Laboratorium für Theoretische Chemie der Universität Paris

(Eingegangen am 13. November 1961)

G. GEISELER und P. RICHTER¹⁾ haben beobachtet, daß die CH_2 -Frequenzen gewisser stellungsisomerer n-Alkanderivate in den reinen Flüssigkeiten und in den Harnstoff-Einschlußverbindungen bei etwas verschiedenen Frequenzen liegen und daß die Frequenzänderungen bei den verschiedenen Stellungsisomeren verschieden groß sind. Daraus schlossen sie auf Wirt-Gast-Wechselwirkungen und darauf, daß diese beim Aufbau der Gitter der Einschlußverbindungen entgegen der üblichen Auffassung eine Rolle spielen. Die Interpretation der Frequenzänderungen in diesem Sinne ist aus folgenden Gründen aber keineswegs zwingend:

1. Die CH_2 -Absorption, die man beobachtet, rührt nicht von einer einzigen, sondern von der Überlappung der Banden mehrerer CH_2 -Gruppen her, die bei Anwesenheit einer polaren Gruppe im Molekül sicher nicht alle genau bei der gleichen Frequenz absorbieren. Die Frequenzänderung einer solchen durch Überlagerung mehrerer Banden entstehenden Absorption ist recht unübersichtlich.

2. Die intermolekularen Wechselwirkungen, die in der Flüssigkeit bestehen, sind in der Einschlußverbindung nicht mehr möglich, in ihren Kanälen ist das Alkanderivat gewissermaßen isoliert-monomer.

3. In Flüssigkeiten aliphatischer Kettenverbindungen liegt immer ein Gemisch von Rotationsisomeren vor, während im Kanal der Einschlußverbindungen nur eine völlig gestreckte Zickzack-Form möglich ist. Wahrscheinlich beruhen die beobachteten Unterschiede der Spektren hauptsächlich hierauf.

Wir haben nie bestritten, daß Wirt-Gast-Wechselwirkungen in Harnstoff-Einschlußverbindungen grundsätzlich möglich sind, nur gibt es u. E. bisher keinen eindeutigen IR-spektroskopischen Hinweis auf sie^{2,3)}. Vor allem sind sie aber für das Zustandekommen der Einschlußverbindungen unwesentlich.

¹⁾ Chem. Ber. **93**, 2511 [1960].

²⁾ Z. analyt. Chem. **170**, 114 [1959].

³⁾ W. KUTZELNIGG, R. MECKE, B. SCHRADER, F. NERDEL und G. KRESSE, Z. Elektrochem., Ber. Bunsenges. physik. Chem. **65**, 109 [1961].