

Highly Effective Receptors Showing Di- vs Monosaccharide Preference

Monika Mazik* and Arno C. Buthe

*Institut für Organische Chemie der Technischen Universität Braunschweig, Hagenring 30, 38106
Braunschweig, Germany*

I Description of the ^1H NMR and fluorescence titrations

For each system at least three ^1H NMR titrations were carried out; for each titration 15-20 samples were prepared. For each fluorescence titration 20 samples were prepared (at least two fluorescence titrations were carried out). Examples are given in points S1-S11.

S1. ^1H NMR titration of receptor **1** with dodecyl β -D-maltoside (**3**) in CDCl_3 (the receptor in CDCl_3 was titrated with a solution of maltoside dissolved in the same receptor solution).

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00101321	1	0,0000
2	0,00011985	0,00101321	1	0,1183
3	0,00023970	0,00101321	1	0,2366
4	0,00031961	0,00101321	1	0,3154
5	0,00039951	0,00101321	1	0,3943
6	0,00047941	0,00101321	1	0,4732
7	0,00059926	0,00101321	1	0,5914
8	0,00067916	0,00101321	1	0,6703
9	0,00079901	0,00101321	1	0,7886
9a	0,00091886	0,00101321	1	0,9069
10	0,00107867	0,00101321	1	1,0646
11	0,00135832	0,00101321	1	1,3406
12	0,00179778	0,00101321	1	1,7743
13	0,00239704	0,00101321	1	2,3658
14	0,00279655	0,00101321	1	2,7601
15	0,00319605	0,00101321	1	3,1544

S2. ^1H NMR titration of receptor **1** with dodecyl α -D-maltoside (**4**) in CDCl_3 (the receptor in CDCl_3 was titrated with a solution of maltoside dissolved in the same receptor solution).

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00121282	1	0,0000
2	0,00008901	0,00121282	1	0,0734
3	0,00017802	0,00121282	1	0,1468
4	0,00023735	0,00121282	1	0,1957
5	0,00029669	0,00121282	1	0,2446
6	0,00035603	0,00121282	1	0,2936
7	0,00044504	0,00121282	1	0,3669
8	0,00050438	0,00121282	1	0,4159
9	0,00059338	0,00121282	1	0,4893
9a	0,00068239	0,00121282	1	0,5627
10	0,00080107	0,00121282	1	0,6605
11	0,00100875	0,00121282	1	0,8317

12	0,00133512	0,00121282	1	1,1008
13	0,00178015	0,00121282	1	1,4678
14	0,00207685	0,00121282	1	1,7124
15	0,00237354	0,00121282	1	1,9570

S3. ^1H NMR titration of receptor **1** with octyl β -D-glucopyranoside (**5**) in CDCl_3 .

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00102407	1	0,0000
2	0,00049251	0,00102407	1	0,4809
3	0,00065668	0,00102407	1	0,6412
4	0,00082085	0,00102407	1	0,8016
5	0,00114919	0,00102407	1	1,1222
6	0,00164170	0,00102407	1	1,6031
7	0,00197004	0,00102407	1	1,9237
8	0,00229838	0,00102407	1	2,2444
9	0,00279089	0,00102407	1	2,7253
10	0,00328340	0,00102407	1	3,2062
11	0,00361174	0,00102407	1	3,5268
12	0,00410425	0,00102407	1	4,0078
13	0,00508927	0,00102407	1	4,9696
14	0,00607429	0,00102407	1	5,9315
15	0,00705931	0,00102407	1	6,8934
16	0,00820850	0,00102407	1	8,0155

S4. ^1H NMR titration of receptor **2** with dodecyl β -D-maltoside (**3**) in CDCl_3 (the receptor in CDCl_3 was titrated with a solution of maltoside dissolved in the same receptor solution).

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00102611	1	0,0000
2	0,00011780	0,00102611	1	0,1148
3	0,00023559	0,00102611	1	0,2296
4	0,00031412	0,00102611	1	0,3061
5	0,00039265	0,00102611	1	0,3827
6	0,00047118	0,00102611	1	0,4592
7	0,00058898	0,00102611	1	0,5740
8	0,00066751	0,00102611	1	0,6505
9	0,00078530	0,00102611	1	0,7653
9a	0,00090310	0,00102611	1	0,8801
10	0,00106016	0,00102611	1	1,0332
11	0,00133502	0,00102611	1	1,3010
12	0,00176693	0,00102611	1	1,7220
13	0,00235591	0,00102611	1	2,2960
14	0,00274857	0,00102611	1	2,6786
15	0,00314122	0,00102611	1	3,0613

S5. ^1H NMR titration of receptor **2** with dodecyl α -D-maltoside (**4**) in CDCl_3 (the receptor in CDCl_3 was titrated with a solution of maltoside dissolved in the same receptor solution).

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00102732	1	0,0000
2	0,00011926	0,00102732	1	0,1161
3	0,00023853	0,00102732	1	0,2322
4	0,00031804	0,00102732	1	0,3096
5	0,00039755	0,00102732	1	0,3870
6	0,00047706	0,00102732	1	0,4644
7	0,00059632	0,00102732	1	0,5805
8	0,00067583	0,00102732	1	0,6579
9	0,00079510	0,00102732	1	0,7740
9a	0,00091436	0,00102732	1	0,8900
10	0,00107338	0,00102732	1	1,0448
11	0,00135166	0,00102732	1	1,3157
12	0,00178897	0,00102732	1	1,7414
13	0,00238529	0,00102732	1	2,3219
14	0,00278284	0,00102732	1	2,7088
15	0,00318039	0,00102732	1	3,0958

S6. ^1H NMR titration of receptor **2** with octyl β -D-glucopyranoside (**5**) in CDCl_3 .

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00102466	1	0,0000
2	0,00049354	0,00102466	1	0,4817
3	0,00065805	0,00102466	1	0,6422
4	0,00082256	0,00102466	1	0,8028
5	0,00115158	0,00102466	1	1,1239
6	0,00164512	0,00102466	1	1,6055
7	0,00197414	0,00102466	1	1,9266
8	0,00230317	0,00102466	1	2,2477
9	0,00279670	0,00102466	1	2,7294
10	0,00329024	0,00102466	1	3,2110
11	0,00361926	0,00102466	1	3,5321
12	0,00411280	0,00102466	1	4,0138
13	0,00509987	0,00102466	1	4,9771
14	0,00608694	0,00102466	1	5,9404
15	0,00707401	0,00102466	1	6,9037
16	0,00822560	0,00102466	1	8,0276

S7. Fluorescence titration of receptor **2** with dodecyl β -D-maltoside (**3**) in CHCl_3 .

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00017565	1	0,0000
2	0,00001435	0,00017565	1	0,0817
3	0,00002870	0,00017565	1	0,1634
4	0,00004305	0,00017565	1	0,2451
5	0,00005740	0,00017565	1	0,3268

6	0,00008609	0,00017565	1	0,4901
7	0,00011479	0,00017565	1	0,6535
8	0,00014349	0,00017565	1	0,8169
9	0,00017219	0,00017565	1	0,9803
10	0,00020088	0,00017565	1	1,1436
11	0,00022958	0,00017565	1	1,3070
12	0,00025828	0,00017565	1	1,4704
13	0,00028698	0,00017565	1	1,6338
14	0,00031567	0,00017565	1	1,7971
15	0,00034437	0,00017565	1	1,9605
16	0,00037307	0,00017565	1	2,1239
17	0,00040177	0,00017565	1	2,2873
18	0,00043046	0,00017565	1	2,4506
19	0,00045916	0,00017565	1	2,6140
20	0,00048786	0,00017565	1	2,7774

S8. Fluorescence titration of receptor **2** with dodecyl α -D-maltoside (**4**) in CHCl_3 .

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00017565	1	0,0000
2	0,00001508	0,00017565	1	0,0858
3	0,00003016	0,00017565	1	0,1717
4	0,00004524	0,00017565	1	0,2575
5	0,00006032	0,00017565	1	0,3434
6	0,00009048	0,00017565	1	0,5151
7	0,00012064	0,00017565	1	0,6868
8	0,00015079	0,00017565	1	0,8585
9	0,00018095	0,00017565	1	1,0302
10	0,00021111	0,00017565	1	1,2019
11	0,00024127	0,00017565	1	1,3736
12	0,00027143	0,00017565	1	1,5453
13	0,00030159	0,00017565	1	1,7169
14	0,00033175	0,00017565	1	1,8886
15	0,00036191	0,00017565	1	2,0603
16	0,00039206	0,00017565	1	2,2320
17	0,00042222	0,00017565	1	2,4037
18	0,00045238	0,00017565	1	2,5754
19	0,00048254	0,00017565	1	2,7471
20	0,00051270	0,00017565	1	2,9188

S9. Fluorescence titration of receptor **2** with octyl β -D-glucopyranoside (**5**) CHCl_3 .

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00017565	1	0,0000
2	0,00005163	0,00017565	1	0,2939
3	0,00010326	0,00017565	1	0,5879
4	0,00015490	0,00017565	1	0,8818
5	0,00020653	0,00017565	1	1,1758
6	0,00030979	0,00017565	1	1,7636
7	0,00041306	0,00017565	1	2,3515

8	0,00051632	0,00017565	1	2,9394
9	0,00061958	0,00017565	1	3,5273
10	0,00072285	0,00017565	1	4,1152
11	0,00082611	0,00017565	1	4,7031
12	0,00092938	0,00017565	1	5,2909
13	0,00103264	0,00017565	1	5,8788
14	0,00113590	0,00017565	1	6,4667
15	0,00123917	0,00017565	1	7,0546
16	0,00134243	0,00017565	1	7,6425
17	0,00144570	0,00017565	1	8,2304
18	0,00154896	0,00017565	1	8,8182
19	0,00165222	0,00017565	1	9,4061
20	0,00175549	0,00017565	1	9,9940

S10. Fluorescence titration of receptor **8** with dodecyl β -D-maltoside (**3**) in CHCl_3 .

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00023883	1	0,0000
2	0,00002013	0,00023883	1	0,0843
3	0,00004027	0,00023883	1	0,1686
4	0,00006040	0,00023883	1	0,2529
5	0,00008053	0,00023883	1	0,3372
6	0,00010067	0,00023883	1	0,4215
7	0,00012080	0,00023883	1	0,5058
8	0,00014093	0,00023883	1	0,5901
9	0,00016107	0,00023883	1	0,6744
10	0,00018120	0,00023883	1	0,7587
11	0,00020134	0,00023883	1	0,8430
12	0,00024160	0,00023883	1	1,0116
13	0,00028187	0,00023883	1	1,1802
14	0,00032214	0,00023883	1	1,3488
15	0,00036240	0,00023883	1	1,5174
16	0,00040267	0,00023883	1	1,6860
17	0,00048320	0,00023883	1	2,0232
18	0,00056374	0,00023883	1	2,3604
19	0,00064427	0,00023883	1	2,6976
20	0,00068454	0,00023883	1	2,8662

S11. Fluorescence titration of receptor **8** with octyl β -D-glucopyranoside (**5**) CHCl_3 .

	[Sugar] mol/L	[Receptor] mol/L	Ratio	
			[Receptor]	[Sugar]
1	0,00000000	0,00025931	1	0,0000
2	0,00007619	0,00025931	1	0,2938
3	0,00015238	0,00025931	1	0,5876
4	0,00022858	0,00025931	1	0,8815
5	0,00030477	0,00025931	1	1,1753
6	0,00038096	0,00025931	1	1,4691
7	0,00045715	0,00025931	1	1,7629
8	0,00053334	0,00025931	1	2,0567
9	0,00060953	0,00025931	1	2,3506

10	0,00068573	0,00025931	1	2,6444
11	0,00076192	0,00025931	1	2,9382
12	0,00091430	0,00025931	1	3,5259
13	0,00106668	0,00025931	1	4,1135
14	0,00121907	0,00025931	1	4,7011
15	0,00137145	0,00025931	1	5,2888
16	0,00152383	0,00025931	1	5,8764
17	0,00182860	0,00025931	1	7,0517
18	0,00213337	0,00025931	1	8,2270
19	0,00243813	0,00025931	1	9,4023
20	0,00259052	0,00025931	1	9,9899