

研究论文

硫酰杯[4]芳烃羧酸类衍生物及其配合物的合成、晶体结构与表征

郭倩玲¹, 屈一新¹, 马淑兰², 朱文祥²

1. 北京化工大学化学工程学院, 北京 100029;
2. 北京师范大学化学系, 北京 100875

收稿日期 2005-12-29 修回日期 网络版发布日期 2006-11-4 接受日期

摘要 合成了5,11,17,23-四叔丁基-25,26,27-三[(乙酯基)甲氧基]-2,8,14,20-四硫酰杯[4]芳烃(L1)和5,11,17,23-四叔丁基-25,26,27-三(氧基乙酸)-2,8,14,20-四硫酰杯[4]芳烃(L2)及L2的稀土配合物, 采用元素分析、紫外光谱、红外光谱和¹H NMR对其结构进行了表征. 用SMART 1000 CCD X射线衍射仪测定了L1的晶体结构. 结果表明, L1组成为: C₅₂H₆₅KO₁₈S₄·0.5H₂O, 属三斜晶系, P1空间群, 晶胞参数 $a=1.2607(6)$ nm, $b=1.5820(8)$ nm, $c=1.6480(8)$ nm; $\alpha=83.720(8)^\circ$, $\beta=69.327(8)^\circ$, $\gamma=79.342(9)^\circ$, $Z=2$, $V=3.019(3)$ nm³, $D_c=1.270$ g/cm³, $F(000)=1218$, $\mu=0.293$ mm⁻¹, $R_1=0.0937$, $wR_2=0.2580$. 杯芳烃分子采取部分锥式构象.

关键词 [硫酰杯\[4\]芳烃](#) [羧酸类衍生物](#) [稀土配合物](#) [晶体结构](#)

分类号 [0611](#)

Synthesis, Crystal Structure and Characterization of Carboxylic Derivatives of Sulfonylcalix[4]arene

GUO Qian-Ling¹, QU Yi-Xin¹, MA Shu-Lan², ZHU Wen-Xiang²

1. College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China;
2. Department of Chemistry, Beijing Normal University, Beijing 100875, China

Abstract The lower-rim partially substituted sulfonylcalix[4]arenes, 5,11,17,23-tetra-*tert*-butyl-25,26,27-tris[(ethoxycarbonyl)methoxy]-2,8,14,20-tetrasulfonylcalix[4]arene(L1) and 5,11,17,23-tetra-*tert*-butyl-25,26,27-tris(oxyacetic acid)-2,8,14,20-tetrasulfonyl calix[4]arene(L2), and the complexes of L2 were synthesized and characterized. The crystal structure of L1 was determined by X-ray diffraction. The results show that the composition of it is C₅₂H₆₅KO₁₈S₄·0.5H₂O. It belongs to triclinic crystal system, P1 space group, with $a=1.2607(6)$ nm, $b=1.5820(8)$ nm, $c=1.6480(8)$ nm, $\alpha=83.720(8)^\circ$, $\beta=69.327(8)^\circ$, $\gamma=79.342(9)^\circ$, $Z=2$, $V=3.019(3)$ nm³, $D_c=1.270$ g·cm⁻³, $F(000)=121.8$, $\mu=0.293$ mm⁻¹, $R_1=0.0937$, $wR_2=0.2580$. The calix[4]arene adopts a partial cone conformation.

Key words [Sulfonylcalix\[4\]arene](#) [Carboxylic derivative](#) [Rare earth complex](#) [Crystal structure](#)

DOI:

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(439KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“硫酰杯\[4\]芳烃” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [郭倩玲](#)

· [屈一新](#)

· [马淑兰](#)

· [朱文祥](#)

