

## COMMUNICATIONS

四(对叔丁基)硫杂杯[4]芳烃选择性包合四氟硼酸分子: 晶体结构和理论研究

洪瑾, 缪韧, 李一志, 杨高升, 郭子建, 朱龙根\*

南京大学配位化学国家重点实验室, 南京 210093

收稿日期 2004-11-4 修回日期 2004-12-27 网络版发布日期 接受日期

摘要 X-射线晶体衍射测定了4-(对叔丁基)硫杂杯[4]

芳烃选择性地包合四氟硼酸分子。晶体学数据为:  $C_{40}H_{49}O_4S_4BF_4$ ,  $M_r=808.88$ , 四方锥, 空间群  $P4/nmm$ ,  $a=1.5887(2)$ ,  $b=1.5887(2)$ ,

$c=0.8428(0)$  nm,  $V=2.127(2)$  nm<sup>3</sup>,  $Z=2$ ,

$D_c=1.263$  g·cm<sup>-3</sup>,

$R_1=0.0405$ ,  $wR[I>2\sigma(I)]=0.1218$ . <sup>19</sup>F

NMR谱中, 在-151.4 ppm处出现的峰,

证实了四氟硼酸的存在。用Bader的分子中的原子理论方法计算了分子结构中的非共价键相互作用。结果显示, 在四氟硼酸包合物中, 除了F...H-C氢键作用和阳离子-阴离子的静电作用外,  $F^{\delta-}\cdot C^{\delta+}$ 静电作用的存在也对4-(对叔丁基)硫杂杯[4]芳烃憎水空腔包合氟硼酸分子起到了稳定作用。

关键词 硫杂杯[4]芳烃, 四氟硼酸包合化合物, 晶体结构, 分子中的原子, 阴离子-芳环相互作用, 进攻结合模式

分类号

### Selective Inclusion of Fluoboric Acid by Tetra(*p-tert*-butyl)-thiacalix[4]arene: Crystal Structure and Theoretical Study

HONG Jin, MIAO Ren, LI Yi-Zhi, YANG Gao-Sheng, GUO Zi-Jian, ZHU Long-Gen\*

State Key Laboratory of Coordination Chemistry, Coordination Chemistry Institute, Nanjing University, Nanjing, Jiangsu 210093, China

**Abstract** The structure of fluoboric acid selectively embedded within the hydrophobic cavity of the tetra(*p-tert*-

butyl)thiacalix[4]arene was determined by X-ray crystallography. Crystal data:  $C_{40}H_{49}O_4S_4BF_4$ ,  $M_r=808.88$ , tetragonal, space group  $P4/nmm$ ,  $a=1.5887(2)$  nm,  $b=1.5887(2)$  nm,  $c=0.8428(0)$  nm,  $V=2.127(2)$  nm<sup>3</sup>,  $Z=2$ ,  $D_c=1.263$  g·cm<sup>-3</sup>,

$R_1=0.0405$ ,  $wR[I>2\sigma(I)]=0.1218$ . <sup>19</sup>F NMR confirmed the existence of fluoboric acid with a signal at  $\delta -151.4$ . The noncovalent interactions in the molecular structure were characterized by Bader's theory of "atoms in molecules" (AIM). The results reveal that besides the C-H...F hydrogen bonding and cation-anion electrostatic interaction present in the fluoboric acid inclusion complex, the  $F^{\delta-}\cdot C^{\delta+}$  electrostatic interaction also exists for stabilizing the fluoboric acid embedded within the hydrophobic cavity of tetra(*p-tert*-butyl)thiacalix[4]arene.

**Key words** thiacalix[4]arene, fluoboric acid, inclusion complex, crystal structure, "atoms in molecules" method, anion-aromatic interaction, "attack" bonding mode

DOI:

通讯作者 朱龙根 [zhulg@public1.ptt.js.cn](mailto:zhulg@public1.ptt.js.cn)

扩展功能

#### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(OKB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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“硫杂杯\[4\]芳烃, 四氟硼酸包合化合物, 晶体结构, 分子中的原子, 阴离子-芳环相互作用, 进攻结合模式”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [洪瑾](#)
- [缪韧](#)
- [李一志](#)
- [杨高升](#)
- [郭子建](#)
- [朱龙根](#)