

## • 研究论文 •

## 对称四甲基六元瓜环与 2-氨基甲基吡啶相互作用的研究

赵云洁<sup>a</sup> 薛赛凤<sup>\*,a</sup> 张云黔<sup>a</sup> 祝黔江<sup>a</sup> 陶朱<sup>a</sup>  
张建新<sup>b</sup> 魏赞斌<sup>c</sup> 龙腊生<sup>c</sup><sup>a</sup> 贵州大学应用化学研究所 贵阳 550025)<sup>b</sup> 贵州省天然产物重点实验室 贵阳 550002)<sup>c</sup> 厦门大学化学系 厦门 361005)

**摘要** 分别用核磁共振、紫外可见吸收和 X 射线单晶衍射方法研究对称四甲基六元瓜环与 2-氨基甲基吡啶的相互作用及其结构特征。<sup>1</sup>H NMR 谱图和紫外可见吸收光谱图清晰表明, 2-氨基甲基吡啶与对称四甲基六元瓜环有明显的相互作用, 客体 2-氨基甲基吡啶的吡啶环部分进入了瓜环空腔, <sup>1</sup>H NMR 谱图相关质子峰的积分强度以及客体吸光度随主体瓜环浓度变化明确表示它们之间形成了 1:1 的包结配合物, 此包结比并不随瓜环的浓度增加而改变。X 射线单晶衍射法对包结配合物晶体的测定进一步证实了核磁共振、紫外可见吸收方法所得结论。

**关键词** 对称四甲基六元瓜环; 2-氨基甲基吡啶; 核磁共振; 紫外可见吸收光谱; X 射线单晶衍射; 主客体包结配合物

Study of the Interaction of Disubstituted Cucurbit[6]uril with  
2-(Aminomethyl)pyridineZHAO, Yun-Jie<sup>a</sup> XUE, Sai-Feng<sup>\*,a</sup> ZHANG, Yun-Qian<sup>a</sup> ZHU, Qian-Jiang<sup>a</sup>  
TAO, Zhu<sup>a</sup> ZHANG, Jian-Xin<sup>b</sup> WEI, Zhan-Bing<sup>c</sup> LONG, La-Sheng<sup>c</sup><sup>a</sup> Institute of Applied Chemistry, Guizhou University, Guiyang 550025)<sup>b</sup> Key Laboratory of Chemistry for Natural Products of Guizhou Province, Guiyang 550002)<sup>c</sup> Department of Chemistry, Xiamen University, Xiamen 361005)

**Abstract** Interaction and structure of a host-guest inclusion complex of symmetrical tetramethyl substituted cucurbit[6]uril (TMeQ[6]) with 2-(aminomethyl)pyridine (amp) have been studied by using <sup>1</sup>H NMR technique, UV-visible spectrophotometry and single crystal X-ray diffraction determination. The experimental results from <sup>1</sup>H NMR and UV-visible spectra revealed that the amp as a guest enters into the cavity of TMeQ[6] to form a host-guest inclusion complex of TMeQ[6] and amp with a constant ratio of 1:1. The single crystal X-ray diffraction determination further confirmed the conclusions.

**Keywords** symmetrical tetramethylcucurbit[6]uril; 2-(aminomethyl)pyridine; <sup>1</sup>H NMR technique; UV-visible spectrophotometry; single crystal X-ray diffraction; host-guest inclusion complex

瓜环(cucurbit[*n*]urils)或称葫[*n*]环联脲, 因其貌似南瓜(拉丁文: cucurbita)而得名, 是一类与环糊精、冠醚具有类似结构的环形笼状化合物。最早的六元瓜环(cucurbituril, 记为 Q[6]), 在 1905 年就由 Behrend 等合

成得到<sup>[1]</sup>, 1981 年确定其晶体结构<sup>[2]</sup>。2000 年以来, 其同系物五、七、八、十元瓜环 (Q[5], Q[7], Q[8]和 Q[10]) 和一系列改性瓜环的连续报道<sup>[3~8]</sup>, 以及超分子化学的创立和主客体化学研究的兴起促使人们开始重视瓜环化

\* E-mail: gzutao@263.net

Received September 13, 2004; revised November 16, 2004; accepted January 18, 2005.

国家自然科学基金(Nos. 200261002, 20362003)、科技部国际科技合作重点计划(No. 2003DF000030)、贵州省省长资金、贵州省教育厅自然科学基金资助项目。

学的研究,瓜环主客体化学的研究也受到国内外学者越来越广泛的关注<sup>[9-15]</sup>.

瓜环的特殊结构决定它不仅能作为分子容器容纳尺度合适的分子或离子,而且还可通过配位键、氢键等不同形式的相互作用与其他质点结合,形成各种复杂的超分子实体.但由于瓜环在碱性、中性、弱酸性的环境下完全不溶或溶解度不大,且均不溶于有机溶剂<sup>[16]</sup>,制约了瓜环的广泛研究及其应用范围.因此,改性瓜环的合成近年来也是瓜环研究的一个重要课题,如韩国的 Kim 研究组<sup>[17]</sup>报道了能溶于醇水体系的环己基取代五元及六元瓜环;日本的 Nakamura 研究组<sup>[18]</sup>合成出能溶于二甲亚砜等溶剂的二苯基取代六元瓜环;本项目组<sup>[19,20]</sup>最近合成了一系列甲基取代和环己基取代的瓜环.新型瓜环的出现不仅改善了瓜环的性质,更重要的是为合成以瓜环为单元结构的纳米管以及功能高分子材料提供有效的途径和有用的原料,大大拓宽了瓜环的研究领域和应用前景.

近几年来,普通瓜环主客体的研究屡见报道<sup>[21-24]</sup>,但对于改性的对称四甲基六元瓜环(TMeQ[6])与吡啉衍生物的主客体研究尚未见报道.鉴于以上情况,本文选取对称四甲基六元瓜环为主体,不仅是因为 TMeQ[6]比普通的 Q[6]有更好的溶解性,更因为 TMeQ[6]具有特殊的椭圆型结构<sup>[8]</sup>,研究它与 2-氨基甲基吡啉(amp)相互作用,可考察瓜环与该化合物包结时,客体进入瓜环在几何空间的选择性.采用多种手段测试:利用 <sup>1</sup>H NMR 技术考察该 amp 与 TMeQ[6]相互作用的实验结果表明,amp 以其芳环部分“钻”入瓜环空腔,形成相互作用实体.UV-visible 光谱确定了主、客体作用的比例,X 单晶衍射进一步证实了紫外与核磁的结果,且客体对瓜环有一定的空间选择性,在其晶体结构中还可观察到以瓜环为单元的纳米孔道结构.

## 1 实验部分

### 1.1 试剂和仪器

2-氨基甲基吡啉购自百灵威化学公司,分析纯;将其溶入浓盐酸,滴加乙醇使其沉淀,过滤收集,烘干,制得其盐酸盐.实验用对称四甲基六元瓜环由贵州大学应用化学研究所提供<sup>[8]</sup>.

核磁共振测定: VARIAN INOVA-400 MHz 核磁共振仪;紫外可见光谱测定: Agilent 8453 二极管阵列紫外可见光谱仪;X 射线单晶衍射仪: Smart APEX CCD 衍射仪.

### 1.2 核磁共振和紫外吸收光谱的测定

<sup>1</sup>H NMR 谱是在 20 °C 下,以氘代水为溶剂,溶剂

水  $\delta=4.67$  作为化学位移的标准.

利用紫外可见光谱仪在室温下测定了 TMeQ[6]与 amp 的包结比.客体 amp 的最大吸收峰为  $\lambda_{\max}=259$  nm,  $\epsilon=4.99 \times 10^4$  mol<sup>-1</sup>·cm<sup>-1</sup>·L,此处主体瓜环 TMeQ[6]没有吸收.采用固定客体 amp 浓度( $2.67 \times 10^{-4}$  mol·L<sup>-1</sup>),改变主体瓜环 TMeQ[6]浓度的方法,在室温下测定各浓度配比溶液的吸光度,根据所测吸光度与体系中主体瓜环 TMeQ[6]与客体 amp 浓度比的变化规律,可得 TMeQ[6]与 amp 的包结比.

## 2 结果与讨论

### 2.1 TMeQ[6]与 amp 作用体系的核磁共振谱

为了解 TMeQ[6]与 amp 作用体系的核磁共振谱图,有必要先了解纯 TMeQ[6]的 <sup>1</sup>H NMR 谱图(图 1a).TMeQ[6]呈  $D_{2h}$  对称性,具有如图 1 瓜环附图所示的七种不同的质子 H(1), H(2), H(3), H(4), H(5), H(6), H(7).其中位于最高场的共振峰对应 12 个甲基质子 H(7),化学位移分别为  $\delta$  4.20 和 4.10 处的共振峰对应连接各苷脲质子并且指向环外的亚甲基质子 H(2)和 H(6),呈二重峰, H(2)对应 8 个质子, H(6)对应 4 个质子. H(1)和 H(5)对应指向环内的 12 个质子,虽然 H(1)两倍于位于对称面上的质子 H(5),但由于两二重共振峰位置几乎重叠,形成一位于  $\delta$  5.56 处的三重峰.类似地,苷脲腰上的 8 个叔碳质子 H(3)和 H(4)的共振峰部分重叠,形成一特别的三重峰,因而 TMeQ[6]的 <sup>1</sup>H NMR 谱图显示出五组共振峰(如图 1),瓜环各质子的化学位移均参照水峰( $\delta$  4.67).

采用滴定法考察了 TMeQ[6]与 amp 的相互作用,图 1b, c 分别显示了比例为 1:1 和 1:3 的 TMeQ[6]与 amp 相互作用的 <sup>1</sup>H NMR 谱图.图中 H<sup>1</sup>, H<sup>2</sup>, H<sup>3</sup>, H<sup>4</sup>, H<sup>5</sup> 表示游离客体 amp, H<sup>1</sup> 呈二重峰, H<sup>2</sup> 呈三重峰,由于 H<sup>3</sup>, H<sup>4</sup> 化学位移相差不大,共振峰位置几乎重叠,呈现为 7.51~7.44 的一组多重峰, H<sup>1</sup>, H<sup>2</sup>, H<sup>3</sup>, H<sup>4</sup> 各对应 1 个质子, H<sup>5</sup> 呈单峰,对应 2 个质子,其化学位移为 4.23,与作用后瓜环上的 H(2)'及 H(2)" ( $\delta=4.22\sim 4.17$ )重叠.而 H<sup>1</sup>, H<sup>2</sup>, H<sup>3</sup>, H<sup>4</sup>, H<sup>5</sup> 表示与 TMeQ[6]相互作用的 amp.显然,作用客体中吡啉环质子共振峰(H<sup>1</sup>, H<sup>2</sup>, H<sup>3</sup>, H<sup>4</sup>)明显向高场移动, H<sup>1</sup> 到 H<sup>1</sup> 向高场移动了  $\delta$  0.93, H<sup>2</sup> 到 H<sup>2</sup> 向高场移动了  $\delta$  1.16,原重叠的 H<sup>3</sup>, H<sup>4</sup> 与瓜环作用后分裂为呈三重峰的 H<sup>3</sup> 和二重峰的 H<sup>4</sup>, 分别向高场移动  $\delta$  0.99 和 1.29.发生如此之大的化学位移,说明 amp 上吡啉环进入到主体分子瓜环的内腔而受到较强的屏蔽作用,而且由于吡啉环上的质子在环内位置不同,所受到屏蔽作用的差异使它们产生不同的位移.而 H<sup>5</sup> 与游离的 H<sup>5</sup> 位移

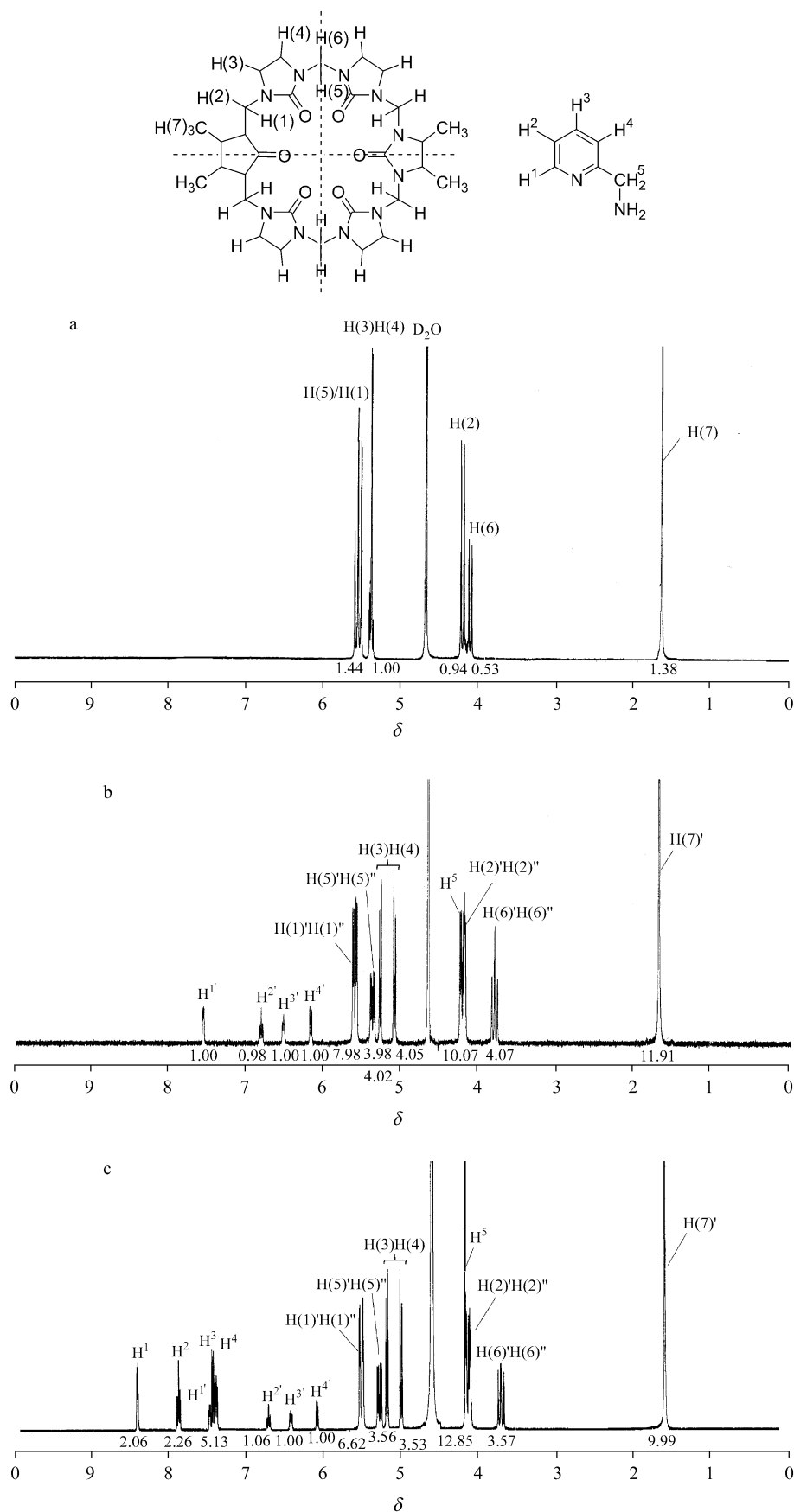


图 1 TMeQ[6] (a), TMeQ[6]/amp 为 1 : 1 (b) 及 TMeQ[6]/amp 为 1 : 3 (c) 的 <sup>1</sup>H NMR 谱图  
 Figure 1 <sup>1</sup>H NMR spectra of TMeQ[6] (a), TMeQ[6]/amp (1 : 1) (b) and TMeQ[6]/amp (1 : 3) (c)

相差不大,这说明该质子位于环端口,受到的屏蔽作用与去屏蔽作用相抵消,从而位移未发生很大变化。

观察主体 TMeQ[6]相关质子,因受到客体的影响,其化学位移也发生了显著变化,特别是 H(3), H(4), H(5) 和 H(6)。原先重叠的 H(3), H(4) 质子峰分裂为位于  $\delta$  5.36 和 5.07 处的两组二重峰;质子 H(5), H(6) 分裂为 H(5)' ( $\delta=5.44$ ), H(6)' ( $\delta=3.80$ ) 和 H(5)'' ( $\delta=4.83$ ), H(6)'' ( $\delta=3.41$ ) 两组质子共振峰;而质子 H(1), H(2) 以及 H(7) 则变化很小。客体的加入使得原来重叠的质子峰分裂,出现七组质子峰,这与瓜环的质子类型完全吻合。另外,图 1b 是瓜环与客体以 1:1 相互作用的  $^1\text{H}$  NMR 谱图,根据作用体系中 TMeQ[6]质子与 amp 质子积分强度平均值比较可知,如瓜环质子 H(7)' 的积分强度比客体 amp 质子 H<sup>1</sup> 的积分强度约为 12 比 1,即它们的物质的量的比接近 1:1,也就是说,一个 TMeQ[6]分子可与一个 amp 分子相作用。图 1c 是在图 1b 的基础上增加 amp 的量,至 TMeQ[6]比 amp 接近 1 比 3,同样根据其主客体的质子积分强度比可知,其物质的量的比还是接近于 1:1,这结果表明 TMeQ[6]与 amp 的包结比是 1:1,而且不随 amp 量的增加而改变。

## 2.2 UV-vis 吸收光谱分析

利用时间分辨的紫外可见分光光度法,不仅可获得一个反应体系的动力学性质,还可获得该作用体系的热力学性质以及配位比或包结比等有关结构的信息。保持客体浓度  $6.68 \times 10^{-4} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ ,做客体与瓜环共存体系相互作用的动力学分析( $\lambda=259 \text{ nm}$ ),结果发现此反应的反应速率很快,瞬间即可完成,因而保证了下面热力学实验的可靠性。图 2 表示在保持客体 amp 浓度为  $2.67 \times 10^{-4} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$  的溶液中, TMeQ[6] 的浓度从  $6.68 \times 10^{-5} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$  逐渐增加到  $6.68 \times 10^{-4} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ ,反应达到平衡的紫外光谱( $\lambda=259 \text{ nm}$ )图。观察此图可以发现:(1)随着主体 TMeQ[6]浓度的增加,吸光度逐渐减小,这是由于随着主体的增加,越来越多的客体与主体相互作用,“钻”入了主体的空腔内,使得客体的吸光度减小,所以吸光度总的趋势是随着主体的增加而减小;(2)当 TMeQ[6]与 amp 的物质的量比约为 1:1 时,出现明显的拐点;(3)在比值为 1:1 以后吸光度出现平台。说明 TMeQ[6]和 amp 按 1:1 的比例作用,即一个主体瓜环分子是与一个客体分子相互作用的,这与核磁共振分析结果相一致。

## 2.3 晶体结构

晶体结构表明,该晶体属于单斜晶系,空间群为  $C2/m$ ,  $a=1.53911(40) \text{ nm}$ ,  $b=1.86406(47) \text{ nm}$ ,  $c=1.28724(34) \text{ nm}$ ;  $\alpha=90.00(0)^\circ$ ,  $\beta=95.936(5)^\circ$ ,  $\gamma=$

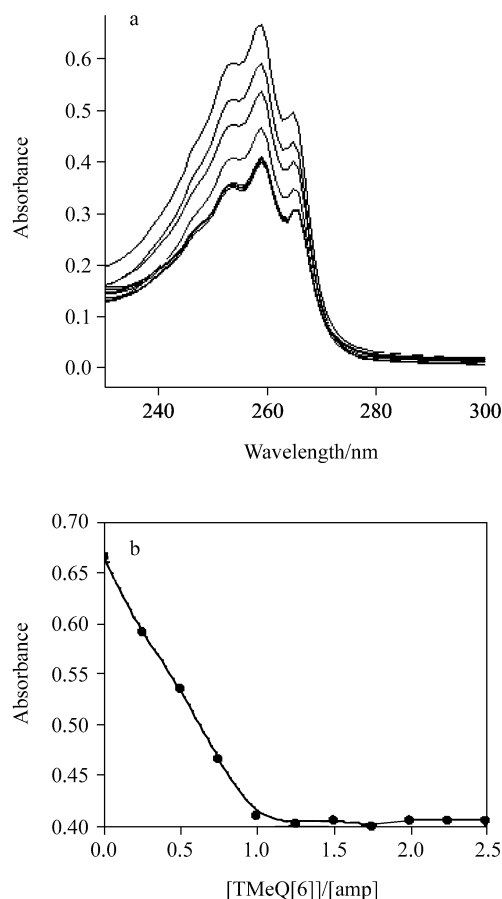


图 2 紫外-可见吸收光谱(a)及吸光度与主客体浓度比的关系(b)

Figure 2 UV-vis absorption spectra (a) and relationship of absorbance and host-guest concentration (b)

$90.00(0)^\circ$ ;  $V=3673.28(25) \text{ nm}^3$ ,  $D_c=1.47 \text{ g}/\text{cm}^3$ ,  $Z=6$ ,  $F_{000}=1671.6$ ,  $R_1=0.110$  [ $I>2\sigma(I)$ ],  $R_w=0.307$ 。图 3 从俯视、瓜环长轴及晶体 X-Y 轴堆积的俯视图和侧视图四个角度展示了 TMeQ[6]与 amp 包结物晶体结构的特征。

从晶体的晶胞图来看,一个 TMeQ[6]分子包结有一个 amp 分子,即包结比为 1:1,且 amp 分子的吡啶环部分深入空腔内部,而与吡啶环相连的亚甲基恰好处于瓜环端口处。此结构与通过  $^1\text{H}$  NMR 谱图与 UV-vis 光谱所得出的结论非常符合。此外,amp 的吡啶环平面是沿着平行于瓜环长轴、垂直于其短轴的方式进入其空腔,且处在空腔正中心,体现了改性瓜环 TMeQ[6]与 amp 相互作用存在空间选择性。见晶体结构的俯视图和侧视图(图 3a, b)。另外,从晶体结构解析结果可知,amp 的氨基甲基在瓜环端口出现的频率相当,表明客体在空腔内并不是固定不动,而可能是处于不停的振动状态。比较 TMeQ[6]与 amp 包结物晶体结构与没有与客体作用的 TMeQ[6]晶体结构,可以发现: TMeQ[6]-amp 端口短轴直径为  $0.41 \text{ nm}$  [端口对位羰基氧原子 O(003)与 O(003-

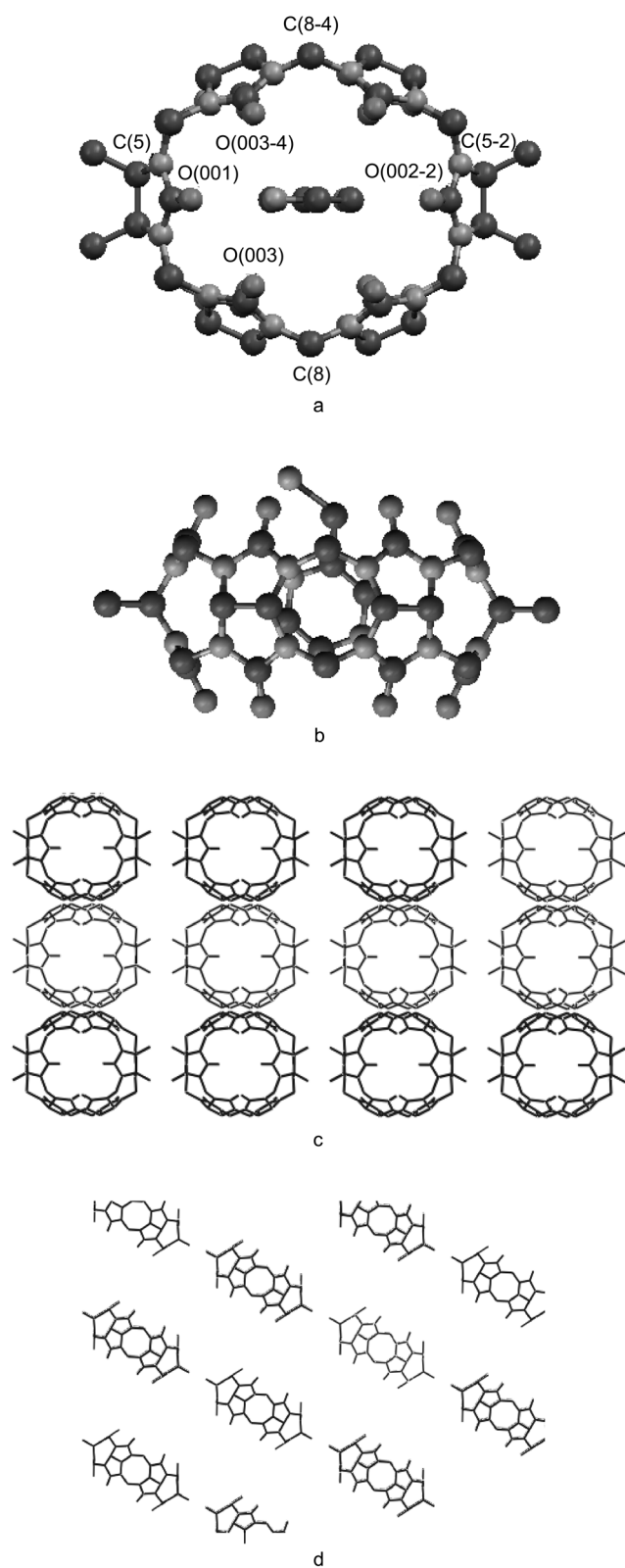


图3 标题主客体包结配合物的结构

(a)俯视图; (b)侧视图及省略 amp 的堆积图; (c)俯视图; (d)侧视图

Figure 3 Structure of host-guest complex

(a) Top view; (b) side view and packing diagram of the complex; (c) top view; (d) side view with amp omitted for clarity

TMeQ[6]-amp 长轴直径[端口对位羰基氧原子 O(001)与 O(002-2)间的距离]达 0.59 nm, 比 TMeQ[6]端口长轴长出 0.02 nm; 而 TMeQ[6]-amp 笼体短轴直径为 0.74 nm [笼体对位碳原子 C(8)与 C(8-4)间的距离]和长轴直径[端口对位碳原子 C(5)与 C(5-2)间的距离]为 0.94 nm, 与 TMeQ[6]笼体的长短轴是相等的. 从上面的数值看出, 瓜环的端口发生了一定程度的变形, 而瓜环的笼体没有改变, 这说明客体“撑开”了瓜环端口, 而对瓜环笼体没有什么影响. 从晶体的晶胞堆积图来看, 在 X-Y 方向上还可观察到由 TMeQ[6]为单元堆砌而得到的纳米孔道, 该空洞直径即为 TMeQ[6]-amp 的端口直径, 而且该孔道内填充着 amp 客体, 两者形成一个非常有序的一维超分子结构, 为清晰起见图 3c, d 仅显示包结物中主体 TMeQ[6]的堆砌图.

TMeQ[6]与 amp 包结物晶体的单晶衍射不仅进一步证实了核磁与紫外所得的结论, 而且提供了相互作用的空间选择性、客体在主体空腔内的运动形式、客体对瓜环结构的影响和主客体堆积结构等方面的重要信息.

## References

- Behrend, R.; Meyer, E.; Rusche, F. *Liebigs Ann. Chem.* **1905**, 339, 1.
- Freeman, W. A.; Mock, W. L.; Shih, N. Y. *J. Am. Chem. Soc.* **1981**, 103(24), 7367.
- Day, A. I.; Arnold, A. P. *WO 2000068232*, **2000** [*Chem. Abstr.* **2000**, 133, 362775k].
- Kim, J.; Jung, I. S.; Kim, S. Y.; Lee, E.; Kang, J. K.; Sakamoto, S.; Yamaguchi, K.; Kim, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122(3), 540.
- Day, A. I.; Blanch, R. J.; Arnold, A. P.; Lorenzo, S.; Lewis, G. R.; Dance, I. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2002**, 41(2), 275.
- Zhao, J. Z.; Kim, H. J.; Oh, J.; Kim, S. Y.; Lee, J. W.; Sakamoto, S.; Yamaguchi, K.; Kim, K. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2001**, 40(22), 4233.
- Isobe, H.; Sato, S.; Nakamura, E. *Org. Lett.* **2002**, 4(8), 1287.
- Zhao, Y.-J.; Shen, Y.-Q.; Xue, S.-F.; Zhu, Q.-J.; Tao, Z.; Zhang, J.-X.; Wei, Z.-B.; Long, L.-S.; Day, A. I. *Chin. Sci. Bull.* **2004**, 49(11), 1111.
- Mustapha, H. E.; Young, H. K.; Luhmer, M.; Kim, K.; Bartik, K. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **2001**, 2104.
- Neugebauer, R.; Knoche, W. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **1998**, 529.
- Kim, J.; Jung, I. S.; Kim, S. Y.; Lee, E.; Kang, J. K.; Sakamoto, S.; Yamaguchi, K.; Kim, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 540.
- Sokolov, M. N.; Dybtsev, D. N.; Fedin, V. P. *Russ. Chem. Bull.* **2003**, 52(5), 1041.
- Zhang, H. Z.; Paulsen, E. S.; Walker, K. A.; Krakowiak, K.

4)间的距离], 比 TMeQ[6]端口短轴长出 0.03 nm<sup>[8]</sup>;

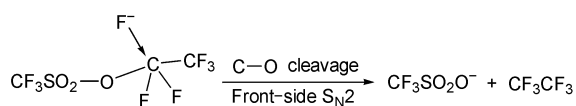
- E.; Dearden, D. V. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, 125(31), 9284.
- 14 Kim, K.; Jeon, W. S.; Kang, J. K.; Lee, J. W.; Jon, S. Y.; Kim, T.; Kim, K. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2003**, 42(20), 2293.
- 15 Samsonenko, D. G.; Geras'ko, O. A.; Mit'kina, T. V.; Lipkowski, J.; Virovets, A. V.; Fenske, D.; Fedin, V. P. *Russ. J. Coord. Chem.* **2003**, 29(3), 166.
- 16 Zhang, G. L.; Xu, Z. Q.; Xue, S. F.; Zhu, Q. J.; Tao, Z. *Chin. J. Inorg. Chem.* **2003**, 19(6), 655 (in Chinese).  
(张桂玲, 徐周庆, 薛赛凤, 祝黔江, 陶朱, 无机化学学报, **2003**, 19(6), 655.)
- 17 Zhao, J. Z.; Kim, H. J.; Oh, J.; Kim, S. Y.; Lee, J. W.; Sakamoto, S.; Yamaguchi, K.; Kim, K. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2001**, 40(22), 4233.
- 18 Isobe, H.; Sato, S.; Nakamura, E. *Org. Lett.* **2002**, 4(8), 1287.
- 19 Shen, Y. Q. *M.S. Thesis*, Guizhou University, Guiyang, **2003** (in Chinese).  
(申永强, 硕士毕业论文, 贵州大学, 贵阳, **2003**.)
- 20 Day, A. I.; Arnold, A. P.; Blanch, R. J. *Molecules* **2003**, 8(1), 74.
- 21 Liu, J. X.; Tao, Z.; Xue, S. F.; Zhu, Q. J.; Zhang, J. X. *J. Inorg. Chem.* **2004**, 20(2), 139 (in Chinese).  
(刘静欣, 陶朱, 薛赛凤, 祝黔江, 张建新, 无机化学学报, **2004**, 20(2), 139.)
- 22 Shen, Y. Q.; Xue, S. F.; Zhao, Y. J.; Zhu, Q. J.; Tao, Z. *Chin. Sci. Bull.* **2003**, 48(11), 2694.
- 23 Xu, Z. Q.; Yao, X. Q.; Xue, S. F.; Zhu, Q. J.; Tao, Z.; Zhang, J. X.; Wei, Z. B.; Long, L. S. *Acta Chim. Sinica* **2004**, 62(19), 1927 (in Chinese).  
(徐周庆, 姚晓青, 薛赛凤, 祝黔江, 陶朱, 张建新, 魏赞斌, 龙腊生, 化学学报, **2004**, 62(19), 1927.)
- 24 Dai, L. P.; Tao, Z.; Zhu, Q. J.; Xue, S. F.; Zhang, J. X.; Zhou, X. *Acta Chim. Sinica* **2004**, 62(19), 2431 (in Chinese).  
(戴丽萍, 陶朱, 祝黔江, 薛赛凤, 张建新, 周欣, 化学学报, **2004**, 62(19), 2431.)

(A0409139 LI, L. T.; FAN, Y. Y.)

Front-Side  $S_N2$  Reaction,  $CF_3SO_3CF_2CF_3$   
 $+ F^-$ , Leading to the C—O Cleavage

GUO, Li; YU, Zhong-Heng\*; ZHU, Shi-Zheng;  
 CHEN, Qing-Yun

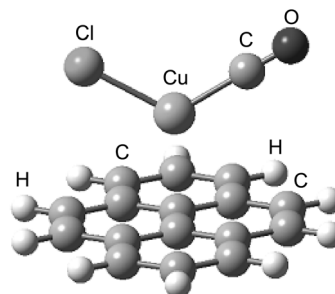
*Acta Chimica Sinica* **2005**, 63(10), 897



Density Functional Theory Calculations  
 of Carbon Monoxide Adsorption on Acti-  
 vated Carbon Loaded with Cuprous Salt

LI, Jun; MA, Zheng-Fei\*; LIU, Xiao-Qin;  
 YAO, Hu-Qing

*Acta Chimica Sinica* **2005**, 63(10), 903

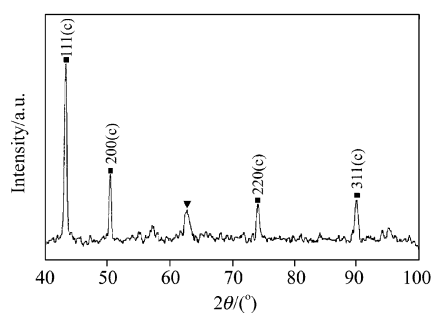


The DFT method and the cluster model approach have been applied to study complex adsorption of CO on activated carbon loaded with cuprous salt. One Cu(I) can adsorb one or two CO molecules, with the adsorption energy between 50 and 60 kJ/mol, which is much greater than the physical adsorption energy (9.15 kJ/mol) of CO on activated carbon. Such energies are both in agreement with available experimental data.

Hydrothermal Synthesis of Cubic Boron  
 Nitride Crystals

YU, Mei-Yan\*; CUI, De-Liang; LI, Kai;  
 YIN, Yan-Sheng; CHU, Lei

*Acta Chimica Sinica* **2005**, 63(10), 909

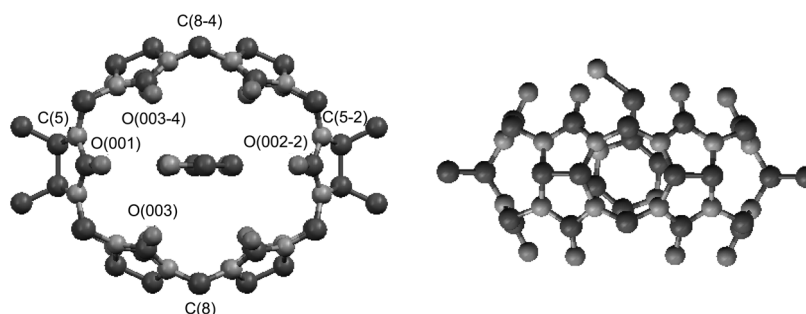


Cubic boron nitride crystals have been successfully synthesized in water solvent at low temperature and low pressure by reaction-coupling effect. The experimental results of X-ray diffraction and Fourier transformation infrared spectroscopy confirmed that cubic boron nitride was the chief phase. Furthermore, transmission electron microscopy and selective area electron diffraction indicated the morphology and surface properties of boron nitride. High-resolution transmission electron microscope and X-ray photoelectron spectroscopy measurements proved the existence of cubic boron nitride.

Study of the Interaction of Disubstituted  
 Cucurbit[6]uril with 2-(Aminomethyl)pyri-  
 dine

ZHAO, Yun-Jie; XUE, Sai-Feng\*; ZHANG,  
 Yun-Qian; ZHU, Qian-Jiang; TAO, Zhu;  
 ZHANG, Jian-Xin; WEI, Zhan-Bing; LONG,  
 La-Sheng

*Acta Chimica Sinica* **2005**, 63(10), 913



Interaction and structure of a host-guest inclusion complex of symmetrical tetramethyl substituted cucurbit[6]uril (TMeQ[6]) with 2-(aminomethyl)pyridine (amp) have been studied by using  $^1H$  NMR technique, UV-visible spectrophotometry and single crystal X-ray diffraction determination.