

Supplementary Information

Organic Guests Inclusion by Tungsten-Calix[4]arene Hosts

Arturo Arduini,^a Chiara Massera,^b Andrea Pochini,^{a,*} Andrea Secchi^a and Franco Ugozzoli^{b,*}

^a Dipartimento di Chimica Organica e Industriale, Università di Parma, via G.P. Usberti 17/a, I-43100, Italy. Fax: +39 0521 905472;

^b Dipartimento di Chimica Generale ed Inorganica, Chimica Analitica, Chimica Fisica, Università di Parma, via G.P. Usberti 17/a, I-43100, Italy. Fax: +39 0521 905557; Tel: +39 0521 905417; E-mail: ugoz@unipr.it

Interaction energies in the benzene/acetone complex as a function of the H...C_t distance (C_t = benzene centroid) calculated with the cc-PVDZ and cc-PVTZ basis sets.

<i>H...C_t</i> /Å	<i>cc-PVDZ basis set</i>			<i>cc-PVTZ basis set</i>		
	<i>E_{HF}</i>	<i>E_{MP2}</i>	<i>E_{corr}*</i>	<i>E_{HF}</i>	<i>E_{MP2}</i>	<i>E_{corr}*</i>
2,2	50,48	13,22	37,26	49,32	-2,05	51,37
2,4	24,66	-2,58	27,24	24,36	-13,56	37,92
2,6	10,53	-9,38	19,91	10,56	-17,46	28,02
2,8	3,15	-11,4	14,55	3,2	-17,54	20,74
3	-0,48	-11,1	10,62	-0,52	-15,93	15,41
3,2	-2,12	-9,97	7,85	-2,23	-13,73	11,5
3,4	-2,73	-8,53	5,8	-2,86	-11,5	8,64
3,6	-2,82	-7,13	4,31	-2,94	-9,47	6,53
3,8	-2,67	-5,9	3,23	-2,76	-7,74	4,98
4	-2,41	-4,87	2,46	-2,48	-6,30	3,82
4,2	-2,12	-4,01	1,89	-2,18	-5,14	2,96
4,4	-1,84	-3,31	1,47	-1,89	-4,2	2,31

(*) Correlation Energy *E_{corr}* = *E_{HF}* - *E_{MP2}*,