



新闻关键字搜索



理论园地



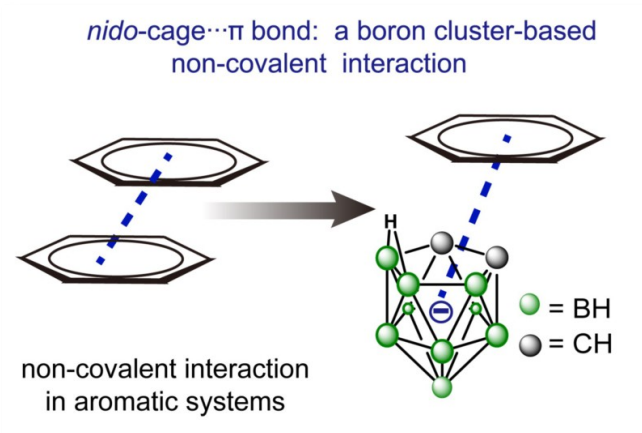
南京大学报

首页 综合新闻 专题新闻 理论园地 讲话与部署 南雍号 媒体传真 学术动态 影像南大 校园动态 学人视点 南大人

首页 - 学术动态

2020-03-11 作者：化学化工学院 来源：科学技术处

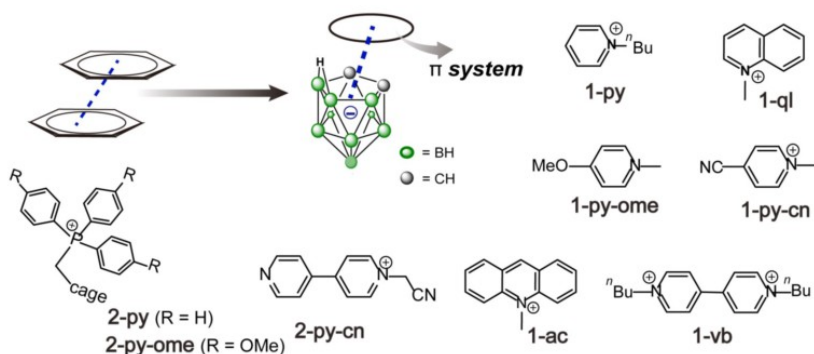
化院燕红课题组发现一类新型非共价键： $nido\text{-cage}\cdots\pi$



非共价键如 $\pi\cdots\pi$ 、 $C-H\cdots\pi$ 等广泛存在于分子间及分子内，并在生命活动及分子自组装过程中扮演了重要的角色，同时非共价键作为联接分子或离子的桥梁，在发光材料，有机催化反应等领域也起了重要作用，因此探索和阐释新型化学键一直是化学领域的核心研究。

由于受到相互作用的成键单元限制，已有的非共价键类型主要是基于 σ 和 π 成键分子，但对于其它成键的分子体系如三中心两电子成键的多面体硼簇却鲜有报道。除了组成和成键方式不同，三维芳香体系碳硼烷与二维的芳环体系在反应性和芳香性等方面有诸多相似之处（R. N. Grimes, Carboranes, Academic Press, 2016），这使得利用硼簇去构筑新型非共价键成为可能。为了验证这一设想，燕红课题组通过设计碳硼烷-吡啶盐体系，获得了基于三维硼簇的新型非共价键 $nido\text{-cage}\cdots\pi$ 。相关研究论文以 $nido\text{-CageBond: A Non-covalent Interaction between Boron Clusters and Aromatic Rings and Its Applications}$ 为题，最近发表在 $Angew. Chem. Int. Ed.$ 10.1002/anie.201915290。这是继一类新型的非经典氢键 $B-H\cdots\pi$ （ $J. Am. Chem. Soc.$ 2016, 138, 4334）之后该课题组发现的另外一类基于硼簇体系的新型非共价键。

$nido\text{-cage}\cdots\pi$ bond: a boron cluster-based non-covalent interaction



最近更新

我校获第四届江苏省大学生知识产权竞赛...

2020.11.30

邹志刚/姚颖方团队首次发现氮还原中的多...

2020.11.30

我校学子斩获江苏省职业规划大赛总决赛...

2020.11.30

昆明学院艺术文创产品南大专场集市举办

2020.11.30

我校举办第三期党性修养与治理能力提升...

2020.11.30

回望南之秋，心添暖意再出发！

2020.11.30

现代工学院鲁振达、张伟华课题组合作实...

2020.11.30

教育部语信司司长田立新来我校考察调研

2020.11.30

国家语委“十四五”规划专家座谈会在南...

2020.11.30

她用手语打出了《掬水月在手》

2020.11.29

一周热点

我校承办全国国土空间规划专题培训班， ...

南京大学举行一等功臣进校园暨退伍大学...

我校举办“海外院士大讲堂暨中国名家论...

国土空间规划战略合作签约仪式举行 我校...

吕建校长参观《墨香梅韵——纪念李瑞清...

Figure 1. 选择的芳环体系用于形成nido-cage... π 非共价键

晶体结构分析表明nido-cage... π 的成键方式为巢式碳硼烷的C₂B₃开口面和吡啶盐形成以平行错位或是垂直(T型)的堆积方式,相应的堆积距离为4.422-5.904 Å (Figure 2)。同时,类似的成键方式也会出现在电中性苯环或吡啶环体系 (Figure 2c)。为了阐释该非共价键的本质,我们利用EDA (energy decomposition analysis) 去解析该nido-cage... π 非共价键。结果表明该化学键在带电荷体系是静电为主的相互作用,而在电中性体系是色散和轨道为主的相互作用。

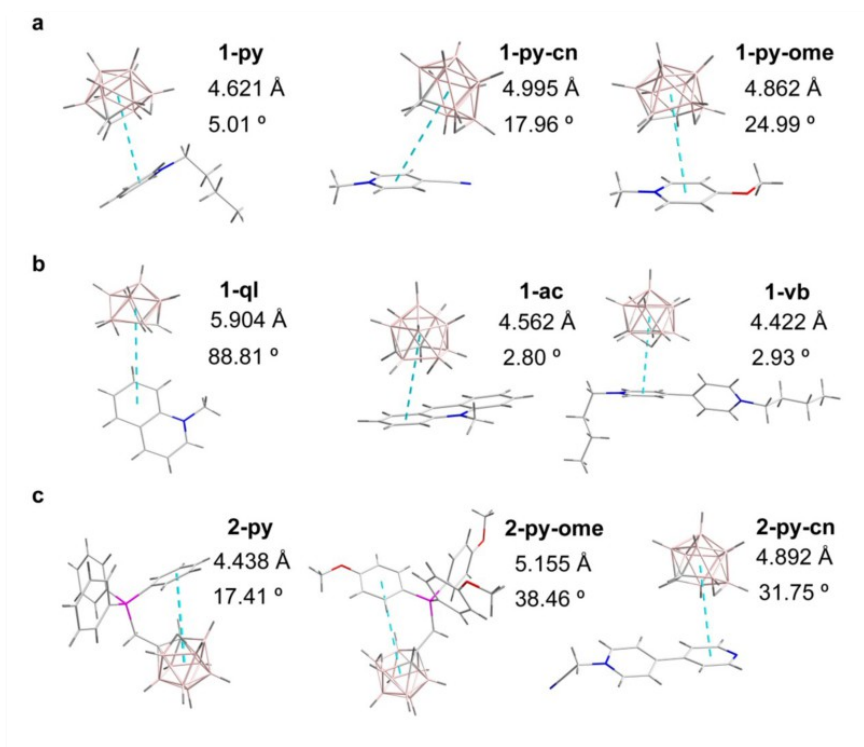


Figure 2. 含有nido-cage... π 非共价键的晶体堆积结构

进一步的研究表明, nido-cage... π 相互作用可有效调控光物理性质。如在晶体状态碳硼烷基化合物呈明显的电荷转移态吸收; 在晶态可诱导聚集发光淬灭而无定型态诱导聚集发光增强, 使得该碳硼烷衍生物具有与传统的荧光分子不同的发光行为; 在溶液中具有溶剂极性依赖的发光特性。这些发现为后续的碳硼烷基功能超分子自组装和硼簇发光分子的应用研究提供了基础。

上述工作的第一作者是博士生涂德双, 理论工作与西班牙Prof. Jordi Poater (Universitat de Barcelona) 和 Prof. Miquel Solà (Universitat de Girona) 教授合作完成。该项研究得到了国家自然科学基金委和南京大学高性能计算中心的资助。

分享:



兼容浏览器: Opera9+ Safari9.0+ Firefox4.0+ Chrome10+ IE10+
访问量: 1926168



南大微信



南大微博