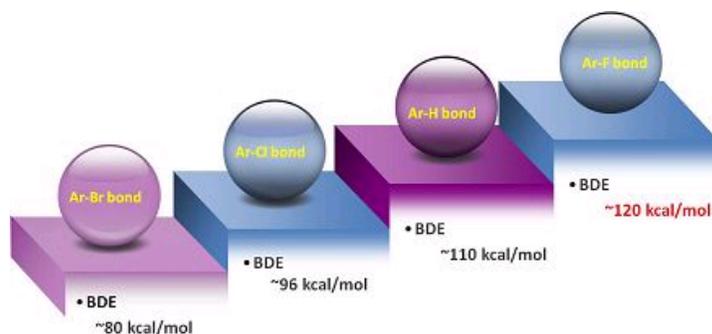


张俊龙研究组发现分子间弱相互作用协助碳氟键活化

日期：2012-10-16 信息来源：化学与分子工程学院

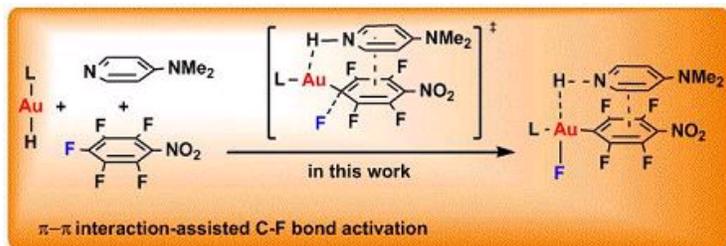
分子间弱相互作用对金属酶催化活化小分子具有重要作用。理解、模拟和运用分子间弱相互作用活化惰性小分子，对设计高效、高选择性的金属催化剂具有重要意义。最近，张俊龙研究组首次报道了分子间弱相互作用（ $\pi-\pi$ 相互作用）协助碳氟键活化，该工作发表于J. Am. Chem. Soc. (2012, 134, 16216-16227)。

碳氟键具有高的键离解能（120 kcal/mol），长期以来被认为是最难活化的化学键之一（图一）。该研究组的前期工作，即利用富电子的一价金配合物，实现高效的催化活化碳氟键的反应，并结合理论计算研究反应机理，首次将碳氟键活化的催化剂拓展到Group 11金属（Adv. Synth. Catal. 2012, 354, 1529-1541）。



图一

在研究金氢化物对氟代芳基底物的活化反应过程中，该研究组发现，加入可与氟代芳基底物产生 $\pi-\pi$ 相互作用的有机碱（4-Dimethylaminopyridine）时，反应活性大大提高。通过反应中间体光谱，反应动力学等研究，发现分子间的 $\pi-\pi$ 相互作用能够稳定该反应的过渡态和中间体，并辅助金氢化物中的氢原子转移，从而降低反应的活化能，使碳氟键活化反应能够具有更高的效率（图二）。密度泛函理论（DFT）计算结果显示 $\pi-\pi$ 相互作用能有效的降低反应的活化能，与实验结果相符。该工作首次将 $\pi-\pi$ 相互作用引入到碳氟键活化研究中，为设计高效的活化碳氟键催化剂以及理解碳氟键活化机理提供了新的思路和模型（J. Am. Chem. Soc. 2012, 134, 16216-16227）。



图二

该研究工作主要由博士研究生吕洪彬，博士后战金辉等完成。该项研究获得国家自然科学基金，国家科技部重大研究计划和北京大学的资助。

编辑：素馨

友情链接

合作伙伴

我为党代会建言献策

学生资助



北大学生就业信息网

[本网介绍](#) | [设为首页](#) | [加入收藏](#) | [校内电话](#) | [诚聘英才](#) | [新闻投稿](#)

投稿邮箱 E-mail: xinwenzx@pku.edu.cn 新闻热线: 010-62756381

北京大学新闻中心 版权所有 建议使用1024*768分辨率 技术支持: 方正电子