

首页 概况 科研成果 科研装备 人才队伍 院地合作 国际合作 研究生教育 文化 党建 公共服务 科学传播 出版物 信息公开 招聘

请输入关键字

旧邮箱

用户名:

密码:



所长信箱

留言信箱



现在位置: 首页 > 新闻中心 > 科研动态

## 新闻中心

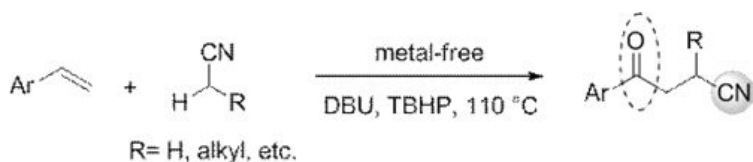
- 重要新闻
- 图片新闻
- 科研动态
- 学术交流
- 综合新闻
- 视频新闻

# 理化所发现苯乙烯与乙腈的转化反应并验证其反应历程

发表日期: 2016-12-05

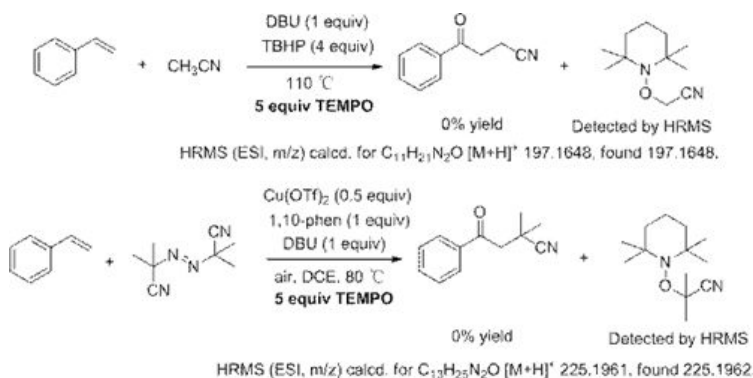
打印 字体大小: 大 中 小 【关闭】

近期, 理化所功能分子与手性化合物合成研究组在苯乙烯与乙腈转化反应研究方面取得新进展, 发现在无任何金属催化剂的条件下, 苯乙烯经与脂肪腈的 $\alpha$ -C(sp<sup>3</sup>)-H键官能团化, 一步得到可以用于药物中间体的双官能团化产物——腈酮类化合物。

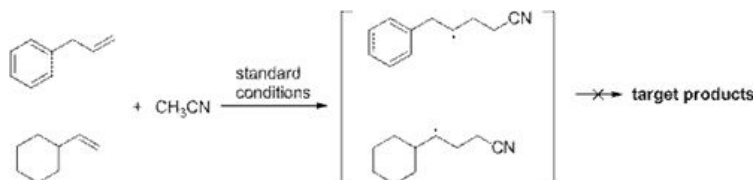


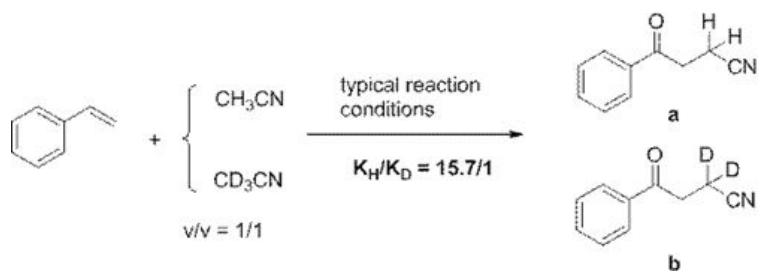
苯乙烯与脂肪腈的转化反应

王乃兴研究员带领课题组从2012年开始探索苯乙烯的高值转化反应, 发现苯乙烯可以在催化条件下与脂肪醇、酮等一步反应得到双官能团化合物。最近, 他们发现苯乙烯与脂肪腈在无金属催化下可以发生转化反应, 一步得到双官能团化合物。得到的23个芳香腈酮类化合物, 都进行了核磁氢谱、碳谱和高分辨质谱的鉴定, 尤其是在机理研究方面, 取得了重要突破, 充分证实了苯乙烯C-H键官能团化的游离基历程。他们使用TEMPO作为捕获剂, 成功地捕捉到了反应过程中生成的活性中间体游离基(乙腈甲基游离基), 捕获剂TEMPO和自由基形成了一种稳定的加合物, 高分辨质谱检测到了加合物的存在。



为了进一步验证游离基历程, 研究人员利用非共轭体系的烯烃进行实验, 发现非共轭烯烃不发生反应, 因为非共轭体系不能有效地分散游离基单电子; 而苯环等共轭体系则能有效地分散相邻游离基的单电子, 该反应进一步支持了游离基反应的机理。他们还通过氘代乙腈(CD<sub>3</sub>CN)的动力学实验, 验证了 $\alpha$ -C(sp<sup>3</sup>)-H键的断裂是该反应的速率决定步骤。另外, 通过计算化学, 从物理化学角度, 通过能垒数据, 进一步揭示了该反应的历程。





该成果发表在有机化学核心刊物 *Organic Letters* 上 ( *Org. Lett.* 2016, 18, 5986 )。

[文章下载](#)

» [评论](#)

» [相关新闻](#)

» [附件下载](#) :

版权所有：中国科学院理化技术研究所 Copyright 2002-2015  
地址：中国北京 京ICP备05002791号