
大连化物所验证镍杂二茂铁芳香性来自金属中心到配体的电子反馈

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10971.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

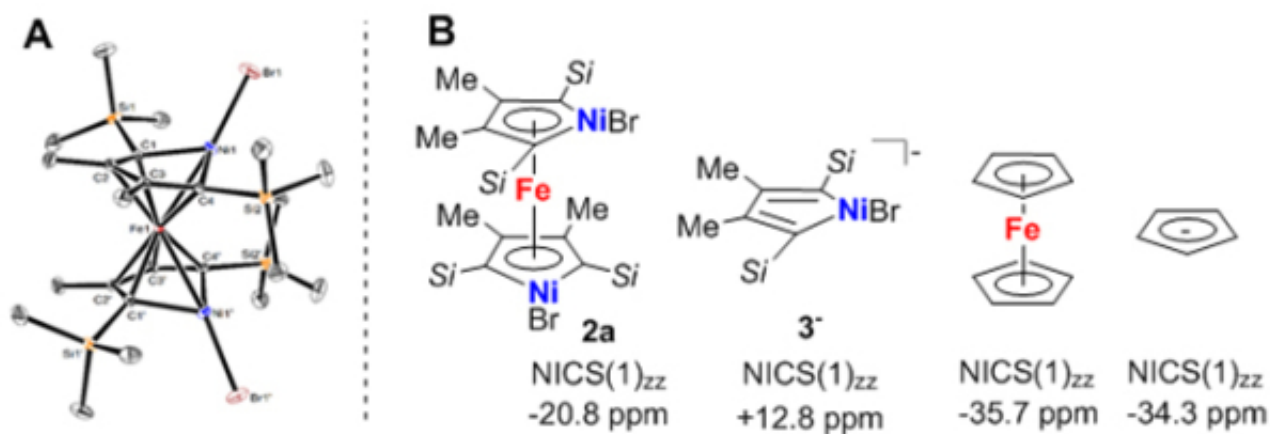
近日，中国科学院大连化学物理研究所催化基础国家重点实验室生物无机催化研究组研究员叶生发团队与北京大学教授席振峰和张文雄研究团队、中科院上海有机化学研究所研究员邓亮合作，成功制备了镍杂二茂铁，并通过单晶X射线衍射与多种光谱学方法，以及理论计算对其进行详细表征。研究表明，与二茂铁和主族金属杂二茂铁不同，镍杂二茂铁中的镍杂环通过接受铁中心的电子反馈可以实现芳香性。

二茂铁及其类似物在许多领域中有广泛应用。在二茂铁类似物中，金属杂二茂铁是备受关注的一种。目前为止，已有多种主族金属杂二茂铁相继被报道。这些化合物中金属杂环均为与茂基类似的芳香性的 π 给体。然而，由两个过渡金属杂环戊二烯配体与铁配位形成的夹心配合物却一直没有被报道。

本工作中，研究人员制备了以两个过渡金属杂环为配体的镍杂二茂铁。铁57穆斯堡尔谱的研究表明，与二茂铁相比，镍杂二茂铁存在更强的铁到配体的反馈作用，这解释了镍杂二茂铁中铁与镍杂环的距离比二茂铁中相应的距离缩短了0.1埃以上。进一步理论计算不仅证实了这一点，而且表明镍杂二茂铁中的镍杂环具有芳香性，而单独的镍杂环单负离子 $3-$ 则具有反芳香性。因此镍杂二茂铁中的镍杂环作为非纯粹配体接受了来自铁中心的电子反馈从而形成芳香性结构。相比之下，二茂铁的芳香性则来自于茂环本身的芳香性。该工作首次制备了以两个过渡金属杂环为配体的金属杂二茂铁——镍杂二茂铁，通过多种实验表征和理论计算证明，镍杂二茂铁中镍杂环通过 π^* 轨道接受铁中心d轨道的电子反馈形成芳香性结构。

该研究成果发表在《德国应用化学》（Angew. Chem. Int. Ed.）上。

[论文链接](#)



大连化物所验证镍杂二茂铁芳香性来自金属中心到配体的电子反馈

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发