

研究验证三环金属杂螺芳香化合物芳香性

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13319.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！

研究验证三环金属杂螺芳香化合物芳香性。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员叶生发团队与北京大学席振峰院士、张文雄教授研究团队合作，成功制备了新型金属杂螺芳香化合物，并对其电子结构进行了深入研究。相关研究成果发表于《自然—通讯》。

螺芳香性最早是用于描述具有跨环超共轭作用的有机螺环化合物，其中作为螺原子的 sp^3 碳原子不参与共轭。2002年，英国伦敦帝国理工学院教授Rzepa提出设想，认为可利用螺原子自身参与共轭，从而形成一类新型螺芳香化合物。这一类螺芳香化合物在螺原子为碳原子时是难以实现的，因为碳原子只有四个价层原子轨道。与碳原子相比，过渡金属具有可参与成键的d轨道，因而将过渡金属引入芳香体系中可实现有机芳香化合物中难以存在的芳香性结构。

该研究合成了一种三环钒杂螺芳香化合物，电子顺磁共振测试表明该化合物的基态为二重态，并且单电子主要位于金属中心上。根据X射线光电子能谱的结果推测，该化合物中钒的氧化态最有可能高于正三价。DFT计算结果表明，合成的三环钒杂螺芳香化合物中钒中心的 d_{xy} 和 $d_{x^2-y^2}$ 两个d轨道与三个配体的 π^* 轨道组合形成分子轨道，使钒中心的4个d电子很大程度地离域到三个配体上。NICS计算值、电子定域化函数和各向磁感应电流密度分析表明，钒中心提供的四个d电子与配体本身的36个 π 电子共同形成一个包含三个金属杂芳香环的40 π 芳香体系。此外，理论计算还表明，锂离子对芳香性有不可或缺的作用，而螺原子的种类也对电子离域程度有影响。该工作成功合成了三环钒杂螺芳香化合物，并揭示了过渡金属的加入可以实现其芳香性结构。（来源：中国科学报卜叶姜洋）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-021-21648-9>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：席振峰等 来源：《自然—通讯》

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](http://iikx.com)转发