
理化所合成共轭莫比乌斯索烃研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/1361.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！

在分子层面具有莫比乌斯构象的共轭体系有着独特分子性质，在分子合成和芳香性理论基础研究领域具有重要意义。莫比乌斯构象的共轭分子通常处于亚稳态结构，此类分子的合成与表征长期以来是合成化学中的难点，基于莫比乌斯共轭分子构建更复杂的超分子复合体更具挑战。

近日，中国科学院理化技术研究所超分子光化学研究团队与厦门大学科研人员合作，利用铜模板法高效合成对苯撑全共轭索烃，并通过单晶X-射线衍射揭示固态下的该索烃化合物由两个稳定莫比乌斯构象的共轭碳环组成。理论计算结果显示，构成索烃的共轭碳环之间存在高达每摩尔84千卡的分子内非共价 - 相互作用，是稳定分子固态下莫比乌斯构象的关键。理论模型确认了该碳环 体系的共轭性和芳香性。

合成化学与理论化学的结合对探索具有复杂且新颖结构的分子具有重要意义。对苯撑全共轭索烃不仅可作为互锁超分子结构的组成单元，也可作为一类新型莫比乌斯共轭分子。该研究为分子设计以及探索芳香性和成键规律提供了新思路。

相关研究成果发表在《自然-通讯》上，理化所研究员丛欢是论文通讯作者并主导研究工作，厦门大学教授朱军作为共同通讯作者负责理论计算的研究；理化所研究生范洋洋、厦门大学研究生陈丹丹、理化所博士后黄泽傲是论文共同第一作者。相关研究得到了中科院战略性先导科技专项、国家重点研发计划、国家自然科学基金委、中组部和中国博士后科学基金的资助。

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://www.iikx.com)转发