
揭示氢键在光催化醇偶联反应中的作用

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/20398.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！

揭示氢键在光催化醇偶联反应中的作用。近日，中科院大连化学物理研究所副研究员罗能超和研究员王峰团队在醇的光催化偶联反应选择性调控方面取得新进展。团队通过向反应中引入水，加强了乙醇之间的氢键强度，从而有利于关键自由基中间体从半导体表面脱附并被溶液相(乙醇/水)稳定，提高了乙醇光催化C-C键偶联转化为2,3-丁二醇的反应速率和选择性。相关研究成果发表在《美国化学会会志》。

自由基是光催化转化中的常见中间体，具有开壳的电子结构，因而活性高并容易强吸附在半导体表面，从而发生多种反应。溶液对光催化反应的产物选择性和量子产率有极大影响。

本工作中，研究团队发现在乙醇溶液中加入5vol%的水，可以使乙醇光催化偶联生成的2,3-丁二醇的选择性从37%提高至57%，同时反应速率提高至原来的2.4倍。研究团队利用自由基捕获实验、氘代实验、DFT计算，以及分子动力学模拟等手段，发现少量水的引入使中间体 α -羟乙基自由基(\cdot HR)在催化剂表面和溶液相中均与溶剂分子形成氢键。在氢键作用下， \cdot HR倾向于从催化剂表面脱附，并被稳定在溶液中，避免了重新生成乙醇的逆反应和生成乙醛的过度氧化副反应。

该工作表明，溶剂分子与中间体的非化学键合作用可以引导自由基的反应以实现光催化选择性转化。(来源：中国科学报孙丹宁)

相关信论文息：<https://doi.org/10.1021/jacs.2c07410>

作者：罗能超等 来源：《美国化学会会志》

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