

科学家利用高分辨太赫兹光谱方法揭示水溶液中硼酸的氟化反应机理

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/26508.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！

氟在化学世界中具有重要地位。氟在所有原子中电负性最高、极化率最低。同时，氟是所有非惰性气体和非氢元素中半径最小的元素。通常，氟的引入使得有机化合物和无机化合物产生独特的物理性能、化学性能和生物性能。地壳中氟元素的丰度排在第13位，是自然界中含量最丰富的卤素。当前，氟已应用于制药、催化、生物、农业和材料等领域。在无机氧化物体系中，氟和氧的离子半径相似，具有较好的可替代性。因此，利用氟替代氧/羟基成为增强氧化物/羟基氧化物物化性质的有效途径之一。尽管氟化策略已在无机氧化物/羟基氧化物结构和性能改性中受到重视，但反应产物的结构分析仍是化学表征的难题。由于氟和氧对X射线和电子束的散射能力相近，致使准确区分和鉴别这两类元素变得困难。更复杂的是，X射线和电子束几乎不和氢原子相互作用，故X射线和电子束方法难以区分氟和羟基。因此，氟化产物中氟和氧/羟基的准确区分是确定取代位点、研究氟化反应规律以及明晰反应路径等课题的研究基础。

近日，中国科学院新疆理化技术研究所潘世烈团队与内蒙古医科大学教授额尔敦、台湾大学教授Hayashi Michitoshi、日本静冈大学教授Tetsuo Sasaki、日本神户大学教授Keisuke Tominaga，以水溶液中硼酸的氟化反应为研究对象，发展了基于高分辨率太赫兹光谱的结构解析方法。该团队利用这一方法测定了反应产物中功能基元上氟和羟基的位点。结果表明，该反应体系中氟原子只出现在 BO_2F_2

阴离子功能基元上。在结构测定的基础上，该研究推导了水溶液中硼酸的氟化机理，提出了两步氟化历程。第一步是氟离子和硼酸分子 $\text{B}(\text{OH})_3$ 形成配位共价键，促使硼的电子轨道经历从 sp^2 到 sp^3 的转变，形成 $\text{B}(\text{OH})_3\text{F}$ 中间体。

第二步是氟化剂产生的酸性环境使该中间体上的一个OH质子化

，形成 OH_2^+ 优势离去基团。进而，氟离子通过亲核取代路径取代 OH_2^+

基团，完成第二步氟化。基于高分辨率太赫兹光谱的结构分析方法，适应于含氟/氧、铍/硼、碳/氮等X射线难以识别元素对的结构体系以及用于研究其他羟基氧化物/氧化物氟化反应机理。该方法为无机氟化学晶体结构基元精确解析和反应理论研究提供了新途径。

相关研究成果发表在《德国应用化学》上。新疆理化所为第一完成单位。研究工作得到科学技术

部、国家自然科学基金委员会、中国科学院和新疆维吾尔自治区等的支持。

[论文链接](#)

水溶液中硼酸的氟化路径示意图

研究团队单位：新疆理化技术研究所

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](#)转发