
福建物构所非共价相互作用研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/27000.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！

福建物构所非共价相互作用研究获进展。

非共价相互作用是超分子化学的基石，因此研究和发展新型非共价作用具有科学意义。生命体中广泛存在的基团——羰基，作为电子给体和受体参与多种非共价相互作用，如氢键、硫键和n*轨道作用等，在生命活动和分子组装中发挥关键作用。同时，动态共价键能够将非共价相互作用的动态性和共价键的稳定性结合，在构建功能组装体和材料方面展现出应用价值。动态共价体系的分子多样性为发现和量化非共价相互作用提供了新途径。

近年来，中国科学院福建物质结构研究所尤磊课题组在羰基参与的非共价相互作用的研究中取得了进展，探索了非共价键与动态共价键的作用机制如n*作用、硫键和芳基-羰基作用，并实现了功能化应用。

当前，羰基参与的非共价相互作用已取得较多进展，但鲜有关于芳基作为电子给体、羰基碳作为电子受体的芳基-羰基作用的报道。近期，该团队以邻甲酰基苯磺酰胺为平台发展了新型芳基-羰基作用。研究通过晶体结构、核磁谱图和理论计算阐明了芳基-醛/亚胺作用的机制。其中，静电和色散作用为主要贡献，n*轨道作用贡献较少。研究利用亚胺交换反应，量化芳基-羰基作用，通过取代基效应和溶剂效应赋予调控。研究发现，芳基-醛/亚胺作用具有功能性，促进动态共价反应的动力学和热力学选择性的逆转以及动态组合库的自分类，实现了荧光信号的多样化调控。这一新型非共价相互作用有望应用于动态组装、智能开关、功能材料等领域。

轨道相互作用等非共价键的类型、结构及机制的研究丰富了非共价相互作用工具箱，对识别组装、复杂体系、响应性材料及其功能化具有指导意义。

相关研究成果发表在Advanced Science

上。研究工作得到国家自然科学基金、中国科学院前沿科学重点研究项目和福建省自然科学基金的支持。

[论文链接](#)

研究团队单位：福建物质结构研究所

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](http://www.iikx.com)转发