
研究揭示提高5—羟甲基糠醛产率新方法

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/29500.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！

研究揭示提高5—羟甲基糠醛产率新方法。近日，中国林业科学研究院林产化学工业研究所研究员、中国工程院院士蒋剑春团队关于林源呋喃化学品低碳高效转化的研究成果在《德国应用化学》发表。

将木质纤维类生物质高效转化为5—羟甲基糠醛（HMF）是实现秸秆、竹木屑等农林剩余物资源高值化利用最有吸引力的途径之一。HMF具有呋喃环、羟甲基和羰基等活性结构单元，可以通过氧化、醚化、加氢等反应制备多种高附加值生物基化学品，但也导致其在合成与纯化过程中稳定性差，易发生缩合、氧化等副反应，规模化生产过程存在得率低（<50%）和成本高（>5万元/吨）等问题。

该团队基于工业生产过程中廉价金属盐均相催化反应过程研究，结合实验分析、分子动力学模拟和量子化学计算，首次揭示了阴离子通过邻近效应和电子张力调控己糖分子结构的定向演化过程，为生物基糖平台高效转化过程中均相催化剂的筛选提供了理论支撑。

研究团队基于系列实验发现：阴离子可以影响金属盐的催化活性，导致显著的HMF产率差异。在上述实验结果的基础上，受霍夫曼斯特效应的启发，结合量子化学计算与分子动力学模拟分析，证实了己糖转化HMF过程中阴离子效应可归因于邻近效应和电子张力效应。

一方面，阴离子通过邻近效应与葡萄糖分子形成近距离的弱相互作用，促进葡萄糖异构化过程的电子转移速率。其中，Br⁻与葡萄糖分子间的距离最小，表现出最显著的邻近效应，从而获得了最高的HMF产率。

另一方面，阴离子通过电子张力效应诱导葡萄糖分子的电子云迁移，促进葡萄糖从基态转变为激发态的速率。其中，Br⁻诱导的葡萄糖分子中碳原子周围的电子云密度差最大，表现出最显著的电子张力效应，从而获得了最高的HMF产率。

该研究由国家自然科学基金优秀青年科学基金项目资助，中国林科院林化所博士生梁洁为论文的第一作者，蒋剑春和该所研究员王奎为共同通讯作者。（来源：中国科学报 李晨）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.202410229>

作者：蒋剑春等 来源：《德国应用化学》

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