

---

# 上海有机所发展出新型手性螺烯双自由基化合物

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/29893.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！*

上海有机所发展出新型手性螺烯双自由基化合物。

螺烯类双自由基具有手性、磁性、手性诱导的自旋选择性、圆偏振光吸收与发射、磁手性二色性及电磁手性各向异性等物理性质。近年来，关于螺烯双自由基的设计和合成的研究取得了进展。而螺烯双自由基具有高度化学反应活性和对映体拆分困难、稳定的螺烯双自由基数目较少、晶态纯对映体稀少等问题，阻碍了这类物质的晶体结构和手性物理性质的研究及进一步应用。因此，合成并分离稳定的晶态螺烯双自由基化合物以及调控其磁性和手性等物理性质是该领域亟待研究的问题。

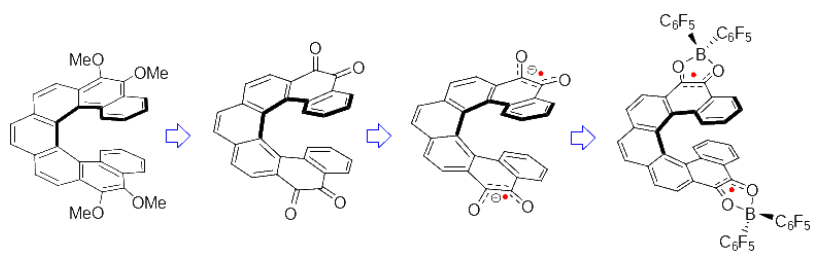
中国科学院上海有机化学研究所研究员王新平团队设计并合成了新型手性螺烯双自由基化合物。该团队设计并合成了由邻二醌官能团化的[7]螺烯分子Rac-3及其对映异构体P/M-3。研究对Rac/P/M-3进行化学还原，分离出稳定的双阴离子及其对映异构体（Rac/P/M-3K）。在此基础上，与 $B(C_6F_5)_2Cl$ 反应，研究获得中性含硼螺烯双自由基Rac/P/M-3B。进而，研究对化合物Rac/P/M-3K和Rac-3B进行单晶、EPR、SQUID及紫外吸收光谱等表征。EPR和SQUID测试结果表明，3K和3B的基态均为开壳层单线态双自由基。这一结果与理论计算结果吻合。

进一步，科研人员对P/M-3K和P/M-3B双自由基对映异构体进行手性光学性质研究。ECD光谱表明，200nm至400nm范围内的手性光学响应来源于螺烯骨架；而结合紫外吸收光谱发现，500nm至780nm范围内的手性光学响应归因于双自由基的特征吸收。双自由基在这一区域内的手性响应差异归因于自旋相互作用差异和自由基类型。同时，研究显示，将杂原子硼结合到螺烯双阴离子上，可以调控其自旋-自旋相互作用强弱及手性光学性质，并能够增强其双自由基的热稳定性。

该研究探讨了螺烯双自由基的晶体结构、电子结构、磁学性质及手性光学性质等内容，揭示了螺烯双自由基磁学性质、手性光学特性与分子结构之间的内在关联，为新型多功能双自由基材料的设计与合成提供了新思路和新策略。

近期，相关研究成果发表在《德国应用化学》上。研究工作得到国家自然科学基金委员会和中国科学院等的支持。

[论文链接](#)



## 螺烯双自由基化合物的理性设计

研究团队单位：上海有机化学研究所

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