

稀土配位分子笼特异性识别和分离高阶富勒烯异构体研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31222.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！

稀土配位分子笼特异性识别和分离高阶富勒烯异构体研究获进展。

分子识别是生物体系的重要过程，尤其在酶-底物、抗原-抗体、药物-靶点等特异性键合过程中发挥重要作用。1985年富勒烯 C_{60} 的发现，开启了三维碳材料研究的新纪元。随着富勒烯碳原子数增加，其立体和构造异构体种类呈指数级增长。不同富勒烯异构体及其衍生物的物理化学性质存在显著的异构效应，直接影响它们的光电、催化和生物学应用。而由于富勒烯分子家族独特的球状结构，高阶富勒烯异构体的精准识别与高效分离面临挑战。

近日，中国科学院福建物质结构研究所研究员孙庆福团队联合华中科技大学教授卢兴团队，在《自然-合成》（*Nature Synthesis*）上发表了题为 *Low-Symmetry Coordination Cages Enable the Recognition Specificity and Selective Enrichment of Higher Fullerene Isomers* 的研究论文。该研究基于碗状三苯三戊并烯配体构建了具有不同对称性空腔微环境的稀土配位分子笼，利用主客体间 π 作用精细调控实现了对高阶富勒烯异构体的特异性识别和选择性富集。主客体化学研究显示，相较于高对称性笼，低对称性笼在识别键合 D_2 - C_{76} 异构体时表现出优势。通过精准的形状匹配，低对称性笼约束了其空腔内富勒烯客体的无规则转动，导致主体对称性从原来的 S_4 降低至 C_2 。进一步，这一策略被用于识别一对堪称孪生兄弟的 C_{2v} 对称性的 C_{78} 异构体。这对孪生富勒烯的区别仅在于两个相邻五元环的取向不同，只需一步 Stone-Wales 单键旋转即可实现彼此结构转化。结果显示，低对称性笼

在识别灵敏度和结合力差异方面优于高对称性笼，在分离纯化高阶富勒烯异构体方面表现出优势。

该研究通过降低对称性策略实现了配位分子笼对高阶富勒烯异构体的精准识别，为配位分子笼材料的结构设计与功能开发提供了新思路，并为生物体系中特异性识别过程提供了仿生模型。同时，这一研究为高附加值富勒烯的分离纯化开辟了新途径，凸显了分子笼材料在识别分离领域的应用前景。

研究工作得到国家重点研发计划和国家自然科学基金等的支持。

[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](#)转发