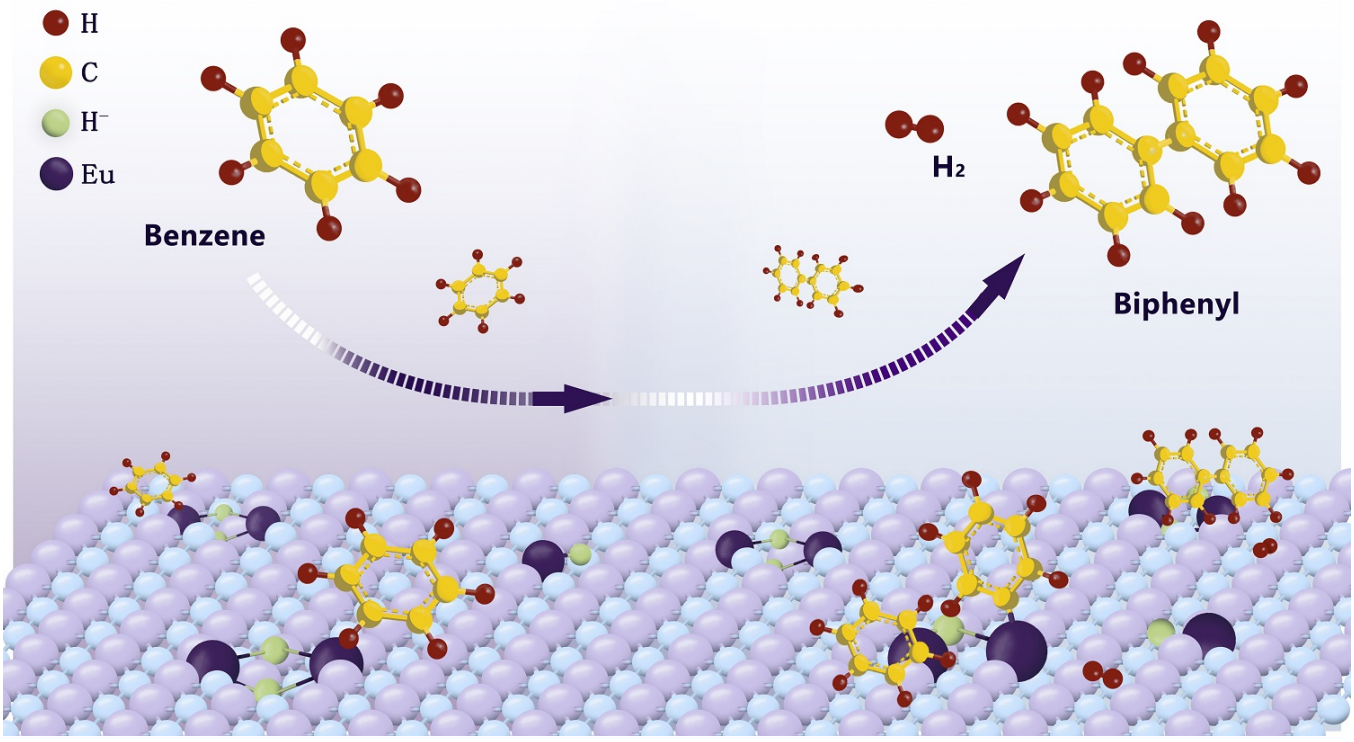
研究揭示氢化物在惰性碳-氢键活化中的独特作用

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/36599.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！

研究揭示氢化物在惰性碳-氢键活化中的独特作用。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员陈萍、研究员郭建平团队与华中师范大学副教授饶立合作，开发出一种具有亚纳米结构的负载氢化铕催化剂，该催化剂在温和、非氧化条件下，实现了苯直接脱氢偶联制备联苯的催化过程。该研究揭示了氢化物在惰性碳-氢（C-H）键活化中的独特作用机制，为绿色高效构筑碳-碳（C-C）键提供了新途径。相关成果发表在《德国应用化学》。



催化剂示意图。大连化物所供图

联苯类化合物是有机合成和精细化工领域的重要结构单元。通过C-H/C-H键直接活化构建C-C键，被认为是一条经济且环境友好的理想合成路径。然而，苯分子的C-H键键能高达113 kcal · mol-1，化学惰性高，活化难度大；另一方面，从热力学角度看，苯直接偶联生成联苯与氢气的过程也属于不利反应。目前，苯的C-C键偶联通常依赖贵金属催化的氧化偶联反应，这类反应往往需要使用过量氧化剂和复杂添加剂。而现有的少数非氧化偶联体系大多需要使用化学计量比的强还原剂，并需后续水解步骤释放联苯产物，难以实现催化循环。

本工作中，团队采用液氨浸渍-加氢还原方法，制备出高分散的亚纳米结构氢化铕催化剂。该催化剂能够在无氧化剂、无需后处理的条件下，实现苯分子的直接脱氢偶联反应，生成联苯与氢气两种高价值产物。理论计算表明，催化剂表面Eu-H物种在C-H键活化及C-C键偶联过程中发挥关键作用：一方面促进苯环C-H键活化及脱质子化过程；另一方面通过调控苯与联苯在催化剂表面的吸附、脱附能垒，实现高效催化循环，展现了氢化物介导C-H活化的新模式。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：https://doi.org/10.1002/anie.202517421

作者：陈萍等 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转发