

---

# “智能科学家”助力全脂肪族手性碳中心精准构建

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36673.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！

## “智能科学家”助力全脂肪族手性碳中心精准构建

。近日，中国科学技术大学团队联合浙江大学团队，依托“智能科学家”自主实验室，在全脂肪族手性碳中心的精准构建方面取得进展。研究团队开发了高效和高选择性的钴催化体系，实现了脂肪族烯烃的不对称氢烷基化反应，突破了长期以来偶联反应对极性基团辅助手性控制的依赖，为手性碳骨架精准构建提供了新方法。

手性碳-碳键的精准构筑是合成化学的难题。过渡金属、酶及有机小分子催化等研究取得了进展，但当底物取代基完全由脂肪族碳链构成时，由于缺少电子和立体差异，底物高对映选择性转化极具挑战。团队提出了“伞状手性口袋”分子识别新模式，可精准区分底物中电子和空间结构相似的两个脂肪族取代基，实现了传统偶联反应与酶催化体系难以达到的全脂肪族手性碳中心构筑。

在研究过程中，“智能科学家”平台发挥了重要作用。平台在短时间内完成数百组反应条件的高通量筛选，提升了数据质量和研究效率。团队基于人工智能算法对实验与理论数据进行建模，在分子片段指纹和空间构型中提取关键描述符，建立了反应选择性的机器学习模型。

结合“智能科学家”平台与AI建模结果，团队发现了一类具伞状手性口袋的钴催化剂体系。该体系通过多重色散作用与空间限域效应协同提升了反应效率与选择性，实现了对结构高度相似的两个烷基基团的精准识别。研究揭示了弱相互作用调控手性识别新原理，为复杂脂肪族分子的立体可控合成提供了新策略。

上述工作通过构建“设计—筛选—建模—推荐—验证—应用”的高效闭环体系，实现了从“人工实验广泛试错”向“数据与机制协同驱动”的跨越。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（JACS）上。

[论文链接](#)

研究团队单位：中国科学技术大学

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](https://www.iikx.com)转发