

研究揭示有机含氟溶剂效应新规律

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/37177.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！

研究揭示有机含氟溶剂效应新规律。南开大学研究员刘天飞团队发现了饱和脂肪链有机荧光探针分子在极性氟代芳烃中的自卷曲与聚集行为的新规律。日前，该研究成果以内封文章的形式，发表在国际学术期刊《聚集体》。

有机含氟溶剂是一类在军事国防、生命医疗、能源材料、绿色化学和芯片微电子等领域中广泛应用的重要反应介质，在国民经济和国防建设中扮演着重要的角色。由于氟原子的引入，导致碳氢化学基本规律对有机含氟溶剂往往不适用。因此，揭示有机含氟溶剂结构对溶剂化行为与性能的影响，是一个重要的研究课题。

刘天飞团队以具有独特亲脂亲氟两亲性的极性氟代芳烃为突破点，发现了有机自由基分子在极性氟代芳烃中的簇集行为；确定了在极性氟代芳烃中的首个C-H碳氢键的绝对pKa键能标度，完善了适用于极性氟代芳烃中反应性能精确预测的计算化学溶剂化模型。

该课题组采用多种浓度相关光谱学、动力学、动态光散射等现代技术并结合理论计算，对两类荧光探针分子在三种极性氟代芳烃中的自卷曲与聚集行为展开研究。他们发现单头荧光探针分子在极性氟代芳烃中，如同中国古代仕女的发簪一样，倾向于保持伸展的帽针构象，在较低浓度下形成聚集体，在较高浓度下形成分子间激基缔合物；大多数双头探针在这些溶剂中倾向于自卷曲的发夹构象，但最佳构象取决于链长，并且能在极低浓度下形成分子内的激基缔合物。这些新发现与我国著名物理有机化学家、中国科学院院士蒋锡夔先生和佟振合先生在上世纪八十年代到九十年代发现的有机分子在水溶液中的聚集与自卷行为规律截然不同。该团队进一步阐明了极性氟代芳烃不同于水的双面结构，由于它们的共轭 π 电子云的贡献，呈现一种独特的三面结构，并且提出了极性氟代芳烃分子在溶质分子周围通过氢键等弱相互作用形成的短程有序、长程无序的溶剂化模型。非常令人兴奋的是，这些新规律，可以从热力学的角度预测并指导大环内酯化反应的性能优化，突破了传统有机合成方法中大环化反应的禁阻，实现了8-羟基辛酸在三氟甲苯中大环内酯化反应的加速与改善。

据悉，这一发现不仅填补了领域空白，深化了对有机含氟溶剂中溶剂化效应对分子行为的基本理解，更展现出在药物合成、材料化学及超分子组装等领域的重要应用潜力，未来或可推动更多功能分子和复杂结构的高效构建。刘天飞表示，团队正基于这一发现，研发具有簇集体梭促进性能的新型催化反应体系和能源转化体系，以国家需求为核心导向，为实现科技强国的宏伟目标提供有力支撑。（来源：中国科学报 陈彬）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/agt2.70217>

作者：刘天飞等 来源：《聚集体》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发