
主族金属有机化学研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/38542.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！

主族金属有机化学研究获进展

铝是地壳中含量最丰富的金属元素。近年来，科学家围绕拓展铝(III)的化学反应性、模拟过渡金属的行为，以实现小分子活化与催化开展研究，相关方向已成为主族元素化学领域的研究热点。

近期，中国科学院上海有机化学研究所研究团队聚焦发展具有氧化还原活性的NNN张力配体，并基于该类配体合成了一系列高活性主族金属/准金属配合物。

研究团队利用NNN张力配体，在乙醚中

与等摩尔的 LiAlH_4 反应，生成铝氢化物配合物锂盐，再经 $[\text{Me}_3\text{SiSO}_3\text{CF}_3]$

反应，得到目标产物 $2 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ 。化合物 $2 \cdot \text{Et}_2\text{O}$

O对空气高度敏感，但可在手套箱中储存。理论计算分子轨道分析表明，该化合物的HOMO(-3.69 eV)主要涉及铝原子、苯环及中心氮原子，LUMO(-1.12 eV)则主要定域在铝中心和两个苯环上。

团队进一步通过计算发现，单一三线态能隙(E_{ST})

为34.3 kcal/mol。电子自旋密度图显示，在激发三线态中，一个电子定域于铝原子，另一个电子离域于氮原子和骨架苯环。自然共振理论分析证实， $2 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ 共振结构主要由Al(III)(66.03%)和Al(I)(16.63%)组成，且具有较强的路易斯酸性。同

时， $2 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ 独特的电子结构也预示着其高反应活性和多样化的化学行为。

该研究制备并表征了一种结构新颖的高活性铝配合物，证明通过合理设计配体环境，主族金属铝也可实现与过渡金属类似的复杂反应模式。这种基于配体参与电子转移与协同活化的策略，为主族元素化学在催化、材料科学等领域的应用拓展了新路径。

近期，相关研究成果发表在《德国应用化学》(Angewandte Chemie International Edition)上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、中国科学院的支持。

[论文链接](#)

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