
科学家揭示卡宾活化氢气新机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39738.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！

科学家揭示卡宾活化氢气新机制。近日，南方科技大学理学院化学系刘柳副教授团队在发表于《自然—化学》发表最新研究成果。他们通过精准调控卡宾电子结构，实现了中性 $0\ 2$ 卡宾的稳定合成，并成功将其应用于氢气的活化，揭示了一条不同于传统模式的全新反应机制。

该研究不仅深化了对卡宾电子结构和反应性的认识，也为相关领域后续发展提供了新思路。

研究示意图。南方科技大学供图

氢气活化是合成化学与能源转化中的关键基元反应，长期以来主要依赖过渡金属体系。相比之下，单线态卡宾介导的氢气活化研究进展较为有限。单线态卡宾通常呈 $0\ 2$ 电子结构，受轨道对

称性限制，氢气活化只能沿卡宾的 π -面路径进行，因而属于非最小移动路径，伴随着较大的结构重组和较高的反应能垒，迄今仅有一种单线态卡宾在加热条件下能够实现氢气的活化。

2024年，刘柳团队创制了具有反转电子结构的阳离子型 σ -卡宾，突破了传统卡宾电子结构的限制。在此基础上，团队进一步将 σ -卡宾拓展至中性体系，通过调控配体环境，一步构建了中性 σ -卡宾，实验结果表明，该物质呈现 σ -卡宾结构特征，面内具有空 π -轨道，面外存在占据的 π -孤对电子。

在室温、1个大气压氢气条件下，中性 σ -卡宾的苯溶液可顺利发生氢气活化，生成产物卡宾加氢产物。研究团队证实，氢化后卡宾碳中心转变为饱和碳。同位素标记与动力学研究表明，该反应遵循协同但非同步的 π -面活化路径，与理论计算结果高度吻合。

团队进一步系统揭示了该卡宾体系的氢气活化机制。计算结果表明，该反应遵循一条 π -面活化路径，即氢气分子沿卡宾 π -面侧向接近，经协同过程实现H-H键断裂。与传统 π -面路径相比，这一路径具有更低的反应能垒和更小的骨架形变，呈现前过渡态特征，整体趋近于最小移动路径。该转化根源在于中性 σ -卡宾所具有的独特路易斯双亲性，一方面，面内空的 π -轨道可接受来自H-H键的电子；另一方面，面外占据的 π -孤对电子又可向H-H反键供电子，二者协同促进氢气活化。

该成果突破了传统单线态卡宾的经典反应范式，首次证实稳定卡宾可经 π -面路径实现小分子活化，拓展了卡宾化学的研究边界，也为双亲性主族元素化学的发展提供了新的思路。（来源：中国科学报 刁雯蕙）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41557-026-02147-0>

作者：刘柳等 来源：《自然—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](https://www.iikx.com)转发