# 研究提出膦催化联烯选择性[2+2]环化反应新策略

作者：writer 来源：科学网

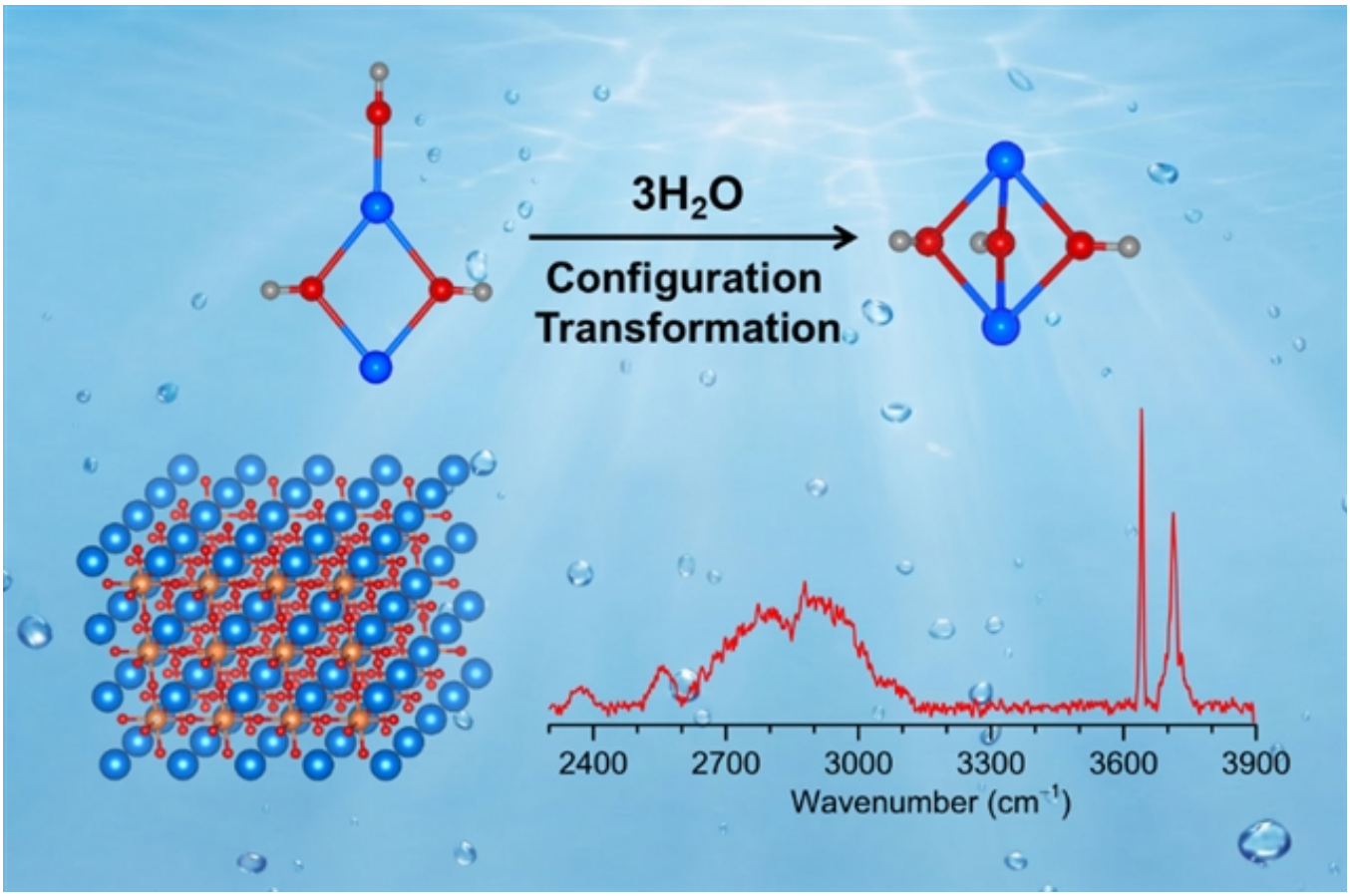
本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/40675.html

*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！*

**研究提出膦催化联烯选择性[2+2]环化反应新策略**。近日，中国科学院大连化学物理研究所化学反应动力学全国重点实验室团簇光谱与动力学研究组（2506组）江凌研究员和李刚副研究员团队联合宁波大学闫迎华教授团队，利用自主研制的中性团簇红外光谱实验站，系统研究了中性双锶氢氧化物水合团簇的结构演化规律，发现仅需三个水分子即可引发Sr2(μ2-OH)2(η1-OH)向Sr2(μ2-OH)3的构型转换，为理解催化剂的金属氧骨架水合作用机制提供了新思路。

多核金属氢氧化物的水合作用在催化转化、金属腐蚀、功能材料等过程广泛存在。在逐级水合过程中，水的氢键网络可诱导核心骨架和微观配位环境的重构，进而驱动体系发生一定的构型转变。因此，研究多核金属氢氧化物水合团簇的结构演化机制，对理解真实催化剂固液界面的活性位点结构特征具有重要意义。然而，与离子型团簇相比，中性团簇不携带电荷，难于探测和质量选择，实验研究更具挑战性。

为实现对中性团簇的精准探测和结构解析，江凌和李刚团队自主开发了基于红外激发和极紫外阈值电离技术（IR-VUV）的中性团簇红外光谱实验站（Rev. Sci. Instrum.，2020），实现了质量选择中性团簇的高灵敏谱学探测、结构表征和反应性能研究。结合大连相干光源和桌面极紫外光源，该实验站已被用于水团簇（Proc. Natl. Acad. Sci.，2020；Nat. Commun.，2020；Cell Rep. Phys. Sci.，2022；J. Chem. Phys.，2023；J. Phys. Chem. Lett.，2024；Nat. Commun.，2025）、金属—水团簇（J. Phys. Chem. Lett.，2023；J. Chem. Phys.，2025；J. Am. Chem. Soc.，2026）、硼团簇（Angew. Chem. Int. Ed.，2025）和硼—氧团簇（J. Am. Chem. Soc.，2026）等体系的中性团簇光谱研究。




在本工作中，科研人员选取中性双锶氢氧化物Sr2(OH)3作为模型体系，利用中性团簇红外光谱实验站，结合桌面极紫外光源，测得了中性双锶氢氧化物水合团簇Sr2(OH)3(H2O)n (n = 1-5)的红外光谱。团队将实验光谱与量子化学计算和从头算分子动力学模拟相结合，发现水合数n ≤ 2的团簇采取Sr2(μ2-OH)2(η1-OH)(H2O)n构型，水合数n ≥ 3的团簇则演变为Sr2(μ2-OH)3(H2O)n构型，表明中性双锶氢氧化物水合团簇在n = 3时发生了构型的突变。研究发现，第三个水分子会诱导Sr2(μ2-OH)2(η1-OH)核心骨架发生显著的形变，产生了较高的形变能，进而驱动了这一结构转变。Sr2(μ2-OH)3(H2O)n构型通过氢键网络的重排，有效降低了体系的泡利排斥能并维持了结构稳定性，使其成为全局最稳定结构。该研究体系可作为描述金属氧骨架和水合作用的模型，为系统研究水合作用驱动的晶格重排、活性位点调控等科学问题提供了新策略。

相关研究成果以Infrared Spectroscopy of Neutral Distrontium Hydroxides Unravels Configuration Transformation in Growing Water Clusters为题，发表在《中国化学会会刊》（CCS Chemistry）上。该工作的第一作者是中国科学院大连化学物理研究所506组博士研究生江帅。该工作得到国家自然科学基金、科技部科技创新2030重大项目、中国科学院B类先导专项基于极紫外光源的化学反应过渡态精准探测等项目的资助。（来源：中国科学院大连化学物理研究所）

相关论文信息：https://doi.org/10.31635/ccschem.026.202608054

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费等事宜，请与我们接洽。
作者：江帅等 来源：《中国化学会会刊》

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