



我国学者与海外合作者在铜催化偶联反应机理研究方面取得进展

日期 2023-10-17 来源: 化学科学部 作者: 雷浩 付雪峰 【大中小】 【打印】 【关闭】

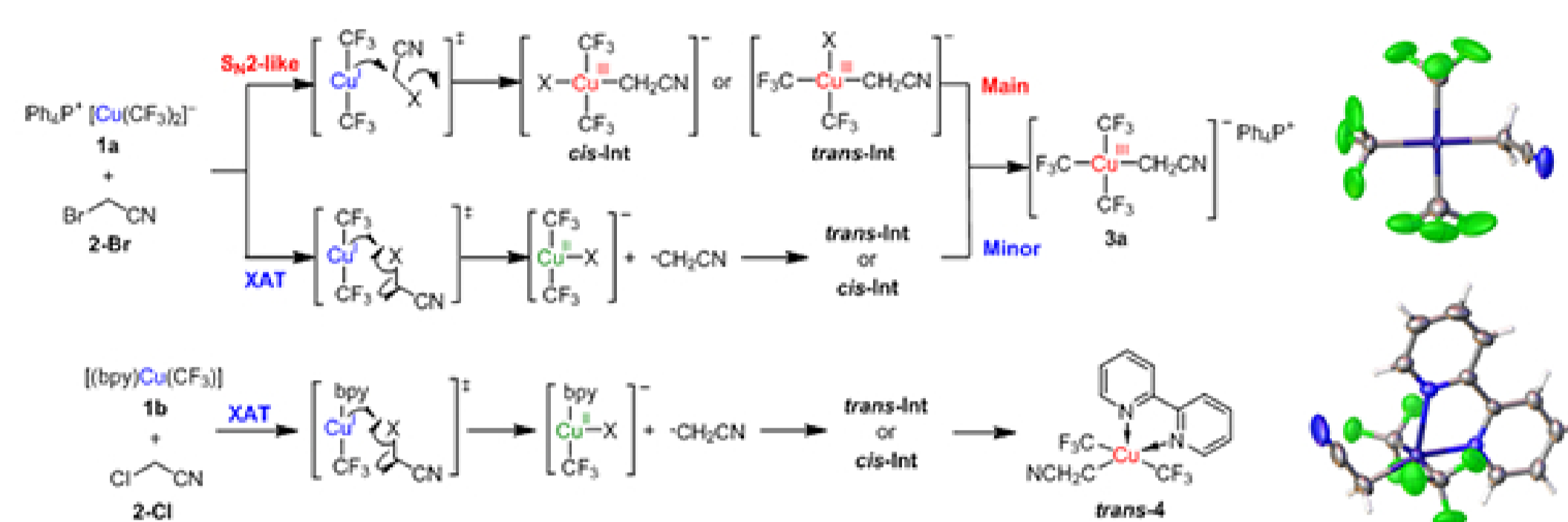


图 离子型或中性一价铜与烷基卤化物氧化加成反应机理及三价铜络合物结构

在国家自然科学基金项目(批准号: 22061160465、22122104)等资助下,中国科学院上海有机化学研究所沈其龙研究员、薛小松研究员等人与美国加州大学伯克利分校John F. Hartwig教授合作,在铜催化偶联反应机理研究方面取得进展。研究成果以“烷基卤化物氧化加成形成稳定的三价铜产物(Oxidative addition of an alkyl halide to form a stable Cu(III) product)”为题,于2023年9月7日在线发表于《科学》(Science)杂志上。论文链接:<https://www.science.org/doi/10.1126/science.adg9232>。

铜催化的偶联反应是一类构建碳-碳键与碳-杂原子键的重要反应。一般认为,一价铜物种与亲电底物氧化加成生成三价铜中间体是该催化反应中的决速步。然而,三价铜络合物稳定性低,很难被分离鉴定。因此,相关机理研究颇具挑战。

针对上述问题,沈其龙等人利用三氟甲基可稳定铜-碳键的特性,通过结构明确的三氟甲基一价铜配合物和烷基卤化物的氧化加成反应,分离并表征了室温下稳定的四配位离子型和五配位中性的三价铜络合物。他们进一步研究了该基元反应的动力学,并对其可能途径进行了理论计算。实验和计算结果均支持离子型和中性一价铜物种经历了不同的反应路径:前者的氧化加成反应经历了以 S_N2 类型为主、卤原子转移(XAT)为辅的混合反应途径;而后者则通过XAT路径,经由二价铜中间体生成三价铜产物。

机构概况: 概况 职能 领导介绍 机构设置 规章体系 专家咨询 评审程序 资助格局 监督工作

政策法规: 国家科学技术相关法律 国家自然科学基金条例 国家自然科学基金规章制度 国家自然科学基金发展规划

项目指南: 项目指南

申请资助: 申请受理 项目检索与查询 下载中心 代码查询 常见问题解答 科学基金资助体系

共享传播: 年度报告 中国科学基金 大数据知识管理服务 优秀成果选编

国际合作: 通知公告 管理办法 协议介绍 进程简表

信息公开: 信息公开制度 信息公开管理办法 信息公开指南 信息公开工作年度报告 信息公开目录 依申请公开

相关链接 政府 新闻 科普