

从“污染源”到“金属核轮烯”：一个小锇原子的蜕变之旅

陈大发, 夏海平*

南方科技大学化学系, 深圳格拉布斯研究院, 广东省催化化学重点实验室, 广东 深圳 518055

摘要: 采用生动的拟人化叙事, 讲述了金属锇原子(“小锇”)从构成有毒化合物四氧化锇到转变为功能性“金属核轮烯”分子的奇幻旅程。故事中, 小锇在造成生态破坏后深感愧疚, 决心改变, 并在一位“分子魔法师”的引导下, 成功被改造成“金属核轮烯”。魔法师通过二茂铁、二苯铬、格氏试剂等经典案例, 深入浅出地阐释了夹心型、半夹心型等金属轮烯的多样性及其广泛应用。最终, 小锇通过创新的“共轭碳链成环”法, 被构筑成一个结构独特、性质稳定且具广泛应用前景的新型分子, 展现了从基础研究到应用创新的科学思维过程。这则故事不仅是一篇有趣的科普童话, 更是一堂融汇了化学史、键合理论和材料科学的启蒙课。

关键词: 轮烯; 金属; 二茂铁; 金属卟啉

中图分类号: G64; O6

From Pollutant to Metal-Centred Annulene: The Transformation Journey of a Little Osmium Atom

Dafa Chen, Haiping Xia *

Department of Chemistry, Shenzhen Grubbs Institute, Guangdong Provincial Key Laboratory of Catalysis, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, Guangdong Province, China

Abstract: This article employs a vivid personified narrative to recount the journey of an osmium atom (“Little Os”) from being part of the toxic osmium tetroxide to transforming into a functional “metal-centred annulene”. In the story, after causing ecological damage, Little Os resolved to change. Under the guidance of a “Molecular Magician”, she was successfully transformed into a “metal-centred annulene”. Using classic examples such as ferrocene, bis(η^6 -benzene) chromium, and Grignard reagents, the Magician explained the diversity of metallo-annulenes-including sandwich, half-sandwich, and other types-and their wide range of applications. Ultimately, through an innovative “conjugated carbon chain cyclization” method, Little Os was constructed into a novel molecule with a unique structure, stable properties, and broad application prospects, demonstrating the scientific thought process from basic research to applied innovation. This story is not only an engaging popular science tale, but also an enlightening lesson integrating the history of chemistry, bonding theory, and materials science.

Key Words: Annulene; Metal; Ferrocene; Metallo-porphyrin

在元素周期表的大家族中, 居住着一个名叫“小锇”的金属原子(锇原子, 元素符号Os)。她天生质地坚硬、性格顽皮好动, 因此不时惹出些小麻烦。

收稿: 2025-08-27; 录用: 2025-08-29; 网络发表: 2025-08-29

*通讯作者, Email: xiahp@sustech.edu.cn

基金资助: 国家自然科学基金(92156021, 22350009); 广东省催化化学重点实验室基金(2020B121201002); 高水平专项资金(G03050K003); 深圳市杰出人才培养经费

1 污染源

有一天，小铁在一条清澈的河边偶遇了四个同样顽皮的氧原子。他们一拍即合，兴奋地决定搞个恶作剧。五个小家伙手拉手，组合成一个名叫“四氧化铁”的分子，“噗通”一声跳进河水里洗澡。谁知，这个看似无害的玩笑竟酿成灾难——四氧化铁具有剧毒！河水迅速被污染，鱼虾呼吸困难、纷纷病倒，原本生机盎然的河流顿时失去了光彩。

眼前的景象让小铁彻底惊呆了。她怔在原地，从没想到过自己一时的“好玩”竟会造成如此巨大的伤害。望着那些奄奄一息的小生命，小铁的内心充满了前所未有的愧疚与悲伤。她暗下决心，一定要洗心革面，成为一个能帮助他人、对社会有贡献的“有用之材”。

2 金属核轮烯

于是，小铁踏上了一段悔过自新的旅程。她翻越晶体山脉，游过溶液海洋，终于来到了一座被称为“分子构筑殿堂”的神秘实验室，拜访了一位智慧而慈祥的魔法师——他擅长用反应条件和催化咒语“搭建”出各种神奇的分子。

魔法师注意到了这位迷茫却坚定的小客人，微笑着请小铁讲述自己的故事。听完后，魔法师点了点头，沉吟片刻，说道：“我可以为你装配一件叫做‘轮烯’的神奇装备。它不仅会让你变得更强大，还可能帮助你成为改变世界的英雄。”

“轮烯？那是什么？”小铁好奇地睁大了漂亮的眼睛。

“轮烯是一种由碳原子手拉手组成的闭合共轭大环^[1]，”魔法师耐心地解释，“世界上第一个被发现的轮烯是苯分子，由英国著名科学家、被称为‘电学之父’的迈克尔·法拉第(Michael Faraday)于1825年从煤焦油中首次分离出来^[2]。这一发现也开创了芳香化学。”

他继续说道：“轮烯能够与你这样的金属原子结合，形成一种被称为‘金属轮烯’的超强分子，赋予你前所未有的能力。”

“可是，为什么装上它，我就能变得有用呢？”小铁仍然有些疑惑。

“看看你的铁爷爷(铁原子，元素符号Fe)吧，”魔法师举了个熟悉的例子，“在七十多年前，我在他的上下各装配了一个由五个碳原子组成的小轮烯‘环戊二烯’环，使他变成了夹心型的‘二茂铁’(图1)^[3]。你猜后来怎样？他再也不到处生锈惹祸了，反而一跃成为科学界的超级明星！”

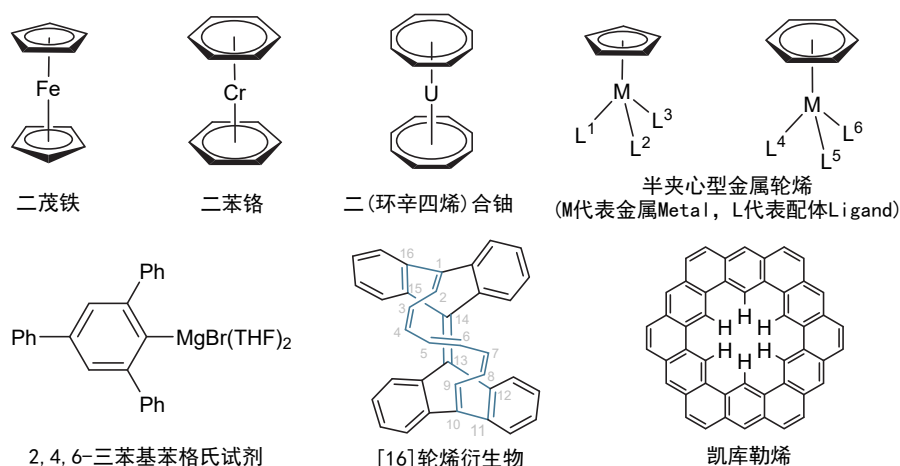


图1 典型的金属轮烯、轮烯结构式

“二茂铁不仅彻底颠覆了人类对金属-碳键的认知，推动了分子轨道理论在配位化学中的应用，奠定了现代金属有机化学的基础，还成为了多个领域不可或缺的多面手——它能帮助汽油更充分地

燃烧，减少尾气污染；能作为催化剂参与药物合成，拯救无数生命；还能通过引入其他官能团实现功能扩展，应用范围极其广泛^[4]。如今，二茂铁家族已在工业、农业、医药、航天、节能与环保等各行各业大显身手，真正成为了改变世界的英雄家族。”

“再看看你的铬爷爷(铬原子，元素符号Cr)，”魔法师又举了一个例子，“同样在约七十年前，我为他装配了两个苯环，使他形成了与二茂铁结构类似的二苯铬(图1)^[5]。二苯铬的发现也极大地促进了人类对化学键的理解。经过进一步修饰的二苯铬类化合物在材料领域表现非常出色，例如：它们可用于催化烯烃聚合；可用于构建突破传统磁性性能局限，兼具低密度、透光性、电绝缘性和低温制备等特性的分子磁体；可用于构筑新型介孔材料、金属碳氮化物薄膜和有机金属聚合物等^[6]。”

“更大的轮烯也可以装配在你们这些金属小伙伴上，”魔法师继续说道，“比如，夹心型的二(环辛四烯)合铀(图1)^[7]，就是将环辛四烯装配在铀原子上形成的……”

“等等，”小钺这次忍不住打断了魔法师，“爷爷，您刚才举的例子都是夹心型分子。那和轮烯装配，能不能形成其他形状分子呢？”

“小钺，你脑袋瓜很灵嘛，懂得举一反三了，”魔法师赞许地点了点头，“当然也有其他形状分子。比如环戊二烯、苯等也可以与金属形成半夹心型结构(图1)，它们的用途一点也不亚于夹心型分子哦^[8,9]。”

“那这种半夹心型分子中，金属伙伴是不是仍然游离于轮烯平面之外？有没有金属和轮烯处于同一平面的分子呢？”

“问得非常好！”魔法师眼中闪着光，“这样的分子当然也有。比如苯与你的镁哥哥(镁原子，元素符号Mg)形成的格氏试剂^[10]，就属于你所说的那种类型(图1)。要知道，格氏试剂种类繁多，其发现甚至比二茂铁还早五十年。它最早由法国化学家维克多·格林尼亚(Victor Grignard)于1901年发现，在有机与药物合成、高分子材料制备等领域极为重要，地位不亚于二茂铁，堪称化学史上划时代的成就^[11]。顺便告诉你，维克多·格林尼亚早年也曾不务正业，后来幡然醒悟、改过自新，终成一代科学巨匠。所以孩子，只要你真心向上，将来也一定大有可为。”

“谢谢魔法师爷爷，”小钺非常激动，眼中闪烁着希望的光芒，“既然已经有这么多形形色色的金属轮烯分子，那您打算为我装配什么样的轮烯呢？我希望拥有与众不同、让人过目不忘的外表。”

“你这个要求听起来简单，实现起来可不容易。我得好好想想。”魔法师闭目沉思，指间仿佛有电子的流光在跃动。

“有了！我可以尝试把你放在轮烯肚子里，也就是在轮烯的平面中心，让多个碳原子如舞者般围着你旋转——这样的结构前所未有，绝对独一无二，按照现代人的说法叫做“从零到一”。而且，你的外形会与叶绿素、血红素等生命必需的金属卟啉相似(图2)^[12]，说不定也能像它们一样，在光合作用、氧气传输甚至疾病治疗中为人类做出重大贡献。”

“太好了！那事不宜迟，我们现在就开始吧！”小钺兴奋地说。

“先别急，我还得仔细考虑怎么实现这个大胆的想法。”魔法师的语气变得严肃起来，“要知道，刚才提到的环戊二烯、苯、环辛四烯等轮烯都太小，它们的肚子里装不下你。而对于更大的轮烯(比如[16]轮烯^[13]，图1)，它们往往扭曲严重，难以保持平面，组装之后也不够美观。有些轮烯衍生物虽然是平面的，比如凯库勒烯^[14]，但你看它空腔里有那么多氢原子，就连我的法力也不够，我无法在不破坏它结构的情况下把你放进去(所需能量太高)(图1)。要知道，我不像造物主那样无所不能，我的魔法是有极限的。”

“啊？难道就没有办法了吗？”小钺的声音中透出一丝失望。

“别急，让我再想想。”魔法师轻轻拍了拍小钺，“也许我们可以另辟蹊径：先不给你直接安装完整的轮烯环，而是先为你装配一段共轭碳链，最后再在链的缺口处拼接其他碳原子令碳链闭合形成轮烯。”

“只要能够成功，什么方法我都愿意尝试！”

“好，那我先为你安装一段含13个碳原子的共轭碳链^[15]。看，你现在变成**A**了。我再让一个炔烃和你成环——瞧，你终于变成了我所说的那种金属位于轮烯平面中心的**B**了(图2)!”

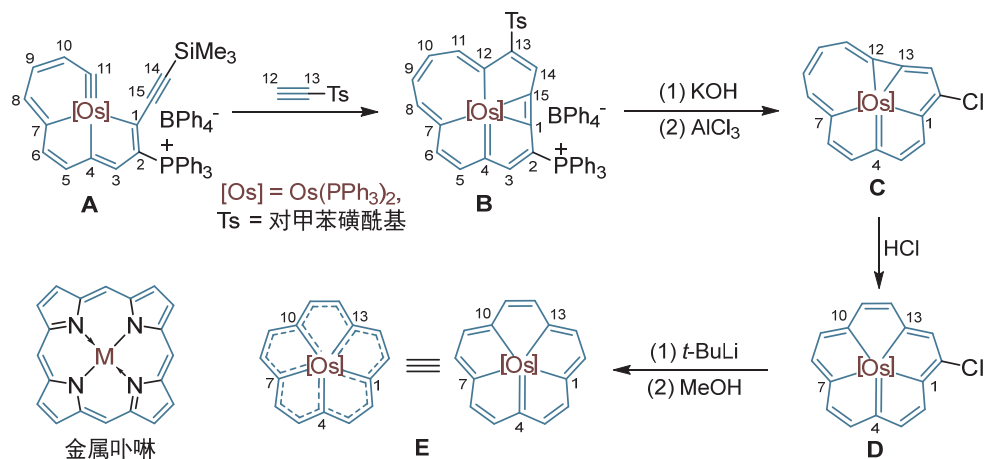


图2 “金属核轮烯”的制备过程及其类似物金属卟啉的结构式

“确实很特别，但我对现在的造型还不太满意。您看，和二茂铁相比，我不够对称，也不够美观。”

“别急，我现在让你变漂亮，这还在我的魔法能力范围之内。”

“我变——咦？你怎么成了**C**(图2)，还是不够对称啊，难道是我魔法失败了？我再试一次。”

“我再变——啊！你看，你现在变成了更漂亮的**D**了，只不过你这怎么还伸出来一个氯原子？我把它也变没吧。好啦，现在你是和二茂铁一样具有五重对称性的**E**了(图2)^[16]！这个外形你满意吗？”

“太满意了！谢谢您！我从未想过自己有一天能变得这么酷。但我不希望只有颜值，人家会说我是个花瓶，我更想成为一个真正有用的人。”

“放心吧，孩子，”魔法师慈祥地说，“经过初步测试，我发现你不仅外形酷似金属卟啉，部分功能也与其相近(如吸光特性)，甚至在某些方面还超越了普通金属卟啉——比如你在500–700 nm之间的吸收峰更强，而且你还具备光致发光和聚集诱导发光增强效应。你内心坚韧，外界的干扰难以动摇你向上的决心(强芳香性和稳定性，在240 °C的空气中也不分解)，你的CV(电化学循环伏安曲线)已经和二茂铁一样完美了；你还容易被进一步改造(易衍生化)；更拥有独门绝技——五个芳环共享你一个原子。要知道，对于传统体系，作为天之骄子的石墨烯也才拥有三个芳环共享一个原子的极限结构，因为，碳只有4个价电子，而你天生丽质——拥有8个价电子。相信这些特质一定能让你为人类做出卓越贡献。”

3 蜕变完成，迎接使命

魔法师最后补充道：“你还有许多兄弟姐妹(指其他金属元素)，如果愿意，将来我也可以为他们安装上不同碳数的轮烯环。在大家的共同努力下，你们或许能成长为一个改变世界的大家族，就像二茂铁家族和金属卟啉家族那样。你们如此独特，由于金属处于轮烯环中心，我为你们取名‘金属核轮烯’吧，不知道你对这个名字满不满意？”

“这个名字非常形象，我很满意。”小钺听得心潮澎湃，她的原子核仿佛都在激动地振动。在魔法师的帮助下，她终于装备上了美丽的轮烯环，完成了从调皮鬼到潜力无限的“金属核轮烯”的蜕变。她不再迷茫顽皮，而是怀着坚定的信念，准备迎接属于自己的使命——助力科学家构建分子、研发新药，在能源、材料与生命科学的广阔天地中自由翱翔。

而这一切，才刚刚开始。

参 考 文 献

- [1] Spitler, E. L.; Johnson II, C. A.; Haley, M. M. *Chem. Rev.* **2006**, 106, 5344.
- [2] Faraday, M. *Philos. Trans. R. Soc. London* **1825**, 115, 440.
- [3] Kealy, T. J.; Pauson, P. L. *Nature* **1951**, 168, 1039.
- [4] Astruc, D. *Nat. Chem.* **2023**, 15, 1650.
- [5] Fischer, E. O.; Hafner, W. Z. *Naturforsch. B* **1955**, 10, 665.
- [6] Pampaloni, G. *Coord. Chem. Rev.* **2010**, 254, 402.
- [7] Streitwieser, A.; Müller-Westerhoff, U. *J. Am. Chem. Soc.* **1968**, 90, 7364.
- [8] Arndt, S.; Okuda, J. *Chem. Rev.* **2002**, 102, 1953.
- [9] Bochkarev, M. N. *Chem. Rev.* **2002**, 102, 2089.
- [10] Krieck, S.; Görls, H.; Yu, L.; Reiher, M.; Westerhausen, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 2977.
- [11] Cascella, M.; Bore, S. L.; Eisenstein, O. *Chem. Sci.* **2025**, 16, 8196.
- [12] Vargas-Zúñiga, G. I.; Boreen, M. A.; Mangel, D. N.; Arnold, J.; Sessler, J. L. *Chem. Soc. Rev.* **2022**, 51, 3735.
- [13] Ajami, D.; Oeckler, O.; Simon, A.; Herges, R. *Nature* **2003**, 462, 819.
- [14] Diederich, F.; Staab, H. A. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1978**, 17, 372.
- [15] Xu, B.; Mao, W.; Lu, Z.; Cai, Y.; Chen, D.; Xia, H. *Nat. Commun.* **2024**, 14, 4378.
- [16] Xu, B.; Chen, D.; Ruan, K.; Luo, M.; Cai, Y.; Qiu, J.; Zhou, W.; Cao, B.; Lin, Z.; Sessler, J. L.; *et al.* *Nature* **2025**, 641, 106.