

外审意见:

审稿人: 1

给作者的审稿意见

本文对反转电子态($\sigma^0\pi^2$)卡宾的研究进行了综述。这类卡宾具有与传统的卡宾不同的电子构型,其研究对于深入理解卡宾的结构,并拓展其应用空间具有重要的意义。作者领导的团队在该领域开展了卓有成效的研究,取得了重要的突破。本文有助于读者对反转电子态($\sigma^0\pi^2$)卡宾的全面了解,并进而对加深对化学结构理论的认识。强力推荐本文发表。

修改建议:

摘要中的第一句

“卡宾($R_2C:$)为一类二价碳中性化合物,其中心碳原子具有六电子特征,在合成化学与材料科学领域具有重要应用价值。”

建议修改。卡宾首先还是有机反应的一类重要的中间体,这也是通常的情况和认识。当然也有特殊稳定的卡宾,可以描述为化合物。本文聚焦于相对稳定的卡宾,但在对卡宾的一般描述上,首先还是反应活性中间体。基于卡宾中间体的各类有机反应在合成化学以及化学生物学方面已有很多的应用。在前言部分进一步把这些区分和关联厘清对读者会有帮助。

在一些图示中,例如,图 15,增加人们试图制备的卡宾结构会更清楚一点,尽管这些瞬态的卡宾并未被观察到。

本文聚焦于反转电子态($\sigma^0\pi^2$)卡宾这类电子构型的卡宾物种,建议在前沿部分适当描述人们比较熟悉的电子态($\sigma^2\pi^0$)卡宾,例如氮杂环卡宾。通过和这类大家比较熟悉,并且已在各领域已有很多应用的稳定卡宾的结构上的比较,读者可以更清楚地了解反转电子态($\sigma^0\pi^2$)卡宾的研究,及其在整个大领域中所处的特殊位置。

审稿人: 2

给作者的审稿意见

在本篇综述文章中,刘柳等人系统梳理了反转电子态($\sigma^0\pi^2$)卡宾的研究进展。作者根据稳定化策略的不同,分类介绍了环状二亚氨基卡宾、二硼基卡宾以及金属配位的环状二磷基卡宾三类反转电子态卡宾,内容涵盖其结构特征、理论计算分析以及反应性质等方面。最后,作者结合反转电子态卡宾的特性,展望了其在惰性小分子活化和新型配体设计等领域的发展前景。总体而言,本文内容结构清晰,行文流畅,已达到《化学学报》发表的要求。建议在对以下问题进行修改和完善后予以发表:

1. 作者详细介绍了 $\sigma^0\pi^2$ 电子态卡宾的理论计算,合成转化和晶体学特征,是否有关于这类卡宾的谱学表征数据,和 $\sigma^2\pi^0$ 电子态卡宾相比,是否存在显著的差异,如果有相关研究建议进行讨论,使读者更全面的了解 $\sigma^0\pi^2$ 电子态卡宾。
2. 图 9 中,化合物 18 能否为实验检测到的化合物,请对化合物 18 的电子排布状态进行较为清晰的讨论。

3. 该综述重点介绍了反转电子态卡宾的合成、分离和表征，建议增加对这类卡宾的应用讨论，比如展望中提到的在小分子活化领域的应用。

审稿人: 3

给作者的审稿意见

在本篇研究展望中，刘柳等系统综述了反转电子态 ($\sigma^0\pi^2$) 卡宾领域的研究进展，介绍了其结构特征、稳定化策略及反应特性，并对其在惰性小分子活化、新型配体设计等方向的发展前景做了展望。本文主题属于结构化学前沿领域，综述全面，逻辑清晰，对卡宾领域的研究具有很好的参考价值。

以下是一些修改建议，供论文作者参考：

1. 建议在文章末尾，通过和正常电子态的单线态卡宾 ($\sigma^2\pi^0$) 比对，系统总结反转电子态 ($\sigma^0\pi^2$) 卡宾的光学性质、核磁共振谱学性质、反应性的差异。
2. 对一些表述进行调整。比如“然而也有例外，例如 George A. Olah 对碳正离子的研究[2]以及 Moses Gomberg 制备三苯基碳自由基的工作[3]”和前文语义不匹配，建议只提“碳正离子和碳自由基”两种结构，而不是讲具体研究，相应的引用可以保留，同时再增加一些关键文献。“三年后（1960 年和 1962 年）”表意不准确，因为这两个年份距离 1958 年并非三年；建议改为“随后（1960 年和 1962 年）”。“.....还未被科学家突破”建议改为“.....还未被科学家分离表征”。“.....并报道了生成的 Criegee 中间体（图 7）”应在图中标注该中间体，或者在正文中指出该中间体对应的化合物编号。
3. 图 16 表意不清楚，建议把两类卡宾的结构及其能量的关系在坐标中标注清楚（一个范围即可），目前的画法很难获得有效信息。
4. 文中多用“作者”指代所讨论工作中的作者，容易产生歧义（容易令人误会是本文作者），建议用“他们”替代。
5. 图 7 的中文标题中“化合物 1”的“1”未加粗；图 12 中文标题中“化合物 26”的“26”未加粗。