



第十五章 有机合成设计



孙宏枚

苏州大学 材料与化学化工学部



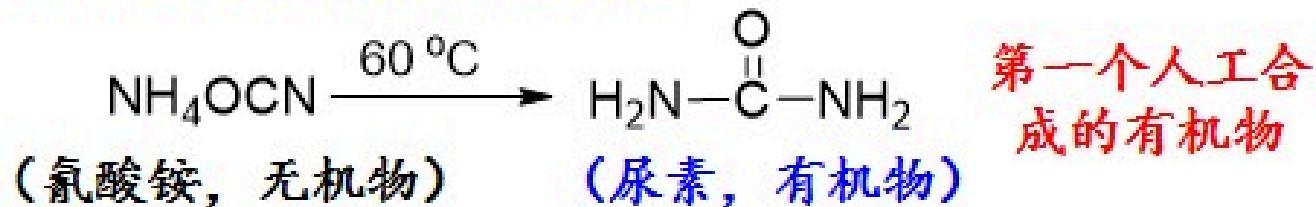


第十五章 有机合成设计

1. 有机合成的要求
2. 有机合成设计的一些基本概念
3. 目标分子化学键的切断
4. 一些常见化合物的逆合成分析
5. 合成中的选择性控制策略

1. 有机合成的要求 1.1 有机合成的核心

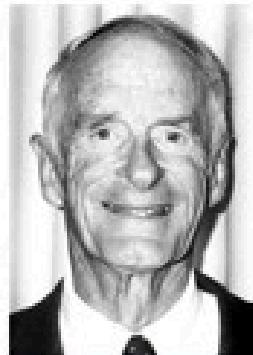
1828年，德国化学家维勒发现：



目前，有机化学家已经合成了几千万种有机化合物，使得有机合成逐渐成为医药、农药、生物和材料等研究领域的基础。

1. 有机合成的要求 1.1 有机合成的核心

2001年诺贝尔化学奖得主：合成我们的未来



William S. Knowles



Ryoji Noyori



K. Barry Sharpless

日本名古屋大学的野依良治教授：

化学是现代科学的中心化学，而合成化学则是化学的中心。

1. 有机合成的要求 1.1 有机合成的核心

有机合成的核心是：

- (1) 构建适当的碳骨架；
- (2) 构造特定位置的官能团；
- (3) 完成合成分子的立体化学要求。

官能团



1. 有机合成的要求 1.1 有机合成的要求

有机合成的要求是：

- (1) 尽可能采用原料便宜易得的可靠反应；
- (2) 选择较短的、较经济的合成路线；
- (3) 绿色环保的工艺路线。

经济
效益



生态效益



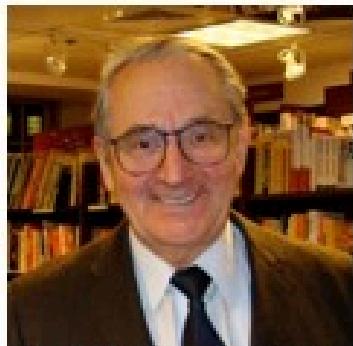


1.有机合成的要求 1.1 有机合成的要求

原料易得是指合成时要用些基本的原料，例如：

- (1) “三烯一炔”（乙烯、丙烯、丁烯及乙炔）；
- (2) “三苯一萘”（苯、甲苯、二甲苯及萘）；
- (3) 小于四个碳原子的醇类和甲醛、乙醛、丙酮、草酸、卤代苯、环己烷、乙酰乙酸乙酯和丙二酸二乙酯等。

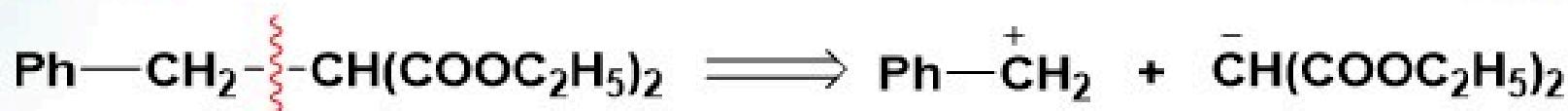
2. 有机合成设计的一些基本概念 2.1 起始原料、目标分子和逆合成分析法



E. J. Corey (1928-)

1991年诺贝尔化学奖——E. J. Corey,

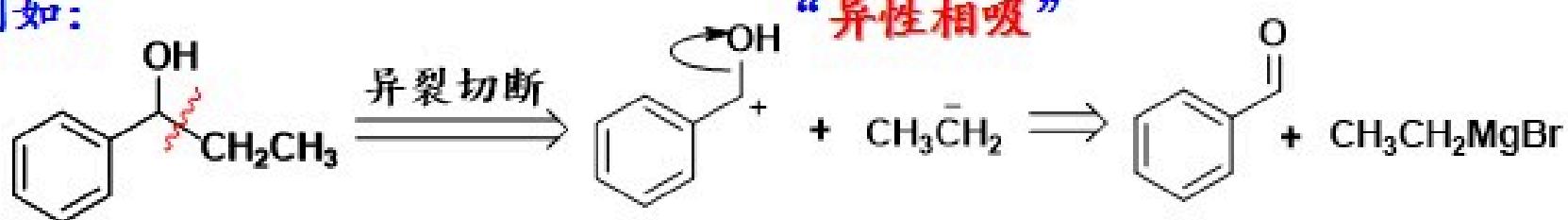
逆合成分析方法，是当今有机合成中最为普遍使用的合成设计方法。



切断是一个有机反应的逆过程，通常用一条波浪线穿过被切断的键来表示，要注意：切断必须以可靠的有机反应为基础。

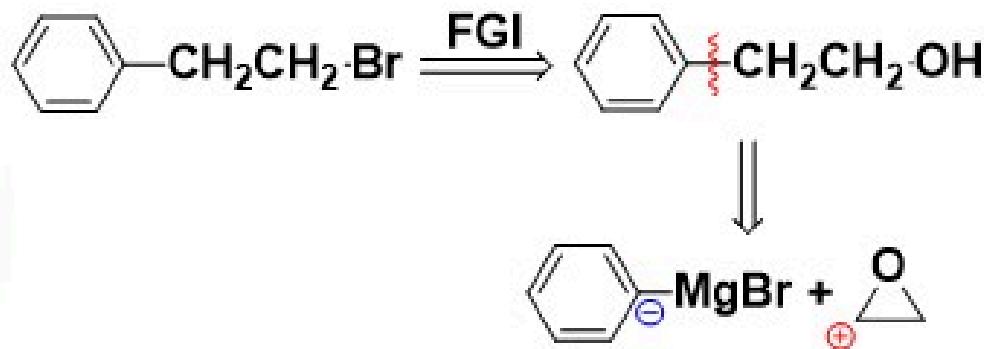
2. 有机合成设计的一些基本概念 2.2 合成子、合成等价物和切断

例如：



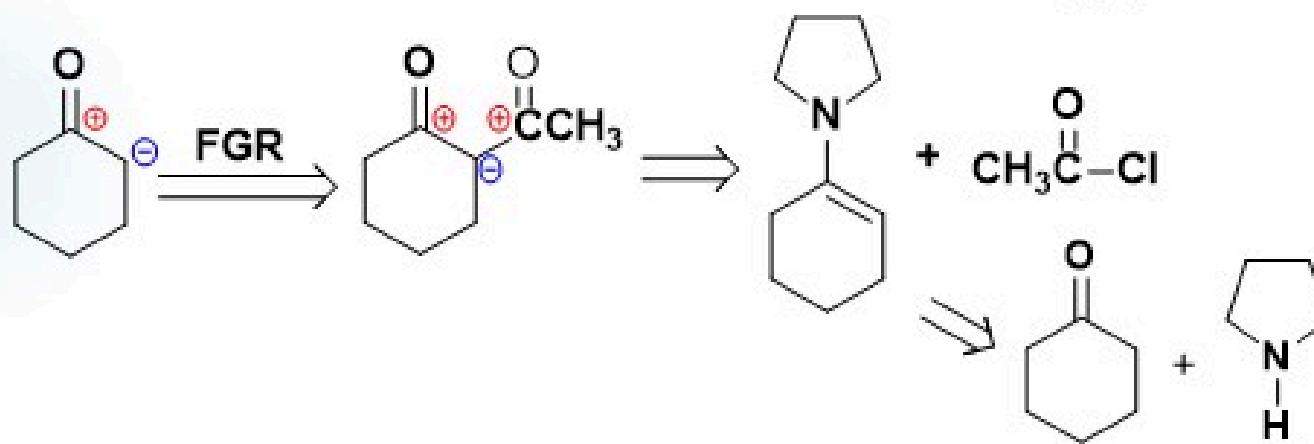
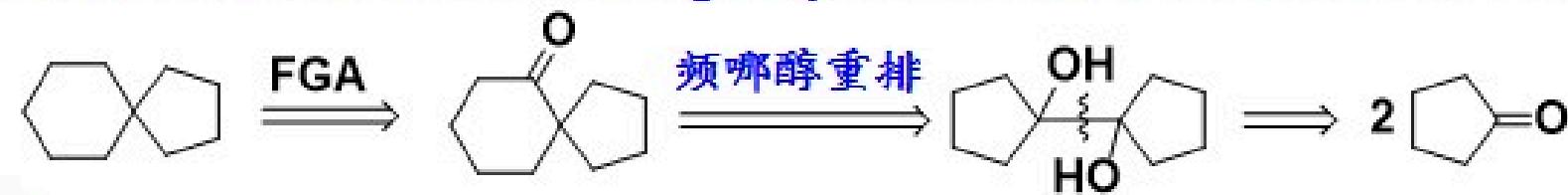
2. 有机合成设计的一些基本概念 2.3 官能团转换、官能团引入和官能团消除

在逆合成分析中，如果分子的骨架没有改变，只是分子中的官能团发生转换，称之为官能团转换 (functional group interconversion) ，简写成 FGI。例如：



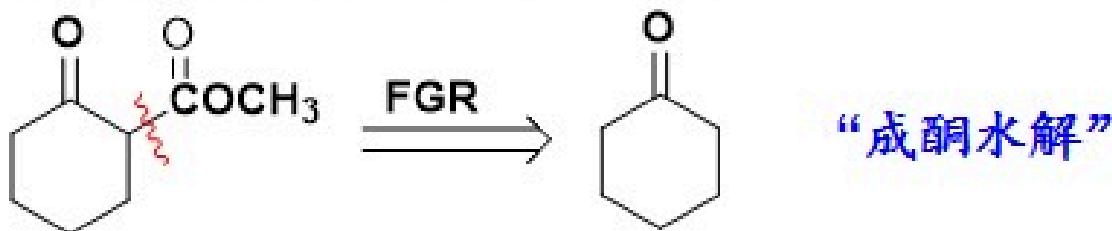
2. 有机合成设计的一些基本概念 2.3 官能团转换、官能团引入和官能团消除

在逆合成分析时，如果需要在骨架的某个位置添加一个官能团，称之为官能团引入 (functional group addition)，简写成FGA。例如：

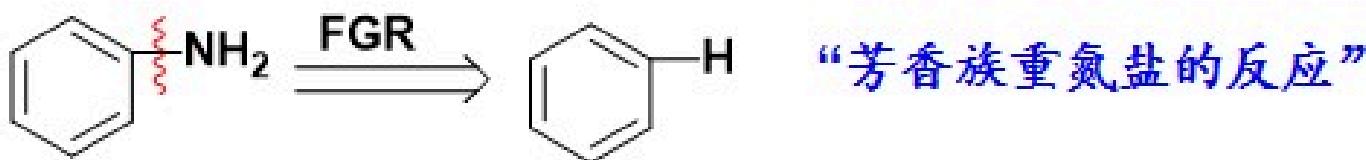


2. 有机合成设计的一些基本概念 2.3 官能团转换、官能团引入和官能团消除

将一个官能团从分子骨架中除去称为官能团消除 (functional group removal) , 简写成FGR。例如:



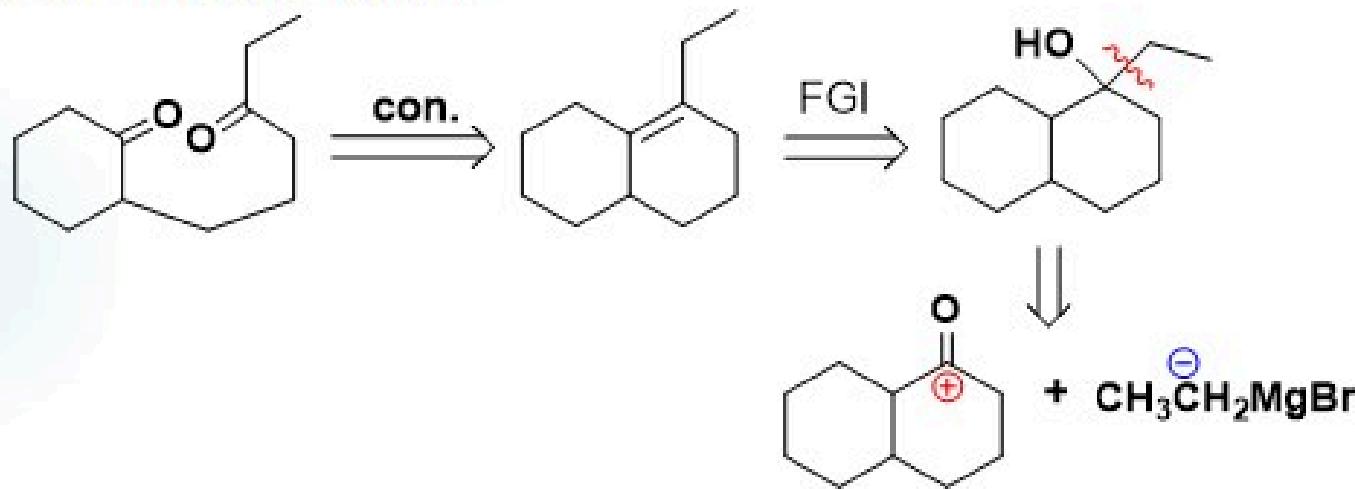
“成酮水解”



“芳香族重氮盐的反应”

2. 有机合成设计的一些基本概念 2.4 连接和重排

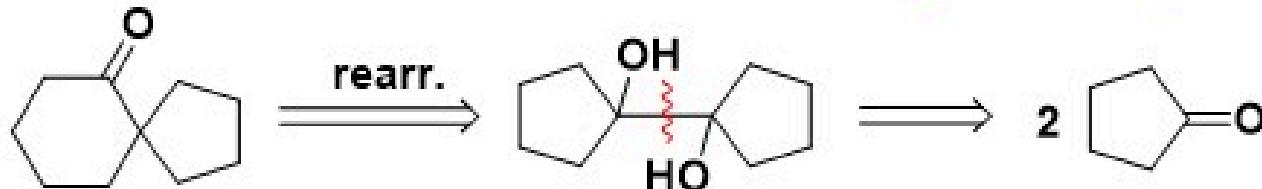
在逆合成分析中，需要将分子骨架中的两部分连接起来的逆向过程称为连接（connection），简写为con.。其表示方法是在逆合成分析的符号上加con.。例如：



2. 有机合成设计的一些基本概念 2.4 连接和重排

在逆合成分析时，如果目标分子是由前体分子骨架经过重排形成的，则其逆过程中会涉及分子骨架的重排（rearrangement），简写为 rearr.。

例如：



频哪醇重排：

