

# 有机合成化学与路线设计 cha课件

制作人：

时间：2024年X月



# 目录

|     |           |
|-----|-----------|
| 第1章 | 简介        |
| 第2章 | 合成方法学     |
| 第3章 | 合成路线设计    |
| 第4章 | 天然产物与药物合成 |
| 第5章 | 高分子合成与应用  |
| 第6章 | 总结        |





● 01

# 第1章 简介



# 有机合成化学与路线设计cha课件简介

本课件旨在介绍有机合成化学和路线设计的基本概念和应用，供相关专业学生和从业人员参考。课件包括有机合成化学和路线设计的简介、方法和应用案例等内容。





# 有机合成化学简介

有机合成化学是研究有机分子的构建和转化规律的学科，在新药研发、材料科学和化工等领域具有广泛的应用和重要的意义。有机合成化学中常用的反应类型包括加成反应、消去反应、置换反应等。





01

## 烯丙基化反应

烯丙基化反应是一种典型的加成反应

02

## 羟甲基化反应

羟甲基化反应是生物有机化学中的典型反应

03

## 环氧化反应

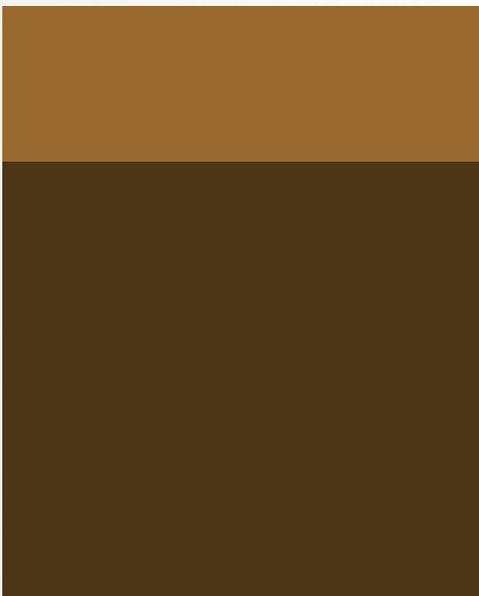
环氧化反应是一种重要的环化反应



# 消去反应和置换反应

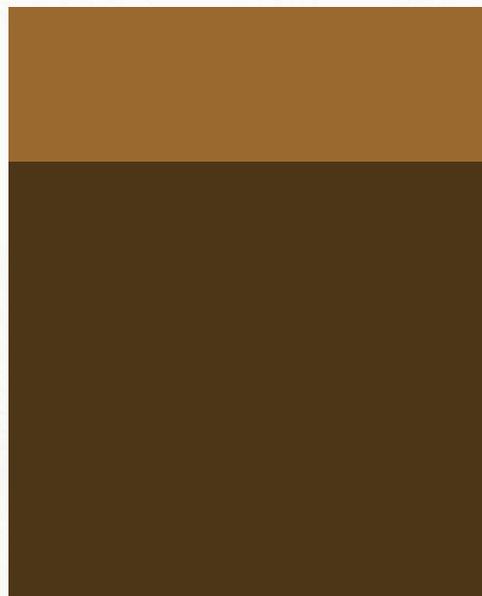
## 消去反应

酯水解反应  
脱水反应  
脱氧反应



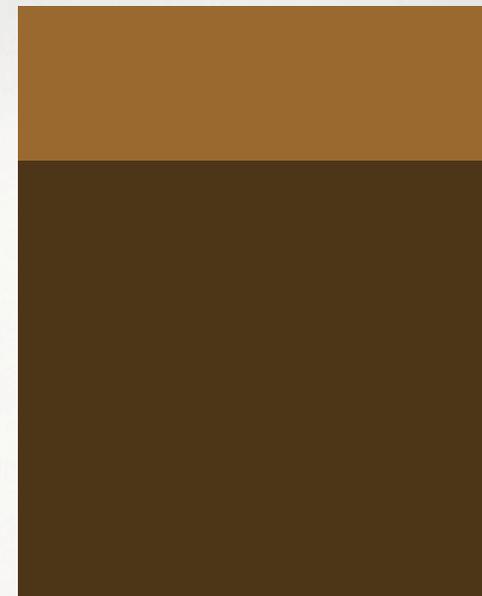
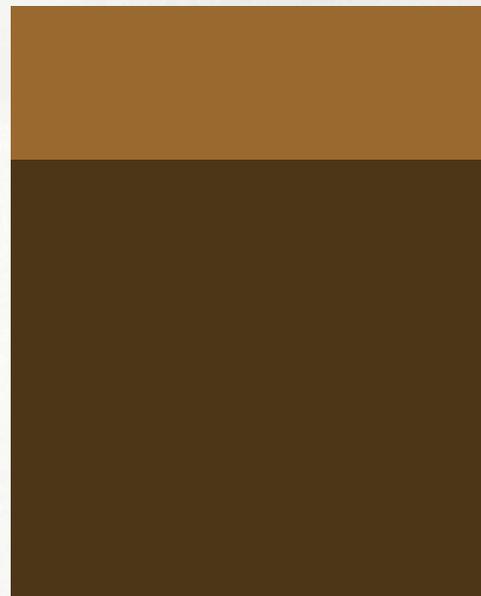
## 置换反应

硝化反应  
氢化反应  
磺酸化反应



## 其他反应

氧化反应  
还原反应  
羟基化反应





# 路线设计简介

路线设计是有机合成化学中重要的研究方向之一，包括确定合成路线、优化反应条件、减少中间体制备和分离等方面。





## 合成路线的设计 :

合成路线的设计是路线设计中的关键步骤，需要根据目标物质的结构和特性，选择最优的反应路径和条件。



# 路线设计的方法

## 经验法

常用于含有大量共有结构的目标物质的合成

## 催化剂设计

针对特定的反应类型，设计具有高效催化活性和选择性的催化剂

## 多步合成路线

将复杂的目标物质分解成若干简单的中间体，减少中间体制备和分离的难度

## 计算机辅助设计

采用分子模拟和量子化学计算等方法，优选反应条件和催化剂种类



01

## 新药研发

路线设计可以优化合成方法，提高目标化合物的产率和纯度

02

## 化工合成

路线设计可以减少废弃物的产生，降低生产成本

03

## 有机材料制备

路线设计可以优化反应条件，提高产物的品质和性能



• 02

## 第2章 合成方法学

# 基础有机合成反应

## 加成反应

常见的加成反应如  
Markovnikov加成、  
反Markovnikov加  
成等

## 取代反应

常见的取代反应如  
亲核取代、芳香取  
代等

## 消去反应

常见的消去反应如  
氧化还原消去、酸  
碱消去等

# 新型有机反应

## 金属催化反应

金属催化反应是有机合成中一类广泛应用的新型反应

## 氧化还原反应

氧化还原反应是有机合成中重要的反应之一

## 光促进反应

光促进反应是近年来快速发展的新型有机反应



# 不对称合成

## 手性识别

手性识别是不对称合成中的重要概念

## 手性传递

手性传递是不对称合成中的一种重要手段

## 手性诱导

手性诱导是不对称合成中的一种重要手段



## 合成方法学在药物研发中的应用

合成方法学在药物研发中占有重要的地位，它可以帮助我们合成新型药物分子，构建药物中间体等。尤其是在不对称合成中的应用，更是大大提高了新药研发的成功率和效率。





01

## 选择优异的催化剂

选择合适的催化剂可以提高反应的速率和选择性

02

## 调整反应条件

适当调整反应条件可以提高反应的收率和纯度

03

## 合理设计反应路线

设计合理的反应路线能够帮助我们高效地合成目标分子



# 手性试剂和手性催化剂

手性试剂和手性催化剂可以帮助我们在不对称合成中引入手性元素，从而得到具有手性的分子。其中手性催化剂的应用更是得到了广泛的发展，比如金属催化剂、小分子有机催化剂等。

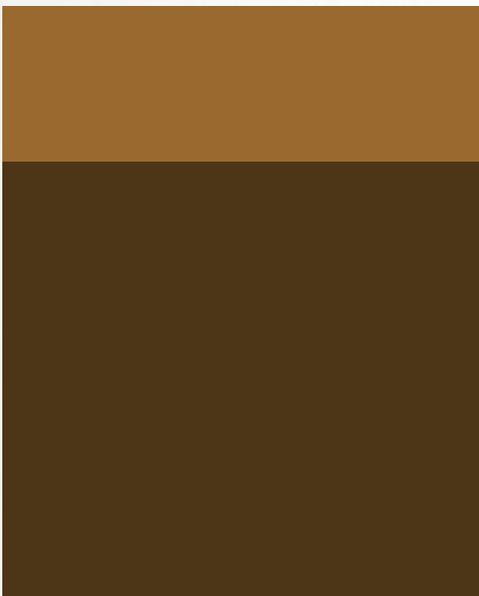




# 中间体的构建

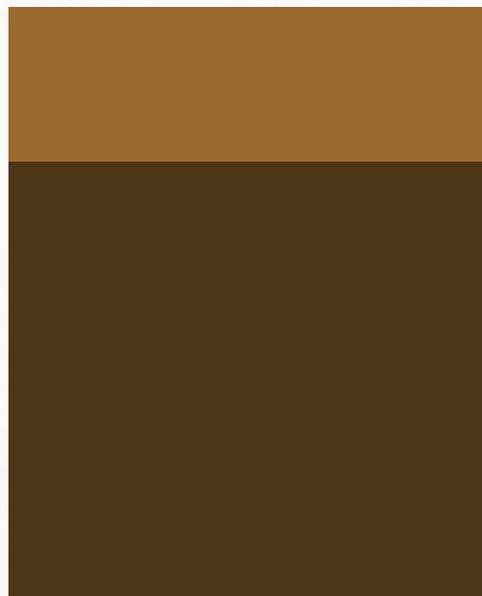
## 氧化反应

环氧化反应  
巴豆醛反应  
巴豆酸合成



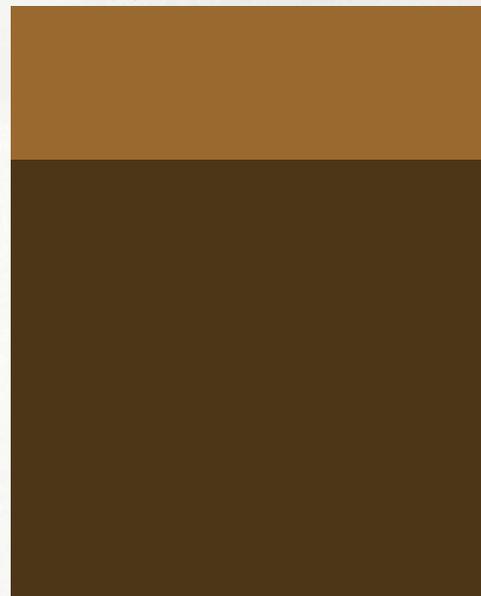
## 还原反应

还原胺合成  
烷基还原反应  
醛还原反应



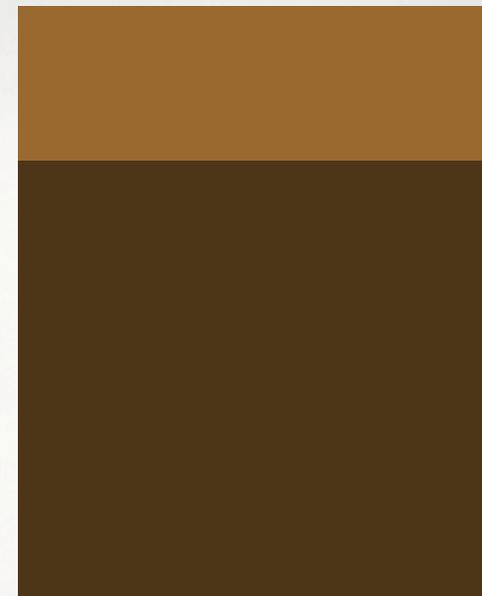
## 取代反应

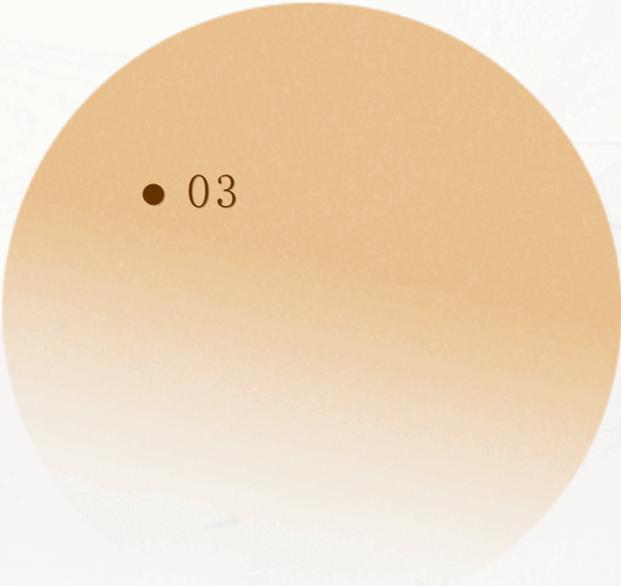
亲核取代  
芳香取代  
烷基取代



## 其他反应

光促进反应  
金属催化反应  
还原消去反应





● 03



**第3章 合成路线设计**





# 合成路线设计的概念和目的



合成路线设计是指在有机合成化学中，通过设计一条或多条化学反应的连续反应路径，在合成目标化合物的过程中最大限度地提高产率、减少废物产生量、缩短合成时间、控制反应中间体的稳定性和选择性。它是药物研发和化学制品工业中不可缺少的环节，能够显著提高研发和生产效率，减少成本和资源浪费。



# 合成路线设计的基本原则



合成路线设计的基本原则包括节俭、高效、环保和经济性。节俭是指在反应中尽量减少废物的产生，提高反应的原子利用率；高效是指通过选择合适的反应条件，达到最高的产率和选择性；环保是指尽量减少环境污染和对生态的影响；经济性是指选择成本低、易得、易操作的反应物和溶剂，达到最小成本的目的。

# 合成路线设计的实践方法

## 采用先进的反应类型

可持续发展的有机合成方法、纯水/无机催化剂、催化剂再生

## 计算机辅助设计

利用计算机模拟和优化反应过程，加速合成路线的设计和优化

## 有机合成化学

有机合成化学是合成路线设计的核心领域，通过改进反应条件和反应路径，提高产率和选择性



01

## 基本反应路径

选择最优的反应路径，减少中间体和废物的产生

02

## 反应条件的优化

针对关键步骤的反应条件进行优化，提高反应的产率和选择性

03

## 合成中间体的控制

通过选择合适的反应物和溶剂，控制中间体的稳定性和选择性

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：  
<https://d.book118.com/258136024130006062>