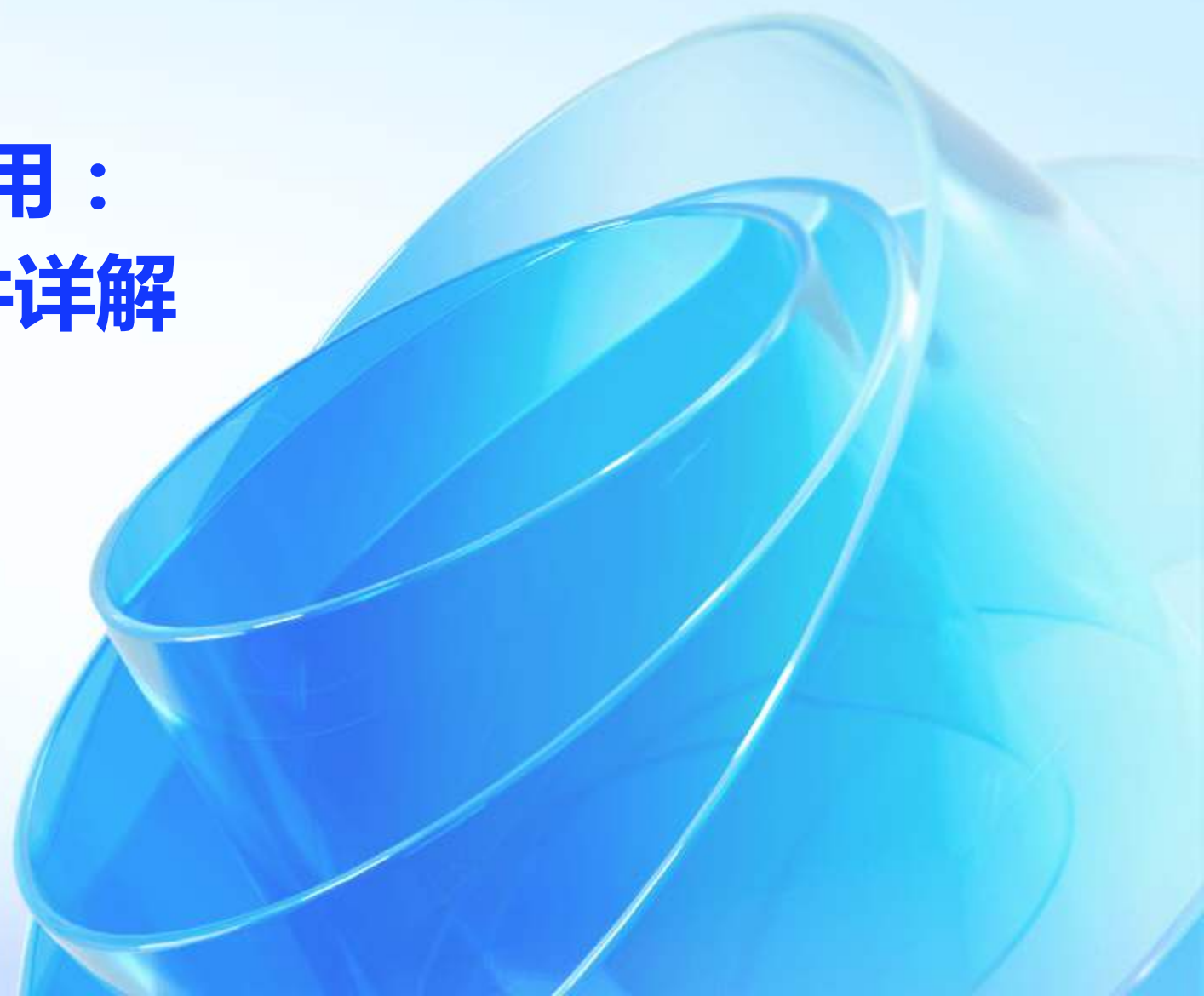


羧酸在药物化学中的应用： 2024大学有机化学课件详解

汇报人：

2024-11-14



目录

CATALOGUE

- 羧酸基本概念与性质
- 羧酸在药物合成中作用
- 常见药物中羧酸结构解析
- 羧酸衍生物在药物设计中应用
- 实验操作技能培养与实践环节
- 课程总结与未来展望



01

羧酸基本概念与性质

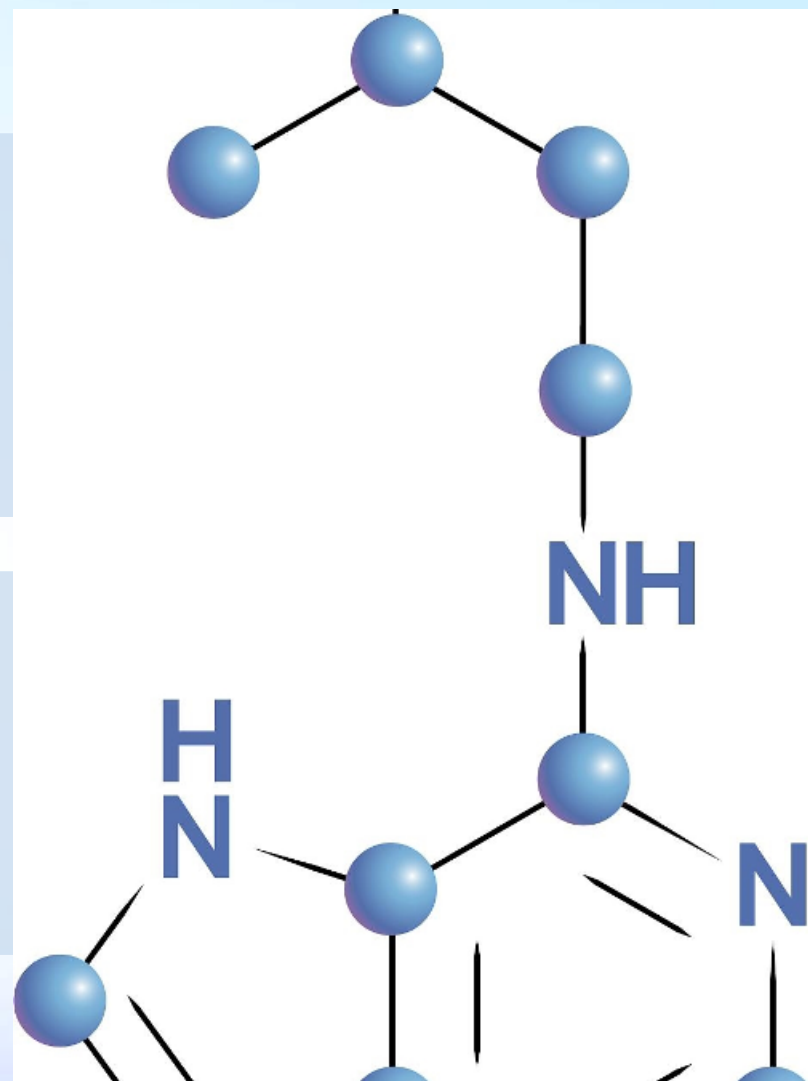
羧酸定义及分类

定义

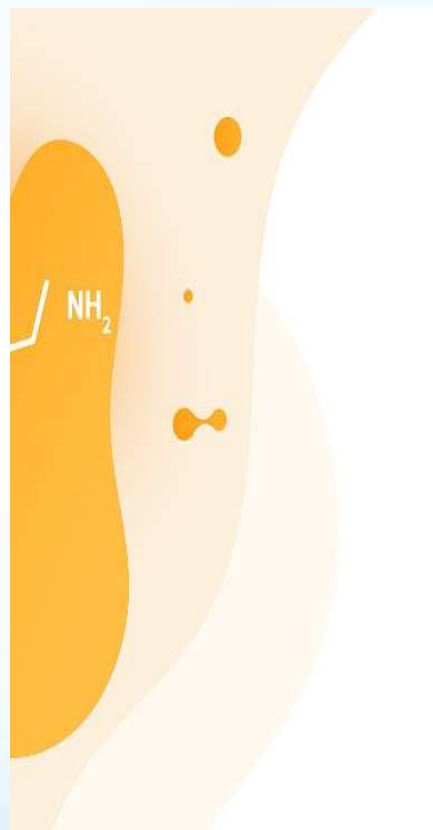
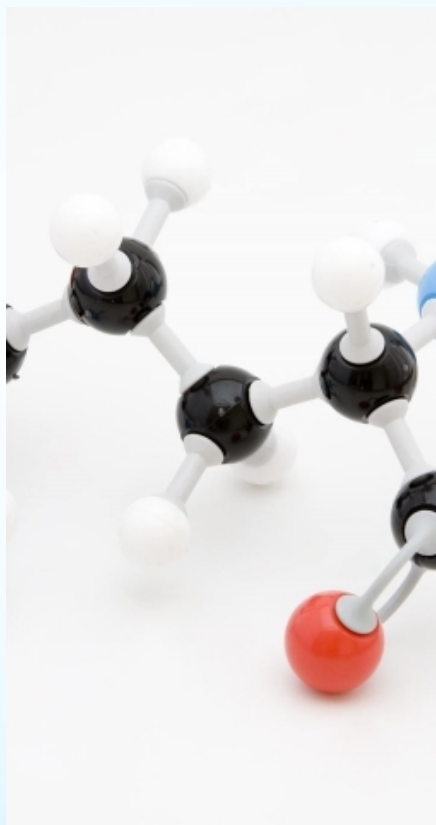
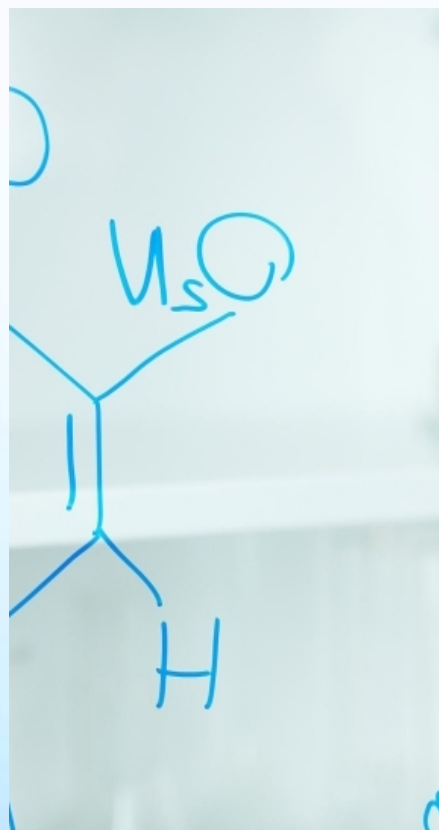
羧酸是一类含有羧基 (-COOH) 的有机化合物，具有典型的酸性。

分类

根据分子中羧基的数目，可分为一元羧酸、二元羧酸和多元羧酸；根据碳链结构，可分为脂肪族羧酸、芳香族羧酸和杂环羧酸等。



物理性质与化学性质



物理性质

羧酸一般为无色或具有特殊气味的液体或固体，能溶于水、醇、醚等溶剂。熔点和沸点随分子量增加而升高，相对密度一般略大于1。

化学性质

羧酸具有酸性，能与碱反应生成盐和水；能发生酯化反应生成酯；能进行卤代、硝化等取代反应； α -碳上的氢原子可发生取代反应等。

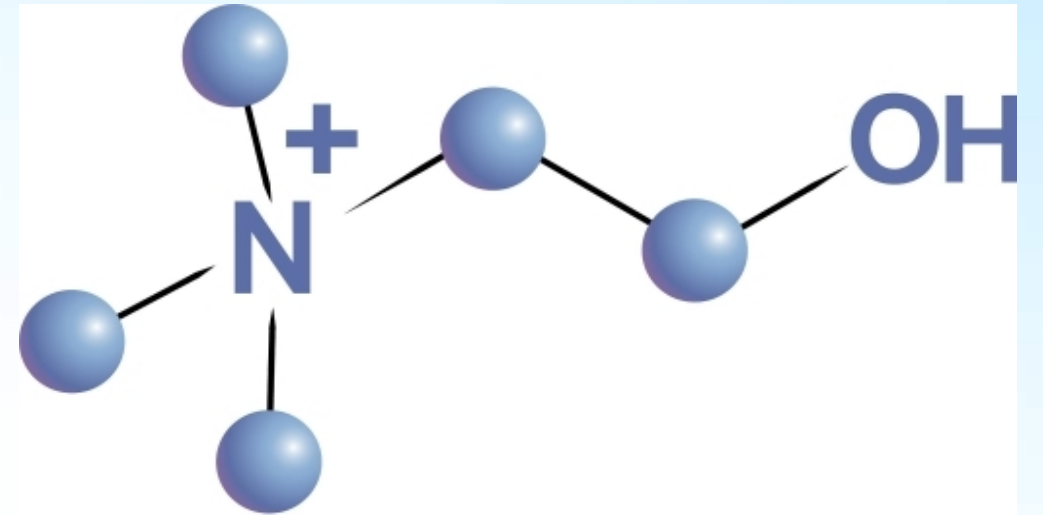
结构特点与命名规则

结构特点

羧酸分子中的羧基由一个碳原子、两个氧原子和一个氢原子组成，碳原子以双键与氧原子相连，形成羧基结构。

命名规则

羧酸一般按照系统命名法进行命名，以羧基所在碳原子为1号碳原子，依次编号并注明取代基位置、名称和数目。



Choline cation

实验室制备方法及原理



01

氧化法

通过醇或醛的氧化反应制备羧酸，常用的氧化剂包括高锰酸钾、重铬酸钾等。原理是醇或醛在氧化剂作用下失去氢原子，生成相应的羧酸。

02

水解法

通过酯的水解反应制备羧酸，常用的催化剂包括酸、碱等。原理是酯在催化剂作用下与水发生反应，生成相应的羧酸和醇。

03

羰基合成法

利用一氧化碳和烯烃在催化剂作用下合成羧酸。原理是一氧化碳和烯烃在催化剂作用下发生加成反应，生成相应的羧酸。该方法具有原料易得、反应条件温和等优点，在工业生产中得到广泛应用。



02

羧酸在药物合成中作用

原料来源与合成路径选择

01

天然羧酸提取

从植物或微生物中提取具有药用价值的羧酸，如柠檬酸、苹果酸等。

02

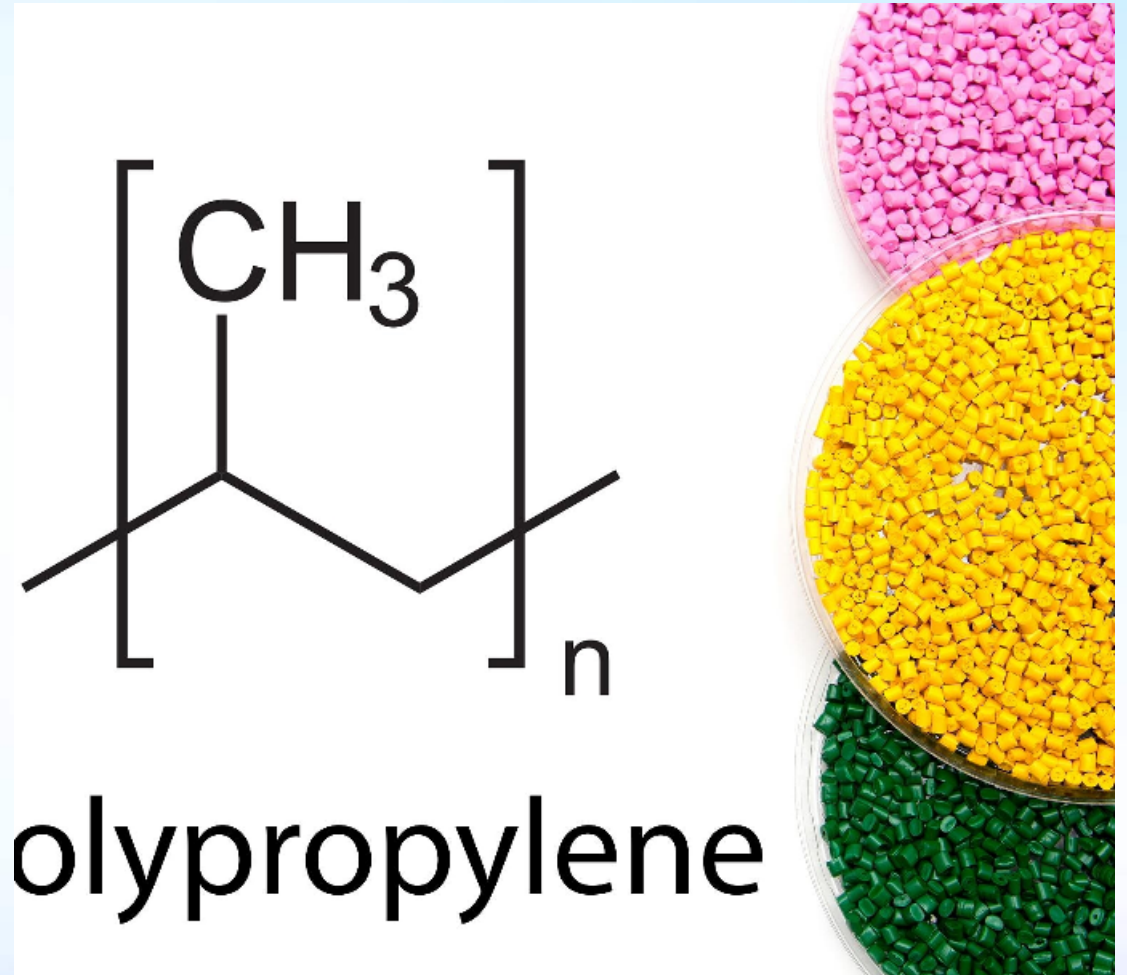
化学合成方法

通过化学合成手段制备特定结构的羧酸，以满足药物合成的需求。

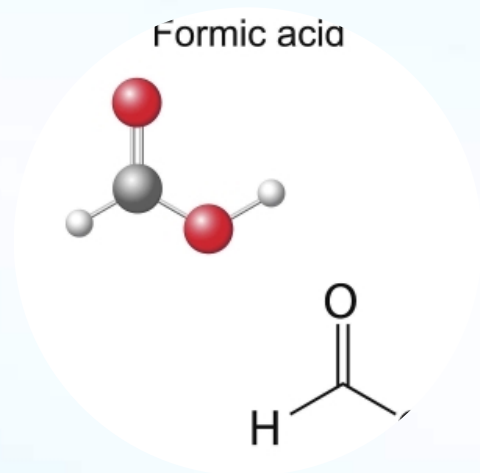
03

合成路径选择

根据目标药物的结构和性质，选择合适的合成路径，以提高合成效率和产物纯度。

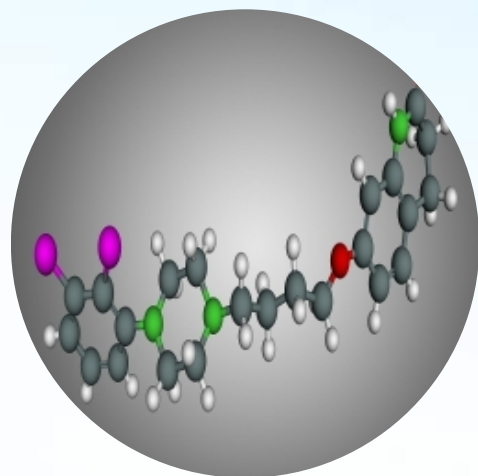


关键反应类型及条件优化



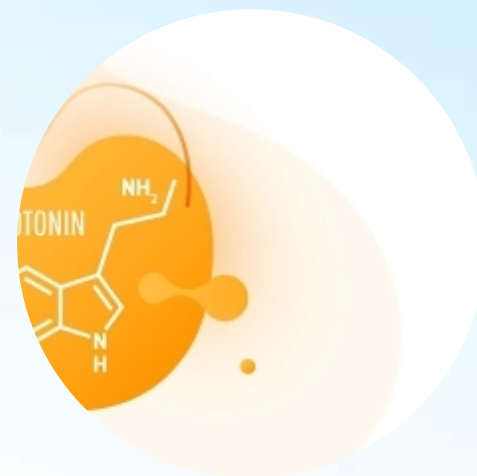
酯化反应

羧酸与醇类发生酯化反应，生成具有药用价值的酯类化合物。



酰胺化反应

羧酸与胺类发生酰胺化反应，生成具有生物活性的酰胺类化合物。



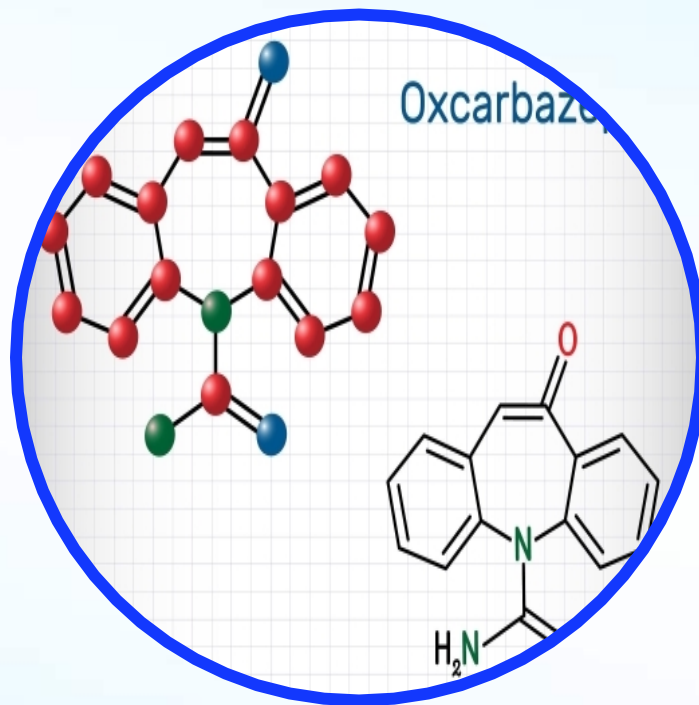
反应条件优化

针对具体反应，通过调整温度、压力、催化剂等条件，提高反应产率和选择性。

产物结构确证方法探讨

核磁共振技术

利用核磁共振技术 (NMR) 对产物进行结构分析，确证其化学结构。



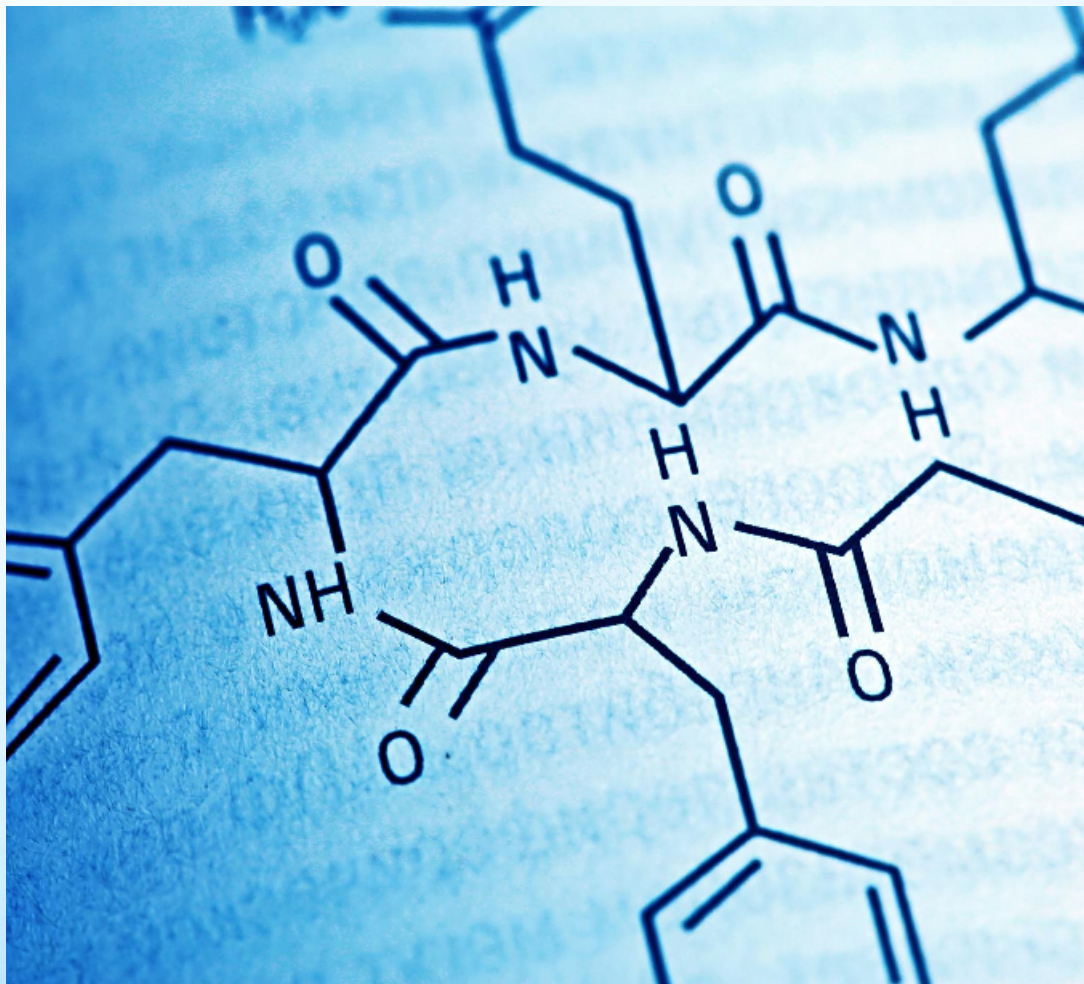
质谱分析法

通过质谱分析法 (MS) 确定产物的分子量及碎片信息，进一步验证其结构。

红外光谱法

利用红外光谱法 (IR) 分析产物中的官能团，辅助确证其结构。

环保意识和安全生产要求



废弃物处理

对药物合成过程中产生的废弃物进行合理处理，降低对环境的污染。

安全生产规范

制定并执行严格的安全生产规范，确保实验操作人员的安全。

节能减排措施

采用节能减排技术，降低药物合成过程中的能耗和排放，提高生产效率的同时保护环境。



03

常见药物中羧酸结构解析

抗生素类药物中羧酸结构特点

羧酸基团在抗生素中的普遍性

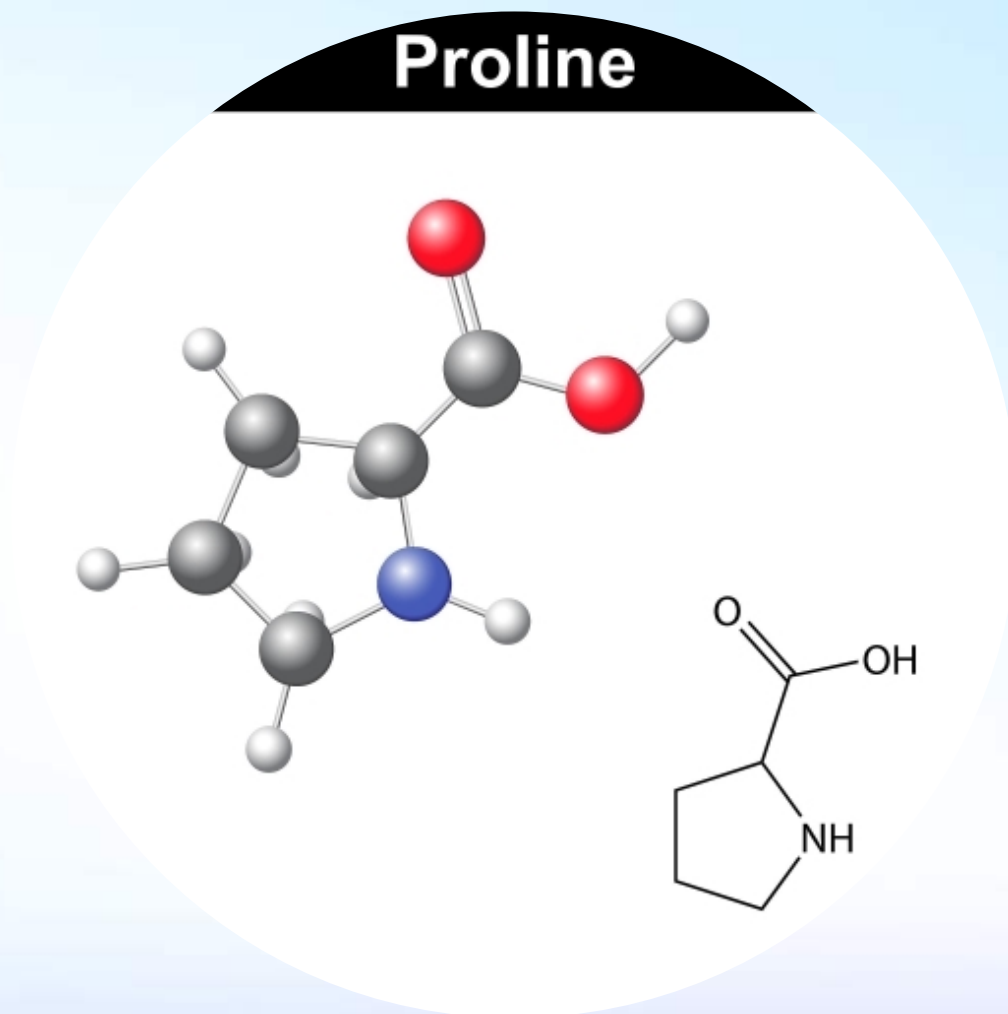
许多抗生素类药物都包含羧酸基团，这些基团在药物分子中发挥着重要作用。

影响药物活性的关键因素

羧酸基团的存在及其位置对抗生素类药物的活性、稳定性和药代动力学性质具有显著影响。

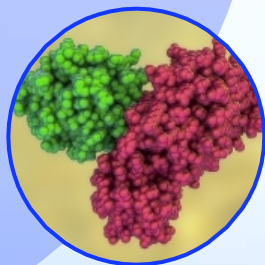
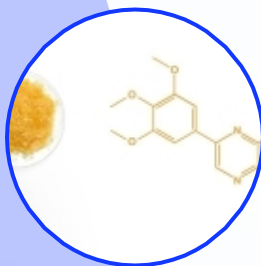
与靶点的相互作用

羧酸基团能够与生物体内的靶点（如酶或受体）发生特异性相互作用，从而实现药物的疗效。



抗肿瘤药物中羧酸功能团分析

抗肿瘤药物中的羧酸功能团对于药物的疗效和毒性具有重要影响，不同类型的抗肿瘤药物中羧酸功能团的作用机制也有所不同。



增强药物亲水性

羧酸基团能够增强抗肿瘤药物的水溶性，有助于药物在体内的运输和分布。

参与药物代谢过程

羧酸基团在抗肿瘤药物的代谢过程中起着关键作用，影响药物的排泄和半衰期。

与肿瘤细胞的相互作用

某些抗肿瘤药物中的羧酸基团能够与肿瘤细胞表面的特定受体结合，从而实现靶向治疗作用。

心血管系统治疗药物举例

羧酸类药物在心血管治疗中的重要性

- 羧酸类药物在心血管系统治疗中占有重要地位，许多药物都包含羧酸基团。
- 羧酸基团的存在使得这些药物具有特定的药理活性和药代动力学性质。

典型药物解析

- 阿司匹林：作为经典的抗血小板聚集药物，阿司匹林中的羧酸基团对于其疗效的发挥起着关键作用。
- 贝那普利：作为血管紧张素转换酶抑制剂，贝那普利中的羧酸基团参与了与靶点的相互作用，实现了降压效果。
-

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/756015035231011004>