

上海药物所通过配体促进的碳碳键断裂实现芳酮多样性转化

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10310.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院上海药物研究所研究员戴辉雄团队在碳碳键活化研究方面取得进展，通过Pd催化下配体促进的碳碳键断裂，实现了简单芳酮的转化，为相关药物分子的后期修饰提供了新途径。该研究成果发表于*Angewandte Chemie International Edition*杂志上。

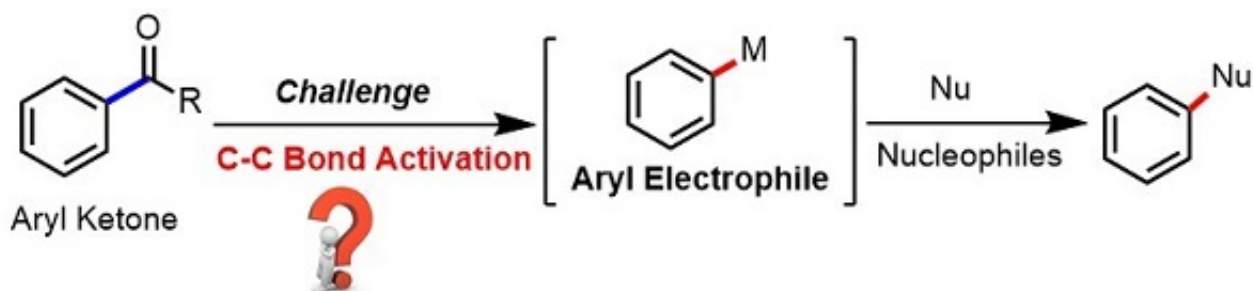
金属催化下芳基亲电试剂与亲核试剂的偶联是构建芳基化合物的重要途径，拓展亲电试剂的类型一直是化学研究的热点，包括卤代烃、羧酸衍生物、芳基氰化物、芳基醚等在内的亲电试剂已得到广泛发展。作为常见的有机结构单元，芳基酮广泛存在于药物分子与天然产物中。如果可以通过金属催化的碳碳键活化方式，实现类似模式芳基酮的亲电试剂化，不仅可以极大拓展亲电试剂的范围，还可以实现芳基酮化合物的后期修饰。然而，目前相关研究主要集中在两方面：张力环酮（三/四元环）和预装导向基团的酮。非张力环简单芳酮的碳碳键活化研究较少，仍缺乏一种通用的策略来实现芳酮的有效转化。

为解决这一问题，研究人员发展了配体促进下简单芳酮经脲酯中间体活化的碳碳键断裂策略。反应历经氧化加成、 β -碳消去过程生成芳基钯物种，可以实现包括硼化、芳基化、氰基化、烯基化在内的一系列转化。该体系底物范围广、官能团兼容度高，一些敏感基团，例如卤素、硝基、酯基、硼酯以及各种杂环底物，都可以很好的进行反应；还可以实现药物分子（Probenecid、Adapalene）、香料（Tonalid）、天然产物（Apocynin）的后期修饰，为药物筛选提供多样性化合物库。此外，研究人员从芳基酮出发，完成了两步一锅的克级实验和药物分子的多官能团化修饰，进一步提升了反应的实用性。

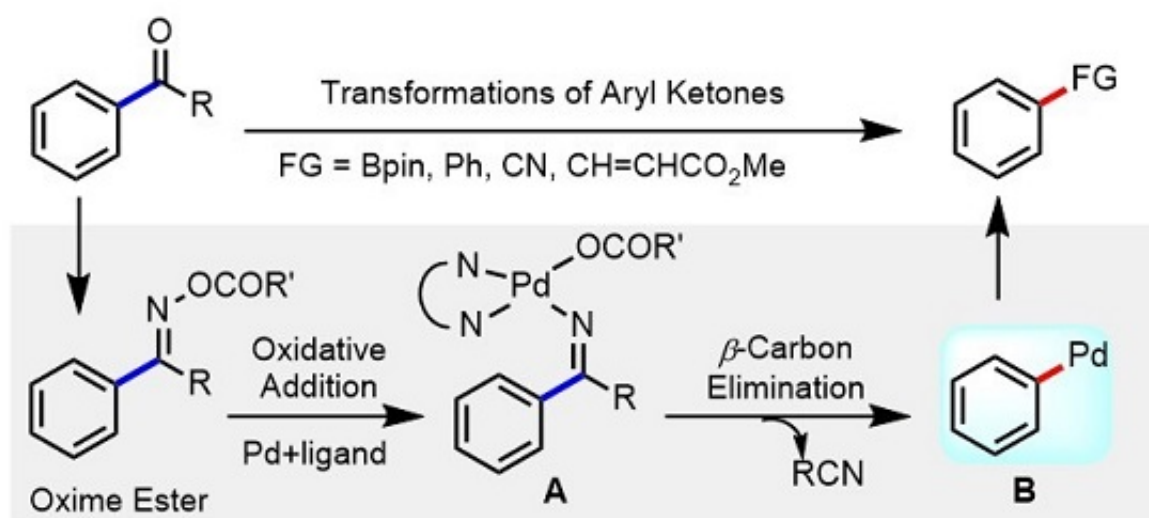
上海药物所博士后李汉园和马彪为论文第一作者，戴辉雄为论文通讯作者。该项研究获得了中科院、科学技术部、国家自然科学基金以及上海市科学技术委员会等项目的资助。

[论文链接](#)

a) Aryl Electrophiles Derived from Aryl Ketones

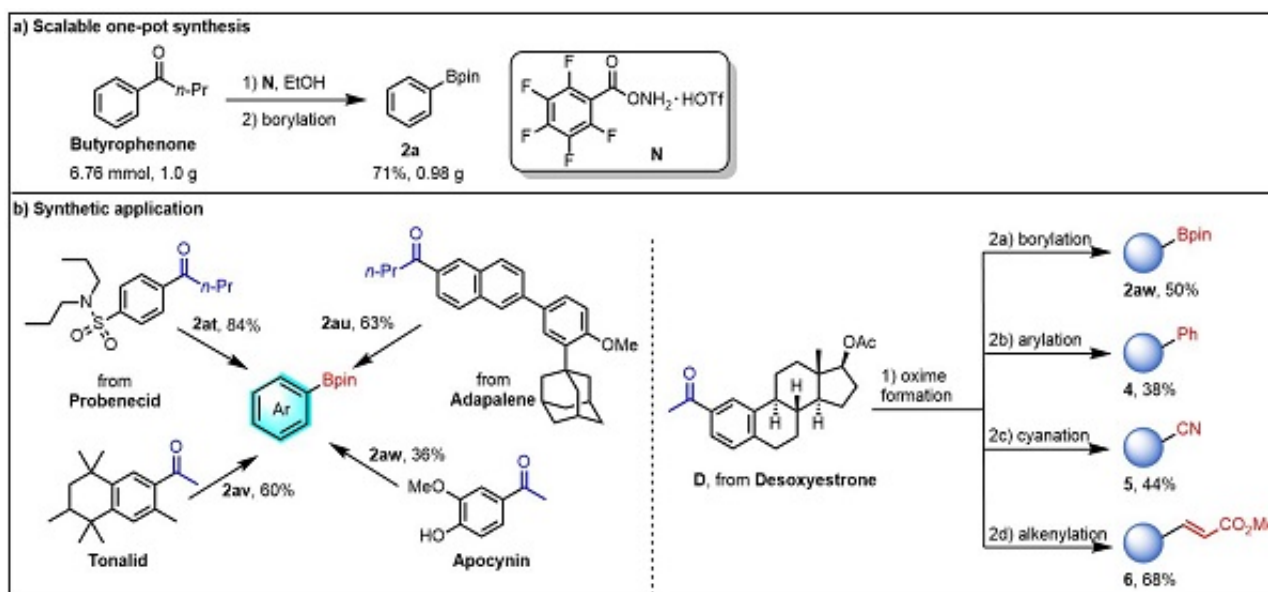


b) This Work: Ligand-Promoted C-C Bond Activation of Unstrained Aryl Ketones



- Unstrained C-C Bond Activation
- Broad Substrate Scope
- General Transformation of Aryl Ketone
- Scalable One-Pot Operation

芳基酮的转化策略



C-C键活化硼酯化在复杂分子结构修饰中的应用

研究团队单位：上海药物研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发