
化学家有了“分子编辑”氮杂芳烃C-H键工具包

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/19702.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！

化学家有了“分子编辑”氮杂芳烃C-H键工具包。

美国斯克利普斯研究所和加利福尼亚大学洛杉矶分校的化学家开发出一种精确灵活的方法修饰一类广泛的化合物。这类化合物被称为双环氮杂芳烃，通常用于构建药物分子。

这种强大的新方法通常可提供更简单、更灵活的分子设计，使化学家能够合成无数以前遥不可及的化学产品，包括潜在的重磅药物。近日，相关研究成果发表于《自然》。

这些新方法为化学家提供了一个统一、实用的后期‘分子编辑’工具包，可以以任何所需顺序在任何给定位点上修饰双环氮杂芳烃，极大扩展了药物和其他有用分子的多样性，而有用分子可以从这些受欢迎的起始化合物中构建。研究共同负责人、斯克利普斯研究所化学教授余金权说。

用实验室化学技术构建有机分子，也被称为有机合成，一直比在宏观尺度上构建东西更具挑战性。如何精确控制多反应位点分子骨架的反应选择性是有机合成和药物研发领域的重要挑战。

尽管化学家已经开发出数百种可以将起始化合物转化为其他化合物的反应方法，但他们缺乏修改广泛存在的仅含有C-H键的工具包。

许多合成化学家雄心勃勃的目标是开发灵活、通用的分子编辑方法，通过打破起始分子中的C-H键，在任何位置修改尽可能多的碳原子。具体而言，就是以一种简化方法，在给定有机分子主链上修饰他们选择的原子——通常是碳，并以任何顺序修饰分子上的碳原子（至少一个以上）。

这种能力将使新分子的构建像随意改变单个单词来创建句子一样简单。但是，设计出能够修饰一个特定原子而不是其他在传统化学术语中几乎相同的原子的难度，往往使分子编辑的概念看起来像一个不可能实现的梦想。

新方法将这一梦想变成了现实，至少对于药物化学家使用的最常见的起始分子之一来说是如此。双环氮杂芳烃是相对简单的有机分子，无数现有药物和与医学相关的天然化合物都是用双环氮杂芳烃骨架构建的。

余金权和合作者设计了两个截然不同的导向模板，通过仔细调控模板设计中的距离、几何结构和手性因素，精确地实现了双环氮杂芳烃上远程相邻（C6/C7）和位置相似（C3/C7）位点的模块化区分和远程官能团化。

结合以往报道的方法，现在能够对双环氮杂芳烃所有C-H键进行任意选择性分子编辑。此外，作者利用该策略实现了复杂天然产物和药物分子后期精确修饰，也对喹啉骨架多个C-H键进行了任意位点和次序选择性迭代分子编辑。

余金权表示，新方法的一个关键方面是，模板直接C-H官能团化不是基于传统的电子标准，而是基于到目标的路径距离和几何结构。

新技术应该易于化学家使用，并且被制药行业和其他以化学为基础的行业迅速采用。我们预计，很快会将这种方法扩展到其他种类的起始化合物。余金权说。（来源：中国科学报王方）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-022-05175-1>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：余金权等 来源：《自然》

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](http://iikx.com)转发