

# 《现代有机立体化学》

## 图书基本信息

书名：《现代有机立体化学》

13位ISBN编号：9787030235695

10位ISBN编号：703023569X

出版时间：2009-4

出版社：科学出版社

作者：朱华结

页数：316

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)

# 《现代有机立体化学》

## 前言

朱华结教授长期从事天然产物化学、不对称合成化学以及计算化学的科研与教学工作，富有扎实的理论基础与实践经验。他把个人的研究经验和结果以及他人的实践结合起来，将手性化合物的立体构型鉴定、有机催化合成、选择性合成以及重要天然产物的全合成研究等汇聚一体，给读者以焕然一新之感。该书的特点之一是，在手性分子研究中，除静态的立体化学描述外，对其动态立体化学，如构象分布等进行了深入而细致的阐述。这些构象的分析与有机化学反应休戚相关。因此，将复杂的构象分析和有机化学反应进行关联，可以让我们对有机化学不同的反应结果，如反应的选择性等有更深入的认识。该书的另一个特点是，将计算机与天然有机化学中立体构型的研究相结合，这也是有机化学的重要组成部分。在二维核磁共振技术和X射线衍射等常规分析手段对一些复杂产物的结构进行解析有困难时，利用量子化学计算技术将使这些结构鉴定变得简单。值得一提的是，作者在最后一章结合文献实例，介绍了计算机化学中相关的软件知识和技巧，这无疑将对普及量子化学计算在现代有机化学中的应用起到一定的推动作用。总之，这种紧密结合理论方法的方法学研究值得相关科技人员关注。该书的出版对于众多从事有机化学工作的读者了解并应用量子化学计算方法是一件十分有意义的尝试，我愿意推荐该书的出版。

# 《现代有机立体化学》

## 内容概要

《现代有机立体化学》在整合有机立体化学领域最新研究成果的基础上，按有机立体化学反应的不同选择性，论述了手性分子旋光计算、对映选择性合成、立体选择性合成、化学选择性合成以及天然产物全合成实例等五大内容，并将相关的（量子）化学计算内容穿插在不同研究领域进行了介绍。《现代有机立体化学》的最后一章是学科相关的计算机软件应用，作者结合实际工作，介绍了过渡态模型的建立和用于确定分子的立体构型手性分子的 $^{13}\text{C}$  NMR波谱和旋光等计算。这些问题均是现代有机立体化学领域的重要研究内容。

## 书籍目录

序前言第1章 分子的手性1.1 旋光值的测量1.2 旋光现象的理论解释1.3 旋光的计算1.3.1 Brewster模型及糖旋光的计算1.3.2 螺旋模型1.3.3 量子化学计算模型1.3.4 矩阵模型1.4 ORD、CD与VCD1.4.1 ORD谱及其应用1.4.2 CD谱及其应用1.5  $^{13}\text{C}$  NMR的计算与相对立体构型的确定1.6 手性分子的拆分原则1.7 手性中心的合成控制原则参考文献第2章 对映选择性反应2.1 手性分子的研究现状2.2 对映选择性1, 2-加成2.2.1 催化剂-Zn配合物2.2.2 催化剂-Zn-Ti配合物2.2.3 对酮的1, 2-催化加成2.3  $\alpha$ ,  $\beta$ -不饱和醛酮的对映选择性1, 4-加成2.4 其他有机锌试剂对醛酮的对映选择性1, 2-和1, 4-加成反应2.4.1 其他有机锌试剂对醛酮的1, 2-加成2.4.2 其他有机锌试剂对 $\alpha$ ,  $\beta$ -不饱和醛酮的1, 4-加成2.4.3 二烷基锌和炔基锌盐对亚胺的1, 4-加成反应2.5 催化对映选择性还原反应2.5.1 对映选择性1, 2-还原反应2.5.2 对映选择性1, 4-还原反应2.5.3 对映选择性还原偶联反应2.6 其他相关的对映选择性反应2.6.1 对映选择性醇醛缩合反应2.6.2 对映选择性环氧化反应2.6.3 其他对映选择性反应2.7 两个对映选择性合成天然产物的实例2.7.1 (+)-obtusenyne的全合成2.7.2 (+)-brefeldin A的全合成2.8 对映催化加成反应中的三个实验现象2.8.1 手性放大效应(非线性效应)2.8.2 自催化效应2.8.3 奇-偶碳效应参考文献第3章 立体选择性反应3.1 分子的构象研究3.2 构象异构现象3.3 构象对有机反应的影响3.3.1 对还原偶联反应中的对映选择性影响3.3.2 烯醇类消旋体异构化中酸结构构象的影响3.3.3 催化剂自由构象对催化对映选择性的影响3.4 非标准手性碳类手性化合物3.5 区域选择性控制反应3.6 立体选择性控制反应3.6.1 立体控制中的几个经验规则3.6.2 利用分子自身的结构特点进行的立体化学控制3.7 立体选择性合成中的理论计算3.8 天然产物研究中的机理研究参考文献第4章 化学选择性反应4.1 选择性还原反应4.1.1 醛酮的选择性还原反应4.1.2 酯基以及羧酸的选择性还原反应4.1.3 酰胺和N杂环的化学选择性还原反应4.1.4 叠氮以及过氧化物的化学选择性还原反应4.1.5 碳-碳双键或叁键的化学选择性还原反应4.1.6 亚胺的化学选择性还原反应4.1.7 硝基芳烃的化学选择性还原反应4.1.8 其他基团的选择性还原反应4.2 化学选择性加成反应4.2.1 化学选择性羰基加成反应4.2.2 其他化学选择性加成反应4.3 化学选择性氧化反应4.3.1 醇的氧化反应4.3.2 硫醚的氧化反应4.4 其他选择性反应参考文献第5章 天然产物研究中的有机立体合成与计算5.1 有机合成中的逆向合成5.2 活性化合物的逆合成研究中的模式识别5.3 天然产物的合成实例5.3.1 FR901464的全合成5.3.2 (+)-aigialospirol的全合成5.3.3 lepadin的全合成5.3.4 (+)-machaeriol D的全合成5.3.5 (+)-hirsutene的全合成5.3.6 isochrysotricine与isocyclocapitelline的全合成5.3.7 crisamicin A的全合成5.3.8 紫杉醇系列衍生物5.3.9 yanucamide A的全合成与构型鉴定5.3.10 nonactin的全合成5.3.11 amphidinolide Y的全合成5.3.12 halipeptins A的全合成5.3.13 (+)-brefeldin A的全合成5.3.14 malyngamide U的全合成与立体构型的纠正5.3.15 (-)-isoprelaufuoin的全合成5.3.16 其他天然产物全合成的一些例子5.4 从天然产物到天然产物或活性化合物5.5 天然产物结构鉴定中的计算研究5.5.1 计算 $^{13}\text{C}$  NMR波谱5.5.2 计算旋光参考文献第6章 计算化学在天然有机手性化合物研究中的应用6.1 软件应用介绍6.1.1 Gaussian 03软件6.1.2 多文件顺序计算6.2 计算化学在化学反应过渡态研究中的应用6.2.1 还原反应过程中的若干过渡态结构问题6.2.2 溶液状态时的能量校正6.2.3 其他反应类型的过渡态结构设计6.3 手性分子的旋光计算6.3.1 HyperChem软件基本功能简介6.3.2 构象搜索操作6.3.3 分子构象坐标的取用6.3.4 利用Gaussian 03计算手性分子的旋光6.4 利用矩阵模型来计算柔性手性分子的旋光6.5 手性分子的 $^{13}\text{C}$  NMR计算6.5.1  $^{13}\text{C}$  NMR的计算设置6.5.2  $^{13}\text{C}$  NMR数据的校正参考文献后记

## 章节摘录

第2章 对映选择性反应 生命体在生命的延续过程中，无论在宏观还是在微观，手性都是普遍存在的一个现象。在微观领域，随着对立体化学认识的深入，合成化学家想出各种办法在手性化合物的合成过程中进行控制，以得到预期的手性分子。前面讲到，如果化合物只有一个潜手性中心，那么在反应中，所产生的产物为一对对映体（enantiomer），若其中一个对映异构体数量在反应后超过另一个对映体的数量，这一反应为对映选择性反应（enantioselectivereaction）。实际上，它是立体选择性反应（stereoselective reaction）的一个特例。由于它最简单，人们研究得相当多而且透彻，因此，这里也就相应地将对映选择性反应单列出来。 为了达到让其中一个异构体的数量在反应后超过另一个异构体的数量，通常需要加入有机手性催化剂，或有机手性配位化合物（螯合物），从而在需要生成的手性中心的位置附近产生一个不对等的反应空间，从而影响反应时的活化能。因此，对映选择性反应又称为催化对映选择性反应（catalytic enantioselective reaction）。主要的反应类型为催化对映选择性加成反应（catalytic enantioselective addition）和催化对映选择性还原反应（catalytic enantioselective reduction）等。 就目前的研究状况而言，在对映加成反应中，利用有机锌试剂的研究占了主要的位置。除此以外，也有有机铜试剂等。在本章的前面，我们用较大篇幅来介绍二乙基锌试剂与手性催化剂的应用。在随后的内容里，我们介绍这一反应过程中出现的若干实验现象等。在本章里，讨论的主要问题是不同手性催化剂的催化活性，因此，只对催化剂的结构进行了编号。

# 《现代有机立体化学》

## 版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)