



上海有机所在苯胺间位芳基化机理研究方面取得进展

文章来源：上海有机化学研究所

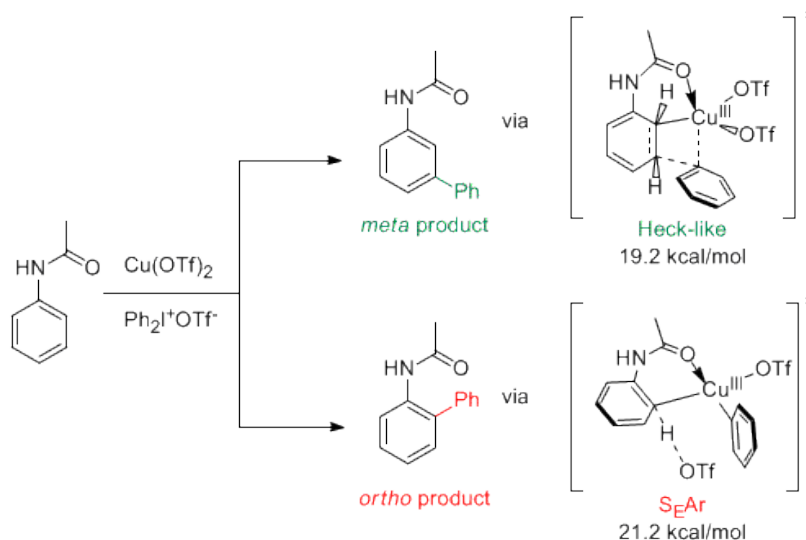
发布时间：2011-12-09

【字号：小 中 大】

亲电芳香取代 (SEAr) 是人们广泛研究的重要反应之一。大家熟知的傅克反应的定位规律是：给电子基团将亲电试剂导向邻位或对位，并提高反应活性；而吸电子基团将亲电试剂导向间位，并降低反应活性。酰基苯胺中的酰胺基 (N端取代, RCONH-) 是传统意义上的邻对位定位基，发生亲电取代反应时只会生成邻位或对位产物。然而，2009年，剑桥大学的Gaunt教授利用Cu(II)催化剂，二芳基高价碘化合物作为芳基化试剂，实现了酰基苯胺间位C-H键的芳基化 (*Science* 2009, 323, 1593)。

最近，中科院上海有机化学研究所的李玉学、吴云东和侯雪龙通过理论计算与实验验证相结合的方法，研究了该反应的机理 (*J. Am. Chem. Soc.* 2011, 133, 7668)，提出了较为合理的反应路径(如图)。其中，通过类似Heck反应的四元环过渡态生成间位产物的路径最有利，从而解释了间位选择性产生的原因。进一步的实验工作支持了计算所提出的机理。该工作表明，理论计算在反应机理研究方面可以发挥重要作用，理论和实验的结合可以更深入地揭示反应的内在规律。

该研究工作得到了国家自然科学基金委、科技部、香港裘槎基金会(The Croucher Foundation) 和中科院的支持。



苯胺间位芳基化机理