标题：案例研究-合成卟啉的[2+2]路线

作者简介：

作者张宗尧来自中国山东。他在位于北京的中国人民大学，于2015年获得化学专业学士学位，并跟从中国人民大学化学系的曹睿研究员继续其无机化学专业研究生生涯。他的研究兴趣包括卟啉基单核水分解催化剂和柔性配位聚合物。

作者单位：

中国人民大学化学系

摘要：

在本案例研究中，我们使用Science of Synthesis数据库探索了合成卟啉类化合物的方法。搜索结果给使用者提供了带有评述的广泛适用的合成路线。并且，搜索结果同样提供了在合成化合物过程中不同的成键策略，这一点对于设计合成路线帮助很大。

正文：

我们的实验团队最近对探索单核卟啉化合物作为水氧化电催化剂的性质非常关注。由于我们并非专业的有机合成人员，在有机合成实验的开始阶段，我们需要归纳、探索和评估比较可靠完备的合成路线，而且，合成路线中涉及的条件应该易于控制，产品分离条件需要相对清晰。并且，我们倾向于选择易于引入取代基的合成路线。

因此，我们运用结构搜索和全文搜索，在SoS数据库内进行查找。我们得到了17.8章节：卟啉和相关化合物。在这个标题下，我们查到了“单吡咯的四聚反应”，“以二吡咯基甲烷或二吡咯基酮为中间体的[2+2]反应”，“以三吡咯化合物为中间体的[3+1]反应”和“以开链四吡咯化合物为中间体的关环反应”等。

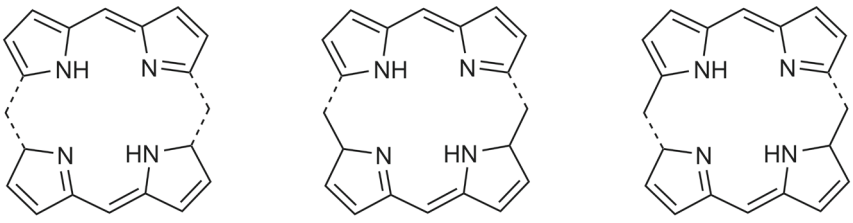

图1：[2+2]合成法的合成路线

Contact
Science of Synthesis Editorial Office • Georg Thieme Verlag KG • Ruedigerstrasse 14 • 70469 Stuttgart • Germany

以“以二吡咯基甲烷或二吡咯基酮为中间体的[2+2]反应”为例，这部分内容见载于章节17.8.1.2.2.1。这种合成路线需要在甲酸或者其他有机酸的熔融状态下煮二吡咯基甲烷类化合物。通常，反应的温度可能高至200摄氏度。例如，血红素的前体可以通过这种合成手段，自修饰的二吡咯基甲烷合成。

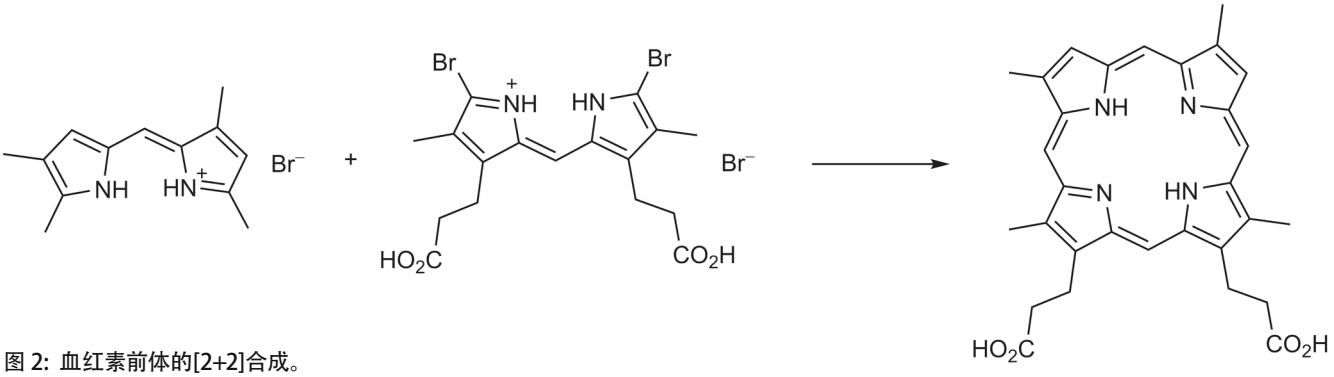

图 2: 血红素前体的[2+2]合成。

而且，我们也搜索了二吡咯基甲烷的合成。通过结构搜索，我们得到了直接相关的章节:17.8.1.1.1.1以及一些不那么相关的章节，像17.3.4.3.3.1.1.1.1，在其中，二吡咯基甲烷是作为催化反应的产物报道的。

在17.8.1.1.1.1中，举例来说，其中报道了一个通过2-甲酰基-1-氢吡咯和2-位没有修饰的1-氢吡咯在酸性条件下聚合的反应。下面报道了具体的合成路线。而且，评述告诉读者，二吡咯基甲烷在层析柱上分布得很广泛，给分离造成一定困难，这一点对合成者来讲帮助很大。

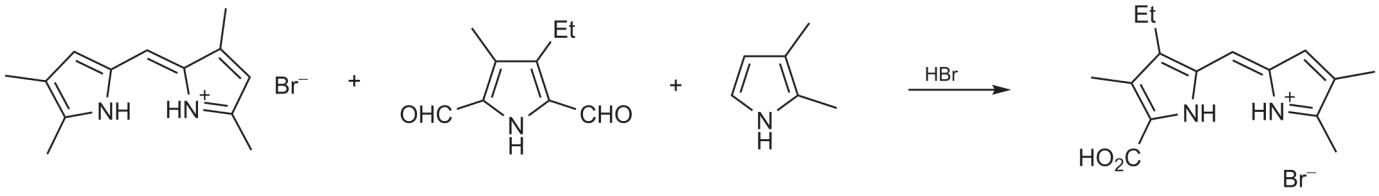

图3: 一个典型的二吡咯基甲烷的合成。

结论:

对于有机合成的研究者而言，Science of Synthesis 数据库是一个非常有效的工具，而且，它在使用上非常方便。然而，我认为对于更广泛领域的化学研究者而言，本数据库具有更大优势。因为，此数据库提供了针对典型化合物的典范可靠合成路线，并记载了合成的实验细节和操作流程。而且，简练的评述让这个数据库更像一个经过同行评议的可靠的百科全书。

Free 14-day SOS trial at: www.thieme.com/sos
www.thieme-chemistry.com
Thieme