



南京工程学院
NANJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY

毕业设计说明书

作 者: LaTeX 学 号: 2025520

单 位: 南京工程学院

专 业: 化学化工学院

题 目: 岩沙海葵毒素的全合成

补充或二级标题

指导者: NJIT LaTeX 模板

评阅者:

二〇二五年七月 南京

毕业设计说明书（论文）中文摘要

摘要

岩沙海葵毒素的首次全合成由哈佛大学岸义人团队历经近二十年最终完成。面对这一结构异常庞大且复杂的天然产物，核心策略是将其逆向分解为八个相对易于合成的关键片段，分别标记为片段 A 至片段 H。这些片段的划分依据了分子内天然存在的重复结构单元，例如连续的 1,3-二醇片段以及特定的烯烃链段，旨在简化合成路径并有效控制立体化学。

每个关键片段的合成本身就是一个复杂的工程，需要精心设计与执行。片段 A 涵盖了分子的 C1 至 C15 部分，片段 B 对应 C16 至 C26，片段 C 对应 C27 至 C38。片段 D 则更为复杂，包含了 C39 至 C51 以及 C68 至 C70 区域，其核心结构是一个内半缩醛。片段 E 和 F 分别负责构建 C52 至 C67 和 C71 至 C78 的链段。片段 G 连接了 C79 至 C98 部分，而最大且最富挑战性的片段 H 则构建了分子的末端，包括 C99 至 C129，这一片段包含了关键的酰胺结构。

成功合成这些片段后，接下来的核心挑战在于如何高立体选择性地将这些“积木”精确无误地连接起来。团队发展并应用了一系列精密的片段偶联反应来实现这一目标。例如，通过 Wittig 烯化反应连接片段 C 和 D，构建了 C38-C39 键。片段 D 和 E 则是通过醛醇缩合反应在 C51-C52 位置实现连接。片段 F 和 G 的连接采用了 Sharpless 不对称环氧化和随后的环氧开环策略在 C78-C79 处进行偶联。而构建 C98-C99 键的关键步骤则是通过片段 G 和 H 的醛醇缩合反应完成的。片段 B 和 C 的连接以及 A 和 B 的连接也分别运用了醛醇缩合和 Wittig 烯化反应。

在整个组装过程中，如何精确控制每一步新生成的手性中心的立体化学是贯穿始终的难题。团队巧妙地利用了多种策略，包括 Evans 手性辅基诱导的不对称合成、高选择性的 Sharpless 不对称环氧化反应、底物自身的手性诱导效应以及经过严格优化的反应条件，最终成功地在超过六十四个手性中心上实现了所需的绝对和相对立体构型。整个合成路线共经历了一百二十余步反应，最终以毫克级的规模成功获得了目标产物，充分展现了合成设计的前瞻性、立体控制技术的精湛以及复杂多步操作的无缝衔接，成为有机合成史上的一个巅峰成就。

关键词：不对称合成；环氧化反应；片段偶联；Wittig 烯化

毕 业 设 计 说 明 书 （ 论 文 ） 外 文 摘 要

Abstract

The first total synthesis of anemone toxin in rock sand was finalized by the team of Yoshito Kishi at Harvard University over a period of nearly two decades. Faced with this unusually large and complex natural product, the core strategy is to reverse decompose it into eight critical fragments that are relatively easy to synthesize, labeled as fragments A to H. The division of these fragments is based on the naturally occurring repeating structural units within the molecule, such as successive 1,3-diol fragments, as well as specific olefin segments, with the aim of simplifying the synthetic pathway and effectively controlling stereochemistry.

The synthesis of each critical segment is a complex project in itself, requiring careful design and execution. Fragment A covers the C1 to C15 portion of the molecule, with fragment B corresponding to C16 to C26 and fragment C corresponding to C27 to C38. Fragment D is more complex, containing regions C39 to C51 and C68 to C70, with an inner hemiacetal at its core. Fragments E and F are responsible for the construction of segments C52 to C67 and C71 to C78, respectively. Fragment G connects the C79 to C98 moieties, while the largest and most challenging fragment H constructs the ends of the molecule, including C99 to C129, which contains the key amide structure.

Keywords: asymmetric synthesis; epoxidation reaction; fragment conjugation; Wittig enylation

目 录

1	绪言.....	1
1.1	LaTeX 介绍.....	1
1.2	本模板介绍.....	1
1.2.1	文档类的选取	1
1.2.2	参考文献编译方式	1
2	图片.....	2
3	绘制普通三线表格.....	4
4	公式.....	7
5	其它小功能.....	9
5.1	脚注	9
5.2	无序列表与有序列表.....	9
5.3	字体加粗与斜体.....	10
	参考文献	11
	致谢.....	12

1 绪言

1.1 L^AT_EX 介绍

要使用 L^AT_EX 来完成建模论文，首先要确保正确安装一个 L^AT_EX 的发行版本。

- Mac 下可以使用 MacT_EX
- Linux 下可以使用 T_EXLive ；
- windows 下可以使用 T_EXLive 或者 MikT_EX ；

具体安装可以参考 [Install-LaTeX-Guide-zh-cn](#) 或者其它靠谱的文章。另外可以安装一个易用的编辑器，例如 T_EXstudio 。

1.2 本模板介绍

为简化南京工程学院本科生毕业论文排版流程，开发了符合校标的 L^AT_EX 模板。该模板内置最新格式规范，可自动处理页眉页脚、标题样式、参考文献等排版要素，使用者仅需编写内容即可生成标准化文档，有效提升写作效率并确保格式统一性。

使用该模板前，请阅读模板的使用说明文档。下面给出模板使用的大概样式。

1.2.1 文档类的选取

模版的文档类是基于 C_T_EX 宏集中自带的 `ctexart` 文档类来实现的^[2]，还用到了—些常用的宏包，编译时要保证自己的系统中已经安装好了这些宏包，如果用户使用的是全量安装的 TeX Live 就没有问题。

1.2.2 参考文献编译方式

模板推荐使用 `\bibliography{}` 命令处理参考文献，借助“GB/T 7714—2015 BibTeX Style”^[3]，模板使用者可以放心大胆地将参考文献的排版工作交给 L^AT_EX，而无需手动调整每条参考文献的格式。

编译记得使用 `xelatex`，而不是用 `pdflatex`。在命令行编译的可以按如下方式编译：

```
1 xelatex example
```

或者使用 `latexmk` 来编译，更推荐这种方式。

```
1 latexmk -xelatex example
```

下面给出写作与排版上的一些建议¹。

2 图片

论文中不可避免要插入图片。图片可以分为矢量图与位图。位图推荐使用 `jpg`, `png` 这两种格式，避免使用 `bmp` 这类图片，容易出现图片插入失败这样情况的发生。矢量图一般有 `pdf`, `eps`，推荐使用 `pdf` 格式的图片，尽量不要使用 `eps` 图片，理由相同。

注意图片的命名，避免使用中文来命名图片，可以用英文与数字的组合来命名图片。避免使用 1,2,3 这样顺序的图片命名方式。图片多了，自己都不清楚那张图是什么了，命名尽量让它有意义。下面是一个插图的示例代码。

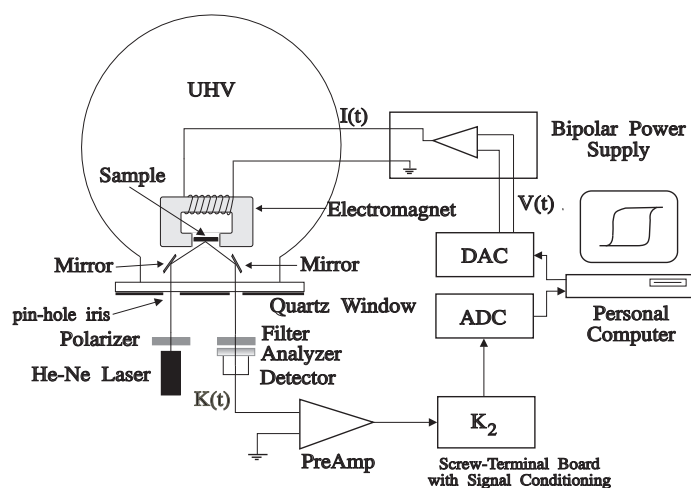


图 2.1 电路图

注意 `figure` 环境是一个浮动体环境，图片的最终位置可能会跑动。`[\h]` 中的 `h` 是 `here` 的意思，`!` 表示忽略一些浮动体的严格规则。另外里面还可以加上 `btp` 选项，它

¹部分内容摘自《全国大学生数学建模 $\text{\LaTeX}$ 》

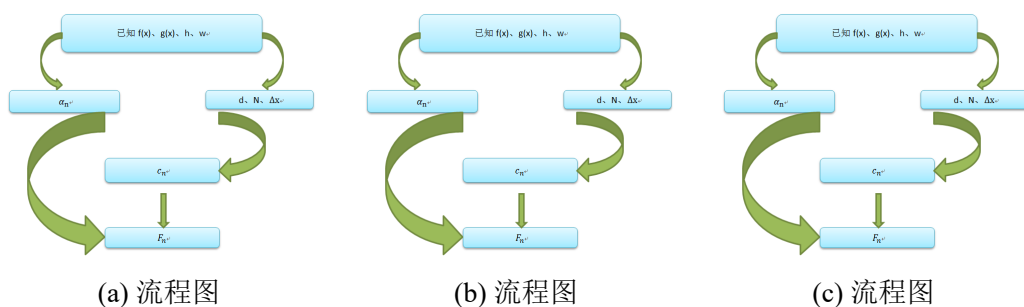


图 2.2 多图并排示例

们分别是 bottom, top, page 的意思。只要这几个参数在花括号里面，作用是不分先后顺序的。page 在这里表示浮动页。

`\label{fig:circuit-diagram}` 是一个标签，供交叉引用使用的。图片是自动编号的，比起手动编号，它更加高效。`\cref{label}` 由 `cleveref` 宏包提供，比普通的 `\ref{label}` 更加自动化。label 要确保唯一，命名方式推荐用图片的命名方式。

图片并排的需求解决方式多种多样，下面用 `minipage` 环境来展示一个简单的例子。注意，以下例子用到了 `subcaption` 命令，需要加载 `subcaption` 宏包。

这相当于整体是一张大图片，大图片引用是 `fig. 2.2`，子图引用别分是 `fig. 2.2a`、`fig. 2.2b`、`fig. 2.2c`。

如果原本两张图片的高度不同，但是希望它们缩放后等高的排在同一行，参考这个例子：

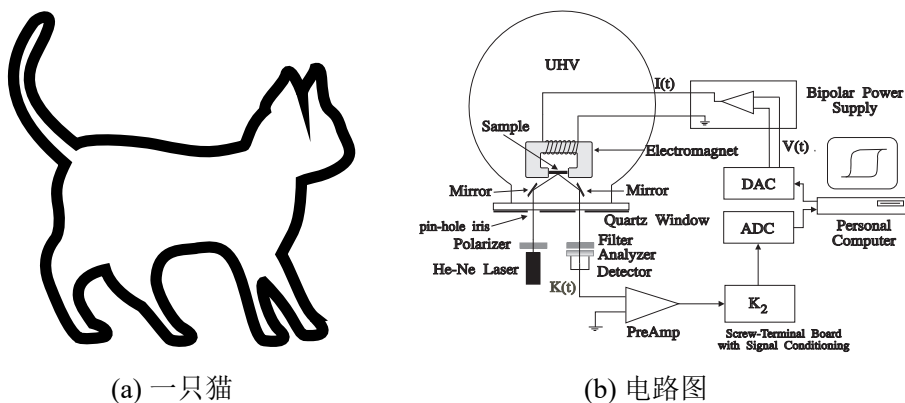


图 2.3 多图并排示例

3 绘制普通三线表格

表格应具有三线表格式，因此常用 booktabs 宏包，其标准格式如 table 3.1 所示。

表 3.1 标准三线表格

$D(\text{in})$	$P_u(\text{lbs})$	$u_u(\text{in})$	β	$G_f(\text{psi.in})$
5	269.8	0.000674	1.79	0.04089
10	421.0	0.001035	3.59	0.04089
20	640.2	0.001565	7.18	0.04089

其绘制表格的代码及其说明如下。

```

1  \begin{ table }[!htbp]
2      \caption[标签名]{中文标题}
3      \begin{ tabular }{cc ... c}
4          \toprule [1.5 pt]
5          表头第1个格 & 表头第2个格 & ... & 表头第n个格 \\
6          \midrule [1 pt]
7          表中数据(1,1) & 表中数据(1,2) & ... & 表中数据(1,n)\\
8          表中数据(2,1) & 表中数据(2,2) & ... & 表中数据(2,n)\\
9          .....\\
10         表中数据(m,1) & 表中数据(m,2) & ... & 表中数据(m,n)\\
11         \bottomrule [1.5 pt]
12     \end{ tabular }
13 \end{ table }

```

table 环境是一个将表格嵌入文本的浮动环境。tabular 环境的必选参数由每列对应一个格式字符所组成：c 表示居中，l 表示左对齐，r 表示右对齐，其总个数应与表的列数相同。此外，@{文本}可以出现在任意两个上述的列格式之间，其中的文本将被插入每一行的同一位置。表格的各行以\\分隔，同一行的各列则以 & 分隔。\\toprule、\\midrule 和 \\bottomrule 三个命令是由 booktabs 宏包提供的，其中 \\toprule 和 \\bottomrule 分别用来绘制表格的第一条（表格最顶部）和第三条（表格最底部）水平线，\\midrule 用来绘制第二条（表头之下）水平线，且第一条和第三条水平线的线宽为 1.5pt，第二条水平线的线宽为 1pt。引用方法与图片的相同。

这里笔者给出常见用法，以供参考。

表 3.2 符号说明

符号	内容说明
ϵ_{tol}	算法误差容限
$\mathbf{a}_{\odot}^{\text{tidal}}$	太阳引潮力项，按二阶梯度展开计算
E	偏近点角，通过牛顿迭代法求解开普勒方程
$\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}$	轨道面正交基向量，由 (Ω, ω, i) 计算
$\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_{13}$	算法中间系数，对应 13 次函数估值
B_{eff}	有效摄动阶数

表 3.3 2028 Olympic Medal Predictions (Top 14 Countries by Total Score)

Country	Gold	Silver	Bronze	Total Score
United States	40.0 (38.0–46.3)	40.4 (38.4–44.0)	33.9 (32.2–42.0)	112.0
China	36.7 (34.9–40.0)	27.0 (25.6–30.4)	24.0 (22.8–31.5)	90.8
Great Britain	17.1 (16.2–30.7)	22.8 (21.7–28.5)	26.6 (25.3–30.5)	67.3
Russia	14.3 (13.6–23.6)	18.1 (17.2–20.9)	20.9 (19.9–20.1)	55.7
France	12.1 (11.5–25.3)	13.3 (12.6–26.0)	21.2 (20.1–22.0)	47.0
Australia	12.1 (11.5–22.6)	14.4 (13.7–19.4)	16.2 (15.4–16.5)	46.7
Japan	13.1 (12.4–20.5)	14.9 (14.2–19.0)	15.3 (14.5–17.0)	45.0
Italy	12.1 (11.5–16.4)	13.0 (12.3–13.6)	17.4 (16.5–20.8)	40.2
Germany	12.1 (11.5–19.8)	12.8 (12.2–18.7)	13.4 (12.7–16.4)	33.2
Netherlands	7.1 (6.7–15.0)	8.0 (7.6–11.4)	12.8 (12.2–16.3)	30.8
South Korea	7.7 (7.3–13.0)	7.9 (7.5–9.5)	9.8 (9.3–10.9)	29.0
New Zealand	4.5 (4.3–10.0)	5.9 (5.6–9.7)	5.8 (5.5–10.3)	20.1
Brazil	4.8 (4.6–11.1)	6.1 (5.8–9.1)	7.4 (7.0–11.3)	20.0
Canada	5.4 (5.1–10.2)	5.6 (5.3–7.3)	8.2 (7.8–11.0)	19.2

Note: Values are formatted as "median (confidence interval)". Countries are ranked by total score median.

Algorithm 1 预测误差与观测时间算法

Require:

初始轨道参数 $\mathbf{X}_0 \in \mathbb{R}^6$ (含误差协方差 $\mathbf{P}_0$)

摄动力模型 $\mathcal{M}$ (含 J2 至 J6 项、日月摄动、太阳光压等)

Ensure:

位置误差统计量 $\mu_\epsilon, \sigma_\epsilon \in \mathbb{R}^3$

- 1: **procedure** 误差传播分析 ($\mathbf{X}_0, \mathbf{P}_0, T_{max}$)
- 2: 步骤 1: 建立参考轨道
- 3: 生成精密星历轨迹: $\mathbf{X}_{ref}(t) \leftarrow \text{SPICE_ephem}(t), t \in [0, T_{max}]$
- 4: 构造变分方程: $\frac{d}{dt}\Phi(t, 0) = \mathbf{A}(t)\Phi(t, 0)$
- 5: 步骤 2: 参数扰动采样
- 6: 分解协方差矩阵: $\mathbf{P}_0 = \mathbf{L}\mathbf{L}^\top$
- 7: **for** $k = 1$ **to** N_{MC} **do**
- 8: 生成随机扰动: $\delta\mathbf{X}_k \leftarrow \mathbf{L}\mathbf{z}_k, \mathbf{z}_k \sim \mathcal{N}(0, 1)$
- 9: 样本轨道参数: $\mathbf{X}_k^{(0)} \leftarrow \mathbf{X}_0 + \delta\mathbf{X}_k$
- 10: **end for**
- 11: 步骤 3: 轨道传播计算
- 12: **for** $k = 1$ **to** N_{MC} 并行执行 **do**
- 13: 数值积分轨道: $\mathbf{X}_k(t) \leftarrow \text{RK78}(\mathbf{X}_k^{(0)}, \mathcal{M}, T_{max})$
- 14: 记录位置偏差: $\Delta\mathbf{r}_k(t) \leftarrow \mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_{ref}(t)$
- 15: **end for**
- 16: 步骤 4: 统计误差分布
- 17: 计算时刻 t_j 的统计量:

$$\mu_\epsilon(t_j) = \frac{1}{N_{MC}} \sum_{k=1}^{N_{MC}} \Delta\mathbf{r}_k(t_j)$$

$$\sigma_\epsilon^2(t_j) = \frac{1}{N_{MC} - 1} \sum_{k=1}^{N_{MC}} \|\Delta\mathbf{r}_k(t_j) - \mu_\epsilon\|^2$$

- 18: **return** $\{\mu_\epsilon(t_j), \sigma_\epsilon(t_j)\}_{j=1}^M$
 - 19: **end procedure**
-

表 3.4 Non-awarded Country

BIZ	MAL	OMA	PLE	ESA	UNK	CAM	RWA
VNM	KIR	SOL	SWZ	MAW	HON	GEQ	BOL
STP	CGO	LBN	MDV	GAM	TUV	NRU	ANG
MHL	LES	YEM	SLE	VIN	LAO	CAF	MAD
MLI	SAA	BEN	ARU	GBS	AND	NBO	CRT
COK	FSM	LBR	GUI	SAM	VAN	MLT	LBA
SOM	NFL	ASA	SKN	LIE	BRU	COD	CAY
ROT	COM	NEP	SSD	CHA	MYA	GUM	TLS
BHU	BIH	IVB	YMD	PLW	YAR	BAN	SEY
MTN	ANT	PNG	NCA	RHO			

4 公式

数学论文必然涉及不少数学公式的使用。下面简单介绍一个可能用得上的数学环境。

首先是行内公式，例如 θ 是角度。行内公式使用 $\$ \$$ 包裹。

行间公式不需要编号的可以使用 $\[\]$ 包裹，例如

$$E = mc^2$$

其中 E 是能量， m 是质量， c 是光速。

如果希望某个公式带编号，并且在后文中引用可以参考下面的写法：

$$E = mc^2 \tag{4.1}$$

式 eq. (4.1) 是质能方程。

多行公式有时候希望能够在特定的位置对齐，以下是其中一种处理方法。

$$P = UI \quad (4.2)$$

$$= I^2 R \quad (4.3)$$

& 是对齐的位置，& 可以有多个，但是每行的个数要相同。

矩阵的输入也不难。

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nn} \end{pmatrix}$$

分段函数这些可以用 case 环境，但是它要放在数学环境里面。

$$f(x) = \begin{cases} 0 & x \text{ 为无理数,} \\ 1 & x \text{ 为有理数.} \end{cases}$$

在数学环境里面，字体用的是数学字体，一般与正文字体不同。假如要公式里面有个别文字，则需要把这部分放在 text 环境里面，即 \text{文本环境}。

公式中个别需要加粗的字母可以用 \$\bm{\mathit{symbol}}\$。如 $\alpha a \alpha a$ 。

以上仅简单介绍了基础的使用，对于更复杂的需求，可以阅读相关的宏包手册，如 amsmath。复杂的公式也不难打出。

$$P(y | X, \beta, \sigma^2) P(\beta) P(\sigma^2) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - x_i\beta)^2}{2\sigma^2}\right) \times \mathcal{N}(\beta | 0, \tau^2) \quad (4.4)$$

$$\times \text{Inverse-Gamma}(\sigma^2 | a, b)$$

$$\mathbf{r}_{\odot}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0(t - t_0) + \frac{1}{2}\mathbf{a}_0(t - t_0)^2 + \frac{1}{6}\mathbf{j}_0(t - t_0)^3 \quad (4.5)$$

$$+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{\tau} \left[\sum_{k=1}^4 \mathbf{a}_k(\tau') + \mathcal{O}(c^{-4}) \right] d\tau' d\tau \quad (\text{日心惯性系}) \quad (4.6)$$

$$\mathbf{r}_{\oplus}(t) = [\mathbf{r}_{\odot}(t) - \mathbf{R}_{\odot}^{\oplus}(t)] \cdot \mathbf{R}_{prec}(t) + \Delta \mathbf{r}_{nut}(t) \quad (\text{地心惯性系}) \quad (4.7)$$

希腊字母这些如果不熟悉，可以去查找符号文件 symbols-a4.pdf，也可以去 detexify 网站手写识别。另外还有数学公式识别软件 mathpix。

出于工作量，本模板未定义 definition、theorem、lemma、corollary、assumption、conjecture、axiom、principle、problem、example、proof、solution 等环境，需要者可以自行添加。

5 其它小功能

5.1 脚注

利用 \footnote{具体内容} 可以生成脚注²。

5.2 无序列表与有序列表

无序列表是这样的：

- one
- two
- ...

有序列表是这样子的：

1. one

²脚注可以补充说明一些东西

2. two

3. ...

5.3 字体加粗与斜体

如果想强调部分内容,可以使用加粗的手段来实现。加粗字体可以用 `\textbf{加粗}` 来实现。例如：**这是加粗的字体。This is bold fonts**。

中文字体没有斜体设计，但是英文字体有。斜体 *Italics*。

参考文献

- [1] Tobias O, Hubert P, Irene H, et al. The Not So Short Introduction to LaTeX2e[EB/OL]. 2021[2021-06-05]. <http://tug.ctan.org/info/lshort/english/lshort.pdf>.
- [2] CTeX-org. CTEX 宏集手册[EB/OL]. (2021-03-14)[2021-06-05]. <http://mirrors.ctan.org/language/chinese/ctex/ctex.pdf>.
- [3] CTeX-org. CTeX-org/gbt7714-bibtex-style[CP/OL]. (2021-05-08)[2021-06-05]. <https://github.com/CTeX-org/gbt7714-bibtex-style>.

致 谢

感钟山紫气之氤氲，润我学术根苗；
谢天印湖波之澄澈，涤我思辨尘埃。
感匠石运斤之精微，铸我工程筋骨；
谢杏坛弦歌之绵长，启我智慧枢机。

谢春风化雨之无声，沐我三载寒窗；
感星斗列张之有迹，引我万里云程。
谢同窗砥砺如金石，切磋以成利器；
感师道巍峨若方山，仰止而见峥嵘。

——乙巳年季夏于天印湖

附录

附录的具体内容（中文采用楷体小四号，英文采用 Times New Roman 小四，首行缩进 2 字符，1.5 倍行距）

表 5.1 宏包罗列

模板中已经加载的宏包				
amsbsy	amsfonts	amsgen	amsmath	amsopn
amssymb	amstext	appendix	array	atbegshi
atveryend	auxhook	bigdelim	bigintcalc	bigstrut
bitset	bm	booktabs	calc	caption
caption3	CJKfntef	cprotect	ctex	ctexhook
ctexpatch	enumitem	etexcmds	etoolbox	everysel
expl3	fix-cm	fontenc	fontspec	fontspec-xetex
geometry	getttitlestring	graphics	graphicx	hobsub
hobsub-generic	hobsub-hyperref	hopatch	hxetex	hycolor
hyperref	ifluatex	ifpdf	ifthen	ifvtex
ifxetex	indentfirst	infwarerr	intcalc	keyval
kvdefinekeys	kvoptions	kvsetkeys	l3keys2e	letltxmacro
listings	longtable	lstmisc	ltxcaption	ltxcmds
multirow	nameref	pdfescape	pdftexcmds	refcount
rerunfilecheck	stringenc	suffix	titletoc	tocloft
trig	ulem	uniquecounter	url	xcolor
xcolor-patch	xeCJK	xeCJKfntef	xeCJK-listings	xparse
xtemplate	zhnumber			

以上宏包都已经加载过了，不要重复加载它们。