

Souhrn

V první části této diplomové práce byla vypracována syntéza výchozích látek - methyl-3-chlorbenzo[b]thiofen-2-karboxylátu, methyl-3-chlor-4-methylbenzo[b]thiofen-2-karboxylátu a methyl-3-brombenzo[b]thiofen-2-karboxylátu.

Na takto připravených látkách byla studovány reakce vedoucí k axiálně-chirálním 3,3'-bi(benzo[b]thiofen)-2,2'-dikarboxylátům. Jako nejlepší metoda se ukázala Ullmanova reakce, která poskytla dimethyl-3,3'-bi(benzo[b]thiofen)-2,2'-dikarboxylát a dimethyl-4,4'-dimethyl-3,3'-bi(benzo[b]thiofen)-2,2'-dikarboxylát v dobrých výtěžcích.

Axiálně-chirální ester byl převeden na 3,3'-bi(benzo[b]thiofen)-2,2'-dikarboxylovou kyselinu, která byla rozdělena na enantiomery krystalizací s chininem. (*R*)-Enantiomer byl získán krystalizací s jedním ekvivalentem chininu v optické čistotě větší než 99% e.e. a (*S*)-enantiomer jsme získali krystalizací s dvěma ekvivalenty chininu v optické čistotě 97,4% e.e. Absolutní konfigurace enantiomerů byla určena ze spektra rentgenové difrakční analýzy.

Vzhledem k nízkým výtěžkům štěpení na (*R*)- a (*S*)- enantiomery byla prostudována vstřícná syntéza diastereomerní směsi (*S,S'*)-2,2'-(3,3'-bi(benzo[b]thiofen))-4,4'-diisopropyl-4,4',5,5'-tetrahydrobisoxazolu a její dělení sloupcovou chromatografií ve stadiu amidoalkoholu a bisoxazolinu. Vzhledem k neuspokojivým výsledkům byla prověřena také možnost enantioselektivní syntézy 3,3'-bi(benzo[b]thiofen)-2,2'-dikarboxylátů. Byly připraveny (*S*)-2-(3-chlorbenzo[b]thienyl)-4-isopropyl-4,5-dihydrooxazol a (*S*)-2-(3-jodbenzo[b]thienyl)-4-isopropyl-4,5-dihydrooxazol, na kterých byly studovány dimerizační reakce. Opět byly nejlepší výsledky dosaženy s Ullmanovou reakcí. Byla získána diastereomerní směs bisoxazolinů **21**, ale ukázalo se, že ke sterickému zvýhodnění jednoho z diastereomerů v průběhu reakce nedochází a že tedy k enantioselektivní reakci nedochází.

Opticky čisté enantiomery (*R*)-, (*S*)- byly zredukovány na dioly (*R*)-, (*S*)-, které byly použity na přípravu redukčních činidel a. Pomocí nich byl proveden pokus o enantioselektivní redukci acetofenonu. Při použití činidla byla reakce enantioselektivní, byl získán 64% (*R*)-1-fenylethan-1-olu a 36% (*S*)-1-fenylethan-1-olu. Získané výsledky z redukce s činidlem, které obsahovalo dva homotopické vodíkové atomy, podporují známé skutečnosti zjištěné během studia enantioselektivních redukcí.

Název diplomové práce: Axiálně chirální sloučeniny odvozené od benzothiofenu
Studijní obor: Technologie organických látek
Diplomantka: Marie Mězlová
Vedoucí práce: Ing. V.Kozmík, CSc.

Práce byla odevzdána dne 10. května 2002.