

50. RTU STUDENTU ZINĀTNISKĀS
UN TEHNISKĀS
KONFERENCES MATERIĀLI

2009. gada aprīlī

III

EKONOMIKA

UZŅĒMĒJDARBĪBA UN VADĪŠANA
ĶĪMIJA UN ĶĪMIJAS TEHNOLOĢIJA

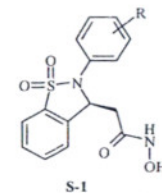
RTU Izdevniecība

RĪGA – 2009

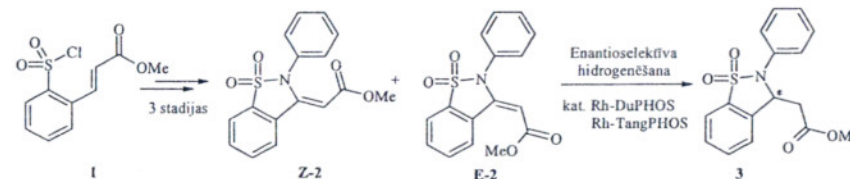
N.Usačova, G.Leitis un A.Jirgensons (zinātniskie vadītāji)

ENANTIOSELEKTĪVĀS HIDROGENĒŠANAS EFEKTIVITĀTES IZPĒTE
HOMOHIRĀLU *N*-HIDROKSI-2-(1,1-DIOKSO-2-FENIL-2,3-DIHDRO-1H-
BENZO[d]IZOTIAZOL-3-IL)ACETAMĪDU IEGŪŠANAI

Jaunu zāļvielu attīstīšanas programmas ietvaros bija nepieciešams izstrādāt efektīvu sintēzes metodi homohirālu (*S*)-*N*-hidroksi-2-(1,1-dioksa-2-aryl-2,3-dihidro-1H-benzo[d]izotiazol-3-il)acetamīda atvasinājumu **S-1** iegūšanai. Dubultsaites asimetriskā hidrogenēšana ir viena no iespējām iegūt enantiomēri bagātinātus β-aminokarbonskābes atvasinājumus, kas ir mērķa savienojumu centrālais struktūrelements.



Lai pārbaudītu asimetriskās hidrogenēšanas efektivitāti, izstrādājām sintēzes ceļu olefīnu **Z-2** un **E-2** iegūšanai no sulfonilhlorīda **1**. Olefīnu izomēru **Z-2** un **E-2** hidrogenēšanai izmantojām rodīja kompleksus ar hirāliem fosfīna ligandiem DuPHOS un TangPHOS.



Vislabākos rezultātus – 89 % konversiju un 60 % ee - izdevās sasniegt, izmantojot Rh-DuPHOS kompleksu olefīna **Z-2** katalītiskajā hidrogenēšanā par esterī **3**.

Iegūtie rezultāti liecina, ka nepiesātināto esteri enantioselectīvā hidrogenēšana ir izmantojama kā atslēgas stadija mērķa savienojumu **S-1** iegūšanai, taču nepieciešams optimizēt katalītisko sistēmu un reakcijas apstākļus augstākas enantioselectivitātes sasniegšanai. Bez tam, lai enantioselectīvās hidrogenēšanas pieeja būtu praktiski izmantojama, nepieciešams attīstīt metodi stereoselectīvai noteiktas konfigurācijas olefīna **2** iegūšanai.