

Sekce : Výroba léčiv a organická technologie

Teoretická studie asymetrické hydrogenace acyklických iminů

Autor: Petr Šot
Ročník: B2
Ústav: Ústav organické technologie
Školitel: doc. Ing. Petr Kačer, PhD.

Roku 1996 Noyori et al. publikoval originální metodu asymetrické redukce iminů a ketonů. Tato reakce, katalyzovaná komplexy typu [RuCl(TsDPEN)(p-cymen)], má velký potenciál ve farmaceutickém průmyslu pro svoji jednoduchost provedení a vysokou stereoselektivitu.

Tehdy navržený reakční mechanismus předpokládal zformování šestičlenného cyklu, a to jak u ketonů, tak iminů. V nedávné době (2009) však Wills et al. poukázal na některé zásadní rozpory s tímto předpokladem (účast NH₂ skupiny, izomerie produktu, aj.) a navrhl zcela nový, „iontový“ mechanismus reakce pro redukci iminů.

Zatímco cyklické iminy (zejména substituované 3,4-dihydroisochinoliny) jsou z pohledu mechanismu intenzivně zkoumány, data pro acyklické iminy jsou poměrně nedostatečná. Tato studie si klade za cíl prozkoumání mechanismu hydrogenace acyklických iminů na Noyoriho komplexu prostřednictvím ab initio výpočetních metod se snahou o osvětlení význačných rozdílů vůči cyklickým iminům. Jako modelový substrát byl zvolen acetofenon benzylimin. Výpočty byly realizovány prostřednictvím programových balíčků Gaussian 03 a Gaussian 09.