

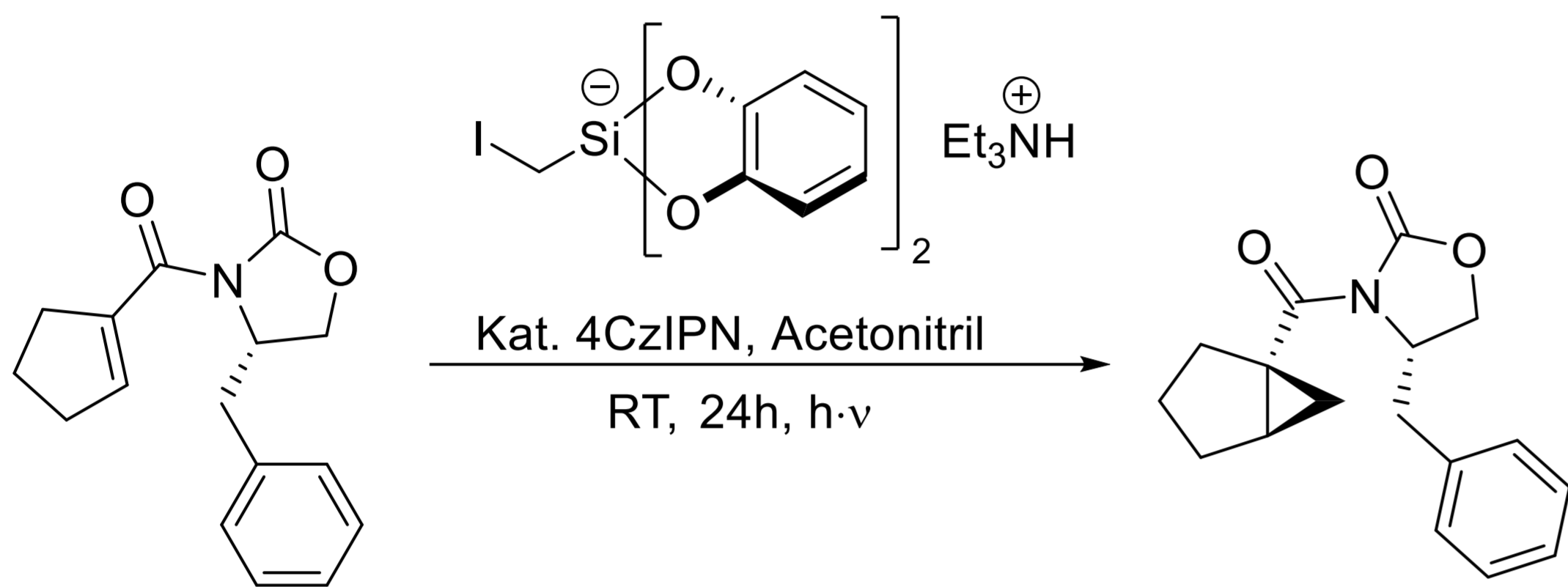
# Molekülbau in 3D

## Ein Einblick in die Stereochemie

Evelin Fateus, Jörg Dietzel, Erik Diepers und Florian Bauer

### Das Projekt

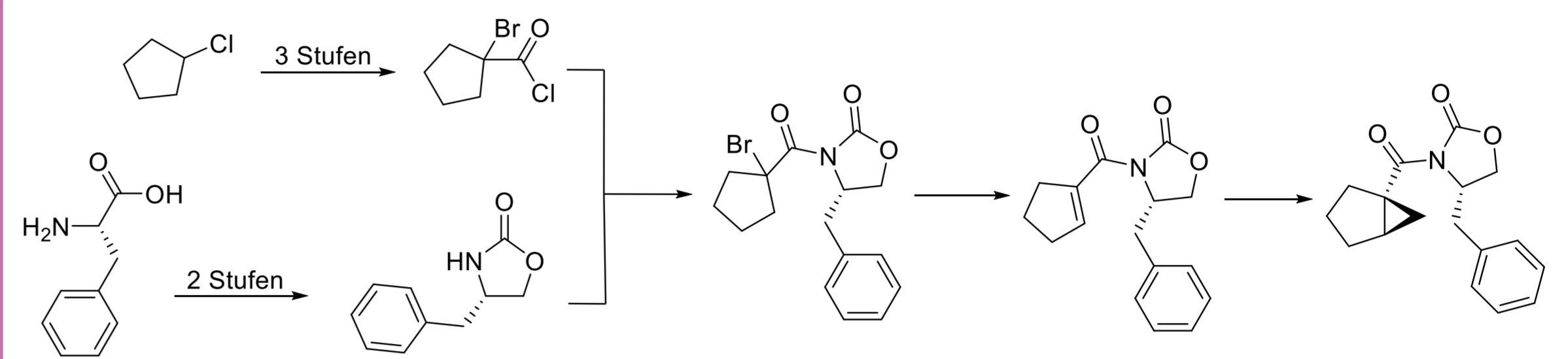
Entwicklung einer chiral Auxiliar gestützten diastereoselektiven Cyclopropanierung zur Herstellung enantiomerenreiner chiral anellierter Bicyclen



Die Reaktion<sup>[1]</sup>:

- basiert auf einer Cyclopropanierung nach Molander
- läuft durch Photoredoxkatalyse unter milden Bedingungen ab
- erzeugt ohne die Verwendung eines chiralen Auxiliars ein racemisches Gemisch
- hat das Potential, auf andere Systeme übertragen zu werden

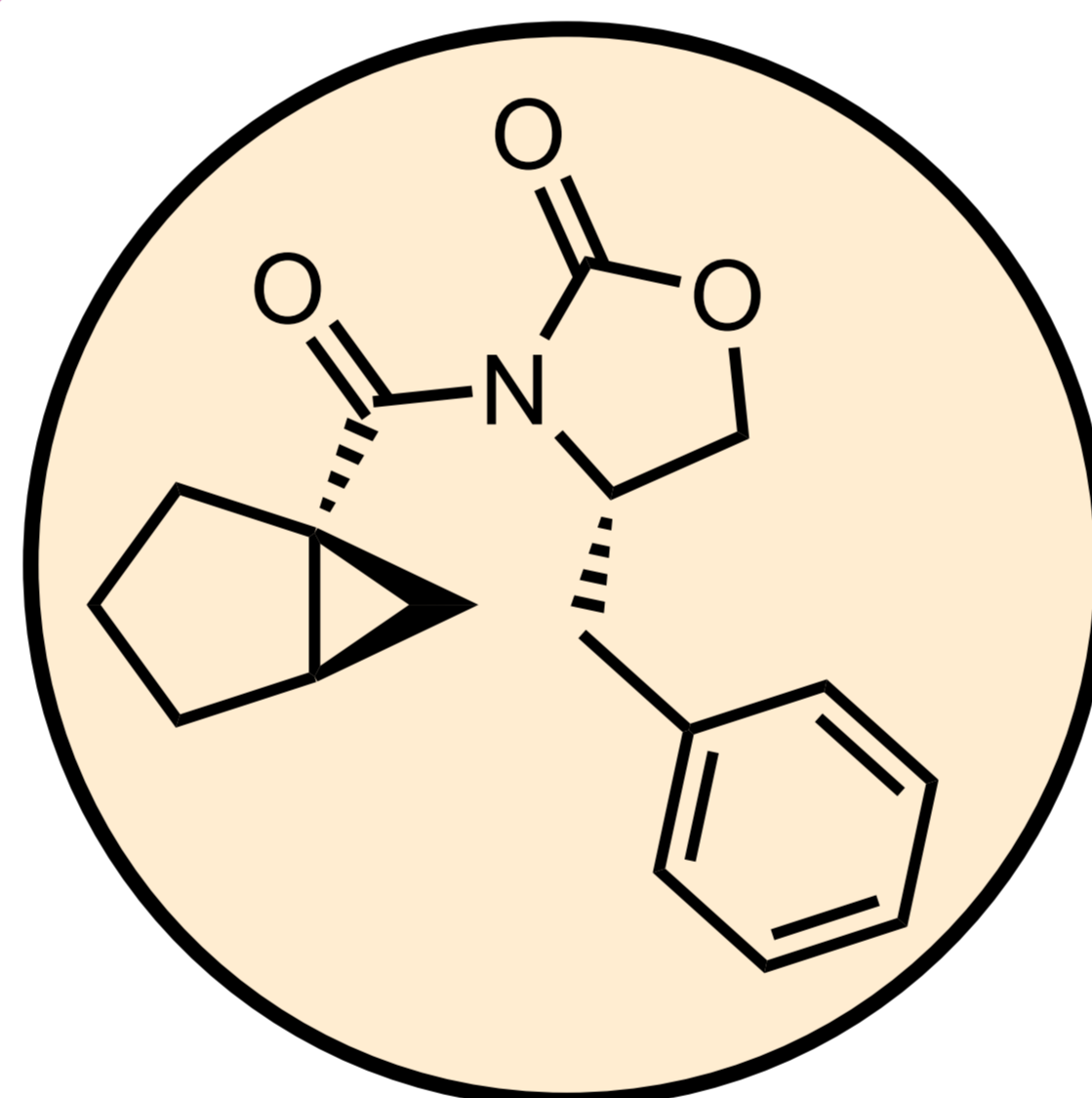
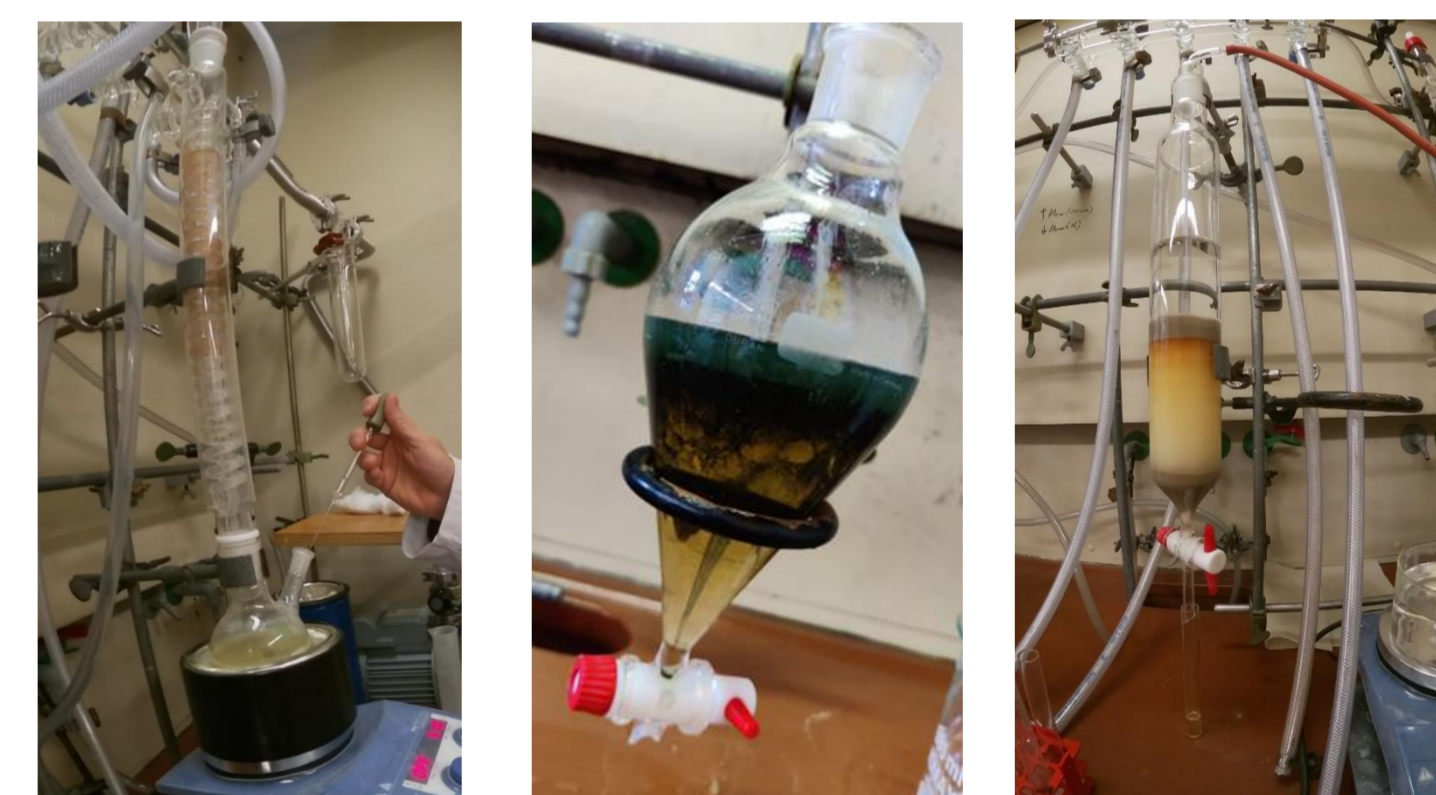
### Synthese



- Komplexe mehrstufige Synthese des Substrates
- in einzelne, bekannte Reaktionsschritte zerlegt

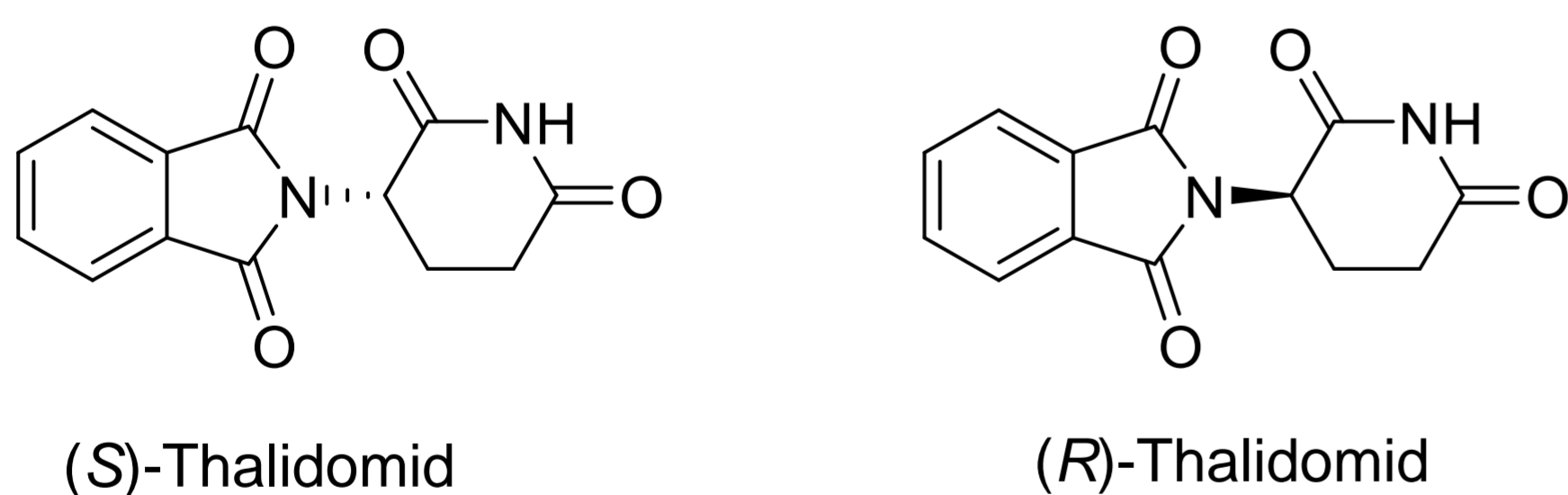
Ablaufschema für jeden Reaktionsschritt:

- Literaturrecherche
- Besprechung mit Prof. Walker
- Durchführung der Synthese in Zweierteams
- Analyse des Reaktionsproduktes



### Theorie

- Stereochemie befasst sich mit der dreidimensionalen Struktur von Molekülen
- wichtig unter anderem in der Pharmazie
- Beispiel<sup>[2]</sup>: Contergan (Thalidomid)

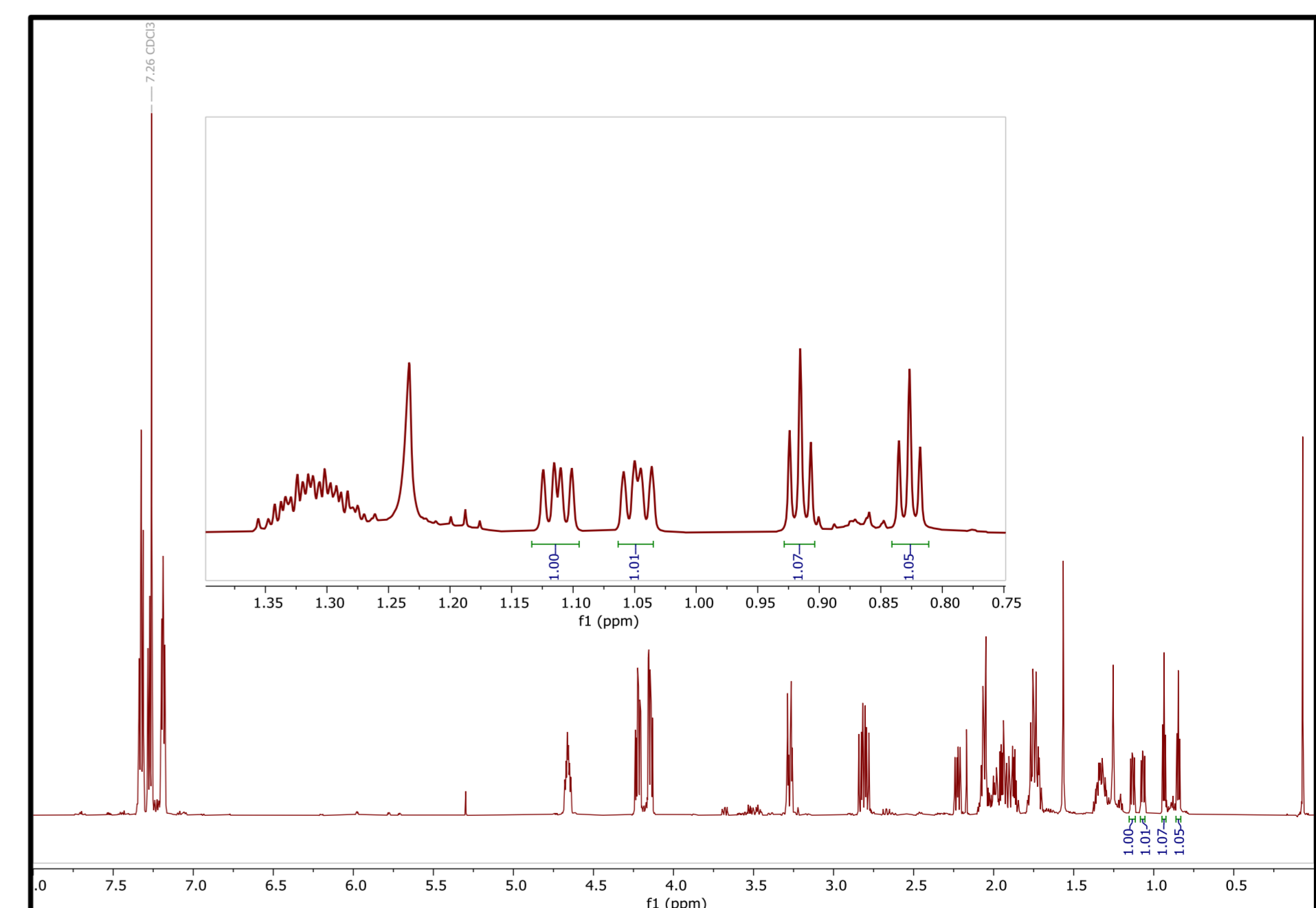


- Medikament gegen Schwangerschaftsübelkeit und Beruhigungsmittel in den 50er Jahren
- (S)-Thalidomid verursacht Fehlbildungen
- (R)-Thalidomid bringt erwünschte Wirkung
- Medikament wurde als racemisches Gemisch verkauft

### Ergebnisse

Analyse mittels NMR:

- Zuordnung der Signale der verschiedenen Protonen
- Trennung der verschiedenen Isomerenpeaks mit Hilfe von 2D-NMR wie COSY und HSQC



Analyse zeigt:

- Cyclopropanierung war erfolgreich, aber
- Reaktion zeigt kaum Diastereoselektivität

Literatur:

[1] G. A. Molander *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 8037-8047

[2] N. Vargesson, *Birth Defects Research Part C: Embryo Today: Reviews*, **2015**, 105, 140-156