
Inhaltverzeichnis

1	Allgemeines und Abkürzungen.....	15
1.1	Allgemeines	15
1.2	Abkürzungen	15
2	Summary	19
3	Thema.....	27
3.1	Einleitung.....	27
3.2	Aufgabenstellung.....	30
4	Kenntnisstand.....	33
4.1	Hydrolasen.....	33
4.2	Kinetische Reaktionsbetrachtungen	36
4.3	Enzymatische kinetische Racematspaltung	37
4.4	Enzymatische dynamisch-kinetische Racematspaltung.....	41
4.5	Organokatalyse	49
4.5.1	Allgemeines	49
4.5.2	<i>Mannich</i> -Typ-Reaktionen.....	55
4.6	Dihydrobenzofurane	62
4.7	Dihydrobenzothiophene.....	65
4.8	Ibuprofen	66
4.9	Naproxen	68
4.10	6-Methyl-2- <i>ortho</i> -tolyl-5-heptencarbonsäure.....	71
4.11	Enzym-Screening.....	74
4.11.1	Optische Assays.....	74
4.11.2	Screenings auf Basis von Circular dichroismus	75
5	Eigene Ergebnisse	79
5.1	Organokatalysatoren	79
5.1.1	Substratsynthese für die Enzymatische kinetische Racematspaltung.....	79
5.1.1	H-Cube [®] -Versuche	87
5.1.2	HPLC-Analytik der Substrate und Produkte der enzymatischen kinetischen Racematspaltung.....	90
5.1.3	Enzymscreening.....	92
5.1.4	Enzymatische kinetische Racematspaltung des Chlor-Derivats <i>rac</i> -4 und des Methyl-Derivats <i>rac</i> -5.....	95

5.1.5	HPLC-Analytik der Produkte der Organokatalyse.....	97
5.1.6	Organokatalyse	99
5.1.7	Synthese der Indolin-3-carbonsäure	101
5.1.8	Kinetik	102
5.1.1	Methylierung in 3-Position.....	106
5.1.2	Nitro- <i>Michael</i> -Reaktion.....	109
5.1.3	Photoisomerisierung	110
5.2	Benzofurane	112
5.2.1	Synthese.....	112
5.2.2	Enantiomerenanalytik.....	112
5.2.3	Enzymatische kinetische Racematspaltung.....	113
5.2.4	Enzymatische dynamisch-kinetische Racematspaltung	115
5.2.5	Acylierung	120
5.2.6	Screening mit HPLC und CD-Detektor.....	123
5.2.7	Enzymatische kinetische Racematspaltung.....	130
5.2.8	Enzymatische dynamisch-kinetische Racematspaltung	132
5.3	Benzothiophen	134
5.3.1	Synthese.....	134
5.3.2	Enantiomerenanalytik.....	135
5.3.3	Enzymscreening.....	136
5.3.4	Enzymatische kinetische Racematspaltung.....	138
5.3.5	Enzymatische dynamisch-kinetische Racematspaltung	139
5.4	Screening-Systeme	142
5.4.1	PET-Esterase-Screening	142
5.4.2	Synthese von Substraten für das Hydrolase-Screening	145
5.4.3	Anwendung des Screeningsystems auf 499EST	154
5.4.4	Anwendung des Screeningsystems auf LipS.....	161
6	Zusammenfassung.....	165
6.1	Organokatalyse	165
6.2	Benzofurane.....	168
6.3	Benzothiophen	170
6.4	Screening-Systeme	172
6.5	Fazit	174

7	Ausblick.....	175
7.1	Organokatalyse	175
7.2	Benzothiophen	177
7.3	Screening-Systeme	178
8	Experimenteller Teil	181
8.1	Allgemeines	181
8.2	Allgemeine Arbeitsvorschriften	186
8.2.1	Darstellung einer etherischen Diazomethanlösung	186
8.2.2	Tauchlösungen für die Dünnschichtchromatographie.....	187
8.2.2.1	Cer-Molybdato-phosphorsäure-Tauchlösung.....	187
8.2.2.2	Anisaldehyd-Tauchlösung	187
8.2.2.3	Vanillin-Tauchlösung	187
8.2.3	Herstellung eines Kaliumphosphatpuffers (100 mM, pH 8.0).....	187
8.2.4	Herstellung eines Kaliumphosphatpuffers (100 mM, pH 3.4).....	188
8.3	Organokatalysatoren	188
8.4	Benzofurane	259
8.5	Benzothiophene	281
8.6	Screening-Systeme	291
9	Literaturverzeichnis.....	321
10	Danksagung	339
11	Curriculum Vitae	341
12	Formelregister	343
13	Stichwortverzeichnis	349