

# Stereoselektywność reakcji elektrocyklizacji fluorowanych pochodnych olefin

Celem pracy było zbadanie procesów elektrocyklicznych (przede wszystkim w aspekcie ich stereoselektywności i możliwości stereokontroli) wykorzystując oprócz danych eksperymentalnych obliczenia kwantowo-mechaniczne metodami DFT. Rozważając zarówno regułę zachowania symetrii orbitali Woodwarda-Hoffmanna jak i efekt skrętoselektywności, jesteśmy w stanie kontrolować stereoselektywność procesu elektrocyklizacji, który zachodzić może w sposób stereospecyficzny, a układ taki może posłużyć w przyszłości np. jako układ modelowy przy projektowaniu nanorotorów. Opisano układy  $4\pi$ -elektronowe (fluorowane pochodne 1,3-dimetylo-5-propenyloouracylu) oraz  $6\pi$ -elektronowe (9,10-bis(pentafluoropropenylo)fenantren) ulegające elektrocyklizacji, w których wpływ na skrętoselektywność mają podstawniki „fluorowe” (zarówno elektronodonorowe np. -F jak i elektronoakceptorowe np. -CF<sub>3</sub>). Efekt skrętoselektywności jest wówczas bardzo wyraźny i może w sposób znaczący wpłynąć na stereoselektywność reakcji elektrocyklizacji. Wyjaśniono obserwowaną stereoselektywność w badanych reakcjach izomeryzacji elektrocyklicznej, wskazując na jej zależność zarówno od skrętoselektywności jak i od: równowagi konformacyjnej substratów, ich parametrów geometrycznych (symetrii), różnic w siłach oscylatorów oraz od możliwości konkurencyjnej, równoległej izomeryzacji rodnikowej.