

## 4(S)-Benzyl-1,3-thiazolidin-2-one a Novel Chiral Auxiliary for Asymmetric Aldol Coupling through Titanium Enolates

---

Dulce M. Mejía-Núñez<sup>1</sup>, Salvador Mastachi-Loza<sup>1</sup>, Diego Martínez-Otero<sup>2</sup>, Moisés Romero-Ortega<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad Autónoma del Estado de México. Toluca, México.

<sup>2</sup>Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEMéx-UNAM Toluca, México.

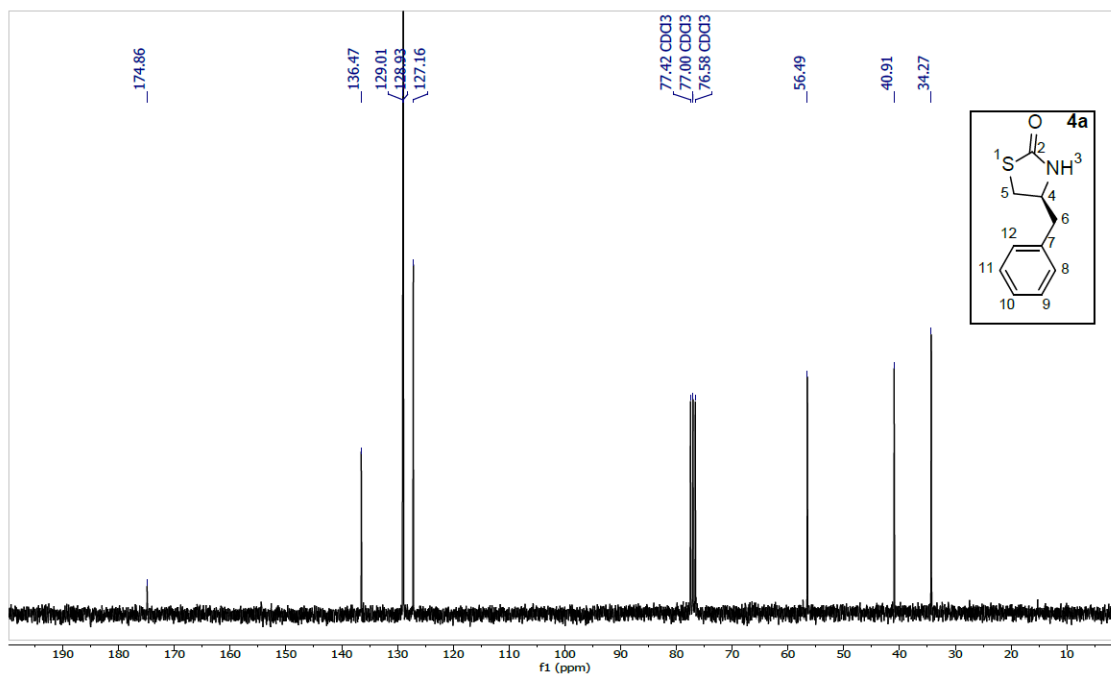
\*Corresponding author: Moisés Romero-Ortega, email: [mromero@uaemex.mx](mailto:mromero@uaemex.mx); Phone +52 7222175109.

Received May 17<sup>th</sup>, 2023; Accepted September 9<sup>th</sup>, 2023.

DOI for the article: <http://dx.doi.org/10.29356/jmcs.v68i1.2067>

## Supplementary Information

## Spectroscopy data of products



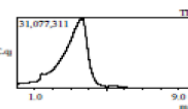
Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM

Laboratorio de Espectrometría de Masas  
Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus

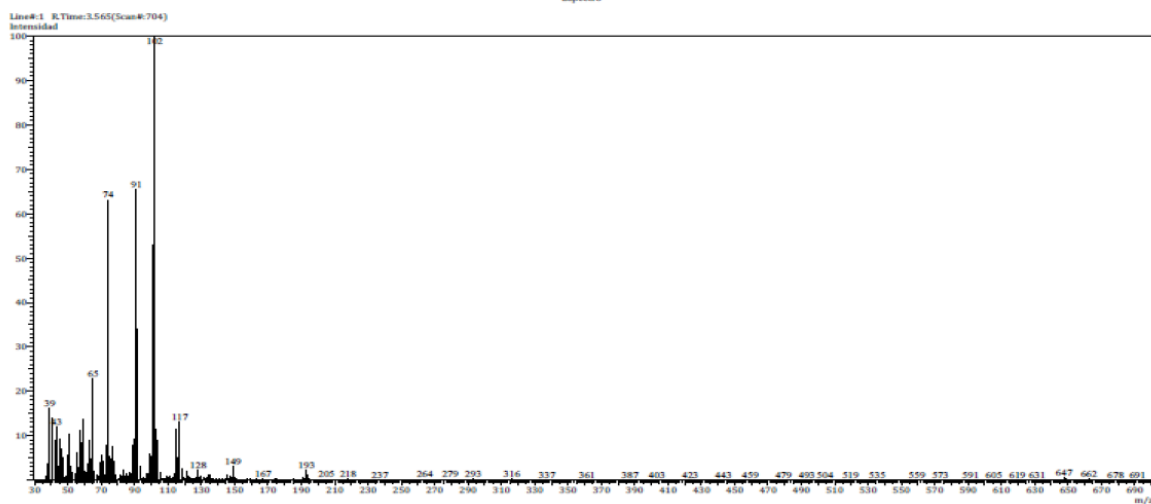
Información del Análisis

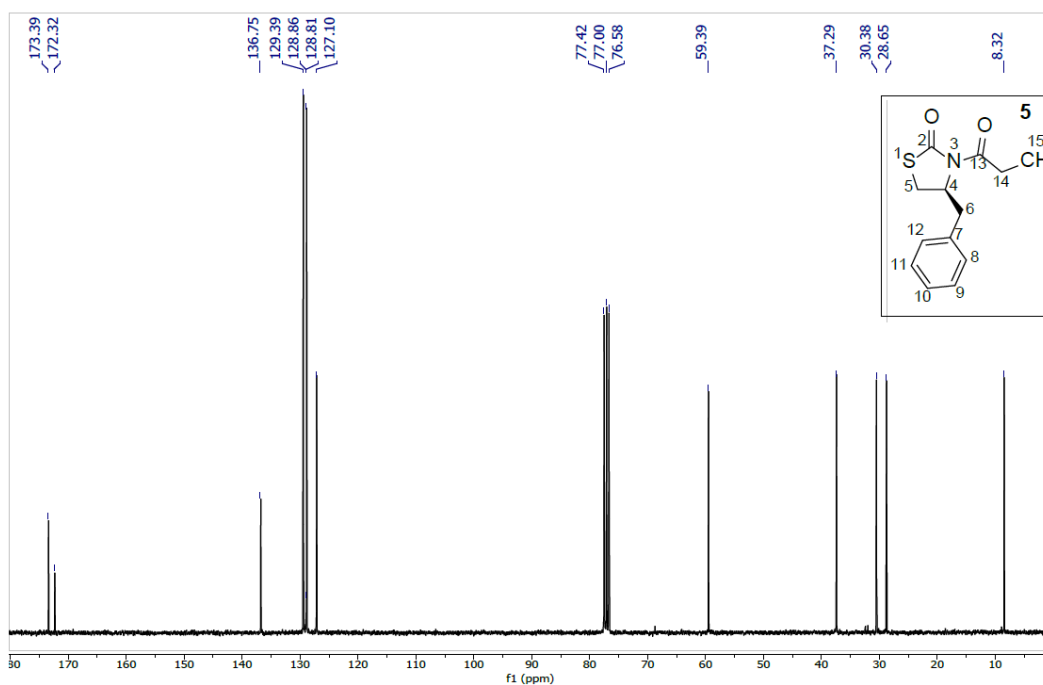
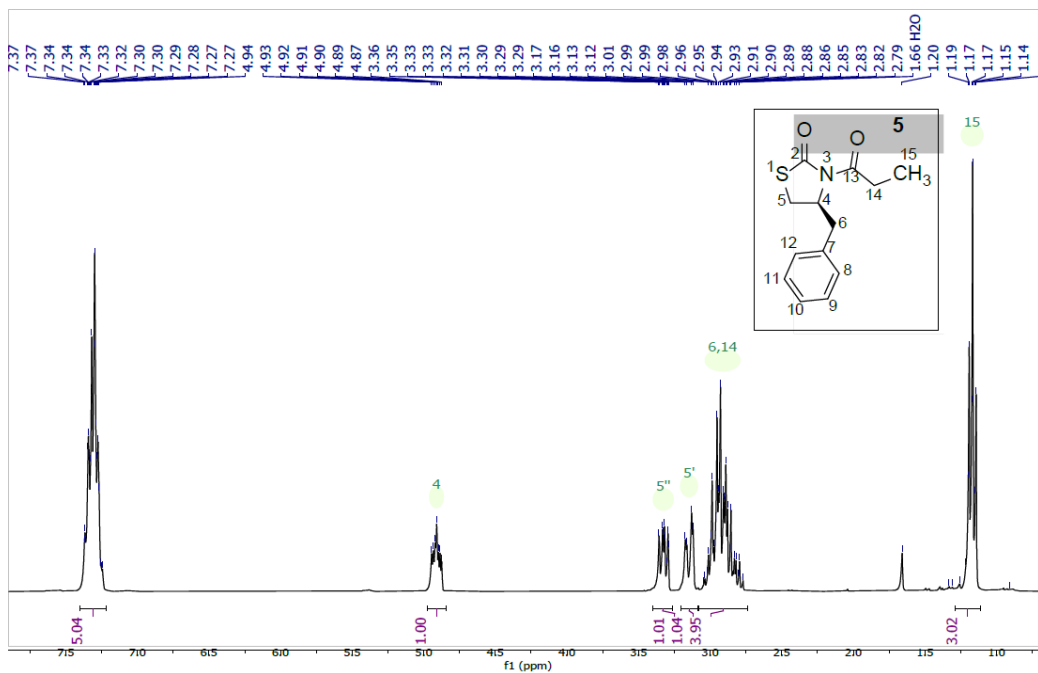
Fecha: 5/22/2017 11:04:06 AM  
Número de registro: 2571  
Nombre de la muestra: DMN-155-180  
Tipo de muestra: Sólido  
Descripción de la muestra: C15H19O3NS, PM 293 g/mol, P.F. 75-77°C  
Modo de inyección: DI  
Modo de ionización: EI

Investigador: Dr. Moisés Romero O.  
Data File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\Duice Mejía\2571\_LTC.q  
Method File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Métodos\DI\_EI\_250°C.qm  
Tuning File: C:\GCMSolution\System\Tune1\2.05.2017-1.qst  
Analizado por: M. en C. Lilbeth Triana Cruz



Espectro







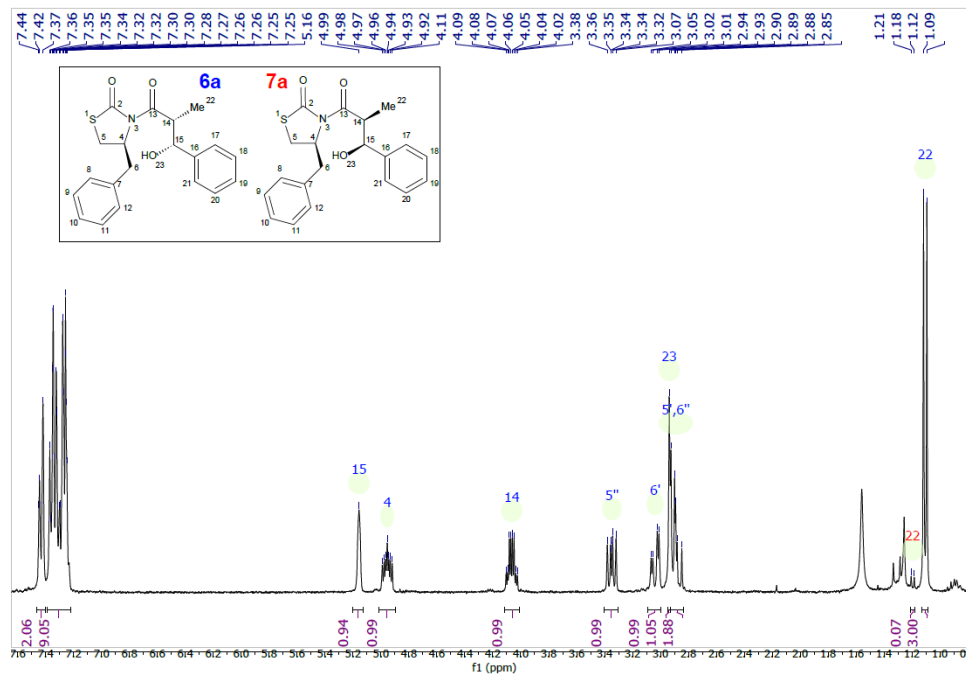
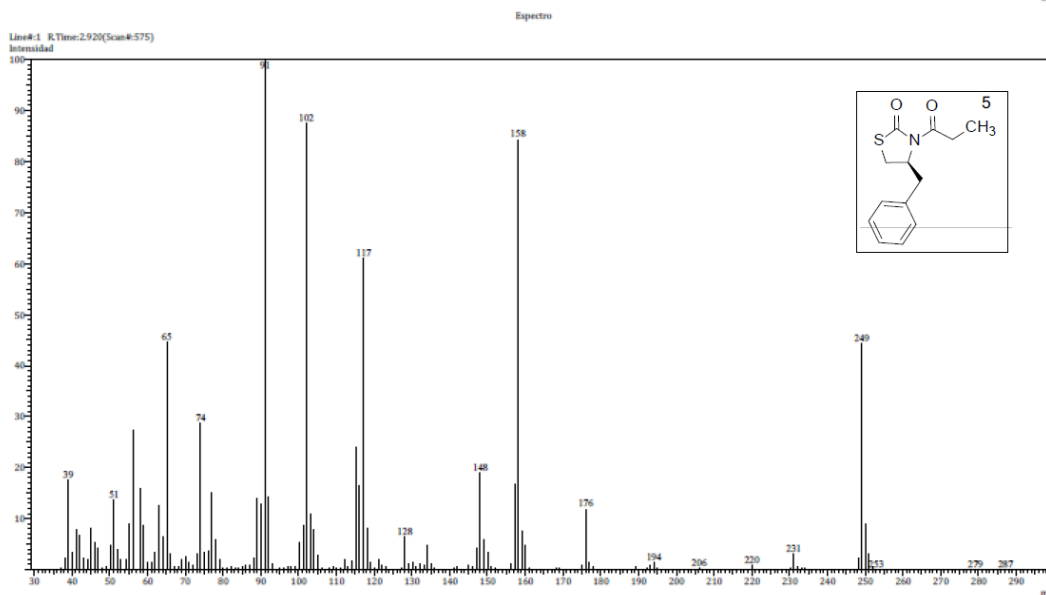
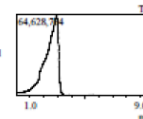
Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM  
 Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus

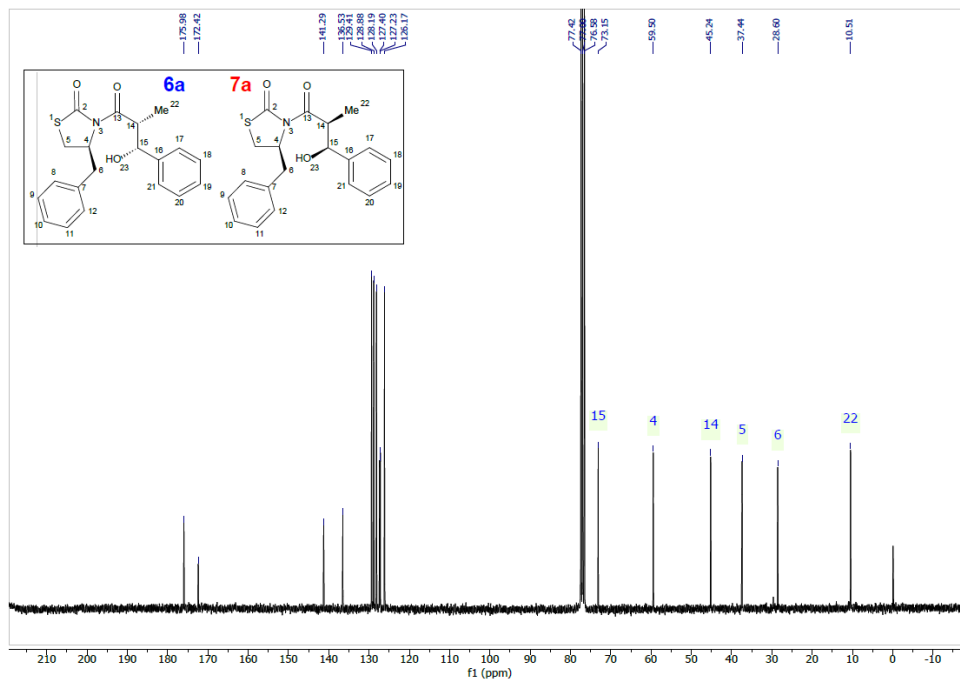


Información del Análisis

Fecha: 5/19/2017 12:10:01 PM  
 Número de registro: 2563  
 Nombre de la muestra: DMMS-MP1  
 Tipo de muestra: Sólido  
 Descripción de la muestra: C13H15O2NS, PM 299 g/mol, P.F. 67-70°C  
 Modo de inyección: DI  
 Modo de ionización: EI

Investigador: Dr. Moisés Romero O.  
 Data File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\2563\_LTC.qgd  
 Method File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Métodos\DI\_EI\_250°C.qgm  
 Tuning File: C:\GCMSolution\System1\Tune1\19052017.Lgt  
 Analizado por: M. en C. Lisseth Triana Cruz



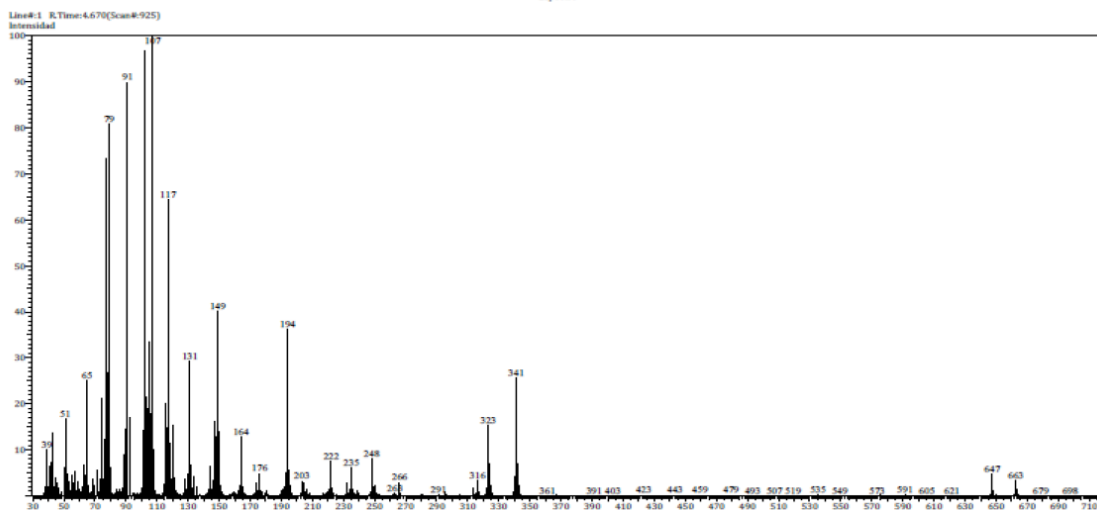
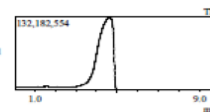


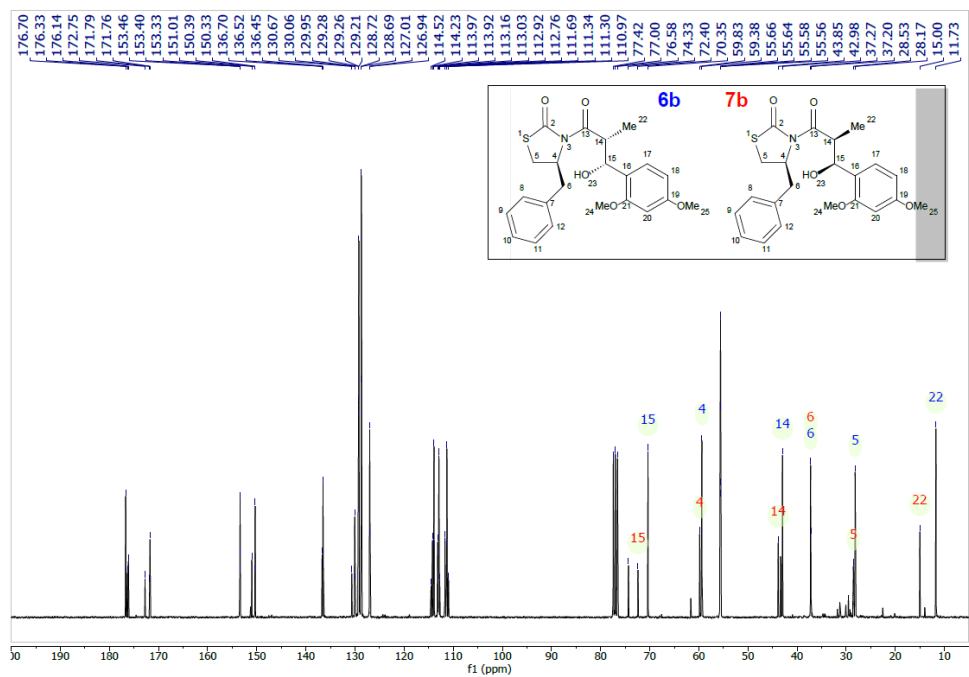
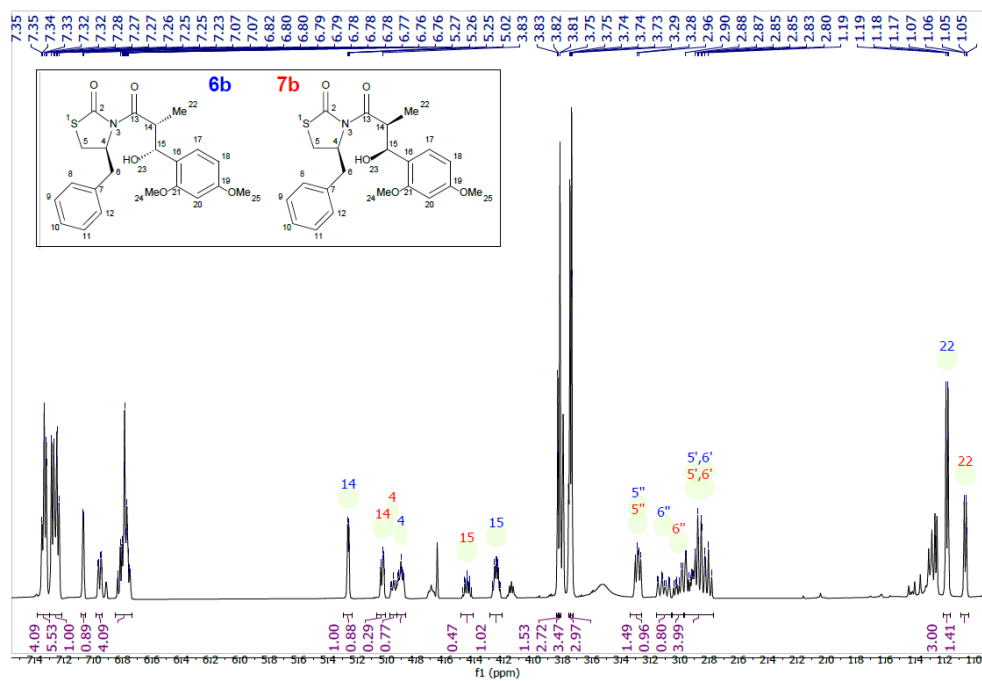
Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM  
 Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus



Información del Análisis

Fecha:	5/19/2017 12:57:19 PM	Investigador:	Dr. Melisa Romero O.
Número de registro:	2565	Data File:	C:\GCMSolution\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Melisa Romero\Dulce Mejía\2565_LTC.apd
Nombre de la muestra:	DMEM-140-162	Method File:	C:\GCMSolution\Data\Project1\Métodos\DI_EI_250°C.apd
Tipo de muestra:	Líquida	Tuning File:	C:\GCMSolution\System\Tune1\19052017-1.gcf
Descripción de la muestra:	C18H19O3NS, PM 329 g/mol	Analizado por:	M. en C. Lizabeth Triana-Cruz
Modo de inyección:	DI		







Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM

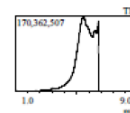
Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus



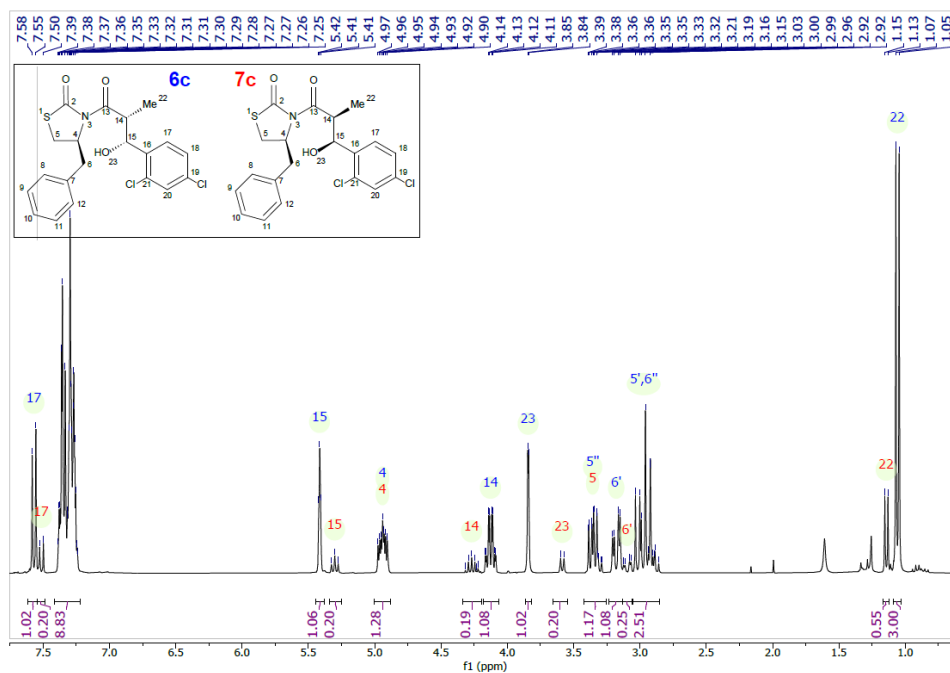
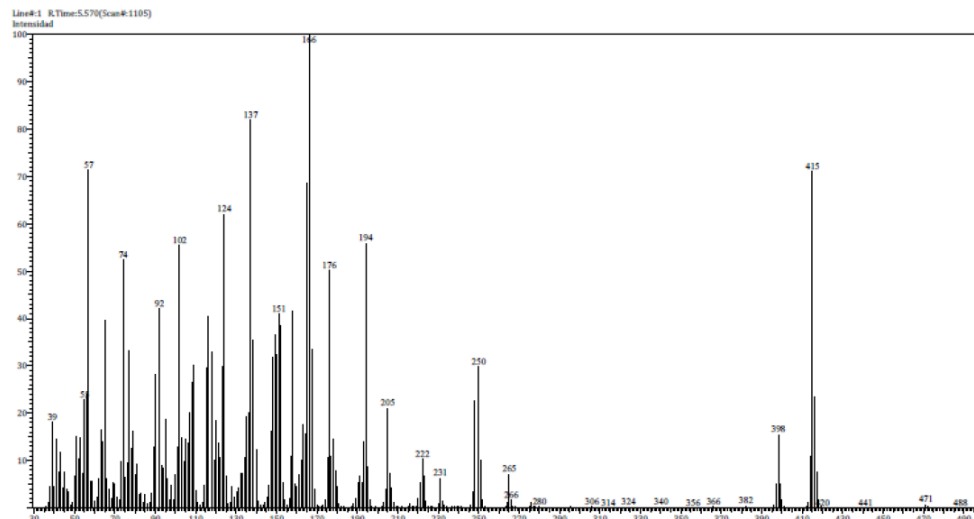
Información del Análisis

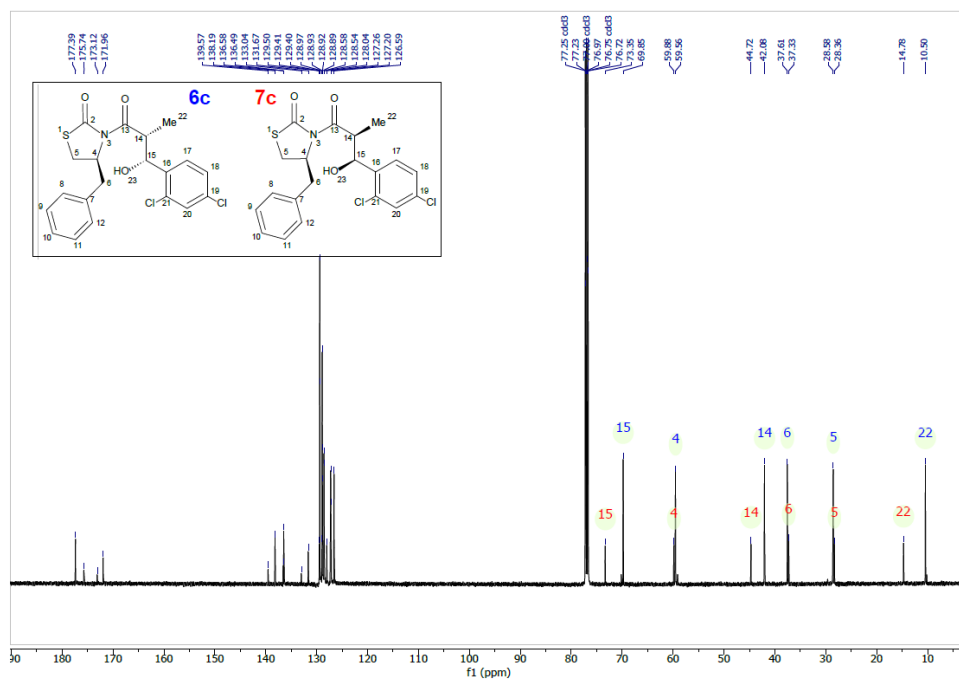
Fecha: 5/22/2017 1:08:21 PM  
 Número de registro: 2574  
 Nombre de la muestra: DMMN-116-134  
 Tipo de muestra: Sólido  
 Descripción de la muestra: C22H25OSNS, PM 403 g/mol, P.F. 130-133°C  
 Modo de inyección: EI  
 Modo de ionización: EI

Investigador: Dr. Moisés Romero G.  
 Data File: C:\GCMS\Ionization\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\Datos Mejía\2574\_LTC.agd  
 Method File: C:\GCMS\Ionization\Data\Project1\Métodos\DI\_EI\_250°C.qm  
 Tuning File: C:\GCMS\Ionization\System\Tune1\22052017-1.qft  
 Analizado por: M. en C. Lidbeth Triana Cruz



Espectro





**Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM**

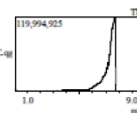
Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus



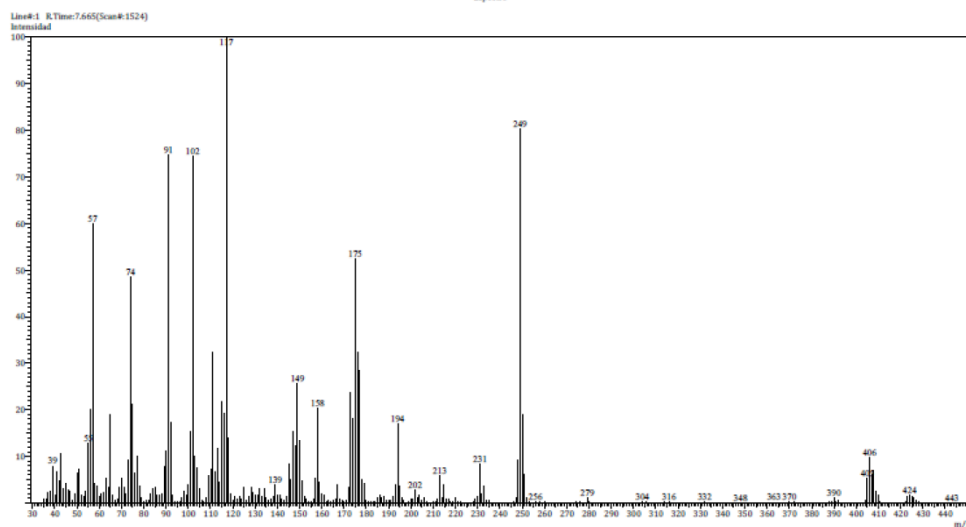
Información del Análisis

Fecha: 5/25/2017 10:43:50 AM  
 Número de registro: 2577  
 Nombre de la muestra: DMN-121-140  
 Tipo de muestra: Sólido  
 Descripción de la muestra: C19H19O3NSCl2, PM 424 g/mol, P.F.150-153°C  
 Modo de inyección: DI  
 Modo de ionización: EI

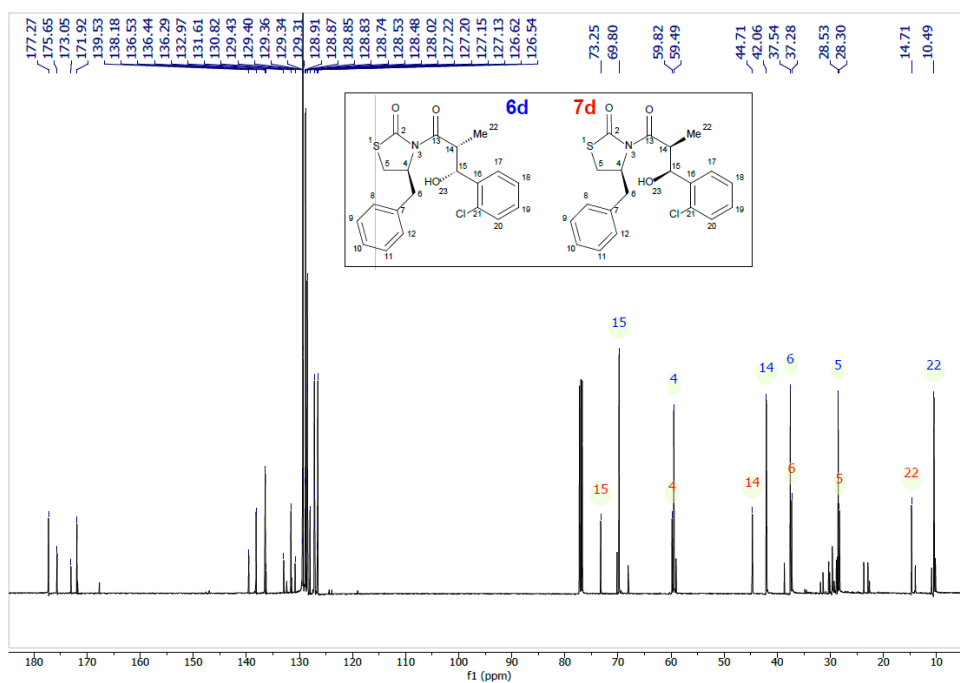
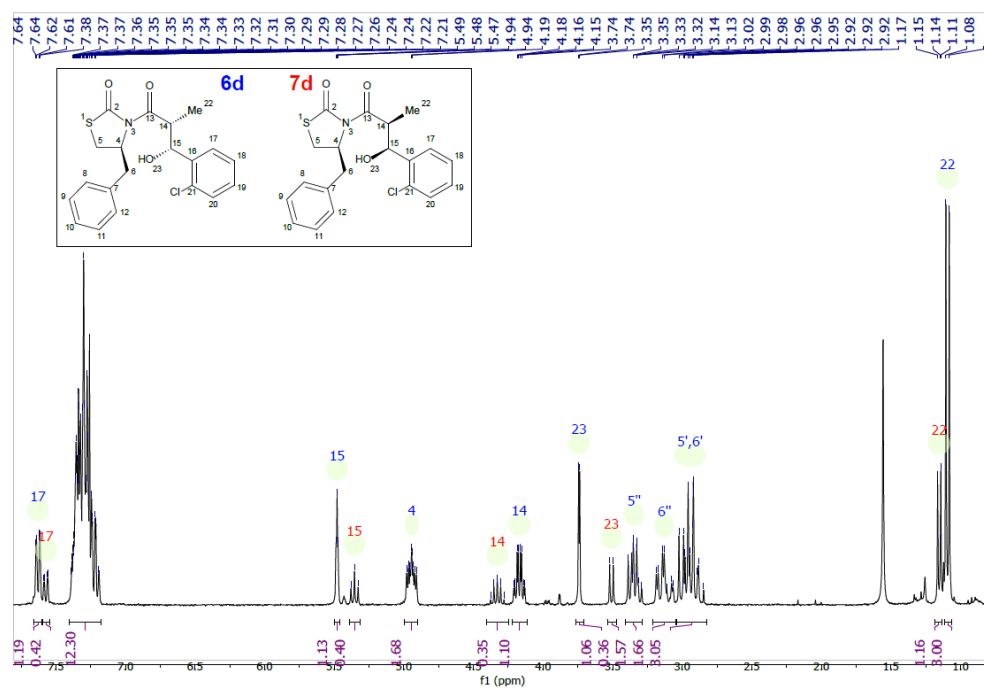
Investigador: Dr. Moisés Romero  
 Data File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\ Dulce Mejía\2577\_LTC.ag  
 Method File: C:\GCMSolution\System1\Métodos\DL\_E\_300°C.gm  
 Tuning File: C:\GCMSolution\System1\Tune1\25052017-1.gct  
 Analizado por: M. en C. Lizbeth Triana Cruz



Espectro







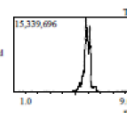


Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM  
 Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus

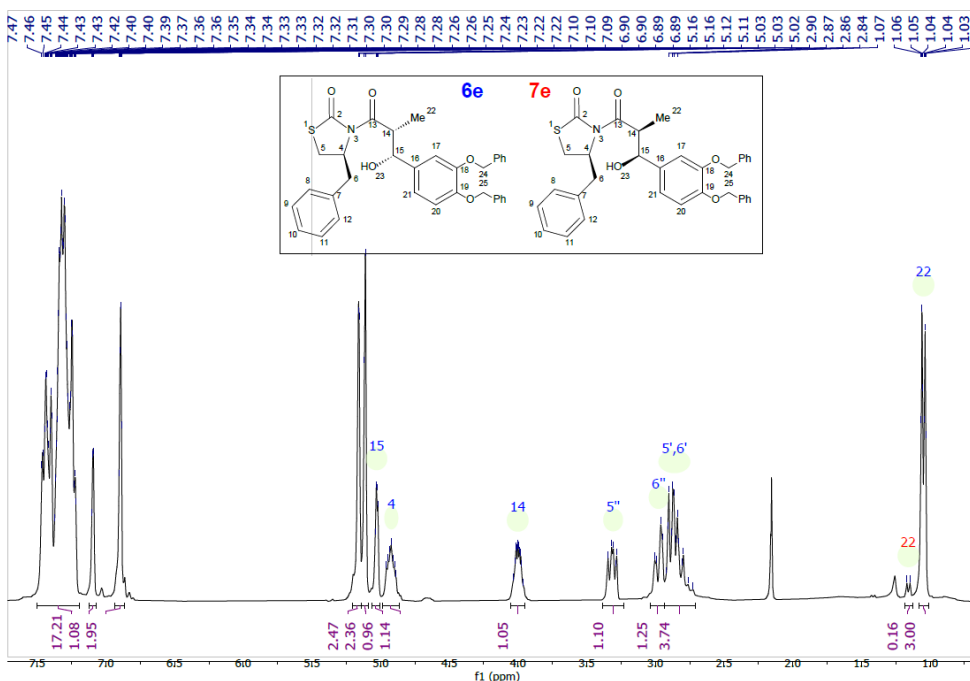
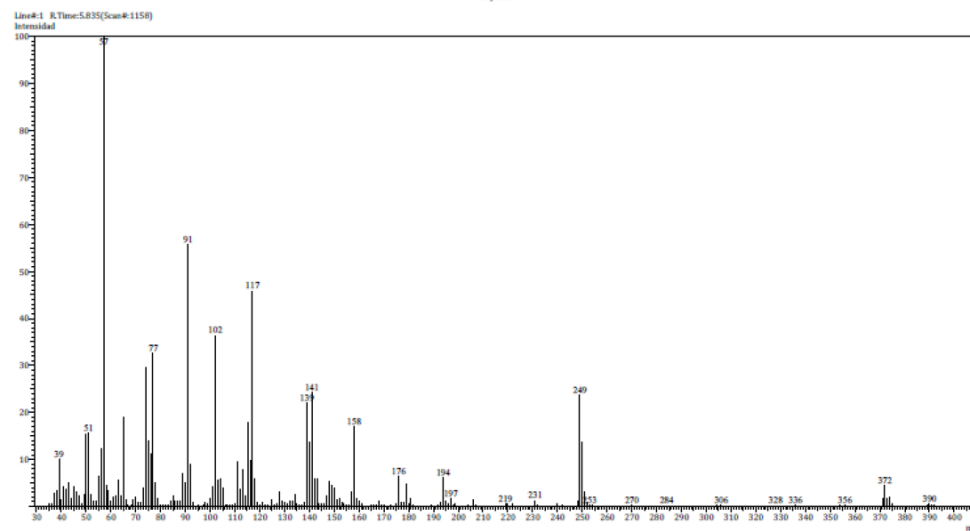


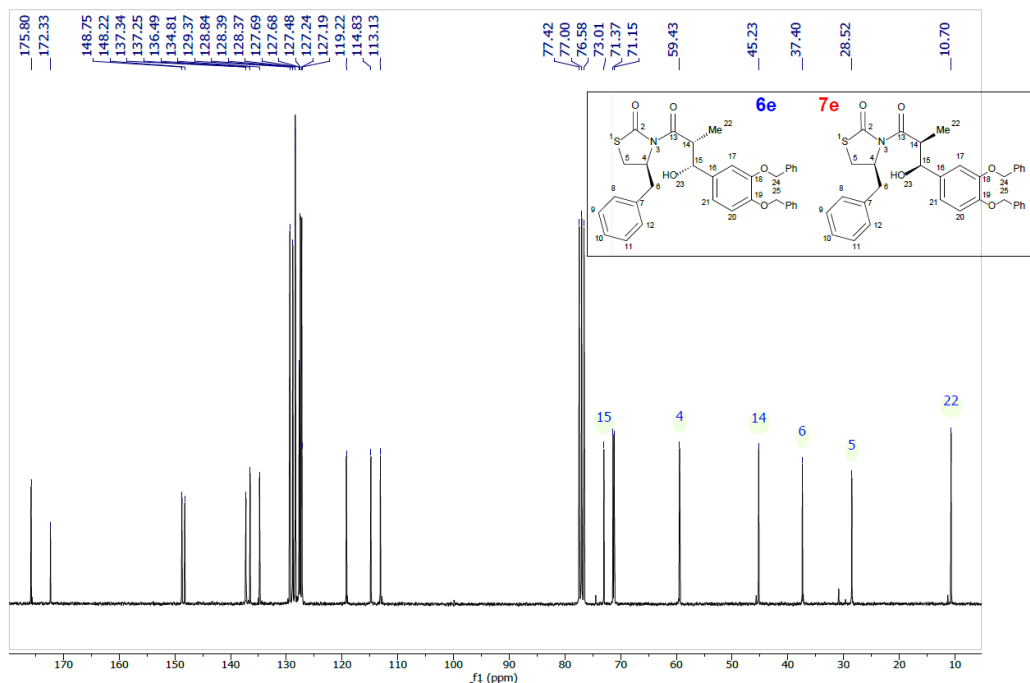
Información del Análisis

Fecha: 5/24/2017 3:24:48 PM Investigador: Dr. Moisés Romero O.  
 Número de registro: 2575 Data File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\Daive Mejía\2575\_LTCagad  
 Nombre de la muestra: DMMN-119-138 Method File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Métodos\DL\_E\_200PC-agg  
 Tipo de muestra: Sólido Tuning File: C:\GCMSolution\System\Tuner1\24052017-Ligt  
 Descripción de la muestra: C19H20O3NS, PM 309 g/mol, P.F. 176-178°C Analizado por: M. en C. Elizabeth Triana Cruz  
 Modo de inyección: DI  
 Modo de ionización: EI



Espectro





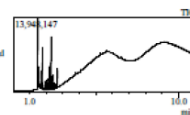
Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM

Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus

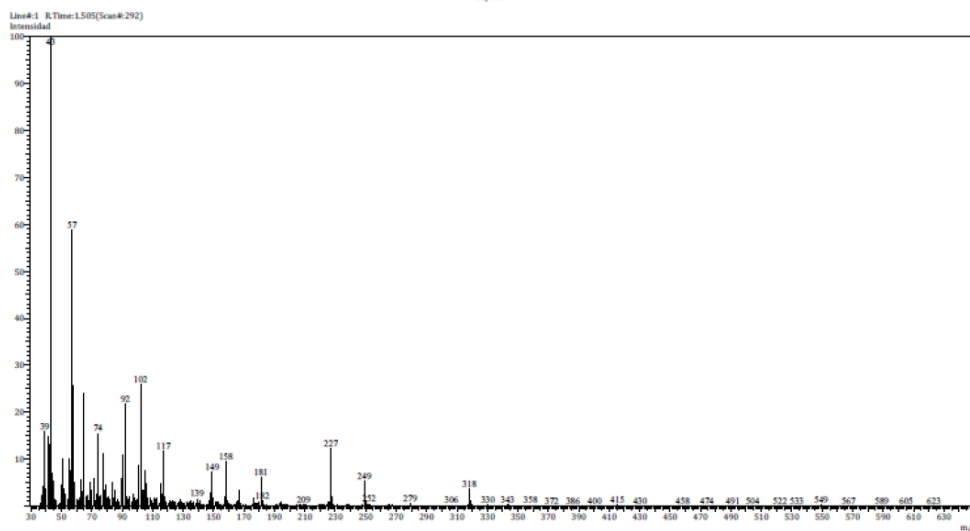


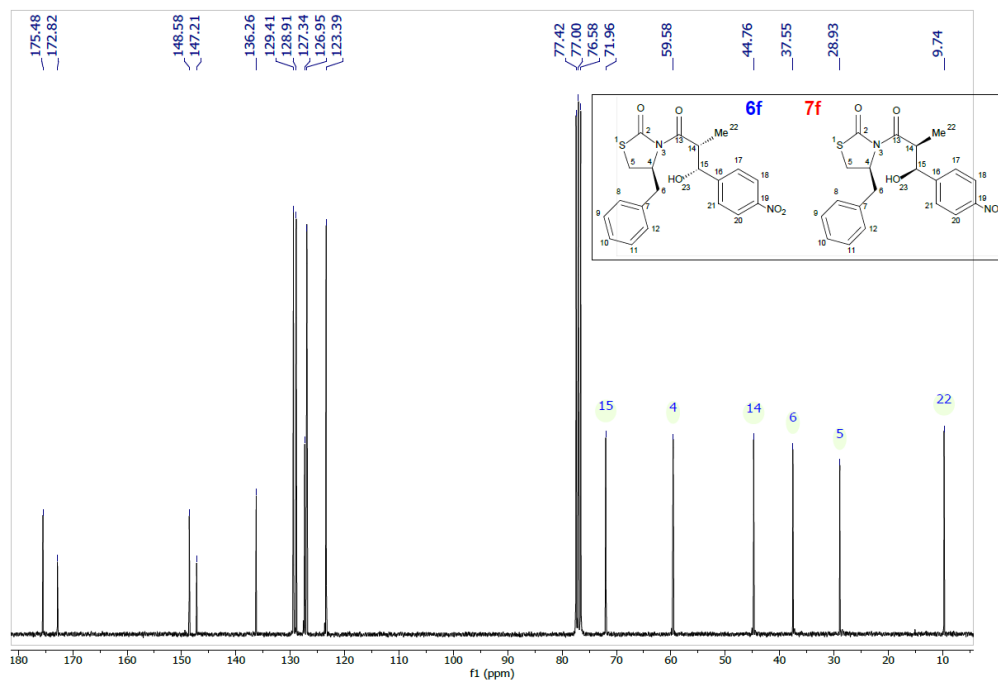
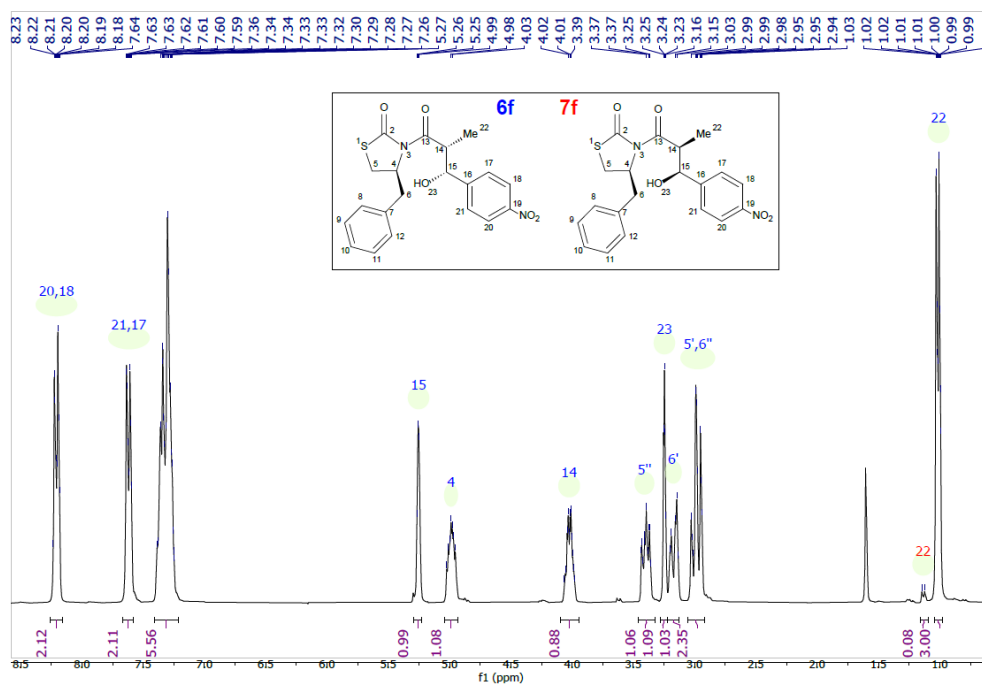
Información del Análisis

Fecha:	5/25/2017 9:19:59 AM	Investigador:	Dr. Moisés Romero
Número de registro:	2576	Data File:	C:\GCMSolution\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\Dulce Mejía\2576_LTC.qgd
Nombre de la muestra:	DMN-120-139	Method File:	C:\GCMSolution\Data\Project1\Métodos\DI_EI_250\Cagm
Tipo de muestra:	Líquido	Tuning File:	C:\GCMSolution\System\Tune1\25052017-Lagt
Descripción de la muestra:	C32H30SN4, PM 567 g/mol	Análisis por:	M. en C. Liebeth Triana Cruz
Modo de inyección:	DI		



Espectro





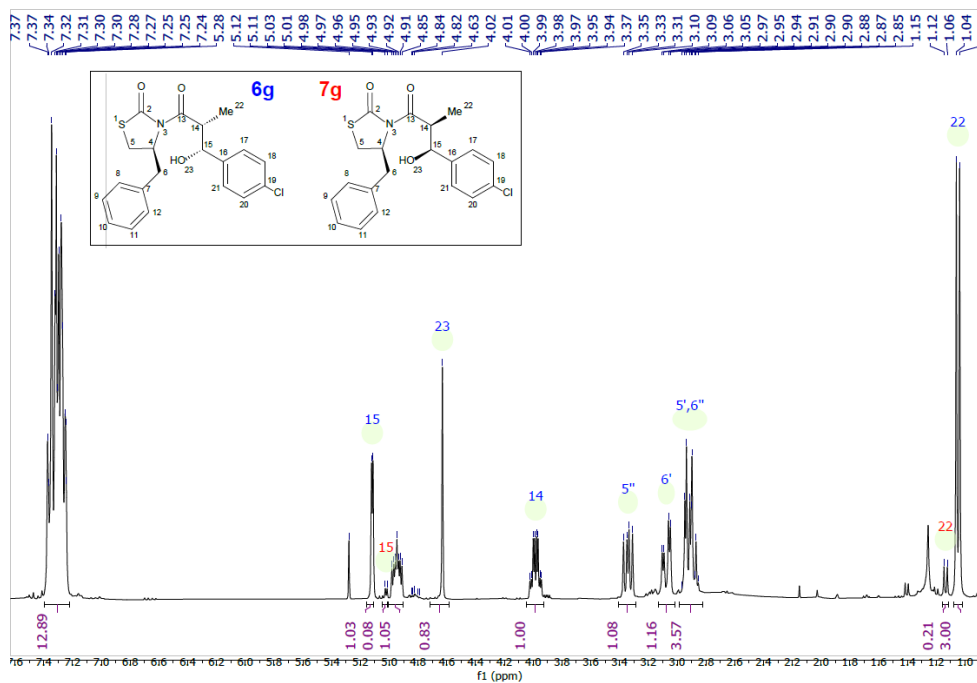
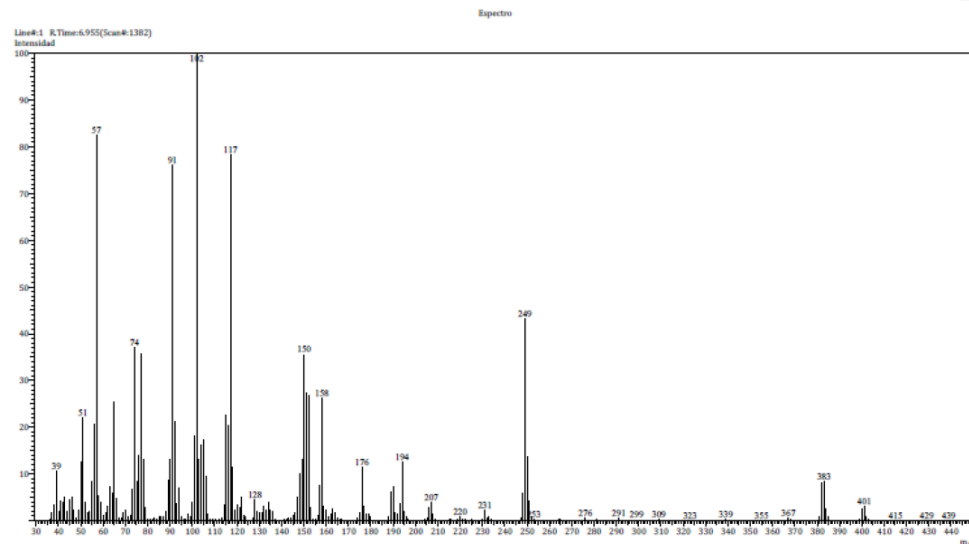
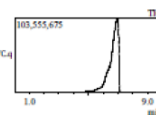


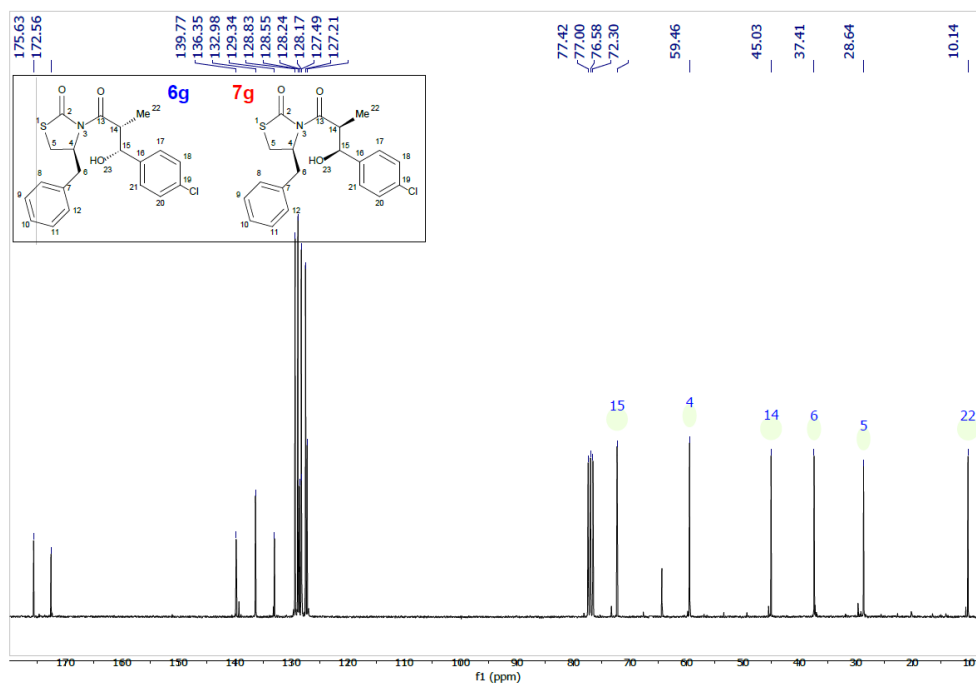
Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM  
 Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus



Información del Análisis

Fecha: 5/25/2017 11:11:37 AM Investigador: Dr. Moisés Romero-D.  
 Número de registro: 2578 Data File: C:\GCMS\analysis\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\Dalce Mejía\2578\_13TCa  
 Nombre de la muestra: DMMN-122-141 Method File: C:\GCMS\analysis\Data\Project1\Métodos\DL\_EI\_300°C.qm  
 Tipo de muestra: Sólido Tuning File: C:\GCMS\analysis\System\Tune1\25052017-Lgt  
 Descripción de la muestra: C19H19O5NS, PM 400 g/mol, FF:150-152°C Analizado por: M. en C. Lizabeth Triana Cruz  
 Modo de inyección: EI  
 Modo de ionización: EI





Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM

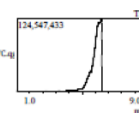
Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus

Información del Análisis

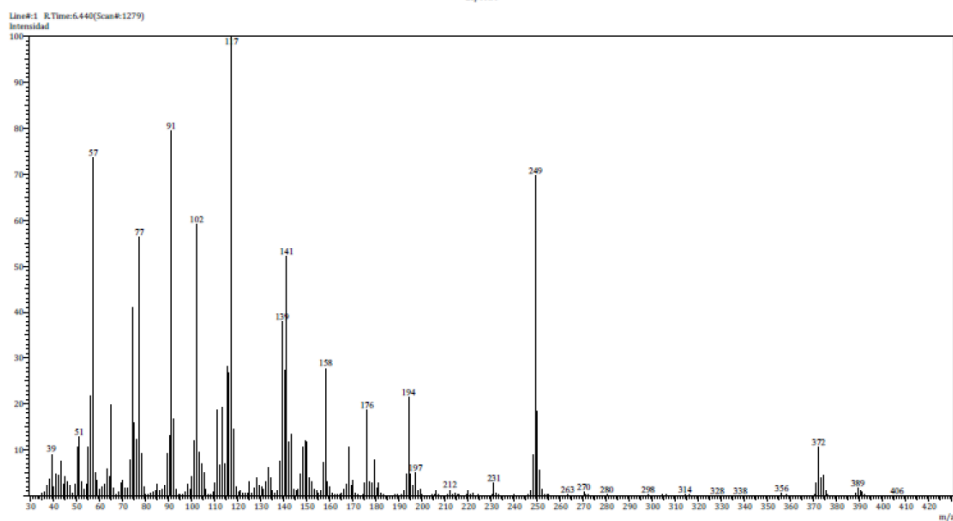


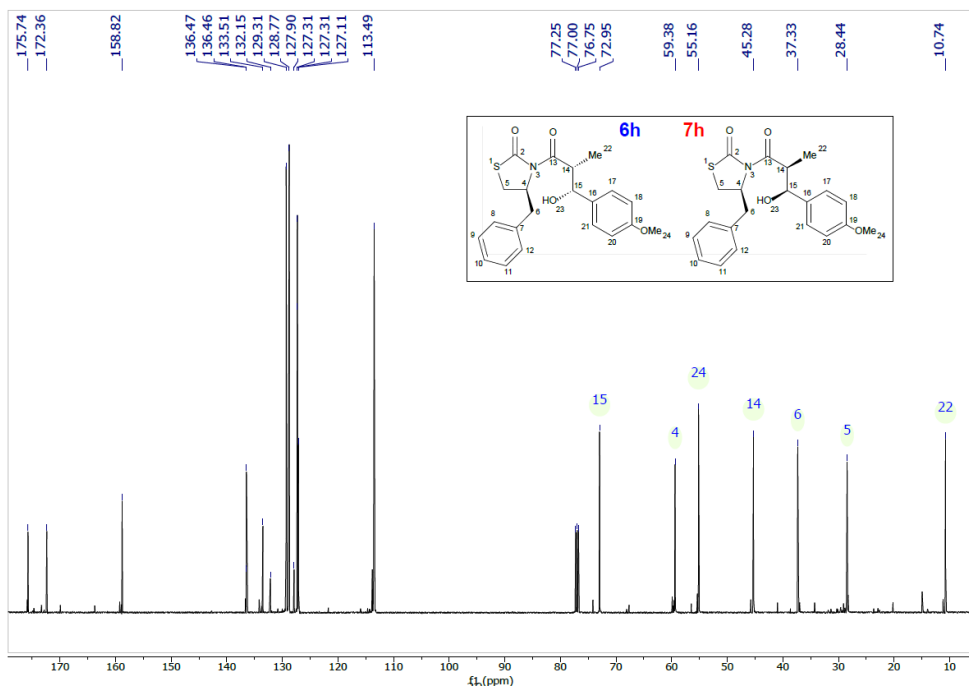
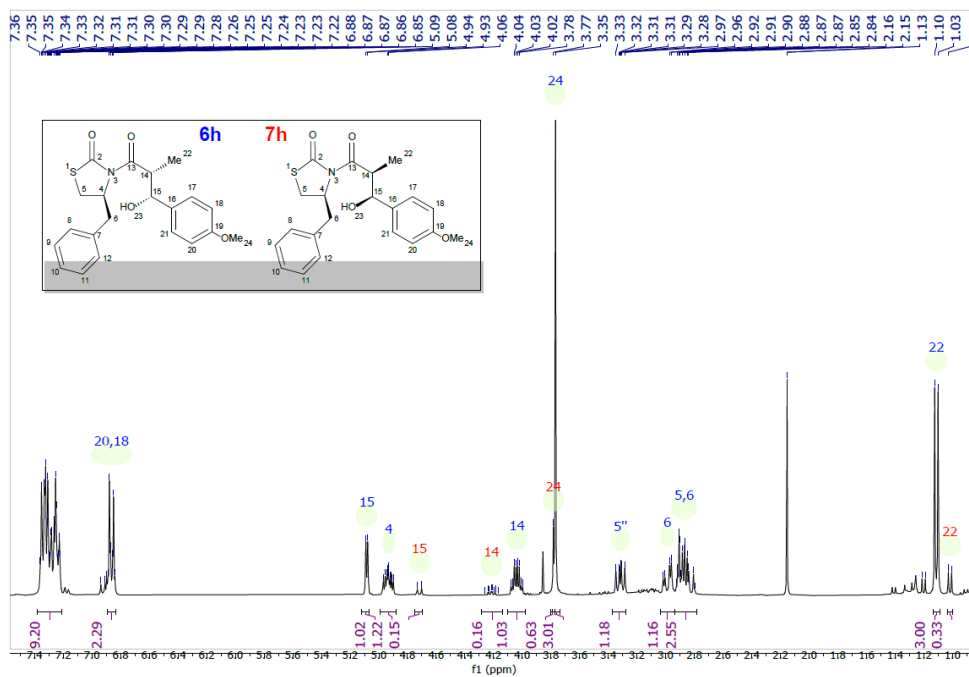
Fecha: 5/25/2017 1:34:59 PM  
 Número de registro: 2582  
 Nombre de la muestra: DMAM-126-147  
 Tipo de muestra: Sólido  
 Descripción de la muestra: C19R2003NSCL PM 389 g/mol, P.F. 124-126°C  
 Modo de inyección: EI  
 Modo de ionización: EI

Investigador: Dr. Moisés Romero O.  
 Data File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\Duca Mejía\2582\_1TC.g  
 Method File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Method\DI\_EI\_250°C.gsm  
 Tuning File: C:\GCMSolution\System\Tune1\_15052017\_1.gst  
 Analizado por: M. en C. Lizbeth Triana Cruz



Espectro





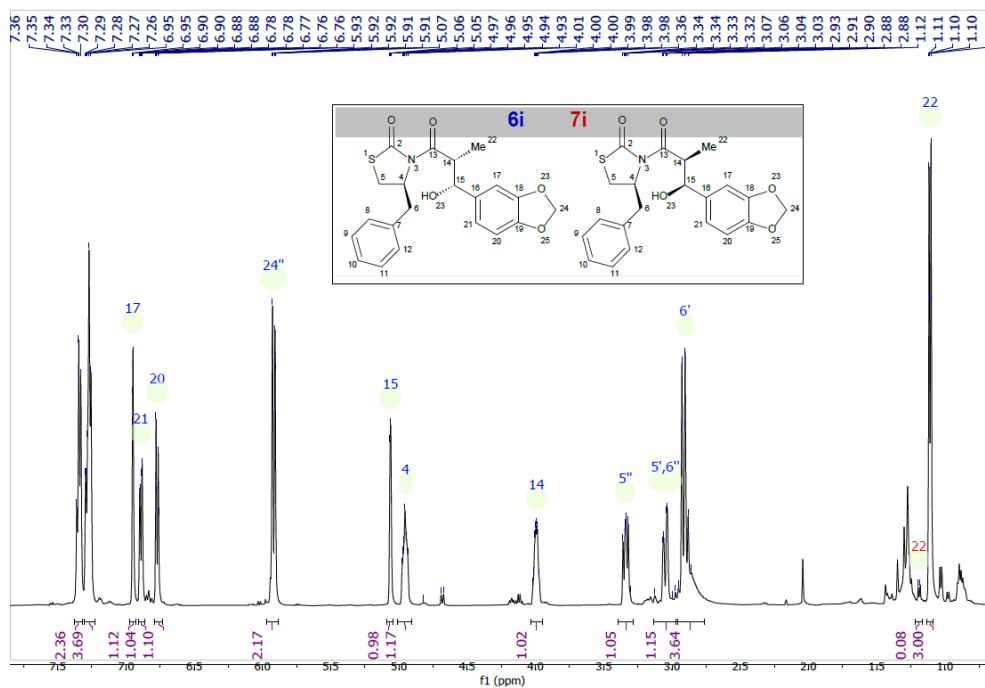
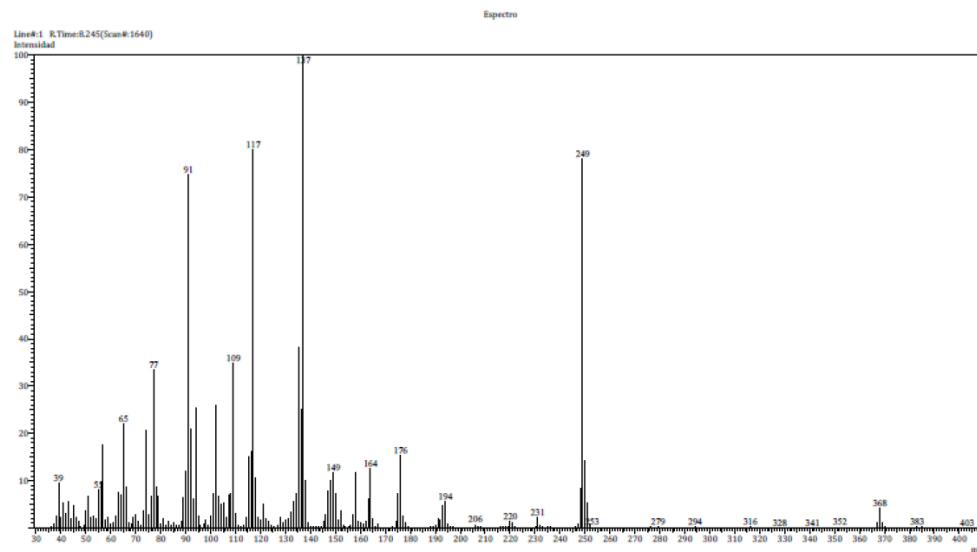
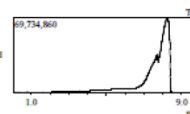


Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM  
 Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus

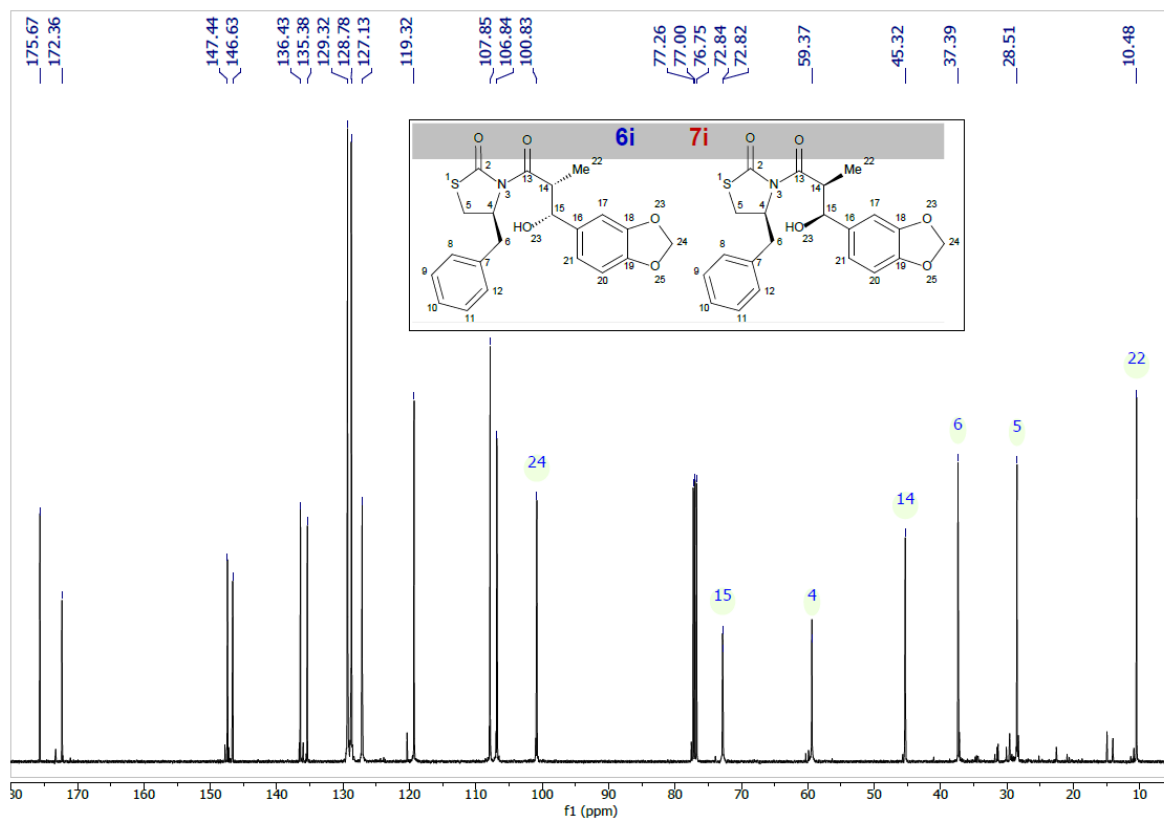


Información del Análisis

Fecha: 5/25/2017 12:32:24 PM Investigador: Dr. Moisés Romero O.  
 Número de registro: 25901 Data File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\Duice Mejía\2590\_1TC.qgd  
 Nombre de la muestra: DMMN-124-143 Method File: C:\GCMSolution\Data\Project1\Métodos\DU\_250C.qgd  
 Tipo de muestra: Líquido Description of the sample: C0802304NS, PM 375 µg/ml Tuning File: C:\GCMSolution\System1\Tune1\25952017-1.qgt  
 Descripción de la muestra: C0802304NS, PM 375 µg/ml Analizado por: M. en C. Lizabeth Triana Cruz  
 Modo de inyección: DI  
 Modo de ionización: EI





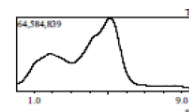


Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM  
 Laboratorio de Espectrometría de Masas  
 Shimadzu, GCMS-QP2010 Plus

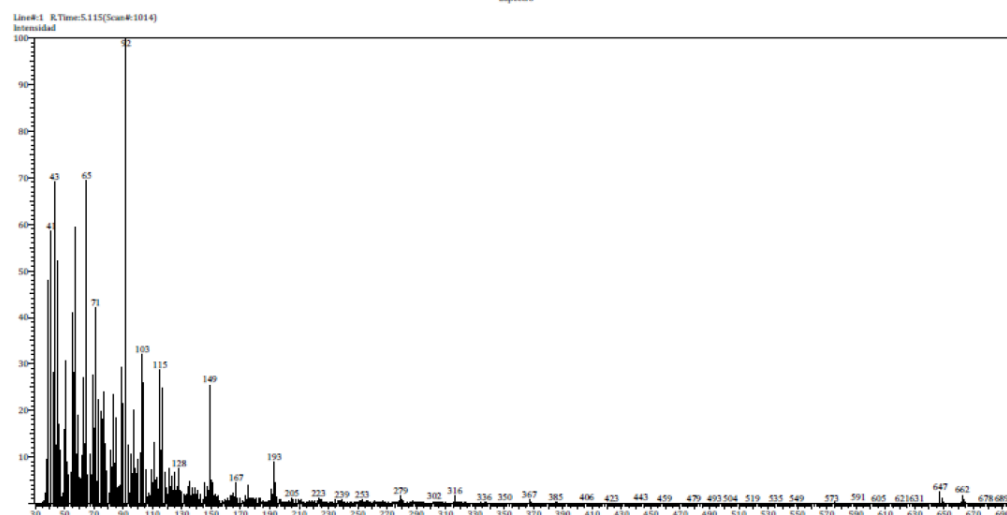


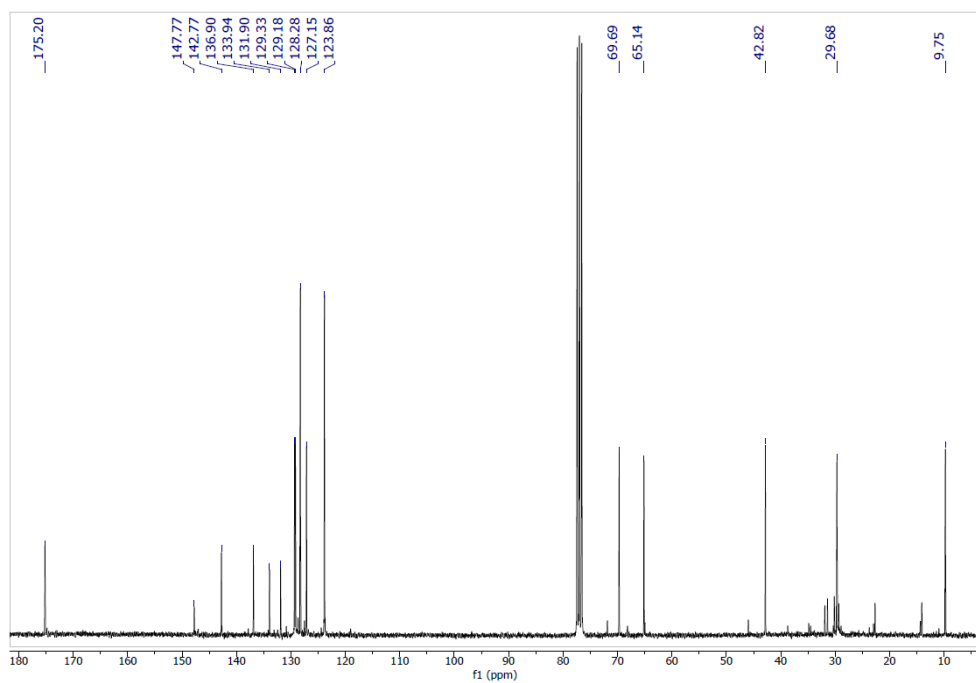
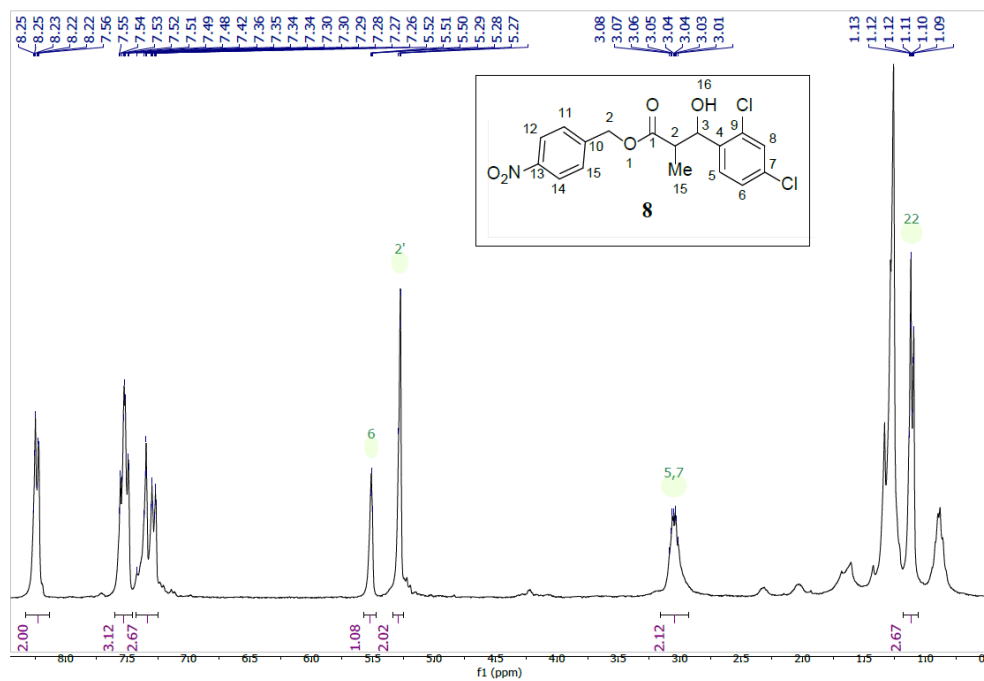
Información del Análisis

Fecha:	5/22/2017 8:03:41 AM	Investigador:	Dr. Moisés Romero O.
Número de registro:	2567	Data File:	C:\GCMSolution\Data\Project1\Espectrometría de Masas\Muestras Externas\Dr. Moisés Romero\2567_LTC.apd
Número de la muestra:	DMMS-151-148	Method File:	C:\GCMSolution\Data\Project1\Métodos\DL_EI_250°C.apm
Tipo de muestra:	Líquido	Tuning File:	C:\GCMSolution\System1\Tune1\20052017-Lgt
Descripción de la muestra:	C19H19OSNS, PM 373 g/mol	Analizado por:	M. en C. Lizabeth Triana Cruz
Modo de inyección:	DI		
Modo de ionización:	EI		



Espectro



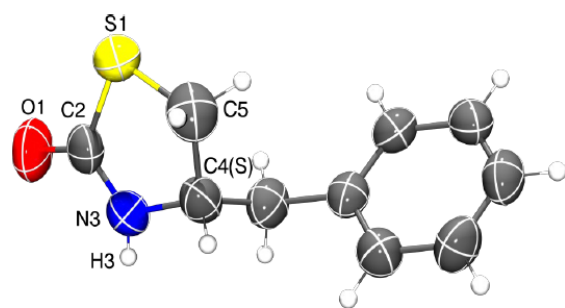


**X-Ray Data**

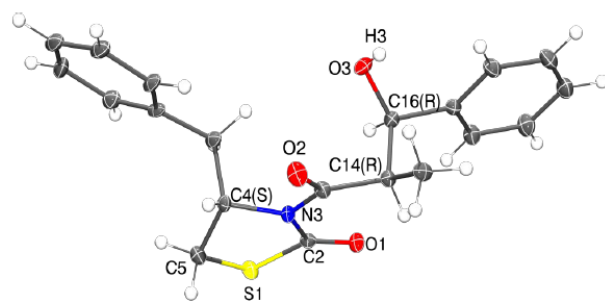
Identification code	mo_216rom14_0m_4	mo_178ROM17_0m_6a	cu_140ROM17_0m_6b	mo_273ROM16_0m_6c	mo_272ROM16_0m_6d	mo_275ROM16_0m_6f	136ROM17_6g
	4a	6a	6b	6c	6d	6f	6g
Empirical formula	C10 H11 N O S	C20 H21 N O3 S	C22 H25 N O5 S	C20 H19 Cl2 N O3 S	C20 H20 Cl N O3 S	C20 H20 N2 O5 S	C20 H20 Cl N O3 S
Formula weight	193.26	355.44	415.49	424.32	389.88	400.44	389.88
Temperature (K)	293(2)	100(2) K	100(2) K	100(2) K	100(2) K	100(2) K	100(2) K
Wavelength Å	0.71073	0.71073 Å	1.54178 Å	0.71073 Å	0.71073 Å	0.71073 Å	0.71073 Å
Crystal system	Orthorhombic	Monoclinic	Monoclinic	Monoclinic	Monoclinic	Orthorhombic	Orthorhombic
Space group	P212121	P21	P21	P21	P21	P212121	P21212
Unit cell dimensions a = Å	5.5498(3)	10.9442(10)	7.22990(10)	9.8146(2)	10.4978(2)	6.98980(10)	18.1093(4)
b = Å	7.6381(4)	7.7512(7)	25.4480(5)	7.8153(2)	8.6477(2)	14.3699(2)	8.5175(2)
c = Å	23.4350(14)	11.4475(11)	11.2565(2)	12.8894(3)	10.7352(2)	19.0942(3)	12.1366(2)
∠=°	90.	116.4377(15).	93.6254(11)	93.9823(4)	109.7581(4)°	90°.	90°.
Volume Å <sup>3</sup>	993.41(10)	869.54(14)	2066.90(6)	986.28(4)	917.19(3)	1917.87(5)	1872.02(7)
Z	4	2	4	2	2	4	4
Density (calculated) mg/m <sup>3</sup>	1.292	1.358	1.335	1.429	1.412	1.387	1.383
Absorption coefficient mm <sup>-1</sup>	0.284	0.205	1.675	0.456	0.342	0.204	0.335
F(000)	408	376	880	440	408	840	816
Crystal size mm	0.324 x 0.268 x 0.116	0.402 x 0.369 x 0.120	0.241 x 0.157 x 0.145	0.336 x 0.183 x 0.134	0.427 x 0.249 x 0.218	0.278 x 0.260 x 0.242	0.349 x 0.247 x 0.194

Theta range for data collection°	1.738 to 26.739.	1.987 to 33.084°.	3.473 to 70.065°.	2.080 to 27.501°.	2.016 to 27.438°.	1.774 to 27.501°.	1.678 to 27.497°.
Index ranges	-7<=h<=7, -9<=k<=9, -29<=l<=29	-16<=h<=16, -11<=k<=11, -17<=l<=17	-8<=h<=8, -31<=k<=30, -13<=l<=13	-12<=h<=12, -10<=k<=10, -16<=l<=16	-13<=h<=13, -11<=k<=11, -13<=l<=13	-9<=h<=9, -18<=k<=18, -24<=l<=19	-23<=h<=23, -11<=k<=11, -15<=l<=15
Reflections collected	11805	29878	25766	12801	13585	16496	55375
Independent reflections	2090 [R(int)=0.0163]	6606 [R(int)=0.0181]	7569 [R(int)=0.0282]	4518 [R(int)=0.0215]	4197 [R(int)=0.0212]	4391 [R(int)=0.0232]	4296 [R(int)=0.0277]
Completeness to theta = 25.242°	99.5 %	99.9 %	99.2 %	99.8 %	99.9 %	99.7 %	99.7 %
Data / restraints / parameters	2090 / 1 / 121	6606 / 438 / 288	7569 / 769 / 645	4518 / 2 / 248	4197 / 2 / 239	4391 / 1 / 257	4296 / 1 / 239
Goodness-of-fit on F2	1.039	1.085	1.049	1.048	1.045	1.055	1.103
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0383, wR2 = 0.1002	R1 = 0.0229, wR2 = 0.0616	R1 = 0.0284, wR2 = 0.0738	R1 = 0.0235, wR2 = 0.0592	R1 = 0.0227, wR2 = 0.0590	R1 = 0.0274, wR2 = 0.0709	R1 = 0.0242, wR2 = 0.0641
R indices (all data)	R1 = 0.0402, wR2 = 0.1020	R1 = 0.0237, wR2 = 0.0623	R1 = 0.0287, wR2 = 0.0741	R1 = 0.0243, wR2 = 0.0597	R1 = 0.0231, wR2 = 0.0593	R1 = 0.0288, wR2 = 0.0718	R1 = 0.0246, wR2 = 0.0644
Absolute structure parameter	0.053(17)	0.026(9)	0.005(4)	0.009(17)	0.039(15)	-0.03(2)	0.005(9)
Largest diff. peak and hole e.Å-3	0.311 and -0.248	0.338 and -0.155	0.329 and -0.251	0.284 and -0.155	0.261 and -0.147	0.232 and -0.167	0.354 and -0.394

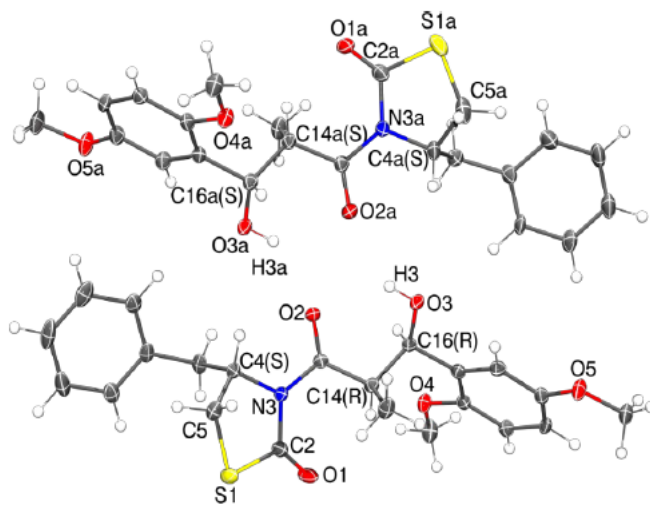
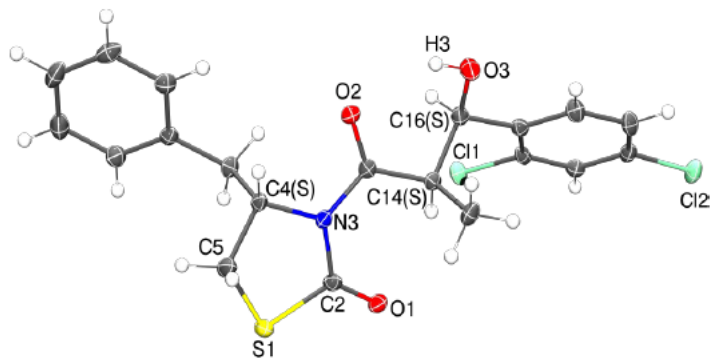
Absorption correction multi-scan, Refinement method Full-matrix least-squares on F

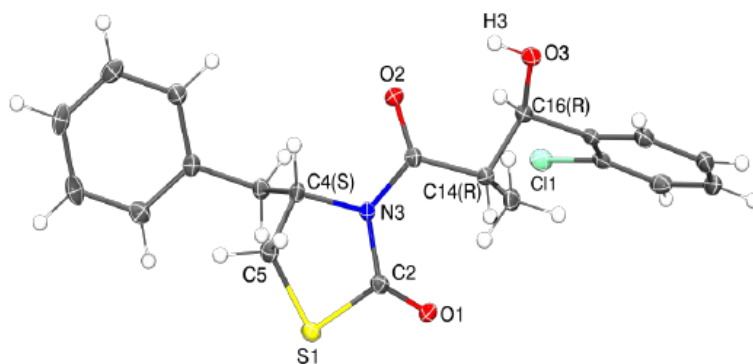
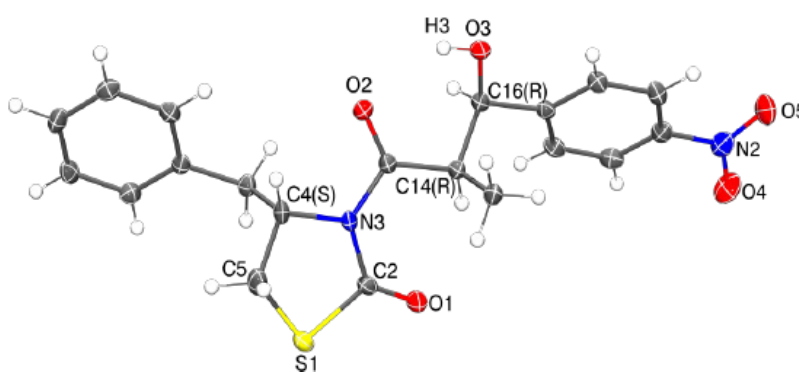
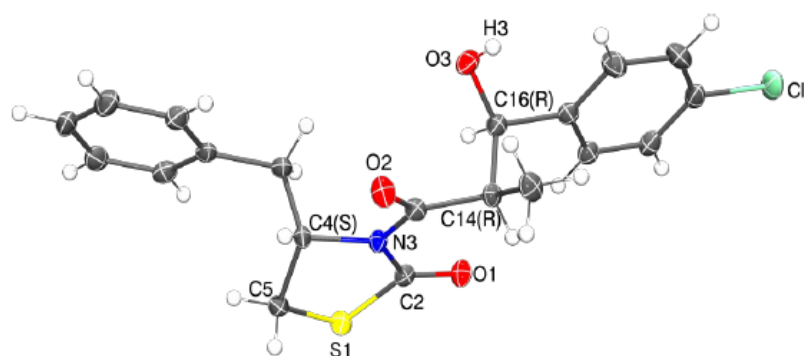


4a



6a

**6b and 7b****6c-**

**6d****6f-****6g**