

FULL PAPERS

手性噁唑硼烷催化 $\alpha$ -和 $\beta$ -氨基酮不对称还原反应立体选择性的AM1过渡态模型研究

樊建芬\*, 卢运祥, 王秋霞

苏州大学化学系, 苏州 215006

收稿日期 2004-5-11 修回日期 2005-1-15 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 基于AM1过渡态(TS)模型研究了(S)-4-苄基-5,5-二苯基-1,3,2-噁唑硼烷催化 $\alpha$ -和 $\beta$ -氨基酮的不对称还原反应。通过对反应立体控制步骤的反应坐标计算,得到了R和S型过渡态的优化构型及其焓和热焓等热力学参数,由此定量计算了最终产物的理论 $ee$ 值。结果表明在 $\alpha$ -氨基酮反应体系中最终产物绝对构型为S型,而在 $\beta$ -氨基酮体系中为R型,并且 $\beta$ -氨基酮最终产物的光学活性比 $\alpha$ -氨基酮好,

其根本原因是后者的不对称还原反应立体控制步骤中R和S过渡态的焓的差值较大。理论计算的产物手性及光学活性与实验结果相吻合。

**关键词** [AM1](#), [立体选择性](#),  [\$\alpha\$ -和 \$\beta\$ -氨基酮](#), [还原反应](#), [手性噁唑硼烷](#)

分类号

**AM1 Transition State Modeling for the Enantioselectivities in the Chiral Oxazaborolidine-Catalyzed Reductions of  $\alpha$ - and  $\beta$ -Aminoketones**

FAN Jian-Fen\*, LU Yun-Xiang, WANG Qiu-Xia, WU Li-Fen

Department of Chemistry, Suzhou University, Suzhou, Jiangsu 215006, China

**Abstract** AM1 transition state (TS) models were developed for the enantioselectivities in the reductions of  $\alpha$ - and  $\beta$ -aminoketones catalyzed by (S)-4-benzyl-5,5-diphenyl-1,3,2-oxazaborolidine. The result showed that  $\beta$ -amino- ketone gave better enantioselectivity than its  $\alpha$ -analog. Different chiralities of the final products were obtained, R for the former and S for the latter. These semiempirical TS models are consistent with the experimental data.

**Key words** [AM1](#) [enantioselectivity](#)  [\$\alpha\$ - and  \$\beta\$ -aminoketones](#) [reduction](#) [chiral oxazaborolidine](#)

DOI:

通讯作者 樊建芬 [jffan9802@sina.com](mailto:jffan9802@sina.com)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(OKB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ 本刊中 包含“[AM1,立体选择性, \$\alpha\$ -和 \$\beta\$ -氨基酮,还原反应,手性噁唑硼烷](#)”的 [相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [樊建芬](#)

· [卢运祥](#)

· [王秋霞](#)