

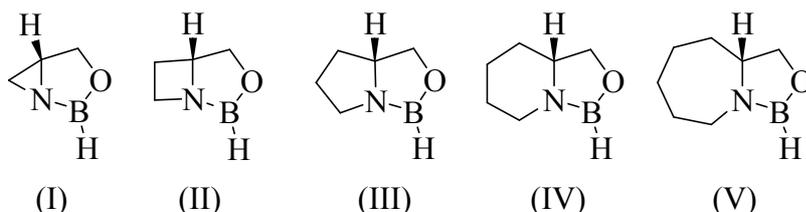
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ N-КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ БИЦИКЛИЧЕСКИХ 1,3,2-ОКСАЗАБОРОЛИДИНОВ С БОРАНОМ

Кушко А.О., Танин В.О., Шамота Т.В., Т.Е. Шубина

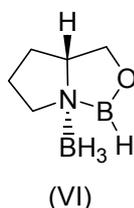
Национальный технический университет Украины "Киевский политехнический институт"
kushko@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Среди гомогенных катализаторов, которые получили широкое распространение в практике асимметрического синтеза, 1,3,2-оксазаборолитины занимают достойное место [1]. Предложенный ранее Кори и сотр. CBS-катализатор оказался исключительно эффективным для реакций асимметрического восстановления прохиральных кетонов. Такая активность катализатора во многом связана с наличием бициклической системы фрагмента пролина.

В рамках настоящей работы нами было исследовано влияние соседнего к оксазаборолитиновому цикла на энергетику и стереохимию комплексообразования с молекулой борана. В качестве модельных систем был выбран ряд бициклических 1,3,2-оксазаборолитинов (I)-(V), производные которых ранее использовались в качестве катализаторов реакции асимметрического восстановления [2].



Известно, что первой стадией реакции восстановления кетонов является комплексообразование с молекулой борана, приводящее к соответствующему стереоизомерному аддукту. При этом теоретически возможно образование *top*- и *bottom*-комплексов, которые в дальнейшем, образуя новые аддукты с кетоном, дают соответствующие стереоизомерные спирты в определенном соотношении. Исследование методом DFT (в базе B3LYP/6-31G*) показывает, что только для соединения (III) возможно образование единственного *bottom*-аддукта (VI).



Для всех представленных структур рассчитаны энергии образования и геометрия молекул. Показана возможность взаимодействия атомов бора в гетероцикле и связанного в комплекс борана с образованием мостиковых систем.



1. В.А. Глушков, А.Г. Толстикова, Успехи химии, **2004**, 73, 6, 632-661.
2. E.J. Corey, C.J. Helal, Angew. Chem. Int. Ed. **1998**, 37, 1986-2012.