

キラルなバナジウム触媒を用いた酸化的 1,2-トリフルオロメチル化反応の理論的研究

(国立精華大学¹・茨大院理工²・茨城大学フロンティア応用原子科学研究センター³) ○藤井 稜馬²・Bang-You Tsai¹・Tsung-Cheng Chen¹・Chien-I Lein¹・Yu-Chang Chang¹・Pin-Xuan Tseng¹・Chin-Wei Chuang¹・Rachit Agarwal¹・Chan-Wei Hsu¹・Chien-Tien Chen¹・森 聖治^{2,3}

Theoretical Investigation of 1,2-Oxidative Trifluoromethylation of Olefins Catalyzed by Vanadyl Complexes (¹Department of Chemistry, National Tsing Hua University, ²Institute of Quantum Beam Science, Ibaraki University, ³Frontier Research Center for Applied Atomic Sciences) ○Ryoma Fujii², Bang-You Tsai¹, Tsung-Cheng Chen¹, Chien-I Lein¹, Yu-Chang Chang¹, Pin-Xuan Tseng¹, Chin-Wei Chuang¹, Rachit Agarwal¹, Chan-Wei Hsu¹, Chien-Tien Chen¹, Seiji Mori^{2,3}

In 2021, Chen and co-workers developed asymmetric three-component, 1,2-oxytrifluoromethylation of styrenes with *N*-hydroxy-1,3-benzo-oxazine by chiral vanadyl(V) complexes derived from *N*-salicylidene-*L*-*t*-leucinate. In this study, we performed density functional theory (DFT) computations for the purpose of elucidating the reaction mechanisms and enantioselectivities. These DFT results suggest that the substituent at the C3 position of the vanadyl catalyst has a great effect on the enantioselectivity.

Keywords : DFT calculations, Vanadium

国立精華大学の Chen らによってキラルなバナジル触媒を用いた、*N*-ヒドロキシ-1,3-ベンゾオキサジンによるスチレンの不斉炭素を含む三成分における酸化的 1,2-トリフルオロメチル化反応が開発された。この反応機構やエナンチオ選択性を解明することを目的として、本研究では密度汎関数法を用いた計算をおこなった。バナジル触媒の C3 位の置換基が選択性に大きく影響を与えることが計算結果より示唆された。

