Тематический раздел: Кинетика и катализ. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Органическая химия. *Регистрационный код публикации:* 11-27-13-1
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
Поступила в редакцию 7 апреля 2010 г. УДК 541.127: 547.466.23.

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 1.

Реакционная способность α-аланина в аренсульфонилировании в водно-органических средах: кинетический эксперимент и моделирование маршрута реакции

© Кустова Татьяна Петровна,[1]*+ **Кочетова Людмила Борисовна**[1]
и **Калинина Наталья Владимировна**[2]
[1] *Кафедра органической и биологической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: kustova_t@mail.ru*
[2] *Кафедра неорганической и аналитической химии. Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия. Тел.: (84932) 37-37-03.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *кинетика, аренсульфонилирование, α-аланин, 3-нитробензолсульфонилхлорид, вода – 1,4-диоксан, вода – 2-пропанол, квантово-химические расчеты, механизм реакции.*

Аннотация

На основе экспериментального исследования кинетики реакции *D,L-α*-аланина с 3-нитробензолсульфонилхлоридом в системах вода – 2-пропанол и вода – 1,4-диоксан переменного состава в политермических условиях определены активационные параметры процесса и сделаны выводы о влиянии состава растворителя на его скорость. Проведено квантовохимическое моделирование маршрута данной реакции в условиях образования моно-, ди- и тригидратов аланина. Показано, что на энергетический профиль реакции существенное влияние оказывает специфическая сольватация аланина молекулами воды.