

Тематический раздел: Квантово-химические исследования.  
Подраздел: Органическая химия.

**Полная исследовательская публикация**

Регистрационный код публикации: 13-35-9-1

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>  
Поступила в редакцию 5 июня 2013 г. УДК 544.43.

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 4.

## **Квантово-химическое моделирование механизма взаимодействия бензоилхлорида и бензолсульфонилхлорида с аминсоединениями разных классов**

© Кочетова<sup>1</sup> Людмила Борисовна, Пайкова<sup>1</sup> Мария Геннадьевна,  
Калинина<sup>2</sup> Наталья Владимировна и Кустова<sup>1\*+</sup> Татьяна Петровна

<sup>1</sup> 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](mailto:kustova_t@mail.ru)

<sup>2</sup> 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:** ацилирование, аминсоединения, бензоилхлорид, бензолсульфонилхлорид, квантово-химические расчеты, механизм реакции, поверхность потенциальной энергии.

### **Аннотация**

Рассчитаны поверхности потенциальной энергии реакций аммиака и ряда аминсоединений с бензоилхлоридом и бензолсульфонилхлоридом в газовой фазе, а также взаимодействия аммиака с хлористым бензоилом в воде в рамках континуальной модели растворителя. Показано, что все реакции протекают по согласованному механизму, при этом бензоилирование идет по маршруту с фронтальной атакой нуклеофила, тогда как арилсульфонилирование – по пути с изменяющимся углом атаки. Неспецифическая сольватация водой снижает энергию активации ацилирования аммиака по сравнению с газовой реакцией.