

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 6.

Квантово-химическая интерпретация реакционной способности дипептидов и аминокислот в процессах образования амидов и сульфамидов кислот

© Кочетова¹ Людмила Борисовна, Калинина² Наталья Владимировна,
Кустова^{1*+} Татьяна Петровна и Курицын² Лев Викторович

¹ Кафедра органической и физической 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: ацилирование, аминокислоты, дипептиды, бензоилхлорид, сульфонилхлориды, эфиры бензойной кислоты, квантово-химические расчеты, механизм реакции, поверхность потенциальной энергии.

Аннотация

Неэмпирическими методами проведено квантово-химическое моделирование анионов аминокислот и дипептидов, а также хлорангидридов бензойной, сульфобензойной, 3-нитро-, 4-метилсульфобензойных кислот и нитрозамещенных фениловых эфиров бензойной кислоты. Установлено, что индексами реакционной способности нуклеофилов в *N*-ацилировании могут служить величины зарядов на атомах азота; реакционная способность ацилирующих агентов связана с энергиями НСМО их молекул. Рассчитана ППЭ реакции глицина с 4-метилбензолсульфонилхлоридом в газовой фазе, показано, что реакция протекает по S_N2 механизму.