

Тематическое направление: Кинетика и механизм реакций ацильного переноса. Часть 10.

Реакционная способность дипептидов и эфиров карбоновых кислот при их взаимодействии в водных растворах 1,4-диоксана

© Кочетова¹ Людмила Борисовна, Калинина² Наталья Владимировна,
Грабчилева² Юлия Эдуардовна, Симонова² Ксения Александровна
и Кустова^{1*+} Татьяна Петровна

¹ Кафедра органической и физической химии; ² Кафедра неорганической и аналитической химии
Ивановский государственный университет. Ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Россия.
Тел.: (84932) 37-37-03. E-mail: kustova_t@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ацилирование, дипептиды, сложные эфиры, вода-диоксан, специфическая сольватация, квантово-химическое моделирование.

Аннотация

Исследовано влияния состава бинарной системы вода-1,4-диоксан и строения сложных эфиров на кинетику реакций глицил-глицина и *L*- α -аланил-*L*- α -аланина с 4-нитрофенилацетатом и активированными нитрогруппой фенилбензоатами. Показано, что рост констант скорости при увеличении доли воды в растворителе связан со специфической сольватацией дипептидов. Кинетические данные сопоставлены с результатами квантово-химического моделирования молекул реагентов. Установлено, что дескрипторами реакционной способности при ацилировании дипептидов могут служить константы Гаммета, pK_a уходящей группы и орбитальные характеристики молекул эфиров.