

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**

© Кочетова<sup>1</sup> Людмила Борисовна, Калинина<sup>2</sup> Наталья Владимировна,  
Грабчилева<sup>2</sup> Юлия Эдуардовна, Симонова<sup>2</sup> Ксения Александровна  
и Кустова<sup>1\*+</sup> Татьяна Петровна

<sup>1</sup> Кафедра органической и физической химии; <sup>2</sup> 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](mailto: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*- $\alpha$ -аланил-*L*- $\alpha$ -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.