Тематический раздел: Квантово-химические исследования. *Подраздел:* Органическая химия. Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 13-36-12-97

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/Поступила в редакцию 4 декабря 2013 г. УДК 544.43.

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

© Кочетова 1 Людмила Борисовна, Калинина 2 Наталья Владимировна, Кустова 1* Татьяна Петровна и Курицын 2 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 амино-кислот и дипептидов, а также хлорангидридов бензойной, сульфобензойной, 3-нитро-, 4-метил-сульфобензойных 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 $S_N 2$ механизму.