

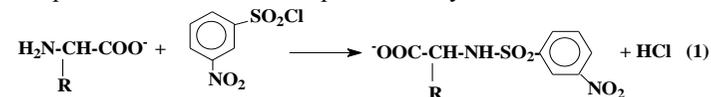
АРЕНСУЛЬФОНИЛИРОВАНИЕ АМИНОВ ХЛОРАНГИДРИДАМИ АРОМАТИЧЕСКИХ СУЛЬФОНОВЫХ КИСЛОТ: КИНЕТИЧЕСКИЙ ЭКСПЕРИМЕНТ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Паришина О.В., Таратанова А.В., Вихрева Е.М.

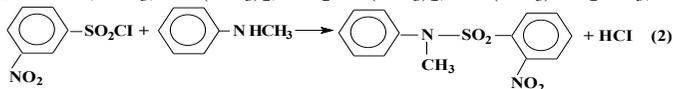
Ивановский государственный университет

Интерес к аренсульфонилрованию аминов разных классов (ароматических, жирноароматических, аминокислот и др.) вызван широким использованием продуктов этих реакций в фармацевтических целях, а также для получения полупродуктов и красителей.

Нами изучены кинетические закономерности реакций 3-нитробензолсульфонилхлорида с неполярными алифатическими α -аминокислотами (глицином, аланином, валином, лейцином и изолейцином) (1) и N-метиланилином (2) в системе вода–1,4-диоксан с различным содержанием воды в политермических условиях.



где R = H, CH₃, CH(CH₃)₂, CH₂CH(CH₃)₂, CH(CH₃)CH₂CH₃;



Кинетику реакции (1) изучали спектрофотометрическим методом, реакции (2) – кондуктометрическим. Установили, что с ростом доли воды в бинарном растворителе константы скоростей изученных реакций изменяются по-разному: уменьшаются в случае реакции (I) и увеличиваются в реакции (II).

С использованием пакета HyperChem 7.52[®] проведено квантово-химическое моделирование механизма газовой фазы взаимодействия простейшего представителя класса α -аминокислот – глицина с бензолсульфонилхлоридом. Методом MNDO/PM3 рассчитаны двухмерные потенциальные кривые для трех возможных направлений атаки молекулы глицина на сульфонилхлоридную группу (фронтального, аксиального и тылового), фрагмент трехмерной потенциальной поверхности реакции, а также характеристики переходного состояния реакции. Установлено, что наиболее вероятное направление атаки глицина – фронтальное, изучаемая реакция протекает по классическому S_N2 механизму.

Работа выполнена в рамках проекта РНП.2.2.1.1.7181 Министерства образования и науки РФ.

Исследования проведены под руководством к.х.н., доц. Кустовой Т.П. и к.х.н., доц. Кочетовой Л.Б.