

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ЭПИМЕРИЗАЦИИ ДИМЕТИЛОВЫХ ЭФИРОВ N-ФТАЛОИЛ-4-ГАЛОГЕНГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ.

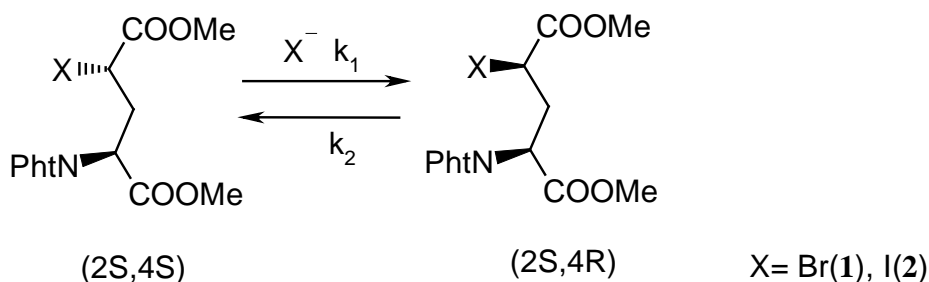
Вигоров А.Ю.^а, Иванов А.Г.^б, Кумков С.И.^б, Краснов В.П.^а

а. Институт органического синтеза УрО РАН. 620219, Екатеринбург, ГСП-147, ул.С.Ковалевской, 20, e-mail: ca@ios.uran.ru.

б. Институт математики и механики УрО РАН. 620219, Екатеринбург, ГСП-384, ул.С.Ковалевской, 16, e-mail: iagsoft@imm.uran.ru

Стереизомерный состав продуктов нуклеофильного замещения галогена в 4-галогенпроизводных глутаминовой кислоты существенно зависит от скоростей взаимного превращения стереоизомеров исходных соединений.

Целью настоящей работы являлось определение констант скоростей эпимеризации диметилловых эфиров (2S)-N-фталойл-4-бром- и 4-йод-глутаминовых кислот (1, 2) при 68 °С в присутствии катализаторов, солей производных анилина (начальная концентрация эпимеров 0,0325 М). Текущие концентрации реагентов определяли методом ВЭЖХ. Результаты представлены в таблице.



Соединение	Растворитель	Катализатор, конц., моль %	k_1 , л/(моль×сек)	k_2 , л/(моль×сек)
1	MeCN	о-толуидин × HBr, 2	0,283	0,328
1	EtOH	п-аминофенол × HBr, 5	0,0041	0,0050
2	MeCN	п-анизидин × HI, 2	1,14	1,21
2	EtOH	п-анизидин × HI, 5	0,0486	0,0487

Найденные значения были использованы для расчета констант реакции нуклеофильного замещения в стереоизомерах соединений 1 и 2 производными анилина методом информационных множеств с использованием многопроцессорной вычислительной техники.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, гранты № 00-15-97390, 00-01-00348 и 99-07-90441.