

Наименование НИР: Кинетическое и квантово-химическое исследование реакционной способности химически и электрохимически генерируемых радикалов, анион-радикалов и анионов в элементарных жидкофазных реакциях с органическими соединениями.

Заказчик, программа: Министерство образования и науки РФ, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России»

Номер: П2272

Внутренний шифр: 816-г/к

Сроки выполнения: 2009 – 2011 г.г.

Коды ГРНТИ: 31.15.15, 31.15.27, 31.15.33, 31.21.17, 31.21.18, 31.25.00

Место выполнения: НОЦ «Физическая органическая химия»

Руководитель

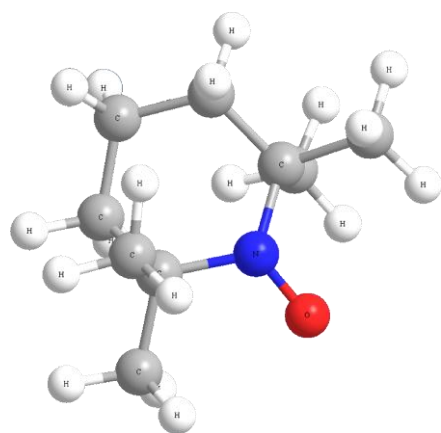
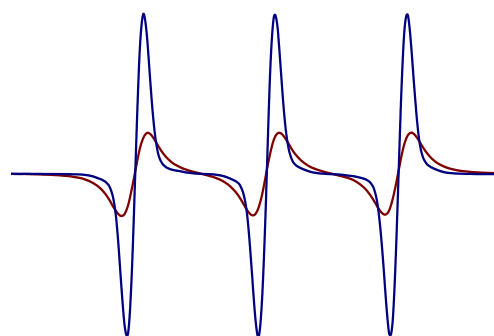


Плисс Евгений Моисеевич,, профессор, д.х.н.

Аннотация НИР:

Целью выполнения НИР является разработка теоретических концепций и моделей, позволяющих предсказывать направление и скорость реакций восстановления, димеризации, нуклеофильного замещения, радикального отрыва и присоединения с участием радикалов, анион-радикалов и анионов.

Использование в данной работе широкого спектра методов исследования позволяет не только изучать кинетику и механизм исследуемых реакций, но и выявлять влияние компонентов среды на протекание ключевых стадий. На основании полученных данных разрабатываются новые подходы для расчетов индексов реакционной способности, позволяющих на основании параметров электронной структуры лабильных промежуточных частиц предсказывать направление и скорость реакций с их участием. Создание теоретических моделей реакций радикалов, анион-радикалов и анионов будет способствовать развитию методов направленного синтеза с участием электронодонорных агентов (восстановление, нуклеофильное замещение и др.), которые представляют значительный практический интерес при создании сырьевого базиса современных технологий. В области радикально-цепных реакций наличие такой модели может позволить решить ряд практических вопросов химической технологии, в том числе проблему стабилизации полимеризационноспособных веществ в процессах синтеза, хранения и переработки изделия.



Получен экспериментальный массив кинетических и термодинамических параметров, позволяющих описывать детальный механизм процесса. Разработана оригинальная методика применения ЭПР-спектроскопии для исследования кинетики реакций стабильных нитроксильных радикалов в процессе окисления непредельных соединений в органической и водной фазах и оригинальная методическая база определения антиоксидантной активности полифенолов и стабильных нитроксильных радикалов при окислении органических субстратов в растворах и мицеллах. Экспериментальный массив кинетических параметров элементарных процессов получен и для реакций антиоксидантов в окисляющихся непредельных и насыщенных соединениях в среде растворителей разной полярности. Представлены модели реакций анион-радикалов и дианионов

изомерных динитробензолов.

Результаты НИР представлены в 2010 г. на XXII Симпозиуме «Современная химическая физика», VIII Международной конференции «Биоантиоксидант» и опубликованы в European Journal of Lipid Science and Technology и Башкирском химическом журнале.