

<p>Наименование НИР: Квантово-химический анализ и экспериментальное исследование детального механизма радикально-цепных процессов неингибированного и ингибированного окисления непредельных и насыщенных полифункциональных органических соединений.</p>		<p>Руководитель</p>  <p>Плисс Евгений Моисеевич, проф., д.х.н.</p>
<p>Заказчик, программа: Рособразование, Ведомственная Программа «Развитие научного потенциала высшей школы».</p>		
<p>Номер: РНП.2.1.1.677</p>	<p>Внутренний шифр: НП-425</p>	
<p>Сроки выполнения: 2006-2008г.г.</p>	<p>Коды ГРНТИ: 31.21.15</p>	
<p>Место выполнения: лаборатория физико-химических исследований кафедры общей и биоорганической химии, факультет биологии и экологии</p>		
<p>Аннотация НИР:</p> <p>Целями НИР явились:</p> <ul style="list-style-type: none"> – сравнительный анализ существующих концепций реакционной способности частиц в реакциях радикального отрыва и присоединения; – систематическое исследование детального механизма неингибированного и ингибированного окисления органических соединений разных классов; – получение массива кинетических и термодинамических параметров элементарных реакций изучаемых процессов; – квантово-химический и корреляционный анализ реакционной способности углерод- и кислородцентрированных радикалов и органических соединений разных классов в реакциях радикального присоединения и отрыва атома водорода от С-Н-связей. <p>В ходе выполнения НИР были получены следующие результаты:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Разработан научно-методический подход к исследованию полярных эффектов в реакциях окисления непредельных соединений. – Получены количественные закономерности, отражающие зависимость константы скорости присоединения низкомолекулярных пероксирадикалов к двойной связи от полярности среды. – Сформулированы теоретические основы влияния электростатических эффектов на механизм элементарного акта распада гидропероксидов. Проведено сравнение экспериментальных результатов с квантово-химическими расчетами и продемонстрировано их логическое соответствие. – Получены корреляционные зависимости, связывающие константу скорости ингибирования с параметрами, описывающими сольватационные эффекты. – Предложены методики определения параметров антиоксидантной активности стабильных нитроксильных радикалов в реакциях с пероксидными радикалами непредельных соединений и определения данных параметров с учетом реакции нитроксильных радикалов с алкильными радикалами. – Предложена модель реакции нитроксильного и пероксидного радикала. В рамках модели показано, что характер их взаимодействия зависит от структуры пероксирадикала. – Проведен анализ специфики реакций ингибиторов класса полифенолов в органической фазе и водных растворах. Сформулированы рекомендации по исследованию антиоксидантной активности в биологических системах. 		