

Наименование НИР: Термодинамика и кинетика элементарных гомолитических и гетеролитических реакций стабильных и лабильных радикалов и анион-радикалов в химических, электрохимических и биохимических процессах.		<p style="text-align: center;">Руководитель</p>  <p style="text-align: center;">Русаков Александр Ильич, ректор, д.х.н.</p>
Заказчик, программа: Министерство образования и науки РФ, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России»		
Номер: 02.740.11.0636	Внутренний шифр: 834-г/к	
Сроки выполнения: 2010 – 2012 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»		

Аннотация НИР:

Радикалы, анион-радикалы и анионы являются ключевыми интермедиатами многочисленных химических и электрохимических процессов, в том числе реакций восстановления, димеризации, нуклеофильного замещения, радикального отрыва и присоединения. Особая роль этим частицам принадлежит в биологических процессах, в частности, в защите живого организма от биологического старения. Разработка теоретических концепций и моделей, позволяющих предсказывать направление и скорость реакций с участием этих частиц, невозможна без исследования термодинамики и кинетики протекающих процессов. Поэтому исследование, направленное на получение массива термодинамических и кинетических данных, установление механизма исследуемых процессов в данных направлениях является актуальной задачей.

Целью выполнения НИР является создание теоретических моделей гомолитических и гетеролитических реакций стабильных и лабильных радикалов и анион-радикалов в химических, электрохимических и биохимических процессах на основании кинетических и термодинамических параметров.

На первом этапе выполнения проекта проведено составление плана проведения экспериментальных и теоретических исследований и осуществлен выбор объектов и методов исследования. Проведен анализ современных моделей и основных дескрипторов реакционной способности, описывающих кинетику и термодинамику образования анион-радикалов и дианионов органических соединений. Изучена кинетика и установлен механизм реакций димеризации и протонирования анион-радикалов и дианионов модельных карбонильных и нитросоединений апротонных и протонных средах. Проведена модернизация программного обеспечения вычислительного кластера. На втором этапе проанализированы технологические решения стабилизации полимеризационноспособных соединений. Разработана методика экспериментального исследования радикально инициированной полимеризации винильных мономеров в анаэробных условиях и условиях насыщения воздухом в присутствии ингибиторов разных классов. Представлены кинетическая схема и модель радикально инициированной полимеризации винильных мономеров в анаэробных условиях и условиях насыщения воздухом в присутствии ингибиторов разных классов. Проведено квантово-химическое моделирование динамики распада молекул углеводов, моделирующих звенья полимерной цепи.

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.

