

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:

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 третьем этапе выполнения проекта получен экспериментальный массив кинетических и термодинамических параметров элементарных стадий неингибированного окисления непредельных соединений в среде органических растворителей и водной фазе. Разработана методология экспериментального исследования кинетики реакций стабильных нитроксильных радикалов в режиме конкуренции реакций окисления и полимеризации. Установлены закономерности влияния специфической и неспецифической сольватации на кинетику и механизм реакций ингибированного окисления полярных субстратов. Проведено исследование окисления непредельных соединений в режиме конкуренции реакций радикального отрыва и присоединения в органической и водной фазе, как моделей перекисного окисления липидов. Проведено исследование региоселективности и кинетики реакций восстановления и нуклеофильного замещения в ароматических системах. Осуществлен препаративный синтез с целью идентификации продуктов протонирования анион-радикалов и дианионов нитросоединений для сопоставления с результатами кинетических исследований и квантово-химических расчетов ППЭ соответствующих реакций.

На четвертом этапе выполнения проекта проведен анализ полярных эффектов в реакциях присоединения пероксидных радикалов к двойной связи непредельных соединений в среде растворителей разной полярности. Разработаны теоретические модели реакций протонирования анион-радикалов и дианионов модельных нитросоединений в неводной среде. Проведено численное моделирование электрохимических процессов образования и приэлектродных реакций анион-радикалов и дианионов нитросоединений с целью определения их термодинамических и кинетических параметров электроаналитическими методами (циклическая вольтамперометрия и хроноамперометрия). Создана модель протекания процесса нуклеофильного замещения водорода для набора субстратов и реагентов на основании данных по региоселективности и кинетическим закономерностям взаимодействия электрондефицитных аренов (нитро- и цианосоединений) с карбанионами арилацетонитрилов.

Результаты НИР представлены в 2011 г. на V Международной конференции «Современные проблемы физической химии» (Донецк, сентябрь 2011), XXIII Симпозиуме «Современная химическая физика» (Туапсе, сентябрь 2011) и опубликованы в *Mendelev Communications*, *International Journal of Electrochemistry* и Башкирском химическом журнале.