

<p><b>Наименование НИР:</b> Квантово-химический анализ и экспериментальное исследование детального механизма радикально-цепных процессов неингибированного и ингибированного окисления непредельных и насыщенных полифункциональных органических соединений.</p>		<p><b>Руководитель</b></p>  <p><b>Плисс Евгений Моисеевич, проф., д.х.н.</b></p>
<p><b>Заказчик, программа:</b> Рособразование, Ведомственная Программа «Развитие научного потенциала высшей школы».</p>		
<p><b>Номер:</b> РНП.2.1.1.677</p>	<p><b>Внутренний шифр:</b> НП-425</p>	
<p><b>Сроки выполнения:</b> 2006-2008г.г.</p>	<p><b>Коды ГРНТИ:</b> 31.21.15</p>	
<p><b>Место выполнения:</b> лаборатория физико-химических исследований кафедры общей и биоорганической химии, факультет биологии и экологии</p>		
<p><b>Аннотация НИР:</b></p> <p>Цель работы – систематическое исследование детального механизма неингибированного и ингибированного окисления органических соединений разных классов.</p> <p>Исследование кинетических закономерностей окисления транс-дифенилэтилена и транс,транс-1,4-дифенилбутадиена-1,3 в среде растворителей разной полярности позволило выдвинуть концепцию, что определяющим фактором реакционной способности гидропероксидного радикала является неспецифическая сольватация переходного состояния реакции присоединения к двойной связи.</p> <p>Разработана методология комплексного исследования механизма термического распада инициатора на радикалы в среде винильных мономеров в анаэробных условиях и в присутствии кислорода.</p> <p>Предложена концепция конкуренции активности <math>\pi</math>- и <math>\alpha</math>-СН-связей бициклоолефинов норборненового ряда в реакциях с пероксидными радикалами. С привлечением квантово-химических расчетов предложена модель механизма образования и распада пероксидных соединений в окисляющихся бициклоолефинах норборненового ряда.</p> <p>Квантово-химическими расчетами подтверждены экспериментальные данные, свидетельствующие о том, что гидропероксиды за счет водородных связей могут образовывать различные виды ассоциатов (димеры, тримеры, полимеры). Проведен квантово-химический анализ самоассоциации гидропероксидов различного строения и установлены закономерности процесса.</p> <p>Впервые обнаружено, что в отличие от известных литературных данных, нитроксильные радикалы реагируют не только с алкильными, но и с пероксидными радикалами. Этот вывод подтвержден компьютерным моделированием и термодинамическими расчетами. На основании теоретических экспериментальных результатов предложена концепция механизма ингибирования органических соединений стабильными нитроксильными радикалами.</p> <p>Осуществлен сбор данных по элементарным радикальным реакциям, изученным в рамках данного проекта (2006 - 2007 г.г.). Данные подготовлены в затабулированном виде (38 таблиц). Этот массив послужит основой для создания базы данных для изучаемых реакций.</p>		