


Наименование НИР: Теоретическое и экспериментальное исследование роли полярных эффектов в цепных реакциях лабильных и стабильных радикалов в конденсированной фазе.		<p style="text-align: center;">Руководитель</p>  <p style="text-align: center;">Плисс Евгений Моисеевич, профессор, д.х.н.</p>
Заказчик, программа: Министерство образования и науки РФ, Тематический план НИР вуза.		
Номер: 1.04.10	Внутренний шифр: ЗН-539	
Сроки выполнения: 2010г.	Коды ГРНТИ: 31.25.27, 31.25.18	
Место выполнения: НОЦ «Физическая органическая химия»		

Аннотация НИР:

Выяснение влияния среды на кинетику и механизм химических реакций имеет фундаментальное значение для теории реакционной способности. Взаимодействие реагирующих частиц с молекулами субстрата и растворителя изменяет их электронные характеристики и, следовательно, их активность в элементарном акте. Комплексообразование может влиять на доступность реакционного центра, создавая стерические затруднения, с другой стороны, целый ряд жидкофазных реакций невозможен без образования реакционноспособных комплексов. Таким образом, полярные эффекты зачастую оказывают решающее влияние на кинетику и механизм процесса. Здесь необходимо отметить, что под термином «полярные эффекты» следует понимать не только специфическую и неспецифическую сольватацию, но и взаимодействие полярных групп в переходном состоянии.

Изучение эффектов среды имеет и ярко выраженную практическую направленность, так как позволяет на основании соответствующих теоретических моделей осуществлять научно обоснованный выбор растворителей для интенсификации технологических процессов.

Целью выполнения проекта явилась разработка теоретических основ и практических аспектов роли полярных эффектов в цепных реакциях лабильных и стабильных радикалов в конденсированной фазе.

Разработана методология оценки сольватационных эффектов в реакциях окисления винильных соединений и создана методика оценки реакционной способности ключевых промежуточных частиц (алкильных, оксильных и пероксильных радикалов) в жидкофазных радикально-цепных реакциях. Полученные кинетические параметры элементарных стадий проанализированы по уравнению Кирквуда-Онзагера и в рамках концепции мультидипольного эффекта. Это позволило разделить эффекты специфической и неспецифической сольватации в реакциях неингибированного и ингибированного окисления винильных соединений. Модернизирована классическая методика интерпретации экспериментальных данных по реакционной способности антиоксидантов. Проведен кинетический анализ конкуренции реакций алкильных, оксильных и пероксильных радикалов с С–Н и □-связями функциональных органических соединений и получены корреляционные параметры реакционной способности этих частиц в реакциях радикального присоединения и замещения.

Таким образом, получены принципиально новые результаты о роли полярных эффектов в механизме элементарных реакций радикалов в жидкой фазе.

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.