

Радикально-цепное окисление 1,4-диоксана в присутствии 2,3-дигидро-2-тиоксо-4(1H)-пиримидинона

© Якупова^{1*+} Люция Рифгатовна, Сафарова² Дилара Илгизовна, Мурзагулова² Эндже Ильдусовна и Сафиуллин¹ Рустам Лутфуллович

¹ Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук. Пр-т Октября, 71. г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан.

Российская Федерация. Факс: (347) 235 6066. E-mail: jkipova@anrb.ru

² Кафедра технической химии и материаловедения. Инженерный факультет. Башкирский государственный университет. ул. Мингажева, 100. г. Уфа, 450078. Республика Башкортостан.

Российская Федерация. Тел.: (347) 228-62-55. E-mail: safarova.dilara.93@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: радикально-цепное окисление, 1,4-диоксан, константа скорости ингибирования, 2,3-дигидро-2-тиоксо-4(1H)-пиримидинон.

Аннотация

В модельной системе радикально-цепного окисления 1,4-диоксана изучены антиокислительные свойства 2,3-дигидро-2-тиоксо-4(1H)-пиримидинона (ТУ) и 6-амино-2,3-дигидро-2-тиоксо-4(1H)-пиримидинона (ТАУ). Окисление проводили кислородом воздуха, в качестве инициатора использован водорастворимый 2,2'-азобис(2-метилпропионамидин) дигидрохлорид. Рассмотрено влияние воды на антиокислительную активность ТУ и ТАУ. За кинетикой реакции следили по скорости поглощения кислорода при помощи манометрической дифференциальной установки. Показано, что оба соединения ингибируют радикально-цепное окисление 1,4-диоксана. В системе, содержащей воду, для ТАУ измерена константа скорости его взаимодействия с пероксильным радикалом 1,4-диоксана $k_7 = (8.9 \pm 1.3) \cdot 10^4 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Полученный результат ниже значения константы скорости, измеренной в среде 1,4-диоксана в отсутствие воды. Предположено, что снижение реакционной способности 6-амино-2,3-дигидро-2-тиоксо-4(1H)-пиримидинона может быть связано с образованием межмолекулярных водородных связей. Для 6-амино-2,3-дигидро-2-тиоксо-4(1H)-пиримидинона стехиометрический коэффициент ингибирования, рассчитанный из значения индукционного периода, составил $f = (0.6 \pm 0.1)$. В системе, содержащей воду, проведена оценка эффективной антирадикальной активности ТУ: $f k_7 \approx 1.4 \cdot 10^4 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Установлено, что наличие атома серы и аминогруппы в 6 положении в молекулы повышает антиокислительную активность соединения.