

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Физико-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/18-56-12-30 Подраздел: Органическая химия.
Цифровой идентификатор объекта – <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/18-56-12-30>
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 544.421 : 542.978 : 547.854.4. Поступила в редакцию 14 ноября 2018 г.

Количественный анализ антирадикальной активности антиоксидантов на примере модельной реакции инициированного радикально-цепного окисления 1,4-диоксана

© Якупова*⁺ Люция Рифгатовна, Сафарова Дилара Ильгизовна,

Насибуллина Ригина Анатольевна и Сафиуллин Рустам Лутфуллович

Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук. Лаборатория химической кинетики. Пр-т Октября, 71.

г. Уфа, 450054. Республика Башкортостан. Российская Федерация.

Факс: (347) 235-60-66. E-mail: [jkupova@anrb.ru](mailto:jakupova@anrb.ru)

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: радикально-цепное окисление, константа скорости ингибирования, стехиометрический коэффициент ингибирования, 5-амино-6-метилурацил, 1,4-диоксан.

Аннотация

В настоящей работе на примере ингибированного радикально-цепного окисления органического соединения показаны способы нахождения количественных параметров, характеризующих антиоксидант. Этими параметрами являются константа скорости реакции пероксильного радикала с ингибитором (k_7) и стехиометрический коэффициент ингибирования (f). Приводятся примеры математического анализа экспериментальной кинетической кривой поглощения кислорода, полученной в ходе инициированного радикально-цепного окисления 1,4-диоксана. Для определения константы скорости (k_7) пероксильного радикала с молекулой ингибитора использованы: экспериментальные (полулогарифмический метод обработки кинетической кривой, метод трансформации кинетической кривой, определение эффективной константы скорости реакции пероксильного радикала с ингибитором по начальной скорости окисления) и теоретический метод пересекающихся парабол. Экспериментальным путем находится константа скорости пероксильного радикала с ингибитором полулогарифмическим методом.

Важным параметром, характеризующим ингибитор, является стехиометрический коэффициент ингибирования. Он численно равен количеству пероксильных радикалов, гибнущих на одной молекуле ингибитора. Для его определения необходимо измерить индукционный период и воспользоваться уравнением $f = \tau W_i / [InH]$. Здесь τ – период индукции. Для определения длины индукционного периода может быть применен метод касательных к кинетической кривой. Зачастую бывает трудно определить начальную скорость ингибированного окисления. В этом случае для измерения τ удобно воспользоваться интегральным методом, а также графическим методом, когда находят точку пересечения двух касательных, тангенсы угла наклона которых составляют 0.5 и 0.75 от тангенса угла наклона прямой неингибированного окисления. Также оценку f можно провести и при применении метода трансформации кинетической кривой.

В работе показано, что методы определения k_7 и τ хорошо согласуются между собой.