

Азот и серосодержащие гетероциклы – потенциальные антиокислительные присадки в минеральных и синтетических маслах

© Кошелев* Владимир Николаевич, Примерова⁺ Ольга Вячеславовна
и Ступникова Анна Сергеевна

Кафедра органической химии и химии нефти. РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина. Ленинский пр-т, 65, корп.1. г. Москва, 119991. Тел: +7 (499) 507-81-11. E-mail: primerova92@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: антиокислители, перехватчик радикалов, гетероциклы, минеральные масла, синтетические масла, смазочные материалы.

Аннотация

В данном обзоре обобщены литературные и собственные данные о структуре *N,S*-содержащих гетероциклов, способных улучшать термоокислительную стабильность синтетических и минеральных масел, опубликованные за последние 20 лет. Соединения этого ряда предлагаются в качестве перспективных присадок к маслам: антиокислительных или полифункциональных, обладающими антиокислительным действием, способными заменить диалкилдитиофосфат цинка. Среди азотсодержащих гетероциклов, проявляющих антиокислительные свойства, найдены производные 1,2,4-, 1,2,3-триазола, имидазола, бензимидазола, бензотриазола, триазина. Среди серосодержащих гетероциклов – перспективных антиокислителей найдены производные тиadiaзола, тиазолидина, тиазолон, тиазола, бензотиазола. Обсуждается классификация и механизм действия антиокислителей в зависимости от их структуры: способность прерывать процессы, проходящие с участием свободных радикалов, разлагать гидропероксиды, дезактивировать каталитическое действие металлов в процессе окисления. Анализируется влияние структуры антиокислителей на механизм их действия и эффективность. Приводятся примеры перспективных антиокислителей, способных действовать по нескольким механизмам, которые включают в своей структуре фенольный или аминный фрагмент и гетероцикл. Выявлены основные направления в разработке антиокислителей данного типа. Проанализированы наиболее эффективные подходы к прогнозированию антиокислительных свойств сложных молекул методами компьютерной химии, в том числе расчет энергии гомолитического разрыва связи ArO-H в фенолах или ArN-H в аминах, анализ структуры переходного состояния и расчет энергетического барьера реакции антиокислителя с алкилпероксирадикалами. Приведены примеры использования метода QSPR (Quantitative Structure-Activity Relationship), а также методов молекулярной динамики с целью анализа и предсказания антиокислительных свойств соединений.