

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра радиационной химии и химико-фармацевтических технологий

УРБАНОВИЧ Ольга Витальевна

**Радиационно-индуцированная дегидратация пропандиола-1,2 и
бутандиолов-1,2 и -2,3 в деаэрированных водных растворах**

Магистерская диссертация
специальность 1-31 80 06 «Химия»

Научный руководитель:
кандидат химических наук
Р. Л. Сverdлов

Допущена к защите

«__» _____ 2021 г.

Зав. кафедрой радиационной химии и
химико-фармацевтических технологий
доктор химических наук, профессор
О. И. Шадыро

Минск, 2021

РЕФЕРАТ

Объём дипломной работы: 63 страницы, 33 рисунка, 12 таблиц, 57 источников.

Ключевые слова: радиоллиз; свободные радикалы; свободнорадикальная фрагментация; свободнорадикальная деструкция; короткоцепной процесс; вицинальные диолы; пропандиол-1,2, бутандиол-1,2; бутандиол-2,3.

Цель работы: на примере пропандиола-1,2, бутандиола-1,2 и бутандиола-2,3 установить влияние положения вицинальных гидроксильных групп на устойчивость гидроксилсодержащих органических молекул к свободнорадикальной фрагментации.

В рамках работы была исследована устойчивость α -диолов к свободнорадикальной фрагментации в деаэрированных водных растворах, в том числе в дейтерированной воде, при pH 7, определены состав и радиационно-химические выходы продуктов их превращений.

Было показано, что α -диолы с терминальным расположением гидроксильных групп (пропандиол-1,2 и бутандиол-1,2) обладают меньшей радиационной стойкостью, чем α -диол с нетерминальным расположением гидроксильных групп (бутандиол-2,3). Предложена схема короткоцепного процесса радиационно-индуцированной дегидратации пропандиола-1,2 и бутандиола-1,2, в которой ключевую роль в продолжении цепи выполняет реакционноспособный терминальный углеродцентрированный радикал. В случае бутандиола-2,3 аналогичный механизм дегидратации не протекает из-за образования более устойчивого вторичного углеродцентрированного радикала. Было установлено, что проведение радиоллиза в дейтерированной воде значительно повышает радиационную стойкость диолов и дейтерообмен может быть использован для ингибирования свободнорадикальных реакций окисления, фрагментации и деструкции гидроксилсодержащих участков биомолекул.

Полученные результаты важны для изучения механизмов протекания свободнорадикальных реакций фрагментации гидроксилсодержащих участков биомолекул, индуцируемых ионизирующим излучением.

РЭФЕРАТ

Дыпломная праца: 63 старонкі, 33 малюнка, 12 табліц, 57 крыніц.

Ключавыя словы: радыёліз; свабодныя радыкалы, свабоднарадыкальная фрагментацыя; свабоднарадыкальная дэструкцыя; кароткалангуговы працэс; віцынальныя дыёлы; прапандыёл-1,2; бутандыёл-1,2; бутандыёл-2,3.

Мэта работы: на прыкладзе 1,2-прапандыёлу, бутандыёлу-1,2 і бутандыёлу-2,3 устанавіць уплыў становішча віцынальных гідраксілавых груп на ўстойлівасць гідраксілзмязчальных арганічных малекул да свабоднарадыкальнай фрагментацыі..

У працы была даследавана ўстойлівасць α -дыёлаў да свабоднарадыкальнай фрагментацыі ў дэаэраваных водных растворах, у тым ліку ў дэйтэраванай вадзе, пры pH 7, вызначаны склад і радыяцыйна-хімічныя выходы прадуктаў іх ператварэнняў.

Было паказана, што α -дыёлы з тэрмінальным месцаваннем гідраксілавых груп (прапандыёл-1,2 і бутандыёл-1,2) валодаюць меншай радыяцыйнай устойлівасцю, чым α -дыёл з нетэрмінальным месцаваннем гідраксілавых груп (бутандыёл-2,3). Прапанавана схема кароткалангуговага працэсу радыяцыйна-ініцыяванай дэгідратацыі прапандыёлу-1,2 і бутандыёлу-1,2, у якой ключавую ролю ў працягу ланцуга выконвае рэакцыйназдольны тэрмінальны вугляродцэнтраваны радыкал. У выпадку бутандыёлу-2,3 аналагічны механізм дэгідратацыі не працякае з-за ўтварэння больш ўстойлівага другаснага вугляродцэнтраванага радыкала. Было ўсталявана, што правядзенне радыёлізу ў дэйтэраванай вадзе значна павялічвае радыяцыйную ўстойлівасць дыёлаў і дэйтэраабмен можа быць скарыстаны для інгібітавання свабоднарадыкальных рэакцый акіслення, фрагментацыі і дэструкцыі гідраксілзмязчальных участкаў біямалекул.

Атрыманыя вынікі важныя для вывучэння механізмаў праходжання свабоднарадыкальных рэакцый фрагментацыі гідраксілзмязчальных участкаў біямалекул, што індуюцца іянізавальным выпрамяненнем.

ABSTRACT

Diploma: 63 pages, 33 figures, 12 tables, 57 sources.

Key words: radiolysis; free radicals; free radical fragmentation; free radical destruction; short-chain process; vicinal diols; propanediol-1,2, butanediol-1,2; butanediol-2,3.

Objective: to establish the effect of the position of vicinal hydroxyl groups on the stability of hydroxyl-containing organic molecules to free radical fragmentation, using propanediol-1,2, butanediol-1,2 and butanediol-2,3.

The stability of α -diols to free radical fragmentation in deaerated aqueous solutions, including deuterated water, at pH 7 was studied, the composition and radiation-chemical yields of the products of their transformations have been determined.

It was shown that α -diols with a terminal hydroxyl groups position (propanediol-1,2 and butanediol-1,2) are less resistant to radiation than α -diol with a nonterminal hydroxyl groups position (butanediol-2,3). A scheme has been proposed for a short-chain process of radiation-induced dehydration of propanediol-1,2 and butanediol-1,2, according which a reactive terminal carbon-centered radical plays a key role in chain prolongation. In the case of butanediol-2,3, a similar dehydration process does not occur due to the formation of a more stable secondary carbon-centered radical. It was also found that carrying out radiolysis in deuterated water significantly increases the radiation resistance of diols and deuterium exchange can be used to inhibit free radical reactions of oxidation, fragmentation and destruction of hydroxyl-containing biomolecule sites.

The results obtained are important for studying radiation-induced free radical fragmentation reactions of hydroxyl-containing biomolecule sites.