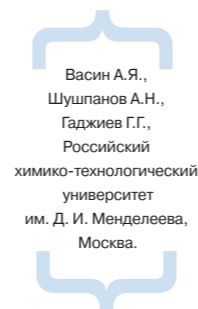


# ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНОСТЬ БАКЛОФЕНА И ЕГО ПОЛУПРОДУКТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ НОВЫМ СПОСОБОМ



Васин А.Я.,  
Шушпанов А.Н.,  
Гаджиев Г.Г.,  
Российский  
химико-технологический  
университет  
им. Д. И. Менделеева,  
Москва.

ВНЕДРЕНИЕ НОВОГО ПУТИ ПРОИЗВОДСТВЕННОГО СИНТЕЗА ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА БАКЛОФЕН (RS-4-АМИНО-3-(4-ХЛОРФЕНИЛ)-БУТАНОВАЯ КИСЛОТА) ПРИВЕЛО К ВОЗНИКНОВЕНИЮ В ЦЕПИ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ТРЕХ НОВЫХ ПОЛУПРОДУКТОВ (П-ХЛОР-НИТРОСТИРОЛ, ДИМЕТИЛОВЫЙ ЭФИР (R)(-)-2-[1-(4-ХЛОРФЕНИЛ)-2-НИТРОЭТИЛ]МАЛОНОВОЙ КИСЛОТЫ И МЕТИЛ-4-(4-ХЛОРФЕНИЛ)-2-ОКСОПИРРОЛИДИН-3-КАРБОКСИЛАТ), **ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫЕ СВОЙСТВА КОТОРЫХ РАНЕЕ НЕ БЫЛИ ИССЛЕДОВАНЫ**. В ДАННОЙ СТАТЬЕ ПРИВЕДЕНЫ ИСКОМЫЕ СВОЙСТВА, КОТОРЫЕ БЫЛИ ПОЛУЧЕНЫ СОВРЕМЕННЫМИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ И РАСЧЕТНЫМИ МЕТОДАМИ. ДЛЯ ИССЛЕДОВАННЫХ ВЕЩЕСТВ БЫЛ ПРОВЕДЕН ТЕРМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И ПОЛУЧЕНЫ КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ СОЧЕТАННОГО ПРОЦЕССА ИСПАРЕНИЕ-ТЕРМОЛИЗ. ДАННЫЕ ПЕРЕДАНЫ ПРОИЗВОДИТЕЛЮ ВЕЩЕСТВ И РЕКОМЕНДУЮТСЯ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ МЕР БЕЗОПАСНОСТИ НА ПРОИЗВОДСТВЕ.

## Введение

Перед химическими производствами (в особенности перед фармацевтическими) в наше время встают не только классические задачи повышения выхода продукта и упрощения пути синтеза, но и, как никогда, задачи экономической целесообразности. Возникают новые пути проведения реакций перегруппировки, новые способы присоединения новых функциональных групп, используются новые катализаторы. Хорошо знакомый процесс в ходе усовершенствования меняется порой до неузнаваемости – вплоть до прохождения через новые полупродукты. Поскольку безопасность на производстве – один из самых приоритетных вопросов, следует досконально изучать пожаровзрывоопасные свойства сырья, полупродуктов и готовой продукции, ведь пожары и взрывы – из года в год являются главной опасностью на химических предприятиях. При изменении технологической схемы следует особенно тщательно обращать внимание на полупродукты реакций. Данная работа продолжает цикл работ по пожаровзрывоопасности лекарственных препаратов

(прогресс цикла отмечен соответствующими публикациями [1-3]) и посвящена ситуации, в которой производителем был изменен технологический цикл, что и потребовало изучения новых полупродуктов с точки зрения пожаровзрывоопасности. В работе представлено описание ряда экспериментальных и расчетных методов, посредством которых были изучены пожаровзрывоопасные характеристики лекарственного препарата баклофен и трех его полупродуктов синтеза. Образцы были предоставлены опытным производством ФГУП «ГНЦ «НИОПик». Сам препарат производится с 1962 г. и представляет собой миорелаксант высокой абсорбции с общеуспокаивающим влиянием, не влияющий на нервно-мышечную передачу, что позволяет его использовать даже в качестве легкого антидепрессанта. В 2018 г. была усовершенствована схема синтеза препарата – суть усовершенствования заключается в введении группы NO<sub>2</sub> в структуру полупродукта уже на первой стадии (ранее это производилось в конце синтеза). На втором этапе новой схемы синтеза проводят восстановление

водородом до группы NH<sub>2</sub>, которую впоследствии можно гидрохлорировать – эта возможность особенно важна для лекарственных препаратов, гидрохлорирование обуславливает усвояемость лекарств, принимаемых перорально. Новая схема синтеза баклофена оптимизирована по выходу продукта, а также короче старой на один этап.

Научный интерес вызывает исследование пожаровзрывоопасных показателей трех полупродуктов из новой схемы и самого баклофена, полученного новым способом. До настоящего времени данные показатели не были изучены и в специальной литературе не приводились. Показатели пожаровзрывоопасности определялись на стандартных установках по методике ГОСТ 12.1.044-2018. Термические характеристики образцов получены на микропроцессорном дериватографе модели «С» Паулик-Паулик-Эрдей, производства завода «МОН», Венгрия. Спектроскопический анализ производился в ЦКП РХТУ им. Д.И. Менделеева на ИК-Фурье-спектрометре Nicolet 380 FT-IR.

## Краткая характеристика изученных образцов

Первым полупродуктом синтеза баклофена (далее ПП1) является п-хлор-нитростирол. Эмпирическая формула C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>ClNO<sub>2</sub>, структурная формула представлена на рисунке 1, код воспроизведения из системы записи SMILES: Clc1ccc(/C=C/[N+](O-)=O)cc1. Молекулярная масса – 183,5 г/моль. Внешний вид – склонный к слеживанию желтый порошок.

Второй полупродукт (далее ПП2), представляющий интерес с точки зрения пожаровзрывоопасности – диме-

тиловый эфир (R)(-)-2-[1-(4-хлорфенил)-2-нитроэтил]малоновой кислоты. Эмпирическая формула C<sub>13</sub>H<sub>14</sub>ClNO<sub>6</sub>, структурная формула приведена на рисунке 2, запись в системе SMILES: Clc1ccc(cc1)C(C[N+](O-)=O)C(C(=O)OC)C(=O)OC. Молекулярная масса 315,5 г/моль. Желтоватый порошок, при хранении слипающийся в крупные агломераты.

Третьим полупродуктом (далее ПП3) в новой схеме синтеза баклофена является метил-4-(4-хлорфенил)-2-оксопирролидин-3-карбоксилат. Его эмпирическая формула C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>NO<sub>2</sub>Cl, структурная формула приведена на ри-

сунке 3, в системе SMILES описывается как Clc1ccc(cc1)C<sub>2</sub>C(C(=O)OC)CNC<sub>2</sub>. Молекулярная масса 239,7 г/моль. Желто-бежевый порошок, так же, как и ПП2, склонный к образованию крупных агломератов при хранении.

Последним в списке исследованных веществ предстает сам баклофен (RS-4-амино-3-(4-хлорфенил)-бутановая кислота). Его эмпирическая формула C<sub>10</sub>H<sub>12</sub>ClNO<sub>2</sub>, структурная формула изображена на рисунке 4, запись в системе SMILES: ClC1=CC=C(C(C(O)=O)CN)C=C1. Молекулярная масса 213,6 г/моль. Внешний вид – белые кристаллы с температурой плавления 207 °C.

РИС. 1  
СТРУКТУРНАЯ  
ФОРМУЛА П-ХЛОР-  
НИТРОСТИРОЛА

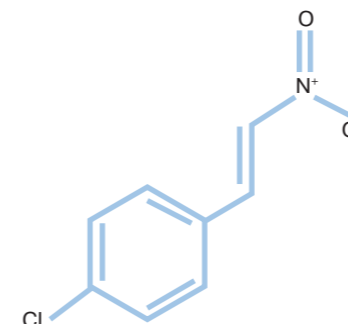


РИС. 2  
СТРУКТУРНАЯ ФОРМУЛА  
ДИМЕТИЛОВОГО ЭФИРА  
4-НИТРО-  
3-МЕТОКСИКАРБОНИЛ  
-3-(4-ХЛОРФЕНИЛ)-  
БУТАНОВОЙ КИСЛОТЫ

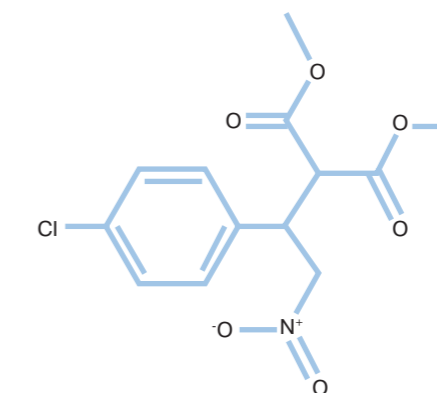


РИС. 3  
СТРУКТУРНАЯ ФОРМУЛА  
МЕТИЛ-4-(  
4-ХЛОРФЕНИЛ)-  
2-ОКСОПИРРОЛИДИН-  
3-КАРБОКСИЛАТА

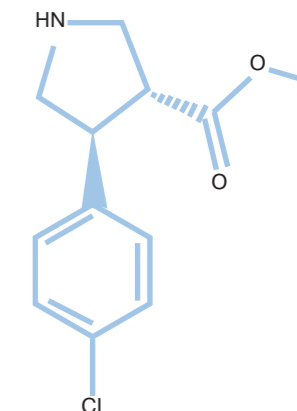
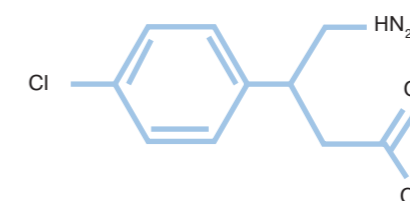


РИС. 4  
СТРУКТУРНАЯ  
ФОРМУЛА  
БАКЛОФЕНА



## Экспериментальная часть

### Точки плавления

Для ПП1, ПП2 и ПП3 впервые были определены температуры плавления – они составили 102, 60 и 118 °С соответственно. Определение проводилось капиллярным методом.

### ИК-спектроскопия

Химическое строение веществ, полученных от производителя, подтверждалось методом ИК-спектроскопии. Полученные полосы поглощения сверялись со справочными данными [4]. Приведенные ниже полосы поглощения являются валентными, если не

указано иное. Все четыре исследованных соединения имеют в структуре ароматические кольца – и все четыре показали наличие деформационных колебаний связи  $C_{аром}-C$  – ПП1 при 1515 и 1587  $cm^{-1}$ , ПП2 при 1497  $cm^{-1}$ , ПП3 при 1482 и 1491  $cm^{-1}$  и баклофен при 1494 и 1525  $cm^{-1}$ . Вторая структурная группа, общая для всех четырех соединений –  $C_{аром}-Cl$ , и наличие соответствующих полос поглощения также было обнаружено – 738  $cm^{-1}$  для ПП1, 741  $cm^{-1}$  для ПП2, 728  $cm^{-1}$  для ПП3 и 729  $cm^{-1}$  для баклофена. Нитрогруппа в соединениях ПП1 и ПП2 показала присутствие в виде характерных пиков нитрогруппы в составе нитропарафинов (962  $cm^{-1}$  для ПП1 и 932  $cm^{-1}$  для ПП2). Спектрограммы ПП2 и ПП3 содержат характерные полосы

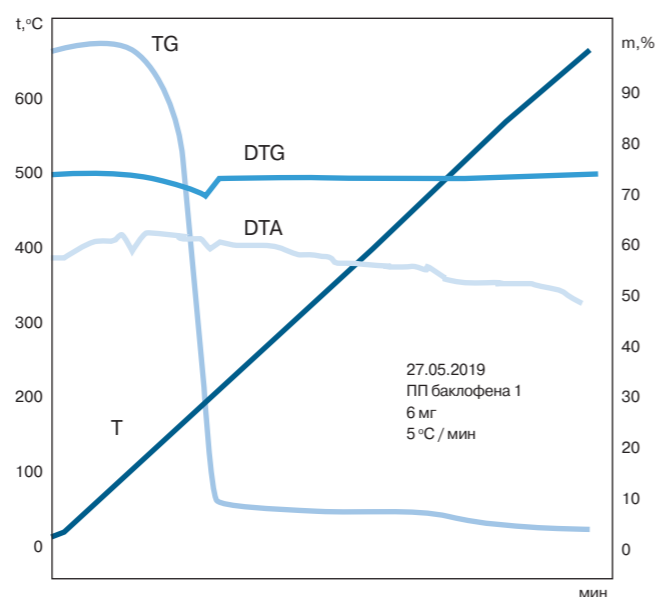
для элемента структуры  $O-CH_3$  – 1434  $cm^{-1}$  для ПП2 и 1431  $cm^{-1}$  для ПП3. В ПП3 дополнительно обнаруживаются полосы поглощения функциональных групп  $C-O-C$  и  $C=O$  (1165–1214  $cm^{-1}$  и 1737  $cm^{-1}$  соответственно). В спектрограмме баклофена присутствуют спектры аминогруппы (1614  $cm^{-1}$ ).

### Термический анализ

Все четыре вещества подвергались термическому анализу в атмосфере воздуха со скоростями 5; 10; 15 и 20 °С/мин. На представленных ниже рисунках даны наиболее характерные ТГ-ДТА кривые, полученные в ходе экспериментов.

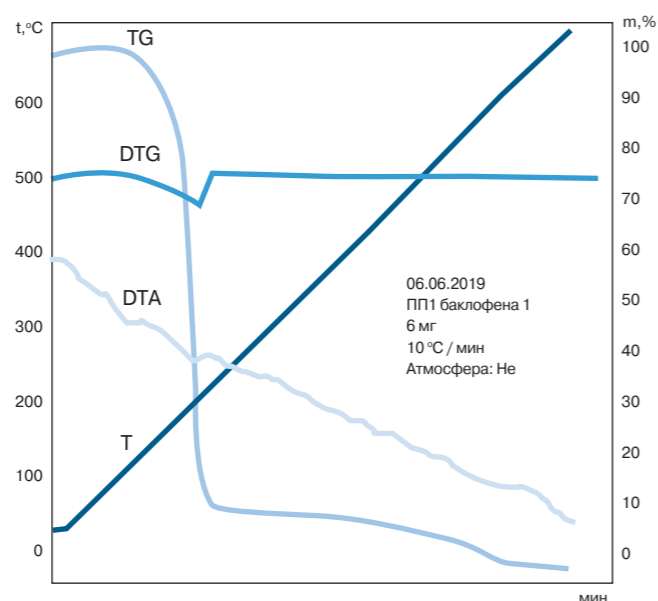
## РИС. 5 ДЕРИВАТОГРАММА ПП1 В АТМОСФЕРЕ ВОЗДУХА

На рисунке 5 представлены ТГ-ДТА кривые ПП1. Эндотермический эффект начинается при 111 °С, при 146 °С начинается потеря массы. Кривая ТГ проявляет характер, общий для остальных трех образцов, что будет показано в дальнейшем. В данном случае нельзя говорить об изолированном процессе испарения, при котором кривая ТГ, как правило, имеет меньший угол наклона. Столь резкое изменение убыли массы предполагает совмещенный эффект термолитического и испарения.



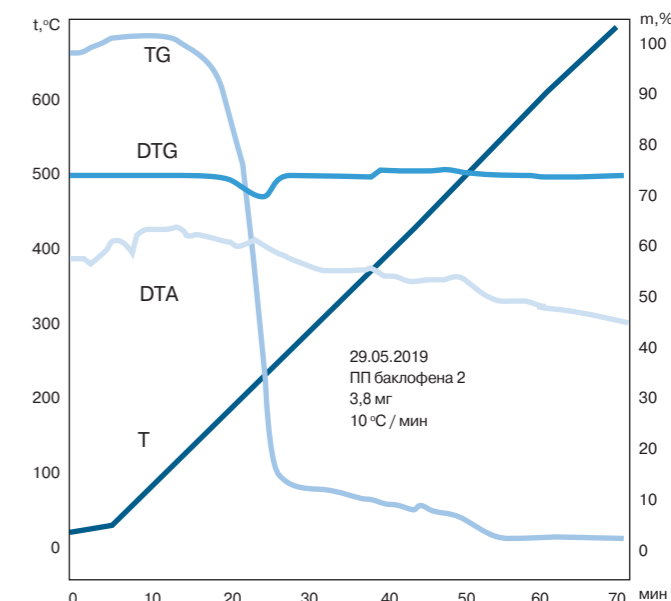
## РИС. 6 ДЕРИВАТОГРАММА ПП1 В АТМОСФЕРЕ ГЕЛИЯ

Для подтверждения данного предположения была снята дериватограмма в атмосфере гелия (рисунк 6). Как видно, характер кривой ТГ практически не изменился в отсутствие окислителя.



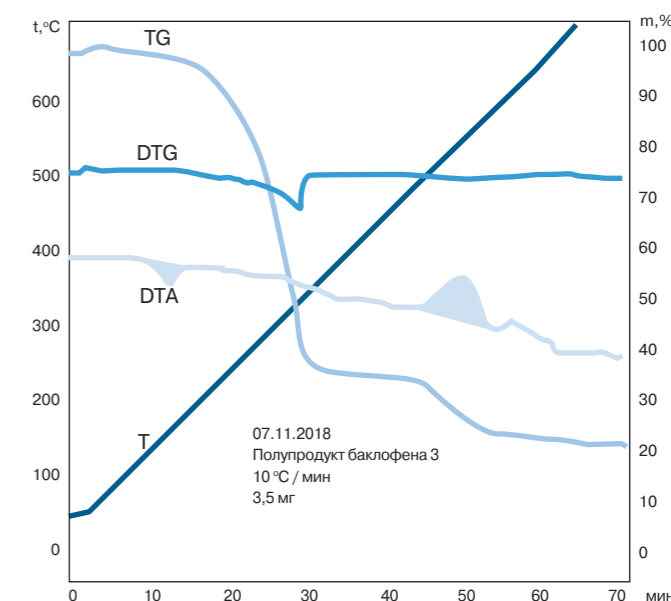
## РИС. 7 ДЕРИВАТОГРАММА ПП2 В АТМОСФЕРЕ ВОЗДУХА

ТГ-ДТА кривые ПП2 представлены на рисунке 7. Помимо описанного выше поведения кривой ТГ наблюдается эндотермический эффект без потери массы при 65 °С, обусловленный плавлением вещества, и эндо-эффект с одновременной убылью массы при 169 °С.



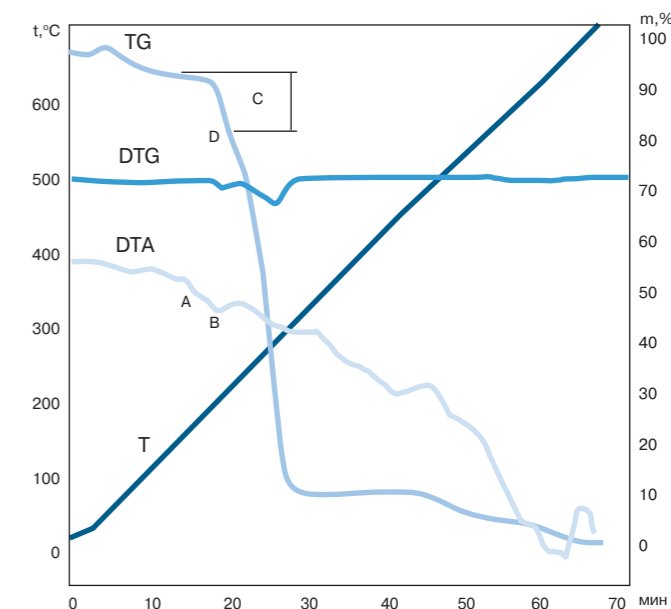
## РИС. 8 ДЕРИВАТОГРАММА ПП3 В АТМОСФЕРЕ ВОЗДУХА

Дериватограмма ПП3 приведена на рисунке 8. На ней наблюдается эндотермический эффект без существенной потери массы, начинающийся при 118 (точка А), что связано с постепенным плавлением образца. Характер ТГ-кривой схожий, но процессы испарения и термолитического на начальном этапе дифференцированы сильнее. Так, при дальнейшем нагревании образца при температуре 140 °С начинается потеря массы, характерная для испарения. При температуре 260 °С наблюдается более интенсивная потеря массы, связанная с термическим разложением вещества.



## РИС. 9 ДЕРИВАТОГРАММА БАКЛОФЕНА В АТМОСФЕРЕ ВОЗДУХА

ТГ-ДТА кривые баклофена приведены на рисунке 9. На кривой ДТА наблюдается эндотермический эффект, начинающийся при 175 (точка А), максимум которого совпадает с точкой плавления, указанной в литературе (206 °С, точка В). По всей видимости, вслед за плавлением вещества непосредственно следует его распад – отвесный ход кривой ТГ на участке С указывает на акт термолитического, а не испарения. Кроме того, в точке D характер убыли массы изменяется, что может свидетельствовать об образовании в ходе термолитического распада новых продуктов, которые в свою очередь также подвергаются распаду – характер кривой ТГ далее не меняется вплоть до выхода ее на плато.



Полученные при разных скоростях нагрева дериватограммы дали возможность рассчитать энергию активации совмещенного процесса термического разложения и испарения. О подходе к решению данного вопроса подробно сообщается ниже, в подразделе "Расчет кинетических параметров".

### Характеристики пожаровзрывоопасности

Показатели пожаровзрывоопасности исследованных веществ приведены в таблице 1. При сравнении значений  $t_{нир}$  и  $t_{вос}$  видно, что три образца из четырех воспламеняются после их разложения. Учитывая общий характер поведения образцов ПП1 и ПП2 при нагревании, можно заключить, что

горючесть обусловлена как испарением, так и формированием продуктов их термического разложения. Горючесть ПП3 обусловлена только испарением, тогда как горючесть баклофена с испарением не связана и обусловлена только его продуктами термического разложения. По результатам предварительного анализа было выдвинуто предположение о том, что взрывзвеси всех исследуемых веществ покажут свою взрывоопасность. Предположение было основано как на результатах термического анализа, так и на расчете долей инертных элементов (N, O) и хлора в химической структуре исследованных веществ. Доля инертных элементов и хлора составила 43 масс. % для ПП1, 46 % для ПП2, 34 % для ПП3 и 38 % для баклофена – данные значения на  $^{\circ}\text{C}$  10 % мень-

ше нижнего предела области неустойчивого флегматизирующего влияния инерта [5]. Тем не менее, эксперимент показал, что взрывоопасными свойствами обладает только ПП2, для ПП3 и баклофена были получены сравнительно высокие значения НКПР, а для ПП1 – крайне высокое. Данные результаты объяснимы, как минимум, сильной склонностью веществ к слеживанию – вещества образуют крупные агломераты за короткое время пребывания в атмосфере воздуха при комнатной температуре, эта склонность наблюдалась даже в крайне малом объеме форкамеры взрывного цилиндра. Особенно сильно данное свойство проявилось для ПП1. Все показатели пожаровзрывоопасности были определены по ГОСТ 12.1.044-2018.

**ТАБЛИЦА 1.**  
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО ОПРЕДЕЛЕННЫЕ ПОКАЗАТЕЛИ ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНОСТИ АЭРОГЕЛЕЙ И АЭРОВЗВЕСЕЙ ИССЛЕДОВАННЫХ ВЕЩЕСТВ

| Вещество |          | Свойства                      |                                |                                |                                |                        |   |
|----------|----------|-------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|------------------------|---|
|          |          | $t_{пл}$ , $^{\circ}\text{C}$ | $t_{нир}$ , $^{\circ}\text{C}$ | $t_{вос}$ , $^{\circ}\text{C}$ | $t_{сам}$ , $^{\circ}\text{C}$ | НКПР, г/м <sup>3</sup> | горючесть образцов, пожаровзрывоопасность аэровзвесей |
| 1        | ПП1      | 102                           | 175                            | 186                            | 465                            | 375                    | Горючее, пожароопасное                                |
| 2        | ПП2      | 60                            | 170                            | 215                            | 415                            | 60                     | Горючее, взрывоопасное                                |
| 3        | ПП3      | 118                           | 260                            | 235                            | 495                            | 75                     | Горючее, пожароопасное                                |
| 4        | Баклофен | 206                           | 206                            | 265                            | 475                            | 100                    | Горючее, пожароопасное                                |

**ТАБЛИЦА 2.**  
ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ ВЕЩЕСТВ В ГАЗОВОЙ И ТВЕРДОЙ ФАЗАХ И ЭНТАЛЬПИИ СГОРАНИЯ В ТВЕРДОЙ ФАЗЕ

| Вещество |          | Значения энтальпий                   |                                      |                                   |                        |
|----------|----------|--------------------------------------|--------------------------------------|-----------------------------------|------------------------|
|          |          | $\Delta H_{г.ф.}^{\circ}$ , кДж/моль | $\Delta H_{т.ф.}^{\circ}$ , кДж/моль | $\Delta H_{сг.}^{\circ}$ , МДж/кг |                        |
|          |          |                                      |                                      | по Гессу                          | по Коновалову-Хандрику |
| 1        | ПП1      | 105                                  | 33                                   | 21,73                             | 21,48                  |
| 2        | ПП2      | -668                                 | -756                                 | 19,99                             | 20,06                  |
| 3        | ПП3      | -308                                 | -386                                 | 26,25                             | 26,01                  |
| 4        | Баклофен | -362                                 | -445                                 | 24,12                             | 24,00                  |

### Расчетная часть

#### Энтальпии образования и сгорания

Энтальпия сгорания – показатель пожаровзрывоопасности по ГОСТ 12.1.044-89, ее величина используется во многих расчетах пожаровзрывоопасных характеристик. Кроме того, в ходе составления производственной документации, при категорировании помещений по пожарной и взрывопожарной опасности, значение энтальпии сгорания используется, как самостоятельная величина. Основным способом получения значения энтальпии сгорания – расчет по закону Гесса через энтальпии образования всех конечных продуктов и энтальпию образования исходного вещества в

твердой фазе. Последнюю возможно получить при помощи расчета или определения энтальпии образования исходного вещества в газовой фазе с последующим учетом всех фазовых переходов. Возможна проверка на сходимость данного расчета через несколько менее точную методику Коновалова-Хандрика [6]. Полученные результаты приведены в таблице 2.

Энтальпии образования исходных веществ в газовой фазе могут быть получены многими методами. В настоящее время большое распространение получили квантовые семиземпирические методы расчета – методика постоянно совершенствуется и, как считают некоторые авторы, погрешности в ходе вычислений уже сопоставимы с экспериментальными [7].

Для расчетов энтальпий образования исследованных веществ использовались программы MOPAC2016, Gaussian, Spartan, а также ручные аддитивные методы – связей, вкладов групп и Бенсона.

Не коррелирующие результаты не учитывались – как правило, это касается исключительно ручных методов в приложении к веществам, для структурных групп которых информация об энергетическом вкладе отсутствует или недостаточно точна. В таблице 2 даны конечные (после учета корреляции) результаты энтальпий образования исследованных веществ в газовой фазе.

**ТАБЛИЦА 3.**  
РЕЗУЛЬТАТЫ РАСШИФРОВКИ ДАННЫХ ТЕРМОАНАЛИЗА ДТА

| Вещество |          | $\beta$ , К/мин | $\alpha$ , % |     |     |     | ЕА, кДж/моль |
|----------|----------|-----------------|--------------|-----|-----|-----|--------------|
|          |          |                 | 5            | 10  | 15  | 20  |              |
|          |          |                 | Табс, К      |     |     |     |              |
|          |          |                 | T1           | T2  | T3  | T4  |              |
| 1        | ПП1      | 2,5             | 411          | 423 | 436 | 440 | 81           |
|          |          | 5               | 423          | 440 | 448 | 450 |              |
|          |          | 10              | 436          | 448 | 461 | 463 |              |
|          |          | 20              | 444          | 461 | 469 | 473 |              |
| 2        | ПП2      | 2,5             | 419          | 432 | 428 | 430 | 117          |
|          |          | 5               | 431          | 448 | 456 | 458 |              |
|          |          | 10              | 443          | 455 | 468 | 470 |              |
|          |          | 20              | 450          | 467 | 475 | 479 |              |
| 3        | ПП3      | 2,5             | 427          | 450 | 465 | 473 | 65           |
|          |          | 5               | 455          | 491 | 511 | 523 |              |
|          |          | 10              | 461          | 502 | 517 | 531 |              |
|          |          | 20              | 479          | 511 | 527 | 538 |              |
| 4        | Баклофен | 2,5             | 453          | 463 | 466 | 470 | 130          |
|          |          | 5               | 462          | 468 | 473 | 478 |              |
|          |          | 10              | 464          | 472 | 476 | 485 |              |
|          |          | 20              | 466          | 476 | 483 | 488 |              |



РИС.10  
ЗАВИСИМОСТЬ СКОРОСТИ НАГРЕВА ППЗ  
ОТ ВЕЛИЧИНЫ ОБРАТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

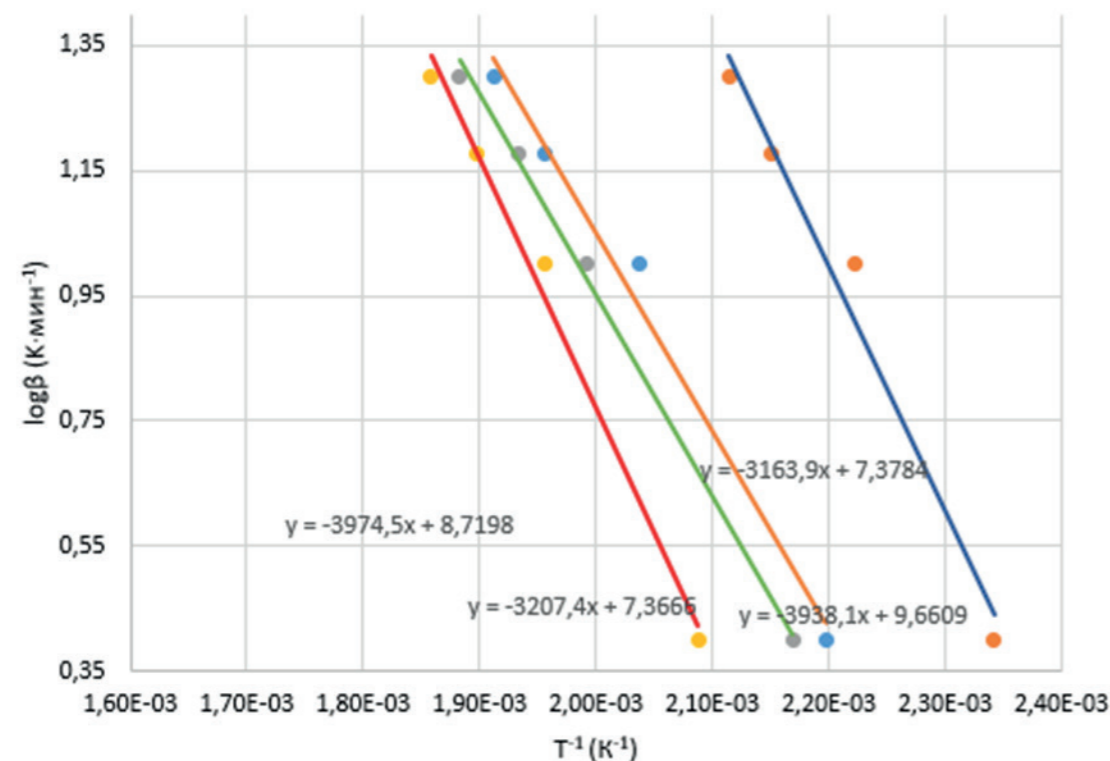


ТАБЛИЦА 4.  
РАСЧЕТНЫЕ ПОКАЗАТЕЛИ ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНОСТИ  
ИССЛЕДОВАННЫХ ВЕЩЕСТВ

| Вещество   | Свойства        |                                 |         |
|------------|-----------------|---------------------------------|---------|
|            | $P_{max}$ , кПа | $(\frac{dP}{dt})_{max}$ , Мпа/с | МВСК, % |
| 1 ПП1      | 675             | 50,6                            | 9,4     |
| 2 ПП2      | 703             | 52,5                            | 9,6     |
| 3 ПП3      | 587             | 43,9                            | 9,8     |
| 4 Баклофен | 490             | 36,9                            | 9,9     |

### Расчет кинетических параметров

Характер кривой TG, полученной в ходе термического анализа и поведение веществ при термоанализе в атмосфере инертного газа (см. подраздел "Термический анализ") предполагает термолит, а не термоокисление кислородом воздуха. Для оценки кинетических параметров был использован метод Озава-Флинна-Уолла по методике ГОСТ 56722-2015, ранее показавший свою применимость для веществ, не демонстрирующих в ходе термоанализа экзотермических пиков в характерных для термораспада областях [8]. Температурные данные, извлеченные в ходе термического анализа из дериватограмм, приведены в таблице 3 – здесь же представлены конечные значения энергий активации для сочетанного процесса испарение-термолит исследованных веществ. Типичное построение по ГОСТ 56722-2015 (для ПП3) приведено на рисунке 10.

### Расчет ряда взрывоопасных показателей

Дополнительно по ГОСТ 12.1.044-89 был рассчитан ряд показателей

пожаровзрывоопасности, результаты вычислений представлены в таблице 4.

### Выводы

Результаты экспериментов и характеристики пожаровзрывоопасности исследованных веществ сконцентрированы в таблицах 1 и 4, энтальпии образования веществ в газообразной и твердой фазах, а также энтальпии сгорания приведены в таблице 2. В соответствующем подразделе статьи приведены данные о точках плавления веществ.

Оценка кинетических параметров термолита методом Озава-Флинна-Уолла для ПП1 и ПП3 дала сравнительно низкие показатели энергии активации, тогда как значения ПП2 и баклофена вполне характерны для процесса термического разложения. В свете изложенного представляется актуальной задачей дальнейшая попытка разделения процессов и выделение действительной энергии активации термического распада веществ. Установлено, что все четыре исследованных вещества горючие, пылевоздушная смесь вещества ПП2 взрывоопасна, а вещества ПП1, ПП3 и баклофен пожароопасны.

**ПОЛУЧЕННЫЕ  
В РАБОТЕ ДАННЫЕ  
О ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНОСТИ  
НОВЫХ  
ОРГАНИЧЕСКИХ  
СОЕДИНЕНИЙ  
ИМЕЮТ БОЛЬШОЕ  
ПРАКТИЧЕСКОЕ  
ЗНАЧЕНИЕ**

и были переданы производителю для создания безопасных условий ведения технологических процессов и применения средств взрывозащиты.

Коллектив авторов благодарит Центр коллективного пользования РХТУ им. Д. И. Менделеева за оперативно проведенную ИК-спектроскопию.

#### Условные обозначения

DTA – дифференциальный термический анализ (DTA – кривая на графике, соответствующая методу); TG или TG – кривая убыли массы; T – температурная кривая; DTG – кривая производной убыли массы по времени (гравиметрическая кривая); ИК – инфракрасная спектроскопия;  $t_{пл}$  – температура плавления;  $t_{нап}$  – температура начала интенсивного разложения;  $t_{вос}$  – температура воспламенения;  $t_{сам}$  – температура самовоспламенения; НКПР – нижний концентрационный предел распространения пламени;  $\Delta H_{г,г}^0$  – энтальпия образования в газовой фазе;  $\Delta H_{т,т}^0$  – энтальпия образования в твердой фазе;  $\Delta H_{сг}^0$  – энтальпия сгорания;  $\beta$  – скорость нагревания, К/мин;  $\alpha$  – степень превращения, %;  $T_{абс}$  – абсолютная температура, К; EA – энергия активации, кДж/моль;  $P_{max}$  – максимальное давление взрыва;  $(dP/dt)_{max}$  – максимальная скорость нарастания давления взрыва; МВСК – минимальное взрывоопасное содержание кислорода, %.

#### Библиография

1. Платонова С.А., Шушпанов А.Н., Васин А.Я., Гаджиев Г.Г., Исследование пожаровзрывоопасных свойств гидрохлорида 5-аминолевулиновой кислоты и его полупродукта синтеза, Успехи в химии и химической технологии, 2017, т. XXXI, № 13, с. 78–80. / 2. Vasin A.J., Shushpanov A.N., Anosova E.B., Raikova V.M., Gadzhiev G.G., Platonova S.A., Combustion and explosion characteristics of 5-aminolevulinic acid hydrochloride and its intermediate product, Proc. 21st Seminar of the New Trends in Research of Energetic Materials, 2018, pp. 1126–1131. / 3. Шушпанов А.Н., Гаджиев Г.Г., Васин А.Я., Аносова Е.Б., Термический анализ и пожаровзрывоопасность полупродуктов синтеза баклофена, Успехи в химии и химической технологии, 2018, т. XXXII, № 14, с. 83–85. / 4. Тарасевич Б.Н., ИК спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы, Москва, МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра органической химии, 2015. / 5. Платонова С.А., Шушпанов А.Н., Гаджиев Г.Г., Васин А.Я., Изучение флегматизирующего действия инертных элементов в структуре вещества на горение пылей, Сборник материалов XXVII Международной научно-практической конференции Предупреждение. Спасение. Помощь, 2017, с. 81–84. / 6. Моныхов В.Т., Методы исследования пожарной опасности веществ, Москва, изд. Химия, 1979. / 7. Eloff M.S., Hoy J., Vumpus J.A., Calculating Heat of Formation Values of Energetic Compounds: A Comparative Study, Advances in Physical Chemistry, 2016. / 8. Шушпанов А.Н., Васин А.Я., Аносова Е.Б., Гаджиев Г.Г., Термическое разложение и пожаровзрывоопасные свойства полупродуктов синтеза баклофена, Исторический опыт, современные проблемы и перспективы образовательной и научной деятельности в области обеспечения пожарной безопасности: сборник тезисов докладов международной научно-практической конференции, 2018, с. 834–839.

#### Краткая информация об авторах.

**Васин Алексей Яковлевич**,  
РХТУ им. Д.И. Менделеева; профессор  
каф. техносферной безопасности,  
доктор технических наук

**Шушпанов Александр Николаевич**,  
РХТУ им. Д.И. Менделеева; ст. преподаватель  
каф. техносферной безопасности,  
e-mail: vremena@me.com

**Гаджиев Гарун Гамзатович**,  
РХТУ им. Д.И. Менделеева; ассистент  
каф. техносферной безопасности,  
кандидат технических наук