

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКИЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

УСПЕХИ
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ
ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXV

№ 10

Москва
2021

УДК 66.01-52
ББК 24. 35
У78

Рецензент:
Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева

Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXV,
У78 № 10 (245). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2021. – 145 с.

В сборник вошли статьи по актуальным вопросам в области теоретической и экспериментальной химии.

Материалы сборника представлены для широкого обсуждения на XVII Международном конгрессе молодых ученых по химии и химической технологии «УСChT-2021», XXXV Международной конференции молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2021», ряде международных и российских конференций, симпозиумов и конкурсов, а также на интернет-сайтах.

Сборник представляет интерес для научно-технических работников, преподавателей, аспирантов и студентов химико-технологических вузов.

УДК 66.01-52
ББК 24. 35

Содержание

Специальная химия, пожарная и промышленная безопасность (технологии и материалы специального и двойного назначения, пожаро- и взрывобезопасность)

Бикметова В.Э., Терехова М.А., Мельников Н.О. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АНТИПИРЕНОВ НА ТЕРМООКИСЛИТЕЛЬНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ДРЕВЕСИНЫ	8
Ботникова А.И., Костанян Ш.К., Веселкина П.Р., Рудаков Г. Ф., Синдицкий В. П. ТЕРМИЧЕСКИЙ РАСПАД ПРОИЗВОДНЫХ 2,7-ДИАМИНО-БИС[1,2,4]-ТРИАЗОЛО-[1,5-b;5',1'-f]-1,2,4,5-ТЕТРАЗИНА	11
Винокурова В.В., Монахов А.А., Мельников Н.О. ИССЛЕДОВАНИЕ ОГНЕЗАЩИЩАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ТРУДНОВЫМЫВАЕМЫХ ПРЕПАРАТОВ ДЛЯ ПРОПИТКИ ДРЕВЕСИНЫ ОПОР ЛЭП И СВЯЗИ	15
Войченко О.Ю., Чернецкая М.Д. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ MOODLE.MUSTR ДЛЯ ВХОДНОГО КОНТРОЛЯ ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА БЖД	18
Гулаков М.Ю., Шишков В.О., Денисюк А.П. ВЛИЯНИЕ ОКТОГЕНА И МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ГОРЮЧЕГО НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДЕЙСТВИЯ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ГОРЕНИЕ ТОПЛИВ С НИТРАТОМ АММОНИЯ	22
До Т.Х., Васин А.Я., Шушпанов А.Н., Гаджиев Г.Г. ТЕРМИЧЕСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ Д-ЦИКЛОСЕРИНА	25
Доценко В.Д., Сизов В.А., Денисюк А.П. ЗАКОНОМЕРНОСТИ ГОРЕНИЯ ЭНЕРГОНАСЫЩЕННЫХ МОНОМЕРОВ	28
Зар Ни Аунг, Денисюк А.П. ВЛИЯНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ НА ТЕМПЕРАТУРНЫЙ ПРОФИЛЬ ВОЛНЫ ГОРЕНИЯ ТРИНИТРОТОЛУОЛА	31
Калиниченко А.И., Нгуен К.Т., Рудаков Г.Ф. СИНТЕЗ МОНОЗАМЕЩЕННЫХ ПОЛИНИТРОАЛКОКСИ-1,2,4,5-ТЕТРАЗИНОВ	34
Левтер П.А., Ильичева Н.Н. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭПОКСИДНОЙ СМОЛЫ ЭД-20 С ПАВ К-7	37
Мельникова Л.Я., Синдицкий В. П., Серушкин В.В., Серушкина О.В., Далингер И.Л. ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ АЗАСИДНОМИНА	40

УДК 544.032.4

До Т.Х., Васин А.Я., Шушпанов А.Н., Гаджиев Г.Г.

ТЕРМИЧЕСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ Д-ЦИКЛОСЕРИНА

До Тхань Хынг, аспирант 3-го года обучения каф. ТСБ, zezo.ru@gmail.com

Васин Алексей Яковлевич, д.т.н., профессор каф. ТСБ

Шушпанов Александр Николаевич, ст. преподаватель каф. ТСБ

Гаджиев Гарун Гамзатович, к.т.н., доцент каф. ТСБ

РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Российская Федерация

125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

Методом ИК-спектроскопии изучен процесс и механизм термического разложения д-циклосерина, что является важной задачей при оценке пожаровзрывобезопасности. Обнаружено, что на первом этапе термоллиза, проходящем при 145 °С, происходит разрыв цикла [-C-O-N-] в молекуле вещества. Высока вероятность разрыва связи O-N.

Ключевые слова: цикloserин, термическое разложение, ИК-спектроскопия.

THERMAL DECOMPOSITION OF D-CYCLOSERINE

Do T.H., Vasin A.Ya., Shushpanov A.N., Gadzhiev G.G.

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

The process and mechanism of thermal decomposition of d-cycloserine has been studied by IR spectroscopy, which is an important task in assessing fire and explosion safety. It was found that at the first stage of thermolysis, which takes place at 145 °C, the [-C-O-N-] cycle in the substance molecule is broken. The probability of breaking the O-N bond is high.

Keywords: cycloserine, thermal decomposition, IR spectroscopy.

Циклосерин (д-циклосерин) – лекарственный препарат, антибиотик, синтетический аналог аланина, аминокислоты, входящей в состав многих белков. Относится к «резервным» противотуберкулезным средствам средней эффективности [1], является составной частью комплексной противотуберкулезной терапии. Существует потенциал применения цикloserина в неврологии за счет потенциальной возможности ослабления обсессивно-компульсивного синдрома [2], но потенциал следует использовать с осторожностью, поскольку он базируется на побочном эффекте, и нет гарантий, что в ходе терапии проявятся иные побочные эффекты, например, генеральная депрессия [3].

Разработка новых лекарственных препаратов [4], лишенных данных недостатков, тем не менее, чаще всего не начинается с нуля, а опирается на известные фармацевтические технологии. Промышленность не отказывается от цикloserина, и обеспечение безопасных условий производства фармацевтических препаратов – приоритетная задача. Обеспечение надлежащих условий пожаровзрывобезопасности обуславливает большой спектр научных исследований, среди которых изучение пожаровзрывоопасных свойств вещества с упором на его строение – интересный и перспективный цикл.

Образец антибиотика д-циклосерин был синтезирован в ФГУП «ГНЦ «НИОПИК». Химическое название вещества – (R)-4-Амино-3-изоксазолидинон или, в номенклатуре ИЮПАК, (R)-4-Amino-1,2-oxazolidin-3-one. Образец цикloserина представляет собой мелкодисперсный (диаметр частиц фракции до 100 мкм) белый порошок, содержание влаги в котором не более 2 %. Эмпирическая формула C₃H₆N₂O₂. Молярная масса

102,09 г/моль. На рис. 1 изображена структурная формула соединения.

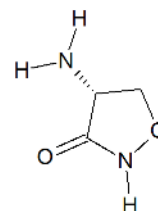


Рис. 1. Структурная формула Д-циклосерина

Показатели пожаровзрывоопасности цикloserина были ранее исследованы и опубликованы в работе [5]. Известно, что исследованное вещество является горючим, его пылевоздушная смесь оказалась взрывоопасной (НКПР < 65 г/м³). Термический анализ цикloserина осуществлен в работе [6], на кривой ДТА дериватограммы, полученной при скорости нагрева 10 °С/мин был обнаружен интенсивный экзотермический эффект, начинающийся при 145 °С и достигающий максимума при 156 °С.

Для продолжения исследований авторы применили ИК-спектроскопический анализ – для изучения процесса термического разложения д-циклосерина было произведено сравнение химической структуры д-циклосерина и продуктов его разложения. Оценка структуры продуктов разложения в зависимости от степени распада вещества позволила выяснить конкретную химическую связь, распадающуюся на первом этапе под воздействием температуры.

Анализ образца д-циклосерина проведен на ИК-Фурье-спектрометре Nicolet 380 FT-IR в Центре коллективного пользования РХТУ им. Д.И. Менделеева. Полученные результаты приведены на рис. 2.

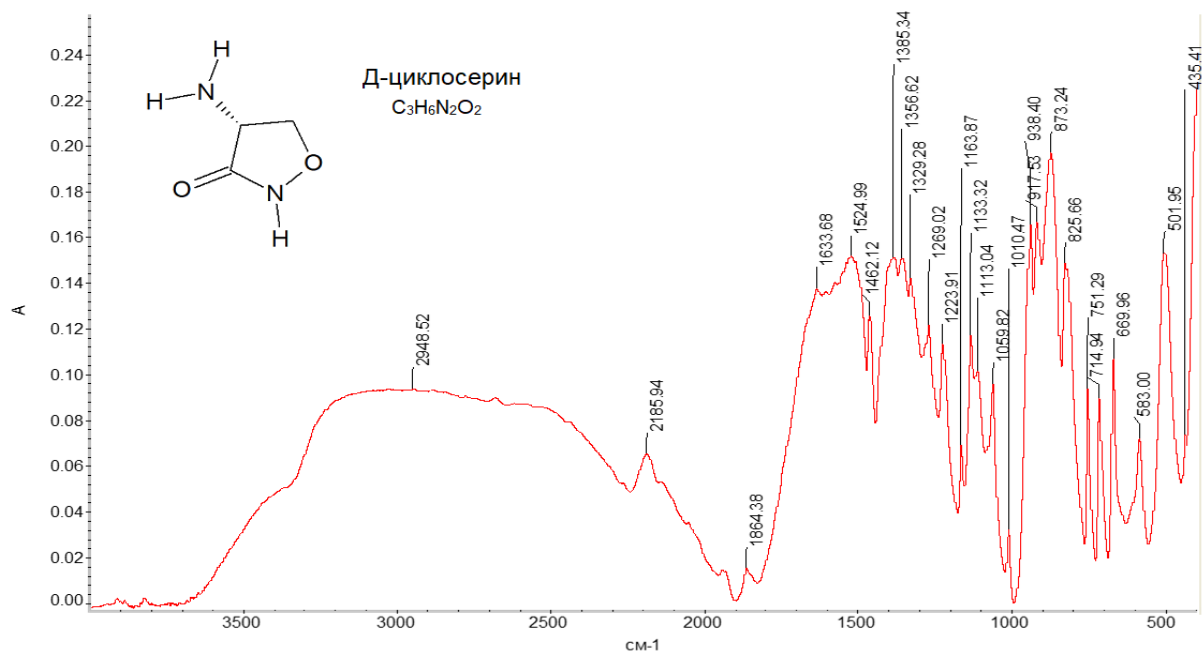


Рис. 2. ИК-спектрограмма д-циclosерина

Существуют, как минимум, два источника, в которых приводятся данные о том, что циклической структуре $[-C-O-N-]$ в молекуле вещества соответствует среднеинтенсивная полоса поглощения в районе 1461 см^{-1} [7, 8].

Для изучения продуктов распада образца при различных степенях разложения была выполнена соответствующая пробоподготовка. Продукты термолита готовились при помощи установки ОТП (по ГОСТ 12.1.044-89), в которой можно создать изотермические условия. Условия помещения: температура воздуха 22 °C , относительная влажность 70% , атмосферное давление 745 мм.рт.ст. Для получения образцов разной степени разложения термообработку проводили в различных временных

интервалах при температуре 105 и 120 °C . Подробные условия пробоподготовки приведены в таблице 1.

Таблица 1. Условия пробоподготовки продуктов термообработки д-циclosерина

№ опыта	Время индукции, мин	Температура испытания, °C	Степени распада, %
1	120	105	10,0
2	210	110	17,0
3	300	110	21,0
4	600	120	23,0
5	900	120	27,0

ИК-спектрограммы продуктов термолита приведены на рис. 3.

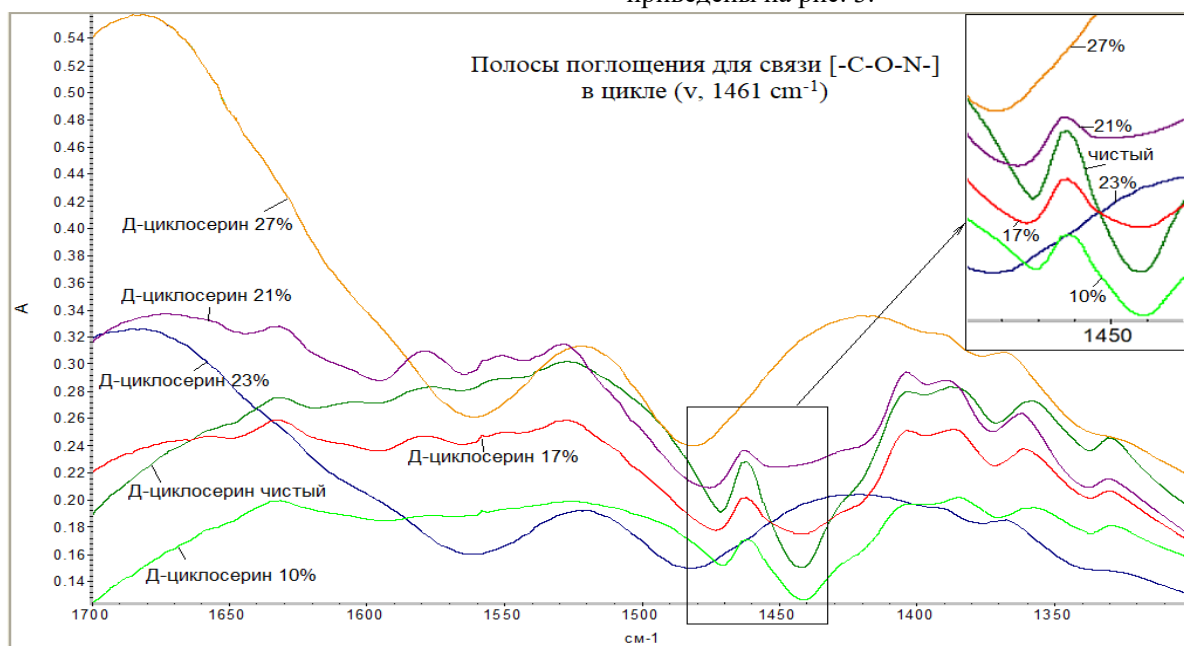


Рис. 3. Комбинированная ИК-спектрограмма д-циclosерина, выделен диапазон $1300 - 1700\text{ см}^{-1}$ (степени распада: чистый (0 %); 10%; 17%; 21%; 23% и 27%)

На полученных спектрограммах заметно, что для образца д-циклосерина с увеличением степени распада наблюдается уменьшение интенсивности полосы поглощения цикла $[-C-O-N-]$ (как было сказано выше, 1461 см^{-1}). У образца со степенью распада 21 % масс. пик полосы поглощения оказался значительно менее интенсивным и размытым по сравнению с остальными образцами. При степени распада 23 и 27 % масс. полоса поглощения 1461 см^{-1} отсутствует полностью, что указывает на разрыв цикла $[-C-O-N-]$, как первичный акт термоллиза д-циклосерина (вероятнее всего, рвется связь O-N).

Авторы благодарят Центр коллективного пользования РХТУ им. Д.И. Менделеева за быстрый и качественный анализ предоставляемых образцов, а также за помощь в комбинировании спектрограмм.

Список литературы

1. Фисенко В. Противотуберкулезные средства: принципы действия, побочные эффекты и перспективы создания новых лекарственных препаратов // Врач. – 2006. – № 12. – с. 30–34.
2. Kushner M. G. [et al.] D-cycloserine augmented exposure therapy for obsessive-compulsive disorder // Biological Psychiatry. – 2007. – t. 62. – №. 8. – p. 835–838.
3. Ebzeeva E.Yu. [et al.] Drug-induced (medication-induced) depression in neurology practice // Neurology, Neuropsychiatry, Psychosomatics. – 2021. – № 13(2). – p. 104–110.
4. Термический анализ лекарственного препарата теризидон / А. Я. Васин, Т. Х. До, Г. Г. Гаджиев и др. // Современные пожаробезопасные материалы и технологии: сборник материалов IV международной научно-практической конференции, посвященной 30-й годовщине МЧС России. Иваново, 15 октября 2020 г. – ФГБОУ ВО Ивановская пожарно-спасательная академия ГПС МЧС России Иваново, 2020. – с. 40–43.
5. Пожаровзрывоопасность лекарственного препарата Д-циклосерина / Т. Х. До, А. Я. Васин, А. Н. Шушпанов, А. К. Протасова // Успехи в химии и химической технологии. – 2019. – Т. 33, № 9 (219). – с. 72–74.
6. Протасова А. К. [и др.] Пожаровзрывоопасность д-серина и д-циклосерина // IV Международная научно-практическая конференция молодых ученых по проблемам техносферной безопасности: материалы конференции. – РХТУ им. Д.И. Менделеева Москва, 2020. – с. 20–24.
7. El-Obeid H.A. Analytical Profile of D-Cycloserine / H.A. El-Obeid, A.A. Al-Badr // Analytical Profiles of Drug Substances. – 1990. – p. 567–597.
8. Lee H.-H. IR Study on Aqueous Solution Behavior of D-Cycloserine / H.-H. Lee [et al.] // Spectroscopy Letters. – 1997. – vol. 30. – № 4. – p. 685–700.