

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева

**V МЕЖДУНАРОДНАЯ
НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
ПО ПРОБЛЕМАМ
ТЕХНОСФЕРНОЙ БЕЗОПАСНОСТИ**

Москва, 17 – 18 мая 2022 г.

Материалы конференции

Москва

2022

УДК 504.06:66(075)

ББК 65.9(2)248

М43

М43 V Международная научно-практическая конференция молодых ученых по проблемам техносферной безопасности: материалы конференции. – М.: РХТУ им Д. И. Менделеева, 2022.– 208 с.
ISBN 978-5-7237-1961-3

В сборник вошли статьи по актуальным проблемам техносферной безопасности. **Основными проблемно-тематическими направлениями работы конференции стали:** промышленная безопасность и охрана труда, пожарная безопасность, экологическая безопасность, особенности подготовки студентов и аспирантов в области техносферной безопасности.

Материалы сборника были представлены для широкого обсуждения 17 – 18 мая 2022 года на Международной научно-практической конференции молодых ученых по проблемам техносферной безопасности. Сборник представляет интерес для научно-технических работников, преподавателей, аспирантов и студентов.

УДК 504.06:66(075)

ББК 65.9(2)248

Редакционная коллегия:

Заместитель председателя конференции – профессор **Н. И. Акинин**

Ученый секретарь – профессор **А. Я. Васин**

Секретари оргкомитета – доцент **М. Д. Чернецкая**
доцент **А. Н. Шушпанов**

Научное издание

V МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ ПО ПРОБЛЕМАМ ТЕХНОСФЕРНОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

Материалы конференции

Текст репродуцирован с оригиналов авторов
Компьютерная верстка: М. Д. Чернецкая

Подписано в печать 30.05.2022 г. Формат 60×84 1/16.
Усл. печ. л. 12,1. Уч.-изд. л. 21,6. Тираж 100 экз. Заказ

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
Издательский центр
Адрес университета и издательского центра: 125047 Москва, Миусская пл., 9

ISBN 978-5-7237-1961-3

© Российский химико-технологический
университет им. Д.И. Менделеева, 2022

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ВСПЫШКИ УГЛЕВОДОРОДОВ ПО ДАВЛЕНИЮ НАСЫЩЕННОГО ПАРА <i>Лукашова Д. Н., Райкова В. М.</i>	108
ОЦЕНКА ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫХ СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА ТЕРАФТАЛ <i>Батогова Д. М., Тимофеева В.А, Васин А. Я., Шушпанов А.Н., Гаджиев Г.Г.</i>	111
ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМООКСИДЛИТЕЛЬНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ДРЕВЕСИНЫ ОГНЕЗАЩИЩЕННОЙ ПРЕПАРАТОМ ББ-11 <i>Яковлева И.С., Мельников Н.О.</i>	115
ИЗУЧЕНИЕ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ СВОЙСТВ РАСТИТЕЛЬНОСТИ ЛЕСОПАРКА Г. МОСКВЫ, ВЛИЯЮЩИЕ НА ЕЁ ПОЖАРООПАСНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ <i>Фрикель М.Д., Пасхина Д.А., Аносова Е.Б.</i>	117
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВАКУАЦИИ ИЗ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ЗДАНИЙ ПРИ АВАРИЯХ СО ВЗРЫВАМИ И ПОЖАРАМИ ОПАСНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ <i>Смирнова А.А., Савицкая Т. В.</i>	121
ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС АВТОМАТИЗАЦИИ ПОИСКА ЭКСПЛУАТАЦИОННЫХ ОГРАНИЧЕНИЙ ЗДАНИЯ <i>Михайлова А.В., Чирков Б.В.</i>	124
НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ БЕЗОПАСНОСТИ ОБЪЕКТОВ ХРАНЕНИЯ НЕФТЕПРОДУКТОВ. <i>Ударцева О.В.</i>	127
АНАЛИЗ ИЗМЕНЕНИЙ НОРМАТИВНЫХ ДОКУМЕНТОВ В ОБЛАСТИ ПРОЕКТИРОВАНИЯ СИСТЕМ ПОЖАРНОЙ СИГНАЛИЗАЦИЙ <i>Кирдий Т.А., Мордвинова А.В.</i>	130
ПОЖАРООПАСНЫЕ СВОЙСТВА АЭРОЗОЛЬНОГО УПАКОВОЧНОГО МАТЕРИАЛА СРЕДСТВ БЫТОВОЙ ХИМИИ <i>Капизова А.М., Чернышова А.Г., Паняева К.В.</i>	132
секция 3. ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ	
КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГАЗОВОЙ ВРЕДНОСТИ И СОДЕРЖАНИЯ ОКСИДОВ АЗОТА (II) В ПРОДУКТАХ ВЗРЫВА МОДЕЛЬНЫХ ПРОМЫШЛЕННЫХ СОСТАВОВ НА ОСНОВЕ АММИАЧНОЙ СЕЛИТРЫ <i>Султанов Е.В., Булушев Д.А., Акинин Н.И.</i>	137
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОНИКАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ЗАЩИТНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ДРЕВЕСИНЫ <i>Винокурова В.В., Монахов А.А., Мельников Н.О., Максименко С.А.</i>	142
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДИК РАСЧЕТА ВЫБРОСОВ ВРЕДНЫХ (ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ) ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРНЫЙ ВОЗДУХ СТАЦИОНАРНЫМИ ИСТОЧНИКАМИ ДОБЫВАЮЩЕЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ <i>Чукарева А.А., Михеев Д.И.</i>	145
ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕПАДА ДАВЛЕНИЯ НА ФИЛЬТРОВАЛЬНОЙ ПЕРЕГОРОДКЕ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ВИБРАЦИОННОГО ФИЛЬТРА НА ИСПЫТАТЕЛЬНОЙ УСТАНОВКЕ И С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ANSYS CFX <i>Фролов Н.П., Девисилов В.А.</i>	149
СПОСОБЫ СНИЖЕНИЯ ПОТЕРЬ ТЕПЛОТЫ И ИНТЕНСИВНОСТИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ ОБЪЕКТОВ ЭЛЕКТРОМОБИЛЬНОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ КРУПНОГО ГОРОДА <i>Трофименко Ю.В., Кутырин Б.А., Галышев А.Б., Носов С.М.</i>	152
АНАЛИЗ ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ, СОДЕРЖАЩИХ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ О КОЛЛОИДНОМ ОКСИДЕ МАРГАНЦА <i>Острокопытов Е.В., Кузнецов В.В., Серегин В.В.</i>	155

УДК 615.011

ОЦЕНКА ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫХ СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА ТЕРАФТАЛ

Батогова Д. М., Тимофеева В.А., Васин А. Я., Шушпанов А.Н., Гаджиев Г.Г.
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

Расчетными и экспериментальными методами определены основные показатели пожаровзрывоопасности лекарственного препарата Терафтал. С помощью программного комплекса CSChemBioUltra 14 рассчитано значение энтальпии образования в газообразной фазе. Учитывая энтальпии фазовых переходов, была определена теплота сгорания терафталла. Показано, что терафтал обладает высокой термической стойкостью.

Ключевые слова: терафтал, энтальпия образования, теплота сгорания, термическое разложение.

EVALUATION OF FIRE AND EXPLOSIVE PROPERTIES OF THE TERAFTAL

Batogova D. M., Timofeeva V.A., Vasin A. Y., Shushpanov A.N., Gadzhiev G.G.
D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

The main indicators of fire and explosion hazard of the drug Teraftal have been determined by computational and experimental methods. With the help of the CSChemBioUltra 14 software package, the value of the enthalpy of formation in the gaseous phase was calculated. Taking into account the enthalpy of phase transitions, the heat of combustion of Teraphthal was determined. It is shown that Teraphthal has a high thermal stability.

Keywords: teraphthal, enthalpy of formation, heat of combustion, thermal decomposition.

Терафтал (натриевая соль 4,5-октакарбокситфалоцианина кобальта) – новый препарат для бинарной каталитической терапии злокачественных заболеваний. Образец был синтезирован в ФГУП «ГНЦ «НИОПиК» и представлен для исследований. С помощью расчетных и экспериментальных методов были определены показатели пожаровзрывоопасности терафталла. Аналогичные расчеты для других лекарственных препаратов выполнены в работах [1-5].

Эмпирическая формула: $C_{40}H_{10}O_{16}N_8Na_8Co$. Это твердое порошкообразное вещество темно-синего цвета, хорошо растворяется в воде. Молярная масса: 1101 г/моль. Структурная формула терафтала приведена на рис. 1.

Для подтверждения химического строения вещества использовался метод ИК-спектроскопии, проведенный на ИК-Фурье-спектрометре Nicolet 380 FT-IR. Исследование было проведено в ЦКП РХТУ им. Д.И. Менделеева. Соотношения спектров выполнялись при помощи [6].

Для терафтала были обнаружены волновые числа, характерные для таких связей, как: ароматические кольца (ν , 1448 cm^{-1}), пироллы (ν , 1560 cm^{-1}), имины (ν , 1560 cm^{-1}). Таким образом, химическое строение было подтверждено присутствием на ИК-спектре полос поглощения, характерных для соединения.

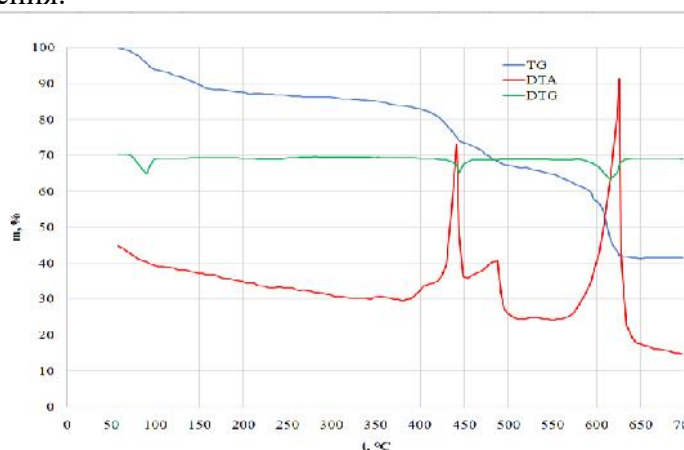
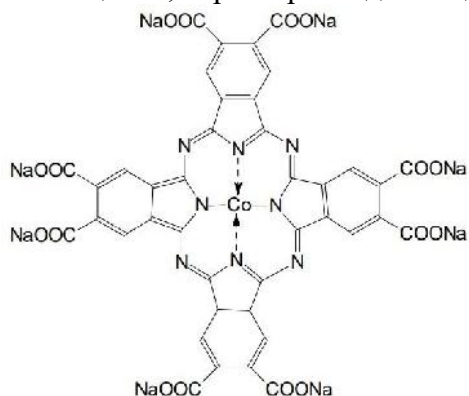


Рис. 1. Структурная формула Терафтала.

Рис. 2. Дериватограмма терафтала при скорости нагрева $10\text{ }^\circ\text{C}$ в минуту (воздух).

Термоанализ образца выполнялся на дериватографе типа “С” Паулик-Паулик-Эрдей. Характерные TG-DTA кривые терафтала (скорость нагрева $10\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$, воздух) представлены на рис. 2.

Терафтал оказался достаточно термостойким веществом. При $67\text{ }^\circ\text{C}$ начинается потеря массы порядка 8 %. Характер убыли массы при этом не резкий, связанный с испарением воды. На кривой DTA при этом виден слабо дифференцированный эндоэффект. При $107\text{ }^\circ\text{C}$ есть небольшой перелом кривой TG, и без выхода на плато начинается второй этап потери массы (6 %), обусловленный, видимо, удалением легколетучих примесей. В сумме потеря массы составляет 14 %.

Далее без особых изменений происходит этап нагрева до $410\text{ }^\circ\text{C}$. При этой температуре начинается заметное ускорение потери массы, которое сопровождается сильным экзотермическим эффектом. Скачок потери массы составляет при этом 12 %. Сразу после первого экзоэффекта, при $450\text{ }^\circ\text{C}$, начинается второй, менее ярко выраженный экзоэффект, который сопровождается потерей массы около 9 %. Третий ярко выраженный экзоэффект начинается при $570\text{ }^\circ\text{C}$, сопровождается потерей массы 24 % и обуславливается, видимо, самовоспламенением образца. На основании этого можно предположить, что температура самовоспламенения терафтала будет составлять около $600\text{ }^\circ\text{C}$. Наличие двух первых экзоэффектов указывает на двухступенчатый процесс термического разложения вещества.

Температура плавления терафтала экспериментально была определена на установке ОТП [7]. При температуре $410\text{ }^\circ\text{C}$ наблюдаются следы плавления и комкования образца, а также выделение небольшого количества серых паров. Видимо, происходит плавление с термическим разложением вещества. В дальнейшем температура плавления терафтала использовалась для расчета энтальпии плавления.

Важным показателем пожарной опасности веществ и материалов является теплота сгорания. Для ее расчета необходимо знать значение энтальпии образования вещества в твердой фазе. Для этого была рассчитана энтальпия образования в газообразной фазе, и потом, учитывая величины фазовых переходов, посчитана энтальпия образования в твердой фазе.

Для терафтала расчетными методами были определены:

1. Энтальпия образования в газообразной фазе. В качестве основного метода использовался расчет при помощи программы MOPAC, которая позволяет выполнить квантовые полуэмпирические расчеты. Результаты расчета приведены в табл. 1.

Таблица 1. Расчет величины энтальпий образования терафтала в газообразной фазе посредством программного комплекса CSChemBioUltra 14.

Наименование гамильтониана	Энтальпия образования в MOPAC2016, кДж/моль	Среднее значение, кДж/моль
PM7	-592	-2377,5
PM7-TS	-453	
PM6	<u>-2207</u>	
PM6-D3H4	<u>-2399</u>	
PM6-DH+	<u>-2390</u>	
PM6-DH2	<u>-2390</u>	
PM6-DH2X	<u>-2390</u>	
PM6-D3	<u>-2489</u>	
PM5	-829	

Для расчета среднего значения были использованы близкие значения энтальпий образования в газообразной фазе.

Второй способ расчета энтальпии образования терафтала в газообразной фазе (метод аддитивных связей $\Delta H_{\text{обp}}^{\circ} = 438,32$ кДж/моль) не показал сходимости и в дальнейшем не был учтен.

2. Учитывая значения фазовых переходов (плавления и испарения) была рассчитана энтальпия образования терафтала в твердой фазе $\Delta H_{\text{обp}}^{\circ} = -2524,49$ кДж/моль.

3. Теплота сгорания:

А) по закону Гесса для продуктов сгорания Na_2CO_3 и CoCO_3 $\Delta H_{\text{cr}}^{\circ} = -15,63$ МДж/кг;

Б) по формуле Коновалова-Хандрика $\Delta H_{\text{cr}}^{\circ} = -14,24$ МДж/кг.

Для терафтала теплота сгорания была посчитана по закону Гесса (рекомендуется в качестве справочных величин), и дополнительно она была посчитана по формуле Коновалова-Хандрика. Результаты двух методик имеют небольшое расхождение, что, видимо, обусловлено сложностью строения терафтала.

Таблица 2. НКПР ароматических веществ, имеющих в составе группы $-\text{COONa}$

№ п/п	Название вещества	Мол. масса, г/моль	Доля $-\text{COONa}$, % масс.	Доля Na, % масс.	НКПР, г/м ³
1	Карфециллина натриевая соль, $\text{C}_{23}\text{H}_{21}\text{O}_6\text{N}_2\text{SNa}$	476	14,08	4,83	72,5
2	Ампициллина натриевая соль, $\text{C}_{16}\text{H}_{18}\text{N}_3\text{O}_4\text{SNa}$	371	18,06	6,20	42,5
3	Мононатриевая соль 4-хлорфталевой кислоты, $\text{C}_8\text{H}_4\text{O}_4\text{ClNa}$	476	30,11	10,34	ПВБ
4	Натриевая соль п-аминосалициловой кислоты, $\text{C}_7\text{H}_6\text{NNaO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	211	31,75	10,90	76
5	Натриевая соль м-нитробензойной кислоты, $\text{C}_7\text{H}_4\text{NNaO}_4$	189	35,45	12,17	500
6	Терафтал (исследуемый образец) $\text{C}_{40}\text{H}_{10}\text{O}_{16}\text{N}_8\text{Na}_8\text{Co}$	1101	48,68	16,71	прогноз - ПВБ

В молекуле терафтала присутствуют 8 групп $-\text{COONa}$, поэтому было проведено исследование влияния этих групп на величину нижнего концентрационного предела распространения пламени (НКПР) пылевоздушных смесей. Аналогичные исследования по влиянию различных функциональных групп и заместителей в структуре вещества на величину

НКПР проводились в работах [8, 9]. При этом было показано, что галогены Cl, Br и группа –SO₃Na являются самоингибиторами процесса горения пылей. При содержании групп –SO₃Na 20 %, или брома 25 %, или хлора 30 % масс. в структуре вещества, аэрозоль становится пожаровзрывобезопасной (ПВБ). В табл. 2 представлены ароматические вещества, имеющие в своем составе группы –COONa. Данные получены из справочника [10].

Из таблицы 2 видно, что вещества 4 и 5, содержащие 31 % и 35,5 % масс. групп –COONa имеют НКПР, а вещество 3, содержащее 30 % масс. групп –COONa является ПВБ. Это говорит о том, что мы находимся в области неустойчивого влияния групп –COONa на процесс горения пылей, когда аэрозоль одних веществ воспламеняется, а других нет при одинаковом содержании групп –COONa. Терафтал имеет почти 50 % масс. групп –COONa. Кроме кислорода, в составе вещества также присутствует еще один инертный элемент - азот. Он составляет 10 % масс. Суммарно группы –COONa и азот составляют около 60 % масс., что выше нижнего предела области неустойчивого флегматизирующего влияния инерта [11]. Исходя из этого, можно сделать предположение, что аэрозоль терафтала будет пожаровзрывобезопасной.

Экспериментальные данные позволяют сделать вывод о том, что препарат терафтал является термически стабильным веществом. Его температура начала экзотермического разложения составляет 410 °С. Интенсивное экзотермическое разложение, а также наличие экзоэффекта самовоспламенения косвенно указывает на то, что терафтал является горючим веществом.

Расчетными методами были найдены энтальпия образования и теплота сгорания Терафтала. Также было сделано предположение, что аэрозоль терафтала является пожаровзрывобезопасной.

Авторы благодарят Центр коллективного пользования РХТУ им. Д.И. Менделеева за быстрый и качественный анализ представленного образца.

Литература

1. Васин А.Я., Аносова Е.Б., Маринина Л.К., Гаджиев Г.Г. Пожаровзрывоопасность новых фармацевтических препаратов и полупродуктов их синтеза // Химическая промышленность сегодня. – 2012. – № 5. – С. 47-55.
2. Васин А.Я., До Т. Х., Акинин Н.И., Гаджиев Г.Г., Шушпанов А.Н. О механизме термического разложения D-циclosерина и теризидона // Безопасность труда в промышленности. — 2022. — № 1. — С. 20–26. DOI: 10.24000/0409-2961-2022-1-20-26.
3. До Т.Х., Васин А.Я., Шушпанов А.Н., Протасова А.К. Пожаровзрывоопасность лекарственного препарата D-циclosерина // Успехи в химии и химической технологии. — 2019. — Т. 33, № 9 (219). — С. 72–74.
4. Некрасова Д. М., Васин А. Я., Шушпанов А. Н. Оценка пожаровзрывоопасных свойств лекарственного препарата тиосенса // Успехи в химии и химической технологии. – 2021. – Т. 35, № 10 (245). – С. 44–46.
5. Васин А.Я., Хынг Д.Т., Гаджиев Г.Г., Райкова В.М., Шушпанов А.Н. Термическое разложение D-циclosерина и теризидона// Безопасность труда в промышленности. — 2021. — № 12. — С. 72–78. DOI: 10.24000/0409-2961- 2021-12-72-78
6. Тарасевич Б.Н., ИК спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы. // МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра органической химии, М., 2015, 55 с.
7. ГОСТ 12.1.044-89 (84) ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения, 1989 г.
8. Васин А.Я., Блохина О.А., Маринина Л.К. Изучение ингибирующего действия групп -SO₃Na на воспламенение аэрозолей ароматических сульфосолей натрия. // Наука производству, 2004, № 7, с. 26-30.
9. Васин А.Я. Изучение влияния различных функциональных заместителей и групп на взрывоопасность органических пылей // Химическая промышленность сегодня, М., 2007, № 1, с. 35-39.

10. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения. Справочник. Часть 1, 2. // М. Ассоциация «Пожнаука», 2004 г.
11. Платонова С.А., Шушпанов А.Н., Гаджиев Г.Г., Васин А.Я. Изучение флегматизирующего действия инертных элементов в структуре вещества на горение пылей //Сб. материалов XXVII Межд. н/п конференции Предупреждение. Спасение. Помощь – 2017, с. 81-84.