

Полученные в работе данные о пожаровзрывоопасности новых органических соединений имеют большое практическое значение. Они будут переданы в ГНЦ НИОПИК с целью создания безопасных условий ведения технологических процессов и средств взрывозащиты.

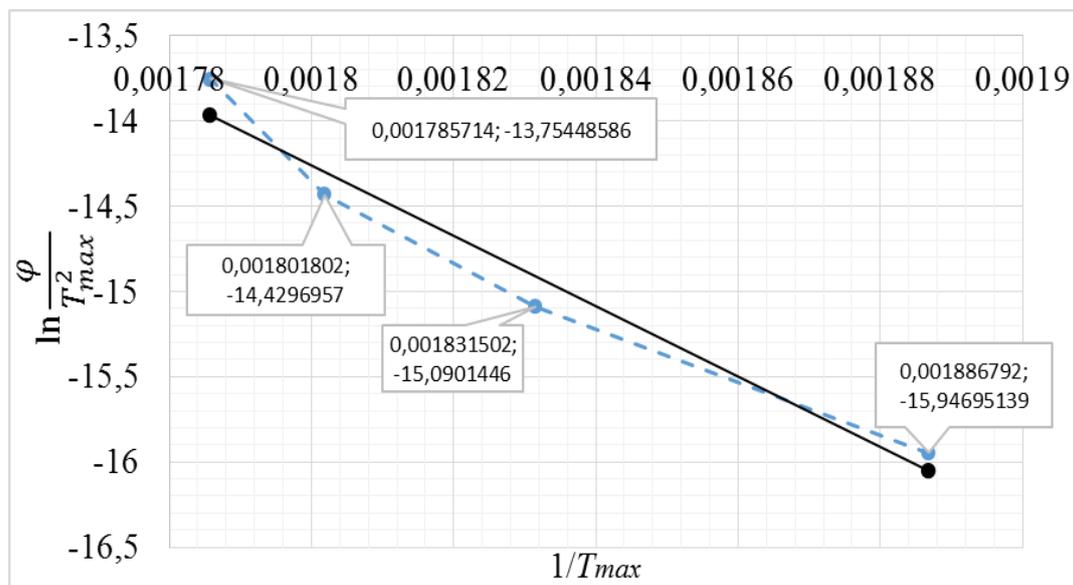


Рис. 2. Зависимость  $\ln \frac{\varphi}{T_{max}^2}$  от  $\frac{1}{T_{max}}$  метилового эфира 5-НЛК.

### Литература

- ГОСТ 12.1.044-89 (84) ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения, 1989 г.
- Корольченко А. Я., Корольченко Д. А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения. Справочник. Часть 1. // М. Ассоциация «Пожнаука», 2004 г., 713 с.
- Монахов В. Т. Методы исследования пожарной опасности веществ. - Москва: Химия, 1979, 416 с.
- Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства жидкостей и газов. - Л.: Химия, 1982, 592 с.
- Программное обеспечение / ChemOffice // ChemBio3D 14.0 UserGuide / ver. 2014 [электронный ресурс]. – Режим доступа [www.cambridgesoft.com](http://www.cambridgesoft.com) (дата обращения 20.02.2017)
- Kissinger H. E. Reaction kinetics in differential thermal analysis, Anal. Chem., 1957, Vol.29 (11), pp. 1702–1706.

УДК 615.011, 614.838.12

## ОЦЕНКА ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНОСТИ ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА АДК-175

*И.И. Черепихина, О.С. Канаева, А.Н. Шушпанов, А. Я. Васин  
Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева*

При производстве, эксплуатации и хранении фармацевтических препаратов зачастую происходит пылеобразование. Так как пылевоздушные смеси подвержены горению и взрыву, с препаратами следует проводить ряд испытаний на определение пожаровзрывоопасных

свойств. Такой подход обеспечит безопасность на производстве, сведет к минимуму риск поломки оборудования, обезопасит сотрудников от несчастных случаев, поможет подобрать средства индивидуальной защиты.

Исследованное вещество было получено из НИИ фармакологии им. В.В. Закусова. Соединение имеет белый цвет с желтоватым оттенком, является кристаллическим порошком. Это соединение хорошо растворимо в этаноле, хлороформе, практически не растворяется в ацетоне и эфире. АДК-175 чувствителен к свету (на свету желтеет). Эмпирическая формула  $C_{28}H_{44}N_4O_4 \cdot HCl$ . Структурная формула показана на рис. 1.

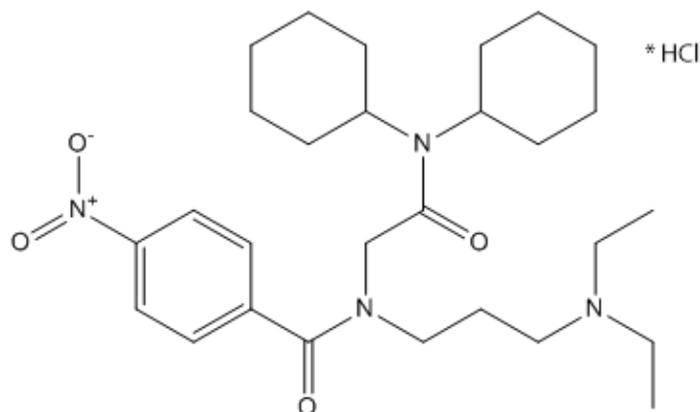


Рис. 1. Структурная формула АДК-175

Для подтверждения структурной формулы АДК-175 использовался метод ИК-спектроскопии. Образец был запрессован в полупрозрачную таблетку с навеской КВг и проанализирован при помощи ИК-Фурье-спектрометра Nicolet 380 FT-IR. Результаты соотнесения спектров приведены в табл. 1 [1].

Таблица 1

Идентификация результатов ИК-спектроскопии АДК-175

Структурные фрагменты и признаки	Волновые числа справочные ( $cm^{-1}$ )	Волновые числа экспериментальные ( $cm^{-1}$ )
$C_{аром} — C$	1450-1490	1455,9 1468,5
$C_{аром} — H$	1000-1070 800-860	1014,9 1046,5 1058,5 829 847,3 856,4
$—CH_2—$	2940-2915 2870-2845	2929,6 2852,8
2 группы $C=O$ в разных циклах	1655-1635	1645,4
$O_2N—$	1300-1255	1302,3 1285,4 1268,7
$(CH_2)_3$	720-740	733,5
$—C_2H_5$	1075-1000 1350-1260	1074,5 1058,5 1046,5 1014,9 1348,2 1302,3 1285,4 1268,7
Соединение является аминокислотой	2760-2530 1335-1300	2568,7 1302,3

Наличие указанных в таблице полос поглощения является подтверждением химического строения вещества.

В работе проводилась оценка термической устойчивости АДК-175. Вещество подвергалось исследованию методом ДТА на приборе фирмы NETZSCH STA 449 F3 Jupiter для синхронного анализа ТГ/ДСК. Термограмма приведена на рис. 2, из которой видно, что при температуре 196,4 °С на кривой ДСК наблюдается эндоэффект, обусловленный плавлением вещества. При температуре 241 °С наблюдается начало убыли массы без выделения тепла, которое, видимо, обусловлено отрывом группы HCl. При температуре 250 °С наблюдается начало экзотермического эффекта с потерей массы до 40 масс. %, обусловленное дальнейшим разложением вещества. Величина экзотермического эффекта составила 319,7 кДж/кг.

Термический распад вещества, видимо, связан с отрывом нитрогруппы от молекулы вещества и разрывом одной из связей C-N, что подтверждается ИК-спектром продуктов распада, в котором были обнаружены пики, характерные для нитрилов.

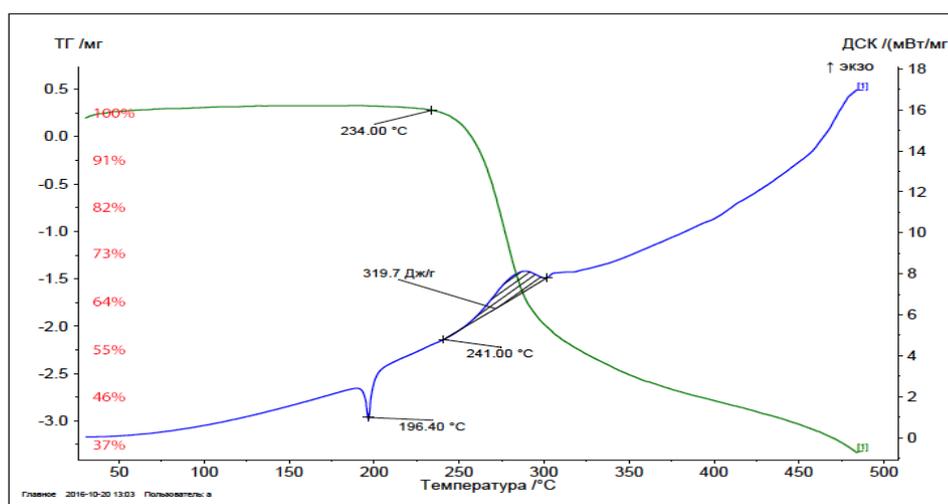


Рис. 2. Термограмма АДК-175, скорость нагрева 5 °С/мин

Таблица 2

Энтальпии образования АДК-175 в газовой фазе

Метод	Метод минимизации энергии молекул, КДж/моль	Метод поиска переходных состояний, КДж/моль	Среднее значение, КДж/моль
AM1	-346,16	-329,21	-489,0
MNDO	-190,05	-118,14	
MNDOd	-187,32	-123,18	
PM3	-495,71	-466,73	
PM5	-506,87	-479,29	
PM6	-504,32	-478,50	
PM7	-506,94	-480,81	
RM1	-469,09	-448,52	
Метод аддитивных связей [2]	-513,14		
Метод аддитивных групповых вкладов [3]	-520,22		
Метод Бенсона [4]	-486,63		

Зачеркнутые значения не учитывались из-за большой погрешности.

Одним из следующих этапов оценки данного вещества было определение энтальпии образования. Энтальпия образования в газовой фазе рассчитывалась несколькими методами, в том числе в программе ChemBioOffice. Результаты расчетов представлены в таблице 2.

Для вещества были определены значения энтальпии плавления и испарения. С учетом их значений была рассчитана энтальпия образования АДК-175 в твердом состоянии, равная - 613,89 кДж/моль.

В работе была определена энтальпия сгорания вещества по закону Гесса и по методу Коновалова-Хандрика [5]. Два метода показали схожие значения и составили -33540,53 кДж/моль и -33365,3 кДж/моль соответственно.

Также по руководству [2] были рассчитаны пожаровзрывоопасные характеристики, такие как нижний концентрационный предел распространения пламени (НКПР), максимальное давление взрыва ( $P_{max}$ ), максимальная скорость нарастания давления взрыва ( $dP/dt$ ). Они представлены в таблице 3.

Таблица 3

Показатели пожаровзрывоопасности пылей АДК-175

Вещество	НКПР, г/м <sup>3</sup>	$P_{max}$ ,кПа	$dP/dt$ , кПа/с
АДК-175	24	464,1	34807,5

НКПР также был определен экспериментальным путём в стеклянном взрывном цилиндре по методике ГОСТ 12.1.044-84. Получено значение 57 г/м<sup>3</sup>, что значительно превышает рассчитанную величину, что может быть обусловлено высокой термической стойкостью вещества и значительным содержанием инертных элементов N, O и группы HCl (31,3 масс. %) в структуре вещества. По классификации Гаджелло пыль вещества АДК-175 относится к группе взрывоопасных.

В работе определено, что вещество обладает достаточно высокой термической стойкостью ( $t_{нир} = 250$  °С), а ее пылевоздушная смесь является взрывоопасной. По закону Гесса определена величина теплоты сгорания вещества. Для получения полной оценки пожаровзрывоопасности требуется дальнейшее исследование вещества.

#### Список литературы

1. Беллами Л. Дж. Инфракрасные спектры сложных молекул. Пер. с англ. Под ред. Ю. А. Пентина // М.: Изд-во Иностранной литературы, 1963, 592 с.
2. Расчет основных показателей пожаровзрывоопасности веществ и материалов. Руководство // М., ВНИИПО, 2002, 77с.
3. Пальм В.А. Введение в теоретическую органическую химию. Учебное пособие для университетов // М.: Высшая школа, 1974, 446 с.
4. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства жидкостей и газов //Л.:Химия, 1982, с. 216-236.
5. Монахов В.Т. Методы исследования пожарной опасности веществ //М.: Химия, 1972, 416 с.