

приближается к нулю, поэтому в данном случае определять время полного истечения из емкости не имеет практического смысла.

Предложенная компьютерная модель представляет практический интерес для прогнозирования динамики аварийного истечения участков трубопроводов и емкостей, содержащих легковоспламеняющиеся жидкости. Эти вопросы имеют большое значение для определения материального и экологического ущерба от аварии, а также для расчета страховых выплат.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бубнов В. Б., Куликов И.М. Анализ подходов к прогнозированию динамики аварийного истечения газов. Сборник материалов III Международной научно-практической конференции «Современные пожаробезопасные материалы и технологии» (11.12.2019). С. 53-56.

2. Бубнов В.Б., Елин Н.Н., Куликов И.М. Прогнозирование процессов аварийных выбросов в системах нефтесбора/ Современные проблемы гражданской защиты. № 2 (35), 2020. С. 42-47.

УДК 544.452:614.841.41

*А. Я. Васин, Т. Х. До, Г. Г. Гаджиев, А. Н. Шушпанов, А. К. Протасова*  
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева»

#### ТЕРМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА ТЕРИЗИДОН

Проведено исследование термического разложения препарата Теризидон (4-[[4-[(3-Оксо-1,2-оксазолидин-4-ил)иминометил]фенил]метилен-амино]-1,2-оксазолидин-3-он) методом ДТА. Определены кинетические параметры термической деструкции вещества по методу Киссинджера.

**Ключевые слова:** теризидон, пожаровзрывоопасность веществ, термический анализ, энергия активации.

*A. Y. Vasin, Do T. H., G. G. Gadzhiev, A. N. Shushpanov, A. K. Protasova*

#### THERMAL ANALYSIS OF THE DRUG TERIZIDONE

Research of the thermal decomposition of the drug Terizidone (4-[[4-[(3-Oxo-1,2-oxazolidin-4-yl) iminomethyl] phenyl] methylene-amino]-1,2-oxazolidin-3-one) was investigated by the DTA method. Kinetic parameters of thermal decomposition of a substance was determined by the Kissinger method.

**Key words:** terizidone, fire and explosion hazard of substances, thermal analysis, activation energy.

Обеспечение пожаровзрывобезопасности предприятий фармацевтической промышленности не перестает быть актуальным в связи с разработкой новых лекарственных препаратов. Одним из важных аспектов изучения пожаровзрывоопасных свойств веществ является изучение кинетических параметров термодеструкции.

Теризидон - бактериостатический антибиотик с широким спектром действия, был синтезирован ФГУП «ГНЦ «НИОПиК» в соответствии с Постановлением Правительства Российской Федерации № ВЗ-П-12 (подписано 6 марта 2008 г.) о развитии российской фармацевтической промышленности с перспективой до 2025 года.

Образец теризидона представляет собой мелкодисперсный (диаметр частиц фракции менее 100 мкм) белый порошок, содержание влаги в котором не превышает 2 %. Эмпирическая формула  $C_{14}H_{14}N_4O_4$ . На рис. 1 изображена структурная формула соединения.

Химическое строение теризидона было подтверждено [1] в ЦКП РХТУ им. Д.И. Менделеева с помощью метода ИК-спектроскопии посредством ИК-Фурье-спектрометра Nicolet 380 FT-IR.

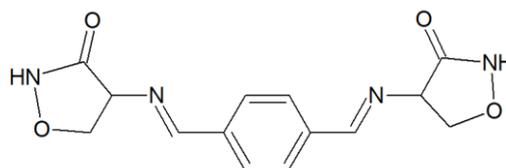


Рис. 1. Структурная формула теризидона

В статье [1] также представлены пожаровзрывоопасные свойства теризидона. Было показано, что теризидон – горючее вещество повышенной опасности. Повышенная опасность обусловлена довольно низкой температурой вспышки вещества (115 °С), а также взрывоопасностью его пылевоздушной смеси (НКПР = 63 г/м<sup>3</sup>).

Термогравиметрический анализ теризидона выполнен на дериватографе типа “С” Паулиг-Паулиг-Эрдей при различных скоростях нагрева. Полученные дериватограммы содержат 4 линии: Т – температура в печи, TG – кривая потери массы, DTA – линия, отражающая тепловые эффекты (пик вниз – эндотермический; пик вверх – экзотермический), DTG – производная от DTA.

На рис. 2 (а) представлена типичная дериватограмма теризидона, снятая в атмосфере воздуха при скорости нагрева 10 °С/мин. На кривой DTA видно, что при 132 °С (точка А) начинается интенсивный экзотермический эффект, сопровождающийся 5 % потерей массы (участок С). Максимум эффекта достигается при 160 °С (точка В). При соотношении площади пика теризидона с площадью пика фазового перехода эталонного вещества (аммиачной селитры с известной энтальпией фазовых переходов) [2], получено количество теплоты процесса 526 кДж/кг.

Чтобы понять обусловлен ли первый экзотермический пик на кривой DTA термоокислительными реакциями с участием кислорода воздуха или нет, была исследована дериватограмма в атмосфере инертного газа – азота (рис. 2 (б)). Видно, что характер экзотермического эффекта (а также площадь пика) и характер кривой убыли массы не изменились, из чего следует, что кислород воздуха не участвует в процессах термодеструкции теризидона.

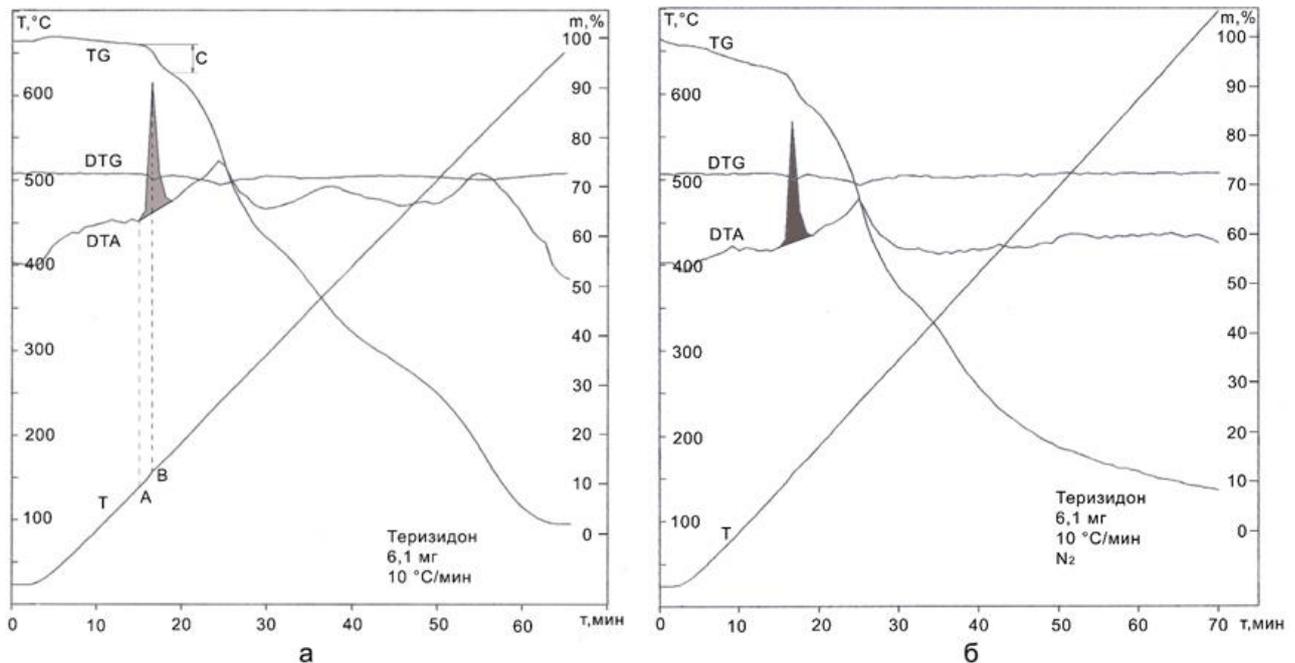


Рис. 2. Дериватограммы теризидона при скорости нагрева 10 °С/мин:  
а) атмосфера воздуха, б) атмосфера азота

Для определения энергии активации и предэкспоненциального множителя процесса разложения теризидона по методу Киссинджера [3] были сняты дериватограммы при разных скоростях нагрева (2,5; 5; 10 и 15 °С/мин), представленные на рис. 3.

Далее определялись температуры максимумов экзотермических пиков и рассчитывались необходимые для определения кинетических параметров значения, представленные в таблице.

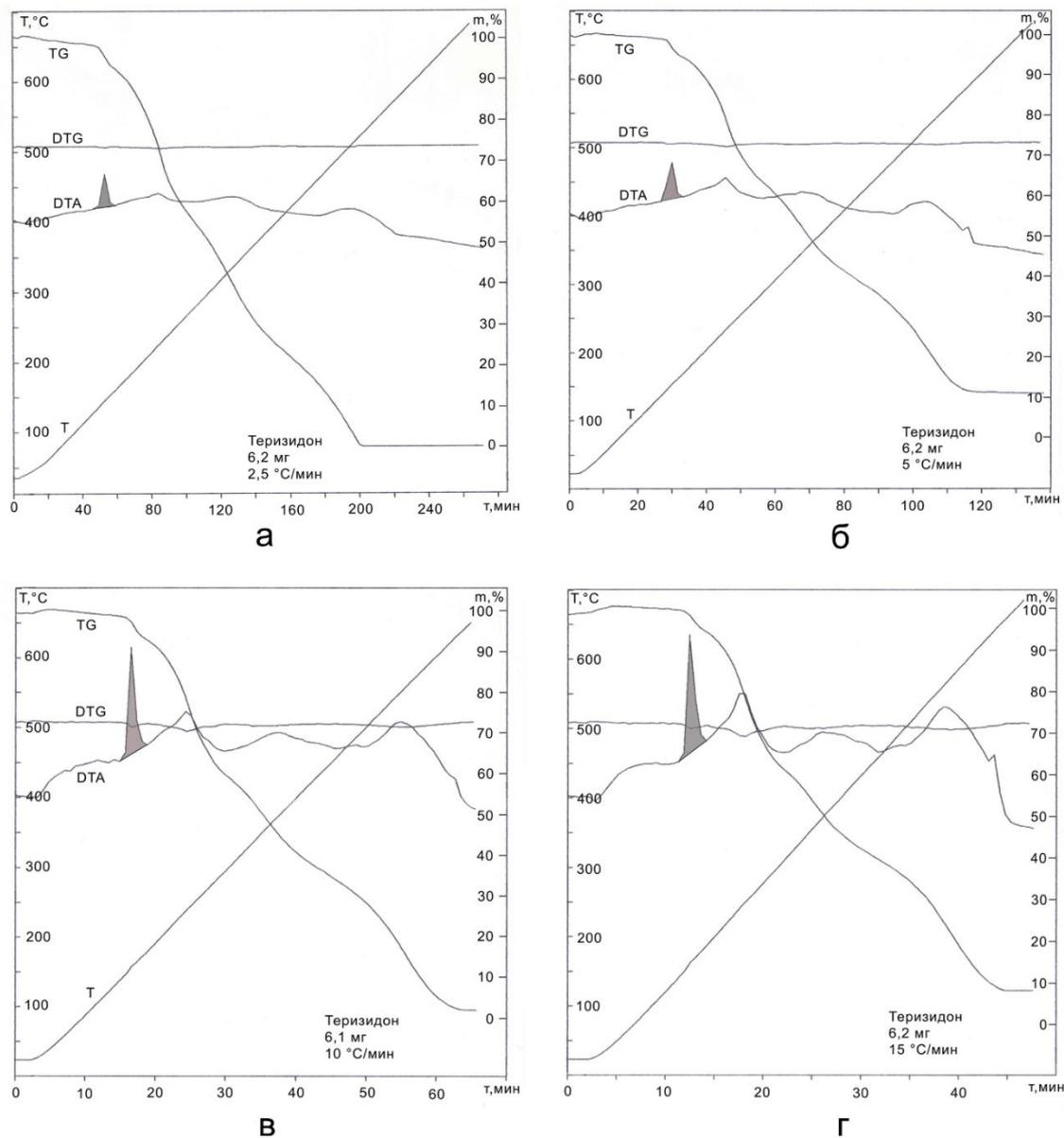


Рис. 3. Дериватограммы теризидона в атмосфере воздуха, скорость нагрева:  
а) 2,5 °С/мин; б) 5 °С/мин; в) 10 °С/мин; г) 15 °С/мин

Таблица 1. Значения, использованные при определении кинетических параметров термического разложения теризидона

φ, К/мин	φ, К/с	t <sub>max</sub> , °С	T <sub>max</sub> , К	1/T <sub>max</sub>	ln (φ/T <sup>2</sup> <sub>max</sub> )	k, с <sup>-1</sup>	ln k
2,5	0,0416	145	418	0,00239	-15,249	0,00429	-5,451
5	0,0833	152	425	0,00235	-14,589	0,00830	-4,791
10	0,1667	159	432	0,00231	-13,929	0,0161	-4,131
15	0,2500	162	435	0,00230	-13,537	0,02377	-3,739

Метод Киссинджера позволяет определять кинетические параметры на основании данных, получаемых из кривой ДТА, а именно температуры максимума пика экзотермического эффекта ( $T_{\max}$ ). В построении зависимости также фигурирует скорость нагрева ( $\varphi$ ). Зависимость  $\ln(\varphi/T_{\max}^2)$  от  $1/T_{\max}$  представляет собой прямую линию, представленную на рис. 4. Энергия активации вычисляется исходя из тангенса угла наклона этой прямой. Свободный член уравнения (27,776) позволяет определить предэкспоненциальный множитель А.

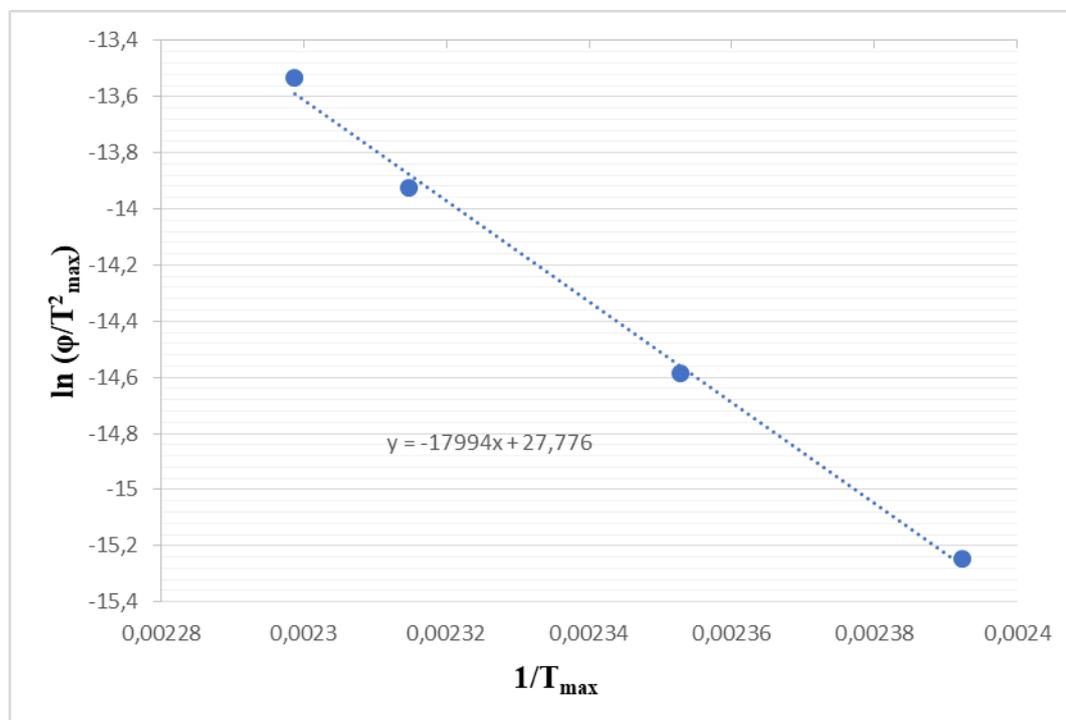


Рис. 4. Зависимость  $\ln(\varphi/T_{\max}^2)$  от  $1/T_{\max}$  для теризидона

Значения энергии активации ( $E_a$ ) и десятичного логарифма предэкспоненты ( $\lg A$ ), полученные по методу Киссинджера для теризидона составили 149,6 кДж/моль (35,76 ккал/моль) и 16,32 соответственно. В монографии [4] отмечается, что необходимо тщательно проводить исследования стабильности веществ с  $E_a$  ниже 37 ккал/моль, так как вещество может оказаться малостабильным или нестабильным. Небольшая энергия активации и достаточно большое значение предэкспоненты у теризидона согласуется с низкой температурой вспышки (115 °С) и позволяет отнести данное вещество к малостабильным.

Полученные данные могут использоваться технологами в целях снижения пожаровзрывоопасности производства на всех его этапах, включая начальный – стадию синтеза.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хынг Д. Т., Васин А. Я., Протасова А. К. Оценка пожаровзрывоопасных свойств лекарственного препарата теризидон // IV Международная научно-практическая конференция молодых ученых по проблемам технологической безопасности: материалы конференции. — РХТУ им. Д.И. Менделеева Москва, 2020. — С. 16–20.
2. Термический анализ и пожаровзрывоопасность новых лекарственных препаратов / А. Я. Васин, А. Н. Шушпанов, Е. Б. Аносова и др. // Химическая промышленность сегодня. — 2018. — № 5. — С. 48–55.
3. Homer E. Kissinger. Reaction Kinetics in Differential Thermal Analysis. ANALYTICAL CHEMISTRY, Vol. 29, No. 11, November 1957, 1702-1706.
4. Манелис Г.Б., Назин Г.М., Рубцов Ю.И., Струнин В.А. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов // М.: Наука, 1996. - 223 с.