

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 «УССТ-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

Некрасова Д.М., Васин А.Я., Шушпанов А.Н.

**ОЦЕНКА ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫХ СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВЕННОГО
ПРЕПАРАТА ТИОСЕНСА44**

Сидорова П.Г., Сизов В.А., Денисюк А.П.

**ВЛИЯНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА
КАТАЛИЗ ГОРЕНИЯ СРЕДНЕКАЛОРИЙНОГО БАЛЛИСТИЧНОГО ТОПЛИВА47**

Сосненко Е.С., Кондакова Н.Н.

**ВЛИЯНИЕ ТРИБУТИЛФОСФАТА НА ФАЗОВУЮ УСТОЙЧИВОСТЬ
ПЛАСТИФИЦИРОВАННОГО БУТАДИЕН-НИТРИЛЬНОГО КАУЧУКА.....50**

Степанова Е.Р., Сизов В.А., Лямкин Д.И., Гавриш А.В.

**РАЗРАБОТКА МОРОЗОСТОЙКОЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ КОМПОЗИЦИИ НА
ОСНОВЕ ПРОПИЛЕНОКСИДНОГО КАУЧУКА.....53**

**Информационные технологии, кибернетика и математика. Цифровые
двойники новых материалов и технологий**

Басистый И.В., Васецкий А.М.

**РАЗРАБОТКА КОНСТРУКТОРА ХИМИЧЕСКИХ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО
НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ57**

Бурцев В.Д., Митричев И.И.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ИРИДИЕВОГО ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОГО КАТАЛИЗАТОРА С
ВЫСОКОЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНЫМ ЛИГАНДОМ.....60**

Воронин М.Э., Гаврилова Н.Н., Кольцова Э.М.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ АГРЕГАЦИИ ЧАСТИЦ В
СИСТЕМЕ $\text{CeO}_2:\text{ZrO}_2 = 1:1$ 63**

Голубев Э.В., Кунаев Д.А., Сулова Е.Н., Лебедев А.Е.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ БИ(8-ОКСИХИНОЛЯТА) КАЛЬЦИЯ В
АЭРОГЕЛЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ66**

Железнова А.Е. Евдокимова С.А. Нохаева В.С.

**ПРОГНОЗИРУЮЩАЯ МОДЕЛЬ ОПИСАНИЯ РОСТА ЧИСЛЕННОСТИ
БИФИДОБАКТЕРИЙ В СМЕШАННОЙ КУЛЬТУРЕ69**

Зинченко Д.И., Куркина Е.С.

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЭПИДЕМИИ COVID-
19 НА ПРИМЕРЕ ГЕРМАНИИ72**

Казанова М.А., Савицкая Т.В.

**РАЗРАБОТКА СТРУКТУРЫ БАЗЫ ДАННЫХ ДЛЯ ИНФОРМАЦИОННОЙ
ПОДДЕРЖКИ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ МНОГОАССОРТИМЕНТНЫХ ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ76**

Демкин К.М., Комарова Д.С., Мочалова М.С., Ловская Д.Д.

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ЧАСТИЦ ХИТОЗАНОВЫХ
АЭРОГЕЛЕЙ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В МЕДИЦИНЕ80**

УДК 615.011

Некрасова Д.М., Васин А.Я., Шушпанов А.Н.

ОЦЕНКА ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫХ СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА ТИОСЕНСА

Некрасова Дарья Максимовна, бакалавр 4-го года обучения каф. ТСБ

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

Шушпанов Александр Николаевич, ст. преподаватель каф. ТСБ

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

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

В статье рассмотрены пожаровзрывоопасные свойства Тиосенса – фотосенсибилизатора, используемого в фотодинамической терапии, методе лечения опухолей головного мозга. Исследования проводились с использованием расчетных методов. По закону Гесса и методом Коновалова-Хандрика рассчитана теплота сгорания вещества.

Ключевые слова: Тиосенс, пожаровзрывоопасность, энтальпия образования, энтальпия сгорания.

EVALUATION OF THE FIRE AND EXPLOSION HAZARD PROPERTIES OF THE DRUG TIOSENS

Nekrasova D.M., Vasin A.Ya., Shushpanov A.N

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

The article discusses the fire and explosion properties of Tiosens, a photosensitizer used in photodynamic therapy, a method of treating brain tumors. The studies were carried out using computational methods. According to the Hess law and the Konovalov-Handrik method, the heat of combustion of a substance is calculated.

Key words: Tiosens, fire and explosion hazard, enthalpy of formation, enthalpy of combustion.

Введение

Первичные опухоли головного мозга являются причиной всего 1-2 % заболеваемости, связанной с раком. Терапия данных опухолей затруднена, потому что развивается в центральной нервной системе, которая защищена гематоэнцефалическим барьером. За последние десятилетия, несмотря на работу ученых, не было достигнуто заметных улучшений в лечении этой группы пациентов. Для оптимизации результатов терапии необходим поиск новых эффективных противоопухолевых препаратов и использование новых рациональных терапевтических методов. Одним из таких методов является фотодинамическая терапия (ФДТ), преимуществом которой является отсутствие серьезных местных и системных осложнений. Клинические исследования подтвердили эффективность ФДТ с фотосенсибилизаторами фотолон, аласенс, тиосенс и др. при опухолях головного мозга. Медиана выживаемости после ФДТ достигает 21 месяца, когда продолжительность жизни после комбинированной терапии составляет 8-12 месяцев [1]. Предметом исследования данной статьи является один из фотосенсибилизаторов – тиосенс.

Экспериментальная часть

Образец исследуемого вещества – тиосенса ((Алюминий 2,9,16,23 – тетрааксис (фенилтио) -29 Н, 31 Н – хлорид фталоцианина) был синтезирован в ФГУП «ГНЦ «НИОПиК». Его лекарственная форма разработана в Российском онкологическом научном центре им. Н.Н. Блохина РАМН. С помощью

расчетных методов нами были определены основные показатели пожаровзрывоопасности тиосенса. Аналогичные расчеты для других лекарственных препаратов выполнены в работах [2-4].

Образец представляет собой порошок темно-зеленого цвета.

Эмпирическая формула: $C_{56}H_{32}ClN_8S_4Al$

Молярная масса: 1007,61 г/моль. Структурная формула вещества приведена на рис.1.

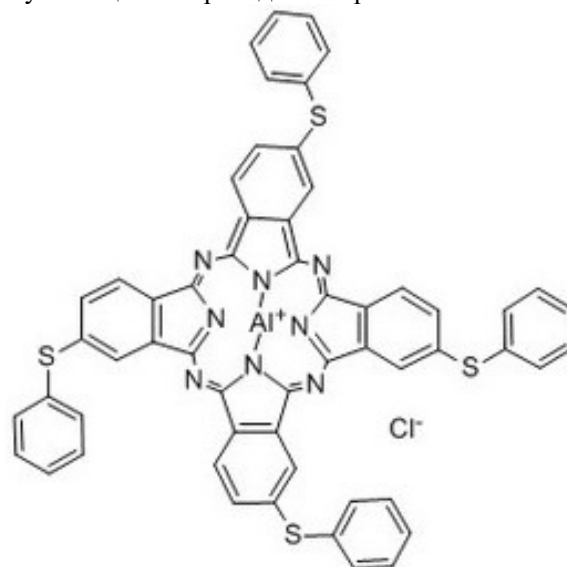


Рис. 1. Структурная формула тиосенса

Химическое строение подтверждено присутствием на ИК-спектрах полос поглощения, характерных для соединения. Для тиосенса были обнаружены волновые числа, характерные для таких связей, как: монозамещенные ароматические

соединения (1101,96 см⁻¹), пироллы (1567,66 см⁻¹), имины (1696,43 см⁻¹), сульфиды (687,09 см⁻¹) [5].

Для образца расчетными методами были получены:

1. Энтальпия образования в газовой фазе. Расчет проводился посредством программы MORAS, которая позволяет выполнять квантовые семиэмпирические расчеты. Значения энтальпий образования приведены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты расчета энтальпии образования посредством программного комплекса MORAS 2016

Наименование гамильтониана	Энтальпия образование в MORAS 2016, кДж/моль	Среднее значение, кДж/моль
AM1	<u>1611</u>	1052
MNDO	997	
MNDO-D	<u>1256</u>	
PM3	<u>1435</u>	
PM6	<u>1201</u>	
PM6-D3	1008	
PM6-DH+	1065	
PM6-DH2	1064	
PM6-DH2X	1065	
PM6-D3H4	1084	
PM6-D3H4X	1084	
PM7	<u>1333</u>	

Для расчета среднего значения были использованы близкие значения энтальпий образования.

2. Энтальпия плавления $\Delta H_{пл} = 35,2$ кДж/моль (по формуле Бретшнайдера).

Температура плавления, рассчитанная по программе EPI Suite, составила 349 °С.

3. Энтальпия испарения $\Delta H_{исп} = 135,9$ кДж/моль (по правилу Трутона).

Температура кипения, рассчитанная по программе EPI Suite, составила 1271 °С

4. Учитывая фазовые переходы, энтальпия образования в твердом состоянии $\Delta H_{тв}^0 = 880,9$ кДж/моль = 210,5 ккал/моль.

5. Энтальпия сгорания:

- По закону Гесса

$$\Delta H_{сг}^0 = -7042,4 \text{ ккал/моль} = -29,24 \text{ МДж/кг}$$

- По методу Коновалова-Хандрика

$$\Delta H_{сг}^0 = -7006,0 \text{ ккал/моль} = -29,09 \text{ МДж/кг}$$

Для исследуемого вещества тиосенса энтальпия сгорания была рассчитана по закону Гесса, также дополнительно она была рассчитана по методу Коновалова-Хандрика [6]. Результаты двух методик очень близки, что свидетельствует о достоверности расчетов.

Посредством Руководства ВНИИПО [7] для тиосенса были определены основные показатели пожаровзрывоопасности – нижний концентрационный предел распространения пламени (НКПР), максимальное давление взрыва (P_{max}), максимальная скорость нарастания давления взрыва $(dP/dt)_{max}$ и минимальное взрывоопасное содержание кислорода (МВСК). Полученные данные приведены в таблице 2. Исходной информацией для выполнения всех расчетов является знание структурной формулы вещества и значение энтальпии сгорания.

Таблица 2. Показатели пожаровзрывоопасности тиосенса

Показатели	$\Delta H_{сг}^0$, МДж/кг	НКПР, г/м ³	P_{max} , кПа	$(\frac{dP}{dt})_{max}$, МПа/с	МВСК, % (об.)
Значения	-29,24	27	740,9	55,6	11,6

Основные показатели пожаровзрывоопасности необходимы для установления мер безопасности на производстве исследуемого вещества.

Значения максимального давления взрыва и максимальной скорости его нарастания используются для подбора средств защиты технологического оборудования. МВСК позволяет определить среду ведения технологического процесса (в токе разбавленного или инертного газа). Нижний концентрационный предел распространения пламени используется для классификации пылей по степени пожаро- и взрывоопасности с учетом их свойств в осевшем и взвешенном состоянии. Исходя из классификации М.Г. Годжелло, тиосенс можно отнести ко II классу – взрывоопасные пыли с нижним концентрационным пределом распространения

пламени (воспламенения) от 16 до 65 г/м³. Также значение НКПР используется для категорирования помещений по взрывопожарной и пожарной опасности [8].

Заключение

Расчётными методами мы предварительно выяснили, что Тиосенс является пожаровзрывоопасным веществом. В дальнейшем будут вестись экспериментальные исследования этого образца, для подтверждения уже имеющихся данных.

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

Список литературы

1. Effectiveness of liposomal system of delivery of hydrophobic antineoplastic thiosens photosensitizer / Z.S Smirnova Z.S [и др.] // Bulletin of Experimental Biology and Medicine. – 2014. – № 4. – С. 480-482
2. До Т.Х., Васин А.Я., Протасова А.К. Оценка пожаровзрывоопасных свойств лекарственного препарата теризидон // IV Международная научно-практическая конференция молодых ученых по проблемам техносферной безопасности: материалы конференции. — РХТУ им. Д.И. Менделеева Москва, 2020. — С. 16–20.
3. Протасова А.К., До Т.Х., Васин А.Я., Пожаровзрывоопасность d-серина и d-циклосерина // IV Международная научно-практическая конференция молодых ученых по проблемам техносферной безопасности: материалы конференции. — РХТУ им. Д.И. Менделеева Москва, 2020. — С. 20–24.
4. Пожаровзрывоопасность d-циклосерина, теризидона и их полупродукта синтеза / А.Я. Васин [и др.] // Химическая промышленность сегодня. – 2021. – № 1. – С. 28-33.
5. 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.
6. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения: Справочное издание. Книга 1. // М., Химия, 2004. – 713 с.
7. Расчет основных показателей пожаровзрывоопасности веществ и материалов. // Руководство, М., ВНИИПО, 2002. – 77 с.
8. Безопасность жизнедеятельности в химической промышленности: Учебник / Под общей ред. Н.И.Акинина. – СПб.:Издательство «Лань», 2019. – 448 с.