

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

ОРГАНИЗАЦИЯ РАБОТ ПО ОБЕСПЕЧЕНИЮ БЕЗОПАСНЫХ УСЛОВИЙ ТРУДА НА УЧАСТКЕ ПО РЕМОНТУ ТРАНСФОРМАТОРОВ <i>Иванова М.С., Солонникова Н.В., Солонникова П.Д.</i>	53
ОБЕСПЕЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОБЕЗОПАСНОСТИ НА РАБОЧИХ МЕСТАХ С ПОВЫШЕННЫМ УРОВНЕМ ШУМА <i>Сидоров А.И., Зыкина Е.В.</i>	57
АНАЛИЗ ОПАСНОСТЕЙ И РИСКА НА ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ОБЪЕКТАХ ТОО «НЭЙБОРС ДРИЛЛИНГ КОМПАНИ» АТЫРАУСКОЙ ОБЛАСТИ <i>Щербакова Е.А., Ержанов Н.Д., Толешов А.К.</i>	60
АНАЛИЗ БЕЗОПАСНОСТИ ШАХТОСТРОИТЕЛЬНОГО ЦЕХА ДОНСКОГО ГОКа <i>Щербакова Е.А., Аскарлов Н., Толешов А.К.</i>	63
ДИНАМИКА ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ И АНАЛИЗ ПРОИЗВОДСТВЕННОЙ СРЕДЫ ПРЕДПРИЯТИЙ ВОРОНЕЖСКОГО РЕГИОНА <i>Митусова В.Е., Дорохина А.А.</i>	66
СРАВНЕНИЕ ОТЕЧЕСТВЕННОГО И ЗАРУБЕЖНОГО ОПЫТА ОБЕСПЕЧЕНИЯ ОХРАНЫ ТРУДА <i>Кандрашова Е.О.</i>	70
РАЗРАБОТКА СОЛНЕЧНОЙ СИСТЕМЫ ЭНЕРГОСНАБЖЕНИЯ ПРЕДПРИЯТИЯ <i>Мурадов Н. М.</i>	72
АНАЛИЗ ПРИЧИН ПРОИЗВОДСТВЕННОГО ТРАВМАТИЗМА НАЦИОНАЛЬНОЙ КОМПАНИИ КАЗАХСТАН ТЕМИР ЖОЛЫ НА ОСНОВЕ ПРИМЕНЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОГО МЕТОДА <i>Имангазин М.К., Кожамуратова Л.К., Жанаева Н.З., Унайбаев А.А.</i>	76
АНАЛИЗ ПОКАЗАТЕЛЕЙ БЕЗОПАСНОСТИ ДОРОЖНОГО ДВИЖЕНИЯ МОСКОВСКОЙ ОБЛАСТИ <i>Масленников П. В.</i>	80
КЛАССИФИКАЦИЯ И АНАЛИЗ ЧРЕЗВЫЧАЙНЫХ СИТУАЦИЙ В КЫРГЫЗСКОЙ РЕСПУБЛИКЕ НА ТРАНСПОРТЕ <i>Темирбек уулу Кубаныч</i>	84
секция 2. ПОЖАРНАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ	
СРАВНЕНИЕ ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫХ СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ D-ЦИКЛОСЕРИНА И ФОНТУРАЦЕТАМА <i>До Т. Х., Макарова В.О., Васин А. Я., Шушпанов А.Н.</i>	88
ВЛИЯНИЕ МАЛОТОКСИЧНОГО КАТАЛИЗАТОРА НА ПАРАМЕТРЫ ГОРЕНИЯ ВЫСОКОКАЛОРИЙНОГО БАЛИСТИЧНОГО ПОРОХА <i>Сидорова П.Г., Сизов В.А., Зар Ни Аунг, Рукина А.М.</i>	91
ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ К МЕХАНИЧЕСКИМ ВОЗДЕЙСТВИЯМ D-ЦИКЛОСЕРИНА, ТЕРИЗИДОНА И ИХ ПОЛУПРОДУКТА СИНТЕЗА <i>Игамбердиев Т. Б., Гаджиев Г. Г., Васин А. Я., До Т.Х.</i>	94
ТЕРМОАНАЛИЗ И КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ РАЗЛОЖЕНИЯ ДВУХ АЗОКРАСИТЕЛЕЙ <i>Казантинова М.М., Шушпанов А.Н., Васин А.Я.</i>	98
ТЕРМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНОСТИ КРАСИТЕЛЯ ОРАНЖ Ж <i>Терехова М.А., Шушпанов А.Н., Колосков С.А., Васин А.Я.</i>	102
АНАЛИЗ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОПАСНОСТИ ЧЕТЫРЕХ АЗОКРАСИТЕЛЕЙ РАЗЛИЧНОГО СТРОЕНИЯ <i>Безалтынных А. С., Райкова В. М., Васин А. Я., Шушпанов А.Н.</i>	105

секция 2. ПОЖАРНАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ

УДК 614.835

СРАВНЕНИЕ ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫХ СВОЙСТВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ D-ЦИКЛОСЕРИНА И ФОНТУРАЦЕТАМА

До Т. Х., Макарова В.О, Васин А. Я., Шушпанов А.Н.

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева

Аннотация: Приведена информация о ряде пожаровзрывоопасных свойств двух лекарственных препаратов, D-циклосерина и фонтурацетама, полученных при использовании ряда расчетных и экспериментальных методов. Установлено, что наличие группы [–C–O–N–] в составе пятичленного гетероцикла D-циклосерина значительно усиливает пожаровзрывоопасность вещества.

Ключевые слова: D-циклосерин, фонтурацетам, термический анализ, параметры пожаровзрывоопасности.

COMPARISON OF FIRE AND EXPLOSION HAZARDOUS PROPERTIES OF DRUGS D-CYCLOSERINE AND PHENYLPYRACETAM

T.H. Do, A.Y. Vasin, A. N. Shushpanov

Abstract: Information is provided on a number of fire and explosion hazardous properties of two drugs, D-cycloserine and phenylpiracetam, obtained using a number of calculation and experimental methods. It has been established that the presence of the [–C–O–N–] group in the composition of the five-membered D-cycloserine heterocycle significantly increases the fire and explosion hazard of the substance.

Key words: D-cycloserine, phenylpiracetam, thermal analysis, fire and explosion parameters.

Лекарственные препараты D-циклосерин ((R)-4-амино-3-изоксазолидинон) и фонтурацетам ((RS)-2-(2-оксо-4-фенилпирролидин-1-ил)-ацетамид) являются важными продуктами российской фармацевтической промышленности, разрабатываемыми в рамках Распоряжения Правительства РФ от 28.12.2012 № 2580-р с перспективой выполнения до 2025 года. В нынешней ситуации практически тотального эмбарго на поставки реагентов, полупродуктов и готовых лекарственных форм, налагаемого недружественными странами, вопросы импортзамещения полупродуктов и выход на самостоятельное производство жизненно важных лекарств имеют большое практическое значение для стабилизации и поддержания приемлемого уровня жизни в России. За время действия Распоряжения было разработано, произведено и исследовано большое количество лекарственных препаратов. Авторам настоящей статьи ранее приходилось работать над исследованиями в области пожаровзрывоопасности новых лекарственных препаратов под эгидой указанного Распоряжения, результаты предыдущих исследований опубликованы, в частности, в работе [1].

Образцы препаратов D-циклосерин и фонтурацетам были синтезированы на производственных мощностях ФГУ «ГНЦ «НИОПиК». В ходе исследований использованы расчетные и экспериментальные методы, посредством которых были получены параметры пожаровзрывоопасности веществ и кинетические параметры начального этапа их термоллиза. Термический анализ был проведен методом TG-DТА на дериватографе типа «С» [2]. Условия эксперимента: динамический нагрев до заданной температуры с одинаковыми скоростями, равные навески образца для разных скоростей нагрева, кондиционирование образцов согласно ГОСТ Р 53293-2009, открытые корундовые тигли, окислительная атмосфера (воздух), сравнительный образец – Al₂O₃.

Оба образца представляют собой мелкодисперсные (диаметр частиц фракции < 100 нм) белые порошкообразные фракции лекарственных форм (действующие вещества), содержание

влаги – не более 2 %. Эмпирическая формула D-циклосерина – $C_3H_6N_2O_2$, молярная масса 102 г/моль; фонтурацетама – $C_{12}H_{14}N_2O_2$ и 218 г/моль соответственно. На рис. 1 показана структурная формула D-циклосерина, на рис. 2 – фонтурацетама.

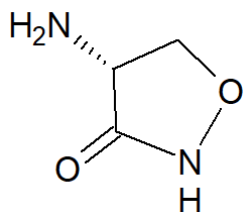


Рис. 1. Структурная формула D-циклосерина

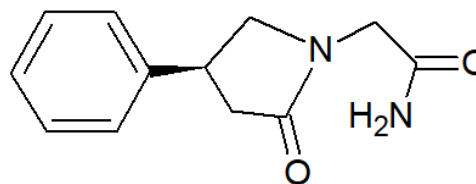


Рис. 2. Структурная формула фонтурацетама

В своей структуре оба образца содержат пятичленные гетероциклы, но природа этих гетероциклов различна. При изучении механизма разложения двух веществ с помощью ИК-спектроскопии было показано, что пятичленный гетероцикл D-циклосерина содержит нестабильную группу $[-C-O-N-]$, которая полностью разрывается при степени распада 23 %. Для фонтурацетама на ИК-спектрах практически не обнаруживается различий для твердых продуктов термообработки по сравнению с чистым веществом даже при максимальной степени распада в 88% [3].

Как было сказано выше, термический анализ проводили методом TG-DTA. Соответствующие кривые, полученные в ходе анализа D-циклосерина, представлены на рис. 3, для фонтурацетама – на рис. 4. Эти наиболее характерные TG-DTA кривые были получены при скорости нагревания $10\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{мин}$.

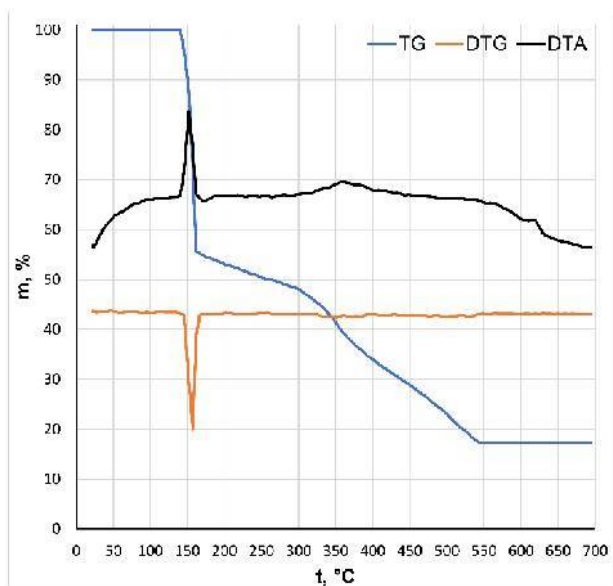


Рис. 3. TG-DTA кривые D-циклосерина в интервале температур 25 – 700 °C при скорости нагрева $10\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{мин}$

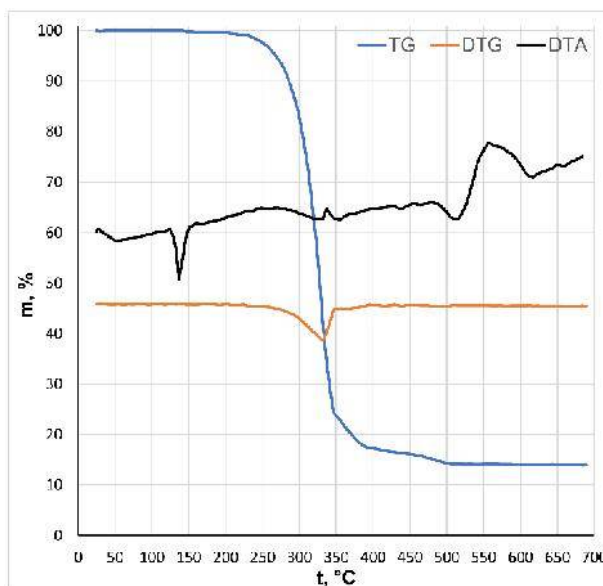


Рис. 4. TG-DTA кривые фонтурацетама в интервале температур 25 – 700 °C при скорости нагрева $10\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{мин}$

При указанной скорости нагревания на кривой DTA D-циклосерина отчетливо наблюдается интенсивный экзотермический эффект, связанный с разложением. Он начинается при $145\text{ }^{\circ}\text{C}$ и сопровождается значительной потерей массы (45 масс. %). При нагревании фонтурацетама до $130\text{ }^{\circ}\text{C}$ на кривой DTA появляется хорошо выраженный эндотермический эффект, не сопровождающийся потерей массы – его появление можно связать с плавлением вещества. Далее при температуре порядка $250\text{ }^{\circ}\text{C}$ наблюдается значительная потеря массы ($> 80\%$), обусловленная испарением и экзотермическим разложением, предполагаемым по характеру хода кривой TG. Сам экзотермический эффект на кривой DTA четко не дифференцируется.

Были рассчитаны величины экзотермических эффектов ($\Delta H_{\text{экз.эфф}}$) D-циклосерина и фонтурацетама через сравнение площадей соответствующих пиков с площадями пиков эталона. В качестве эталона брали аммиачную селитру [4]. Для начального этапа термоллиза были определены его кинетические параметры. Значения энергии активации (E_A) были получены двумя способами, оба из которых задействуют построение в координатах Аррениуса. Первый способ – метод Киссинджера, по нему для выполнения построения берутся температуры максимумов экзотермических эффектов, взятые при разных скоростях нагрева. Вторым способом стал методом Озава-Флинна-Уолла, включенный в ГОСТ 57951-2017, построение выполняется через ряд температурных показателей, взятых при различных степенях разложения образца. Все полученные результаты приведены в табл. 1.

Таблица 1. Величины экзотермических эффектов и кинетические параметры начального этапа термоллиза фонтурацетама и D-циклосерина

Вещество	M, г/моль	$\Delta H_{\text{экз.эфф.}}$, кДж/кг	E_A , кДж/моль		lgA (A в с ⁻¹)	k, с ⁻¹ (при 120 °С)
			по методу Озава-Флинна-Уолла	по методу Киссинджера		
D-циклосерин	102	294	157,0	158,4	17,6	0,000340
Фонтурацетам	218	48	75,8	75,6	4,1	0,000001

С помощью трех аддитивных методов и программы для квантовых полуэмпирических расчетов MORAS 2016 было рассчитано среднее значение энтальпий образования в газовой фазе ($\Delta H_{\text{f, 298 г.ф.}}$). Энтальпия образования в твердой фазе ($\Delta H_{\text{f, т.ф.}}$) рассчитана через энтальпии фазовых переходов ($\Delta H_{\text{пл}}$ – энтальпия плавления, $\Delta H_{\text{исп}}$ – энтальпия испарения). Теплота сгорания ($\Delta H_{\text{сг}}$) двух веществ рассчитана по закону Гесса, дополнительно она была рассчитана по методу Коновалова-Хандрика, сходимость результатов подтверждает корректность вычислений (такой подход неоднократно применялся авторами ранее, см. например [5,6]). Результаты расчета энтальпий образования и теплот сгорания приведены в таб. 2.

Таблица 2. Результаты расчета энтальпий образования и теплот сгорания D-циклосерина и фонтурацетама

Вещество	$\Delta H_{\text{f, 298 г.ф.}}$, кДж/моль	Энтальпия фазовых переходов		$\Delta H_{\text{f, т.ф.}}$, кДж/моль	$\Delta H_{\text{сг}}$, МДж/кг	
		$\Delta H_{\text{пл}}$, кДж/моль	$\Delta H_{\text{исп}}$, кДж/моль		по закону Гесса	по Коновалову-Хандрику
D-циклосерин	-177,8	19,8	49,2	-246,8	-17,6	-17,2
Фонтурацетам	-305,8	32,6	71,6	-410,0	-28,9	-28,9

Экспериментальными и расчетными методами по ГОСТ 12.1.044-89 [7] и руководству ВНИИПО [8] был получен ряд показателей пожаровзрывоопасности исследуемых веществ, результаты приведены в табл. 3.

Таблица 3. Показатели пожаровзрывоопасности D-циклосерина и фонтурацетама

	Аэрогель				Аэрозоль			
	$t_{\text{нэр}}$, °С*	$t_{\text{вос}}$, °С*	$t_{\text{сам}}$, °С*	Группа горючести	P_{max} , кПа**	$(dP/dt)_{\text{max}}$, МПа/с**	НКПР, г/м ³	МВСК, % об.**
D-циклосерин	115	–	415	горючее, легковоспламеняемое	683	51,2	57,0	10,6
Фонтурацетам	–	195	465	горючее	580	43,5	62,0	11,7

* – показатели пожаровзрывоопасности веществ, определенные на установке ОТП;

** – расчетные показатели пожаровзрывоопасности веществ.

Во время испытаний D-циклосерина в установке ОТП при определении $t_{н\text{эр}}$ (температура начала интенсивного экзотермического разложения) наблюдалось интенсивное разложение при достаточно низких температурах с выделением большого количества паров, вспыхивающих от внешнего источника и сгорающих за 2 – 3 с., а также значительная потеря массы. Данный образец проявляет склонность к взрывчатому превращению.

Группа $[-C-O-N-]$ в пятичленном гетероцикле D-циклосерина оказывает сильное влияние на стабильность вещества. Экспериментальные и расчетные результаты показывают, что D-циклосерин менее термически стабилен, чем фонтурацетам, и начинает интенсивное экзотермическое разложение при относительно низких температурах. D-циклосерин также опаснее фонтурацетама по показателям пожаровзрывоопасности. Таким образом, можно сделать вывод о том, что группа $[-C-O-N-]$ в пятичленном гетероцикле является эксплозифорной.

Авторы благодарят Центр коллективного пользования РХТУ им. Д.И. Менделеева за оперативный и точный анализ предоставляемых образцов.

Список литературы

1. Пожаровзрывоопасность новых фармацевтических препаратов и полупродуктов их синтеза / А. Я. Васин, Е. Б. Аносова, Л. К. Маринина, Г. Г. Гаджиев // Химическая промышленность сегодня. – 2012. – № 5. – С. 47-55.

2. Paulik J., Paulik F., Arnold M. Derivatograph-C: A microcomputer automated equipment for simultaneous TG, DTG, DTA, EGA and TD / *Thermochimica Acta.* – 1986 – Vol.107 – P.375–378.

3. Васин А.Я., До Т. Х., Акинин Н.И., Гаджиев Г.Г., Шушпанов А.Н. О механизме термического разложения D-циклосерина и теризидона // *Безопасность труда в промышленности.* — 2022. — № 1. — С. 20–26. DOI: 10.24000/0409-2961-2022-1-20-26.

4. Chaturvedi S., Dave P.N. Review on Thermal Decomposition of Ammonium Nitrate // *Journal of Energetic Materials.* – 2013. – Vol. 31. – Iss. 1. – P. 1–26. DOI: 10.1080/07370652.2011.573523.

5. Пожаровзрывоопасность лекарственного препарата фонтурацетам / М. М. Казантинова, А. Н. Шушпанов, А. Я. Васин, Т. Х. До // *Техносферная безопасность Байкальского региона : материалы международной научно-практической конференции.* — Чита: Чита, 2019. — С. 29–37.

6. Пожаровзрывоопасность лекарственного препарата D-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.

7. ГОСТ 12.1.044-89 (84) ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения, 1989 г.

8. Расчет основных показателей пожаровзрывоопасности веществ и материалов. Руководство // М., ВНИИПО. 2002. — 77с.