

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева

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

К 10-летию кафедры ТСБ

Москва, 25–26 апреля 2024 г.

Материалы конференции

Москва

2024

УДК 504.06:66(075)

ББК 65.9(2)248

М43

М43 VI Международная научно-практическая конференция молодых ученых по проблемам техносферной безопасности: материалы конференции. – М.: РХТУ им Д. И. Менделеева, 2024. – 300 с.
ISBN 978-5-7237-2078-7

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 25–26 апреля 2024 г. на Международной научно-практической конференции молодых ученых по проблемам техносферной безопасности, посвященной 10-летию кафедры ТСБ. Сборник представляет интерес для научно-технических работников, преподавателей, аспирантов и студентов.

УДК 504.06:66(075)

ББК 65.9(2)248

Редакционная коллегия:

Сопредседатель конференции – профессор **Н. И. Акинин**

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

Секретари оргкомитета – доцент **М. Д. Чернецкая**

доцент **А. Н. Шушпанов**

Научное издание

VI 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 16.05.2024 Формат 60×84 1/16.
Усл. печ. л. 17,4. Уч.-изд. л. 26,7. 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 978-5-7237-2078-7

© Российский химико-технологический
университет им. Д. И. Менделеева, 2024

ОЦЕНКА ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫХ СВОЙСТВ НОВОЙ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ КОМПОЗИЦИИ Н027-4289 <i>Миловидов П.Д., Тимофеева В.А., Васин А.Я., Шушпанов А.Н.</i>	80
ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫЕ СВОЙСТВА ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА РАВИДАСВИР <i>Сахацкая А. В., Васин А. Я., Миловидов П. Д.</i>	85
ВЛИЯНИЕ СОСТАВА БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ УГЛЕВОДОРОДОВ НА ДАВЛЕНИЕ НАСЫЩЕННОГО ПАРА И ТЕМПЕРАТУРУ ВСПЫШКИ <i>Лукашова Д. Н., Бредихина К.А., Райкова В. М.</i>	89
АНАЛИЗ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОПАСНОСТИ ДИКУМИЛПЕРОКСИДА <i>Крюков Г.Н., Райкова В. М.</i>	93
СРАВНЕНИЕ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ К УДАРУ БИНАРНЫХ СМЕСЕЙ ОКТОГЕН/СuO И ОКФОЛ-3,5/СuO <i>Дмитриев Н.В., Акинин Н.И.</i>	98
ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ К УДАРУ СМЕСИ ПЕРХЛОРАТА АММОНИЯ С АЛЮМИНИЕМ <i>Еремина А.В., Дмитриев Н.В.</i>	102
ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ К УДАРУ ДИНИТРОАНИЗОЛА <i>Чаплыгин А.Е., Гаджиев Г.Г.</i>	105
ТЕРМОХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ВОДОРОСЛЕЙ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНОГО ИСТОЧНИКА БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА <i>Солодухин Е.С., Шушпанов А.Н.</i>	109
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ВСПЫШКИ И ВОСПЛАМЕНЕНИЯ РЯДА СМАЗОЧНО-ОХЛАЖДАЮЩИХ ЖИДКОСТЕЙ <i>Шугаева А.Р., Леонтьева И.Н., Шушпанов А.Н.</i>	112
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ТЕРМОЛИЗА D-СЕРИНА <i>Шарова Е.Н., Шинкарев Н.А., Шушпанов А.Н.</i>	116
ТЕРМОГРАВИМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КРАСИТЕЛЯ ЦЕМАКТИВ БФ-0 <i>Шинкарев Н.А., Терехова М.А., Солодухин Е.С., Шушпанов А.Н.</i>	96
ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИЙ ОБРАЗОВАНИЯ РЯДА АЗО- И АНТРАХИНОНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ <i>Звездунова В.А., Шушпанов А.Н.</i>	122
ОГНЕЗАЩИТНАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДИАММОНИЙФОСФАТА И СУЛЬФАТА АММОНИЯ И ИХ СМЕСЕЙ <i>Капранова Е.М., Колесова В.Ю., Мельников Н.О.</i>	125
РАЗРАБОТКА И ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ БОР-, АЗОТ-, ФОСФОРСОДЕРЖАЩЕГО ОГНЕЗАЩИТНОГО СОСТАВА ДЛЯ ДРЕВЕСИНЫ <i>Давидова А. А., Мирсаяпова А. И., Монахов А.А., Мельников Н. О.</i>	127
ОГНЕЗАЩИТНАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ ТРУДНОВЫМЫВАЕМЫХ СОСТАВОВ НА ОСНОВЕ ХРОМА И МЕДИ <i>Бондаревская А.М., Монахов А.А., Мельников Н.О.</i>	130
АНАЛИЗ ХАРАКТЕРИСТИК И ЭФФЕКТИВНОСТИ ОГНЕЗАЩИТНЫХ СОСТАВОВ ПРИ ИСПЫТАНИИ ДРЕВЕСИНЫ В ЛЕТНИЙ И ЗИМНИЙ ПЕРИОДЫ ВРЕМЕНИ <i>Пищикова А.В., Андруняк И.В.</i>	133
ПРЕДЛОЖЕНИЯ ПО СОВЕРШЕНСТВОВАНИЮ ИЗУЧЕНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОПАСНЫХ ФАКТОРОВ ПОЖАРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛЕЙ <i>Сандалов В.М., Аносова Е.Б.</i>	137
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЖАРНОГО РИСКА УЧЕБНОЙ ЛАБОРАТОРИИ РХТУ им. Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА С ПРИМЕНЕНИЕМ СОВРЕМЕННЫХ ПРОГРАММНЫХ ПРОДУКТОВ <i>Фрикель М.Д., Пасхина Д.А., Аносова Е.Б.</i>	143
АНАЛИЗ ЗАРУБЕЖНОГО ОПЫТА В ОБЕСПЕЧЕНИИ ПОЖАРНОЙ БЕЗОПАСНОСТИ УГОЛЬНЫХ ШАХТ <i>Давитадзе Л.Т., Скуртова И.В.</i>	148
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ЛАНДШАФТНЫХ ПОЖАРОВ ПРИ ЭКСПЛУАТАЦИИ ВОЗДУШНЫХ ЛИНИЙ ЭЛЕКТРОПЕРЕДАЧИ НАПРЯЖЕНИЕМ 6, 10 КВ <i>Бажина А.О., Крапивин Д.А.</i>	152

На основании изложенного материала и расчётов динамики ОФП следует, что для повышения пожарной безопасности в зальном помещении необходимо увеличение времени наступления критических значений ОФП, что становится возможным благодаря применению СМЛ плит и негорючих и огнестойких материалов в рамках снижения пожарной нагрузки в помещении.

Литература

1. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности [Электронный ресурс]: Федер.закон РФ от 22.07.2008 № 123-ФЗ: с изм. и доп., вступ. в силу с 13.07.2014. – Электрон. дан. – Режим доступа: <http://www.consultant.ru>. – 18.03.2024.
2. Федеральный закон «О пожарной безопасности» [Электронный ресурс]: Федер.закон РФ от 21.12.1994 N 69-ФЗ. – Электрон. дан. – Режим доступа: <http://www.consultant.ru>. – 18.03.2024.
3. СП 2.13130.2012 «Системы противопожарной защиты. Обеспечение огнестойкости объектов защиты» от 23.10.2013 г. – М.: Издательство стандартов – Режим доступа: <http://www.consultant.ru> 18.03.2024.
4. СП 4.13130.2013 «Системы противопожарной защиты. Ограничение распространения пожара на объектах защиты. Требования к объемно-планировочным и конструктивным решениям» от 18 июля 2013 г. – М.: Издательство стандартов – Режим доступа: <http://www.consultant.ru> 18.03.2024.
5. СП 12.13130.2009 Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности // Своды правил. Системы противопожарной защиты. – М.: ООО «Издательство «Пожнаука», 2009.
6. ГОСТ 12.1.004-91 «Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Пожарная безопасность» в сентябре 2006 года – М.: Издательство стандартов – Режим доступа: <http://www.consultant.ru> 18.03.2024.
7. ГОСТ 12.1.004-91. ССБТ. Пожарная безопасность. Общие требования.
8. ГОСТ 30244-94. Межгосударственный стандарт материалы строительные Методы испытаний на горючесть. М.: Стандартиформ, 2008 год. – Режим доступа: <http://www.consultant.ru> 18.03.2024.
9. ГОСТ Р 51032-97 Материалы строительные. Метод испытания на распространение пламени (принят в качестве межгосударственного стандарта ГОСТ 30444-97) – М.: ГУП ЦПП, 1997 год. – Режим доступа: <http://www.consultant.ru> 18.03.2024.
10. Девисилов В.А., Дроздова Т.И., Тимофеева С.С. Теория горения и взрыва: практикум : учебное пособие 1 В.А. Девисилов, Т.И. Дроздова, С.С. Тимофеева 1 под общ. ред. В.А. Девисилова. – М. : ФОРУМ, 2012. – 352 с. – (Высшее образование).

УДК 615.011

ОЦЕНКА ПОЖАРОВЗРЫВООПАСНЫХ СВОЙСТВ НОВОЙ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ КОМПОЗИЦИИ Н027-4289

Миловидов П.Д., Тимофеева В.А, Васин А.Я., Шушпанов А.Н.

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

Аннотация. В статье описаны термические характеристики и пожаровзрывоопасные свойства фармацевтической субстанции Н027-4289 с помощью расчетных, квантово-эмпирических и экспериментальных методов. По результатам исследований

определено, что субстанция H027-4289 является горючим веществом в осевшем состоянии, при этом во взвешенном состоянии пыль может быть пожаровзрывобезопасна.

Ключевые слова: термический анализ, параметры пожаровзрывоопасности, энтальпия сгорания.

EVALUATION OF THE FIRE AND EXPLOSION HAZARD PROPERTIES OF A NEW PHARMACEUTICAL COMPOSITION H027-4289

Milovidov P.D., Timofeeva V.A., Vasin A.Y., Shushpanov A.N.

Annotation. the article describes the thermal characteristics and fire and explosion hazard properties of the innovative pharmaceutical substance H027-4289 using computational, quantum-empirical and experimental methods. Based on the research results, it was determined that the substance H027-4289 is a flammable substance in a settled state, while in a suspended state the dust can be fire and explosion-proof.

Key words: thermal analysis, fire and explosion hazard parameters, enthalpy of combustion.

По данным исследований, гепатиты входят в пятерку самых опасных болезней, и находятся на третьем месте по количеству летальных исходов от инфекционных и паразитарных заболеваний. [1] Перспективная по отношению к гепатитам фармацевтическая субстанция H027-4289 относится к классу ингибиторов РНК-полимеразы NS5B вируса гепатита С, и в настоящее время проходит клинические исследования с целью подтверждения переносимости, безопасности и эффективности для вывода препарата на фармацевтический рынок. [2] В 2016 году в России была подписана стратегия ВОЗ по элиминации вирусных гепатитов к 2030 году, в рамках которой была разработана искомая молекула, вследствие чего, высоковероятным является крупномасштабный синтез данной активной фармацевтической субстанции, и актуально исследование пожаровзрывоопасных свойств H027-4289 для написания технологического регламента и обеспечения пожаровзрывобезопасности на производстве.

Исследуемая композиция (рис. 1) была разработана на базе группы компаний «ХимРар» и синтезирована ООО «АФС-технологии». Препарат представляет из себя мелкодисперсную пыль белого цвета, без запаха. Название по ИЮПАК: (S)-Циклобутил-2-(S)-((((2R,3R,4R,5R)-5-(2,4-дноксо-3,4-дигидропиримидин -1(2H)-ил) -3-гидрокси -4-метил -4-тетрагидрофуран-2-ил)метокси) (фенокси)пропаноат. Эмпирическая формула субстанции — $C_{23}H_{29}FN_3O_9P$, молярная масса 541,46 г/моль, Распределение массовых долей элементов в составе препарата (масс.%): С – 51%; О – 27%; N – 8%; P – 6%; H – 5%; F – 3%, причем, общая массовая доля инертных элементов в образце составляет 35 %, и массовая доля ингибитора горения фтора – 3%. Исходя из чего можно сделать предположение, что аэрозоль субстанции может быть пожаровзрывобезопасной, так как количество инерта в молекуле стремится к нижнему пределу области неустойчивого флегматизирующего влияния

инертных элементов, как было показано в аналогичных исследованиях со схожим массовым содержанием инерта [3, 4].

Структура вещества была подтверждена методом ИК-спектроскопии, экспериментально выявленные волновые числа функциональных частей молекулы соответствуют справочным данным, а именно: сложноэфирная группа (1279 см^{-1} ν с., шир), заместители пиримидинового кольца (1675 см^{-1} , 1718 см^{-1} ν с), ароматическое бензольное кольцо (1600 см^{-1} ν переменной инт.), связь С-Ф (1093 см^{-1} , ν с), тризамещенный фосфит (903 см^{-1} ν РО), вторичный амин (3324 см^{-1} , ν сл), третичный амин ($1264, 1354\text{ см}^{-1}$ с), тетрагидрофуран (3342 см^{-1} , δ шир). [5]

Исследование термического поведения образца было проведено методом ТГ-ДТА, с помощью Венгерского дериватографа с микропроцессором. Образец подвергался нагреву со скоростью $10\text{ }^\circ\text{C} / \text{мин}$ в атмосфере воздуха, в диапазоне температур от 20 до $700\text{ }^\circ\text{C}$, исследуемая навеска – 10 мг . Результаты анализа представлены на Рисунке 2. На кривой ТГ четко видна первая ступень потери массы около 12% , которая началась практически с самого начала эксперимента, что может быть связано с испарением воды. На кривой ДТА дифференцирован эндозффект при $146\text{ }^\circ\text{C}$, вызванный плавлением исследуемого образца, что в последствии было доказано экспериментально капиллярным методом. При дальнейшем нагреве на кривой ДТА четко выделен экзотермический пик в области температур от $218\text{ }^\circ\text{C}$ до при $256\text{ }^\circ\text{C}$, при этом, на кривой ТГ происходит резкое уменьшение массы порядка 30% , связанное, видимо, с интенсивным термическим разложением вещества. На основании анализа дериватограммы можно предположить, что выделяющиеся продукты термического разложения могут воспламениться от внешнего источника зажигания.

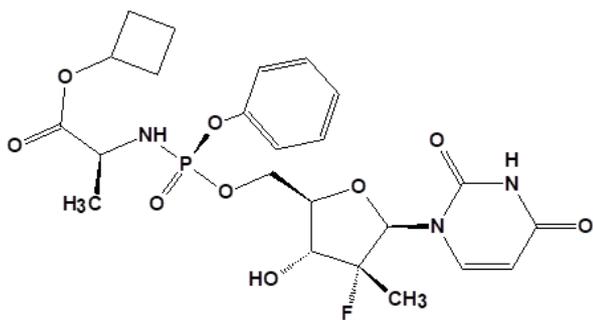


Рис. 1. Структурная формула H027-4289

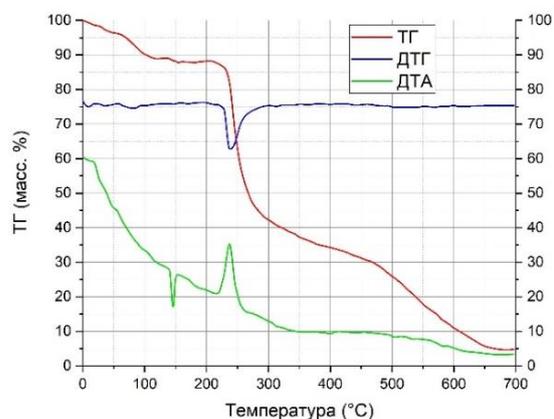


Рис. 2. Дериватограмма образца H027-4289 (скорость нагрева $10\text{ }^\circ\text{C}$ в мин, воздух)

Температура плавления образца экспериментально была определена капиллярным методом по методике ГОСТ [6], и составила $146\text{ }^\circ\text{C}$. В дальнейшем температура плавления H027-4289 использовалась для расчета энтальпии плавления.

Температуру воспламенения препарата определяли экспериментально на установке ОТП по методике ГОСТ [7]. Исходя из данных шести экспериментов при температурах нагрева от $220\text{ }^\circ\text{C}$ до $250\text{ }^\circ\text{C}$ наблюдалось воспламенение образца при влиянии внешнего источника зажигания и его

устойчивое горение при удалении горелки при 247 °С. Данный показатель является температурой воспламенения, что подтверждает выдвинутое на основании анализа дериватограммы предположение.

Одним из ключевых факторов, определяющих степень риска возникновения пожара от определенных видов сырья или материалов, является их способность к выделению тепла в процессе горения. Чтобы определить эту величину, необходимо знать начальную энтальпию сгорания вещества в его твердом состоянии. Для этого мы сначала вычислили энтальпию образования данного вещества в газовой фазе, а затем, с учетом изменений состояния вещества (фазовых переходов), определили его энтальпию образования в твердом состоянии.

Для H027-4289 расчетными методами была определена энтальпия образования в газообразной фазе с использованием квантово-химических полуэмпирических методик и программы ChemBio3D версии 14.0, включенной в пакет ChemBioOffice 2014 года, а также MOPAC2016, разработанной компанией SambridgeSoft Corporation. При этом применялся метод UHF (unrestricted Hartree-Fock method). Результаты расчета внесены в табл. 1.

Таблица 1

Расчет энтальпий образования H027-4289 в газообразной фазе посредством программного комплекса CSChemBioUltra 14

Гамильтонианы квантового полуэмпирического метода	Метод минимизации энергии молекул, ккал/моль	Метод минимизации энергии молекул, кДж/моль	Среднее значение, кДж/моль
PM5	-457,02	-1912,18	-2012 кДж/моль
PM6	-470,20	-1967,33	
PM6-D3	-506,54	-2119,35	
PM6-DH+	-492,1	-2058,93	
PM6-DH2	-493,03	-2062,84	
PM6-DH2X	-493,03	-2062,84	
PM6-D3H4	-475,60	-1989,92	
PM6-D3H4X	-475,6	-1989,93	

Расчет энтальпии образования методом аддитивных связей [8] производили по формуле:

$$\Delta H_f^0 = \sum \Delta(\Delta H_f^0)_i \cdot n_i = \Delta H_f^0 = -381.928 \text{ ккал/моль} = -1597.985 \text{ кДж/моль}$$

Однако метод не показал сходимости и в дальнейших расчетах не был учтен. Полученное среднее значение с помощью квантово-эмпирических методик (-2012 кДж/моль) принимают за энтальпию образования исследуемого вещества в газообразной фазе. Далее, учитывая значения теплот испарения и плавления, была рассчитана энтальпия образования H027-4289 в твердой фазе, а также энтальпии сгорания двумя методами: по закону Гесса и по методу Коновалова-Хандрика. [8] Результаты расчетов внесены в табл. 2. Значения энтальпий сгорания имеют небольшое расхождение, что может быть объяснено сложным строением изучаемого соединения.

Значения энтальпий фазовых переходов и теплота сгорания Н027-4289

$\Delta H_{пл}$ кДж/моль (по формуле Бретшнайдера)	$\Delta H_{исп}$ кДж/моль (по учебнику Косинцева)	$\Delta H_{ф.т.ф.}$ кДж/моль	$\Delta H_{сг}$ МДж/кг (по закону Гесса)	$\Delta H_{сг}$ МДж/кг (по методу Коновалова- Хандрика)
23,70	66,57	-2102,27	-22,10	-22,68

Таким образом, для лекарственного средства Н027-4289 была подтверждена молекулярная структура методом ИК спектроскопии, фактическое расположение волновых чисел функциональных групп соответствует справочным данным. Определены расчетные характеристики субстанции, получены энтальпия сгорания и энтальпия образования Н027-4289. Дан прогноз о пожаровзрывобезопасности взвеси вещества ввиду большого содержания инерта и фтора (38 масс.%) в молекуле. Проведен анализ кривых ТГ-ДТА на дериватограмме, результаты сопоставлены с экспериментальными данными по ГОСТ, и подтверждены температура плавления образца 146 °С с помощью капиллярного метода, и температура воспламенения 247 °С на установке ОТП. Наличие температуры воспламенения говорит о том, что препарат Н027-4289 является горючим веществом.

В дальнейшем запланировано исследование механизма термического разложения композиции, экспериментальное определение показателей пожаровзрывобезопасности, расчет энергии активации первичной стадии процесса термического разложения вещества.

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

Список используемой литературы

1. Михайлова Ю.В., Стерликов С.А., Громов А.В. Смертность от вирусных гепатитов в Российской Федерации (аналитический обзор) // Современные проблемы здравоохранения и медицинской статистики – 2022 – № 1 – С. 414–437.
2. Пат. RU2567854C1 (Российская Федерация), МПК C07D 249/10. Нуклеозидные ингибиторы РНК-полимеразы HCV NS5B, способы их получения и применения / Иващенко Александр Васильевич – Заявлено: 11.11.2014, Опубликовано: 10.11.2015.
3. Васин А.Я. Изучение влияния различных функциональных заместителей и групп на взрывоопасность органических пылей // Химическая промышленность сегодня, М., 2007 – № 1 – С. 35–39.
4. 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.
5. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы. – М.: МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра органической химии., 2012 – 55 с.
6. ГОСТ 18995.4-73. Продукты химические органические. Методы определения интервала температуры плавления, 1974 г.

7. ГОСТ 12.1.044-89 (84) ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения, 1989 г.
8. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения. Справочник. Часть 1. – М.: Ассоциация «Пожнаука», 2004 г.