

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
<b>КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ТЕРМОЛИЗА D-СЕРИНА</b> <i>Шарова Е.Н., Шинкарев Н.А., Шушпанов А.Н.</i>	<b>116</b>
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

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ТЕРМОЛИЗА D-СЕРИНА

*Шарова Е.Н., Шинкарев Н.А., Шушпанов А.Н.*

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

**Аннотация.** Для исследования аминокислоты D-серин был собран набор справочных данных, позволивший провести квантово-химическое моделирование первичного процесса термолиза. Выполненное сопоставление с ранее полученными экспериментальными данными говорит о достоверности и потенциальной применимости методики.

**Ключевые слова:** DFT, D-серин, термолиз.

## QUANTUM CHEMICAL STUDIES OF THE THERMOLYSIS OF D-SERINE

*Sharova E.N., Shunkarev N.A., Shushpanov A.N.*

**Abstract.** To study the amino acid D-serine, a set of reference data was collected, which made it possible to conduct quantum chemical modeling of the primary thermolysis process. The performed comparison with the previously obtained experimental data indicates the reliability and potential applicability of the technique.

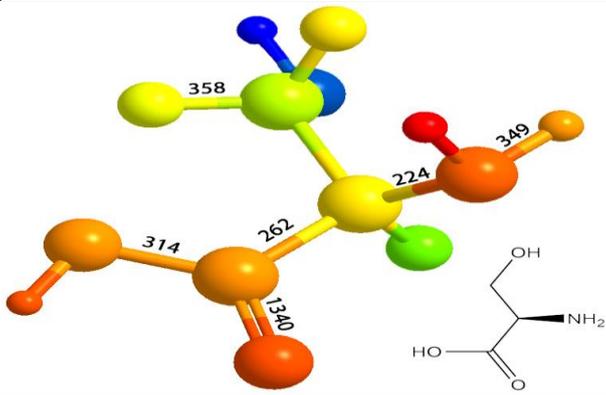
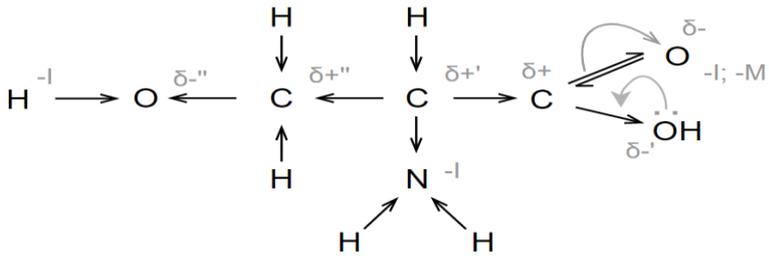
**Keywords:** DFT, D-serine, thermolysis.

Динамическое изменение цепочек поставок оборудования, компонентов, сырья и полупродуктов синтеза ряда химических соединений, не последнее место среди которых занимают фармпрепараты, вносит ряд корректив в технологический уклад предприятий, вынужденных реорганизовывать промышленные циклы порой в условиях цейтнота. В таких условиях становится крайне важен поиск быстрых и надежных оценочных и расчетных методов для определения ряда классических показателей безопасности (токсикологических показателей, показателей пожаровзрывоопасности и др.) новых продуктов и полупродуктов химической промышленности. С учетом того, что из года в год статистика по пожарам в производственном секторе значительно не меняется – до 50% всех пожаров приходится в целом на производственный сектор[1] (не только химическая промышленность), а в химпроме порядка 70% инцидентов – это пожары или взрывы[2], следует особое внимание уделять пожаровзрывоопасности сырья, веществ и полупродуктов, причём не только свойствам, как таковым, но и косвенным аспектам, которые могут способствовать развитию негативных ситуаций. В частности, имеет смысл изучение механизмов первой стадии термического разложения веществ, в особенности для веществ с низкой термической стабильностью – зачастую именно экзотермическая декомпозиция таких веществ становится иницирующей стадией промышленной аварии. Подходы к изучению могут быть разнообразными[3], результаты может дать и квантово-химическое моделирование молекулярных процессов – теоретико-химическое направление, описывающее химические преобразования на основе моделей различной

сложности. В настоящей работе данный подход будет осуществлен на примере лекарственного препарата D-серин.

В данной работе мы не планируем подробно останавливаться на описании и свойствах исследуемого вещества, как и на показателях пожаровзрывоопасности и обсуждении эмпирически выявленного потенциального механизма первичного акта термоллиза D-серина. Указанные аспекты были подробнейшим образом освещены в работе [4]. Мы видим нашей непосредственной задачей аналитически-модельный подход к рассмотрению акта термоллиза D-серина и сопоставление расчетных данных с ранее полученными экспериментальными.

На начальном этапе работы был проведен литературный обзор и сбор справочных данных с целью введения гипотезы о наиболее неустойчивой связи, которая при термоллизе предположительно должна разорваться в первую очередь. На основании проведенного обзора была составлена графическая схема энергий диссоциации (рис. 1). Также удалось построить простую схему электронного распределения зарядов (рис. 2). Данная информация пригодилась в дальнейшем – при компоновке электронной модели.

	<p>Рис. 1. Энергии диссоциации для различных типов связей в молекуле D-серина (численные значения даны в кДж/моль)</p>
	<p>Рис. 2. Простая схема электронного распределения зарядов в молекуле D-серина</p>

В молекуле серина связь C–N имеет наименьшую энергию разрыва связей, предположительно эта связь и разорвется первой при термическом взаимодействии, после нее будет рваться связь C–C. Однако молекула серина содержит две связи углерод-углерод. С помощью схемы электронного распределения зарядов было сделано предположение о том, что сначала разорвется связь углерод-углерод, соединенная с гидроксильной группой, а затем связь углерод-углерод, соединенная с карбоксильной группой, так как она делокализуется p-π сопряжением мезомерного эффекта.

Для проведения квантово-химического расчета использовался программный комплекс Gaussian, визуализацию проводили в GaussView. Для расчетов использован полуэмпирический метод B3LYP/6-31G(d,p). Метод основан на теории функционала плотности (DFT) и представляет собой комбинацию метода градиентных поправок Бекка-Ли-Янга-Парра (B3LYP)

с минимальным базисом 6-31G(d,p). Этот метод позволяет выразить электронную плотность молекулы как функционал ее волновой функции. Модель D-серина, аналогичная представленной на рисунке 1, подвергалась увеличению межатомных расстояний различных связей с целью поиска переходных состояний. Степень удлинения связей варьировалась в пределах 50–100% от исходного. После цикла расчетов для связи C–NH<sub>2</sub> была обнаружена мнимая частота –618 см<sup>-1</sup>, очевидным образом указывающая на потенциальный разрыв при разложении молекулы именно здесь.

Таким образом, имеет смысл говорить о потенциальной применимости указанной методики, но об её универсальности говорить несколько преждевременно – требуется дополнительное моделирование на различных классах веществ.

#### **Библиографический список**

1. Анализ обстановки с пожарами и их последствиями на территории Российской Федерации за 12 месяцев 2022 г. Департамент надзорной деятельности и профилактической работы МЧС России, 2023. С. 17.
2. Пожары и пожарная безопасность в 2021 году: статист. сб. Балашиха: ФГБУ ВНИИПО МЧС России, 2022. 114 с.
3. Васин А.Я. et al. О механизме термического разложения D-циклосерина и теризидона // Безопасность Труда В Промышленности. 2022. № 1. С. 20–26.
4. До Т.Х. Пожаровзрывоопасность некоторых лекарственных препаратов, способных к интенсивному экзотермическому разложению: дис. кандидата технических наук: 05.26.03. Москва: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2022. 187 с.