

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

УДК 544.18

ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ РЯДА АЗО- И АНТРАХИНОНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

Звездунова В.А., Шушпанов А.Н.

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

Аннотация. Для ряда азо- и антрахиноновых красителей полуэмпирическими методами (с упором на гамильтониан РМ6) были рассчитаны энтальпии образования в газовой фазе. Результаты уточняют ранее произведенные расчеты и пригодны для дальнейшего использования.

Ключевые слова: азокрасители, антрахиноновые красители, полуэмпирические расчеты, энтальпия образования в газовой фазе.

SEMI-EMPIRICAL CALCULATION OF ENTHALPY OF FORMATION FOR A NUMBER OF AZO- AND ANTHRAQUINONE DYES

Zvezdunova V.A., Shushpanov A.N.

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

Abstract. For a number of azo- and anthraquinone dyes, the enthalpy of formation in the gas phase was calculated using semi-empirical methods (with an emphasis on the PM 6 Hamiltonian). The results clarify previously performed calculations and are suitable for further use.

Keywords: azo dyes, anthraquinone dyes, semi-empirical calculations, enthalpy of formation in the gas phase.

Задачи, которые возникают перед специалистами по техносферной безопасности, не всегда ставятся на прикладном уровне. Многие методики, в том числе уровня государственных стандартов [1], которыми привычно пользуются специалисты, основаны на глубоко фундаментальных закономерностях. Понимание этих закономерностей помогает не только потенциально уменьшить количество экспериментов в прикладных исследованиях, но и стать хорошим прогностическим инструментом ученого-фундаменталиста в поисках каузации среди набора корреляций, задав верное направление мысли еще на стадии планирования исследования [2]. Одной из базовых функций состояния

термодинамической системы является энтальпия образования вещества, знание значений которой может служить разным целям – от уточнения свойств существующих веществ и предсказания свойств новых материалов до прогнозирования детонационных свойств высокоэнергетических веществ. Расчетные методы разной сложности и степени точности для определения энтальпии образования веществ в газовой фазе (в частности) успешно применялись уже во второй половине XX века [3,4], но с развитием компьютерной техники они стали доступны практически повсеместно. Одновременно уменьшались и расчетные погрешности [5].

На уровне точности, удовлетворяющем исследователей в области техносферной, пожарной и промышленной безопасности нет необходимости в использовании время- и ресурсозатратных методов вычисления *ab initio*, расчет по которым даже для сравнительно небольших молекул может занимать часы машинного времени. Настоящая работа посвящена вычислению энтальпий образования в газовой фазе азо- и антрахиноновых красителей с размером молекулы от 28 до 82 атомов. В данном случае возможно использование полуэмпирических расчетов. Подробно об этих красителях в работе [6]. Часть настоящей работы, посвященная азокрасителям, уточняет результаты работы [7].

Для выполнения расчетов использовался пакет полуэмпирических расчетов MORAC2016[8], для написания задания и передачи его пакету использовался интерфейс программы ChemBio 14. Перед выполнением расчета молекулы веществ оптимизировались методом минимизации энергии. Использовался ряд гамильтонианов, предпочтение отдавалось RM6 и его расширенным версиям, значения в пределах ± 16 кДж/моль усреднялись[9].

На рис. 1 в графическом представлении приведены энтальпии образования в газовой фазе для ряда азокрасителей. Формат биржевой диаграммы выбран для демонстрации не только результатов, но и погрешностей вычисления.

На рисунке 2, построенном по аналогичной логике, приведены энтальпии образования в газовой фазе для ряда антрахиноновых красителей.

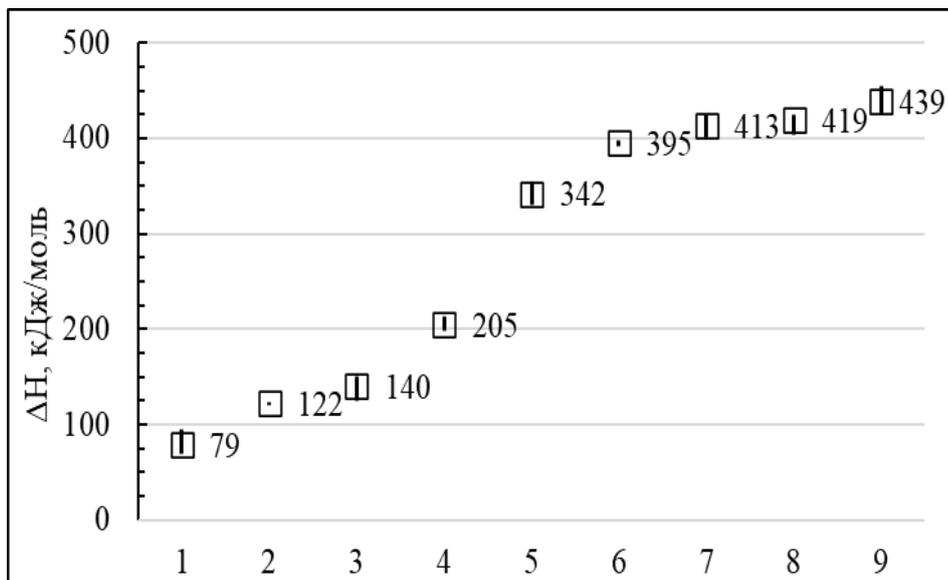


Рис. 1. Расчетные энтальпии образования в газовой фазе для азокрасителей:
 1 – Красно-коричневый,
 2 – Алый Ж,
 3 – Бордо С, 4 – Оранжевый 4К,
 5 – Оранжевый Ж,
 6 – Алый п/э,
 7 – Желто-коричневый,
 8 – Оранжевый п/э,
 9 – Диазочерный С

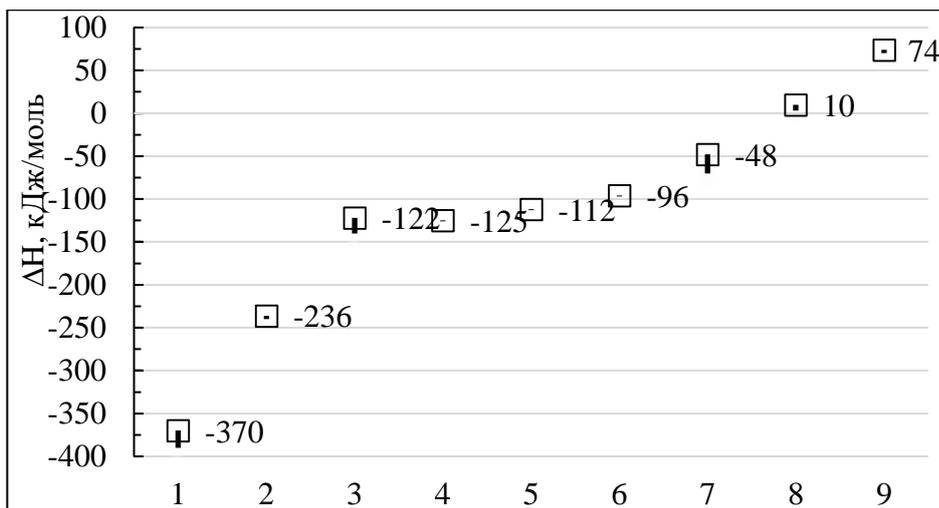


Рис. 2. Расчетные энтальпии образования в газовой фазе антрахиноновых красителей:
 1 – Зеленый Н2С,
 2 – Ярко-синий,
 3 – Зеленый 2Ж,
 4 – Ярко-зеленый Н4Ж,
 5 – Фиолетовый, 6 – Чисто-голубой, 7 – Малиновая база, 8 – Фиолетовый 2К, 9 – Фиолетовый 4К

Даже с учетом полученных результатов, которыми вполне можно пользоваться для дальнейших расчетов, на данном этапе работа не представляется законченной в полной мере. Предстоит провести сравнение с имеющимися экспериментальными данными, несмотря на кажущуюся сложность, провести расчеты методами изодесмических реакций и реакций атомизации, после чего окончательно обосновать использование полуэмпирических методов. Авторы декларируют желание продолжать работу в этом направлении.

Библиографический список

- ГОСТ 12.1.044-89 (ИСО 4589-84) ССБТ Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения (с Изменением N 1). 1989.
- Юдин Ю.В., Майсурадзе М.В., Водолазский Ф.В. Организация и математическое планирование эксперимента: учеб. пособие. Екатеринбург: Из-тво Урал. ун-та, 2018. 124 с.
- Пальм В.А. Введение в теоретическую органическую химию. Москва: Высшая школа, 1974. 447 с.
- Benson S.W. Bond energies // J. Chem. Educ. 1965. № 42. P. 502–518.
- Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods I. Method // J. Comput. Chem. 1989. Vol. 10, № 2. P. 209–220.
- Васин А.Я. Взаимосвязь химического строения и пожаровзрывоопасности органических красителей, лекарственных средств и их аэрозвесей: дис. доктор технических наук: 05.17.07. РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2008. 306 с.
- Безалтынних А.С. et al. Анализ термической опасности четырех азокрасителей различного строения // V МНПК молодых ученых по проблемам ТСБ: материалы конференции. Москва: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2022. с. 105–108.
- Stewart Computational Chemistry, MOPAC2016. 2016.
- Kříž K., Řezáč J. Benchmarking of Semiempirical Quantum-Mechanical Methods on Systems Relevant to Computer-Aided Drug Design // J. Chem. Inf. Model. 2020. Vol. 60, № 3. P. 1453–1460.