



УДК543.272.42

МОДЕЛЮВАННЯ СИСТЕМ ДЕКОНТАМІНАЦІЇ N-ФОСФОНОМЕТИЛГЛІЦИНУ

Студ. В.Ю. Василенко, гр. МгЗХФ-17¹

н.с. В.С. Дерипапа¹

п.н.с. Л.М. Вахітова²

Наукові керівники доц. В.І. Бессарабов

доц. Г.І. Кузьміна

¹Київський національний університет технологій та дизайну

²Інститут фізико-органічної хімії та вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАНУ

Мета і завдання. Мета дослідження – вивчення впливу активаторів нуклеофільного заміщення на розкладання N-фосфонометилгліцину під дією перекису водню та гідроксиду калію.

Основними завданнями даного дослідження було:

- визначити здатність N-фосфонометилгліцину до перокисного гідролітичного розщеплення за участі активаторів;
- розробити модельний склад миючого засобу для дезактивації технологічного обладнання від залишків фосфорорганічної сполуки (ФОС).

Об'єкт та предмет дослідження. Об'єктом дослідження обрано промивні води після очищення лінії виробництва пестицидів на основі N-фосфонометилгліцину із залишковим ступенем забруднення 1000-3000 ppm. Предметом дослідження стали кінетичні закономірності розпаду N-фосфонометилгліцину в залежності від складу системи дегазації.

Методи та засоби дослідження. Моделлю систем деконтамінації обрано лужну міцелярна система дезактивації ФОС з використання перекису водню та активаторів α -нуклеофілів[1]. Контроль за розщепленням N-фосфонометилгліцину проводили у відповідності з валідованою методикою СІРАС *284/ТС/(М) на рідинному хроматографі LC-2030C 3D (Shimadzu, Японія) з PDA-детектором та використанням програмного забезпечення LabSolutions. У ході аналізу використовували аналітичну колонку Zorbax[®] 5 μ mSB-CN 80 Å, LCColumn 250 * 4.6 mm.

Наукова новизна та практичне значення отриманих результатів. Вперше досліджено кінетику деконтамінації N-фосфонометилгліцину в активованій міцелярній нуклеофільній системі дегазації. До недавнього часу N-фосфонометилгліцин вважався одним із найбезпечніших активних інгредієнтів агрохімічної промисловості, але дослідження останніх 10 років підтверджують факт його безпосереднього впливу на розвиток ембріону та плоду, а також безпосередньо пов'язують хронічне отруєння гліфосатом із підвищеним ризиком захворюваності на лімфогемопетичні онкологічні захворювання. З огляду на ці причини, одним з пріоритетних завдань хімічної галузі України та ЄС загалом є пошук систем деконтамінації N-фосфонометилгліцина.

Результати дослідження. Під час дослідження методів дезактивації N-фосфонометилгліцину у рамках даного дослідження як базові використовували відомі методики[1–3]. Деконтамінацію N-фосфонометилгліцину здійснювали шляхом створення умов для лужного пергідролізу за рахунок введення в систему пероксид-аніонів, в якості α -нуклеофілу, та активаторів нуклеофільного заміщення, а також, утворення міцелярних систем з використанням поверхнево-активних речовин (ПАР).

Проведено порівняльне дослідження шести деконтамінаційних систем (таб.).

**Сучасні матеріали і технології виробництва виробів
широкого вжитку та спеціального призначення**

Промислова фармація

Таблиця – Залежність швидкості деконтамінації N-фосфонометилгліцину
від складу нуклеофільної системи

Деконтамінаційна система	$k_{\text{HOO}^-}^2, \text{M}^{-1}\text{s}^{-1}$
ОН ⁻	0,000000
ОН ⁻ /H ₂ O ₂	0,002611
ОН ⁻ /H ₂ O ₂ /ЦПХ	0,04018
ОН ⁻ /H ₂ O ₂ /ЦПХ/NH ₄ HCO ₃	0,002629
ОН ⁻ /H ₂ O ₂ /ЦПХ/B(OH) ₃	0,004711
ОН ⁻ /H ₂ O ₂ /ЦПХ/NH ₂ (CH ₂) ₂ OB(OH) ₂	0,000512

Показано, що зміна рН системи без участі додаткових агентів не призводить до жодних змін у системі. Такі результати говорять про відсутність гідролітичного розщеплення N-фосфонометилгліцину у системі і підтверджує існування лише гідролітично-перекисного механізму розщеплення.

Система ОН⁻/H₂O₂/ЦПХ/B(OH)₃ створює сприятливі умови для нуклеофільної атаки на ФОС за рахунок самоорганізації міцел та активації механізму утворення пероксид-іонів. У вказаній системі константа швидкості реакції другого порядку у 2 рази вища ніж у неактивованій системі. Система із вмістом карбонату амонію за ефективністю деконтамінації відповідає системі без активатора та міцелуютьорюючого агента. Борат моноетаноламіну спричиняє уповільнення реакції мінімум у п'ять разів.

Висновки. В результаті моделювання деконтамінаційних систем для N-фосфонометилгліцину встановлено, що оптимальний склад для дезактивації таких розчинів повинен містити перекис водню, цетилпіридинію хлорид та борну кислоту. Також важливою умовою є рН системи, який повинен знаходитись у проміжку від 10,5 до 11,5, тобто за концентрації гідроксильних-іонів (ОН⁻) 0,3-3 ммоль/л.

Як наслідок досліджень розроблено склад модельного засобу для дезактивація залишкових кількостей N-фосфонометилгліцину та проведено його первинне випробування в умовах реального виробництва.

Ключові слова. Фосфорорганічні сполуки, N-фосфонометилгліцин, деконтамінація, лужний гідроліз, активатори α -нуклеофілів.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Bessarabov, V. Development of micellar system for the decontamination of organophosphorus compounds to clean technological equipment [Text] / V. Bessarabov, L. Vakhitova, G. Kuzmina, G. Zagoriy, O. Baula // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. – 2017. – Vol. 1, Issue 6 (85). – P. 42–49. doi: 10.15587/1729-4061.2017.92034
2. Vakhitova L. N. Kinetics of the oxidation of methyl phenyl sulfide byperoxoborate anions/ L. N. Vakhitova, N. V. Lakhtarenko, A. F. Popov //Theoretical and Experimental Chemistry. – 2015. – Vol. 51, № 5. – P. 297-302.
3. Mandal, D. Nucleophilic Degradation of Fenitrothion Insecticide and Performance of Nucleophiles: A Computational Study/ D. Mandal, B. Mondal, A. K. Das // The Journal of Physical Chemistry A. – 2012. – Vol. 116, Issue 10. – P. 2536–2546. doi: 10.1021/jp2100057