

Nghiên cứu xây dựng thành phần đơn và đánh giá quá trình chuyển hóa 2-chloroethyl phenylsulfide bằng chất tiêu độc xanh trên cơ sở molybden

Vũ Thanh Bình^{1*}, Đỗ Ngọc Khuê¹, Hà Hải Nam²,
Đào Duy Hưng², Hoàng Kim Huế², Nguyễn Thanh Hải³

¹Viện Công nghệ mới, Viện Khoa học và Công nghệ quân sự;

²Viện Hóa học Môi trường Quân sự, Binh chủng Hóa học;

³Trường Sĩ quan Phòng hóa, Binh chủng Hóa học.

*Email: vuthanhbinh0979@gmail.com

Nhận bài: 15/5/2023; Hoàn thiện: 20/7/2023; Chấp nhận đăng: 03/8/2023; Xuất bản: 25/10/2023.

DOI: <https://doi.org/10.54939/1859-1043.j.mst.90.2023.94-101>

TÓM TẮT

Bài báo giới thiệu kết quả nghiên cứu khảo sát bước đầu vai trò của một số thành phần trong chất tiêu độc xanh đối với quá trình chuyển hóa 2-chloroethyl phenylsulfide (2-CEPS chất mô phỏng chất độc quân sự yperit). Lần lượt từng thành phần của chất tiêu độc xanh được khảo sát, xác định vai trò trong quá trình tiêu độc, gồm: chất hoạt động bề mặt, chất xúc tác, chất đệm và chất oxy hóa. Từ kết quả nghiên cứu đã lựa chọn các điều kiện tối ưu và bước đầu đề xuất một đơn thành phần chất tiêu độc có hiệu suất chuyển hóa 2-CEPS đạt trên 99% sau 15 phút. Đồng thời đã xác định được một số sản phẩm, từ đó, đề xuất cơ chế quá trình chuyển hóa 2-CEPS.

Từ khóa: 2-CEPS; Chất tiêu độc xanh; Molybden; Triton X-100.

1. MỞ ĐẦU

Hóa học xanh, hay còn gọi là hóa học bền vững, là một ngành hóa học khuyến khích việc thiết kế, chế tạo các sản phẩm xanh, sạch và giảm thiểu việc sử dụng, tạo ra các chất độc hại. Các thành phần dung dịch tiêu độc xanh (DDTĐX) được khảo sát trong bài báo này gồm: chất oxy hóa (H_2O_2), chất xúc tác (K_2MoO_4), chất hoạt động bề mặt (Triton X-100 (TX-100)), dung môi (propylene carbonate (PC), propylene glycol (PG)), dung dịch đệm (kali citrate). Các thành phần của DDTĐX đều được phân nhóm theo mức độ thân thiện môi trường của chúng: Chất oxy hóa H_2O_2 3% dùng để rửa vết thương, 1,5% sử dụng để xúc miệng; K_2MoO_4 được dùng trong thực phẩm chức năng, vitamin; PG là phụ gia thực phẩm; PC được dùng làm dung môi trong mỹ phẩm; TX-100 được sử dụng trong nông nghiệp [4, 6].

Hydro peroxyt (H_2O_2) là một chất oxy hóa lý tưởng ở pha lỏng. Nó có thể oxy hóa với hiệu suất nguyên tử là 47%, khả năng phản ứng cao, tạo ra nước là sản phẩm lý thuyết duy nhất, không gây ô nhiễm môi trường. Những lợi thế này đã thu hút sự quan tâm nghiên cứu của nhiều nhà khoa học trên thế giới trong lĩnh vực phát triển hệ oxy hóa xanh [7, 9]. Tuy nhiên, H_2O_2 trong nước thể hiện hiệu suất kém đối với quá trình oxy hóa các chất độc. Chỉ khoảng 30% đến 40% yperit bị oxy hóa trong năm phút đầu tiên [7]. Do đó, việc tìm kiếm một chất xúc tác hiệu quả và lựa chọn các điều kiện phản ứng là chìa khóa để thực hiện một quy trình oxy hóa lý tưởng. Quá trình oxy hóa các hợp chất hữu cơ khác nhau bằng cách sử dụng H_2O_2 đã có nhiều loại xúc tác và môi trường được thử nghiệm. Trong đó, hệ dung môi gồm TX-100, PC, PG thể hiện là một hỗn hợp lý tưởng, chúng có khả năng hòa tan tốt các loại chất độc mà không gây phá hủy bề mặt vật liệu [4, 6]. Đồng thời, Mo đóng vai trò như một chất xúc tác phù hợp do nó không gây ra sự chuyển hóa không hiệu quả của H_2O_2 . Xử lý chất độc bằng DDTĐX có hiệu suất cao, sạch sẽ, an toàn, vận hành đơn giản và tiết kiệm chi phí [4, 5, 7, 10].

DDTĐX có nhiều ưu điểm mà các nhà khoa học trên thế giới và Việt Nam đang hướng tới như: thân thiện với môi trường, an toàn cho người sử dụng, hiệu suất tiêu độc cao,... Trên thế giới, đã có nhiều công trình được công bố và một số sản phẩm mang tính thân thiện môi trường được đưa vào trang bị trong quân đội Mỹ và một số nước thuộc khối NATO như: DS-2P, DF-100,

DF-100A, DF-200HF, DF-200LF (Mỹ),... và GDS 2000, C8 (Đức), BX-24 (Ý) [1, 2],... Trong đó, chỉ có DG và NDG thực sự đáp ứng các tiêu chí của chất tiêu độc xanh. Ở Việt Nam đã có một số chất tiêu độc được nghiên cứu và sản xuất thử nghiệm như DF5, TĐTH-4, M1,... Tuy nhiên, tính thân thiện với môi trường, an toàn và tiện lợi cho người sử dụng còn ít được quan tâm. Mục đích của bài báo này là nghiên cứu sử dụng chất tiêu độc xanh trên nền muối K_2MoO_4 để chuyển hóa hợp chất 2-CEPS, từ đó, xây dựng mô hình tiêu độc cho chất độc loét da yperit.

2. THỰC NGHIỆM VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Hóa chất, thiết bị

2.1.1. Hóa chất

2-CEPS (98%): hãng Sigma Aldrich; H_2O_2 (30%); triton X-100 $C_{14}H_{22}O(C_2H_4O)_n$ (99%); propylene carbonate $C_4H_6O_3$ (99%); propylene glycol $C_3H_8O_2$ (99%); kali molybdate (K_2MoO_4) (99%), kali citrate ($C_6H_5K_3O_7$) (99%), natri cacbonat (Na_2CO_3) (99%), natri sunfit (Na_2SO_3) (99%): hãng Merck; cloroform, metanol có độ tinh khiết dùng cho phân tích sắc ký lỏng; nước cất.

2.1.2. Thiết bị

Thiết bị sắc ký lỏng hiệu năng cao (HPLC) nhãn hiệu HP-1100 của hãng Agilent (Mỹ); Thiết bị sắc ký khí khối phổ (GC-MS), Agilent 5975 (Mỹ), cột DB-5MS (30mx0,32mmx0,25mm); Cân phân tích điện tử Pioneer hãng Ohaus (Mỹ), độ nhạy 0,0001g; Máy lắc MS2 Minishaker (Mỹ).

2.2. Phương pháp nghiên cứu

2.2.1. Phương pháp nghiên cứu xây dựng thành phần đơn của chất tiêu độc TĐX-1

a. Phương pháp khảo sát hiệu suất chuyển hóa trong dung dịch

Khảo sát hiệu suất chuyển hóa 2-CEPS được thực hiện trong ống nghiệm có nắp, tiến hành như sau: lấy các thành phần chất tiêu độc cần khảo sát vào ống nghiệm vừa đủ 1 mL và thêm vào trong ống nghiệm 20 μ l 2-CEPS (tỷ lệ chất tiêu độc:tác nhân là 50:1), sau đó đưa lên máy lắc ở tốc độ 1800 vòng/phút trong 30 giây để trộn đều dung dịch. Tại các điểm thời gian khảo sát là 1, 5, 10, 15, 30 phút lấy 59 μ l mẫu ra khỏi ống nghiệm và cho vào ống nghiệm đã có 1 mL hỗn hợp dung dịch phản ứng gồm Na_2SO_3 0,2 M và Na_2CO_3 0,2 M, lắc đều. Thêm tiếp 2 mL cloroform vào hỗn hợp, lắc đều trong 2 phút rồi chiết lấy lớp cloroform. Cuối cùng lọc dung dịch đã được chiết qua màng lọc 0,22 μ m và phân tích trên thiết bị sắc ký lỏng hiệu năng cao HP-1100 để xác định nồng độ 2-CEPS. Mỗi thí nghiệm được lặp lại 3 lần và được thực hiện trong tủ hút phòng thí nghiệm [4, 7, 9].

b. Phương pháp định lượng 2-CEPS

Nồng độ 2-CEPS tại các thời điểm khảo sát được phân tích bằng phương pháp HPLC. Quá trình đo được tiến hành trên thiết bị HPLC Agilent 1100 (Mỹ); cột sắc ký C8 (250 mm x 4,6 mm x 5 μ m), detector UV-VIS Diode Array (DAD) dải quét 0 - 1100 nm. Điều kiện phân tích như sau: Tín hiệu đo 252 nm; Pha động: MeOH/nước(V/V) = 70/30; Tốc độ dòng: 1 mL/phút; Thể tích bơm mẫu: 10,0 μ l; Thời gian lưu, ứng với peak của 2-CEPS: t_r = 7,188 phút.

c. Phương pháp lập đường chuẩn 2-CEPS

Từ chất chuẩn 2-CEPS pha thành dung dịch gốc nồng độ 1000 ppm trong cloroform. Rồi pha tiếp thành dung dịch có nồng độ 1, 5, 10, 50, 100, 300, 400, 500 ppm. Phân tích trên thiết bị HPLC 1100 ở bước sóng λ = 252 nm sử dụng detector UV-VIS của Agilent. Từ đó, ta có đường chuẩn mỗi tương quan giữa diện tích peak và nồng độ 2-CEPS là $y = 29.541x - 8.84$ với $R^2 = 0,9992$. Hệ số $R^2 = 0.9992$ cho thấy dữ liệu phù hợp với mô hình đường hồi quy tuyến tính.

d. Tính toán hiệu suất chuyển hóa

Hiệu suất chuyển hóa (η , %) được tính theo công thức sau:

$$\eta = \frac{C_o - C_t}{C_o} \cdot 100 (\%)$$

Trong đó, C_0 , C_t (ppm) là nồng độ 2-CEPS trong dung dịch trước và sau khi xử lý.

2.2.2. Phương pháp đánh giá quá trình chuyển hóa 2-CEPS bằng chất tiêu độc TĐX-1

Thí nghiệm được tiến hành như mục a phần 2.2.1, dung dịch cloroform sau khi chiết được làm khô bằng Na_2SO_4 khan với hàm lượng 0,1 g/mL, sau đó, lọc qua màng 0,22 μm . Cuối cùng sử dụng phương pháp sắc ký khí khối phổ (GC-MS) để xác định 2-CEPS và các sản phẩm chuyển hoá.

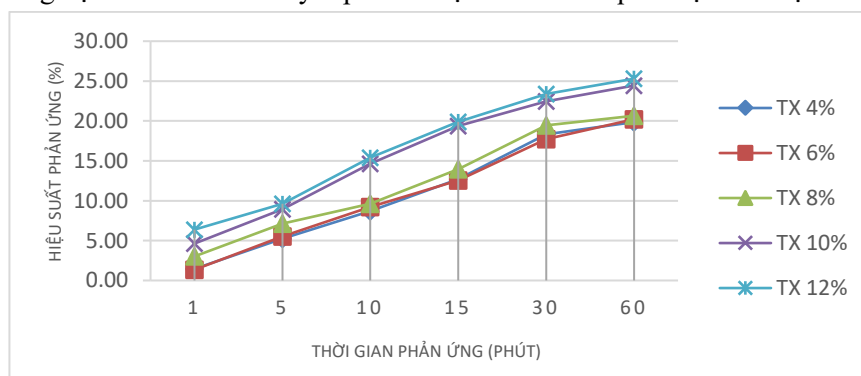
Thí nghiệm được thực hiện trên máy sắc ký khối phổ Agilent 5975 (Mỹ), cột DB-5MS (30 m x 0,32 mm x 0,25 mm), thư viện phổ so sánh NIST, với các điều kiện đo: Khí mang: Heli; Chương trình nhiệt độ: Nhiệt độ bắt đầu: 40 °C, giữ 01 phút; Nhiệt độ kết thúc: 280 °C, giữ 05 phút; Tốc độ gia nhiệt: 10 °C/phút. Các chất được xác định định tính dựa trên cơ sở kết hợp phương pháp so sánh phổ khối của chất phân tích với thư viện phổ NIST và phương pháp ghép mảnh.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Kết quả nghiên cứu xây dựng thành phần đơn của chất tiêu độc TĐX-1

3.1.1. Ảnh hưởng của chất hoạt động bề mặt TX-100

Để khảo sát ảnh hưởng của TX-100 đến khả năng chuyển hóa 2-CEPS, các thí nghiệm được tiến hành với thành phần chất tiêu độc gồm: H_2O_2 4,32 M, 10% V_{PC} , 20% V_{PG} , đối với TX-100 được thay đổi ở các nồng độ theo V là 4%, 6%, 8%, 10%, 12%, phần còn lại là nước cất. Sau đó tiến hành thí nghiệm như đã trình bày ở phần a mục 2.2.1. Kết quả được thể hiện ở hình 1.



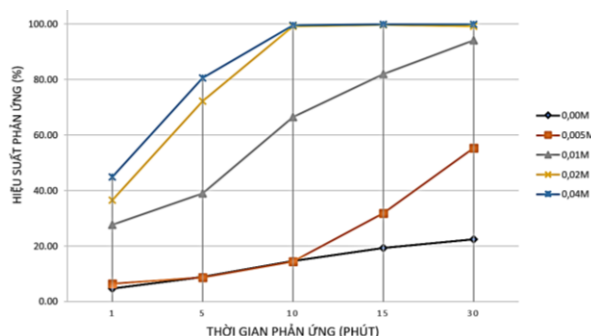
Hình 1. Ảnh hưởng của chất hoạt động bề mặt TX-100.

Từ kết quả hình 1 nhận thấy, khi chỉ có tác nhân oxy hóa là H_2O_2 với dung môi hữu cơ và chất hoạt động bề mặt thể hiện hiệu suất chuyển hóa 2-CEPS thấp: chưa đến 10% 2-CEPS bị chuyển hóa sau 5 phút đầu tiên, sau 60 phút hiệu suất đạt 20% ÷ 25%. Đồng thời, với hàm lượng TX-100 nhỏ hơn 10% V, tốc độ chuyển hóa và hiệu suất chuyển hóa kém hơn khá nhiều so với dung dịch có nồng độ 10% và 12% V. Kết quả trên có được là do khi lượng TX-100 nhỏ hơn 10% V dung dịch không hòa tan hoàn toàn 2-CEPS nên khả năng tiếp xúc của 2-CEPS với chất tiêu độc kém, dẫn đến hiệu suất chuyển hóa kém, từ 10% V trở lên dung dịch tan hoàn toàn, hiệu suất chuyển hóa tăng nhưng chỉ đạt khoảng 25%. Vì vậy, chọn nồng độ theo thể tích của TX-100 là 10%.

3.1.2. Ảnh hưởng của nồng độ muối K_2MoO_4

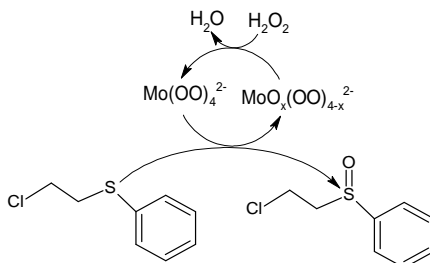
Từ kết quả phần 3.1.1, hàm lượng các chất trong dung dịch tiêu độc được cố định thành phần như sau: 10% $V_{\text{TX-100}}$, 10% V_{PC} , 20% V_{PG} , H_2O_2 4,32 M. Để khảo sát ảnh hưởng của nồng độ muối K_2MoO_4 đến khả năng chuyển hóa 2-CEPS, các thí nghiệm được tiến hành với nồng độ K_2MoO_4 lần lượt là 0,005M, 0,01M, 0,02 M và 0,04 M, phần còn lại là nước cất. Sau đó tiến hành thí nghiệm như đã trình bày ở mục 2.2.1. Kết quả được thể hiện ở hình 2.

Từ kết quả hình 2 nhận thấy, khi có mặt muối K_2MoO_4 tốc độ và hiệu suất chuyển hóa 2-CEPS tăng rõ rệt. Đặc biệt khi nồng độ K_2MoO_4 từ 0,02 M trở lên, sau 5 phút hiệu suất chuyển hóa đã đạt 70-80%, sau 10 phút hiệu suất đã đạt khoảng 99%.



Hình 2. Ảnh hưởng của nồng độ muối K_2MoO_4 .

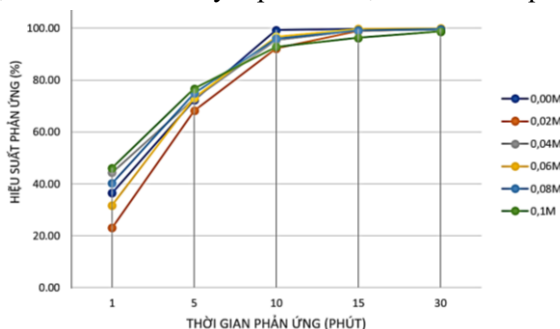
Sự tăng đột biến khả năng oxi hóa của chất tiêu độc khi có mặt K_2MoO_4 có thể được giải thích rằng, H_2O_2 phản ứng với K_2MoO_4 trong hỗn hợp chất tiêu độc để tạo ra các anion OOH^- . Các anion được tạo ra của axit peroxy sẽ oxy hóa nguyên tử S trong 2-CEPS thành sulfoxide [3, 5, 8].



Đồng thời cũng nhận thấy, từ phút thứ 10 trở đi, nồng độ K_2MoO_4 từ 0,02 M và cao hơn cũng không có sự khác biệt về hiệu suất chuyển hóa, tăng nồng độ K_2MoO_4 hơn 0,02 M là không cần thiết. Vì vậy, chọn nồng độ K_2MoO_4 là 0,02 M.

3.1.3. Ảnh hưởng của nồng độ muối kali citrate

Từ kết quả phần 3.1.1 và 3.1.2, hàm lượng các chất trong dung dịch tiêu độc được cố định thành phần chất tiêu độc như sau: 10% V_{TX-100} , 10% V_{PC} , 20% V_{PG} , H_2O_2 4,32 M, muối K_2MoO_4 0,02 M. Để khảo sát ảnh hưởng của nồng độ muối $C_6H_5K_3O_7$ đến khả năng chuyển hóa 2-CEPS, các thí nghiệm được tiến hành với thể tích muối thay đổi để dung dịch tiêu độc có nồng độ $C_6H_5K_3O_7$ lần lượt là 0,00 M, 0,02 M, 0,04 M, 0,06 M, 0,08 M và 0,1 M, phần còn lại là nước cất. Sau đó, tiến hành thí nghiệm như đã trình bày ở phần a mục 2.2.1. Kết quả được thể hiện ở hình 3.

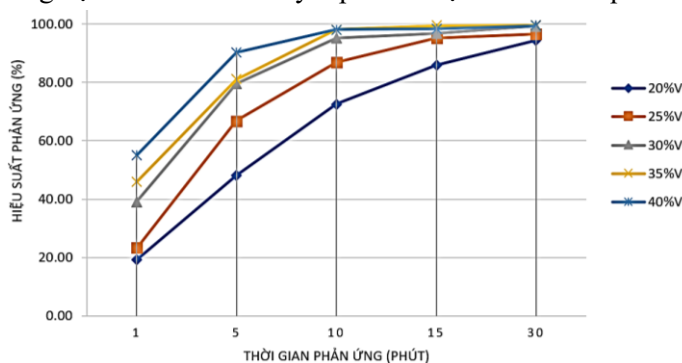


Hình 3. Ảnh hưởng của nồng độ muối $C_6H_5K_3O_7$.

Từ hình 3 nhận thấy ảnh hưởng của muối $C_6H_5K_3O_7$ đến quá trình chuyển hóa 2-CEPS là không nhiều, sau 10 phút hiệu suất đạt trên 92%. Tuy nhiên, muối $C_6H_5K_3O_7$ có vai trò làm dung dịch đệm giúp hệ phản ứng được ổn định trong khoảng $pH = 8 \pm 0,2$. Ảnh hưởng của muối đến khả năng chuyển hóa, độ ổn định của dung dịch tiêu độc, khả năng tiêu độc với các chất độc khác, ... cần được tiếp tục nghiên cứu. Lựa chọn nồng độ $C_6H_5K_3O_7$ là 0,08 M.

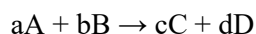
3.1.4. Ảnh hưởng của nồng độ Hydro peroxide

Từ kết quả phần 3.1.1, 3.1.2 và 3.1.3, hàm lượng các chất trong dung dịch tiêu độc được cố định như sau: 10% V_{TX-100} , 10% V_{PC} , 20% V_{PG} , K_2MoO_4 0,02 M, $C_6H_5K_3O_7$ 0,08 M. Để khảo sát ảnh hưởng của nồng độ H_2O_2 đến khả năng chuyển hóa 2-CEPS, các thí nghiệm được tiến hành với nồng độ H_2O_2 lần lượt là 2,47 M, 3,09 M, 3,71 M, 4,32 M và 4,94 M, phần còn lại là nước cất. Sau đó, tiến hành thí nghiệm như đã trình bày ở phần a mục 2.2.1. Kết quả được thể hiện ở hình 4.



Hình 4. Ảnh hưởng của nồng độ H_2O_2 .

Từ hình 4 nhận thấy, khi tăng nồng độ H_2O_2 dẫn đến tốc độ và hiệu suất chuyển hóa tăng, sau 30 phút các hệ phản ứng đều đạt hiệu suất trên 95%. Điều này phù hợp với định luật tác dụng khối lượng, tốc độ phản ứng tỉ lệ thuận với nồng độ chất tham gia với số mũ bằng hệ số phản ứng [1].



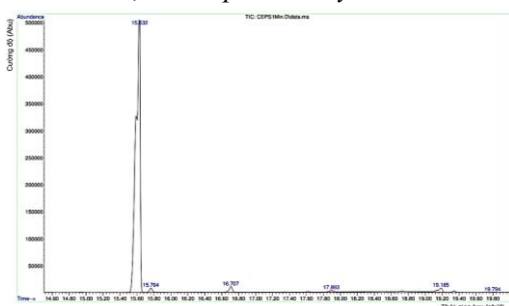
$$v = k \cdot [C_A]^a \cdot [C_B]^b$$

Tuy nhiên, khi nồng độ H_2O_2 là 4,32 M và 4,94 M thì sau 10 phút khả năng chuyển hóa của 2-CEPS trong hai dung dịch là tương đương. Hiệu suất chuyển hóa ở 10 phút đạt 98% và 15 phút đạt trên 99%. Theo thời gian, nồng độ các chất giảm dần, đặc biệt từ phút thứ 10 lượng CEPS giảm còn dưới 5% (6,68 mM). Tuy nhiên, do tỉ lệ mol H_2O_2 :2-CEPS $\approx 23 \div 27$ lần nên lượng tác nhân oxy hóa H_2O_2 giảm không đáng kể. Do đó, đến 15 phút đạt hiệu suất 99,4% và quá trình chuyển hóa vẫn tiếp tục. Vì vậy, chọn nồng độ H_2O_2 là 4,32 M.

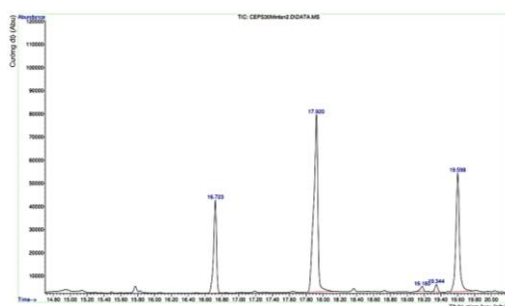
Từ kết quả thử nghiệm, đơn chất tiêu độc xanh được đề xuất (TĐX-1) gồm: 10% V_{TX-100} , 10% V_{PC} , 20% V_{PG} , K_2MoO_4 0,02 M, $C_6H_5K_3O_7$ 0,08 M, H_2O_2 4,32 M. Chất tiêu độc TĐX-1 dạng lỏng, màu cánh gián, tan tốt trong nước, hòa tan nhiều chất hữu cơ.

3.2. Xác định sản phẩm của chuyển hóa 2-CEPS

3.2.1. Xác định sản phẩm chuyển hóa



a) Sau oxy hoá 01 phút.



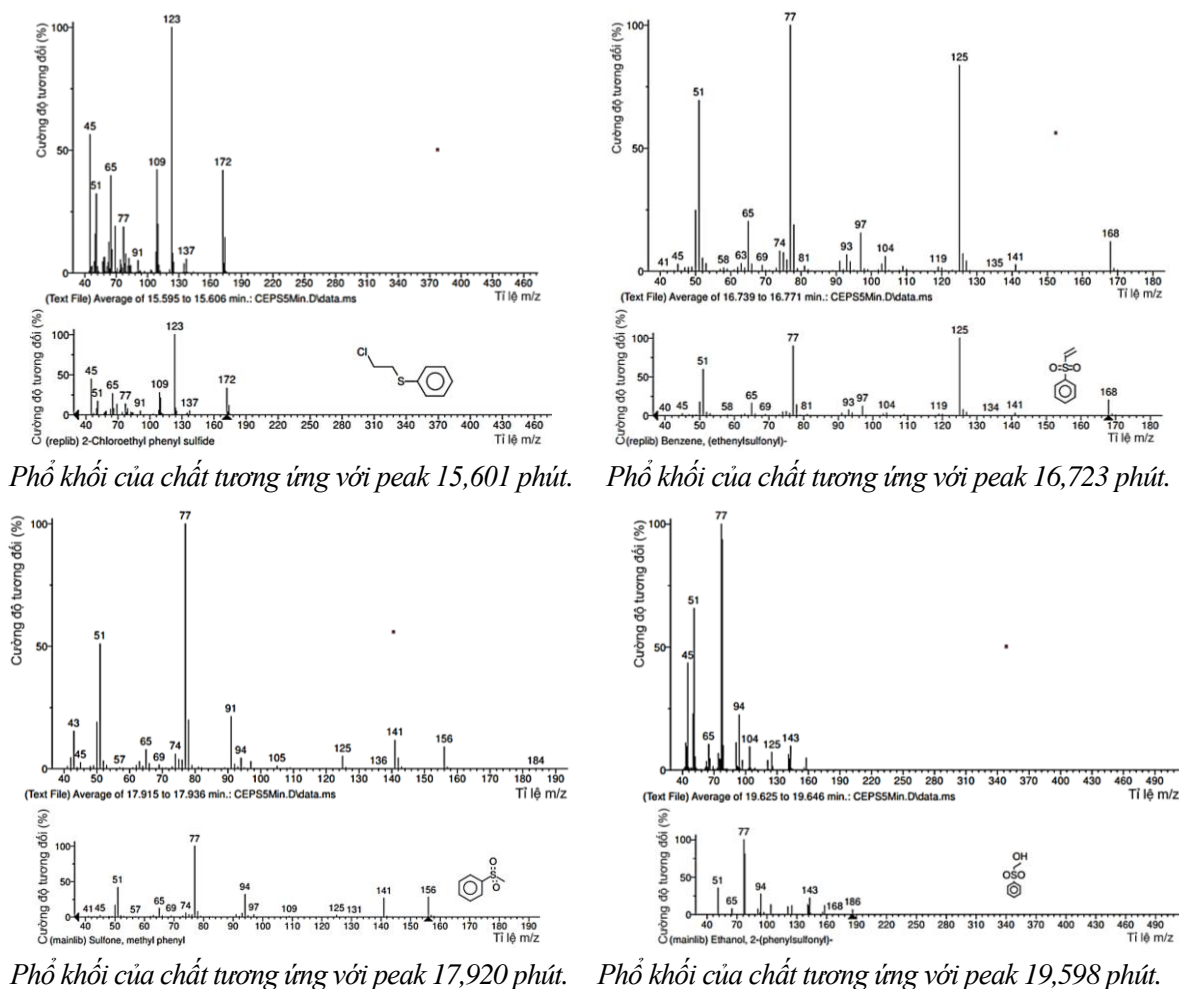
b) Sau oxy hoá 30 phút.

Hình 5. Sắc đồ GC của hỗn hợp sau 01 và 30 phút chuyển hóa 2-CEPS bởi TĐX-1.

Xác định sản phẩm chuyển hóa 2-CEPS bởi TĐX-1 bằng thư viện phổ GC-MS. Kết quả ghi sắc đồ GC-MS của hỗn hợp ở thời điểm sau phản ứng 01 phút và sau phản ứng 30 phút được dẫn ra

Nghiên cứu khoa học công nghệ

trong hình 5. Kết quả so sánh sắc đồ GC của 2 mẫu oxy hoá 2-CEPS sau 01 phút và sau 30 phút cho thấy: sau 01 phút chuyển hoá bằng TĐX-1 cường độ peak của 2-CEPS tại thời gian lưu là 15,601 phút còn rất lớn, trong khi đó cường độ peak các sản phẩm rất thấp. Sau 30 phút hầu như không còn peak của 2-CEPS, đồng thời có 03 peak chính tại thời gian lưu là: 16,723; 17,920 và 19,598 phút.



Phổ khối của chất tương ứng với peak 15,601 phút.

Phổ khối của chất tương ứng với peak 16,723 phút.

Phổ khối của chất tương ứng với peak 17,920 phút.

Phổ khối của chất tương ứng với peak 19,598 phút.

Hình 6. Phổ MS của sản phẩm ở các thời gian lưu khác nhau.

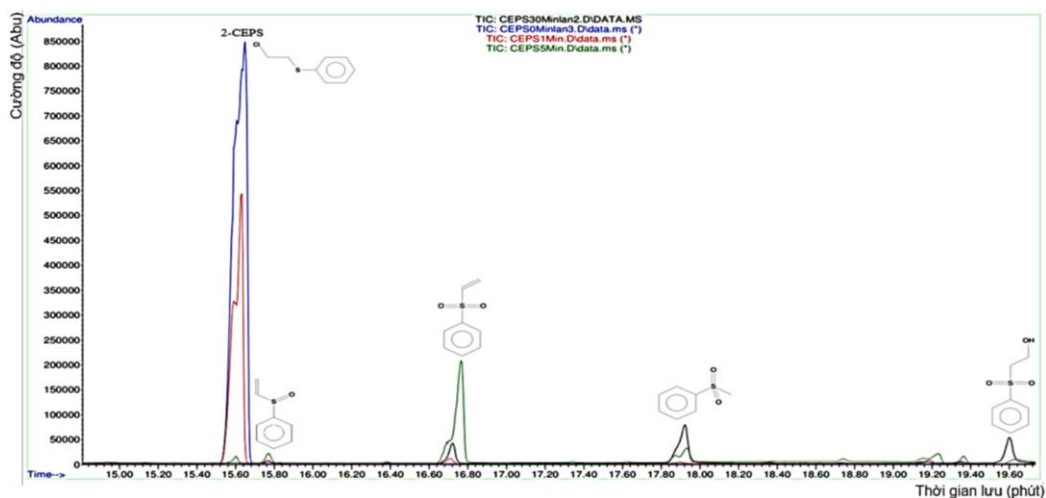
Dựa trên các mảnh ion đặc trưng của phổ MS đã xác định được các chất tương ứng là: 2-chloroethyl phenyl sulfide (với các mảnh ion có số khối đặc trưng: 77, 109, 123, 137, 172); ethenylsulfonyl benzene (với các mảnh ion có số khối đặc trưng: 77, 91, 141, 168); methyl phenyl sulfone (với các mảnh ion có số khối đặc trưng: 65, 77, 78, 141, 156) và 2-(phenylsulfonyl) ethanol (với các mảnh ion có số khối đặc trưng: 45, 77, 141, 186).

Như vậy, 2-CEPS bị chuyển hóa bởi TĐX-1 sau 30 phút thành 03 sản phẩm chính là: ethenylsulfonyl benzene, methyl phenyl sulfone và 2-(phenylsulfonyl) ethanol.

3.2.2. Đề xuất cơ chế quá trình chuyển hóa

Từ sắc đồ GC của sản phẩm phản ứng ở các thời điểm sau 0, 1, 5 và 30 phút nhận thấy, có 4 sản phẩm chính với thời gian lưu lần lượt là: 15,770; 16,723; 17,920 và 19,598 phút.

Kết quả chồng phổ ở hình 7 cho thấy, ở thời gian lưu 15,601 phút, cường độ peak của 2-CEPS suy giảm nhanh, sau 5 phút còn lượng rất thấp, sau 30 phút không nhận thấy peak. Như vậy, có thể xem như 2-CEPS đã chuyển hóa hoàn toàn.



Hình 7. Chồng phổ GC ở các thời điểm phản ứng 0, 1, 5, 30 phút.

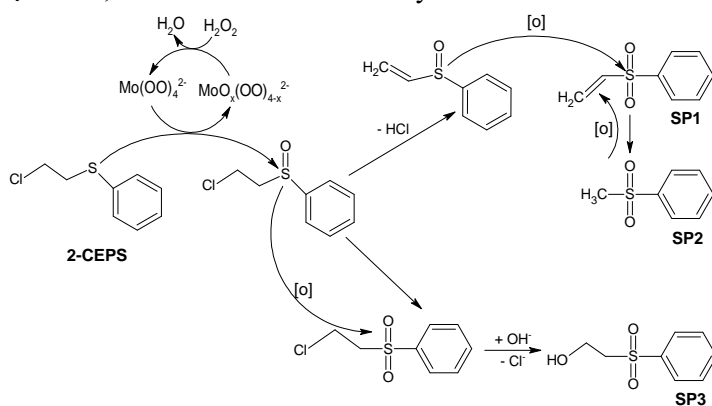
Ở thời gian lưu 15,770 phút, sản phẩm là (ethenylsulfinyl) benzene tại thời điểm 1 phút có tạo peak, đến 5 phút cường độ lớn nhất, sau đó giảm dần và sau 30 phút không nhận thấy peak. Như vậy, (ethenylsulfinyl) benzene là sản phẩm trung gian và đã chuyển hóa hoàn toàn sau 30 phút.

Ở thời gian lưu 16,723 phút, sản phẩm là ethenylsulfonyl benzene, tại thời điểm 1 phút có tạo peak, đến 5 phút cường độ lớn nhất, sau đó giảm dần và sau 30 phút vẫn còn lượng khá lớn. Như vậy, ethenylsulfonyl benzene là một sản phẩm chính của phản ứng và nó tiếp tục bị chuyển hóa chậm (SP1).

Ở thời gian lưu 17,920 phút, sản phẩm là methyl phenyl sulfone; cường độ của peak tăng dần. Như vậy, methyl phenyl sulfone là một sản phẩm chính của phản ứng (SP2).

Ở thời gian lưu 19,598 phút, sản phẩm là 2-(phenylsulfonyl) ethanol; cường độ của peak tăng dần. Như vậy, 2-(phenylsulfonyl) ethanol là một sản phẩm chính của phản ứng (SP3).

Từ những nhận định trên, có thể đề xuất cơ chế chuyển hóa như sau:



Hình 8. Quá trình chuyển hóa 2-CEPS bởi TĐX-1.

Quá trình chuyển hóa 2-CEPS bởi TĐX-1 xảy ra nhanh và qua nhiều sản phẩm trung gian. Môi trường phản ứng có tính oxi hóa mạnh và có tính kiềm, do đó, phản ứng oxi hóa diễn ra đồng thời với quá trình thủy phân, tách loại HCl và cắt mạch cacbon. Sau 30 phút phản ứng tạo ra 03 sản phẩm chính như trên.

4. KẾT LUẬN

Bài báo đã nghiên cứu vai trò một số thành phần chính và lựa chọn được đơn thành phần chất

TĐX-1 cho hiệu quả chuyển hóa 2-CEPS đạt trên 99% sau 15 phút, gồm có: 10% V_{TX-100}, 10% V_{PC}, 20% V_{PG}, K₂MoO₄ 0,02 M, C₆H₅K₃O₇ 0,08 M, H₂O₂ 4,32 M. Đã xác định được 03 sản phẩm của quá trình chuyển hóa 2-CEPS bởi TĐX-1 sau 30 phút phản ứng là: ethenylsulfonyl benzene, methyl phenyl sulfone và 2-(phenylsulfonyl) ethanol. Đồng thời đã đề xuất cơ chế quá trình chuyển hóa 2-CEPS để tạo ra 03 sản phẩm trên.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Nguyễn Văn Hoàng, Vũ Ngọc Toán, “*Giáo trình chất độc quân sự*”, Viện Khoa học và Công nghệ quân sự, (2018).
- [2]. Vũ Thanh Bình, Nguyễn Ngọc Phan, Phùng Minh Tấn, “*Giáo trình Chất tiêu tủy và phương pháp tiêu tủy*”, TSQ Phòng hóa, Bình chủng Hóa học, (2017).
- [3]. Beer Singh, G. K. Prasad, K. S. Pandey, R. K. Danikhel, R. Vijayaraghavan, “Decontamination of Chemical Warfare Agents”. *Defence Science Journal*, 60 (4), pp. 428-441, (2010).
- [4]. George W. Wagner, Lawrence R. Procell, David C. Sorrick, “*Development of new decon green- a how to guide for the rapid decontamination of CARC pain*”, U.S. Army Edgewood Chemical Biological Center, (2008).
- [5]. George W. Wagner, Lawrence R. Procell, Yu-Chu Yang, Clifford A. Bunton, “*Molybdate/peroxide microemulsions useful for decontamination of chemical warfare agents*”, United States Patent, US 6,723,891 B1, (2004).
- [6]. George W. Wagner, Philip W Bartram, Lawrence R. Procell, David D. Henderson, Abraham L. Turetsky, Vipil K. Rastogi, Yu-Chu Yang, “*Decon green Development and chemical, biological agent efficacy testing*”, U.S. Army Edgewood Chemical Biological Center, (2004).
- [7]. M. Kassem, M. Sh. Fayed, A. M. Soltan and M. A. Ibrahim, “*Oxidative decontamination of sulfur mustard using formulations based on hydrogen peroxide*”, *Proceeding of the 4th ICEE Conference* 27, pp. 503 – 514, (2008).
- [8]. North atlantic treaty organization, “*Sensitive Equipment Decontamination*”, Science and Technology organization, (2017).
- [9]. Ryoji Noyori, Masao Aoki and Kazuhiko Sato, “*Green oxidation with aqueous hydrogen peroxide*”, (2003).
- [10]. Victor J. Ketcham, Enzo L. Coltrinari, Wayne W. Hazen, “*Pressure oxidation process for the production of molybdenum trioxide molybdenite*”, US 6,149,883, (2000).

ABSTRACT

Research on formulating ingredients and evaluating the decomposition ability of 2-chloroethyl phenylsulfide by green decontamination based on molybdate

This paper presents the results of initial research on investigating the role of some components in green decontamination in the metabolism of 2-chloroethyl phenyl sulfide (a military poison simulant yperit). Each component of green decontamination was investigated and determined to play a role in the detoxification process, including surfactants, catalysts, buffers and oxidizing agents. From the research results, the optimal conditions were selected and initially proposed a detoxifying ingredient with 2-CEPS conversion efficiency of over 99% after 15 minutes. Simultaneously, a number of products have been identified from which the mechanism of 2-CEPS metabolism is proposed.

Keywords: 2-CEPS; Green decontamination; Molybden; Triton X-100.