

# TỔNG HỢP VÀ KHẢO SÁT KHẢ NĂNG TIÊU ĐỘC CỦA KBDO ĐỐI VỚI CHẤT ĐỘC YPERIT

Vũ Ngọc Doãn<sup>1,\*</sup>, Đoàn Hữu Hùng<sup>2</sup>, Nguyễn Thành Vinh<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Đại học Kỹ thuật Lê Quý Đôn

<sup>2</sup>Bình chủng Hóa học

## Tóm tắt

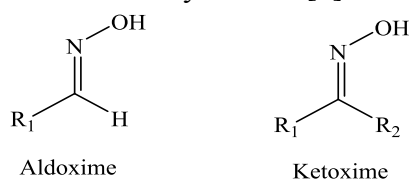
Muối kali 2,3-butanedione monoxime (KBDO) là một trong những hợp chất tiêu độc có hiệu quả cao với các chất độc thần kinh, loét da và là thành phần chính trong bộ Kit khử nhiễm RSDL. Bài báo trình bày kết quả nghiên cứu tổng hợp KBDO từ 2,3-butanedione monoxime (DAM) và KOH hoặc *t*-BuOK ở các điều kiện phản ứng khác nhau và khảo sát khả năng tiêu độc của sản phẩm trên chất độc loét da yperit (HD). Thành phần, cấu trúc của sản phẩm đã được khẳng định bằng các phương pháp phổ IR, NMR, EDX. Cơ chế tiêu độc của KBDO với chất độc HD được đề xuất thông qua xác định sản phẩm trung gian của phản ứng bằng phổ NMR.

**Từ khóa:** KBDO; chất khử nhiễm; chất độc quân sự, yperit (HD).

## 1. Mở đầu

Chất độc quân sự là những chất độc hoá học có độc tính cao được dùng trong mục đích quân sự, để sát thương sinh lực hoặc làm nhiễm độc môi trường, trang bị và vật chất của đối phương, là cơ sở của vũ khí hóa học. Trong đó, nhóm chất độc thần kinh (sarin, soman, tabun, VX) và loét da (yperit, yperit nito) là những loại chất độc được sản xuất và sử dụng khá phổ biến [1]. Để loại bỏ chất độc khỏi bề mặt nhiễm, cần phải thực hiện quá trình tiêu độc. Trong đó, khử nhiễm bằng chất tiêu độc là một phương pháp hiệu quả và được sử dụng rộng rãi. Có hai nhóm chất tiêu độc phổ biến là các tác nhân nucleophin (chủ yếu là các oxime) và các chất có tính ôxi hóa mạnh [2].

Oxime là một nhóm các hợp chất hóa học có công thức chung  $R_1R_2C=NOH$ , trong đó  $R_1$  là nhóm alkyl,  $R_2$  có thể là hydro sẽ tạo thành aldoxime hoặc  $R_2$  là alkyl sẽ tạo thành ketoxime (Hình 1) [3]. Thuật ngữ oxime có từ thế kỷ 19, là một sự kết hợp của các từ “ôxi” và “imine”. Thông thường, oxime được tạo ra bằng cách phản ứng hydroxylamine với aldehyde hoặc ketone, nhưng nó cũng có thể được tạo ra bằng cách phản ứng nitrit với các hợp chất có chứa hydro axit [4].



Hình 1. Cấu trúc của aldoxime và ketoxime

\* Email: doanvn@mta.edu.vn

<https://doi.org/10.56651/lqdtu.jst.v17.n02.306>

Các hợp chất của oxime (pralidoxime, dekon 139) được sử dụng làm thuốc giải độc, khử nhiễm cho các tác nhân thần kinh, các hợp chất cơ photpho [5]. Bộ RSDL là sản phẩm được sử dụng để khử nhiễm chất độc quân sự (nhóm V, G, H) và các độc tố T-2. Chúng được sản xuất trên cơ sở của hỗn hợp với hợp chất chính là diacetyl monoxime (DAM), dekon 139 (muối kali 2,3-butanedione monoxime (KBDO), MPEG (methoxy polyethylene glycol), nước được tẩm trên tẩm bột biển [6]. Đây là một sản phẩm tiêu độc đa năng được NATO phát triển và trang bị cho quân đội và các lực lượng đặc nhiệm chống khủng bố CBRN với thành phần chất tiêu độc chính là tác nhân nucleophin - KBDO.

Để tổng hợp KBDO có thể thực hiện phản ứng giữa DAM với các tác nhân cung cấp kali như kali kim loại,  $C_2H_5OK$ ,  $KOH$  [7], hoặc  $t-BuOK$  [8]. Theo 2 cách đầu tiên (kali kim loại và  $C_2H_5OK$ ) có nhược điểm là không an toàn, nguồn nguyên liệu đắt tiền, quy trình thực hiện phức tạp. Trong khi đó, nếu tổng hợp KBDO từ DAM và  $KOH$  (hoặc  $t-BuOK$ ) thì hiệu quả thu được cũng tương đương trong khi rất an toàn và nguyên liệu dễ tiếp cận hơn. Trong nghiên cứu này, các tác giả trình bày kết quả tổng hợp KBDO và bước đầu xác định cơ chế tiêu độc của KBDO đối với chất độc yperit lưu huỳnh (HD).

## 2. Thực nghiệm

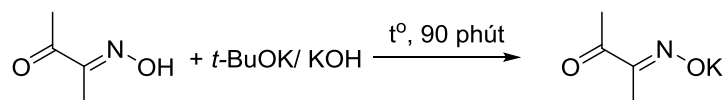
### 2.1. Hóa chất và thiết bị

Các hóa chất được sử dụng trong quá trình tổng hợp KBDO là hóa chất của hãng Sigma với độ tinh khiết trên 98%, dung môi sử dụng tinh khiết, khan đều được cất mới. Các thí nghiệm tổng hợp, tinh chế sản phẩm được thực hiện tại phòng thí nghiệm Phòng hóa, Khoa Hóa - Lý kỹ thuật, Đại học Kỹ thuật Lê Quý Đôn. Tiến trình phản ứng được theo dõi phản ứng bằng sắc ký lớp mỏng (TLC) sử dụng hệ dung môi *n*-hexan : etylaxetat (4:1), chất chỉ thị  $KMnO_4$ . Hợp chất được tách và tinh chế bằng phương pháp lọc rửa kết hợp với kỹ thuật kết tinh.

Phổ cộng hưởng từ hạt nhân  $^1H-NMR$ ,  $^{13}C-NMR$  được thực hiện trên máy Bruker Avance 500 MHz với các dung môi  $CDCl_3$  và TMS là chất chuẩn, phổ EDX được đo trên máy JEOL - JED tại Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam; nhiệt độ nóng chảy được đo trên máy Stuart SMP11; phổ hồng ngoại IR được đo trên máy Perkin Elmer Spectrum Two tại Phòng thí nghiệm Hữu cơ, Đại học Kỹ thuật Lê Quý Đôn, sử dụng phương pháp tán xạ ATR (Attenuated total reflection).

### 2.2. Tổng hợp KBDO

KBDO được tổng hợp từ DAM,  $KOH$  (hoặc  $t-BuOK$ ) trong dung môi thích hợp theo sơ đồ 1:



Sơ đồ 1. Phản ứng tổng hợp KBDO.

Hòa tan 0,505 g DAM trong 25 mL dung môi, thu được dung dịch A. Hòa tan 0,336 g KOH (hoặc 0,673 g *t*-BuOK) trong 25 mL dung môi thu được dung dịch B. Cho dung dịch B vào bình cầu 2 cổ dung tích 250 mL, đặt trên máy khuấy từ gia nhiệt. Nhỏ từng giọt dung dịch A vào dung dịch B trong khoảng 20÷30 phút, khuấy ở tốc độ 600÷1000 vòng/phút, nhiệt độ 70°C. Kết thúc nhỏ giọt, tiếp tục khuấy và đun thêm 90 phút. Kiểm tra tiến trình của phản ứng bằng sắc ký lớp mỏng. Kết thúc phản ứng, đem hỗn hợp sản phẩm cô quay chân không (nhiệt độ 80°C, áp suất 150 mbar), thu được sản phẩm KBDO thô. Sản phẩm được tinh chế và làm sạch trong ether, sấy khô trong tủ hút chân không từ 1÷2 giờ. Sản phẩm thu được là chất rắn màu vàng, nhiệt độ nóng chảy 223÷225°C.

Trong quá trình tổng hợp KBDO, các yếu tố ảnh hưởng lần lượt được xét đến nhằm tối ưu hóa hiệu suất như: dung môi (EtOH, *t*-BuOH, THF), tỉ lệ chất đầu (giữa DAM và *t*-BuOH/ KOH = 1:1,2; 1:1;1,2:1) và nhiệt độ (30÷90°C).

### 2.3. Nghiên cứu khả năng tiêu độc của KBDO với chất độc hại da HD

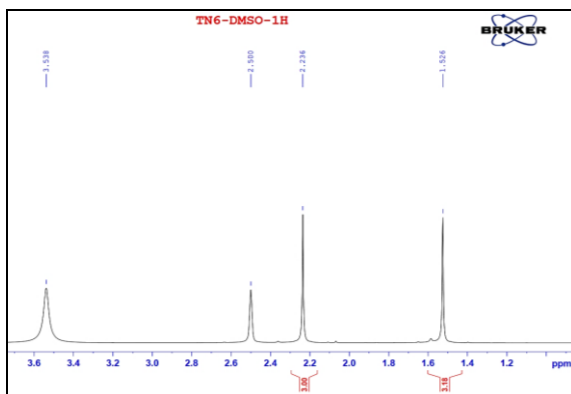
Mẫu chất độc HD dùng trong nghiên cứu được cung cấp từ Bộ tư lệnh Hóa học với độ tinh khiết 98%. Quá trình thử nghiệm đánh giá khả năng tiêu độc và xác định cơ chế phản ứng được thực hiện như sau: pha 0,159 g (0,001 mol) chất độc HD với 100 mL ethanol khan được dung dịch 0,01 mol/L; lấy 0,139 g (0,001 mol) KBDO pha với 100 mL ethanol khan, được dung dịch 0,01 mol/L. Thực hiện phản ứng tiêu độc với tỉ lệ KBDO:HD là 5:1 trong 180 phút. Sản phẩm của phản ứng được chiết tách, tinh chế bằng sắc ký cột và phân tích cấu trúc bằng các phương pháp phổ IR, NMR, EDX.

## 3. Kết quả và thảo luận

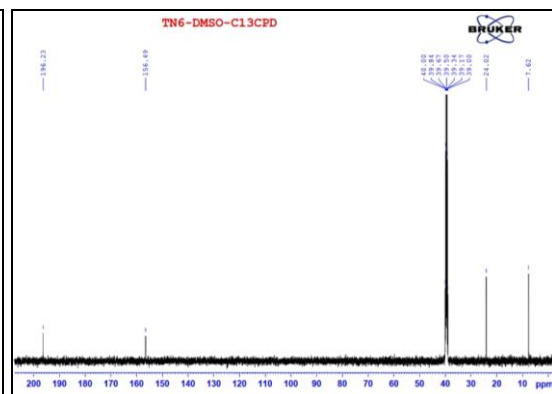
### 3.1. Cấu trúc và thành phần sản phẩm KBDO

Cấu trúc, thành phần của sản phẩm đã được chứng minh bằng các phương pháp IR, NMR, EDX. IR (ATR),  $\nu_{\max}$ : 3197,7; 2922,7; 1609,3; 1474,2; 1371,4; 1174,3; 1106,9; 623,5; 427,2  $\text{cm}^{-1}$ .  $^1\text{H-NMR}$  (DMSO-*d*<sub>6</sub>, 500 MHz,  $\delta$  (ppm): 1,526 (3H, s,  $\text{CH}_3\text{-C=O}$ ); 2,236 (3H, s,  $\text{CH}_3\text{-C=N-}$ ).  $^{13}\text{C-NMR}$  (DMSO-*d*<sub>6</sub>, 125 MHz,  $\delta$  (ppm): 196,23 (C=O); 156,49 (C=N), 24,02 ( $\text{CH}_3\text{-C=O}$ ); 7,62 ( $\text{CH}_3\text{-C=N}$ ).

Trên phổ cộng hưởng từ hạt nhân  $^1\text{H-NMR}$  của sản phẩm (Hình 2) xuất hiện đầy đủ các tín hiệu đặc trưng của các proton có mặt trong phân tử KBDO. Hai tín hiệu singlet cộng hưởng tại  $\delta = 1,526$  ppm (3H, s,  $\text{CH}_3\text{-C=O}$ ) và  $\delta = 2,236$  ppm (3H, s,  $\text{CH}_3\text{-C=N-}$ ) là tín hiệu cho proton của 2 nhóm  $-\text{CH}_3$ . Trên phổ  $^{13}\text{C-NMR}$  (Hình 3) của sản phẩm cũng xuất hiện đầy đủ các tín hiệu của 4 nguyên tử cacbon có mặt trong phân tử KBDO:  $\delta = 196,23$  ppm (C=O);  $\delta = 156,49$  ppm (C=N), ngoài ra  $\delta = 24,02$  ppm ( $\text{CH}_3\text{-C=O}$ ) và  $\delta = 7,62$  ppm ( $\text{CH}_3\text{-C=N}$ ).

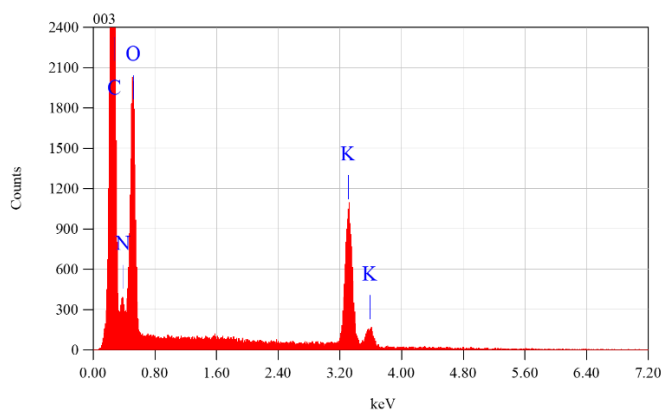
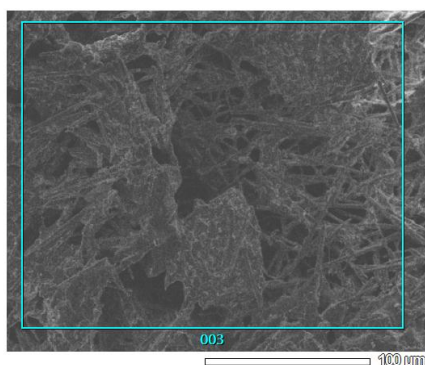


Hình 2. Phổ  $^1\text{H-NMR}$  của KBDO.



Hình 3. Phổ  $^{13}\text{C-NMR}$  của KBDO.

Để xác định thành phần các nguyên tố trong sản phẩm, kỹ thuật phân tích EDX đã được sử dụng. Trên phổ EDX của sản phẩm (Hình 4) cho thấy trong sản phẩm tổng hợp được ngoài các nguyên tố của hợp chất oxime (C, O, N) có xuất hiện của nguyên tố K trong thành phần, điều này có thể dự đoán rằng nguyên tử H trong phân tử DAM đã được thay thế bằng nguyên tử K trong KBDO.



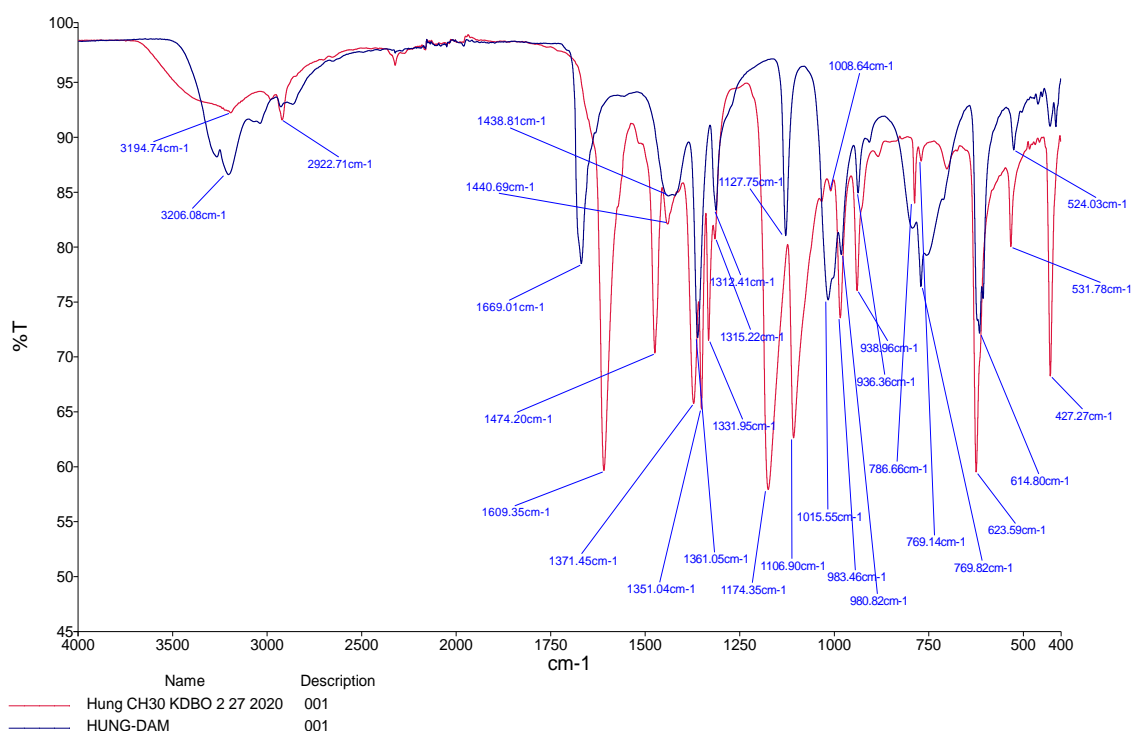
Thin Film Standardless Standard Quantitative Analysis

Fitting Coefficient: 0.6351

Element	(keV)	Mass%	Counts	Error%	Atom%	Compound	Mass%	Cation K
C K (Ref.)	0.277	57.18	18726.80	0.01	72.21			1.0000
N K	0.392	4.52	2632.71	0.09	4.89			0.5623
O K	0.525	14.35	11835.26	0.03	13.60			0.3970
K K	3.312	23.95	12325.43	0.08	9.29			0.6363
Total		100.00			100.00			

Hình 4. Kết quả phân tích EDX của KBDO.

Mặt khác, khi so sánh phổ IR của DAM và sản phẩm tạo thành (Hình 5) không có sự khác biệt nhiều về vị trí các dải hấp thụ. Các pic đặc trưng của các nhóm chức giống nhau của hai hợp chất đều xuất hiện. Khác biệt lớn nhất là sự thay đổi trong khu vực  $3000 \div 3500 \text{ cm}^{-1}$ , pic dao động hóa trị của nhóm -OH trong phân tử DAM không còn (pic nhọn,  $\nu_{\text{OH}} = 3206 \text{ cm}^{-1}$ ), thay vào đó là pic tù ( $\nu_{\text{OK}} = 3194 \text{ cm}^{-1}$ , đặc trưng cho nhóm -OK trong phân tử KBDO).



Hình 5. Phổ IR của sản phẩm KBDO và của DAM.

Như vậy, bằng các kết quả phân tích nhiệt độ nóng chảy, IR,  $^1\text{H-NMR}$ ,  $^{13}\text{C-NMR}$ , EDX cho phép khẳng định cấu trúc của sản phẩm tạo thành KBDO.

### 3.2. Nghiên cứu ảnh hưởng của một số yếu tố đến hiệu suất phản ứng tổng hợp KBDO

#### 3.2.1. Ảnh hưởng của tác nhân kiềm và dung môi phản ứng

Quá trình tổng hợp KBDO, hai tác nhân kiềm được lựa chọn là KOH và *t*-BuOK do có những thuận lợi trong quá trình phản ứng và tinh chế sản phẩm. Với hai tác nhân này, lần lượt các dung môi EtOH, *t*-BuOH và THF được sử dụng làm môi trường phản ứng trong điều kiện nhiệt độ là  $70^\circ\text{C}$  và thời gian 90 phút. Kết quả được trình bày trong bảng 1.

Bảng 1. Hiệu suất phản ứng theo các chất tham gia và dung môi

Mẫu	Tác nhân kiểm	Dung môi	Nhiệt độ phản ứng (°C)	Thời gian (phút)	Hiệu suất (%)
TN1	KOH	EtOH	70	90	47,44
TN2		<i>t</i> -BuOH	70	90	65,12
TN3		THF	70	90	23,51
TN4	<i>t</i> -BuOK	EtOH	70	90	74,46
TN5		<i>t</i> -BuOH	70	90	82,01
TN6		THF	70	90	91,56

Với các dung môi được sử dụng trong nghiên cứu, hiệu suất phản ứng của DAM và KOH luôn thấp hơn so với *t*-BuOK. Điều này có thể được giải thích do khả năng trao đổi K<sup>+</sup> giữa *t*-BuOK và DAM thuận lợi hơn so với KOH. Mặt khác, phản ứng giữa DAM và *t*-BuOK không sinh ra nước, là một thành phần gây thủy phân KBDO.

Trong 3 loại dung môi sử dụng, THF cho hiệu suất phản ứng cao nhất. KBDO tạo thành sau phản ứng không hòa tan trong THF do đó thúc đẩy phản ứng xảy ra theo chiều thuận và đạt hiệu suất phản ứng cao hơn. Trong khi đó, với các dung môi như EtOH, *t*-BuOH khi hòa tan KBDO làm nó bị thủy phân một phần thành DAM.

Từ kết quả trên, tác nhân phản ứng với DAM để tổng hợp KBDO trong các khảo sát tiếp theo là *t*-BuOK với dung môi THF.

### 3.2.2. Ảnh hưởng của tỉ lệ chất tham gia phản ứng

Thực hiện phản ứng trong cùng điều kiện về nhiệt độ, thời gian và dung môi, các chất tham gia phản ứng với các tỉ lệ khác nhau thu hiệu suất phản ứng như bảng 2. Ở mẫu M1, trong sản phẩm phản ứng có lẫn *t*-BuOK còn dư và khó khăn trong quá trình tinh chế, làm sạch sản phẩm. Ở M3 xuất hiện DAM còn dư, tuy nhiên có thể dễ dàng loại bỏ bằng cách rửa hỗn hợp bằng ether hoặc EtOAc.

Bảng 2. Hiệu suất phản ứng theo tỉ lệ các chất tham gia

Mẫu	Nhiệt độ (°C)	Thời gian phản ứng (phút)	Dung môi	Tỉ lệ DAM/ <i>t</i> -BuOK	Hiệu suất (%)
M1	70	90	THF	1,0:1,2	91,56
M2	70	90	THF	1,0:1,0	89,43
M3	70	90	THF	1,2:1,0	90,05

Bảng 2 cho thấy hiệu suất phản ứng có sự khác biệt nhỏ. Vì vậy, để thu được sản phẩm sạch với độ tinh khiết cao hơn, các tác giả lựa chọn tỉ lệ chất tham gia phản ứng là DAM : *t*-BuOK = 1:1 và tiếp tục thực hiện khảo sát ảnh hưởng của nhiệt độ.

### 3.2.3. Ảnh hưởng của nhiệt độ

Dải nhiệt độ khảo sát được thực hiện từ nhiệt độ 30°C đến 90°C. Phản ứng tiến hành với các thành phần và điều kiện về tỉ lệ, dung môi đã được lựa chọn ở trên.

Bảng 3. Hiệu suất phản ứng theo nhiệt độ

STT	DAM/ <i>t</i> -BuOK	Dung môi	Thời gian (phút)	Nhiệt độ (°C)	Hiệu suất phản ứng (%)
1	1:1	THF	90	30	62,86
2	1:1	THF	90	50	81,27
3	1:1	THF	90	70	89,43
4	1:1	THF	90	90	88,79

Kết quả từ bảng 3 cho thấy: Ở vùng nhiệt độ khảo sát, hiệu suất phản ứng tăng dần khi tăng nhiệt độ từ 30°C (đạt 62,86%) lên 70°C (89,43%) và có chiều hướng giảm khi tăng nhiệt độ phản ứng (đạt 88,79% ở 90°C). Điều này có thể giải thích là do ở vùng nhiệt độ thấp (30÷50°C) năng lượng để hoạt hóa và khuếch tán các cấu tử chưa đủ lớn để phản ứng hoàn toàn trong khoảng thời gian khảo sát (90 phút). Trong khi đó, ở vùng nhiệt độ cao hơn (90°C) có thể bắt đầu xảy ra quá trình phân hủy sản phẩm dẫn đến làm giảm hiệu suất phản ứng. Hiện tượng này được quan sát trong quá trình theo dõi phản ứng: Trong quá trình thực nghiệm, phản ứng ở nhiệt độ cao (ở 90°C), ban đầu khi mới nhỏ giọt dung dịch DAM vào bình cầu xuất hiện màu vàng (màu của KBDO), dần chuyển sang màu hơi nâu (có thể một phần nhỏ sản phẩm bị phân hủy khi thực hiện phản ứng ở nhiệt độ cao tại thời điểm ban đầu).

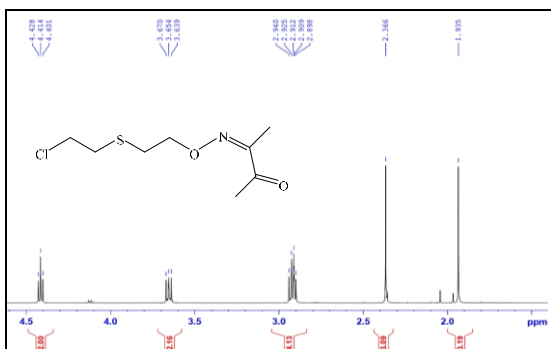
### 3.3. Nghiên cứu khả năng tiêu độc của KBDO với chất độc hại da HD

Nhằm đánh giá bước đầu về khả năng tiêu độc của KBDO và cơ chế tiêu độc, nhóm nghiên cứu đã tiến hành thử nghiệm phản ứng của KBDO với chất độc HD. Tỉ lệ KBDO : HD = 5:1 và thời gian phản ứng tiêu độc là 3 giờ. Sản phẩm sau phản ứng được tách riêng bằng sắc ký lớp mỏng thu được 2 sản phẩm, tiến hành chụp phổ NMR với 2 chất này thu được kết quả như sau:

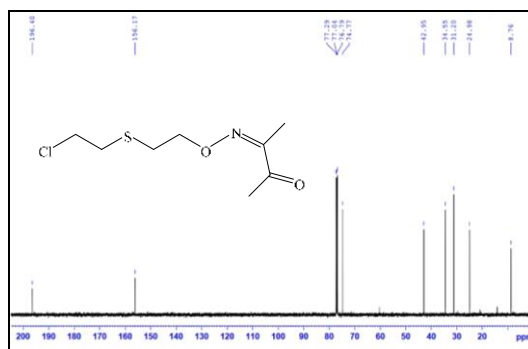
**SP-VI:** IR (ATR),  $\nu_{\max}$ : 2829; 1692; 1609; 1306; 1125; 1014; 695  $\text{cm}^{-1}$ .  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 500 MHz),  $\delta$  (ppm): 4,4 (2H, t,  $J = 6,5\text{Hz}$ ,  $\text{CH}_2\text{-Cl}$ ); 3,65 (2H, t,  $J = 6,5\text{Hz}$ ,  $\text{CH}_2\text{-O}$ ); 2,94-2,89 (4H, m,  $2 \times \text{CH}_2\text{-S}$ ); 2,36 (3H, s,  $\text{CH}_3$ ); 1,93 (3H, s,  $\text{CH}_3$ ).  $^{13}\text{C-NMR}$

(CDCl<sub>3</sub>, 125 MHz), δ (ppm): 196,40 (C=O); 156,17 (C=N); 74,77 (O-CH<sub>2</sub>); 42,95 (C-Cl); 34,55 (S-CH<sub>2</sub>); 31,20 (S-CH<sub>2</sub>); 24,98 (H<sub>3</sub>C-C=O); 8,76 (H<sub>3</sub>C-C=N).

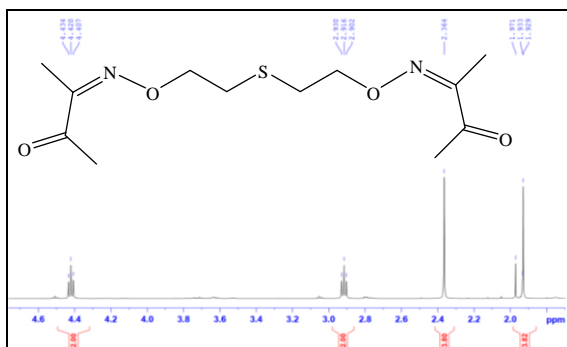
**SP-V2:** IR (ATR), ν<sub>max</sub>: 2929; 1692; 1609; 1306; 1124; 1024; 1017; 608 cm<sup>-1</sup>. <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 500 MHz), δ (ppm): 4,42 (2H, t, J = 7,0 Hz, -CH<sub>2</sub>-O); 2,91 (2H, t, J = 7,0 Hz, -CH<sub>2</sub>-S); 2,36 (3H, s, -CH<sub>3</sub>); 1,92 (3H, s, -CH<sub>3</sub>). <sup>13</sup>C-NMR (CDCl<sub>3</sub>, 125 MHz), δ (ppm): 196,5 (C=O); 156,0 (C=N); 74,6 (CH<sub>2</sub>-O); 31,2 (CH<sub>2</sub>-S); 24,9 (CH<sub>3</sub>); 8,73 (CH<sub>3</sub>)



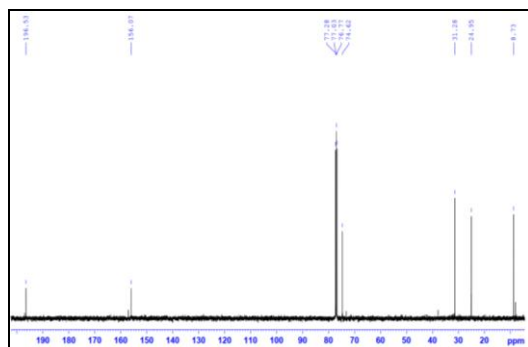
Hình 6. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của sản phẩm SP-V1.



Hình 7. Phổ <sup>13</sup>C-NMR của sản phẩm SP-V1.



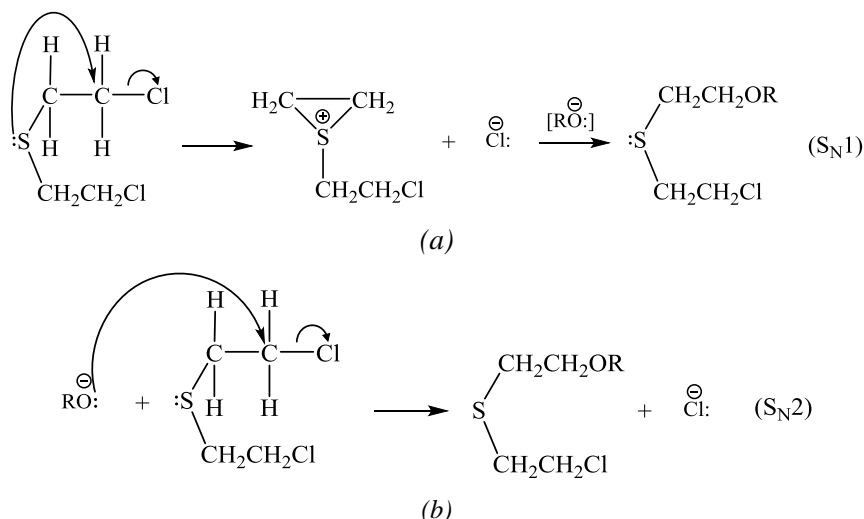
Hình 8. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của sản phẩm SP-V2.



Hình 9. Phổ <sup>13</sup>C-NMR của sản phẩm SP-V2.

Kết quả phân tích cho thấy SP-V1 là 2-butanedione oximeino ethyl - 2'-chloroethyl sulfide. Đây là sản phẩm thế 1 nguyên tử Cl trong HD bởi KBDO. Trong khi đó, SP-V2 là bis[2-(2,3 butanedione oximeino) ethyl] sulfide (sản phẩm thế 2 nguyên tử Cl trong HD). Cả 2 sản phẩm này đều không còn tính hại da như chất độc HD ban đầu. Từ kết quả phân tích sản phẩm sau phản ứng bằng phổ NMR cho thấy phản ứng tiêu độc HD bởi KBDO được đề xuất xảy ra theo cơ chế S<sub>N</sub>1 hoặc S<sub>N</sub>2 (Hình 10a, 10b) hoàn toàn phù hợp với kết quả nghiên cứu của E.J. Dunn và R.K. Miller [9].





Hình 10. Cơ chế tiêu độc theo  $S_N1$  (a);  $S_N2$  (b).

#### 4. Kết luận

Hợp chất KBDO đã được tổng hợp thành công từ nguyên liệu đầu DAM và *t*-BuOK (tỉ lệ 1:1 về số mol) sử dụng dung môi THF ở 70°C trong thời gian 90 phút với hiệu suất đạt gần 90%. Sản phẩm đã được xác định, chứng minh cấu trúc bằng các phương pháp phổ IR, NMR, EDX. Cơ chế phản ứng tiêu độc của KBDO với chất độc HD đã được đề xuất thông qua xác định sản phẩm sau phản ứng bằng phương pháp NMR. Các kết quả thu được cho thấy phản ứng có thể xảy ra theo cơ chế thế nucleophin  $S_N1$  hoặc  $S_N2$ .

#### Lời cảm ơn

Các tác giả cảm ơn sự tài trợ của đề tài mã số CTHSB.2018.KTQS.05 để thực hiện công trình này.

#### Tài liệu tham khảo

- [1] Seyhan Polat, Mehmet Gunata, Hakan Parlakpınar, "Chemical warfare agents and treatment strategies," *Annals of Medical Research*, 25(4), 2018, pp. 776-782.
- [2] Beer Singh, G.K. Prasad\*, K.S. Pandey, R.K. Danikhel, and R. Vijayaraghavan, "Decontamination of Chemical Warfare Agents," *Defence Science Journal*, Vol. 60, No. 4, 2010, pp. 428-441.
- [3] Zvi Rappoport and Joel F.Liebman, *The Chemistry of Hydroxylamines, Oximes and Hydroxamic Acids – Part 1*, John Wiley & Sons Ltd., Jerusalem, 2009.
- [4] Hans Fischer (1943), "2,4-Dimethyl-3,5-dicarboxypyrrrole," *Organic Syntheses, Coll. Vol. 2*, p. 202.

- [5] Pamela T. Wong, Somnath Bhattacharjee, Jayme Cannon, Shengzhuang Tang, Kelly Yang, Sierra Bowden, Victoria Varnau, Jessica J. O'Konek and Seok Ki Choi, "Reactivity and mechanism of  $\alpha$ -nucleophile scaffolds as catalytic organophosphate scavengers," *Organic & Biomolecular Chemistry*, 17(16), 2019.
- [6] Method and formulation for neutralizing toxic chemicals and materials, by Timothy G. Henry and Barbara B. Price, 2017, United States Patent 9,604,085 B2.
- [7] 习海玲, 孔令策, 左言军, 李增昌, 郭楠, 朱晓明, 罗伟清 (2013), "一种丁二酮单肟钠、钾盐的合成方法", 中国人民解放军部队, CN103408457A.
- [8] Triarylmethane dye-oximeate compounds, by William Wallace Ellis, III and Brian John Elliott (2017), United States Patent US 9,714,346 B1.
- [9] E.J. Dunn and R.K. Miller, "Substitution of chloride ion in Bis(2-Chloroethyl) Sulfide (HD) by various oxygen anions," Defence research establishment Ottawa, Ottawa, Canada, 1990.

## SYNTHESIS AND INVESTIGATING THE DETOXIFICATION ABILITY OF KBDO AGAINST YPERITE

**Abstract:** *Potassium 2.3-butanedione monoxime (KBDO) salt is one of the highly effective decontaminations for neurotoxins and blister agents; hence, it is the main ingredient in the RSDL Decontamination Kit. This paper presents the synthesizing KBDO from 2.3-butanedione monoxime (DAM) and KOH or t-BuOK under different reaction conditions and decontamination surveys of product with the yperite. The composition and structure of the products were confirmed by IR, NMR, EDX spectroscopy methods. Furthermore, the detoxification mechanism of KBDO with HD was proposed by determining the intermediate product of the reaction by NMR spectroscopy.*

**Keywords:** KBDO; detoxification; chemical warfare agents, yperite (HD).

*Nhận bài: 15/12/2021; Hoàn thiện sau phân biện: 17/02/2022; Chấp nhận đăng: 14/04/2022*

