ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
МІСЬКОГО ГОСПОДАРСТВА імені О. М. БЕКЕТОВА

ALGOL CHEMICALS SIA, RIGA, LATVIA
EMO FRITE COMPANY, CELJE, SLOVENIA
CM.PROJECT.ING GmbH, GERMANY
GOLDEN TILE CERAMIC GROUP
ПрАТ «ТРЕСТ ЖИТЛОБУД-1»

МАТЕРІАЛИ
Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції

«АКТУАЛЬНІ ПИТАННЯ ХІМІЇ ТА ІНТЕГРОВАНИХ ТЕХНОЛОГІЙ В УМОВАХ КРИЗОВИХ СИТУАЦІЙ»

Харків – 2024

УДК 54+66]:005.334(06) ISBN 978-966-695-616-6

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ МІСЬКОГО ГОСПОДАРСТВА імені О. М. БЕКЕТОВА

ALGOL CHEMICALS SIA, RIGA, LATVIA

EMO FRITE COMPANY, CELJE, SLOVENIA

CM.PROJECT.ING GmbH, GERMANY

GOLDEN TILE CERAMIC GROUP

ПрАТ «ТРЕСТ ЖИТЛОБУД-1»

М А Т Е Р І А Л И

МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ ІНТЕРНЕТ-КОНФЕРЕНЦІЇ

«Актуальні питання хімії та інтегрованих технологій в умовах кризових ситуацій»

24–26 вересня 2024 р.

Харків – 2024

УДК 54+66]:005.334(06)
А43

Редакційна колегія:

Пилипенко О. І. – канд. техн. наук, доцент кафедри хімії та інтегрованих технологій Харківського національного університету міського господарства імені О. М. Бекетова;

Фесенко О. І. – канд. техн. наук, старший викладач кафедри хімії та інтегрованих технологій Харківського національного університету міського господарства імені О. М. Бекетова.

Актуальні питання хімії та інтегрованих технологій в умовах
А43 кризових ситуацій [Електронний ресурс] : матеріали Міжнар. науково-практичної інтернет-конф., Харків, 24–26 вересня 2024 р. / Харків. нац. ун-т міськ. госп-ва ім. О. М. Бекетова, Algol Chemicals SIA (Riga, Latvia), EMO Frite Company (Celje, Slovenia) [та ін.] ; [редкол. : О. І. Пилипенко, І. С. Зайцева, О. І. Фесенко]. – Електронні текстові дані. – Харків : ХНУМГ ім. О. М. Бекетова, 2024. – 288 с.

ISBN 978-966-695-616-6

У збірнику надані матеріали Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції «Актуальні питання хімії та інтегрованих технологій в умовах кризових ситуацій», що відбулася 24–26 вересня 2024 року в Харківському національному університеті міського господарства імені О. М. Бекетова. Збірник може становити інтерес для наукових співробітників, аспірантів та студентів, які займаються дослідженнями у області хімічної технології та інженерії, матеріалознавства та нанотехнологій, тенденціями розвитку та вдосконалення виробництв хімічної галузі, питаннями екологічного моніторингу, нафтогазової, вугільної промисловості, корозії та захисту матеріалів, сучасними тенденціями розвитку освіти за спеціальністю 161 «Хімічні технології та інженерія».

УДК 54+66]:005.334(06)

© Колектив авторів, 2024
© Харківський національний університет міського господарства імені О. М. Бекетова, 2024

ISBN 978-966-695-616-6

УДК 544.169

НЕЛІНІЙНІСТЬ ГРАНИЧНО-ДОПУСТИМИХ КОНЦЕНТРАЦІЙ У ГОМОЛОГІЧНИХ РЯДАХ ВУГЛЕВОДНІВ

Трегубов Дмитро Георгійович,
кандидат технічних наук, доцент, доцент;
Трегубова Флора Дмитрівна,
студентка;
Національний університет цивільного захисту України
cxxttregubov1970@nuczu.edu.ua

Усі хімічні речовини становлять певну небезпеку як для людини, так й для навколишнього середовища або для стабільності властивостей інших матеріалів. Ця небезпека має хімічну природу походження. Гранично-допустима концентрація (ГДК) показує вплив певних речовин на людину. Незалежно від шляхів дії на організм – через дихальні шляхи, шкіру, шляхом контакту зі слизовими поверхнями (наприклад, очі) – можна говорити про певну роль розчинності даної речовини у воді (яка формує масу нашого тіла та омиває усі органи) у формуванні токсичного впливу. Розчинність у воді н-алканів має максимум для пропану та бутану, після якого різко зменшується для добірки з n_C до 20 на 7 порядків. Довідкові дані свідчать [1], що починаючи з $n_C = 4$ розчинності н-алканів та н-спиртів у воді близькі. Можна дослідити зміну ГДК в гомологічних рядах вуглеводнів та порівняти її з розчинністю.

Наслідком розчинності також є можливість утворення азеотропних сумішей. Температура кипіння ($t_{кип}$) усіх водних азеотропів менша за $t_{кип}$ обох компонентів (хоча бувають азеотропні суміші з позитивною зміною $t_{кип}$). Азеотропну пропорцію можна розглядати як критичну концентрацію розчину за якої підтримується певна надмолекулярна будова. Відповідний кластер може мати меншу або більшу довжину, ніж для речовини з індивідуальних компонентів, що й визначає напрямок дрейфу $t_{кип}$ такої суміші. Якщо склад системи відмінний від азеотропного, то суміш можна розглядати як суміш азеотропу і надлишкового компоненту. Серед н-алканів найменше води містить азеотроп пентану 1,4 мас. % (для газів-алканів інформації не наведено); серед н-спиртів – азеотроп етанолу містить 4 % мас. води; для наступних гомологів вміст води меншає, метанол не має азеотропного стану [2]. З точки зору кластерного підходу до розуміння розчинності – чим вона менша, тим більше молекула асоціює молекул води і виникає більш масивний асоціат.

На рисунку 1 показано зміну ГДК алканів, алкенів, н-спиртів та спиртів ізомерної будови у повітрі [3] (для деяких речовин за відсутності відповідних даних наведено ОБРД – орієнтовний безпечний рівень дії забруднюючої

речовини, у даному джерелі не наведено пропорційність між ГДК та ОБРД, а два списки речовин не перетинаються). Через меншу небезпеку н-алканів вони мають великі значення ГДК, тому на графіку дані для них для збереження можливості аналізу залежностей відкладено по іншій осі.

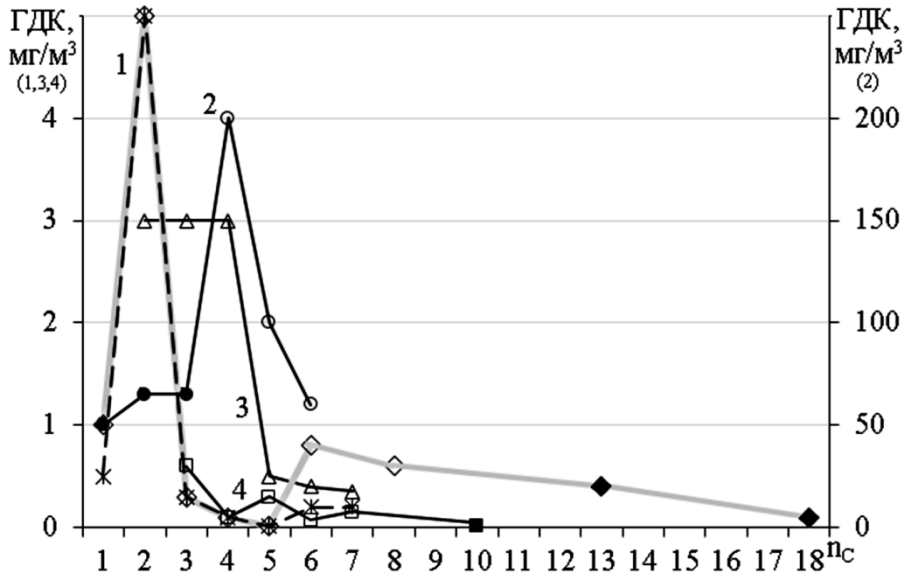

Рисунок 1 – Гранично допустимі концентрації алканів (2, ○, ●), алкенів (3, Δ), н-спиртів (1, ◊, ♦, ж), ізо-спиртів (4, □, ■); суцільні лінії – разова, пунктирна – середньодобова ГДК; ●, ♦, ■ – дані щодо ОБРД

За наведеними на рисунку 1 даними існує загальна закономірність: для більш довгих молекул вуглеводнів ГДК менша, тобто небезпека більша. Цій залежності не підкоряються перші члени гомологічних рядів. Крім того, видно, що небезпека н-алканів як мінімум на 2 порядки менша, ніж в н-алкенів та н-спиртів. Існує нелінійність у вигляді певних коливань значень ГДК у гомологічному ряду. Найбільше чергування значень для парних-непарних молекул за довжиною каркасу ланцюга помітно для ізо-спиртів, що раніше було пояснено чергуванням надмолекулярної будови зі зміною точки кластеризації. Причому для н- та ізо-спиртів значення ГДК близькі. А ось окремі дані для алканів показують, що ізомерні сполуки мають ГДК у 1000 разів менше; так, для пентану ГДК 100 мг/м^3, а для ізо-пентану 0,1 мг/м^3 [3]. Порівняння разової та середньодобової ГДК для н-спиртів показало, що значення у більшості випадків співпадають або є дещо меншими для середньодобової ГДК. Для разової ГДК н-спиртів помітно скачкоподібне зменшення небезпеки (зростання ГДК), починаючи з н-гексанолу (n_C = 6), що можна пояснити завершенням дії «пентанового» ефекту зі стабілізацією карбонового ланцюга ланками по 5 атомів, що надає наступний ступінь свободи молекулі, збільшує здатність до конформних перетворень, дає можливість сформувати більш короткий кластер.

Якщо каркасна довжина пропанолу-1 – 4, то гексанол-1 поводить себе так, начебто в нього довжина 3,5. Для індивідуального рідкого стану це пояснюють кластероутворенням [4]: метанол – гексамер з каркасною довжиною 12, етанол тетрамер (як й інші спирти) з каркасною довжиною теж 12; у водних розчинах перші 3 спирти нормальної будови прийнято водо-спиртовими димерами, а починаючи з н-бутанолу застосовано певний коефіцієнт кластеризації.

Якщо врахувати, що у рідкому стані для більшості алканів та алкенів пропонують димерну надмолекулярну будову (як найменший можливий кластер), то для н-спиртів працює тетрамерна будова [4, 5] (ізопропанол має таку саму каркасну довжину, як й етанол), тобто для спиртів з тією самою кількістю атомів карбону кластер виявляється у 2 рази довшим. Тоді піки усіх графіків 1–4 щодо ГДК мають співпасти.

Таким чином, існує певний взаємозвязок між розчинністю у воді, складом водних азеотропів та ГДК вуглеводнів у повітрі. Порівняння разової ГДК, розчинності у воді та вмісту н-спирту у водному азеотропі наведено на рис. 2.

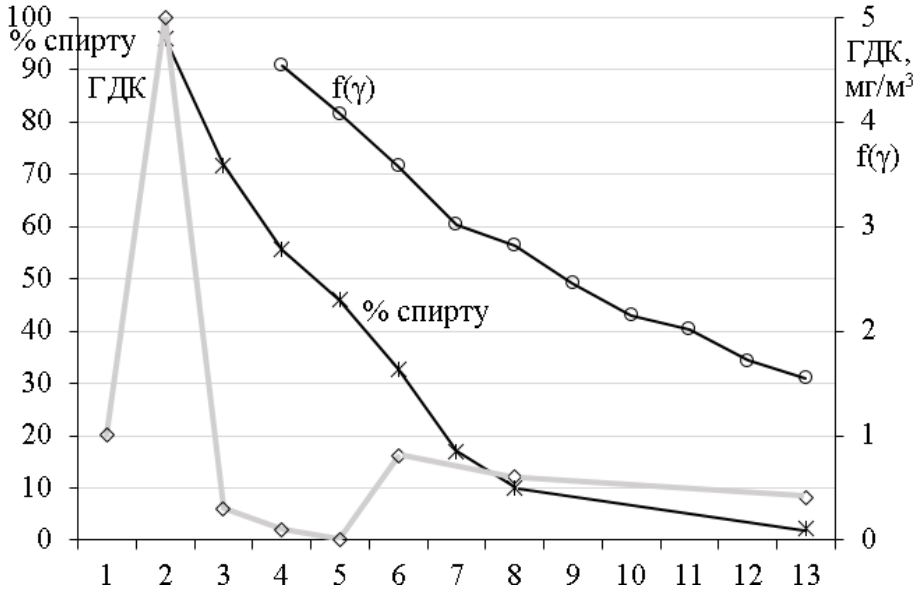

Рисунок 2 – Зміна ГДК (разова), розчинності та вмісту в азеотропі н-спиртів

На рисунку 2 розчинність у воді масштабовано функцією: $f(\gamma)=3\gamma^{0,1}$. Кореляція залежностей $\%A_{сп}$ та $f(\gamma)$ становить $R^2 = 0,99$, але з великими похибками. Тоді вміст спирту в азеотропі на підставі значень розчинності у воді та каркасної довжини молекули спирту можна апроксимувати рівнянням $\%A_{сп}=200\gamma^{0,15}n_C^{-1,3}$ з $R^2 = 0,96$. Судячи з тенденції графіку щодо вмісту спирту у водному азеотропі – за знижених тисків можливо все ж таки існує азеотроп метанолу.

У цілому характер зменшення розчинності, вмісту спирту у водному азеотропі в гомологічному ряду поводять себе аналогічно до зміни ГДК. У

діапазоні від н-бутанолу до н-тридеканолу розчинність падає на 4 порядки. ГДК від етанолу до амілового спирту зменшується у 500 разів.

З точки зору токсичності важливим є питання механізму проникнення певних молекул крізь мембрани клітин, що теж може бути пов'язано з надмолекулярною будовою або тимчасовою асоціацією з молекулами мембран. Незалежно від шляху потрапляння токсичної речовини в організм людини, схема її руху буде відбуватись подібним чином: проникнення через мембрани (легені, шкіра, шлунок), перенесення кровотоком, проникнення крізь мембрани клітин інших органів, участь у певних хімічних або біохімічних реакціях. Тому відмінності між аналізованими залежностями можуть визначатися надмолекулярним станом вуглеводнів за певних умов на різних етапах шляху токсичної речовини в організмі. Щодо вибірковості сорбційних та мембранних процесів говорять, що цим процесам піддаються молекули, близькі за розміром до мікропори. Під час адсорбції виділяється тепло, як і під час конденсації, тому можна вважати, що у мікропорах стан адсорбованої речовини є квазіконденсованим. Метанол у плані розчинності у воді відрізняється від етанолу тим, що не утворює з водою азеотроп. У рідкому та твердому станах для метанолу застосовують надмолекулярну модель найменшого кластеру у вигляді гексамеру, для інших спиртів у рідкому – тетрамери, у твердому – етанол тетрамер, інші – тримери [5]. Можливо, на різних етапах розповсюдження молекул токсичної речовини в організмі вони по різному кластеризуються як між собою, так й з іншими молекулами, що потребує подальших досліджень.

Список використаних джерел

1. Quickly find chemical information from authoritative sources. Pubchem, U.S. National Library of Medicine. (Режим доступу: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/).

2. Gmehling Jü., Menke Jo., Krafczyk Jö., Fischer K. A data bank for azeotropic data – status and applications. *Fluid Phase Equilibria*. 1995.Vol. 103(1). P. 51–76.

3. Державні медико-санітарні нормативи. Гранично допустимі концентрації хімічних і біологічних речовин в атмосферному повітрі населених місць. [Чинний від 2024-05-24]. Київ: МОЗ, 2024. 120 с.

4. Трегубов Д. Г., Тарахно О. В., Соколов Д. Л., Трегубова Ф. Д. Ідентифікація кластерної будови вуглеводнів за температурами плавлення. *Проблеми надзвичайних ситуацій*. 2021. № 2(34). С. 94–109.

5. Tregubov D., Trefilova L., Minska N., Hapon Yu., Sokolov D. Nonlinearities correlation of n-alkanes and n-alcohols physicochemical properties. *Problems of Emergency Situations*. 2024. № 1(39). С. 4–24.

Богдан Л. О., Донцова Т. А.
Створення індикаторних систем на основі керамічних мембран……. 82
Івженко Г. Р., *Янушевська О. І.*, *Донцова Т. А.*
Перспективи використання TiO_2 для синтезу селективного шару керамічних мембран…….. 84
Тобілко В. Ю., *Бондарєва А. І.*, *Глущенко Є. О.*
Вплив поліакрилатних розріджувачів на технологічні характеристики шлікера для керамічної плитки……... 86
Казимиренко Ю. О., *Мельник М. О.*
Розвиток технологій та застосування стеклокомпозитів і керамічних матеріалів у суднобудуванні та енергетичному машинобудуванні……. 88

Секція 2
Сучасні технології функціональних матеріалів і матеріалів архітектурно-будівельного призначення

Fedenko Yu., *Synitska V.*, *Kohno K.*
Analysis of the legal framework in the field of wastewater management…….. 91
Fedenko Yu., *Synitska V.*
Basic methods for determining wastewater pollutants…… 93
Трегубов Д. Г., *Трегубова Ф. Д.*
Нелінійність гранично-допустимих концентрацій у гомологічних рядах вуглеводнів……95
Колошко Ю. В., *Груздова В. О.*
Використання зеленої хімії для знешкодження вибухонебезпечних речовин… 99
Бабенко В. М., *Никонюк Є. С.*
Моніторинг стану якості повітря в умовах військових дій в Харківській області……..…..102
Сорокіна К. Б., *Карпук Д. С.*
Вдосконалені окисні процеси в очищенні стічних вод фармацевтичних підприємств…….. 107
Бурківська І. В., *Камінський О. М.*, *Томашик В. М.*, *Чайка М. В.*, *Денисюк Р. О.*, *Писаренко С. В.*
Адсорбція метиленового синього з розчинів поверхнею цинкового фериту… 111
Чумак М. О., *Шахновський А. М.*, *Сангінова О. В.*
Непряме визначення водневого показника в системі моніторингу водно-хімічного режиму АЕС……... 113
Костенко Є. Г., *Шахновський А. М.*, *Обушенко Т. І.*
Дослідження кінетики сорбції фторид-іонів на залізовмісному сорбенті……. 116