Теорія і практика гасіння пожеж та ліквідації надзвичайних ситуацій: Матеріали XVI Міжнародної науково-практичної конференції – Черкаси: НУЦЗ України, 2025. – 449 с.

Рекомендовано до друку Вченою радою
навчально-наукового інституту
оперативно-рятувальних сил НУЦЗ України
(протокол №5 від 22.04.2025 р.)

Дозволяється публікація матеріалів збірника
у відкритому доступі комісією з питань роботи
із службовою інформацією в НУЦЗ України
(протокол №3 від 26.04.2025 р.)

Національний університет цивільного захисту України, 2025

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Smith, J., & Johnson, R. (2020). "Chemical and Physical Characteristics of Combustion in Vertical and Horizontal Arrangements of Solid Fuels." Journal of Combustion Science, 15(2), 45-62.
2. Chen, L., & Wang, H. (2019). "Comparative Study of the Burning Characteristics of Solid Fuels in Vertical and Horizontal Configurations." International Journal of Thermal Engineering, 25(4), 112-127.
3. García, M., & Rodríguez, P. (2018). "Analysis of the Physicochemical Properties of Combustion in Different Orientations of Solid Combustibles." Fuel Chemistry Review, 10(3), 88-103.
4. ДСТУ 2272-2006 Пожежна безпека. Терміни і визначення основних понять.
5. Виникнення і розвиток горіння та вибуху. Припинення горіння: підручник / [Г. І. Єлагін, Є.О. Тищенко, А. Г. Алєксєєв, В. М. Нуянзін, А. О. Майборода] -- Черкаси: Черкаський інститут пожежної безпеки імені Героїв Чорнобиля, НУЦЗ України, 2020. -- 444с.
6. Smith, J., & Johnson, R. (2020). "Chemical and Physical Characteristics of Combustion in Vertical and Horizontal Arrangements of Solid Fuels." Journal of Combustion Science, 15(2), 45-62.
7. Chen, L., & Wang, H. (2019). "Comparative Study of the Burning Characteristics of Solid Fuels in Vertical and Horizontal Configurations." International Journal of Thermal Engineering, 25(4), 112-127.

УДК 614.833:544.169:539.199

ПРОГНОЗУВАННЯ ГДК З ВРАХУВАННЯМ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЇ БУДОВИ

Дмитро ТРЕГУБОВ, к.т.н., доцент
Віктор ДЕРЕНКО
Національний університет цивільного захисту України

Для усіх хімічних речовин існує концентрація та час впливу, які визначають можливість заподіяння шкоди людині, навколишньому середовищу або матеріалам внаслідок хімічної взаємодії. Хімічну небезпеку екзотермічних реакцій з виникненням горіння класифікують як пожежну небезпеку. Ці небезпеки різняться критичними концентраціями, механізмом розвитку, факторами, які надають шкідливий вплив. Але умови виникнення небезпечних ситуацій схожі: необхідність аварійного викиду речовини, наявність зони небезпечної загазованості повітря. Ця зона має концентрації речовин більші за критичні, виникнення токсичної дії визначає гранично допустима концентрація (ГДК). Визначення ступеня токсичності передбачає проведення серії випробувань на піддослідних тваринах. Надійних шляхів розрахункового прогнозування ГДК на підставі певних фізико-хімічних параметрів речовини не існує. Типовою хімічною небезпекою, яка надає як хімічну, так й пожежну небезпеку є аміак.

Властивості речовини значною мірою визначають її надмолекулярна будова та відповідні особливості міжмолекулярної взаємодії. Такі структури можна узагальнити поняттям кластер. Найменшим кластером є димер – координаційне число 2, у спиртах фіксують й більш масивні кластери. Газоподібний стан зазвичай має мономерний склад; хоча такі гази як O_2, H_2 тощо, іноді класифікують як стійкі димери. Відомо, також, випаровування мурашиної кислоти у вигляді димерів. Вода у рідкому стані характеризується утворення великих кластерів, але у надкритичному стані гарячої води виявлено відсутність надмолекулярних структур [1]. Тобто кластерна будова дуже нестійка та швидко змінюється для різних умов та станів речовини.

На цей час вже досліджено моделювання кластерної будови речовини та розроблено на підставі показника «легкість плавлення» методики розрахунку температур плавлення і самоспалахування, густини рідин та розчинності у воді [2, 3]. У цих роботах також відмічено подібність зниження розчинності у воді та температур самоспалахування пароповітряних систем тих саме речовин, на підставі чого розглянуто момент самоспалахування як утворення повітряного розчину горючої речовини. Але стосовно прогнозування ГДК досліджень не проведено.

Незалежно від шляху проникнення токсичної речовини в організм певну роль в її дії визначає розчинність у воді, яка є середовищем переносу речовин. Розчинність у воді н-алканів та н-спиртів, починаючи з $n_C = 4$, має спільний характер та для $n_C = 20$ зменшується на 7 порядків. За розгляду розчинності як кластероутворення – речовина менш розчинна, якщо асоціює більше молекул води. Наслідком водорозчинності є можливість утворення азеотропних сумішей; причому їх tкип менша за $t_{кип}$ компонентів. Азеотроп можна розглядати як розчин зі стійким кластером лише одного типу, за інших концентрацій – присутні кластери компоненту у надлишку. Найменше води серед н-спиртів містить азеотроп етанолу – 4 % серед н-алканів – пентану 1,4 %; більш довгі гомологи містять меншає води, метанол не утворює азеотроп.

На рис. 1 наведено зміну разової ГДК н-спиртів, складу водного азеотропу, дані для температури самоспалахування як $f(t_{cc}) = 0{,}01t_{cc}$ та водорозчинності як $f(\gamma) = 3\gamma^{0,1}$. Помітно їх спільний характер – зниження показника для більш довгих спиртів, але з деякими аномаліями, що може свідчити про зміну кластерної та конформної будови. Водночас можна сказати, що менш розчинні н-спирти (більш довгі молекули або кластери) є більш токсичними. Стрибкоподібне зростання ГДК (зменшення токсичності) для н-гексанолу (з наступним продовженням спадання) можна пов'язати з затуханням дії індуктивного ефекту перерозподілу електронної щільності та виникненням конформних перетворень або зрушенням точки кластеризації ближче до центра молекули. Раніше було припущено, що в організмі токсичність речовин пов'язана з їх розчинністю у воді, що не повною мірою корелює з графіками ГДК. Можна припустити, що під час проходження клітинних мембран виникає квазітвердий водний розчин.

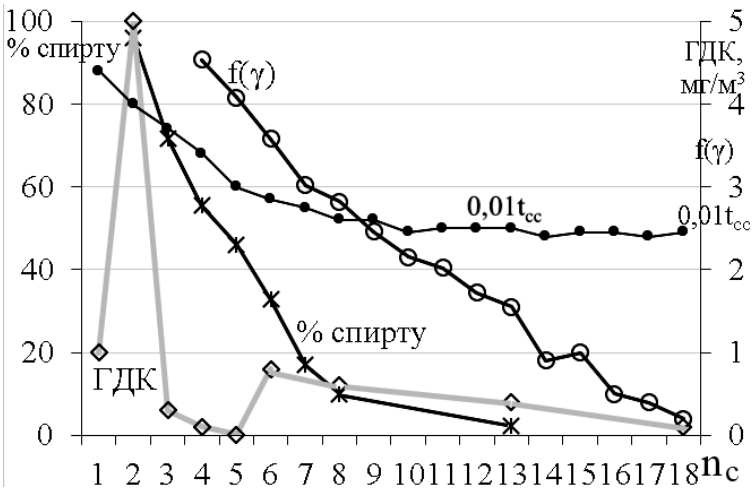

Рис. 2. Зміна ГДК (разова), розчинності та вмісту в азеотропі н-спиртів

За даними для ГДК припускаємо, що для метанолу коефіцієнт кластеризації буде більшим, як і для стану плавлення. У табл. 1 зведено моделі кластерів н-спиртів для плавлення, рідкого стану та водного розчину [4], а також нові моделі для самоспалахування та ГДК.

Таблиця 2.4. Моделі надмолекулярних структур[1] н-спиртів для різних станів

n_{C+OH}	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
водний розчин	1/3	1/4	1/5	2/-2	2/-2	2/-1[3]	2/9	2/10	3/-2	3/12	3/13	4/14	5/-1	6/16	5/17	8/18	11/19	17/20
рідкий стан	6/2	4/3	4/4	4/-1	4/-2	4/-3	4/-3	4/-3	4/-4	4/-5	4/-6	4/-5-1[4]	4/-6	4/-6-4	4/-6-5	4/-10-3	4/-12-2	4/-13-3
твердий стан	6/2	4/-1	3/-1	3/-1	3/-2	3/-2	3/-3	3/-2	3/-3	3/-3	3/-4	3/-4	3/-5	3/-5	3/-6	3/-7	3/-8	3/-9
полум'я	3/8	2/7	2/-1	2/-1	2/-1	2/-2	2/-3	2/-4	2/-5	2/-5	2/-6	2/-7	2/-8	2/-9	2/-10	2/-11	2/-12	2/-13
мембрани клітин	5/14	3/-1	3/15	3/17	3/20	3/-4	3/-4		3/-5				3/-9					3/-15

[1] – координаційне число (чисельник)/довжина мономеру або принцип його укорочення (знаменник); довжину кластеру визначають множенням координаційного числа на довжину мономеру;

[2] – дробове число означає суміш кластерів з різним координаційним числом;

[3] – кластеризація за 2-м карбоном кожної молекули, мономер стає коротше на «1»;

[4] – перше число показує скорочення ланцюга за рахунок глобулізації або перегину молекули, друге – скорочення ланцюга внаслідок кластеризації (за приміткою 3);

[5] – довжина кластерів водних розчині та у мембранах клітин враховує проміжну молекулу H_2O.

На підставі раніше розробленого показника «легкість плавлення» $n_M = n_{cекв} M^{0,2}$; розроблено формулу для опису залежності ГДК(n_c) для н-спиртів: $ГДК_{сер} = 185\ (10n_M - 10)^{-0,52} - 7$, мг/м^3, яка описує залежність на рис.1 з R = 0,9, що говорить як про принциповий опис залежності, так й про необхідність проведення подальших досліджень з моделювання кластерної будови.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Mauelshagen K, Schienbein P, Kolling I, Schwaab G, Marx D, Havenith M. Random encounters dominate water-water interactions at supercritical conditions. *Sci Adv*. 2025. №11: P. 8614.

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

3. Трегубов Д., Трегубова Ф. Дослідження впливу надмолекулярної будови на параметри пожежної небезпеки вуглеводнів. *НС: попередження та ліквідація*. 2024. Т.8(2). С. 133–146.

4. Tregubov D., Trefilova L., Minska N., Hapon Yu., Sokolov D. Nonlinearities correlation of n-alkanes and n-alcohols physicochemical properties. Проблеми НС. 2024. №1(39). С. 4-24.

Дмитро СОКОЛОВ, Анатолій ГЛАДІЙ
АНАЛІЗ НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЙ НА ГІДРОТЕХНІЧНИХ СПОРУДАХ 343
Дмитро СОКОЛОВ, Андрій КАЛАПАЧ
АКТУАЛЬНІ ПИТАННЯ ТА АНАЛІЗ ВИНИКНЕННЯ НС НА ОБ'ЄКТАХ З НАЯВНІСТЮ НХР 344
Дмитро СОКОЛОВ, Максим ПАТЬОХА
ПИТАННЯ ЩОДО НЕБЕЗПЕЧНИХ ФАКТОРІВ ПРИ АВАРІЯХ НА ОБ'ЄКТАХ З ОБЕРТАННЯМ НЕБЕЗПЕЧНИХ ХІМІЧНИХ РЕЧОВИН 345
Дмитро СОКОЛОВ, Олег КОТИК
АКТУАЛЬНІ ПИТАННЯ ТА АНАЛІЗ ВИНИКНЕННЯ НС НА ОБ'ЄКТАХ ПО ЗБЕРІГАННЮ НАФТИ ТА НАФТОПРОДУКТІВ 347
Дмитро СОКОЛОВ, Федір АНДРІЄВСЬКИЙ
АКТУАЛЬНІ ПИТАННЯ ЛІКВІДАЦІЇ НАСЛІДКІВ НС З НАЯВНІСТЮ РАДІАЦІЇ 348
Ігор СОЛОДКИЙ, Юліана ГАПОН
ОГЛЯД АВАРІЙ ТА НАСЛІДКІВ ПОВ'ЯЗАНИХ З ВИКИДОМ НЕБЕЗПЕЧНИХ ХІМІЧНИХ РЕЧОВИН В ПЕРІОД ВОЄННОГО СТАНУ 349
Данило СТАНКЕВИЧ
РОЗРОБКА ОПЕРАТИВНО-ОРГАНІЗАЦІЙНИХ ЗАХОДІВ З ХІМІЧНОГО ЗАХИСТУ НАСЕЛЕННЯ, ПОВ'ЯЗАНИХ З ЛІКВІДАЦІЄЮ НАСЛІДКІВ АВАРІЇ НА «ДНІПРОВСЬКІЙ ВОДОПРОВІДНІЙ СТАНЦІЇ №1» 350
Віталій СТЕПАНЕНКО
ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ПОЖЕЖНОЇ БЕЗПЕКИ НА ОБ'ЄКТАХ, ЩО ПРАЦЮЮТЬ З НЕБЕЗПЕЧНИМИ ХІМІЧНИМИ РЕЧОВИНАМИ 351
Юлія СТЕПАНЕНКО, Олександр ЗОБЕНКО
ОПТИМІЗАЦІЯ СИСТЕМИ ПРОТИПОЖЕЖНОГО ЗАХИСТУ ДЛЯ ЕЛЕКТРИЧНИХ МЕРЕЖ 352
Наталя ТВЕРДОХЛЄБОВА
ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ПОЖЕЖНОЇ БЕЗПЕКИ ТЕХНОЛОГІЧНОГО ОБЛАДНАННЯ 353
Олександр ТЕСЛЕНКО, Олександр ДОЦЕНКО, Сергій ЦИМБАЛІСТИЙ, Олександр КРИКУН
РИЗИКИ ЕКСПЛУАТАЦІЇ ЕЛЕКТРОГЕНЕРАТОРІВ ПАЛИВНОГО ТИПУ ПІД ЧАС ЕНЕРГЕТИЧНИХ КРИЗ: АНАЛІЗ ПРИЧИН ПОЖЕЖ І ЗАХОДИ БЕЗПЕКИ 355
Єгор ТИНДЮК, Артем МАЙБОРОДА
ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ РОЗТАШУВАННЯ ТВЕРДИХ ГОРЮЧИХ РЕЧОВИН НА ШВИДКІСТЬ ГОРІННЯ 357
Дмитро ТРЕГУБОВ, Віктор ДЕРЕНКО
ПРОГНОЗУВАННЯ ГДК З ВРАХУВАННЯМ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЇ БУДОВИ 359
Дмитро ТРЕГУБОВ, Владислав ЗАХАРЧЕНКО
МЕТОД ПЛАЗМОХІМІЧНОЇ УТИЛІЗАЦІЇ ШИННОЇ ПРОДУКЦІЇ 362
Дмитро ТРЕГУБОВ, Олександр ПЛУЖНИК
ПІДВИЩЕННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ ОЧИЩЕННЯ СТІЧНИХ ВОД КОКСОХІМІЧНОГО ВИРОБНИЦТВА У МІКРОДУГОВОИХ РОЗРЯДАХ 364
Олександр ТРОЯН, Олександр ПАШЕНЮК, Анастасія ВОЛОТІВСЬКА, Дмитро ЖУРБИНСЬКИЙ
БАЗОВІ АСПЕКТИ СТВОРЕННЯ ТА МОДЕРНІЗАЦІЇ ОБ'ЄКТІВ ЦИВІЛЬНОГО ЗАХИСТУ НАСЕЛЕННЯ В УМОВАХ НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЙ ВОЄННОГО ХАРАКТЕРУ 366