

# БЕЗОПАСНОСТЬ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И ПРОИЗВОДСТВ

Научная статья

УДК 614.84; DOI: 10.61260/2304-0130-2024-1-34-42

## ВЛИЯНИЕ СТРОЕНИЯ ЛИНЕЙНЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ НА ТЕМПЕРАТУРУ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ

✉ Свидзинская Галина Борисовна;

Иванова Мария Алексеевна.

Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России, Санкт-Петербург, Россия

✉ [svidzinskaya\\_gb@igps.ru](mailto:svidzinskaya_gb@igps.ru)

*Аннотация.* Проведен анализ влияния структур линейных предельных и непредельных углеводородов на температуру их самовоспламенения с использованием существующих в литературе экспериментальных данных. На базе современных исследований по окислению углеводородов при разных температурах показана взаимосвязь химического строения, прочности связей в молекуле и радикальных механизмов процессов окисления с температурой самовоспламенения. Отмечено, что повышению температуры самовоспламенения способствует разветвление молекул, то есть увеличение в их составе метильных групп, третичных и четвертичных атомов углерода, расположенных рядом в углеродной цепи. Кратные связи, начиная с C<sub>5</sub>, способствуют упрочнению молекулы. Удлинение как основной цепи, так и цепи заместителей снижает температуру самовоспламенения соединения.

*Ключевые слова:* линейные предельные и непредельные углеводороды, температура самовоспламенения, пожарная опасность

**Для цитирования:** Свидзинская Г.Б., Иванова М.А. Влияние строения линейных углеводородов на температуру самовоспламенения // Надзорная деятельность и судебная экспертиза в системе безопасности. 2024. № 1. С. 34–42. DOI: 10.61260/2304-0130-2024-1-34-42.

### Введение

Углеводороды, то есть соединения, содержащие в своем составе только атомы углерода и водорода, являются наиболее распространенными органическими низкомолекулярными природными соединениями. Из углеводородов состоят природные топлива (газ и нефть), они широко применяются в промышленности как источники тепловой энергии, сырье для органического синтеза, растворители. Все углеводородные соединения имеют коэффициент горючести больше единицы, то есть являются веществами, представляющими значительную пожарную опасность. Причем эта опасность сохраняется на всех стадиях добычи, транспортировки, переработки и применения этих соединений. Способность вещества самопроизвольно воспламениться создает потенциальную опасность пожара везде, где обращаются горючие материалы. Температуру самовоспламенения используют в качестве важного входного параметра для определения возможных последствий утечки горючих жидкостей, установления безопасных температур при эксплуатации промышленного и лабораторного оборудования, исследуют при оптимизации работы дизельных и двигателей внутреннего сгорания.

Все большее число органических соединений используется в промышленности и научных лабораториях, растет многообразие технологических процессов с их участием, однако число изученных веществ отстает от числа известных и используемых. Задача исследования состоит не только в определении физико-химических свойств углеводородов, но и в необходимости охарактеризовать их пожаровзрывоопасность. Экспериментальное определение свойств каждого вещества не всегда целесообразно или практически невозможно.

Разработка методов, способных заменить экспериментальные и дающих возможность прогнозировать искомые значения свойств, чрезвычайно актуальна и в научном сообществе получила название «Поиск количественных соотношений структура-свойство» (Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) [1].

Огромный толчок для развития методов QSPR дало появление компьютерных технологий, позволяющих обрабатывать большие массивы данных и выводить регрессионные зависимости для расчета показателей на основе состава и строения соединения, то есть входящих в него структурных групп и физико-химических параметров.

В Российской Федерации действует Федеральный закон от 22 июля 2008 г. № 123-ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» и ГОСТ 12.044-89 «Пожаровзрывоопасность веществ и материалов Номенклатура показателей и методы их определения», в них включены более двадцати показателей пожаровзрывоопасности. В международных карточках безопасности MSDS (Material Safety Data Sheet), как правило, предусмотрены пять характеристик пожарной опасности: нижний и верхний концентрационные пределы воспламенения (КПП), теплота сгорания вещества, температуры вспышки ( $t_{всп}$ ) и самовоспламенения ( $t_{свс}$ ) [1–3].

Соответствующие формулы для расчета КПП, температур вспышки, воспламенения, температурных пределов распространения пламени на базе температуры кипения и строения молекулы приведены в ГОСТ, Рекомендациях ВНИИПО МЧС России, справочнике А.Я. Корольченко и дают хорошую сходимость результатов с экспериментальными значениями [1–6].

Более сложно подобрать методику для расчета температуры самовоспламенения, так как этот процесс связан с окислением молекулы углеводорода кислородом, протекает в несколько стадий и, наряду с внешними факторами и условиями протекания процесса, зависит от длины углеродной цепи, прочности связи углерод-углерод и углерод-водород на отдельных участках цепи, наличия кратных связей и циклических структур и взаимного влияния атомов и групп атомов в молекуле [7–9].

Поскольку  $t_{свс}$  – это температура, при которой материал самопроизвольно воспламеняется при контакте с окружающей средой, она зависит не только от химических и физических свойств вещества, но и от методов и устройств, используемых для ее определения, то есть от давления, концентрации кислорода, объема и материала сосуда и т.д. В разных источниках, особенно зарубежных, значения  $t_{свс}$  для одного и того же соединения в зависимости от метода определения различаются до 300 °С. Для обнаружения внезапного появления пламени внутри прибора используется визуальный контроль, что вносит погрешность до 30 °С. Определение температуры самовоспламенения экспериментальным путем очень трудоемко и не всегда выполнимо. Способность оценивать величину  $t_{свс}$  с помощью математического моделирования нивелирует недостатки экспериментальных методов и делает процесс экономически целесообразным [9, 10].

Попытки учесть все факторы, влияющие на  $t_{свс}$ , с использованием значительного объема статистических данных и компьютерных технологий привели к созданию сложных математических зависимостей, учитывающих с помощью специальных коэффициентов различные характеристики и вклад определенной структурной группы в температуру самовоспламенения.

При наиболее распространенном дескрипторном методе расчета в качестве переменных используются физико-химические и пожароопасные свойства вещества, показатели, учитывающие наличие в молекуле определенных структурных групп, количество атомов углерода и квантово-химические особенности молекул. Так в Российской Федерации наибольшее распространение получил метод расчета температуры самовоспламенения через среднюю длину цепи молекул и метод групповых инкрементов, описанный А.Я. Корольченко [1, 4–6].

В работах F. Gharagheizi на базе 1025 органических соединений было выделено 146 структурных групп, с помощью программного обеспечения авторы прогнозировали  $t_{свс}$  для различных классов органических соединений. Chen С.-С. с соавторами, используя структурные дескрипторы, вывели формулу для вычисления температуры самовоспламенения

линейных и циклических углеводородов. Авторы исследований заявляют среднюю погрешностью вычислений  $32\text{ }^{\circ}\text{C}$  и средний процент ошибок  $4,9\text{--}5,4\%$  [1, 9, 11, 12].

Подобные работы ввиду важности определяемого показателя проводятся в разных странах. Недостатком данных исследований является то, что авторы, используя статистические данные и компьютерные технологии, не объясняют с химической точки зрения причины, по которым значение температуры самовоспламенения меняется тем или иным образом при изменении структуры вещества. Доступные для расчета методы не обеспечивают достаточную точность, особенно для сложных разветвленных соединений. Российские исследователи указывают на невозможность вывода удовлетворяющих по точности математических закономерностей для расчета  $t_{\text{свс}}$  непредельных и циклических углеводородов [13, 14].

Целью данной работы является:

- сбор и обработка справочных данных по температуре самовоспламенения линейных углеводородов;
- поиск закономерностей, связывающих строение линейных углеводородов с температурой их самовоспламенения и трактовка этих взаимосвязей на базе существующих химических знаний, что позволит специалистам по пожарной безопасности, без использования дорогостоящего оборудования и сложных математических расчетов, используя структурные формулы молекул углеводородов, прогнозировать температуру самовоспламенения соединений.

### Методы исследования

Авторами были собраны отечественные и зарубежные данные по температурам самовоспламенения линейных углеводородов и механизмам протекания процесса для различных по строению соединений, полученные результаты обработаны и представлены в виде таблиц и графиков, позволяющих прогнозировать область температур самовоспламенения для аналогичных по строению веществ.

### Результаты исследования

Алканы – основной компонент природных и искусственных топлив. При увеличении длины линейной неразветвленной молекулы *n*-алканов температура самовоспламенения падает от  $535\text{ }^{\circ}\text{C}$  у метана до  $205\text{ }^{\circ}\text{C}$  у нонана, оставаясь на уровне  $202\text{--}208\text{ }^{\circ}\text{C}$  от  $\text{C}_9$  до  $\text{C}_{17}$ . Далее фиксируется рост температуры самовоспламенения с последующим ее повышением (рис. 1) [4, 6, 15].

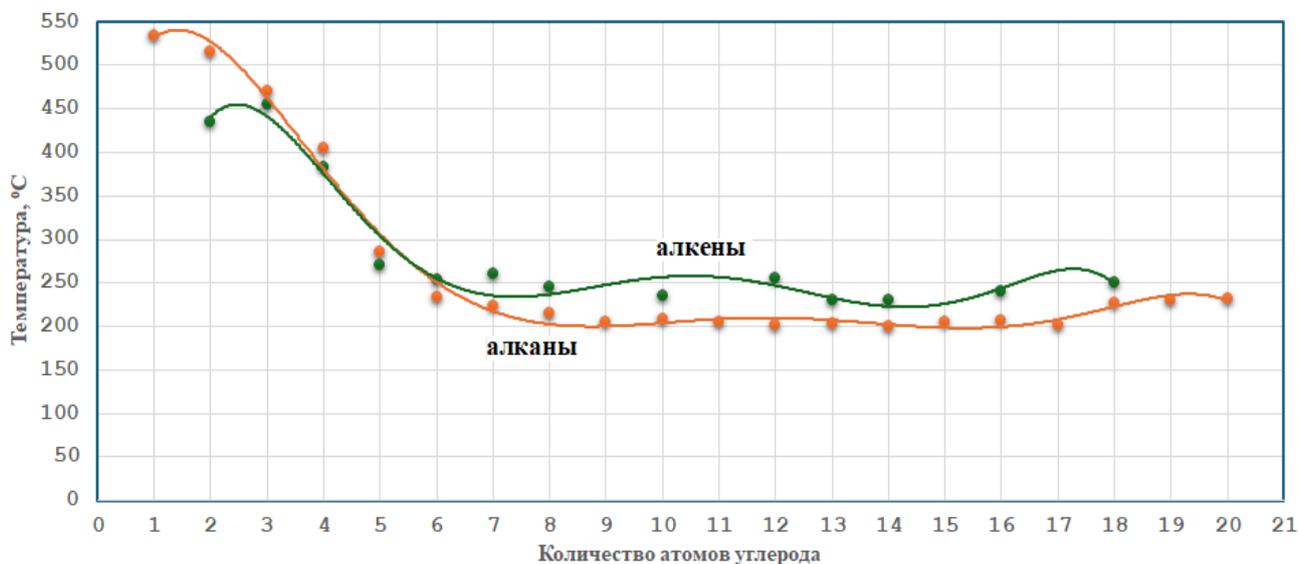


Рис. 1. Зависимость температур самовоспламенения алканов и алкенов-1 нормального строения от длины цепи

Температура самовоспламенения является показателем прочности связей в молекуле. При увеличении длины цепи в ней нарастают внутренние напряжения, значительное количество энергии расходуется на внутренние степени свободы: вращение и колебание. Прочность связи C–C уменьшается и, начиная с четвертого–пятого атома углерода, остается постоянной, равной 310,0 кДж/моль, энергия связи C–H также падает (рис. 2) [16]. Происходит изменение геометрической конфигурации молекулы, и облегчается возможность реагирования горючего с окислителем. Энергия, требуемая для разрыва этих слабых связей в больших молекулах, вероятно, будет отличаться незначительно, что объясняет близость температур самовоспламенения у *n*-алканов от нонана до гептадекана.

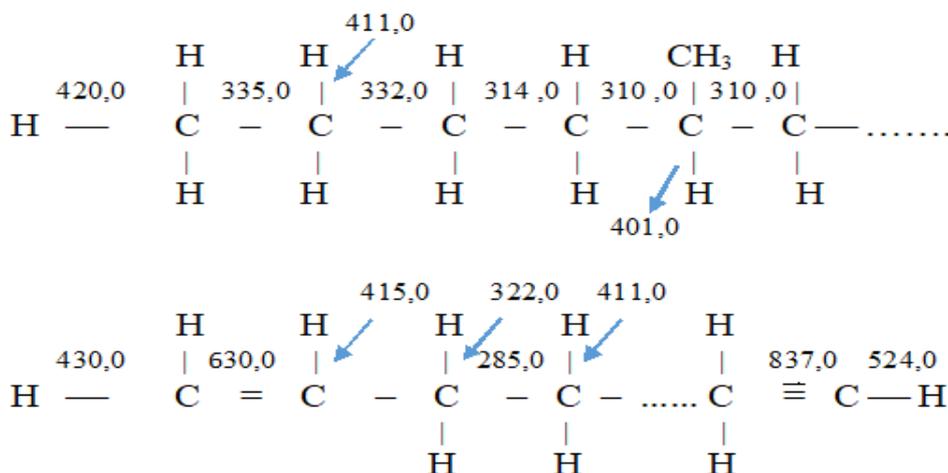


Рис. 2. Энергия связи углерод-углерод и углерод-водород в молекулах линейных углеводородов, кДж/моль

Изомеризация не влияет на область воспламенения и теплоту сгорания, но снижает температуру кипения органических соединений. Разветвленные молекулы в большей степени склонны к внутримолекулярным, а не межмолекулярным взаимодействиям, что снижает энергию, затрачиваемую на испарение, и упрочняет молекулу за счет увеличения количества метильных групп [14]. Данные табл. 1 свидетельствуют, что температура самовоспламенения снижается при увеличении длины цепи аналогичных по строению алканов (горизонтальный ряд), но растет при появлении в основной цепи заместителей, несмотря на общее увеличение количества углеродов в молекуле (вертикальный ряд).

Присоединение одного метильного радикала повышает температуру самовоспламенения, при этом рост данного показателя не зависит от положения заместителя в цепи (2-метилпентан и 3-метилпентан, 2-метилгексан и 3-метилгексан).

В молекулах с короткими основными цепями (C<sub>3</sub>–C<sub>4</sub>) наличие заместителей сказывается мало, начиная с C<sub>5</sub> зависимость  $t_{\text{свс}}$  от строения молекулы проявляется все сильнее, так соединения с двумя метильными радикалами имеют более высокую прочность, если оба заместителя находятся у одного атома углерода, поскольку при этом образуется неспособный присоединять кислород четвертичный атом углерода (2,2-диметилпентан и 2,3- или 2,4-диметилпентан).

Наличие трех и четырех метильных групп, присоединенных к основной цепи с образованием четвертичных атомов углерода, приводит к дальнейшему повышению температуры самовоспламенения, так, у соединений 2,2,3-, 2,3,3-триметилпентан и 2,2,3,3-, 2,2,3,4-, 2,3,3,4-тетраметилпентан температура самовоспламенения достигает 430–435 °С, что на 215–230 °С выше, чем у их линейных изомеров *n*-октана и *n*-нонана.

Наибольшая температура самовоспламенения фиксируется, если заместители находятся у соседних атомов углерода. Появление групп –CH<sub>2</sub>– между замещенными углеродами, особенно при увеличении основной цепи, приводит к снижению прочности молекулы. Так, температуры самовоспламенения у 2,3-диметилпентана и 2,4-диметилпентана

близки (332 °С и 340 °С), а у 2,3-диметилгексана и 2,4-диметилгексана они уже отличаются на 30 °С (350 °С и 320 °С),  $t_{\text{свс}}$  2,2,5-триметилгексана 330 °С, что на 50 °С ниже, чем у 2,3,3-триметилгексана.

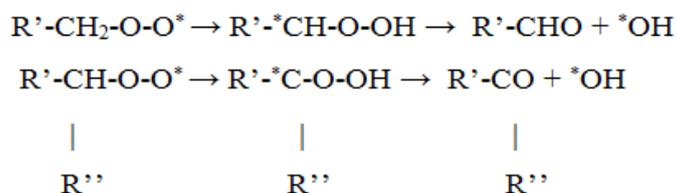
Увеличение длины цепи у заместителей закономерно снижает температуру самовоспламенения (2,4-диметилгексан – 320 °С, 2-метил-4-этилгексан – 280 °С).

Таблица 1

## Температуры самовоспламенения алканов

Основная цепь, $t_{\text{свс}}$					
C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	C <sub>6</sub>	C <sub>7</sub>	C <sub>8</sub>
Пропан, 440 °С	Бутан, 405 °С	Пентан, 286 °С	Гексан, 233 °С	Гептан, 223 °С	Октан, 219 °С
2-метилпропан, 460 °С	2-метилбутан, 430 °С	2-метилпентан, 305 °С	2-метилгексан, 290 °С	2-метилгептан, 240 °С	2-метилоктан, 220 °С
–	–	3-метилпентан, 300 °С	3-метилгексан, 280 °С	–	4-метилоктан, 225 °С
2,2-диметилпропан, 450 °С	2,2-диметилбутан, 425 °С	2,2-диметилпентан, 407 °С	–	3,3-диметилгептан, 325 °С; 4,4-диметилгептан, 287 °С	–
–	2,3-диметилбутан, 435 °С	2,3-диметилпентан, 332 °С	2,3-диметилгексан, 350 °С	–	2,3-диметилоктан, 225 °С; 4,5-диметилоктан, 290 °С
–	–	2,4-диметилпентан, 340 °С	2,4-диметилгексан, 320 °С	2,5-диметилгептан, 244 °С	–
–	–	2-метил-3-этилпентан, 350 °С; 3,3-диэтилпентан, 290 °С	2-метил-4-этилгексан, 280 °С; 3-метил-4-этилгексан, 266 °С	–	–
–	2,2,3-триметилбутан, 430 °С	2,2,3-триметилпентан, 430 °С; 2,3,3-триметилпентан, 430 °С	2,3,3-триметилгексан, 380 °С; 3,3,4-триметилгексан, 380 °С	–	–
–	–	2,2,4-триметилпентан, 410 °С	2,2,5-триметилгексан, 330 °С	2,5,5-триметилгептан, 275 °С	–
–	–	2,4-диметил-3-этилпентан, 390 °С	2,3,4-триметилгексан, 360 °С	–	–
–	–	2,2,3,3-тетраметилпентан, 430 °С; 2,2,3,4-тетраметилпентан, 435 °С; 2,3,3,4-тетраметилпентан, 430 °С	–	2,2,3,3-тетраметилгептан, 360 °С	–

Механизм окисления алканов при самовоспламенении подробно изучен и, несмотря на его сложность и многостадийность, позволяет выделить некоторые моменты, связанные с особенностями структуры молекул. Предполагается, что присоединение кислорода идет с образованием пероксидных и далее гидропероксидных радикалов, которые при температурах выше 400 °С изомеризуются и, распадаясь, превращаются в альдегид, если окислению подвергался вторичный атом углерода, или кетон, если окисление шло по третичному атому [2, 8]:



Связь С–Н у третичного атома слабее (рис. 2), но в результате образуется более устойчивые к дальнейшему окислению кетоны [7, 15]. (Температура самовоспламенения 2,2,5-триметилгексана, имеющего две группы –CH<sub>2</sub>– в середине молекулы 330 °С, а 2,3,4-триметилгексана, имеющего одну группу –CH<sub>2</sub>– 360 °С).

Изучив самовоспламенение алканов, N. Milovanovic и R. Chen выяснили, что при низкой температуре скорость разветвления цепи у парафинов с прямой цепью намного выше, чем с разветвленной. Это связано со структурой радикала \*C<sub>7</sub>H<sub>15</sub>, которая способствует изомеризации соединения RO<sub>2</sub> и вызывает разветвление цепи при разложении кетогидропероксида. Более низкая реакционная способность алкана с разветвленной цепью обусловлена не только большим количеством менее реакционноспособных метильных групп, но и присутствием третичных и четвертичных атомов С в его структуре. Реакции гомолиза третичной и четвертичной структур конкурируют с процессом образования кетогидропероксида, способствуя снижению реакционной способности парафинов с разветвленной цепью. В результате алканы, имеющие длинную цепь и слабо связанные атомы водорода, обладают высокими скоростями изомеризации и низкой температурой самовоспламенения, в отличие от компактных и сильно разветвленных соединений с большой долей прочно связанных атомов Н, где самовоспламенение ингибируется [17].

Таким образом, «слабым звеном» в цепи оказываются именно метиленовые группы. Не случайно в расчете температуры самовоспламенения по методу групповых инкрементов, предложенном А.Я. Корольченко, коэффициент, характеризующий вклад этой структуры имеет знак «–» [4].

Алкены, алкадиены и алкины широко используются в органическом синтезе, на их основе производят полимеризационные полимеры, в частности каучуки. Алкены – вещества, используемые для повышения октанового числа бензинов. Образующиеся при переработке сырой нефти в бензин путем крекинга более тяжелых фракций алкены, присутствуют в транспортных топливах, включая бензин, в значительных количествах (до 15–20 %). Двойная связь С=С представляет собой очень распространенную функциональную группу в компонентах биодизельного топлива. Алкены служат потенциальным топливом или пропеллентами для новых двигательных установок. Например, реактивные двигатели, развивающие гиперзвуковые скорости, могут заправляться этиленом. Соединения с кратными связями являются основными промежуточными продуктами окисления алканов при самовоспламенении.

Механизм самовоспламенения непредельных соединений изучен недостаточно и, в основном, зарубежными учеными [7, 18, 19]. Прочность двойной и тройной связи, а также связи углерод-водород при кратной связи значительно выше, чем в алканах (рис. 2). Известно, что температура самовоспламенения алкенов с тем же числом атомов углерода, начиная от С<sub>5</sub>, выше, чем алканов (рис. 1). Zhou C.-W. с соавторами объясняют это тем, что

связи С–С и С–Н у атома углерода, находящегося в β-положении к двойной связи, значительно слабее, чем в других положениях (рис. 2). В результате реакции отщепления H, приводящие к образованию аллильных радикалов (CH<sub>2</sub>=CH–CH<sub>2</sub>–), при высоких температурах у алкенов C<sub>5</sub> и выше протекают легче, чем присоединение радикала к двойной связи, характерное для алкенов меньшего размера. Кроме того, при высоких температурах связь С=С поглощает радикалы H и O, что снижает реакционную способность алкенов по сравнению с насыщенными углеводородами [19].

Вопасаев R. с соавторами определили, что увеличение степени замещения у двойной связи и перемещение ее внутрь молекулы делает соединение более стабильным (алкен-3 > алкен-2 > алкен-1), в результате растет октановое число изомерных алкенов. Объясняется это появлением у алкенов-2 и алкенов-3 *транс*-изомеров, являющихся более прочными соединениями, чем *цис*-изомеры [7, 18]. Данные табл. 2 повышение температуры самовоспламенения при перемещении двойной связи не подтверждают, что может быть связано с тем, что сдвиг двойной связи С=С от концевой к центральной части молекулы прерывает образование алкилкетогидропероксидов с разветвленной цепью и, следовательно, снижает реакционную способность при низких температурах, но ускоряет реакционную способность при высоких температурах [19].

Таблица 2

Температуры самовоспламенения линейных непредельных углеводородов

Основная цепь, t <sub>свс</sub>				
C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	C <sub>6</sub>	C <sub>7</sub>
Пропен, 455 °С	Бутен-1, 384 °С; Бутен-2, 324 °С	Пентен-1, 270 °С; Пентен-2, 273 °С	Гексен-1, 254 °С; Гексен-2, 245 °С	Гептен-1, 260 °С
2-метилпропен, 465 °С	2-метилбутен-1, 365 °С; 2-метилбутен-2, 380 °С	2-метилпентен-1, 300 °С; 2-метилпентен-2, 240 °С	–	–
–	3-метилбутен-1, 374 °С	4-метилпентен-1, 305 °С; 4-метилпентен-2, 330 °С	–	–
–	2-этилбутен-1, 324 °С	–	–	–
–	2,3-диметилбутен-1, 369 °С; 2,3-диметилбутен-2, 400 °С	–	–	–
–	–	2,3,3-триметилпентен-1, 383 °С; 2,4,4-триметилпентен-1, 365 °С	–	–
–	Бутадиен-1,3, 430 °С	Пентадиен-1,3, 430 °С	Гексадиен-1,5, 350 °С	–
–	2-метилбутадиен-1,3, 400 °С	–	–	–
–	Бутин-1, 386 °С	Пентин-1, 281 °С	Гексин-2, 290 °С	Гептин-1, 255 °С
–	3-метилбутин-1, 263 °С	–	–	–
–	Бутен-1-ин-3, 310 °С	–	–	–
–	2-метилбутен-1-ин-3, 260 °С	–	–	–

Так же как в алканах  $t_{\text{свс}}$  алкенов растет при разветвлении. Появление второй двойной связи повышает температуру самовоспламенения. Замена двойной связи на тройную в этине по сравнению с этеном снижает  $t_{\text{свс}}$  на 100 градусов, при увеличении длины цепи прочность алкинов возрастает и мало отличается от аналогичных алкенов, однако разветвление алкинов или замена одной двойной связи на тройную приводит к уменьшению температуры самовоспламенения соединений (табл. 2). Таким образом, предсказать поведение линейных непредельных соединений, основываясь только на показателях прочности связи, невозможно, требуется проведение большого объема дополнительных исследований по влиянию кратных связей на процессы самовоспламенения.

### Заключение

Существующие методы для оценки температуры самовоспламенения веществ очень сложны, затратны, не всегда учитывают особенности строения молекул и механизм процессов окисления, не обеспечивают требуемую точность. Наличие данных по изомерам или гомологам, близким по строению к исследуемому веществу, особенностям их химического поведения при самовоспламенении, позволяет осуществить прогноз показателя и оценить полученные расчетные величины. Прогнозируя пожарную опасность линейных углеводородов, следует учитывать, что повышению температуры самовоспламенения способствует разветвление молекул, увеличение количества метильных групп и двойных связей, причем прочность молекулы тем выше, чем больше в ней третичных и четвертичных атомов углерода и чем ближе расположены заместители в молекуле. Кратные связи, начиная с  $C_5$ , способствуют упрочнению молекулы. Удлинение как основной цепи, так и цепи заместителей снижает температуру самовоспламенения соединения.

### Список источников

1. Алексеев С.Г., Алексеев К.С., Барбин Н.М. Методы прогнозирования основных показателей пожаровзрывоопасности органических соединений // Техносферная безопасность. 2015. № 2 (7). С. 4–14.
2. ГОСТ 12.1.044–89. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов Номенклатура показателей и методы их определения. Доступ из информ.-правового портала «Гарант».
3. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности: Федер. закон Рос. Федерации от 22 июля 2008 г. № 123-ФЗ (в ред. от 10 июля 2012 г.). Доступ справ.-правовой системы «КонсультантПлюс».
4. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения: справ. в 2-х ч. М.: Асс. «Пожнаука», 2004.
5. Расчет основных показателей пожаровзрывоопасности веществ и материалов: руководство. М.: ВНИИПО МЧС России, 2002. 77 с.
6. Анализ и прогнозирование пожароопасных свойств индивидуальных алканов / И.А. Агафонов [и др.] // Пожаровзрывобезопасность. 2009. Т. 18. № 2. С. 16–19.
7. Impact of fuel molecular structure on auto-ignition behavior – Design rules for future high performance gasolines / M.D. Boot [et al.] // Progress in Energy and Combustion Science. 2017. № 60. P. 1–25. DOI: 10.1016/j.pecs.2016.12.001.
8. Коробейникова Е.Г., Кожевин Д.Ф., Кожевникова Н.Ю. Теоретические основы процессов горения и тушения: учеб. для вузов МЧС России СПб.: С.-Петербург. ун-т ГПС МЧС России, 2022. 425 с.
9. Chen C.-C., Liaw H.-H., Kuo Y.-Y. Prediction of autoignition temperatures of organic compounds by the structural group contribution approach // J. Hazard. Mater. 2009. Vol. 162. № 2-3. P. 746–762.
10. Lushchik A.P., Arestovich D.N. Application of the Statistical Methods for Determining the Self-ignition Temperature of Combustible Liquids // Safety & Fire Technology. 2014. Vol. 33. № 1. P. 51–58.

11. Keshavarz M.H., Gharagheizi F., Ghanbarzadeh M. A simple correlation for prediction of autoignition temperature of various classes of hydrocarbons // J. Iran. Chem. Soc. 2013. Vol. 10. № 3. P. 545–557.
12. Gharagheizi F. An accurate model for prediction of autoignition temperature of pure compounds // Journal of hazardous materials. 2011. Vol. 189. № 1-2. P. 211–221.
13. Анализ и прогнозирование пожароопасных свойств  $\alpha$ -олефинов нормального строения / И.А. Агафонов [и др.] // Пожаровзрывобезопасность. 2011. Т. 20. № 1. С. 28–30.
14. Батов Д.В., Сторонкина О.Е., Мочалова Т.А. Модификация аддитивно-группового метода для описания показателей пожарной опасности предельных углеводородов: температур вспышки и самовоспламенения, энтальпии испарения // Пожаровзрывобезопасность. 2017. Т. 26. № 5. С. 21–28. DOI: 10.18322/PVB.2017.26.05.21-28.
15. Перекатнова Е.С., Райкова В.М., Акинин Н.И. Влияние строения углеводородов на температуру самовоспламенения // Успехи в химии и химической технологии. 2017. Т. 31. № 13 (194). С. 52–54.
16. Магарил Р.З. Теоретические основы химических процессов переработки нефти. М.: Химия, 1976. 312 с.
17. Milovanovic N., Chen R. A Review of Experimental and Simulation Studies on Controlled Auto-Ignition Combustion. SAE Paper 2001-01-1890, 2001.
18. Influence of the position of the double bond on the autoignition of linear alkenes at low temperature / R. Bounaceur [et al.] // Proceedings of the Combustion Institute. 2009. Vol. 32. № 1. P. 387–394.
19. Combustion chemistry of alkenes and alkadienes / C.W. Zhou [et al.] // Progress in Energy and Combustion Science. 2022. Vol. 90. P. 100983.

**Информация о статье:** статья поступила в редакцию: 12.03.2024; принята к публикации: 22.03.2024

*Информация об авторах:*

**Свидзинская Галина Борисовна**, доцент кафедры физико-химических основ процессов горения и тушения Санкт-Петербургского университета ГПС МЧС России (196105, Санкт-Петербург, Московский пр., д. 149), кандидат химических наук, доцент, e-mail: [svidzinskaya\\_gb@igps.ru](mailto:svidzinskaya_gb@igps.ru), <http://orcid.org/0000-0001-9535-217X>, SPIN-код: 4334-8701

**Иванова Мария Алексеевна**, курсант Санкт-Петербургского университета ГПС МЧС России (196105, Санкт-Петербург, Московский пр., д. 149), e-mail: [petulka3294@gmail.com](mailto:petulka3294@gmail.com)