

Научная статья

УДК 614.841.11; DOI: 10.61260/1998-8990-2025-4-133-142

ТЕПЛОТА СГОРАНИЯ И КОЭФФИЦИЕНТ ГОРЮЧЕСТИ: СВЯЗЬ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЖАРНОЙ ОПАСНОСТИ ВЕЩЕСТВА

Коробейникова Елена Германовна;

✉ Кожевин Дмитрий Федорович.

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

✉ Yagmort_KDF@mail.ru

Аннотация. Статья посвящена модернизации классического коэффициента горючести (К), используемого для оценки пожарной опасности веществ. Авторы устанавливают физический смысл К, доказывая его пропорциональность теплоте сгорания. На основе стехиометрического и термохимического анализа предложена уточненная формула для расчета К, включающая ранее не учитываемые элементы: фосфор, кремний и бор. Уточнены коэффициенты для серы и водорода. Валидация на значительной выборке веществ показала снижение погрешности расчета до $\leq 7\%$ для основных классов органических соединений (алканы, спирты, кислоты). Для органических соединений, содержащих кремний, бор погрешность не превышает 9,1 %. Результаты позволяют точно оценивать ключевые параметры пожарной опасности: нижний концентрационный предел распространения пламени, температуру вспышки, эффективность огнезащиты. Работа имеет высокую практическую значимость для сертификации материалов и разработки огнестойких композитов.

Ключевые слова: коэффициент горючести, физический смысл, теплота сгорания, закон Гесса, пожарная опасность

Для цитирования: Коробейникова Е.Г., Кожевин Д.Ф. Теплота сгорания и коэффициент горючести: связь характеристик пожарной опасности вещества // Проблемы управления рисками в техносфере. 2025. № 4 (76). С. 133–142. DOI: 10.61260/1998-8990-2025-4-133-142.

Scientific article

HEAT OF COMBUSTION AND COMBUSTIBILITY COEFFICIENT: RELATIONSHIP BETWEEN FIRE HAZARD CHARACTERISTICS OF A SUBSTANCE

Korobeynikova Elena G.;

✉ Kozhevkin Dmitriy F.

Saint-Petersburg university of State fire service of EMERCOM of Russia, Saint-Petersburg, Russia

✉ Yagmort_KDF@mail.ru

Abstract. The article is devoted to the modernization of the classical coefficient of flammability (K), used to assess the fire hazard of substances. The authors establish the physical meaning of K, proving its proportionality to the heat of combustion. Based on stoichiometric and thermochemical analysis, a refined formula for calculating K is proposed, which includes previously ignored elements: phosphorus, silicon and boron. The coefficients for sulfur and hydrogen have been refined. Validation on a significant sample of substances showed a reduction in the calculation error to $<7\%$ for the main classes of organic compounds (alkanes, alcohols, acids). For organic compounds containing silicon, boron the error does not exceed 9,1 %.

The results make it possible to accurately assess the key parameters of fire danger: the lower concentration limit of flame propagation, the flash point, and the effectiveness of fire protection. The work is of high practical importance for the certification of materials and the development of fire-resistant composites.

Keywords: combustibility coefficient, physical meaning, heat of combustion, Hess's law, fire hazard

For citation: Korobeynikova E.G., Kozhevnik D.F. Heat of combustion and combustibility coefficient: relationship between fire hazard characteristics of a substance // Problemy upravleniya riskami v tekhnosfere = Problems of risk management in the technosphere. 2025. № 4 (76). P. 133–142. DOI: 10.61260/1998-8990-2025-4-133-142.

Введение

Пожаровзрывоопасные свойства веществ и материалов и пожарная опасность технологических процессов оцениваются с помощью показателей пожарной опасности – количественных и качественных физико-химических свойств, характеризующих способность к образованию горючей среды и поведение в условиях пожара.

Федеральный закон от 22 июля 2008 г. № 123-ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности»¹ определяет 36 показателей (общих, групповых и индивидуальных). ГОСТ 12.1.044–2018² включает 32 показателя пожарной опасности, характеризующих физико-химические свойства веществ и материалов (первая группа), условия распространения горения (вторая группа) и обеспечения пожаровзрывобезопасности объектов защиты (третья группа).

Экспериментально определенные показатели пожарной опасности известны для незначительной части соединений – нескольких тысяч, при этом известно более 290 млн веществ и смесей, и ежедневно это число увеличивается на 10–15 тыс. Получить экспериментальные данные для такого числа веществ – задача чрезвычайно сложная.

Решить ее позволяет другой путь определения показателей – использование расчетных методов, которые можно разделить на две группы: дескрипторные и сравнительные.

Расчет показателей пожарной опасности при использовании дескрипторного метода представляет показатель как функцию дескрипторов, в качестве которых выступают различные характеристики вещества: число атомов элементов в молекуле, плотность, температура кипения, энталпия испарения, образования, горения и ряд других.

Метод широко используется для вычисления таких показателей, как температура вспышки, воспламенения, концентрационных и температурных пределов распространения пламени и многих других [1–4].

Сравнительные методы расчета появились позже, но в настоящее время активно развиваются [5]. Метод эффективен при оценке показателей пожарной опасности для органических веществ различных гомологических рядов и различного строения.

Одной из важнейших физико-химических характеристик горючего вещества является его энталпия (теплота) сгорания – количество тепла, выделяющееся при сгорании 1 моля вещества [6]. Энталпия сгорания, выраженная в кДж/моль, является дескриптором при расчете концентрационных пределов распространения, минимальной флегматизирующей концентрации флегматизатора [7], химической экспергии [8], а также температуры горения, максимального и избыточного давления взрыва. Связанная с энталпией сгорания удельная теплота сгорания (МДж/кг) – показатель пожарной опасности³. В работе [9] эта величина обсуждается при формулировке понятия горючести вещества.

¹ Технический регламент о требованиях пожарной безопасности: Федер. закон от 22 июля 2008 г. № 123-ФЗ (ред. от 13.07.2015). Доступ из справ.-правовой системы «КонсультантПлюс».

² ГОСТ 12.1.044-2018. ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения. Доступ из справ.-правовой системы «КонсультантПлюс».

³ Технический регламент о требованиях пожарной безопасности: Федер. закон от 22 июля 2008 г. № 123-ФЗ (ред. от 13.07.2015). Доступ из справ.-правовой системы «КонсультантПлюс».

Экспериментально теплоту сгорания определяют в калориметрической бомбе, для значительного числа веществ эти данные приведены в справочниках⁴ [10, 11].

Еще одна характеристика горючего вещества – коэффициент горючести – применяется в пожарно-технических расчетах для оценки способности вещества к горению в воздухе [12].

При значении коэффициента горючести больше единицы ($K \geq 1$) вещество является горючим; при значении K меньше единицы ($K < 1$) – вещество негорючее.

Рассчитанный коэффициент горючести может быть использован как дескриптор для приближенного вычисления температуры вспышки вещества, а также величины нижнего концентрационного предела распространения пламени [13].

В формулу для расчета коэффициента горючести входят наиболее часто встречающиеся в составе органических соединений элементы, при этом в ней отсутствуют такие элементы, как фосфор, кремний, бор. В настоящее время фосфор-, бор-, кремний-органические соединения обретают все большее применение в промышленности и в быту, а использовать зарекомендовавший себя для пожарно-технических расчетов коэффициент горючести в его текущем виде для этих веществ невозможно. Описанию метода корректировки коэффициента горючести, связью с другими характеристиками горения, формализации его физического смысла и расширенного на его основе применения для оценки пожарной опасности различных веществ и материалов посвящена данная статья.

Методы исследования

В работе использовались расчетные методы оценки энталпии сгорания и коэффициента горючести.

Энталпия сгорания индивидуальных веществ рассчитывалась по I следствию закона Гесса с использованием табличных значений энталпии образования веществ⁵ [10–11].

Коэффициент горючести определяется по следующей формуле:

$$K = 4 \cdot n(C) + 4 \cdot n(S) + n(H) + n(N) - 2 \cdot n(O) - 2 \cdot n(Cl) - 3 \cdot n(F) - 5 \cdot n(Br), \quad (1)$$

где $n(C)$, $n(S)$, $n(H)$, $n(N)$, $n(O)$, $n(Cl)$, $n(F)$, $n(Br)$ – число атомов углерода, серы, водорода, азота, кислорода, хлора, фтора и брома в молекуле вещества.

Результаты и их обсуждение

Формула (1) для расчета коэффициента горючести активно используется в пожарно-технических расчетах, однако физический смысл как самого коэффициента горючести, так и индексов перед числом атомов каждого элемента в явном виде не определен.

Первое предположение состояло в том, что индексы в выражении для коэффициента горючести – это стехиометрические коэффициенты перед кислородом ($\beta(\mathcal{O})$), выраженные относительно атома водорода ($\beta(H)$). Так были подтверждены коэффициенты перед водородом, углеродом и серой, а для элементов, которые не входили в выражение для К (фосфор, кремний, бор), они были определены в рамках настоящего исследования по выше обозначенному принципу. Результаты расчетов приведены в табл. 1.

⁴ Удельная теплота сгорания и другие свойства некоторых медицинских препаратов. URL: <https://dpva.ru/Guide/GuidePhysics/GuidePhysicsHeatAndTemperature/ComnustionEnergy/CombustionHighHeat/> (дата обращения: 28.05.2025)

⁵ Там же.

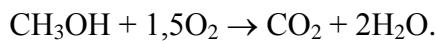
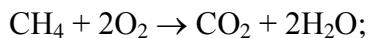
Расчет коэффициента горючести по значению коэффициента β в уравнении реакции горения

Реакция горения	$\beta(\mathcal{E})$	$\beta(\mathcal{E}) / \beta(H)$
$C + O_2 \rightarrow CO_2$	1	4
$S + O_2 \rightarrow SO_2$	1	4
$H + 0,25O_2 \rightarrow 0,5H_2O$	0,25	1
$Si + O_2 \rightarrow SiO_2$	1	4
$B + 0,75O_2 \rightarrow 0,5B_2O_3$	0,75	3
$P + 1,25O_2 \rightarrow 0,5P_2O_5$	1,25	5

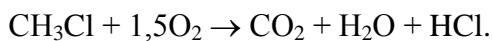
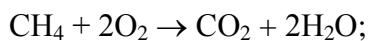
Для негорючих элементов (кислорода, азота, галогенов) коэффициенты в выражении для K могут быть также рассчитаны по уравнениям реакций горения сложных веществ, в состав которых они входят.

Каждый атом кислорода, входящий в состав сложного вещества, уменьшает коэффициент β на 0,5, следовательно, соотношение:

$$\beta(O) / \beta(H) = -2;$$



Атомы галогенов в составе веществ не окисляются и в продукты сгорания переходят в виде галогеноводородов (HCl , HBr , HI). Коэффициент β в этом случае уменьшается за счет связывания атома водорода, и для галогенов условный $\beta(Hal) / \beta(H) = -1$. И это самое существенное расхождение с формулой (1):



Изменился индекс и перед азотом. Азот, содержащийся в веществе, переходит в продукты сгорания в виде молекулярного азота N_2 , не влияя на коэффициент β , а значит условный $\beta(N) / \beta(H) = 0$.

Таким образом, выражение для коэффициента горючести с учетом стехиометрических коэффициентов в уравнении реакции горения может быть представлено в следующем виде:

$$K = 4n(C) + 4n(S) + 4n(Si) + n(H) + 3n(B) + 5n(P) - 2n(O) - n(Hal). \quad (2)$$

Анализ значений K для веществ различных классов позволил предположить, что величина коэффициента горючести не является безразмерной величиной, а связана с теплотой сгорания вещества:

$$K = 0,01 Q_{\text{гор}}, \text{ кДж/моль}. \quad (3)$$

Для большого числа веществ была рассчитана теплота сгорания по первому следствию из закона Гесса и через коэффициент горючести по формулам (2), (3). Некоторые результаты представлены в табл. 2.

Таблица 2

**Результаты расчета теплоты сгорания по первому следствию из закона Гесса
и через коэффициент горючести**

Вещество	$ \Delta H_{\text{гор}} = Q_{\text{гор}}$, кДж/моль по уравнению Гесса	Коэффициент горючести K по (Ошибка! Источник ссылки не найден.)	$Q_{\text{гор}} = 100 \cdot K$, кДж/моль	Погрешность, %
C_2H_6	1431,9	14	1400	2,2
$\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$	1890,4	18	1800	4,7
CH_3COOH	833,3	8	800	4,0
$(\text{CH}_3)_2\text{S}$	1771,7	18	1800	1,6
$\text{C}_2\text{H}_5\text{F}$	1270,6	12	1200	5,6
$\text{C}_6\text{H}_7\text{N}$	3238,0	31	3100	4,3
$(\text{CH}_3)_3\text{SiH}$	2947,8	26	2600	11,8
$(\text{CH}_3)_3\text{B}$	2765,3	26	2600	6,0
$(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{P}$	4839,1	44	4400	9,1

Данные табл. 2 показывают удовлетворительное совпадение результатов расчета теплоты сгорания, полученных двумя способами. Вместе с тем расчеты для кремния, фосфора, бора и фтора требуют корректировки.

В развитие предположения о связи коэффициента горючести и теплоты сгорания была рассмотрена возможность применения этого подхода для более точного расчета индексов для C , H , S , P , B , Si и галогенов.

Были определены значения коэффициента горючести для простых веществ исходя из их теплоты сгорания. Данные представлены в табл. 3.

Таблица 3

Значения коэффициента горючести простых веществ

Вещество	$ \Delta H_{\text{гор}} = Q_{\text{гор}}$, кДж/моль по уравнению Гесса	Коэффициент горючести $K = 0,01 Q_{\text{гор}}$, кДж/моль
Углерод (C)	393,5	3,94
Сера (S)	296,9	2,97
Кремний (Si)	859,3	8,59
Водород (H_2)	241,8	1,21
Бор (B)	1278,6	6,39
Фосфор (P)	1504,8	7,52
Азот (N)	–	0
Кислород (O)	–	«–2»

Результаты расчетов показывают, что существенно изменились в сторону увеличения индексы для кремния, бора и фосфора, что связано с их высокой теплотой сгорания, и, напротив, для серы уменьшился. Значения индексов для галогенов требуют отдельного анализа и соответствующих термохимических данных для расчета.

Выражение для коэффициента горючести (2) учетом индексов, рассчитанных по теплоте сгорания, приобрело следующий вид:

$$K = 3,94n(\text{C}) + 2,97n(\text{S}) + 8,59n(\text{Si}) + 1,21(\text{H}) + 6,39n(\text{B}) + 7,52n(\text{P}) - 2n(\text{O}) - n(\text{Hal}) \quad (4)$$

Была проведена сравнительная оценка теплоты сгорания более 50 веществ различных классов через коэффициент горючести по формулам (1), (4). Некоторые результаты приведены в табл. 4.

Таблица 4

**Результаты расчета теплоты сгорания по 1 следствию закона Гесса
и через коэффициенты горючести**

Вещество	$ \Delta H_{\text{гор}} = Q_{\text{гор}}$, кДж/моль по уравнению Гесса	Коэффициент горючести K по (1)	$Q_{\text{гор}} =$ =100 К, кДж/моль по (1)	Коэффициент горючести K по (4)	$Q_{\text{гор}} = 100 \text{ К}$, кДж/моль по (4)
CH ₄ метан	891,2	8	800	8,78	878
PH ₃ фосфин	1120,5	8	800	11,15	1115
SiH ₄ силан	1327,7	8	800	13,43	1343
H ₂ S сероводород	518,6	6	600	5,38	538
C ₆ H ₅ OH фенол	2923,5	28	2800	28,90	2890
CH ₂ O ₂ муравьиная кислота	272,7	2	200	2,36	236
(CH ₃) ₃ N триметиламин	2243,9	21	2100	22,71	2271
(CH ₃) ₄ Si тетраэтилсилан	6193,6	56	5600	64,31	6431
(C ₂ H ₅) ₃ B триэтилборан	4625,8	42	4200	48,18	4818
(C ₂ H ₅) ₃ P триэтилфосфин	4839,1	44	4400	49,31	4931

Адекватность предложенной модели (индексов в формуле) проверена путем сравнения экспериментально определенных значений теплоты сгорания (по справочным данным) и величин теплоты сгорания углеводородов и кислородсодержащих органических соединений, рассчитанных:

- по 1 следствию закона Гесса (δ_1);
- через коэффициент горючести по формуле (1) (δ_2);
- через коэффициент горючести по формуле (4) (δ_3).

Численные значения погрешности (%) приведены в табл. 5.

Таблица 5

Погрешность расчетного определения теплоты сгорания органических веществ

A т о м ы C	Химическая формула	$\Delta H_{\text{гор}}$, кДж/моль справочн., эксперим., [10–14]	$\Delta H_{\text{гор}}$, кДж/моль 1 следств. закона Гесса	δ_1 , %	$ \Delta H_{\text{гор}} =$ $Q_{\text{гор}} =$ $K_{\text{гор}} \cdot 100$ кДж/моль формула (1)	δ_2 , %	$ \Delta H_{\text{гор}} =$ $Q_{\text{гор}} =$ $K_{\text{гор}} \cdot 100$ кДж/моль формула (4)	δ_3 , %
Алканы								
1	CH ₄	–890,3	–802,3	9,88	800	10,14	878	1,38
2	C ₂ H ₆	–1559,0	–1427,7	8,42	1400	10,20	1514	2,89
3	C ₃ H ₈	–2217,0	–2043,9	7,81	2200	0,77	2150	3,02

А т о м ы С	Химическая формула	ΔH гор, кДж/моль справочн., эксперим., [10–14]	ΔH гор, кДж/моль 1 следств. закона Гесса	δ_1 , %	$ \Delta H \text{ гор} =$ $Q_{\text{гор}} =$ $K_{\text{гор}} \cdot 100$ кДж/моль формула (1)	δ_2 , %	$ \Delta H \text{ гор} =$ $Q_{\text{гор}} =$ $K_{\text{гор}} \cdot 100$ кДж/моль формула (4)	δ_3 , %
4	C_4H_{10}	–2874,0	–2656,8	7,56	2600	9,53	2786	3,06
5	C_5H_{12}	–3525,6	–3270,2	7,24	3200	9,24	3422	2,94
6	C_6H_{14}	–4197,7	–3886,4	7,42	3800	9,47	4058	3,33
7	C_7H_{16}	–4757,1	–4501,1	5,38	4400	7,51	4694	1,33
8	C_8H_{18}	–5515,7	–5115,7	7,25	5000	9,35	5336	3,26
9	C_9H_{20}	–6493,3	–5730,5	11,75	5600	13,76	5724	11,85
10	$\text{C}_{10}\text{H}_{22}$	–7188,6	–6345,2	11,73	6200	13,75	6602	8,16
Алкены								
2	C_2H_4	–1410	–1322,9	6,18	1200	14,89	1272	9,79
3	C_3H_6	–2060	–1885,5	8,47	1800	12,62	1908	7,38
4	C_4H_8	–2720	–2541,1	6,58	2400	11,76	2544	6,47
5	C_5H_{10}	–3378	–3155,6	6,58	3000	11,19	3180	5,86
6	C_6H_{12}	–4037	–3768,3	6,66	3600	10,82	3816	5,47
7	C_7H_{14}	–4696	*	–	4200	10,56	4452	5,20
8	C_8H_{16}	–5355	*	–	4800	10,36	5088	4,99
9	C_9H_{18}	–6014	*	–	5400	10,21	5728	4,76
10	$\text{C}_{10}\text{H}_{20}$	–6613	*	–	6000	9,27	6360	3,83
Алкины								
2	C_2H_2	–1299,6	–1255,6	3,39	1000	23,05	1030	20,74
3	C_3H_4	–1937,6	–1849,5	4,55	1600	17,42	1666	14,02
4	C_4H_6	–2596,8	–2859,6	10,12	2200	15,28	2302	11,35
5	C_5H_8	–3255,3	*	–	2800	13,99	2938	9,75
6	C_6H_{10}	–3912,9	*	–	3400	13,11	3574	8,66
7	C_7H_{12}	–4572,7	*	–	4000	12,52	4210	7,93
8	C_8H_{14}	–5234,4	*	–	4600	12,12	4846	7,42
9	C_9H_{16}	–5890,2	*	–	5200	11,72	5482	6,93
10	$\text{C}_{10}\text{H}_{18}$	–6548,9	*	–	5800	11,44	6118	6,58
Спирты								
1	CH_3OH	–763,8	–675,8	11,52	600	21,45	678	11,23
2	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	–1408,0	–1277,5	9,27	1200	14,77	1314	6,68
3	$\text{C}_3\text{H}_7\text{OH}$	–2067,4	–1890,4	8,56	1800	12,93	1950	5,68
4	$\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$	–2728,0	–2508,4	8,05	2400	12,02	2586	5,21
5	$\text{C}_5\text{H}_{11}\text{OH}$	–3383,6	–3115,8	7,91	3000	11,34	3222	4,78
6	$\text{C}_6\text{H}_{13}\text{OH}$	–4044,6	–3733,8	7,68	3600	10,99	3858	4,61
7	$\text{C}_7\text{H}_{15}\text{OH}$	–4709,5	–4353,8	7,55	4200	10,82	4494	4,58
8	$\text{C}_8\text{H}_{17}\text{OH}$	–5360,0	–4967,2	7,33	4800	10,45	5130	4,29
9	$\text{C}_9\text{H}_{19}\text{OH}$	–6104,0	–5572,5	8,71	5400	11,53	5645	7,52
10	$\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{OH}$	–6677,6	–6191,5	7,28	6000	10,15	6402	4,13
Альдегиды								
1	CH_2O	–570,8	–519,4	9,00	400	29,92	436	23,62
2	$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$	–1192,5	–1105,0	7,34	1000	16,14	1072	10,10
3	$\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$	–1816,0	–1684,2	7,26	1600	11,89	1708	5,95
4	$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$	–2336,2**	–2336,2	–	2200	5,83	2344	0,33
5	$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}$	–2948,7**	–2948,7	–	2800	5,04	2980	1,06
6	$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}$	–3563,4**	–3563,4	–	3400	4,59	3616	1,48
7	$\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$	–4709,5	–4112,0	12,69	4000	15,07	4252	9,71
8	$\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}$	–4793,0	*	–	4600	4,03	4888	1,98
9	$\text{C}_9\text{H}_{18}\text{O}$	*	*	–	5200	–	5524	–
10	$\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}$	–6025,0**	–6025,0	–	5800	3,73	6160	2,24

А т о м ы С	Химическая формула	ΔH гор., кДж/моль справочн., эксперим., [10–14]	ΔH гор., кДж/моль 1 следств. закона Гесса	δ_1 , %	$ \Delta H \text{ гор} =$ $Q_{\text{гор}} =$ $K_{\text{гор}} \cdot 100$ кДж/моль формула (1)	δ_2 , %	$ \Delta H \text{ гор} =$ $Q_{\text{гор}} =$ $K_{\text{гор}} \cdot 100$ кДж/моль формула (4)	δ_3 , %
Кетоны								
3	C_3H_6O	–1821,4	–1688,3	7,31	1600	12,16	1708	6,23
4	C_4H_8O	–2469,4	–2302,9	6,74	2200	10,91	2344	5,08
5	$C_5H_{10}O$	–2917,9**	–2917,9	–	2800	4,04	2980	2,13
6	$C_6H_{12}O$	–3539,8**	–3539,8	–	3400	3,95	3616	2,15
7	$C_7H_{14}O$	–3913,9	–4155,2	6,17	4000	2,20	4252	8,64
8	$C_8H_{16}O$	–4793,0	*	–	4600	4,03	4888	1,98
9	$C_9H_{18}O$	–5386,7**	–5386,7	–	5200	3,47	5524	2,55
10	$C_{10}H_{20}O$	–6003,0**	–6003,0	–	5800	3,38	6160	2,62
Карбоновые кислоты								
1	CH_2O_2	–210,6	–256,7	21,89	200	5,03	236	12,06
2	$C_2H_4O_2$	–786,5	–833,3	5,95	800	1,72	872	10,87
3	$C_3H_6O_2$	–1439,9**	–1439,9	–	1400	2,77	1508	4,73
4	$C_4H_8O_2$	–2054,9**	–2054,9	–	2000	2,67	2144	4,34
5	$C_5H_{10}O_2$	–2686,1**	–2686,1	–	2600	3,21	2780	3,50
6	$C_6H_{12}O_2$	–3286,1**	–3286,1	–	3200	2,62	3416	3,95
7	$C_7H_{14}O_2$	–3837,5	–3901,6	1,67	3800	0,98	4052	5,59
8	$C_8H_{16}O_2$	–4447,0	–4517,1	1,58	4400	1,06	4688	5,42
9	$C_9H_{18}O_2$	–5058,0	*	–	5000	1,15	5324	5,26
10	$C_{10}H_{20}O_2$	–6108,0	–5748,3	5,89	5600	8,32	5960	2,42

Примечание: * – Информация о значении ΔH обр вещества открытых источниках отсутствует, расчет по 1 следствию закона Гесса невозможен; ** – В справочных данных приводится расчетное значение теплоты сгорания

Анализ данных табл. 5 показывает, что в сравнении с известными экспериментальными данными максимальная погрешность наблюдается для расчета теплоты сгорания с использованием коэффициента горючести, рассчитанного по формуле (1) – среднее значение 10,5 %. Погрешность при расчете по 1 следствию закона Гесса составляет 7,7 %, а минимальное отклонение (6,9 %) – для расчета с использованием коэффициента горючести по модернизированной формуле (4).

Исходя из вышеизложенного, индексы, приведенные в уравнении (4), позволяют с удовлетворительной точностью рассчитать теплоту сгорания различных веществ, что может быть важно в случае отсутствия значения энталпии образования и невозможности воспользоваться (1) следствием закона Гесса.

Полученные результаты могут быть использованы при расчете нижнего концентрационного предела распространения пламени, температуры вспышки, удельной теплоты сгорания и других характеристик горения.

Очевидно, что появилась возможность дополнительно ввести значения для фосфора, кремния, бора и других элементов в формулу Д.И. Менделеева, а уравнение Г.Т. Земского [15] для этих элементов требует существенной корректировки.

Заключение

Коэффициент горючести характеризует тепловой эффект реакции и является связующей величиной для различных показателей пожарной опасности. Исходя из физического смысла этой величины возможно определять не только количество теплоты, выделяющейся при химической реакции (для горючих веществ, при $K>1$), но и эффективность ингибирирования смеси

(для негорючих веществ, при $K<1$). Проведенное исследование расширило представление о тривиальной характеристике, используемой ранее только для условного определения способности или не способности к горению различных веществ. Авторами были добавлены часто используемые в современных горючих веществах элементы и уточнены коэффициенты перед элементами, входящими в изначальную формулу.

Список источников

1. Монахов В.Т. Методы исследования пожарной опасности веществ. М.: Химия, 1979. 424 с.
2. Алексеев С.Г., Смирнов В.В., Барбин Н.М. Температура вспышки. Ч. I. История вопроса, дефиниции, методы экспериментального определения // Пожаровзрывобезопасность. 2012. Т. 21. № 5. С. 35–41.
3. Review of estimation methods for flash points and flammability limits / M.A. Vidal [et al.] // Process Safety Progress. 2004. Vol. 23. № 1. P. 47–55.
4. Liu X., Liu Z. Research progress on flash point prediction // Journal of Chemical & Engineering Data. 2010. Vol. 55. № 9. P. 2943–2950.
5. Карапетьянц М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. М.: Наука, 1965. 405 с.
6. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика. М.: Химия, 1975. 583 с.
7. Расчет основных показателей пожаровзрывоопасности веществ и материалов: руководство / Ю.Н. Шебеко [и др.]. М.: ВНИИПО, 2002. 77 с.
8. Применение потенциала горючести и экспергетического показателя для оценки пожарной опасности грузов железнодорожного транспорта / Л.А. Королева [и др]. // Пожаровзрывобезопасность. 2021. № 30 (1). Р. 16–31. DOI: 10.22227/PVB.2021.30.01.16-31.
9. Корольченко А.Я. Проблемы определения горючести веществ // Пожаровзрывобезопасность. 2015. Т. 24. № 12. С. 6–10. DOI: 10.18322/PVB.2015.24.12.6-10.
10. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность вещества и материалов и средства их тушения: справ.: в 2-х ч. 2-е изд, перераб. и доп. М.: Асц. «Пожнаука», 2004. Ч. 1. 713 с.; Ч. 2. 774 с.
11. Термодинамические свойства индивидуальных веществ / под ред. В.П. Глушко. М.: Изд-во АН СССР, 1962. Т. 2. 916 с.
12. Бронишевский Б.П. Специальная химия: учеб. пособие / под ред. П.П. Щеглова. М.: Учеб.-метод. каб. МВД СССР, 1979. 116 с.
13. Бенсон С. Термохимическая кинетика. М.: Издательство «МИР», 1971. 308 с.
14. Сагадеев В.Г., Барабанов В.П. Расчет теплот сгорания углеводородов ряда ацетилена // Химия и химическая технология. 2003. Т. 46. Вып 1. С. 157–159.
15. Земский Г.Т. Огнеопасные свойства неорганических и органических материалов: справ. М.: ВНИИПО, 2016. 971 с.

References

1. Monahov V.T. Metody issledovaniya pozharnoj opasnosti veshchestv. M.: Himiya, 1979. 424 s.
2. Alekseev S.G., Smirnov V.V., Barbin N.M. Temperatura vspышki. Ch. I. Iстория вопроса, definicii, metody eksperimental'nogo opredeleniya // Pozharovzryvobezopasnost'. 2012. T. 21. № 5. S. 35–41.
3. Review of estimation methods for flash points and flammability limits / M.A. Vidal [et al.] // Process Safety Progress. 2004. Vol. 23. № 1. P. 47–55.
4. Liu X., Liu Z. Research progress on flash point prediction // Journal of Chemical & Engineering Data. 2010. Vol. 55. № 9. P. 2943–2950.
5. Karapet'yan M.H. Metody sravnitel'nogo rascheta fiziko-himicheskikh svojstv. M.: Nauka, 1965. 405 s.

6. Karapet'yan M.H. Himicheskaya termodinamika. M.: Himiya, 1975. 583 s.
7. Raschet osnovnyh pokazatelej pozharovzryvoopasnosti veshchestv i materialov: rukovodstvo / Yu.N. Shebeko [i dr.]. M.: VNIIPo, 2002. 77 s.
8. Primenenie potenciala goryuchesti i ekszergeticeskogo pokazatelya dlya ocenki pozharnoj opasnosti gruzov zheleznodorozhnogo transporta / L.A. Koroleva [i dr]. // Pozharovzryvobezopasnost'. 2021. № 30 (1). P. 16–31. DOI: 10.22227/PVB.2021.30.01.16-31.
9. Korol'chenko A.Ya. Problemy opredeleniya goryuchesti veshchestv // Pozharovzryvobezopasnost'. 2015. T. 24. № 12. S. 6–10. DOI: 10.18322/PVB.2015.24.12.6-10.
10. Korol'chenko A.Ya., Korol'chenko D.A. Pozharovzryvoopasnost' veshchestva i materialov i sredstva ih tusheniya: sprav.: v 2-h ch. 2-e izd, pererab. i dop. M.: Ass. «Pozhnauka», 2004. Ch. 1. 713 s.; Ch. 2. 774 s.
11. Termodinamicheskie svojstva individual'nyh veshchestv / pod red. V.P. Glushko. M.: Izd-vo AN SSSR, 1962. T. 2. 916 s.
12. Bronishevskij B.P. Special'naya himiya: ucheb. posobie / pod red. P.P. Shcheglova. M.: Ucheb.-metod. kab. MVD SSSR, 1979. 116 s.
13. Benson S. Termohimicheskaya kinetika. M.: Izdatel'stvo «MIR», 1971. 308 s.
14. Sagadeev V.G., Barabanov V.P. Raschet teplot sgoraniya uglevodorodov ryada acetilena // Himiya i himicheskaya tekhnologiya. 2003. T. 46. Vyp 1. S. 157–159.
15. Zemskij G.T. Ogneopasnye svojstva neorganicheskikh i organicheskikh materialov: sprav. M.: VNIIPo, 2016. 971 s.

Информация о статье:

Статья поступила в редакцию: 24.09.2025; одобрена после рецензирования: 14.10.2025; принята к публикации: 08.12.2025

The information about article:

The article was submitted to the editorial office: 24.09.2025; approved after review: 14.10.2025; accepted for publication: 08.12.2025

Информация об авторах:

Коробейникова Елена Германовна, доцент кафедры физико-химических основ процессов горения и тушения Санкт-Петербургского университета ГПС МЧС России (196105, Санкт-Петербург, Московский пр., 149), кандидат химических наук, доцент, e-mail: korhelen2012@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5886-1450>, SPIN-код: 6268-1464

Кожевин Дмитрий Федорович, начальник кафедры физико-химических основ процессов горения и тушения Санкт-Петербургского университета ГПС МЧС России (196105, Санкт-Петербург, Московский пр., д. 149), кандидат технических наук, доцент, e-mail: Yagmort_KDF@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6418-107X>, SPIN-код: 9647-7196

Information about the authors:

Korobeynikova Elena G., associate professor of the department of physical and chemical foundations of combustion and extinguishing processes of Saint-Petersburg university of State fire service of EMERCOM of Russia (196105, Saint-Petersburg, Moskovskiy ave., 149), candidate of chemical sciences, associate professor, e-mail: korhelen2012@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5886-1450>, SPIN: 6268-1464

Kozhevkin Dmitriy F., chief of the physical and chemical bases of the burning and extinguishing processes department of Saint-Petersburg university of State fire service of EMERCOM of Russia (196105, Saint-Petersburg, Moskovskiy ave., 149), candidate of technical sciences, e-mail: Yagmort_KDF@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6418-107X>, SPIN: 9647-7196