ISSN 1506-2017

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКИЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

УСПЕХИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Том XL

№ 9

Москва
2026

УДК 66.01-52
ББК 24. 35
У78

Рецензент:
Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева

Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XL,
У78 № 9 (313). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2026. – 211 с.

В сборник вошли статьи по актуальным вопросам в области теоретической и экспериментальной химии.

Материалы сборника представлены для широкого обсуждения на XXI Международном конгрессе молодых ученых по химии и химической технологии «UCChT-2026», XL Международной конференции молодых ученых по химии и химической технологии «МКХТ-2026», ряде международных и российских конференций, симпозиумов и конкурсов, а также на интернет-сайтах.

Сборник представляет интерес для научно-технических работников, преподавателей, аспирантов и студентов химико-технологических вузов.

УДК 66.01-52
ББК 24. 35

ISSN 1506-2017

© Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, 2026

Власкин И.А., Комарова М.А., Мельников Н.О., Шалабин М.В.
Особенности применения методов синхронного термического анализа для оценки свойств огнезащитных покрытий после искусственного старения 101

Гуреева В.Г., Щетинина С.А., Михеев Д.И., Султанов Е.В.
Влияние влажности атмосферного воздуха на сорбцию диоксида азота..... 104

Дерябина Д.А., Райкова В.М.
Сравнительный анализ методов расчета нижнего концентрационного предела распространения пламени кислородсодержащих органических веществ 108

Звездунова В.А., Шушпанов А.Н., Солодухин Е.С.
Влияние соотношения компонентов на параметры горения и взрыва модельного гранулита 112

Чаплыгин А.Е., Козлова Е.В., Васин А.Я.
Пожаровзрывоопасные свойства 2,3,4-тригидроксибензофенон нафтохинон-1,2-диазидо-5-сульфоната 116

Листопад О.И., Акинин Н.И.
Анализ риска аварий на установке производства формалина с применением метода дерева событий 120

Марфина А.Д., Аносова Е.Б.
Уточнение значений критериев горючести строительных материалов на основе древесно-стружечных плит 123

Савлов Н.А., Комарова М.А., Мельников Н.О., Шалабин М.В.
Изучение влияния атмосферных факторов на свойства огнезащитных вспучивающихся покрытий..... 126

Самойлова Т.С., Сорокин И.О., Райкова В.М., Шушпанов А.Н.
Исследование температуры вспышки бинарных растворов на основе орто-ксилола 129

Сергунова А.Э., Мельников Н.О., Гаджиев Г.Г., Султанов Е.В.
Переработка эмульсионных матриц промышленных взрывчатых веществ со специальными технологическими добавками 133

Сипилина А.А., Советин Ф.С., Шаталов К.И., Шушпанов А.Н.
Термический анализ и определение кинетических параметров пигмента азокрасителя Красный 2С..... 136

Чаплыгин А.Е., Науменко А.В., Васин А.Я.
Термический анализ и пожаровзрывоопасность долутегравир натрия..... 139

Шугаева А.Р., Мельников Н.О., Акинин Н.И.
Идентификация антипиренов в древесине методами сканирующей электронной микроскопии и термического анализа 143

Борисова А.С., Чёрный А.Н.
Влияние активного связующего на закономерности горения топливных композиций . 147

УДК 614.835

Самойлова Т.С., Сорокин И.О., Райкова В.М., Шушпанов А.Н.

Исследование температуры вспышки бинарных растворов на основе орто-ксилола

Самойлова Таисия Сергеевна– бакалавр 4 года обучения инженерного химико-технологического факультета, email*: tayasamoylova@yandex.ru*
Сорокин Иван Олегович – магистрант 2 года обучения инженерного химико-технологического факультета,
Райкова Влада Мирославовна – доцент, канд. техн. наук, доцент кафедры техносферной безопасности,
Шушпанов Александр Николаевич – доцент, канд. техн. наук, доцент кафедры техносферной безопасности.
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева»
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Температура вспышки – один из основных показателей пожаровзрывоопасности легковоспламеняющихся жидкостей и их смесей. В статье приведены результаты экспериментального измерения и расчетного моделирования зависимости температуры вспышки от состава бинарных смесей орто-ксилола с н-бутанолом, изопропанолом и ацетоном. Установлено, что на температуру вспышки бинарных растворов влияет, не только количественное соотношение компонентов, но и характер их взаимодействие друг с другом.
Ключевые слова: пожаровзрывоопасность, температура вспышки, давление насыщенного пара, раствор, орто-ксилол.

Investigation of the flash point of binary solutions based on ortho-xylene

Samoylova T.S., Sorokin I.O., Raikova V.M., Shushpanov A.N.
Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow. Russia

The flash point is one of the main factors of the fire and explosion hazard of flammable liquids and their mixtures. The paper presents the results of experimental measurement and computational modeling of the dependence of the flash point on the composition of binary mixtures of ortho-xylene with n-butanol, izopropanol and acetone. It has been established that the flash point of binary solutions is influenced not only by the quantitative ratio of the components, but also by the nature of their interaction with each other.
Keywords: fire and explosion hazard, flash point, saturated vapor pressure, solution. ortho-xylene

Введение

В химической промышленности растворители и их смеси применяются при проведении различных синтезов, в процессах перекристаллизации, экстракции, абсорбции и т.д. В качестве растворителей большое применение находят одноатомные алифатические спирты (этанол, изопропанол и бутанолы). Спирты являются добавкой к большинству смесевых растворителей, повышают их растворяющую способность, улучшают адгезию покрытий за счет снижения поверхностного натяжения и препятствует помутнению пленок. Среди алифатических кетонов в качестве растворителя чаще всего используется ацетон, обладающий высокой растворяющей способностью и относительно низкой токсичностью. Ацетон применяется для растворения масел, эпоксидных смол, полистирола, сополимеров винилхлорида и полиакрилатов. Высокая летучесть ацетона ограничивает его использование в чистом виде для растворения пленкообразующих веществ. Ароматические углеводороды – наиболее обширная группа углеводородных растворителей, выпускаемых промышленностью. Они обладают высокой растворяющей способностью и в качестве составляющих компонентов входят в большинство смесевых растворителей. Смеси орто-ксилола с н-бутанолом в различных соотношениях используется как разбавитель для лаков, эмалей и грунтовок: РКБ-1, РКБ-2, РЭ-8В. Также находит применение смесь орто-ксилола и ацетона (75% /25%) в качестве растворителя РП для грунтовок.

Все указанные выше вещества относятся к легковоспламеняющимся жидкостям (ЛВЖ) и обладают повышенной пожаровзрывоопасностью. Одним из основных показателей пожаровзрывоопасности горючих жидкостей является температура вспышки в закрытом тигле, который используется в качестве критерия для классификации воспламеняющихся жидкостей, для определения категорий помещений и зданий по взрывопожарной опасности, а также для разработки мероприятий по обеспечению пожаровзрывобезопасности технологических процессов [1].

Следуют отметить, что в справочной литературе приведены значения температуры вспышки для многих органических жидкостей [2], но данных для бинарных растворителей сложного состава недостаточно.

В настоящей статье представлены результаты исследования зависимости температуры вспышки от состава смесей орто-ксилола с изопропанолом, н-бутанолом и ацетоном.

В таблице приведены некоторые физико-химические свойства и температура вспышки изученных веществ.

Таблица 1. Брутто-формула, молекулярная масса, температура кипения и температура вспышки веществ

Характеристики	изопропанол	н-бутанол	Ацетон	орто-ксилол
Брутто-формула	C_3H_8O	$C_4H_{10}O$	C_3H_6O	C_8H_{10}
Молекулярная масса, г/моль	60,09	74,12	58,08	106,17
Температура кипения, °С	82,3	117	56,5	144,4
Температура вспышки, °С (з.т.)	14	35	-18	31

Все изученные вещества относятся к легковоспламеняющимся жидкостям ($t_{всп}$ < 61°С), изопропанол и ацетон – к особо опасным ЛВЖ ($t_{всп} \leq$ -18°С).

Экспериментальная часть

Для проведения опытов использовали вещества производства компании «РУСХИМ»: изопропанол – ТУ 2319-001-92509289-2011, н-бутанол – ГОСТ 6006-78; орто-ксилол ТУ 38.101254-72, ацетон – ТУ 20.14.62-002-17661421-2022.

Опыты проводили на лабораторной установке по определению температуры вспышки в закрытом тигле согласно ГОСТ 12.1.044-2018 [1]. Установка для проведения эксперимента включает следующие элементы: термометр со шкалой 1 °С (от –35 °С до +75 °С), тигель, крышку с поворотным механизмом (рукоятка), мешалкой и фитилем.

Перед исследованием смесей были проведены измерения температуры вспышки исходных веществ (по три опыта): изопропанол $t_{всп}$=13±0,3 °С, н-бутанол $t_{всп}$=38±0,6 °С, орто-ксилол $t_{всп}$=33±0,6 °С, ацетон $t_{всп}$= -20±0,1°С.

Смеси растворителей готовили с заданными мольными концентрациями, переведенными в массовые проценты. Измерение массы компонентов производилось на аналитических весах с последующим соединением компонентов в колбе с пробкой. В течение 30 минут осуществлялось перемешивание раствора при помощи магнитной мешалки. При необходимости приготовленный раствор в колбе помещали в морозильную камеру и охлаждали до требуемой температуры. Если прогнозируемая температура вспышки смесей превышала температуру окружающей среды в лаборатории, для проведения измерений использовался аппарат Пенски-Мартенса, для предварительного нагрева образца. Дальнейшие этапы проведения эксперимента осуществлялись в вытяжном шкафу. Охлажденную смесь наливали в сухой тигель до риски. Устанавливали крышку с мешалкой и термометром. Фиксировали температуру смеси. С помощью розжига зажигался фитиль и осуществлялся поворот крышки рукояткой для открытия отверстия. В момент открытия отверстия, фитиль вводился в паровоздушную фазу внутри тигля на 1 с. Испытания на вспышку проводились каждый 1 °С. За температуру вспышки принимали температуру в момент первого появления пламени над поверхностью жидкости. Для каждого состава смеси проводили по 2-3 опыта. Средняя погрешность измерения составила 1 °С.

На рис. 1 в координатах температура вспышки – содержание (мольные доли) приведены результаты опытов (точки) для смеси орто-ксилола с н-бутанолом. Разница между температурами вспышки н-бутанола (38 °С) и орто-ксилола (33°С) составляет всего 5 °С. Значения температуры вспышки для смесей, содержащих 0,2-0,8 орто-ксилола) заметно ниже, чем для компонентов смеси.

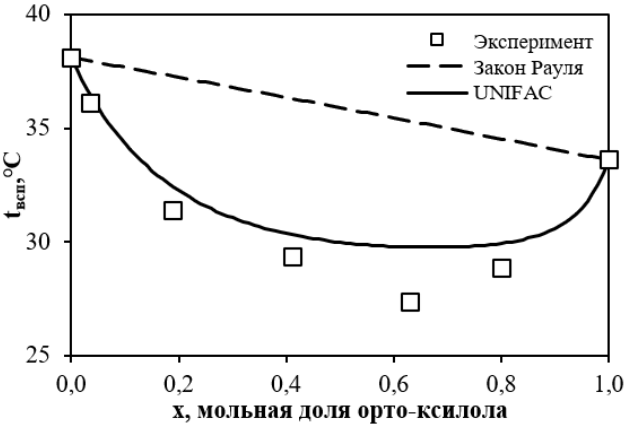

Рис. 1. Результаты экспериментального измерения и расчета температуры вспышки смесей н-бутанола с орто-ксилолом: точки результаты опытов (средние значения), сплошная линия – расчет по модели UNIFAC, пунктирная линия – расчет по закону Рауля

Результаты измерения температуры вспышки смесей изопропанола с орто-ксилолом приведены на рис. 2. При добавлении 0,1 мольной доли изопропанола к орто-ксилолу температура вспышки резко снижается от 33 до 17°С. При дальнейшем увеличении содержания изопропанола скорость уменьшения температуры вспышки снижается. В области концентраций изопропанола 0,7-0,8 на зависимости наблюдается слабо выраженный минимум 10,9-10,3°С.

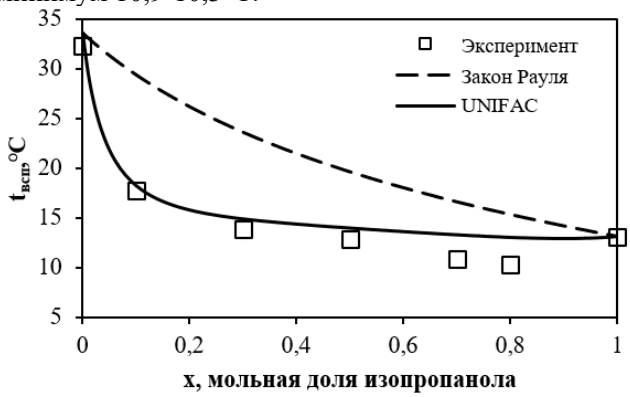

Рис. 2. Результаты экспериментального измерения и расчета температуры вспышки смесей орто-ксилола с изопропанолом: точки результаты опытов (средние значения), сплошная линия – расчет по модели UNIFAC, пунктирная линия – расчет по закону Рауля

Результаты определения температуры вспышки смесей орто-ксилола с ацетоном представлены на рис. 3. Точки на графике – средние значения температуры вспышки в двух опытах. Диапазон изменения температуры вспышки смесей большой от 33 до -20 °С. При увеличении содержания ацетона в смеси температура вспышки монотонно уменьшается.

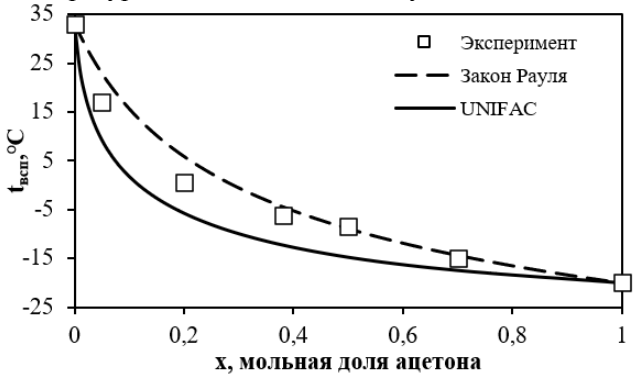

Рис. 3. Результаты экспериментального измерения и расчета температуры вспышки смесей ацетона с орто-ксилолом: точки – результаты опытов (средние значения), сплошная линия – расчет по модели UNIFAC, пунктирная линия – расчет по закону Рауля

Расчетная часть

Температура вспышки паров горючей жидкости или смеси определяется величиной давления насыщенного пара. С ростом температуры жидкости давление насыщенного пара растет. Для практических расчетов давления насыщенного пара применяется уравнение Антуана:

$$\log P = A - \frac{B}{t + C_A}, \qquad (1)$$

где t – температура, °С; A, B и C_A – постоянные Антуана.

Для идеальных растворов, согласно закону Рауля, парциальное давление компонента раствора пропорционально его концентрации, тогда общее давление бинарной смеси можно рассчитать по уравнению:

$$P_{см}(t_{см}) = P_1(t_{см})\cdot x + P_2(t_{см})\cdot(1-x), \qquad (2)$$

где x – мольная доля 1-го компонента в смеси; P_1, P_2 – парциальное давление компонентов смеси.

Компоненты неидеальных растворов не подчиняются закону Рауля. При этом наблюдаются положительные или отрицательные отклонения от закона. Системы, в которых истинные парциальные давления паров компонентов над поверхностью смеси больше вычисленных по закону Рауля, называют системами с положительными отклонениями, если парциальные давления меньше вычисленных – с отрицательными отклонениями. Чем больше отклонение от закона Рауля, тем больше вероятность появления экстремума на зависимости давления насыщенного пара от состава смеси.

Для описания неидеальных бинарных растворов в уравнение (2) добавляют коэффициенты активности (γ_1 и γ_2), таким образом, что уравнение (2) принимает вид:

$$P_{см}(t_{см}) = P_1(t_{см})\cdot\gamma_1\cdot x + P_2(t_{см})\cdot\gamma_2\cdot(1-x), \qquad (3)$$

Общая модель для прогнозирования температуры вспышки основана на уравнении Антуана (1) и модифицированном уравнении Ле Шателье:

$$\sum_i x_i\cdot\gamma_i\cdot P_i/P^0_{i,всп} = 1 \qquad (4)$$

Существуют различные методы расчета коэффициентов активности для учета отклонения растворов от идеальности, в данной статье они были рассчитаны с применением модели UNIFAC [3].

Вычисления производились с помощью программного комплекса MATLAB. За основу модуля для расчета коэффициентов активности была взят калькулятор для расчета активности компонентов смесей с помощью модели UNIFAC [4]. Более подробное описание выполнения расчетов представлено в статье [5].

В результате были получены зависимости температуры вспышки от состава изученных смесей, прогнозированные по моделям идеального (закон Рауля) и неидеального растворов (модель UNIFAC). Сравнение результатов прогнозирования температуры вспышки с экспериментальными данными представлено на рис.1-3.

Для смеси н-бутанола с орто-ксилолом (рис.1) расчет температуры вспышки по закону Рауля дает линейную зависимость, которая лежит значительно выше экспериментальных данных. Зависимость температуры вспышки от мольной доли орто-ксилола, рассчитанная по модели UNIFAC имеет минимум и в целом согласуется с экспериментальными данными.

Для смеси орто-ксилола с изопропанолом (рис.2) расчет температуры вспышки по закону Рауля также дает завышенные значения по сравнению с результатами опытов. Расчетная зависимость по модели UNIFAC практически совпадает с экспериментальными данными.

Несколько иная картина получена для смесей орто-ксилола с ацетоном (рис. 3). Расчетные кривые, полученные по закону Рауля и по модели UNIFAC близки друг к другу, а экспериментальные точки лежат между ними.

Выводы

1. Экспериментально измерены температуры вспышки в закрытом тигле смесей орто-ксилола с н-бутанолом, изопропанолом и ацетоном. Полученные зависимости температуры вспышки от состава смеси имеют различный характер для разного сочетания компонентов.

2. На основании проведенного расчетного моделирования зависимостей температуры вспышки от состава смесей по закону Рауля и модели UNIFAC было установлено, что смеси орто-ксилола с н-

бутанолом и изопропанолом относятся к неидеальным растворам.

3. Результаты расчета также показали, для смеси орто-ксилола с ацетоном неидеальность раствора слабо выражена. Зависимости температуры вспышки от состава смесей, рассчитанные по закону Рауля и с использованием модели UNIFAC, близки друг другу, а экспериментальные точки лежат между ними.

Список литературы

1. ГОСТ 12.1.044-2018. Система стандартов безопасности труда. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения: издание официальное: утв. и введ. в действие приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 5 октября 2018 г. N 717-ст взамен ГОСТ 12.1.044-89: дата введения 2019-05-01 / разработан ФГБУ ВНИИПО МЧС России. М.: Стандартинформ, 2018. 211 с.

2. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения: в 2 томах. – М.: ассоциация «Пожнаука». Т. 1. – 2004. – 713 с. Т. 2. – 2004. – 774 с.

3. H.J. Liaw, V. Gerbaud, Y.-H. Li, Prediction of miscible mixtures flash point from UNIFAC group contribution methods, Fluid Phase Equilibr 300, 2011. – P. 70 - 82.

4. Saeed (2025). UNIFAC group contribution method activity calculator function. MATLAB Central File Exchange URL: https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/64885-unifac-group-contribution-method-activity-calculator-function. (Дата обращения: 10.05.2026 г.).

5. Сорокин И.О., Бредихина К.А., Райкова В.М., Шушпанов А.Н. Исследование влияния состава смеси на температуру вспышки неидеальных растворов // Успехи в химии и химической технологии. – 2025. – Т. XXXIX. – №9. – С. 29-32.