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 620.9 662.242:006.354

Звездунова В.А., Шушпанов А.Н., Солодухин Е.С.

Влияние соотношения компонентов на параметры горения и взрыва модельного гранулита

Звездунова Виктория Александровна – студент группы МИ-12; viki.zvz@mail.ru
Шушпанов Александр Николаевич – к.т.н., доцент кафедры техносферной безопасности;
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»
Солодухин Егор Сергеевич – химик; ООО «Зеленые линии»

С применением биодизельного топлива на основе этиловых эфиров олеиновой и линолевой кислот был изготовлен модельный гранулит. Методом Озавы-Флинна-Уолла по данным ТГ-ДТА определена энергия активации состава, составившая 66 кДж/моль. В программном комплексе Shock&Detonation рассчитаны основные детонационные характеристики в диапазоне содержания биодизеля в составе 1–20 %. Максимальная скорость детонации 4,2 км/с обнаружена при 11 % биодизеля. Экспериментальное измерение скорости детонации электромагнитным методом показало значение 2,7 км/с, что обусловлено неидеальным равновесием, теплопотерями и реальным временем протекания реакций. Модельный гранулит в целом работоспособен на уровне классического АСДТ.

Ключевые слова: взрывчатые составы, гранулиты, аммиачная селитра, биодизель.

The influence of the ratio of components on the combustion and explosion parameters of model granulite

Zvezdunova V.A., Shuchpanov A.N., Soloduhin E.S.
D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

A model granulite was manufactured using biodiesel based on ethyl esters of oleic and linoleic acids. The Ozawa-Flynn-Wall method used the TG-DTA data to determine the activation energy of the composition, which is 66 kJ/mol. The Shock&Detonation software package has calculated the main detonation characteristics in the range of 1-20 % biodiesel content. The maximum detonation velocity of 4.2 km/s was detected at 11 % biodiesel. Experimental measurement of the detonation velocity using the electromagnetic method showed a value of 2.7 km/s, which is due to imperfect equilibrium, heat loss, and the actual reaction time. The model granulite is generally operational at the level of the classical ANFO.

Key words: explosives, granulites, ammonium nitrate, biodiesel.

Введение

Гранулированные взрывчатые вещества на основе аммиачной селитры занимают доминирующее положение среди промышленных взрывчатых материалов. Смесь аммиачной селитры с дизельным топливом, известная как АСДТ (ANFO), составляет от 70–80 % в Северной Америке до 20–30 % в Европе от общего объёма используемых взрывчатых веществ. Широкое распространение АСДТ обусловлено простотой изготовления, низкой стоимостью, высокой безопасностью обращения и возможностью максимальной механизации взрывных работ [1]. Однако этому типу взрывчатых веществ присущи и серьёзные недостатки: гигроскопичность аммиачной селитры, стекание жидкого горючего в нижние слои заряда, сравнительно низкая скорость детонации и, что особенно важно в современных условиях, значительное негативное воздействие на окружающую среду. Исследования показывают, что после взрыва АСДТ концентрация нитратов в почве может превышать предельно допустимые значения в 5–7 раз в радиусе 50 м, а загрязнение нефтепродуктами сохраняется в течение 6–12 месяцев. Выбросы токсичных газов достигают 120 мг/м³ оксидов азота и 80 мг/м³ монооксида углерода, что приводит к кислотным дождям, повреждению растительности и долговременной токсической нагрузке на экосистемы [2].

В последние годы всё более актуальным становится поиск экологически безопасных альтернатив традиционным горючим компонентам. Одним из перспективных направлений является использование биодизельного топлива, получаемого из возобновляемого сырья – растительных масел (рапсового, соевого, пальмового) и животных жиров. Биодизель обладает рядом существенных экологических преимуществ: биоразлагаемость (полное разложение за 14–20 суток по сравнению с 6–12 месяцами для дизельного топлива), снижение выбросов монооксида углерода на 40–45 %, уменьшение образования оксидов азота на 15–20 %, отсутствие сернистых соединений. Биодизель характеризуется более высокой термической стабильностью и температурой вспышки, что повышает безопасность производства и хранения взрывчатых составов. Также за счёт того, что биодизель является возобновляемым компонентом, наблюдается преимущество не только с экологической точки зрения, но и с экономической [3].

Ключевой проблемой, требующей изучения, является определение оптимального соотношения «аммиачная селитра / биодизель». Изменение процентного содержания биодизеля влияет на кислородный баланс смеси, теплоту взрыва и устойчивость детонации, что, в свою очередь, определяет эффективность применения взрывчатых веществ в конкретных условиях. Для традиционного АСДТ стехиометрическое соотношение составляет 94,5 % аммиачной селитры и 5,5 % дизельного топлива. Для гранулита с биодизельным топливом это

соотношение может отличаться из-за различий в химическом составе и теплоте сгорания.

Таким образом, изучение влияния соотношения «аммиачная селитра/биодизель» на параметры горения и детонации состава представляет значительный практический интерес, поскольку позволяет оптимизировать состав для повышения эффективности и безопасности применения.

Экспериментальная часть

Объектом исследования служил модельный состав – гранулит «аммиачная селитра / биодизель». В качестве биодизельного составляющего выбрано рапсовое масло. Качественный и количественный состав биодизельного топлива был определен методом хромато-масс-спектроскопии. Результаты позволили установить превалирование в составе синтезированного биодизельного топлива этиловых эфиров линолевой и олеиновой кислот, причем площадь пика эфира олеиновой кислоты составляет около 70 %, а площадь пика эфира линолевой кислоты – 15 %. Усредненная брутто-формула биодизельного топлива совпадает с брутто-формулой этилового эфира олеиновой кислоты ($C_{20}H_{38}O_2$).

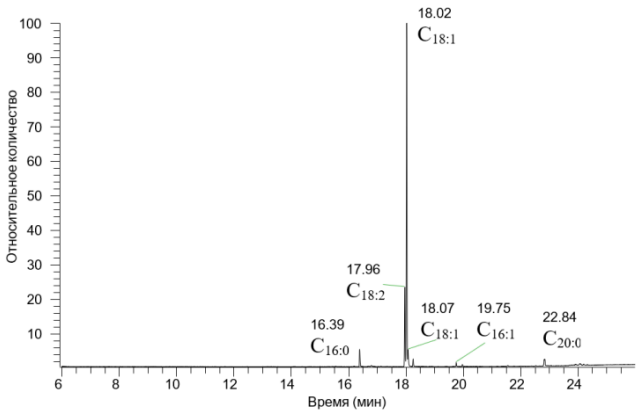

Рис. 1. Хроматограмма образца синтезированного биодизельного топлива.

Первым этапом работы было определение кинетических параметров и расчёта критерия взрывчатости, которые невозможно было бы определить без проведения термического анализа гранулита.

Термический анализ – метод исследования физико-химических и химических процессов, основанный на регистрации массы и тепловых эффектов, сопровождающих превращения веществ в условиях программирования температуры [4]. Среди наиболее информативных и широко применяемых методов выделяются термогравиметрия (ТГ) и дифференциально-термический анализ (ДТА), часто используемые совместно в виде комбинированной системы ТГ-ДТА. Преимуществом метода является возможность одновременного получения информации о массовых и энергетических изменениях в образце, что повышает точность интерпретации данных. Однако на результаты могут влиять такие факторы, как скорость нагрева, атмосфера в печи и форма образца [5].

Термический анализ модельного состава «аммиачная селитра/биодизель» проводился на дериватографе при четырёх различных скоростях нагрева: 2,5; 5; 7,5; 10 °С/мин в окислительной атмосфере (воздух). Температурный диапазон составляет 25–500 °С. Результатом проведённого термоанализа являются дериватограммы, приведённые на рисунке 2.

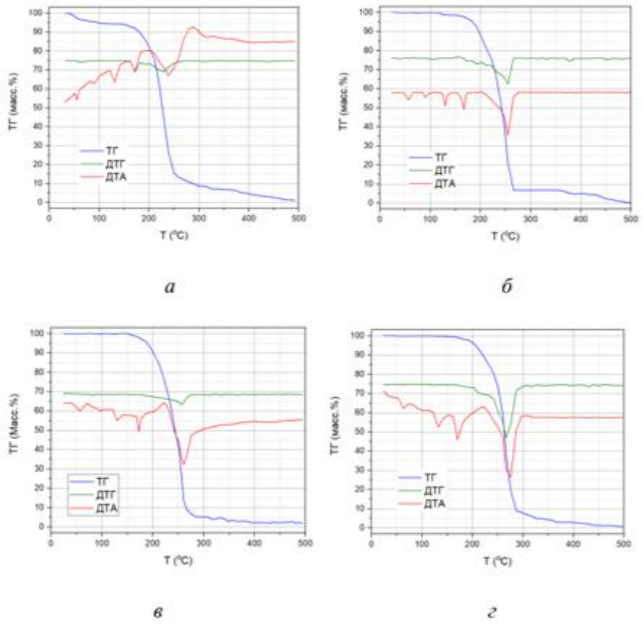

Рис. 2. ТГ-ДТА кривые модельного состава «аммиачная селитра/биодизель», атмосфера: воздух, скорость нагрева: а – 2,5; б – 5; в – 7,5; г – 10 °С/мин.

Анализируя данные дериватограммы, можно заметить общие черты. Во всех случаях в температурном диапазоне 150–280 °С, наблюдается плавное снижение кривой ТГ, означающее потерю массы вещества.

По кривой ДТА можно заметить пять эндотермических пиков, во всех случаях первые четыре пика наблюдаются при приблизительно одинаковых температурах: 55, 92, 130, 170 °С. Эти пики соответствуют фазовым переходам чистой аммиачной селитры (53, 93, 129, 164 °С). Температура, при которой возникает пятый пик, возрастает с увеличением скорости нагрева. В этом случае происходят термоокислительные реакции, где аммиачная селитра проявляет себя как окислитель, а восстановителем являются органические составляющие состава.

При помощи результатов термоанализа по кривым ТГ и ДТА можно определить кинетические параметры для любых стадий процесса, сопровождающихся изменением массы и наличием тепловых эффектов. Наиболее популярными в данном направлении являются методы Киссинджера и Озава-Флинна-Уолла.

Метод Киссинджера используется для определения энергии активации без знания точного механизма реакции. Основное уравнение метода выглядит следующим образом:

$$\ln\frac{\beta}{T_p^2} = -\frac{E_a}{RT_p} + \ln\frac{AR}{E_a} \quad (1),$$

где β – скорость нагрева, °С/мин или К/мин, Тр – температура пика на кривой ДТА, К, Еа – энергия активации, Дж/моль, R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К), А – предэкспоненциальный множитель.

Метод Озава–Флинна–Уолла основан на анализе данных кривой ТГ и также применяется для получения энергии активации веществ. Проводится несколько экспериментов при разных скоростях нагрева, для каждой из которых определяются температуры при различных фиксированных степенях превращениях по кривой ТГ. Далее необходимо построить график зависимости log β от обратной температуры. Энергия активации рассчитывается по наклону полученных прямых [6].

Таким образом, по методу Киссинджера энергия активации состава составляет 78 кДж/моль, а по методу Озава-Флинна-Уола 66 кДж/моль. Для дальнейших расчётов использовалось значение, полученное по методу Озава-Флинна-Уолла, так как в отличие от метода Киссинджера, в котором используется только температура максимума пика разложения, метод Озава–Флинна–Уолла учитывает изменение температуры при фиксированных степенях превращения (α), что делает его более точным и информативным.

Оценку способности состава к тепловому взрыву проводилась по значению критерия взрывчатости.

$$\omega = \frac{R*T_0^2*C_v}{E_A*Q_v} \quad (2),$$

где R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К), T_0 – начальная температура, К, Cv – теплоемкость вещества при постоянном объеме, Дж/(кг·К), E_A – энергия активации, Дж/моль, Q_v – теплота взрыва вещества, Дж/кг.

Энергия активации является одним из основных параметров процесса термического разложения, определяющего минимальную энергию, необходимую для инициирования взрывного распада вещества.

С точки зрения интенсивности разогрева при тепловом взрыве существуют два основных момента: значительная разница скоростей в предвзрывной период и при взрыве; большая скорость реакции в момент взрыва. Первое условие гарантирует увеличение скорости реакции при значительном возрастании температуры, которую обуславливает второе условие. Суммарно они дают критерий взрывчатости (ω).

Критерий взрывчатости показывает во сколько раз адиабатический процесс протекает быстрее, чем изотермический. Чем больше ω, тем сильнее выражены взрывчатые свойства системы. Для типичных взрывчатых веществ $\omega \approx 10^{-2}$ и меньше [7].

Для гранулита «аммиачная селитра/биодизель» расчётное значение критерия взрывчатости равняется 0,0033. Таким образом можно заметить, что значение ω по порядку величины близко к 10^{-3}. Следовательно, оценку их взрывоопасности можно проводить в рамках теории теплового взрыва.

Основные детонационные характеристики рассчитывали в программном комплексе Shock & Detonation (SD) для диапазона содержания биодизеля от 1 до 20 % с шагом 1 %. Для сравнения провели аналогичные расчёты для традиционного АСДТ (аммиачная селитра/дизельное топливо). Результаты показали, что с увеличением доли горючего от 1 до 6–7 % скорость детонации возрастает (с 3530 до 4245 м/с), а давление – с 2,22 до 3,52 ГПа. При стехиометрическом соотношении 93,6/6,4 расчётные значения составили: D = 4232 м/с, P = 3,51 Гпа. При дальнейшем увеличении содержания биодизеля до 11 % скорость детонации достигает максимума 4287 м/с, после чего начинает плавно снижаться до 4225 м/с при 20 % горючего. Давление остаётся на уровне 3,52 ГПа в интервале 7–11 %, а затем уменьшается до 3,35 ГПа. Такое поведение объясняется переходом кислородного баланса в положительную область при избытке окислителя и последующим ухудшением полноты сгорания.

Для состава АСДТ стехиометрическое соотношение составляет 94,5 % аммиачной селитры и 5,5 % дизельного топлива. При этом D = 4309 м/с, P = 3,66 ГПа, что несколько выше, чем у биодизельного гранулита. Во всём исследованном диапазоне АСДТ превосходит биодизельный состав по энергетическим характеристикам на 2–5 %. Однако, как уже отмечалось, это преимущество нивелируется существенно лучшими экологическими показателями биодизельного варианта.

Результаты расчётов для гранулита «аммиачная селитра/биодизельное топливо» представлены на рисунках 3 и 4.

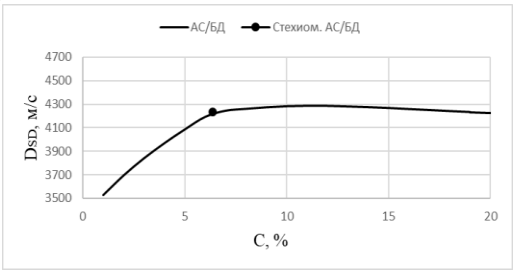

Рис. 3. Расчетная зависимость скорости детонации гранулита «аммиачная селитра/биодизель» от содержания биодизеля в смеси.

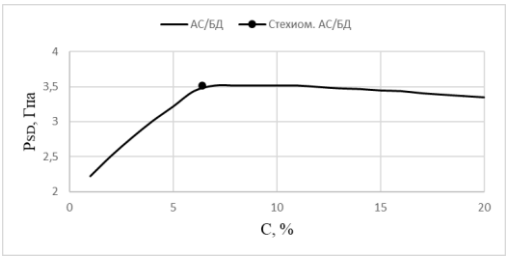

Рис. 4. Расчетная зависимость давления детонации гранулита «аммиачная селитра/биодизель» от содержания биодизеля.

Сравнение расчётных данных с результатами эксперимента показали, что экспериментальное значение скорости детонации, полученное электромагнитным методом, составило 2700 м/с, что значительно ниже расчётного (4232 м/с). Данное различие характерно для модели SD, поскольку программа предполагает идеальное равновесие, отсутствие тепловых потерь и мгновенное протекание реакций, чего в реальных условиях не достигается. Вместе с тем литературные данные указывают для составов «аммиачная селитра – биодизель» экспериментальные скорости детонации в диапазоне 3200–3500 м/с, что выше полученного нами экспериментального значения, но всё же ниже расчётного. Таким образом, расчёты SD следует рассматривать как верхнюю теоретическую оценку, позволяющую выявить общие закономерности и оптимальное соотношение компонентов.

Заключение

Проведённое исследование термического анализа и кинетических параметров модельного состава «аммиачная селитра/биодизель» позволило получить данные о его поведении при нагревании, а также оценить его взрывчатые и детонационные характеристики. Полученные данные подтверждают, что модельный состав «аммиачная селитра/биодизель» обладает свойствами, характерными для взрывчатых веществ, но с несколько меньшими энергетическими показателями по сравнению с традиционными составами типа АСДТ. Перспективы применения гранулита «аммиачная селитра/биодизель» связаны с его экологичностью, биоразлагаемостью и сниженным негативным воздействием на окружающую среду по сравнению с традиционными составами.

Список литературы

1. Меликулов А. Д., Ханжаров С. Б., Шамаев М. К. Особенности применения взрывчатых веществ простейшего состава на карьерах //International Journal of Advanced Technology and Natural Sciences. – 2024. – Т. 5. – №. 1. – С. 66-70.

2. Biessikirski A. et al. Impact of nitromethane additive on ANFO performance // Sci Rep. 2024. Vol. 14, № 1. P. 27882.

3. Brochu S. Assessment of ANFO on the Environment //Technical Investigation. – 2010. – С. 09–01.

4. Баннов А. Г., Попов М. В. Инструментальные методы анализа: термический анализ и низкотемпературная адсорбция азота. – 2019.

5. Жукова Л. В., Салимгареев Д. Д., Корсаков А. С. Новые материалы для оптики и фотоники: учебное пособие. – 2022.

6. ГОСТ Р 57951-2017. Композиты полимерные. Определение кинетических параметров разложения материалов с использованием термогравиметрии и метода Озавы-Флинна-Уолла.

7. Шушпанов А. Н. Пожаровзрывоопасность ряда нафтохинондиазидных фоторезистов: дис. кандидата технических наук: 05.26.03. 2021. 178 с.