

ВЗАЄМОЗВ'ЯЗОК БУДОВИ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ РЕЧОВИНИ**Трегубов Д.Г., Трегубова Ф.Д.***Національний університет цивільного захисту України, м. Харків*

Аналізувати різницю властивостей речовин можна за однакової температури або однакових фазових перетворень. Але за довідковими даними часто неможливо дотриматись першої або другої методики. У властивостях речовини можна виділити їх рівні у взаємозв'язку. Умови та атомарний склад речовини необхідно віднести до первинного рівня факторів. Другий рівень враховує спосіб організації атомів у молекулу: типи хімічних зв'язків та структуру молекули, що проявляється у різній середній довжині молекули та кількості каркасних атомів карбону n_C . Ці два рівня використовують для опису властивостей речовини. Але існує й надмолекулярна будова [1], що створює визначальний вплив на властивості речовини у твердому стані. Тоді необхідно враховувати еквівалентні: довжину, молярну масу та кількість каркасних атомів кластеру. Певний вміст кластерів характерний й для рідкого, газоподібного станів та для процесів горіння. Тоді властивості речовини визначає найменша структура (молекула або кластер), яка присутня у найбільшій кількості. Четвертий рівень властивостей пов'язаний з фазовими, енергетичними змінами у стані речовини, протіканням хімічних реакцій, параметрами стану речовини.

Наступні рівні нас цікавлять з точки зору параметрів горіння, тому п'ятий рівень відповідає за самоприскорення стаціонарної хімічної реакції. Для твердих вуглецевих матеріалів це починається з температури тління, для газових повітряних сумішей – з температури самоспалахування. Також потрібні достатні концентрації горючої речовини та окисника, що для газів відображають концентраційними межами поширення полум'я (КМПП). Параметри шостого рівня утворюються внаслідок певного співвідношення властивостей речовини за попередніми рівнями. Так, температурні межі поширення полум'я (ТМПП) та температура спалаху ($t_{сп}$) формуються внаслідок ланцюга факторів: атомарний склад – молярна маса молекули – певні хімічні зв'язки – певна будова молекули – кластери певної будови – пропорція кластерів та молекул у рідині – теплота утворення – теплота випаровування – тиск насиченої пари – концентрація пари – КМПП – ТМПП ($t_{сп}$).

Врахування кластерної будови речовини дозволяє прогнозувати температури плавлення $t_{пл}$ [1] та процеси горіння [2]. Так, проведено оцінку характеру зміни $t_{пл}$ вуглеводнів у кластерному або полімерному стані $T_{пл}=54,356\ln(0,01M_{екв}+1)+166,28$ та металів з різною кількістю атомів у кристалі $T_{пл}=147,62\ln(0,01M_{екв}+1)+267,78$, К. Для горіння передбачається, що на першій стадії утворюються пероксидні кластери.

Розрахунки параметрів пожежної небезпеки речовини враховують внески різних складових будови молекули [3], але мають низьку кореляцію. Врахування кластерної структури речовини може вирішити цю проблему.

Література

1. Трегубов Д.Г. та ін. Осциляційність характерних температур н-алканів внаслідок кластерної будови речовини. Проблеми надзвичайних ситуацій. 2020. №32. С. 14–30.
2. Трегубов Д.Г. Концентраційні характеристики виникнення горіння на підставі пероксидної теорії. Пожежна безпека. 2022. № 41. С. 110–118.
3. Теорія розвитку та припинення горіння. Практикум / О.В. Тарахно та ін. Х.: НУЦЗУ, 2010. 751 с. URL: <http://repositsc.nuczu.edu.ua/handle/123456789/10457>.