

В. В. СМИРНОВ, старший преподаватель Уральского института ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22); аспирант Научно-инженерного центра "Надежность и ресурс больших систем и машин" УрО РАН (Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Студенческая, 54а; e-mail: s_vitaly2006@list.ru)

С. Г. АЛЕКСЕЕВ, канд. хим. наук, доцент, чл.-корр. ВАНКБ, старший научный сотрудник Научно-инженерного центра "Надежность и ресурс больших систем и машин" УрО РАН (Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Студенческая, 54а); старший научный сотрудник Уральского института ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: Alexshome@mail.ru)

Н. М. БАРБИН, д-р техн. наук, канд. хим. наук, заведующий кафедрой химии Уральского государственного аграрного университета (Россия, 620075, г. Екатеринбург, ул. Карла Либкнехта, 42); старший научный сотрудник Уральского института ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: NMBarbin@mail.ru)

М. А. СПИРИДОНОВ, д-р хим. наук, главный научный сотрудник научно-исследовательской группы Учебного комплекса платных услуг, Уральский институт ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: sma@mtf.ustu.ru)

М. П. ДАЛЬКОВ, д-р геогр. наук, профессор кафедры пожарной тактики и службы, Уральский институт ГПС МЧС России (Россия, 620026, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: 1213874@rambler.ru)

О. А. МОКРОУСОВА, д-р пед. наук, начальник кафедры пожарной безопасности в строительстве, Уральский институт ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: olgamokrousova@mtf.ustu.ru)

А. Ю. АКУЛОВ, канд. техн. наук, начальник адъюнктуры, Уральский институт ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: akulov-07@mail.ru)

УДК 614.841.41:547-302

СВЯЗЬ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПОЖАРНОЙ ОПАСНОСТИ С ХИМИЧЕСКИМ СТРОЕНИЕМ. ХХ. ХЛОРАЛКАНЫ (часть 2)¹

Рассчитана температура вспышки для набора из 34 соединений класса хлоралканов с помощью правила углеродной цепи ("ручной" вариант и с использованием пяти ранее найденных уравнений: $t_{\text{всп}} = 0,63t_{\text{кип}} - 57,53$; $T_{\text{всп}} = 24,03N_{\text{C}} - 0,59N_{\text{C}}^2 + 177$; $T_{\text{всп}} = 189 + 7,72\beta^{1,5} - 0,632\beta^{2,5} + 0,08\beta^3$; $T_{\text{всп}} = 198,5 + 64,99/C_{\text{стx}} + 774,8/C_{\text{стx}}^2 - 1093,01/C_{\text{стx}}^3 + 443,29/C_{\text{стx}}^4$; $T_{\text{всп}} = 3,7N_{\text{C}} + 0,492T_{\text{кип}} + 75,63$). В случае хлоралканов нелинейного строения в формулы вместо стехиометрических коэффициента β , концентрации $C_{\text{стx}}$ и числа атомов углерода N_{C} подставляются псевдокоэффициент β^* ($\beta^* = \text{УУЦ} + (2\text{УУЦ} + 1 - N_{\text{C}})/4$), псевдостехиометрическая концентрация $C_{\text{стx}}^*$ определяемая через β^* , и условная углеродная цепь (УУЦ). Проведен сравнительный анализ результатов прогнозирования по методу углеродной цепи и по методикам ГОСТ 12.1.044–89*, Роули (Rowley), с использованием программных комплексов ACDLabs 2014 и TEST (версия 4.1). Установлено, что уравнения (2) и (3) дают наилучшие результаты (среднее абсолютное отклонение соответственно 1,25 и 1,27 %).

Ключевые слова: температура вспышки; свойство; зависимость; прогноз; хлоралкан; пожарная опасность.

DOI: 10.18322/PVB.2015.24.08.27-33

В работе Д. В. Батова [1] отмечен вклад нашей группы в развитие аддитивно-группового метода для систематизации и прогнозирования показателей по-

жарной опасности горючих веществ. В то же время высказано справедливое замечание об отсутствии данных о погрешности предлагаемого нами подхода к расчету характеристик пожарной опасности в ранее опубликованных статьях. В связи с этим начаты работы по сравнительному анализу метода углеродной цепи (МУЦ) и других основных подходов.

¹ Предыдущие сообщения см. в журнале "Пожаровзрывобезопасность" № 5 за 2010 г., № 6, 7, 9 за 2011 г., № 7, 9, 12 за 2012 г., № 1, 4, 5, 8 за 2013 г., № 6, 8, 9, 11, 12 за 2014 г., № 1, 2, 7 за 2015 г.

В настоящем исследовании представлены результаты сравнительного анализа МУЦ (“ручной” вариант и с помощью формул (1)–(5)) и методик ГОСТ 12.1.044–89* (формула (6) [2])², Роули (Rowley) (формула (7) [3]), ACDLabs 2014 и TEST, версия 4.1 (Toxicity Estimation Software Tool) на примере прогнозирования температуры вспышки в закрытом тигле ($t_{\text{всп}}$, $T_{\text{всп}}$)³:

$$t_{\text{всп}} = 0,63t_{\text{кип}} - 57,53; \quad (1)$$

$$T_{\text{всп}} = 24,03N_{\text{C}} - 0,595N_{\text{C}}^2 + 177; \quad (2)$$

$$T_{\text{всп}} = 189 + 7,72\beta^{1,5} - 0,632\beta^{2,5} + 0,08\beta^3; \quad (3)$$

$$T_{\text{всп}} = 198,5 + \frac{64,99}{C_{\text{ctx}}} + \frac{774,8}{C_{\text{ctx}}^2} - \frac{1093,01}{C_{\text{ctx}}^3} + \frac{443,29}{C_{\text{ctx}}^4}; \quad (4)$$

$$T_{\text{всп}} = 3,7N_{\text{C}} + 0,492T_{\text{кип}} + 75,63; \quad (5)$$

$$t_{\text{всп}} = 0,659t_{\text{кип}} + \left[\sum_{i=1}^n (a_i l_i) - 73,14 \right]; \quad (6)$$

$$T_{\text{всп}} = \frac{\sum (n_i f_i) + \delta}{\lambda \ln (8\beta) + 1} + \varepsilon, \quad (7)$$

где N_{C} — условная углеродная цепь;

β — коэффициент в реакции горения перед кислородом⁴;

C_{ctx} — стехиометрическая концентрация⁵;

a_i — структурный дескриптор i -й связи;

l_i — количество i -х связей [2];

$\delta, \varepsilon, \lambda$ — эмпирические коэффициенты (табл. 1);

n_i — количество i -х групп;

f_i — эмпирический коэффициент i -й группы (табл. 2).

Исходные данные взяты из работ [4–11]. Результаты расчетов представлены в табл. 3. Точность методов прогнозирования температуры вспышки оценивалась с помощью среднего абсолютного отклонения D и максимального отклонения D_{max} (табл. 4):

$$D = \frac{1}{n} \sum \left| \frac{T_{\text{всп}}^{\text{р}} - T_{\text{всп}}^{\text{эксп}}}{T_{\text{всп}}^{\text{эксп}}} \right| \cdot 100 \%, \quad (8)$$

где $T_{\text{всп}}^{\text{р}}$, $T_{\text{всп}}^{\text{эксп}}$ — расчетное и экспериментальное значения температуры вспышки, К;

n — количество измерений.

² Для хлораканов в ГОСТ 12.1.044–89* также приведена модифицированная формула Орманди–Крэвена (Ormandy–Craven), но поскольку уравнение (1) является уточненным вариантом этой формулы, она не была использована в сравнительном анализе.

³ t , T — температуры в °С и К соответственно.

⁴ Для хлоралканов нелинейного строения в уравнение (3) подставляется псевдокоэффициент β^* : $\beta^* = \text{УУЦ} + (2\text{УУЦ} + 1 - N_{\text{Cl}})/4$ [11].

⁵ Для хлоралканов нелинейного строения в уравнение (4) подставляется псевдостехиометрическая концентрация C_{ctx}^* , определяемая через псевдокоэффициент β^* .

Таблица 1. Значения коэффициентов для уравнения (7) [3]

Параметр	Спирты	Другие соединения
λ	2,4	2,13
δ	-208,3	-510,49
ε	196,68	235,21

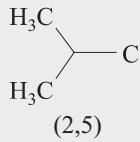
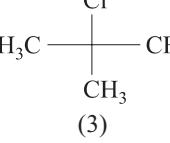
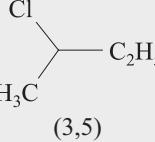
Таблица 2. Структурные дескрипторы для уравнения (7) [3]

Группа	f_i	Группа	f_i
$\equiv\text{C}-$ (HC)	256,43	$\text{O}=\text{C}_R\text{O}-$	1192,63
$\equiv\text{CH}$ (HC)	-61,94	$-\text{COO}-$	529,37
$=\text{C}<$ (HC)	483,40	$-\text{COOH}$	1034,70
$=\text{C}_R<$ (HC)	378,53	$\text{O}=\text{C}_R\text{O}_R\text{C}_R=\text{O}$	1750,35
$=\text{C}-$ (HC)	219,78	$=\text{O}$	623,68
$=\text{C}_R\text{H}-$ (HC)	124,16	$-\text{O}-$	176,69
$=\text{CH}_2$ (HC)	-99,53	$-\text{O}_R-$	128,89
$>\text{C}<$ (HC)	561,32	$-\text{OH}$ (спирты)	803,82
$>\text{C}_R<$ (HC)	98,67	$-\text{OH}$ (фенол)	806,21
$>\text{CH}-$ (HC)	418,55	$>\text{N}-$	153,69
$>\text{C}_R\text{H}-$ (HC)	313,87	$>\text{NH}$	354,79
$>\text{CH}_2$ (HC)	191,61	$>\text{N}_R\text{H}$	325,82
$-\text{C}_R\text{H}_2-$ (HC)	122,22	$-\text{NH}_2$	362,58
$-\text{CH}_3$ (HC)	-59,62	$-\text{N}=$	196,10
$>\text{CH}-$	119,79	$-\text{N}_R=$	243,93
$>\text{C}_R\text{H}-$	201,98	$>\text{N}_R-$	369,80
$>\text{CH}_2$	162,43	$-\text{N}-\text{C}_a$	797,35
$-\text{C}_R\text{H}_2-$	149,72	$-\text{CN}$	640,67
$-\text{CH}_3$	77,80	$-\text{NC}=\text{O}$	1193,67
$=\text{C}<$	194,11	$\text{O}=\text{C}=\text{N}-\text{C}_a$	697,80
$=\text{C}_R<$	236,45	$\text{NO}_2-\text{C}-$	898,17
$=\text{C}=$	-239,01	$-\text{NO}_2$	525,91
$=\text{CH}-$	148,59	$-\text{S}-$	405,65
$=\text{C}_R\text{H}-$	163,28	$-\text{S}_R-$	221,89
$=\text{CH}_2$	37,56	$-\text{SH}$	469,16
$\text{C}_R-\text{C}_R=$	-59,24	$-\text{Br}$	386,51
$>\text{C}<$	108,68	$-\text{Cl}$	251,85
$>\text{C}_R<$	130,20	$-\text{F}$	-55,41
$>\text{C}=\text{O}$	494,20	$-\text{I}$	622,38
$>\text{C}_R=\text{O}$	551,77	$-\text{Si}-$	89,55
$\text{O}=\text{CH}-$ (альдегид)	437,19	$-\text{O}-(\text{Si})$	96,01

Примечание. НС указывает на связь группы только с углеводородом. C_a обозначает ароматическое соединение, индекс R — любой цикл.

Из табл. 4 видно, что МУЦ в варианте расчета по формулам (2) и (3) дает наилучшие результаты. В расчетах по “ручному” варианту, а также с помощью уравнений (3) и (4) он уступает уточненному уравнению.

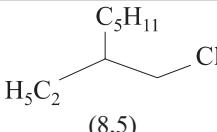
Таблица 3. Результаты прогнозирования температуры вспышки

Хлоралкан (УУЦ)	Экспе- римент	Значение $T_{\text{всп}}$, К									
		Прогноз									
		(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	ACDLabs	TEST*	МУЦ (ручн.)
CH ₃ Cl (1)	207	200	200	202	208	202	202	206	187	260 216	—
C ₂ H ₅ Cl (2)	223	223	223	221	223	223	226	233	216	253 237	225
C ₃ H ₇ Cl (3)	241	244	244	243	241	243	248	255	241	257 252	241
C ₄ H ₉ Cl (4)	256 261	265	264	264	261	263	270	275	266	288 263	262
C ₅ H ₁₁ Cl (5)	286 285	283	282	284	281	281	290	292	284	290 284	280
C ₆ H ₁₃ Cl (6)	300 301	300	300	302	300	298	307	309	300	306 300	300
C ₇ H ₁₅ Cl (7)	315 311	315	316	318	318	314	323	325	315	318 317	317
C ₈ H ₁₇ Cl (8)	331 335 334	330	331	333	334	329	340	341	331	345 339	331
C ₉ H ₁₉ Cl (9)	347 351	344	345	346	348	344	354	356	348	349 348	345
C ₁₀ H ₂₁ Cl (10)	356	356	358	357	359	356	366	370	356	357 357	359
C ₁₁ H ₂₃ Cl (11)	—	368	370	367	368	370	379	385	368	364 365	369
C ₁₂ H ₂₅ Cl (12)	377 386	379	380	376	375	382	391	399	378	381 373	384
C ₁₃ H ₂₇ Cl (13)	—	390	390	386	382	394	403	413	387	385 380	388
C ₁₄ H ₂₉ Cl (14)	395	401	398	396	390	407	415	427	396	394 390	392
C ₁₅ H ₃₁ Cl (15)	—	410	405	407	399	417	424	440	404	403 401	402
C ₁₆ H ₃₃ Cl (16)	409	418	410	419	411	428	433	454	411	416 408	418
C ₁₇ H ₃₅ Cl (17)	—	427	415	434	429	438	442	467	418	423 445	433
	238	238	233	232	232	237	242	237	238	263 247	233
	250	248	244	243	241	246	252	244	291	266 281	241
	263 252 258	259	254	254	251	257	264	258	258	268 259	252

Продолжение табл. 3

Хлоралкан (УУЦ)	Экспе- римент	Значение $T_{\text{всп}}$, К									
		Прогноз									
		(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	ACDLabs	TEST*	МУЦ (ручн.)
<chem>CC(C)C(Cl)CC</chem> (3,5)	256 254	259	254	254	251	257	264	287	294	271 258	252
<chem>CC(C)(Cl)C(C)CC</chem> (4)	276 263	269	264	264	261	267	275	264	276	278 272	262
<chem>CC(C)(Cl)C(C)C(C)C</chem> (4)	264	269	264	264	261	267	275	292	264	281 269	262
<chem>CC(C)C(C)C(C)CC(Cl)</chem> (4)	264	268	264	264	261	266	274	288	279	276 272	262
<chem>CC(C)C(Cl)CC(C)CC</chem> (4,5)	283	278	273	274	271	275	284	304	283	283 279	271
<chem>CC(C)C(Cl)C(C)CC(C)C</chem> (4,5)	274	275	273	274	271	273	282	276	283	283 282	271
<chem>CC(C)C(Cl)C(C)C(C)CC</chem> (4,5)	283	277	273	274	271	274	283	276	283	285 282	271
<chem>CC(C)C(Cl)C(C)C(C)C(C)C</chem> (4,5)	—	278	273	274	271	276	285	304	283	286 282	271
<chem>CC(C)C(C)C(C)C(C)C(C)C</chem> (5)	280 292	289	282	284	281	286	296	323	292	294 292	280
<chem>CC(C)C(C)C(C)C(C)C(C)CC</chem> (5,5)	298	296	291	293	291	293	303	320	298	300 299	290
<chem>CC(C)C(C)C(C)C(C)C(C)C(C)C</chem> (7,5)	—	324	324	326	326	322	333	326	325	322 313	324
<chem>CC(C)C(C)C(C)C(C)C(C)C(C)CC</chem> (7,5)	333	324	324	326	326	323	333	351	325	321 319	324

Окончание табл. 3

Хлоралкан (УУЦ)	Экспе- римент	Значение $T_{\text{всп}}$, К									
		Прогноз									
		(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	ACDLabs	TEST*	МУЦ (ручн.)
	333	339	339	339	341	338	349	366	338	337 336	338

Примечание. Курсивом выделены результаты расчета по методу Hierarchical method, обычным шрифтом — Consensus method.

Таблица 4. Сравнительный анализ методов прогнозирования

Метод	D			n	Метод	D		D _{max} , К	n
	%	К	D _{max} , К			%	К		
Уравнение (2)	1,25	3,55	9,8	27	TEST (Hierarchical method)	2,28	6,21	31,0	28
Уравнение (3)	1,27	3,74	10,2	28	Уравнение (7)	2,59	7,83	23,9	28
Уравнение (1)	1,35	4,19	9,3	27	ACDLabs 2014	2,78	7,67	41,0	28
Уравнение (5)	1,35	4,21	18,6	28	TEST (Consensus method)	4,64	12,13	53,0	28
Уравнение (4)	1,54	4,47	12,3	28	Уравнение (6)	5,17	15,96	44,6	28
МУЦ (“ручной” метод)	1,58	4,64	12,0	26					

нению Орманди–Крэвэна (1), но лучше (т. е. дает более точные результаты) подходов Роули, методики

ГОСТ 12.1.044–89* и программ ACDLabs 2014 и TEST.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Батов Д. В. Использование аддитивно-группового метода для анализа, систематизации и прогнозирования показателей пожарной опасности горючих жидкостей // Российский химический журнал. — 2014. — Т. LVIII, № 2. — С. 4–14.
- ГОСТ 12.1.044–89*. ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения. — Введ. 01.01.1991. — Доступ из сборника НСИС ПБ. — 2014. — № 1 (52).
- Rowley J. Flammability limits, flash points, and their consanguinity: critical analysis, experimental exploration, and prediction: dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy. — Brigham Young University, 2010. — 261 p.
- Сайт компании Sigma-Aldrich. URL: <http://www.sigmaaldrich.com/catalog> (дата обращения: 10.04.2015).
- Chemical Database DIPPR 801 (Brigham Young University). URL: <http://www.aiche.org/dippr> (дата обращения: 21.04.2015).
- Корольченко А. Я., Корольченко Д. А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения : справочник : в 2 ч. — М. : Пожнаука, 2004. — Ч. 1. — 713 с.
- Корольченко А. Я., Корольченко Д. А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения : справочник: в 2 ч. — М. : Пожнаука, 2004. — Ч. 2. — 774 с.
- Земский Г. Т. Физико-химические и огнеопасные свойства органических соединений. — М. : ВНИИПО, 2009. — Кн. 1. — 502 с.
- Земский Г. Т. Физико-химические и огнеопасные свойства органических соединений. — М. : ВНИИПО, 2009. — Кн. 2. — 458 с.
- Болотников М. Ф., Неручев Ю. А. Температуры плавления и кипения соединений в гомологических рядах моногалоген-*n*-алканов // Журнал физической химии. — 2007. — Т. 81, № 8. — С. 1364–1369.

11. Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Животинская Л. О. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. IX. Хлоралканы // Пожаровзрывобезопасность. — 2013. — Т. 22, № 4. — С. 13–21.

Материал поступил в редакцию 17 июня 2015 г.

Для цитирования: Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Спиридонов М. А., Дальков М. П., Мокроусова О. А., Акулов А. Ю. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XX. Хлоралканы (часть 2) // Пожаровзрывобезопасность. — 2015. — Т. 24, № 8. — С. 27–33. DOI: 10.18322/PVB.2015.24.08.27-33.

English

CORRELATION OF FIRE HAZARD CHARACTERISTICS WITH CHEMICAL STRUCTURE. XX. CHLOROALKANES (Part 2)

SMIRNOV V. V., Senior Lecturer of Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation); Postgraduate Student of Science and Engineering Centre "Reliability and Safety of Large Systems" of Ural Branch of Russian Academy of Sciences (Studencheskaya St., 54a, Yekaterinburg, 620049, Russian Federation; e-mail address: s_vitaly2006@mail.ru)

ALEXEEV S. G., Candidate of Chemistry Sciences, Associate Professor, Corresponding Member of WASCS, Senior Researcher of Science and Engineering Centre "Reliability and Safety of Large Systems" of Ural Branch of Russian Academy of Sciences (Studencheskaya St., 54a, Yekaterinburg, 620049, Russian Federation); Senior Researcher of Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: Alexhome@mail.ru)

BARBIN N. M., Doctor of Technical Sciences, Head of Chemistry Department, Ural State Agrarian University (Karla Libknekhta St., 42, Yekaterinburg, 620075, Russian Federation); Senior Researcher, Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: NMBarbin@mail.ru)

SPIRIDONOV M. A., Doctor of Chemical Sciences, Chief Researcher of the Research Group, Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: sma@mtf.ustu.ru)

DALKOV M. P., Doctor of Geographical Sciences, Professor of Tactics and Service Department, Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: 1213874@rambler.ru)

MOKROUSOVA O. A., Doctor of Pedagogical Sciences, Head of Fire Safety in Construction Department, Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: olgamokrousova@mail.ru)

AKULOV A. Yu., Candidate of Technical Sciences, Head of Adjuncture, Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: akulov-07@mail.ru)

ABSTRACT

Flash point for a set of 34 compounds of the class of chloroalkanes was calculated by the rule of "carbon chain" (manual version and with five previously found equations: $FP(^{\circ}C) = 0.63BP(^{\circ}C) - 57.53$; $FP(K) = 24.03N_C - 0.59N_C^2 + 177$; $FP(K) = 189 + 7.72\beta^{1.5} - 0.632\beta^{2.5} + 0.08\beta^3$; $FP(K) = 198.5 + 64.99/C_s + 774.8/C_s^2 - 1093.01/C_s^3 + 443.29/C_s^4$; $FP(K) = 3.7N_C + 0.492BP(K) + 75.63$). In the case of isomeric compounds, conditional carbon chain (CCC), pseudofactor $\beta^* = CCC + (2CCC + N_{Cl})/4$, pseudo-stoichiometric concentration C_s^* are substituted in formulas. A comparative analysis of prediction results by the method of "carbon chain" and other methods (Interstate Standard 12.1.044–89*, Rowley, ACDLabs 2014 and TEST (version 4.1) software systems) is made. It is established that equations (2) and (3) give the best results (average absolute deviation of 1.25 and 1.27 % respectively).

Keywords: flash point; property; dependence; prediction; chloroalkane; fire hazard.

REFERENCES

1. Batov D. V. Ispolzovaniye additivno-gruppovogo metoda dlya analiza, sistematizatsii i prognozirovaniya pokazateley pozharnoy opasnosti goryuchikh zhidkostey [Use of an additive and group method for the analysis, systematization and forecasting of indicators of fire hazard of combustible liquids]. *Rossiyskiy khimicheskiy zhurnal — Russian Chemical Journal*, 2014, vol. LVIII, no. 2, pp. 4–14.
2. Interstate Standard 12.1.044–89*. Occupational Safety Standards System. Fire and Explosion Hazard of Substances and Materials. Nomenclature of Indices and Methods of their Determination. Moscow, Izdatelstvo standartov, 1989; IPK Izdatelstvo standartov, 1996, 2001. Available at: NSIS PB, 2012, no. 2 (48) (in Russian).
3. Rowley J. *Flammability limits, flash points, and their consanguinity: critical analysis, experimental exploration, and prediction: dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy*. Brigham Young University, 2010. 261 p.
4. Sigma-Aldrich Database. Available at: <http://www.sigma-aldrich.com/catalog> (Accessed 10 April 2015).
5. Chemical Database DIPPR 801. Available at: <http://www.aiche.org/dippr> (Accessed 21 April 2015).
6. Korolchenko A. Ya., Korolchenko D. A. *Pozharovzryvoopasnost veshchestv i materialov i sredstva ikh tusheniya: spravochnik* [Fire and explosive hazard of compounds and materials, and their fire extinguishing means. Handbook]. Moscow, Pozhnauka Publ., 2004, vol. 1. 713 p.
7. Korolchenko A. Ya., Korolchenko D. A. *Pozharovzryvoopasnost veshchestv i materialov i sredstva ikh tusheniya: spravochnik* [Fire and explosive hazard of compounds and materials, and their fire extinguishing means. Handbook]. Moscow, Pozhnauka Publ., 2004, vol. 2. 774 p.
8. Zemskiy G. T. *Fiziko-khimicheskiye i ogneopasnyye svoystva organicheskikh soyedineniy* [Physical, chemical and fire hazard properties of organic compounds]. Moscow, All-Russian Research Institute for Fire Protection Publ., 2009, vol. 1. 502 p.
9. Zemskiy G. T. *Fiziko-khimicheskiye i ogneopasnyye svoystva organicheskikh soyedineniy* [Physical, chemical and fire hazard properties of organic compounds]. Moscow, All-Russian Research Institute for Fire Protection Publ., 2009, vol. 2. 458 p.
10. Bolotnikov M. F., Neruchev Yu. A. The melting and boiling points of compounds in homologous series of monohalogenated *n*-alkanes. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2007, vol. 81, no. 8, pp. 1198–1202. DOI: 10.1134/S0036024407080031.
11. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Zhivotinskaya L. O. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. IX. Khloralkany [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. IX. Chloroalkanes]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2013, vol. 22, no. 4, pp. 13–21.

For citation: Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Spiridonov M. A., Dalkov M. P., Mokrousova O. A., Akulov A. Yu. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. XX. Khloralkany (chast 2) [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XX. Chloroalkanes (Part 2)]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2015, vol. 24, no. 8, pp. 27–33. DOI: 10.18322/PVB.2015.24.08.27-33.