

**С. Г. АЛЕКСЕЕВ**, канд. хим. наук, доцент, чл.-корр. ВАН КБ, 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)

**А. Ю. КОШЕЛЕВ**, старший преподаватель Уральского института ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22); соискатель научно-инженерного центра “Надежность и ресурс больших систем и машин” УрО РАН (Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Студенческая, 54а; e-mail: Alekshelev@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 address: NMBarbin@mail.ru)

УДК 614.841.41:547.43

## СВЯЗЬ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПОЖАРНОЙ ОПАСНОСТИ С ХИМИЧЕСКИМ СТРОЕНИЕМ. XVIII. АЛКИЛЬНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ АМИНОМЕТАНОЛА

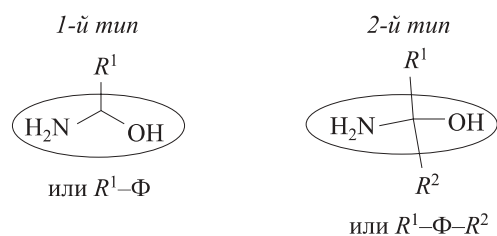
Проведено QSPR-исследование в ряду алкильных производных аминометанола. Показана возможность применения правила углеродной цепи для прогнозирования их физико-химических и пожароопасных свойств. Получены эмпирические зависимости для прогнозирования теплот парообразования и образования ( $H_{\text{пар}}$ ,  $H_{\text{обр}}$ ), критического давления ( $P_{\text{кр}}$ ), критической температуры ( $T_{\text{кр}}$ ) температур кипения и вспышки ( $T_{\text{кип}}$ ,  $T_{\text{всп}}$ ) и концентрационных пределов воспламенения ( $C_{\text{н}}$ ,  $C_{\text{в}}$ ) от числа атомов углерода ( $N_{\text{C}}$ ):  $H_{\text{пар}} = 1,55N_{\text{C}} + 37,95$  ( $2 \leq N_{\text{C}} \leq 6$  – 1-й тип);  $H_{\text{обр}} = 20,92N_{\text{C}} + 167,83$  ( $2 \leq N_{\text{C}} \leq 11$ );  $P_{\text{кр}} = 0,34N_{\text{C}}^2 - 8,82N_{\text{C}} + 77,98$  ( $2 \leq N_{\text{C}} \leq 11$ );  $T_{\text{кр}} = 16,21N_{\text{C}} + 538,2$  ( $2 \leq N_{\text{C}} \leq 11$ );  $T_{\text{кип}} = 0,81N_{\text{C}}^2 + 34,39N_{\text{C}} + 347,19$  ( $2 \leq N_{\text{C}} \leq 11$ );  $T_{\text{всп}} = 0,34N_{\text{C}}^2 + 17,08N_{\text{C}} + 279,98$  ( $2 \leq N_{\text{C}} \leq 11$ );  $C_{\text{н}} = 0,07N_{\text{C}}^2 - 0,89N_{\text{C}} + 3,91$  ( $2 \leq N_{\text{C}} \leq 11$ );  $C_{\text{в}} = 0,57N_{\text{C}}^2 - 7,77N_{\text{C}} + 33,6$  ( $2 \leq N_{\text{C}} \leq 11$ ). Для сравнительного анализа выполнены расчеты по методам ACD/Labs, HSPiP, ChemBioOffice 2012 и ГОСТ 12.1.044–89\*.

**Ключевые слова:** аминометанол; показатель; температура вспышки; зависимость; прогноз; хемоинформатика.

Исследования QSPR (*Quantitative Structure — Property Relationship*) — одно из направлений хемоинформатики, в котором устанавливается количественная взаимосвязь между строением и свойством химического соединения. В настоящей работе продолжено QSPR-изучение аминспиртов [1] и в качестве объекта исследования выбраны алкилпроизводные аминометанола. По способу увеличения углеродной цепи молекулы за счет алкильных заместителей  $R^1$  и  $R^2$  можно выделить два типа производных аминометанола (рис. 1).

Ранее при QSPR-исследовании алкил- и диалкилбензолов [2] нами использовался прием изменения точки отсчета, который заключался в том, что в качестве “функциональной” группы рассматривались не алкильные радикалы, а бензольное кольцо. Благодаря этому подходу стало возможно рассматривать диалкилбензолы как алканы с одной функциональной группой. В настоящем исследовании также использован данный прием. В качестве услов-

ной функциональной группы  $\Phi$  выбран фрагмент  $\text{H}_2\text{N}-\text{C}-\text{OH}$  (см. рис. 1). Метод определения основной (ОУЦ) и условной (УУЦ) углеродных цепей для соединений 1-го типа аналогичен способу нахождения ОУЦ и УУЦ в спиртах, альдегидах, карбоновых кислотах, алкилмеркаптанах, нитроалканах, галогеналканах и алкиламинах [3–10]. При этом  $\alpha$ -эффект алкильной группы, характерный для спиртов и нитроалканов [3, 6], не проявляется. В производных аминометанола 2-го типа ОУЦ и УУЦ вычисляются так же, как в простых эфирах и тиоэфирах [11, 12].



**Рис. 1.** Типы производных аминометанола

Таблица 1. Справочные и расчетные физико-химические и пожароопасные свойства дизамещенных аминометанолов

Соединение			$H_{\text{пар}},$ кДж/ моль	$H_{\text{обр}},$ кДж/ моль	$P_{\text{кр}},$ атм	Температура, К			КПВ, % (об.)	
$R^1$	$R^2$	Номер (УУЦ)				$T_{\text{кр}}$	$T_{\text{кип}}$	$T_{\text{всп}}$	$C_{\text{н}}$	$C_{\text{в}}$
CH <sub>3</sub>	H	1 (1)	41,1 <sup>P</sup>	208,3 <sup>P</sup>	62,9 <sup>P</sup>	550 <sup>P</sup>	387 <sup>P</sup>	296 <sup>P</sup>	2,4 <sup>P</sup>	20,9 <sup>P</sup>
			41,1	209,7	61,7	554	410 <sup>P</sup> 409 <sup>P</sup> 406 <sup>P</sup> 381	330 <sup>P</sup> 330 <sup>P</sup> 297	2,3 2,4	20,3
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	(2)	42,5 <sup>P</sup>	229,0 <sup>P</sup>	54,2 <sup>P</sup>	573 <sup>P</sup>	400 <sup>P</sup>	303 <sup>P</sup>	1,8 <sup>P</sup>	14,9 <sup>P</sup>
			42,6	230,6	54,6	571	432 <sup>P</sup> 429 <sup>P</sup> 427 <sup>P</sup> 413 410	334 <sup>P</sup> 338 <sup>P</sup> 313 313	1,7 1,9 1,9	15,4 16,2
			42,6	229,0	55,1	572				
CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	H	3 (2,5)	43,2 <sup>P</sup>	254,9 <sup>P</sup>	47,8 <sup>P</sup>	580 <sup>P</sup>	406 <sup>P</sup>	307 <sup>P</sup>	1,4 <sup>P</sup>	11,5 <sup>P</sup>
			43,4	241,1	51,3	579	455 <sup>P</sup> 444 <sup>P</sup> 430 <sup>P</sup> 428 421	349 <sup>P</sup> 342 <sup>P</sup> 321 322	1,7 1,6	13,4 13,2
			43,3	239,3	50,8	584				
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	H	2 (3)	44,2 <sup>P</sup>	249,6 <sup>P</sup>	47,3 <sup>P</sup>	594 <sup>P</sup>	415 <sup>P</sup>	313 <sup>P</sup>	1,4 <sup>P</sup>	11,5 <sup>P</sup>
			44,2	251,5	48,1	587	455 <sup>P</sup> 456 <sup>P</sup> 444 <sup>P</sup> 443 432	346 <sup>P</sup> 348 <sup>P</sup> 328 328	1,3 1,5 1,5	11,6 12,2
			44,2	249,7	47,9	594				
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	H	(3)	44,3 <sup>P</sup>	279,0 <sup>P</sup>	42,6 <sup>P</sup>	596 <sup>P</sup>	417 <sup>P</sup>	314 <sup>P</sup>	1,5	11,6
			44,2	251,5	48,1	587	475 <sup>P</sup> 450 <sup>P</sup> 430 <sup>P</sup> 444 <sup>P</sup> 443 432	336 <sup>P</sup> 350 <sup>P</sup> 328 328	1,5	12,2
			44,2	249,7	47,9	594				
CH(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	(3,5)	44,9	275,5 <sup>P</sup>	42,0 <sup>P</sup>	601 <sup>P</sup>	478 <sup>P</sup>	351 <sup>P</sup>	1,3	10,2
			45,0	262,0	40,2 <sup>P</sup>	613 <sup>P</sup>	461 <sup>P</sup> 462 <sup>P</sup> 458 452	372 <sup>P</sup> 336 336	1,3	10,5
				260,0	45,2	595				
					44,4	605				
CH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	H	(3,5)	44,9	262,0	45,2	595	478 <sup>P</sup> 469 <sup>P</sup> 450 <sup>P</sup> 458 452	365 <sup>P</sup> 379 <sup>P</sup> 336 336	1,3	10,2
			45,0	260,0	44,4	605			1,3	10,5
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	H	(4)	45,7	270,3 <sup>P</sup>	41,5 <sup>P</sup>	615 <sup>P</sup>	478 <sup>P</sup>	360 <sup>P</sup>	1,2	9,0
			45,8	272,4	42,4	603	448 <sup>P</sup> 464 <sup>P</sup> 474 <sup>P</sup> 472 466	381 <sup>P</sup> 343 343	1,2	9,4
				270,3	42,3	605				
CH(CH <sub>3</sub> )C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	H	(4,5)	46,5	296,2 <sup>P</sup>	37,2 <sup>P</sup>	620 <sup>P</sup>	501 <sup>P</sup>	365 <sup>P</sup>	1,1	8,1
			46,6	282,9	39,8	611	481 <sup>P</sup> 470 <sup>P</sup> 486 483	385 <sup>P</sup> 350 351	1,1	8,4
				280,6	39,4	612				
CH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	(4,5)	47,2 <sup>P</sup>	296,2 <sup>P</sup>	37,2 <sup>P</sup>	620 <sup>P</sup>	501 <sup>P</sup>	329 <sup>P</sup>	1,1	8,1
			46,5	282,9	39,8	611	456 <sup>P</sup> 470 <sup>P</sup> 469 <sup>P</sup> 486 483	368 <sup>P</sup> 383 <sup>P</sup> 350 351	1,1	8,4
			46,6	280,6	39,4	612				

Соединение			$H_{\text{пар}},$ кДж/ моль	$H_{\text{обр}},$ кДж/ моль	$P_{\text{кр}},$ атм	Температура, К			КПВ, % (об.)	
$R^1$	$R^2$	Номер (УУЦ)				$T_{\text{кр}}$	$T_{\text{кип}}$	$T_{\text{всп}}$	$C_{\text{н}}$	$C_{\text{в}}$
$(\text{CH}_2)_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	H	(4,5)	46,5	296,2 <sup>P</sup>	37,2 <sup>P</sup>	620 <sup>P</sup>	501 <sup>P</sup>	365 <sup>P</sup>	1,1	8,1
			<u>46,6</u>	282,9	39,8	611	478 <sup>P</sup>	386 <sup>P</sup>	<u>1,1</u>	<u>8,4</u>
				<u>280,6</u>	<u>39,4</u>	<u>612</u>	472 <sup>P</sup>	350	<u>351</u>	
						486				
						483				
$\text{C}_5\text{H}_{11}$	H	(5)	47,3	290,9 <sup>P</sup>	36,8 <sup>P</sup>	633 <sup>P</sup>	501 <sup>P</sup>	376 <sup>P</sup>	1,1	7,5
				293,4	37,3	619	484 <sup>P</sup>	405 <sup>P</sup>	<u>1,0</u>	<u>8,1</u>
				<u>292,7</u>	<u>37,4</u>	<u>625</u>	482 <sup>P</sup>	357	<u>357</u>	
						499				
						498				
$\text{CH}_3$	$\text{CH}_3$	13 (2)	41,3 <sup>P</sup>	232,4 <sup>P</sup>	55,2 <sup>P</sup>	552 <sup>P</sup>	389 <sup>P</sup>	297 <sup>P</sup>	1,8 <sup>P</sup>	14,9 <sup>P</sup>
			<u>42,6</u>	230,6	54,6	571	430 <sup>P</sup>	320 <sup>P</sup>	1,9	15,4
				<u>229,0</u>	<u>55,1</u>	<u>572</u>	425 <sup>P</sup>	358 <sup>P</sup>	<u>1,9</u>	<u>16,2</u>
						413				
						410				
$\text{C}_2\text{H}_5$	$\text{CH}_3$	14 (3)	43,2 <sup>P</sup>	253,1 <sup>P</sup>	48,0 <sup>P</sup>	575 <sup>P</sup>	406 <sup>P</sup>	307 <sup>P</sup>	1,4 <sup>P</sup>	11,5 <sup>P</sup>
			<u>44,2</u>	251,5	48,1	587	453 <sup>P</sup>	330 <sup>P</sup>	1,5	11,6
				<u>253,1</u>	<u>47,9</u>	<u>585</u>	430 <sup>P</sup>	373 <sup>P</sup>	<u>1,5</u>	<u>12,2</u>
						423 <sup>P</sup>				
						443				
						432				
$\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3$	15 (3,5)	45,0	279,0 <sup>P</sup>	42,6 <sup>P</sup>	582 <sup>P</sup>	475 <sup>P</sup>	335 <sup>P</sup>	1,1 <sup>P</sup>	9,4 <sup>P</sup>
				262,0	45,2	595	443 <sup>P</sup>	388 <sup>P</sup>	1,3	10,2
				<u>263,4</u>	<u>44,4</u>	<u>595</u>	427 <sup>P</sup>	336	<u>1,3</u>	<u>10,5</u>
						458				
						452				
$\text{C}_2\text{H}_5$	$\text{C}_2\text{H}_5$	16 (4)	45,8	273,7 <sup>P</sup>	42,1 <sup>P</sup>	596 <sup>P</sup>	475 <sup>P</sup>	342 <sup>P</sup>	1,1 <sup>P</sup>	9,4 <sup>P</sup>
				272,4	42,4	603	442 <sup>P</sup>	388 <sup>P</sup>	1,2	9,0
				<u>273,8</u>	<u>42,3</u>	<u>605</u>	443 <sup>P</sup>	343	<u>1,2</u>	<u>9,4</u>
						472				
						466				
$\text{C}_3\text{H}_7$	$\text{CH}_3$	17 (4)	45,8	273,7 <sup>P</sup>	42,1 <sup>P</sup>	596 <sup>P</sup>	475 <sup>P</sup>	345 <sup>P</sup>	1,1 <sup>P</sup>	9,4 <sup>P</sup>
				272,4	42,4	603	443 <sup>P</sup>	388 <sup>P</sup>	1,2	9,0
				<u>273,8</u>	<u>42,3</u>	<u>605</u>	438 <sup>P</sup>	343	<u>1,2</u>	<u>9,4</u>
						472				
						466				
$\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$\text{C}_2\text{H}_5$	18 (4,5)	46,6	299,6 <sup>P</sup>	37,7 <sup>P</sup>	602 <sup>P</sup>	498 <sup>P</sup>	348 <sup>P</sup>	1,0 <sup>P</sup>	7,3 <sup>P</sup>
				282,9	39,8	611	468 <sup>P</sup>	403 <sup>P</sup>	1,1	8,1
				<u>284,1</u>	<u>39,4</u>	<u>606</u>	446 <sup>P</sup>	350	<u>1,1</u>	<u>8,4</u>
						457 <sup>P</sup>				
						486				
						487				
$\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}_3$	19 (4,5)	46,6	299,6 <sup>P</sup>	37,7 <sup>P</sup>	602 <sup>P</sup>	498 <sup>P</sup>	351 <sup>P</sup>	1,1	8,1
				282,9	39,8	611	451 <sup>P</sup>	403 <sup>P</sup>	<u>1,1</u>	<u>8,4</u>
				<u>284,1</u>	<u>39,4</u>	<u>606</u>	447 <sup>P</sup>	350	<u>351</u>	
						486				
						487				
$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}_2\text{H}_5$	$\text{CH}_3$	20 (4,5)	46,6	282,9	39,8	611	474 <sup>P</sup>	351 <sup>P</sup>	1,1	8,1
				<u>284,1</u>	<u>39,4</u>	<u>606</u>	446 <sup>P</sup>	388 <sup>P</sup>	<u>1,1</u>	<u>8,4</u>
							486	350		
						487				
						351				
$\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	$\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	21 (5)		325,6 <sup>P</sup>	34,0 <sup>P</sup>	608 <sup>P</sup>	520 <sup>P</sup>	356 <sup>P</sup>	0,9 <sup>P</sup>	6,8 <sup>P</sup>
				293,4	37,3	619	446 <sup>P</sup>	418 <sup>P</sup>	1,1	7,5
				<u>294,4</u>	<u>37,4</u>	<u>615</u>	472 <sup>P</sup>	357	<u>1,0</u>	<u>8,1</u>
						499				
						498				

Продолжение табл. 1

Соединение			$H_{\text{пар}},$ кДж/ моль	$H_{\text{обр}},$ кДж/ моль	$P_{\text{кр}},$ атм	Температура, К			КПВ, % (об.)	
$R^1$	$R^2$	Номер (УУЦ)				$T_{\text{кр}}$	$T_{\text{кип}}$	$T_{\text{всп}}$	$C_{\text{н}}$	$C_{\text{в}}$
$C_3H_7$	$C_2H_5$	<b>22</b> (5)	294,4 <sup>P</sup>	37,3 <sup>P</sup>	616 <sup>P</sup>	498 <sup>P</sup>	356 <sup>P</sup>	1,0 <sup>P</sup>	7,3 <sup>P</sup>	
			293,4	37,3	619	451 <sup>P</sup>	403 <sup>P</sup>	1,1	7,5	
			294,4	37,4	615	457 <sup>P</sup>	357	1,0	8,1	
						499	357			
						498				
$C_4H_9$	$CH_3$	<b>23</b> (5)	294,4 <sup>P</sup>	37,3 <sup>P</sup>	616 <sup>P</sup>	498 <sup>P</sup>	403 <sup>P</sup>	1,1	7,5	
			293,4	37,3	619	459 <sup>P</sup>	357	1,0	8,1	
			294,4	37,4	615	455 <sup>P</sup>	357			
						499				
						498				
$CH(CH_3)_2$	$C_3H_7$	<b>24</b> (5,5)	320,3 <sup>P</sup>	33,6 <sup>P</sup>	622 <sup>P</sup>	521 <sup>P</sup>	360 <sup>P</sup>	0,9 <sup>P</sup>	6,8 <sup>P</sup>	
			303,8	35,0	627	459 <sup>P</sup>	419 <sup>P</sup>	1,1	7,2	
			304,7	35,3	625	470 <sup>P</sup>	364	0,95	7,1	
						512	363			
						510				
$CH_2CH(CH_3)_2$	$C_2H_5$	<b>25</b> (5,5)	320,3 <sup>P</sup>	33,6 <sup>P</sup>	622 <sup>P</sup>	521 <sup>P</sup>	363 <sup>P</sup>	1,1	7,2	
			303,8	35,0	627	468 <sup>P</sup>	419 <sup>P</sup>	0,95	7,1	
			304,7	35,3	625	512	364			
						510	363			
						510				
$(CH_2)_2CH(CH_3)_2$	$CH_3$	<b>26</b> (5,5)	320,3 <sup>P</sup>	33,6 <sup>P</sup>	622 <sup>P</sup>	521 <sup>P</sup>	367 <sup>P</sup>	1,1	7,2	
			303,8	35,0	627	468 <sup>P</sup>	419 <sup>P</sup>	0,95	7,1	
			304,7	35,3	625	512	364			
						510	363			
						510				
$CH(CH_3)C_2H_5$	$C_2H_5$	<b>27</b> (5,5)	320,3 <sup>P</sup>	33,6 <sup>P</sup>	622 <sup>P</sup>	521 <sup>P</sup>	363 <sup>P</sup>	1,1	7,2	
			303,8	35,0	627	487 <sup>P</sup>	419 <sup>P</sup>	0,95	7,1	
			304,7	35,3	625	512	364			
						510	363			
						510				
$CH_2CH(CH_3)C_2H_5$	$CH_3$	<b>28</b> (5,5)	320,3 <sup>P</sup>	33,6 <sup>P</sup>	622 <sup>P</sup>	521 <sup>P</sup>	367 <sup>P</sup>	1,1	7,2	
			303,8	35,0	627	487 <sup>P</sup>	419 <sup>P</sup>	0,95	7,1	
			304,7	35,3	625	512	364			
						510	363			
						510				
$C_3H_7$	$C_3H_7$	<b>29</b> (6)	315,0 <sup>P</sup>	33,3 <sup>P</sup>	634 <sup>P</sup>	521 <sup>P</sup>	369 <sup>P</sup>	0,9 <sup>P</sup>	6,8 <sup>P</sup>	
			314,3	32,9	636	471 <sup>P</sup>	419 <sup>P</sup>	1,1	7,1	
			315,0	33,6	635	524	370	1,15	7,6	
						521	370			
						521				
$C_4H_9$	$C_2H_5$	<b>30</b> (6)	315,0 <sup>P</sup>	33,3 <sup>P</sup>	635 <sup>P</sup>	521 <sup>P</sup>	371 <sup>P</sup>	1,1	7,1	
			314,3	32,9	636	476 <sup>P</sup>	419 <sup>P</sup>	1,15	7,6	
			315,0	33,6	635	524	370			
						521	370			
						521				
$C_5H_{11}$	$CH_3$	<b>31</b> (6)	315,0 <sup>P</sup>	33,3 <sup>P</sup>	635 <sup>P</sup>	521 <sup>P</sup>	376 <sup>P</sup>	1,1	7,1	
			314,3	32,9	636	476 <sup>P</sup>	419 <sup>P</sup>	1,15	7,6	
			315,0	33,6	635	524	370			
						521	370			
						521				
$C_4H_9$	$C_3H_7$	<b>32</b> (7)	335,6 <sup>P</sup>	29,9 <sup>P</sup>	653 <sup>P</sup>	544 <sup>P</sup>	384 <sup>P</sup>	1,3	7,9	
			335,2	29,2	652	489 <sup>P</sup>	434 <sup>P</sup>	1,35	8,4	
			335,7	30,1	652	548	383			
						544	409			
						544				
$C_5H_{11}$	$C_2H_5$	<b>33</b> (7)	335,6 <sup>P</sup>	29,9 <sup>P</sup>	653 <sup>P</sup>	544 <sup>P</sup>	387 <sup>P</sup>	1,3	7,9	
			335,2	29,2	652	496 <sup>P</sup>	434 <sup>P</sup>	1,35	8,4	
			335,7	30,1	652	548	383			
						544	409			
						544				
$C_6H_{13}$	$CH_3$	<b>34</b> (7)	335,6 <sup>P</sup>	29,9 <sup>P</sup>	653 <sup>P</sup>	544 <sup>P</sup>	393 <sup>P</sup>	1,3	7,9	
			335,2	29,2	652	496 <sup>P</sup>	434 <sup>P</sup>	1,35	8,4	
			335,7	30,1	652	548	383			
						544	409			
						544				

Соединение			$H_{\text{пар}},$ кДж/ моль	$H_{\text{обр}},$ кДж/ моль	$P_{\text{кр}},$ атм	Температура, К			КПВ, % (об.)	
$R^1$	$R^2$	Номер (УУЦ)				$T_{\text{кр}}$	$T_{\text{кип}}$	$T_{\text{всп}}$	$C_{\text{н}}$	$C_{\text{в}}$
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	<b>35</b> (8)		356,3 <sup>p</sup>	26,9 <sup>p</sup>	669 <sup>p</sup>	567 <sup>p</sup>	449 <sup>p</sup>	1,6	9,8
				356,1	26,1	668	<b>495<sup>p</sup></b>	395		
				<u>356,3</u>	<u>27,1</u>	<u>669</u>	<u>571</u>	<u>424</u>		
							<u>567</u>			
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	<b>36</b> (8)		356,3 <sup>p</sup>	26,9 <sup>p</sup>	669 <sup>p</sup>	567 <sup>p</sup>	449 <sup>p</sup>	1,6	9,8
				356,1	26,1	668	<b>509<sup>p</sup></b>	395		
				<u>356,3</u>	<u>27,1</u>	<u>669</u>	<u>571</u>	<u>424</u>		
							<u>567</u>			
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	<b>37</b> (8)		356,3 <sup>p</sup>	26,9 <sup>p</sup>	669 <sup>p</sup>	567 <sup>p</sup>	449 <sup>p</sup>	1,6	9,8
				356,1	26,1	668	<b>517<sup>p</sup></b>	395		
				<u>356,3</u>	<u>27,1</u>	<u>669</u>	<u>571</u>	<u>424</u>		
							<u>567</u>			
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	CH <sub>3</sub>	<b>38</b> (8)		356,3 <sup>p</sup>	26,9 <sup>p</sup>	669 <sup>p</sup>	567 <sup>p</sup>	449 <sup>p</sup>	1,6	9,8
				356,1	26,1	668	<b>517<sup>p</sup></b>	395		
				<u>356,3</u>	<u>27,1</u>	<u>669</u>	<u>571</u>	<u>424</u>		
							<u>567</u>			
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	<b>39</b> (9)		376,9 <sup>p</sup>	24,4 <sup>p</sup>	685 <sup>p</sup>	590 <sup>p</sup>	465 <sup>p</sup>	2,0	12,9
				377,0	23,8	684	<b>513<sup>p</sup></b>	406		
				<u>377,0</u>	<u>24,6</u>	<u>684</u>	<u>591</u>	<u>465</u>		
							<u>590</u>			
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	<b>40</b> (9)		376,9 <sup>p</sup>	24,4 <sup>p</sup>	685 <sup>p</sup>	590 <sup>p</sup>	465 <sup>p</sup>	2,0	12,9
				377,0	23,8	684	<b>532<sup>p</sup></b>	406		
				<u>377,0</u>	<u>24,6</u>	<u>684</u>	<u>591</u>	<u>465</u>		
							<u>590</u>			
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	<b>41</b> (9)		376,9 <sup>p</sup>	24,4 <sup>p</sup>	685 <sup>p</sup>	590 <sup>p</sup>	465 <sup>p</sup>	2,0	12,9
				377,0	23,8	684	<b>538<sup>p</sup></b>	406		
				<u>377,0</u>	<u>24,6</u>	<u>684</u>	<u>591</u>	<u>465</u>		
							<u>590</u>			
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	CH <sub>3</sub>	<b>42</b> (9)		376,9 <sup>p</sup>	24,4 <sup>p</sup>	685 <sup>p</sup>	590 <sup>p</sup>	465 <sup>p</sup>	2,0	12,9
				377,0	23,8	684	<b>538<sup>p</sup></b>	406		
				<u>377,0</u>	<u>24,6</u>	<u>684</u>	<u>591</u>	<u>465</u>		
							<u>590</u>			
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	<b>43</b> (10)		397,6 <sup>p</sup>	22,3 <sup>p</sup>	699 <sup>p</sup>	613 <sup>p</sup>	480 <sup>p</sup>	2,6	17,1
				398,0	22,1	700,3	<b>530<sup>p</sup></b>	417		
							610			
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub>	<b>44</b> (10)		397,6 <sup>p</sup>	22,3 <sup>p</sup>	699 <sup>p</sup>	613 <sup>p</sup>	480 <sup>p</sup>	2,6	17,1
				398,0	22,1	700,3	<b>530<sup>p</sup></b>	417		
							610			
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	<b>45</b> (10)		397,6 <sup>p</sup>	22,3 <sup>p</sup>	699 <sup>p</sup>	613 <sup>p</sup>	480 <sup>p</sup>	2,6	17,1
				398,0	22,1	700,3	<b>530<sup>p</sup></b>	417		
							610			
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	<b>46</b> (10)		397,6 <sup>p</sup>	22,3 <sup>p</sup>	699 <sup>p</sup>	613 <sup>p</sup>	480 <sup>p</sup>	2,6	17,1
				398,0	22,1	700,3	<b>559<sup>p</sup></b>	417		
							610			
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub>	CH <sub>3</sub>	<b>47</b> (10)		397,6 <sup>p</sup>	22,3 <sup>p</sup>	699 <sup>p</sup>	613 <sup>p</sup>	480 <sup>p</sup>	2,6	17,1
				398,0	22,1	700,3	<b>559<sup>p</sup></b>	417		
							610			

Примечания:

1. Символом "p" обозначены данные, рассчитанные с помощью известных методов или взятые из справочной литературы.
2. Курсивом выделены значения, предсказанные по формулам (1)–(8), курсивом с подчеркиванием — по правилу углеродной цепи.
3. Жирным шрифтом выделены сомнительные значения, которые не учитывались при выводе уравнений (1)–(8).

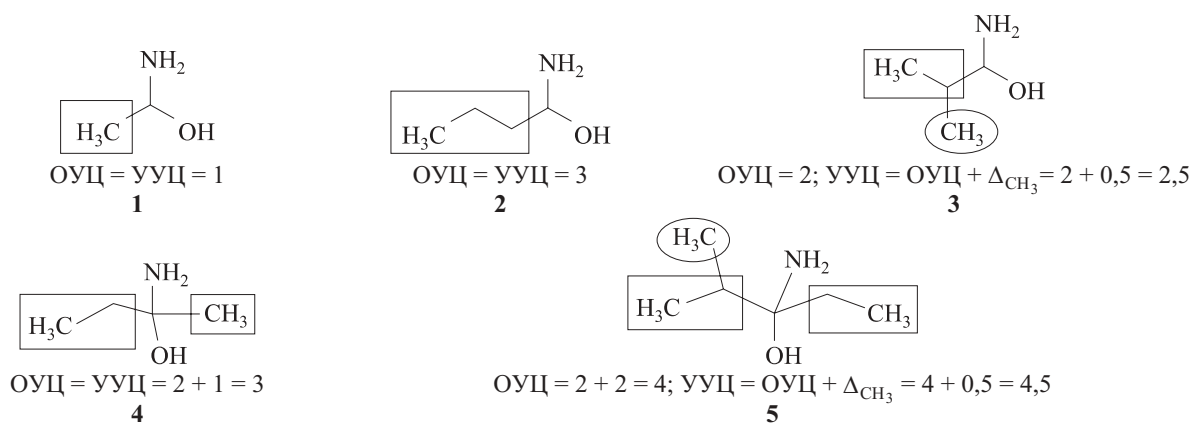


Рис. 2. Примеры определения ОУЦ и УУЦ в производных аминометанола 1-го и 2-го типов:  $\Delta_{CH_3}$  — вклад бокового метильного заместителя

Таблица 2. Уравнения для прогнозирования физико-химических и пожароопасных свойств производных аминометанола

Показатель	Уравнение	Номер	$r^2$	Область применения
$H_{пар}$ , кДж/моль	$H_{пар} = 1,55N_C + 37,95$	1	0,9969	$2 \leq N_C \leq 6$ (только для 1-го типа)
$H_{обр}$ , кДж/моль	$H_{обр} = 20,92N_C + 167,83$	2	0,9997	$2 \leq N_C \leq 11$
$P_{кр}$ , атм	$P_{кр} = 0,34N_C^2 - 8,82N_C + 77,98$	3	0,9982	$2 \leq N_C \leq 11$
$T_{кр}$ , К	$T_{кр} = 16,21N_C + 538,2$	4	0,9923	$2 \leq N_C \leq 11$
$T_{кип}$ , К	$T_{кип} = 0,81N_C^2 + 34,39N_C + 347,19$	5	0,9918	$2 \leq N_C \leq 11$
$T_{всп}$ , К	$T_{всп} = 0,34N_C^2 + 17,08N_C + 279,98$	6	0,9965	$2 \leq N_C \leq 11$
$C_n$ , % (об.)	$C_n = 0,07N_C^2 - 0,89N_C + 3,91$	7	0,9992	$2 \leq N_C \leq 11$
$C_v$ , % (об.)	$C_v = 0,57N_C^2 - 7,77N_C + 33,6$	8	0,9917	$2 \leq N_C \leq 11$

Отличие аминометанолов 2-го типа от кетонов и сложных эфиров [13–16] заключается в том, что в настоящем случае атом углерода функциональной группы Ф ( $H_2N-C-OH$ ) при расчете ОУЦ и УУЦ не учитывается. Примеры определения ОУЦ и УУЦ аминометанолов 1-го и 2-го типов представлены на рис. 2, на котором ОУЦ выделена прямоугольником, а боковые заместители — овалом.

В табл. 1 приведены литературные [3–7] и расчетные значения показателей физико-химических и пожароопасных свойств производных аминометанола, полученные с помощью известных методов ACD/Labs, HSPiP (версия 4), ChemBioOffice 2012 и ГОСТ 12.1.044–89\* [8–11]. В результате обработки этих данных выведены эмпирические уравнения (1)–(8) для прогнозирования теплот образования  $H_{обр}$  и парообразования  $H_{пар}$ , критической температуры

$T_{кр}$ , критического давления  $P_{кр}$ , температур кипения  $T_{кип}$  и вспышки  $T_{всп}$ , концентрационных пределов воспламенения — нижнего  $C_n$  и верхнего  $C_v$  (табл. 2).

Прогнозы свойств дизамещенных аминометанолов по формулам (1)–(8) (см. табл. 2) и правилу углеродной цепи [1–16] дают удовлетворительные результаты.

В заключение отметим, что в результате проведенного исследования предложены эмпирические уравнения, позволяющие прогнозировать физико-химические и пожароопасные свойства производных аминометанола; продемонстрировано действие правила углеродной цепи и свойства функциональных групп для подобных соединений, а также проведен сравнительный анализ расчетных значений, полученных с помощью известных программных комплексов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алексеев С. Г., Кошелев А. Ю., Барбин Н. М. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XVI.  $\alpha, \omega$ -аминоспирты // Пожаровзрывобезопасность. — 2014. — Т. 23, № 12. — С. 13–19.
2. Алексеев С. Г., Мавлютова Л. К., Кошелев А. Ю., Алексеев К. С., Барбин Н. М. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XII. Алкилбензолы и диалкилбензолы // Пожаровзрывобезопасность. — 2014. — Т. 23, № 6. — С. 38–46.



3. Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. I. Алканолы // Пожаровзрывобезопасность. — 2010. — Т. 19, № 5. — С. 23–30.
4. Алексеев К. С., Барбин Н. М., Алексеев С. Г. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. V. Карбоновые кислоты // Пожаровзрывобезопасность. — 2012. — Т. 21, № 7. — С. 35–46.
5. Алексеев К. С., Барбин Н. М., Алексеев С. Г. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. VI. Альдегиды // Пожаровзрывобезопасность. — 2012. — Т. 21, № 9. — С. 29–37.
6. Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Смирнов В. В. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. VII. Нитроалканы // Пожаровзрывобезопасность. — 2012. — Т. 21, № 12. — С. 22–24.
7. 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.
8. Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Калач А. В. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XI. Галогеналканы // Пожаровзрывобезопасность. — 2013. — Т. 22, № 8. — С. 25–37.
9. Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Животинская Л. О. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XIII. Тиоспирты // Пожаровзрывобезопасность. — 2014. — Т. 23, № 8. — С. 15–25.
10. Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XIV. Алкиламины // Пожаровзрывобезопасность. — 2014. — Т. 23, № 9. — С. 27–37.
11. Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. IV. Простые эфиры // Пожаровзрывобезопасность. — 2011. — Т. 20, № 9. — С. 9–16.
12. Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Животинская Л. О. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XV. Тиозэфиры // Пожаровзрывобезопасность. — 2014. — Т. 23, № 11. — С. 24–33.
13. Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. II. Кетоны (часть 1) // Пожаровзрывобезопасность. — 2011. — Т. 20, № 6. — С. 8–15.
14. Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. III. Кетоны (часть 2) // Пожаровзрывобезопасность. — 2011. — Т. 20, № 7. — С. 8–13.
15. Алексеев С. Г., Алексеев К. С., Барбин Н. М. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. VIII. Сложные эфиры (часть 1) // Пожаровзрывобезопасность. — 2013. — Т. 22, № 1. — С. 31–57.
16. Алексеев С. Г., Алексеев К. С., Животинская Л. О., Барбин Н. М. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. X. Сложные эфиры (часть 2) // Пожаровзрывобезопасность. — 2013. — Т. 22, № 5. — С. 9–19.
17. Сайт компании Sigma-Aldrich. URL : <http://www.sigmaaldrich.com/catalog> (дата обращения: 05–07.12.2013).
18. База данных университета Akron. URL : <http://ull.chemistry.uakron.edu/erd> (дата обращения: 08–10.12.2013).
19. Chemical Database DIPPR 801 (Brigham Young University). URL : <http://www.aiche.org/dippr> (дата обращения: 11–13.12.2013).
20. 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.
21. 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.
22. База данных “ChemSpider”. URL : <http://www.chemspider.com> (дата обращения: 15–17.03.2014).
23. HSPiP (версия 4). URL : <http://www.piri-ka.com/ENG/TCPE/index.html> (дата обращения: 01–10.01.2014).
24. Сайт компании Perkin-Elmer. URL : [http://www.cambridgesoft.com/Ensemble\\_for\\_Chemistry/ChemBioOffice/Default.aspx](http://www.cambridgesoft.com/Ensemble_for_Chemistry/ChemBioOffice/Default.aspx) (дата обращения: 10.02.2014).
25. ГОСТ 12.1.044–89\*. ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения. Доступ из сборника НСИС ПБ. — 2013. — № 1 (50).

Материал поступил в редакцию 29 июля 2014 г.

## CORRELATION OF FIRE HAZARD CHARACTERISTICS WITH CHEMICAL STRUCTURE.

### XVIII. ALKYL DERIVATIVES AMINOETHANOL

**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: Alexshome@mail.ru)

**KOSHELEV A. Yu.**, 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 (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: Alekshlev@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: NMBarbin@mail.ru)

#### ABSTRACT

It is performed QSPR research in number of alkyl derivatives aminoethanol. It is shown possibility of applying the carbon rule for prediction physicochemical and fire-dangerous properties of aminoalcohols. Empirical relationships for prediction heat of vaporization ( $H_v$ ), heat of formation ( $H_f$ ), critical pressure ( $P_c$ ), critical temperature ( $T_c$ ), boiling point and flash point, lower and upper flammability limits (LFL, UFL) are found depending on number of carbon atoms ( $N_C$ ):  $H_v = 1,55N_C + 37,95$  ( $2 \leq N_C \leq 6$  — 1<sup>st</sup> type);  $H_f = 20,92N_C + 167,83$  ( $2 \leq N_C \leq 11$ );  $P_c = 0,34N_C^2 - 8,82N_C + 77,98$  ( $2 \leq N_C \leq 11$ );  $T_c = 16,21N_C + 538,2$  ( $2 \leq N_C \leq 11$ );  $TB = 0,81N_C^2 + 34,39N_C + 347,19$  ( $2 \leq N_C \leq 11$ );  $FP = 0,34N_C^2 + 17,08N_C + 279,98$  ( $2 \leq N_C \leq 11$ );  $LFL = 0,07N_C^2 - 0,89N_C + 3,91$  ( $2 \leq N_C \leq 11$ );  $UFL = 0,57N_C^2 - 7,77N_C + 33,6$  ( $2 \leq N_C \leq 11$ ). Flash point values of alkyl derivatives aminoethanol calculated by the ACD/Labs, HSPiP, ChemBioOffice 2012, Interstate standard 12.1.044–89\* method.

**Keywords:** aminoethanol; indicator; flash point; dependence; predict; chemoinformatics.

#### REFERENCES

- Alexeev S. G., Koshelev A. Yu., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. XVI.  $\alpha,\omega$ -Alkanolaminy [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XVI.  $\alpha,\omega$ -Alkanolamines]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 12, pp. 13–19.
- Alexeev S. G., Mavlyutova L. K., Koshelev A. Yu., Alexeev K. S., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. XII. Alkilbenzoly i dialkilbenzoly [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XII. Alkyl benzenes and dialkyl benzenes]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 6, pp. 38–46.
- Alexeev S. G., Barbin N. M., Alexeev K. S., Orlov S. A. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. I. Alkanoly [Correlation of fire hazard indices with chemical structure. I. Alcohols]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2010, vol. 19, no. 5, pp. 23–30.
- Alexeev K. S., Barbin N. M., Alexeev S. G. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. V. Karbonovyye kisloty [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. V. Carboxylic acids]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 21, no. 7, pp. 35–46.
- Alexeev K. S., Barbin N. M., Alexeev S. G. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. VI. Aldegidy [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. VI. Aldehydes]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 21, no. 9, pp. 29–37.
- Alexeev S. G., Barbin N. M., Smirnov V. V. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. VII. Nitroalkany [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. VII. Nitroalkanes]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 21, no. 12, pp. 22–24.



7. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Zhihotinskaya L. O. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. IX. Khloral'kany (chast 2) [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. IX. Chloroalkanes (part 2)]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 22, no. 4, pp. 13–21.
8. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Kalach A. V. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. XI. Galogenalkany [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XI. Haloalkanes]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2013, vol. 22, no. 8, pp. 25–37.
9. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Zhihotinskaya L. O. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. XIII. Tiospirty [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XIII. Alkylthiols]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 8, pp. 15–25.
10. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. XIV. Alkilaminy [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XIV. Alkylamines]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 9, pp. 27–37.
11. Alexeev S. G., Barbin N. M., Alexeev K. S., Orlov S. A. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. IV. Prostyye efiry [Correlation of fire hazard indices with chemical structure. IV. Ethers]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2011, vol. 20, no. 9, pp. 9–16.
12. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Zhihotinskaya L. O. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. XV. Tioefiry [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XV. Thioethers]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 11, pp. 24–33.
13. Alexeev S. G., Barbin N. M., Alexeev K. S., Orlov S. A. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. II. Ketony (chast 1) [Correlation of fire hazard indices with chemical structure. II. Ketones (part 1)]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2011, vol. 20, no. 6, pp. 8–15.
14. Alexeev S. G., Barbin N. M., Alexeev K. S., Orlov S. A. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. III. Ketony (chast 2) [Correlation of fire hazard indices with chemical structure. III. Ketones (part 2)]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2011, vol. 20, no. 7, pp. 8–13.
15. Alexeev S. G., Alexeev K. S., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. VIII. Slozhnyye efiry (chast 1) [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. VIII. Esters (part 1)]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 22, no. 1, pp. 31–57.
16. Alexeev S. G., Alexeev K. S., Zhihotinskaya L. O., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharной opasnosti s khimicheskim stroeyeniym. X. Slozhnyye efiry (chast 2) [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. X. Esters (part 2)]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 22, no. 5, pp. 9–19.
17. Sigma-Aldrich database. Available at: <http://www.sigma-aldrich.com/catalog> (Accessed 5–7 December 2013).
18. Akron University database. Available at: <http://ull.chemistry.uakron.edu/erd> (Accessed 8–10 December 2013).
19. Chemical Database DIPPR 801. Available at: <http://www.aiche.org/dippr> (Accessed 11–13 December 2013).
20. Korolchenko A. Ya., Korolchenko D. A. *Pozharovzryvopasnost 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.
21. Korolchenko A. Ya., Korolchenko D. A. *Pozharovzryvopasnost 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.
22. ChemSpider database. Available at: <http://www.chemspider.com> (Accessed 15–17 March 2014).
23. HSPiP (version 4). Available at: <http://www.piri-ka.com/ENG/TCPE/index.html> (Accessed 1–10 January 2014).
24. Perkin-Elmer. Available at: [http://www.cambridgesoft.com/Ensemble\\_for\\_Chemistry/ChemBioOffice/Default.aspx](http://www.cambridgesoft.com/Ensemble_for_Chemistry/ChemBioOffice/Default.aspx) (Accessed 10 February 2014).
25. 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).