



МАТЕРІАЛИ
ДРУКУЮТЬСЯ
УКРАЇНСЬКОЮ,
АНГЛІЙСЬКОЮ ТА
ПОЛЬСЬКОЮ
МОВАМИ

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

ВІСНИК
ЛЬВІВСЬКОГО
ДЕРЖАВНОГО УНІВЕРСИТЕТУ
БЕЗПЕКИ ЖИТТЄДІЯЛЬНОСТІ
№ 23, 2021
заснований у 2007 році

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ:

Попович В.В., *головний редактор*, д.т.н., доцент, Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Смогр О.О.**, *заступник головного редактора*, к.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Степова К.В.**, *заступник головного редактора*, к.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Івануса А.І.**, *відповідальний секретар*, к.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Аніщенко О.В.**, д.пед.н., проф., Інститут педагогічної освіти і освіти дорослих імені Івана Зязюна НАПН України, Україна; **Борзов Ю.О.**, к.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Бунь Р.А.**, д.т.н., проф., Національний університет «Львівська політехніка», Україна; **Васянович Г.П.**, д.пед.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Вдович С.М.**, к.пед.н., с.н.с., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Гащук П.М.**, д.т.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Гіллмор Гевін**, PhD, проф., Кінгстонський університет, Великобританія; **Гуліда Е.М.**, д.т.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, **Домінік А.М.**, к.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Дончев Тодор**, PhD, доц., Кінгстонський університет, Великобританія; **Зачко О.Б.**, д.т.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Карабин В.В.**, д.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Ковалишин В.В.**, д.т.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Коваль Г.В.**, д.держ.упр., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Коваль М.С.**, д.пед.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Козяр М.М.**, д.пед.н., проф., Член-кореспондент НАПН України, Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Костишин Е.І.**, к.і.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Кузик А.Д.**, д.с.-г.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Купчак М.Я.**, к.пед.н., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Лабач М.М.**, к.філол.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Литвин А.В.**, д.пед.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Логвиненко В.М.**, к.філос.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Лозинський Р.Я.**, к.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Мартин Є.В.**, д.т.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Михалічко Б.М.**, д.х.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Нагурський О.А.**, д.т.н., проф., Національний університет «Львівська політехніка», Україна; **Повстин О.В.**, д.пед.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Придатко О.В.**, к.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Руденко Л.А.**, д.пед.н., с.н.с., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Рудик Ю.І.**, к.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Самберг Андре**, д.т.н., проф., член програмного комітету Міжнародного товариства управління в надзвичайних ситуаціях (TIEMS), Бельгія; **Самогий В.В.**, д.т.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Сірко Р.І.**, д.психол.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Слива Томаш**, PhD, Гірничо-металургійна академія ім. Станіслава Сташиця, Польща; **Стародуб Ю.П.**, д.ф.-м.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Тацій Р.М.**, д.ф.-м.н., проф., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Ткачук Р.Л.**, д.т.н., доц., Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, Україна; **Тригуба А.М.**, д.т.н., проф., Львівський національний аграрний університет, Україна; **Турпак С.М.**, д.т.н., проф., Національний університет «Запорізька політехніка», Україна; **Шукіс Ріголдас**, PhD, Вільнюський технічний університет ім. Гедиміна, Литва; **Ярош Войцех**, PhD, Головна школа пожежної служби, Польща.

ISSN 2078-4643 (print)
ISSN 2708-1389 (online)

DOI: 10.32447/20784643.23.2021.00

ЗАСНОВНИК І ВИДАВЕЦЬ

Львівський державний університет
безпеки життєдіяльності (ЛДУ БЖД)

ЗАРЕЄСТРОВАНО

Державною реєстраційною службою України
12.03.2015 р. Серія КВ №20328-11128Р

**ВНЕСЕНО ДО ПЕРЕЛІКУ ФАХОВИХ ВИДАНЬ УКРАЇНИ
ЯК ДРУКОВАНЕ ПЕРІОДИЧНЕ ВИДАННЯ КАТЕГОРІЇ «Б»**
(Наказ МОН України від 02.07.2020 року №886 та від 24.09.2020 року №1188)

ВНЕСЕНО ДО БІБЛОГРАФІЧНИХ БАЗ ДАНИХ:
«*НАУКОВА ПЕРІОДИКА УКРАЇНИ*» В НАЦІОНАЛЬНІЙ БІБЛІОТЕЦІ УКРАЇНИ
ІМ. В.І. ВЕРНАДСЬКОГО, «*ULRICH'S PERIODICALS DIRECTORY*»,
«*GOOGLE SCHOLAR*»

Рекомендовано до друку рішенням Вченої ради ЛДУ БЖД
(Протокол № 9 від 03.06.2021 р.)

Літературний редактор Падик Г.М.

Технічний редактор Сорочич М.П.

Комп'ютерна верстка Климус М.В.

Друк на різнографі Петролюк Н.І.

Відповідальний за друк Фльорко М.Я.

АДРЕСА РЕДАКЦІЇ: ЛДУ БЖД, вул. Клепарівська, 35, м. Львів, 79007
Контактні телефони: (032) 233-24-79, тел/факс 233-00-88
E-mail: visnyk@ldubgd.edu.ua

Збірник наукових праць "Вісник Львівського державного університету безпеки життєдіяльності" видається в університеті з 2007 року. Запланована періодичність: 2 рази на рік. Тематична спрямованість: науки про освіту, менеджмент, екологія, комп'ютерні науки та інформаційні технології, кібербезпека, хімічні технології та інженерія, технології захисту навколишнього середовища, пожежна безпека, цивільна безпека, транспортні технології (за видами), публікація рекламних матеріалів та матеріалів конференцій, семінарів.

Здано в набір 15.06.2021. Підписано до друку 23.06.2021.
Формат 60x84^{1/3}. Папір офсетний. Ум. друк. арк. 6,75.
Гарнітура Times New Roman. Друк на різнографі
Наклад: 100.
Друк: Сектор видавничої діяльності ЛДУ БЖД
вул. Клепарівська, 35, м. Львів, 79007.

НАУКОВО-МЕТОДИЧНІ

ЕКОЛОГІЯ

Б. Я. Бойчук, А. Д. Кузык, Л. В. Суса
ОЦІНЮВАННЯ АНТРОПОГЕННОГО
ВПЛИВУ НА РІЧКУ ПРУТ В ОКОЛИЦЯХ
МІСТА ЯРЕМЧЕ ЗА ПОКАЗНИКАМИ
РІВНЯ ЗАБРУДНЕННЯ ДОННИХ
ВІДКЛАДЕНЬ

5

І.В. Уряднікова
ВИЗНАЧЕННЯ ТЕХНОГЕННИХ РИЗИКІВ
В ПЕРЕХІДНИХ СТАНАХ ПРИ
ЕКСПЛУАТАЦІЇ СИСТЕМ
ВОДООЧИЩЕННЯ В
ТЕПЛОЕНЕРГЕТИЦІ

11

КОМПЮТЕРНІ НАУКИ

А.Р. Харів, А.Е. Лагун
АВТОМАТИЗОВАНА СИСТЕМА
МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ
ДІЯЛЬНОСТІ ПІДПРИЄМСТВА

20

КІБЕРБЕЗПЕКА

О.І. Полотай
ФІЗИЧНИЙ ЗМІСТ КОМП'ЮТЕРНОЇ
СТЕГАНОГРАФІЇ

27

ХІМІЧНІ ТЕХНОЛОГІЇ ТА
ІНЖЕНЕРІЯ

*М.Я. Карвацька, О.І. Лавренюк,
В.-П.О. Пархоменко, Б.М. Михалічко*
КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
ІНГІБУЮЧОГО ВПЛИВУ ВОДНИХ
РОЗЧИНІВ НЕОРГАНІЧНИХ СОЛЕЙ
КУПРУМУ(II) НА ГОРІННЯ
ВУГЛЕВОДНІВ

33

ECOLOGY

B.Ya. Boychuk, A.D. Kuzyk, L.V. Sysa
EVALUATING THE ANTHROPOGENIC
IMPACT ON THE PRUT RIVER NEAR
YAREMCHÉ-TOWN ON THE POLLUTION
LEVEL INDICES
OF BOTTOM SEDIMENTS

I. V. Uriadnikova
DETERMINATION OF TECHNOGENIC
RISKS IN TRANSITIONAL STATES
DURING OPERATION OF WATER
TREATMENT SYSTEMS IN HEAT ENERGY

COMPUTER SCIENCE

A. R. Khariv, A. E. Lagun
AUTOMATED MODELING AND
FORECASTING SYSTEM OF ENTERPRISE
ACTIVITIES

CYBERSECURITY

O.I Polotai, O.I Belej, N.A. Maltseva
PHYSICAL CONTENT OF COMPUTER
STEGANOGRAPHY

CHEMICAL TECHNOLOGY AND
ENGINEERING

*M.Ya. Karvats'ka, H. Lavrenyuk, V.-P.O.
Parhomenko, B. Mykhalichko*
QUANTUM CHEMICAL SIMULATION OF
THE INHIBITORY EFFECT OF
AQUEOUS SOLUTIONS OF INORGANIC
COPPER(II) SALTS ON THE COMBUSTION
OF HYDROCARBONS

М.Я. Карвацька, О.І. Лавренюк, В.-П.О. Пархоменко, Б.М. Михалічко
Львівський державний університет безпеки життєдіяльності

КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ІНГІБУВАЛЬНОГО ВПЛИВУ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ НЕОРГАНІЧНИХ СОЛЕЙ КУПРУМУ(II) НА ГОРІННЯ ВУГЛЕВОДНІВ

Вступ. Пошук хімічних речовин, здатних проявляти значну вогнегасну дію та створення на їх основі нових вогнегасних засобів – це вкрай актуальне завдання пожежної безпеки. З літературних джерел відомо, що доволі ефективний інгібувальний вплив на горіння вуглеводнів здатні чинити водні вогнегасні речовини (ВВР) нового типу на основі розчинених у воді неорганічних солей перехідних металів, зокрема, хлоридів купруму(II). Втім, механізм інгібуння горіння вуглеводнів цим класом речовин досі до кінця не вивчений. Проте достовірна інформація про процеси, які відбуваються в полум'ї після внесення туди аерозолу згаданих ВВР, дає змогу здійснювати систематичний пошук більш оптимального хімічного складу розчинених у воді неорганічних солей інших *d*-металів, і таким чином створювати вогнегасні засоби нового покоління.

Мета. Розкрити особливості взаємодії концентрованих водних розчинів хлоридів купруму(II) з хімічно активними частинками в полум'ї.

Методи. Квантово-хімічні розрахунки хімічної активності радикалів, які з'являються в полум'ї та фізико-хімічних процесів, що відбуваються в полум'ї після внесення туди аерозолу ВВР.

Результати. Розрахунковими методами досліджено механізм вогнегасної дії водних розчинів неорганічних солей купруму(II) на горіння вуглеводнів. Була встановлена послідовність стадій хімічних перетворень, які відбуваються в полум'ї під час інгібуння горіння вуглеводнів концентрованими розчинами CuCl_2 та $\text{K}_2[\text{CuCl}_4]$, та теплові ефекти всіх реакцій, що супроводжують кожне з цих постадійних перетворень. Виявилось, що стадії взаємодії газоподібних молекул Cu_2Cl_4 з радикалами $\cdot\text{OH}$ і $\cdot\text{H}$ в полум'ї з утворенням спочатку радикально-молекулярного комплексу, а потім і молекулярного комплексу є визначальними в цьому процесі інгібуння і відображають процеси переривання ланцюгових реакцій, тобто деактивації радикалів в полум'ї.

Висновки Отже, методом квантово-хімічних розрахунків був запропонований механізм інгібуння горіння вуглеводнів солями купруму(II). Цей процес описується асоціативним механізмом, визначальний елементарний акт якого здійснюється за схемою приєднання в полум'ї активних радикалів (частинок $\cdot\text{OH}$) до газоподібних молекул Cu_2Cl_4 з утворенням радикально-молекулярного комплексу $[\{\text{Cu}(\cdot\text{OH})\text{Cl}_2\}_2]$ і подальшою його деактивацією частинками $\cdot\text{H}$. Цей процес є стереоспецифічним, де найбільш ймовірним місцем атаки є координований з Cu атом O частинки $\cdot\text{OH}$, на p_z -орбіталі якого розміщений неспарений електрон.

Ключові слова: неорганічні солі купруму(II), водні вогнегасні речовини, інгібітори горіння, квантово-хімічне моделювання.

М.Я. Karvats'ka, H. Lavrenyuk, V.-P.O. Parhomenko, B. Mykhalichko
L'viv State University of Life Safety

QUANTUM CHEMICAL SIMULATION OF THE INHIBITORY EFFECT OF AQUEOUS SOLUTIONS OF INORGANIC COPPER(II) SALTS ON THE COMBUSTION OF HYDROCARBONS

Introduction. The search for chemicals that would have an effective fire extinguishing effect and the development of new fire extinguishers based on them is an extremely important problem of fire safety. It is known from the literature that new aqueous fire extinguishing agents (AFEAs) based on dissolved inorganic salts of transition metals, in particular, copper(II) chloride salts, have a rather efficient inhibitory effect on the hydrocarbon flame. However, the mechanism of inhibition of hydrocarbon combustion by this class of substances is not completely ascertained. However, it is reliable information about the processes that take place in the flame after the bringing in there of the aerosol of the mentioned AFEA will allow a systematic search for more optimal chemical composition of dissolved inorganic salts of *d*-metals.

Purpose. The purpose of the work is to reveal the peculiarities of the interaction of concentrated aqueous solutions of copper(II) chloride salts with chemically active flame particles.

Methods. Quantum chemical calculations of the chemical activity of radicals that appear in the flame and the physicochemical processes that occur in the flame after the bringing on there of AFEA aerosol.

Results. The mechanism of a fire-extinguishing effect of aqueous solutions of inorganic copper(II) salts on a hydrocarbon flame is investigated by a calculation method. The sequence of stages of chemical processes that occur in the flame during the inhibiting combustion of hydrocarbons by AFEAs—concentrated solutions of CuCl_2 and $\text{K}_2[\text{CuCl}_4]$ —and the thermal effects of all reactions that accompany each of these stepwise transformations were ascertained. The stages of the interaction of gaseous Cu_2Cl_4 molecules with $\times\text{OH}$ and $\times\text{H}$ radicals in flame with the formation of first a radical-molecular complex and then a molecular complex are decisive in the process of inhibition and display the processes of interruption of chain reactions, i.e. deactivation of radicals in a flame.

Conclusion. Thus, using the method of quantum chemical calculations the mechanism of inhibition of hydrocarbon combustion by copper(II) salts was offered. The mechanism of this process is considered to be associative, the decisive elementary act of which is carried out according to the scheme of addition of active radicals of a flame ($\times\text{OH}$ particles) to gaseous molecules Cu_2Cl_4 with the formation of radical-molecular complex $[\{\text{Cu}(\times\text{OH})\text{Cl}_2\}_2]$ and with its subsequent deactivation by $\times\text{H}$ particles.

Keywords: inorganic copper(II) salts, aqueous fire extinguishing agents, combustion inhibitor, quantum-chemical simulation

Постановка проблеми. Пошук та систематичне дослідження вогнегасних властивостей нових хімічних речовин, які б з великою ефективністю призупиняли горіння вуглеводнів, а також проявляли чималу вогнегасну дію – це одне з пріоритетних завдань пожежної безпеки.

Вода – найпоширеніший засіб пожежогашіння, завдяки її унікальним фізико-хімічним властивостям. Як вогнегасний засіб вода проявляє переважно охолоджувальну та ізолювальну дію. Втім, охолоджувальний ефект води можна суттєво посилити (тобто зменшити витрати води на одиницю площі пожежі а, отже, й зменшити тривалість гасіння пожеж), якщо використовувати воду у вигляді аерозолу [1–3]. Однак через хімічну інертність води до більшості речовин і матеріалів, вона зовсім не проявляє хімічного впливу на процес горіння [4].

У світовій практиці протипожежного захисту об'єктів різного призначення великого поширення набувають технології розприскування водних вогнегасних речовин (ВВР), які найповніше забезпечують реалізацію як унікальних фізико-хімічних властивостей води, так і інгібувальної функції розчинених у воді солей [5, 6]. В практиці пожежогашіння у ролі розчинених у воді вогнегасних речовин, інгібіторів горіння, найчастіше використовують солі *s*-металів та амонію [7–9].

Аналіз останніх досліджень і публікацій
Нещодавно з'явилися публікації стосовно розробки нових ВВР на основі солей перехідних металів. Ефективність гасіння пожеж аерозолями водних розчинів цих солей зумовлена особливими хімічними властивостями *d*-металів. У підсумку ці вогнегасні композиції проявляють високу здатність призупиняти поширення полум'я. У ролі ВВР використовувались такі солі *d*-металів, як CoCl_2 , NiCl_2 , MnCl_2 , FeCl_2 тощо. Серед інгібіторів

горіння на особливу увагу заслуговують комплексні сполуки калію і феруму [10], зокрема концентровані водні розчини калій гексаціаноферату(II) $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ (жовта кров'яна сіль) і, особливо, калій гексаціаноферату(III) $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ (червона кров'яна сіль) [11]. Так, 30% водний розчин червоної кров'яної солі спроможний дуже ефективно придушувати горіння вуглеводнів.

В роботах [12, 13] як ВВР для гасіння осередків займань класу В використовували сполуки купруму(II) – 40% водні розчини CuCl_2 і $\text{K}_2[\text{CuCl}_4]$. Результати тестувань засвідчили, що вже короткотривала дія цих ВВР на вуглеводневе полум'я спричиняє миттєве його гасіння. Втім, механізм інгібування горіння вуглеводнів за допомогою цього класу ВВР так до кінця не встановлений. Проте саме достовірні відомості про процеси, які відбуваються в полум'ї після внесення туди аерозолу згаданих ВВР дають змогу здійснювати систематичні пошуки хімічних речовин на основі неорганічних солей інших *d*-металів.

Мета роботи – встановити механізм інгібування горіння вуглеводнів концентрованими водними розчинами CuCl_2 і $\text{K}_2[\text{CuCl}_4]$, використовуючи квантово-хімічне моделювання взаємодії цих ВВР з хімічно активними частинками в полум'ї.

Виклад основного матеріалу. Отримані в роботах [12, 13] результати з експериментального визначення вогнегасної ефективності ВВР приготуваних з концентрованих водних розчинів CuCl_2 і $\text{K}_2[\text{CuCl}_4]$, дають нам цінну інформацію, яка допомагає краще зрозуміти механізм інгібування горіння вуглеводнів. Нагадаємо, що у разі гасіння горіння вуглеводнів водними розчинами солей купруму(II), хімічний ефект добавок CuCl_2 чи $\text{K}_2[\text{CuCl}_4]$ домінує над ефектом охолодження розчинника. Також добре відомо, що купрум(II) хлорид при підвищених температурах легко випаровується, утворюючи густий коричневий дим. При

цьому газоподібний CuCl_2 здатний взаємодіяти з різними хімічними радикалами в полум'ї [14], утворюючи складні аддукти. Очевидно, що така поведінка водних розчинів CuCl_2 і $\text{K}_2[\text{CuCl}_4]$ у полум'ї багато в чому буде визначати кінцевий результат інгібування.

Таблиця

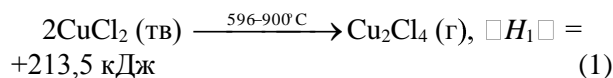
Спектри випромінювання деяких хімічних частинок у вуглеводневому полум'ї

Радикал	λ , нм	Радикал	λ , нм
$\square\text{OH}$	306,4	$\text{HCO}\square$	250,0–400,0
$\square\text{NH}$	334,6	$\square\text{CH}$	430,0–438,0
$\square\text{CN}$	349,5–353,4; 387,0	$\square\text{C}_2$	467,0–472,0; 513,0–517,0; 559,0–564,0
$\square\text{H}$	396,3; 410,1; 434,0; 487,1; 656,3	H_2O^*	591,0; 616,0– 625,0
$\square\text{Cu}$	324,7; 453,1		

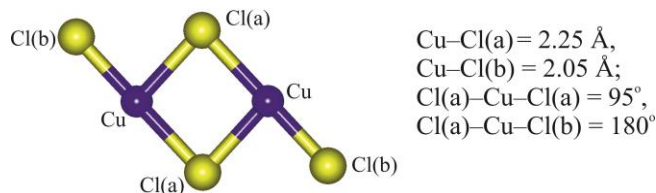
Перш ніж приступити до розгляду цього механізму інгібування горіння, згадаймо яку структуру має полум'я і які хімічні частинки присутні у полум'ї при горінні вуглеводнів. Відомо, що горіння вуглеводнів має яскраво виражені три зони, які різняться між собою температурою та природою хімічних радикалів [15]. Так, у 1-й зоні полум'я, яку ще називають підготовчою, відбувається початкове руйнування горючої речовини. Температура полум'я в цій зоні є найнижчою, а характер утворених хімічних радикалів ($\square\text{C}_2$, $\square\text{CO}$, $\square\text{CH}$, $\square\text{H}$ тощо) – відновний. Навпаки, у 2-й зоні, яка називається зоною горіння, хімічні радикали відновного характеру окиснюються до CO_2 і H_2O , в основному за завдяки дифузії кисню з атмосфери у полум'я. Нарешті, у 3-й зоні, яка називається зоною продуктів горіння, тепло і продукти горіння залишають межі полум'я переважно завдяки конвекційним потокам. Температура полум'я в цій зоні дещо нижча, ніж у зоні горіння. Як показують квантово-хімічні обчислення, при високих температурах хімічні радикали та молекули випромінюють електромагнітні хвилі певної довжини, забарвлюючи полум'я (див. табл.).

Спектральна смуга 306,4 нм генерується частинками $\cdot\text{OH}$, які відповідають за розгалуження ланцюгової реакції горіння. Відразу після потрапляння аерозолу водного розчину CuCl_2 (чи $\text{K}_2[\text{CuCl}_4]$) у полум'я розпочинається перебіг складних фізико-хімічних процесів, які призводять до переривання цих ланцюгових реакцій. На стадії потрапляння рідкого аерозолу ВВР у полум'я відбувається миттєве випаровування води, яке супроводжується поглинанням великої кількості тепла ($43,94 \text{ кДж}\square\text{моль}^{-1}$), після чого утво-

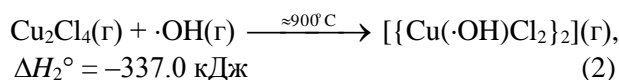
рюється твердий аерозоль CuCl_2 (густий коричневий дим). В 2-й зоні полум'я тверді частинки CuCl_2 швидко випаровуються, поглинаючи тепло ($213,5 \text{ кДж}\square\text{моль}^{-1}$) і перетворюючись на газоподібні молекули Cu_2Cl_4 :



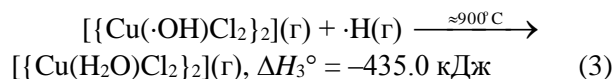
Автори [16] вивчали стереохімію газоподібних частинок Cu_2Cl_4 , які мають форму плоских молекул, показаних на схемі:



Можна припустити, що поява дискретних молекул Cu_2Cl_4 у полум'ї буде забезпечувати позитивний результат інгібування, оскільки плоский фрагмент Cu_2Cl_4 з легкістю зв'язуватиметься з хімічними радикалами $\cdot\text{OH}$. В результаті виникне радикально-молекулярний аддукт $[\{\text{Cu}(\square\text{OH})\text{Cl}_2\}_2]$. Це призводить до виділення теплової енергії в кількості 337 кДж на моль утворених зв'язків $\text{Cu}(\text{II})-(\square\text{OH})$:



Остаточна деактивація хімічних радикалів відбувається внаслідок зв'язування атомів гідрогену ($\cdot\text{H}$) з частинками $\cdot\text{OH}$, координованими центрами $\text{Cu}(\text{II})$. Це призводить до появи молекулярного аква-комплексу $[\{\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})\text{Cl}_2\}_2]$ і виділення тепла (435 кДж):



Сtereохімічний аспект взаємодії молекул Cu_2Cl_4 з хімічними радикалами $\cdot\text{OH}$ та $\cdot\text{H}$ у полум'ї показано на рис. 1. Слід зазначити, що максимально можлива кількість координаційних точок для молекули Cu_2Cl_4 становить 4, тобто 1 моль Cu_2Cl_4 може деактивувати 4 молі частинок $\cdot\text{OH}$. Це пояснює той факт, що для гасіння горіння вуглеводнів потрібна мізерна кількість ВВР.

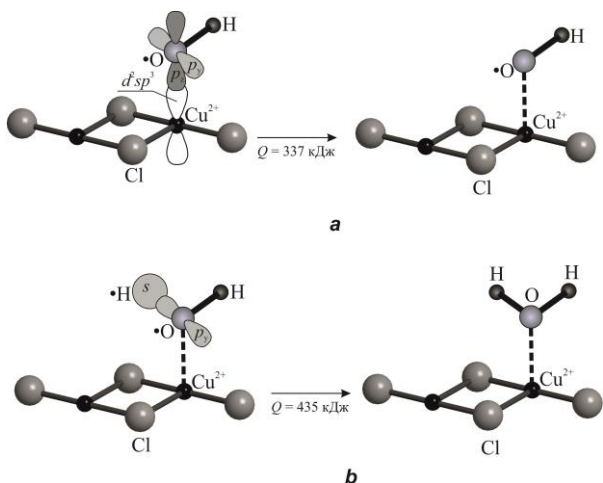
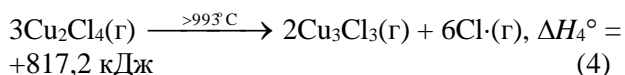
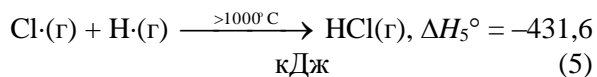


Рисунок 1 – Стереохімічний аспект реакції 2 (a) і 3 (b)

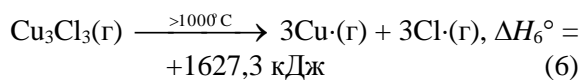
Під впливом високих температур ($\approx 1000^\circ\text{C}$) молекули Cu_2Cl_4 диспропорціонують на Cu_3Cl_3 і $\square\text{Cl}$ [17]:



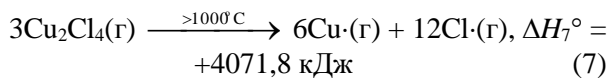
Окисно-відновна реакція (4) ендотермічна, однак в момент утворення атоми хлору взаємодіють з атомами водороду генеруючи молекули HCl зі значним екзотермічним ефектом:



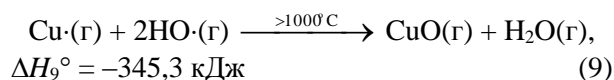
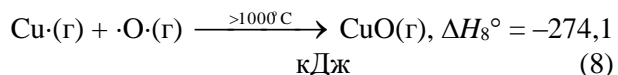
Вище 1000°C газоподібні молекули Cu_3Cl_3 розпадаються на частинки $\text{Cu}\cdot$ і $\text{Cl}\cdot$:



Енергетичний баланс реакцій (4) і (6) дає величезну сумарну кількість поглинутого тепла у разі розкладання молекул Cu_2Cl_4 :



У разі, коли температура полум'я досягне позначки у 2000°C , тоді можуть переважати процеси іонізації атомів $\text{Cu}\cdot$ та $\text{Cl}\cdot$. Проте ймовірність екзотермічного процесу окиснення атомів $\text{Cu}\cdot$ хімічними радикалами $\cdot\text{O}\cdot$ та $\text{HO}\cdot$, а також утворення продукту CuO буде значно вищою:



Висновки. Аналіз інформації, отриманої в процесі вивчення вогнегасних властивостей CuCl_2 -вмісних ВВР, дав змогу виявити особливості поведінки концентрованих водних розчинів купрум(II) хлориду у полум'ї при горінні вуглеводнів. Це дозволило методом квантово-хімічних розрахунків дати адекватну інтерпретацію механізму придушення горіння вуглеводнів концентрованими водними розчинами солей купрум(II). Цей процес описується асоціативним механізмом, визначальний елементарний акт якого протікає за схемою приєднання у полум'ї активних радикалів (частинки $\cdot\text{OH}$) до газоподібних молекул Cu_2Cl_4 з утворенням радикально-молекулярного комплексу $[\{\text{Cu}\cdot(\text{OH})\text{Cl}_2\}_2]$ і подальшою його дезактивацією частинками $\cdot\text{H}$. Описаний процес є стереоспецифічним, де найбільш ймовірним місцем атаки буде координований на атомі Cu атом O частинок $\cdot\text{OH}$, на p_z -орбіталі якого знаходиться неспарений електрон. Завдяки цій взаємодії ланцюгові реакції у полум'ї перериваються, і горіння припиняється.

Список літератури

- Абрамов Ю.А., Бесараб С.Н., Садковой В.П. Условия и временные характеристики тушения пожара класса В распыленной водой. *Проблемы пожарной безопасности*. Харьков, 2011. Вып. 30. С. 3-7.
- Дударев В.В., Горовых О.Г., Бардушко С.Н., Шмулевцов И.А., Бобрышева С.Н. Влияние дисперсности распыленной воды на интенсивность ее подачи при тушении пожара в закрытом объеме. *Научный вестник УкрНДІПБ*. Київ, 2009. Т. 19, № 1. С. 149-157.
- Копылов Н.П., Чибисов А.Л., Душкин А.Л., Кудрявцев Е.А. Изучение закономерностей тушения тонкораспыленной водой модельных очагов пожара. *Пожарная безопасность*, 2008. № 4. С. 45-58.
- Алеханов Ю.В., Блинецов М.В., Власов Ю.А., Дудин В.И., Левушов А.Е., Логвинов А.И., Ломтев С.А., Мешков Е.Е. Взаимодействие диспергированной воды с пламенем. *Письма в ЖТФ*, 2003. Т. 29, № 6. С. 1-6.
- Коврегин В.В., Калугин В.Д., Кустов М.В., Сидоренко О.В. Повышение эффективности пожаротушающих составов на основе воды за счет добавок различных реагентов. *Вестник ЛДУБЖД*. Львів, 2010. № 4. Ч. 1. С. 136-142.
- Турчин А.І., Антонов А.В. Теоретичні і практичні питання застосування технологій тонкого розпилювання водних вогнегасних речовин. *Научный вестник УкрНДІПБ*. Київ, 2008. Т. 17, № 1. С. 138-145.

7. Турчин А.І., Боровиков В.О., Антонов А.В., Козяр Н.М. Дослідження з визначення показників якості деяких водних вогнегасних речовин. *Науковий вісник УкрНДІПБ*. Київ, 2008. Т. 18, № 2. С. 110-115.

8. Водна вогнегасна речовина для гасіння тонкорозпиленними струменями пожеж класів «А» та «В» за ГОСТом 27331-87 з використанням від -30 до +50°C: пат. № 52969 U, Україна. № u200911293; Заявл. 06.11.2009; Опубл. 27.09.2009; Бюл. № 18.

9. Водна вогнегасна речовина для гасіння тонкорозпиленними струменями пожеж класів «А» та «В» за ГОСТом 27331-87: пат. № 96797 C2, Україна. № a200911271; Заявл. 06.11.2009; Опубл. 12.12.2011; Бюл. № 23.

10. Shmakov A.G., Korobeinichev O.P., Shvartsberg V.M., Yakimov S.A., Knyazkov D.A., Komarov V.F., Sakovich G.V. Testing organophosphorus, organofluorine, and metal-containing compounds and solid-propellant gas-generating compositions doped with phosphorus-containing additives as effective fire suppressants. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 2006. Vol. 42(6). P. 678-687.

11. Korobeinichev O.P., Shmakov A.G., Chernov A.A., Bol'shova T.A., Shvartsberg V.M., Kutsenogii K.P., Makarov V.I., Fire suppression by aqueous solutions salts aerosols. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. Vol. 46(1). P. 20-25.

12. Mykhalitchko O.B., Godovanets N.M., Shcherbina O.N., Mykhalitchko B.M., Preproduction testing extinguishing efficiency of a novel water-based fire-extinguishing agent on basis of $K_2[CuCl_4]$ compound. *Fire safety*. 2014. No. 24. P. 111-115.

13. Годованець Н.М., Михалічко Б.М., Петровський В.Л., Щербина О.М. Вогнегасні випробування водної вогнегасної речовини на основі купрум(II) хлориду. *Проблеми пожежної безпеки*. Харків, 2013. Вып. 33. С. 38-44.

14. Cotton F.A., Wilkinson G., *Advanced inorganic chemistry*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1980.

15. Jarosinski J., Veysiere B. *Combustion phenomena: Selected mechanisms of flame formation, propagation and extinction*. CRC Press, Boca Raton, 2009.

16. Van Liere M., De Vore T. C., The infrared spectrum of $CuCl$ and $CuCl_2$. *High Temp. Sci.* 1984. Vol. 18(3). P. 185-195.

17. Galwey A.K., Brown M.E. *Thermal decomposition of ionic solids*. Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1999.

References

1. Abramov Y.A., Besarab S.N., Sadkovoy V.P. Terms and time characteristics of extinguishing fire class B by water spray. *Problems of Fire Safety*. Kharkiv, 2011. Issue 30. P. 3-7 (in Russian).

2. Dudarev V., Gorovykh O., Bardushko S., Shmulevtsov I., Bobrysheva S. Influence of dispersion of sprayed water upon its flow rates at extinguishing of a fire at a closed hazard. *Naukovyi visnyk UkrNDIPB*. Kyiv, 2009. Vol. 19(1). P. 149-157 (in Russian).

3. Kopylov N., Chibisov A., Dushkin A., Kudriavcev E. Studying of mechanism of a quenching of the model centers of a fire by the finely sprayed. *Fire Safety*. 2008. No 4. P. 45-58 (in Russian).

4. Alehanov Yu.V., Bliznetsov M.V., Vlasov Yu.A., Dudin V.I., Levushov A.E., Lomtev S.A., Meshkov E.E. *Interaction of dispersed water with. Letters to Journal of Theoretical Physics*. 2003. Vol. 29(6). P. 1-6 (in Russian)

5. Kovregin V.V., Kalugin V.D., Kustov M.V., Sidorenko O.V. Efficiency improvement of aqueous fire extinguishing compositions due to additives of various reagents. *Visnyk LDUBGD*. Lviv, 2010. Vol. 4(1). P. 136-142 (in Russian).

6. Turchin A.I., Antonov A.V. Theoretical and experimental aspects of application technologies for fine spraying of water-based fire extinguishing substances. *Naukovyi visnyk UkrNDIPB*. Kyiv, 2008. Vol. 17(1). P. 138-145 (in Ukrainian).

7. Turchin A.I., Borovikov V.O., Antonov A.V., Koziar N.M. The investigation for determination of quality coefficient of some water-based fire-extinguishing agents. *Naukovyi visnyk UkrNDIPB*. Kyiv, 2008. Vol. 18(2). P. 110-115 (in Ukrainian).

8. The water-based fire-extinguishing agent for fire extinguishing of "A" and "B" types by sprayed jets in compliance with all-Union State Standard 27331-87 by using of -30 to +50°C: Patent UA No 52969 U, 2009 (in Ukrainian).

9. The water-based fire extinguishing agent for fire-extinguishing of "A" and "B" types by sprayed jets in compliance with all-Union State Standard 27331-87: Patent UA No 96797 C2, 2011 (in Ukrainian).

10. Shmakov A.G., Korobeinichev O.P., Shvartsberg V.M., Yakimov S.A., Knyazkov D.A., Komarov V.F., Sakovich G.V. Testing organophosphorus, organofluorine, and metal-containing compounds and solid-propellant gas-generating compositions doped with phosphorus-containing additives as effective fire suppressants. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 2006. Vol. 42(6). P. 678-687

11. Korobeinichev O.P., Shmakov A.G., Chernov A.A., Bol'shova T.A., Shvartsberg V.M., Kutsenogii K.P., Makarov V.I. Fire suppression by aqueous solutions salts aerosols *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. Vol. 46(1). P. 20-25.

12. Mykhalitchko O.B., Godovanets N.M., Mykhalitchko B.M. Preproduction testing extinguish-

ing efficiency of a novel water-based fire-extinguishing agent on basis of $K_2[CuCl_4]$ compound. *Fire safety*. 2014. No. 24. P. 111-115.

13. Godovanets N.M., Mykhalitchko B.M., Petrovskii V.L., Shcherbina O.N. Fire extinguishing tests of aqueous fire extinguishing agents based on copper(II) chloride. *Problems of Fire Safety*. Kharkiv, 2013. Issue 33. P. 38-44.

14. Cotton F.A., Wilkinson G., *Advanced inorganic chemistry*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1980.

15. Jarosinski J., Veyssiere B. *Combustion phenomena: Selected mechanisms of flame formation, propagation and extinction*, CRC Press, Boca Raton, 2009.

16. Van Liere M., De Vore T. C., The infrared spectrum of CuCl and CuCl₂. *High Temp. Sci.* 1984. Vol. 18(3). P. 185-195.

17. Galwey A.K., Brown M.E. *Thermal decomposition of ionic solids*. Elsevier Science B.V., Amsterdam, 1999.

* Науково-методична стаття