

Тематический раздел: Физико-химические исследования.

Полная исследовательская публикация

Подраздел: Пожаровзрывоопасность.

Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/16-45-1-93

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>

Поступила в редакцию 19 февраля 2016 г. УДК 547.493:541.27:614.841.41.

Тематическое направление: Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. Часть XXII.<sup>1</sup>

## Диалкилкарбонаты

© Алексеев<sup>1</sup> Кирилл Сергеевич, Алексеев<sup>1,2\*+</sup> Сергей Геннадьевич  
и Барбин<sup>2,3</sup> Николай Михайлович

<sup>1</sup> Научно-инженерный центр «Надежность и ресурс больших систем и машин» УрО РАН.  
Ул. Студенческая, 54а. г. Екатеринбург, 620049. Россия. Тел.: (343) 374-16-82.  
E-mail: 3608113@mail.ru

<sup>2</sup> Научно-исследовательский отдел. Уральский институт ГПС МЧС России. Ул. Мира, 22.  
г. Екатеринбург, 620062. Россия. Тел.: (343) 360-80-21. E-mail: Alexshome@mail.ru

<sup>3</sup> Уральский государственный аграрный университет. Ул. Карла Либкнехта, 42. г. Екатеринбург,  
620075. Россия. Тел.: (343) 371-33-63. E-mail: nmbarbin@mail.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** карбонат, прогноз, температура вспышки, QSPR, хемоинформатика.

### Аннотация

Выполнено прогнозирование основных показателей пожарной опасности 15 диалкилкарбонатов с помощью методов *ACD/Lab 2014*, ГОСТ 12.1.044-89 (далее *ACD/Lab 2014*) и правил углеродной цепи, постулированных ранее авторами. Показано, что расчет через условную углеродную цепь дает сопоставимые результаты с методиками *ACD/Lab 2014*. Ошибки расчета по методам *ACD/Lab 2014* и правилам углеродной цепи не превышают нормативных экспериментальных допусков для экспериментального определения температуры вспышки и температурных пределов воспламенения по ГОСТ 12.1.044-89.

<sup>1</sup> Сообщение XXI см. в [1].