



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Горелик М.В. Химия антрахинонов и их производных. – М.: Химия, 1983.- 296 с.
2. Денисов В.Я. Химия промежуточных продуктов антрахинонового ряда. В 2-х частях.- Кемерово: КемГУ, 1987-1988.- Ч. 1.- 79 с.- Ч.2.- 65 с.
3. Elseviers Encyclopaedia of organic chemistry/ Ed. E.Josephy, F.Radt.- N.Y.-Amsterdam: Elsevier, 1946.-V. 13, ser. 3.- P. 444, 466.
4. Денисов В.Я., Фокин Е.П., Анишина Л.Н. Термолиз 1-диалкиламиноантрахинонов – новый путь синтеза производных антра[1,9-bc]пиррола// Хим. гетероциклич. соедин. 1975.-№ 10.- С. 1360-1363.

**К ПРОБЛЕМЕ РАЗРАБОТКИ
КОМПЛЕКСНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО
ОБЕСПЕЧЕНИЮ
ПОЖАРОВЗРЫВОБЕЗОПАСНОСТИ
ШАХТНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ**

Сечин А.И.¹, Бощенятов Б.В.², Косинцев В.И.¹,
Сечин А.А.¹, Лаптев Д.А.¹, Задорожная Т.А.¹
¹Томский политехнический университет, Томск
²ЗАО Научно-технический центр «Московречье»,
Москва

Известную актуальность занимают проблемы, сопровождающие добычу и переработку угля, представляющие собой обеспечение безопасности технологического процесса. Анализируя накопленные знания в этой области, можно прийти к следующему заключению:

- вероятность наличия источника зажигания равного 1 исключить нельзя. Иначе это было бы давно сделано;
- вероятность появления горючей смеси равного 1, так же исключить нельзя;

- следует иметь ввиду, что основные пожаровзрывоопасные характеристики углей располагаются в широком диапазоне, т.е. они не представляют тех характеристик, что исследователи привыкли наблюдать у большинства веществ;
- с другой стороны, состав смеси участвующей в горении в первом приближении довольно несложен, но исследования горения гетерогенных систем в этой области не представлены.

Если подвергать анализу пожаровзрывоопасные свойства веществ [1, 2], являющихся основными компонентами производственных пылегазовых систем, то мы увидим, что повышение уровня пожаровзрывобезопасности можно ожидать, изменяя состав компонентов горючей среды, либо условий в которых она формируется. Следующим шагом, так как ряд известных факторов исключить мы не в состоянии, предлагается перевести аварийный процесс с параметрами взрыва (со всеми его поражающими факторами), в процесс дефлаграционного горения, с условиями выживания человека находящегося в зоне его действия.

Из выше сказанного следует: необходимо провести комплекс исследований горения как индивидуальных составляющей шахтной атмосферы, так и ее компонентов. В результате проведения этих исследований можно ожидать следующие результаты:

- Сама область горения такой смеси будет существенно уменьшена (если не исчезнет совсем), но параметры процесса горения будут более щадящими, чем в первоначальном случае (поражающие факторы). Тем самым можно ожидать выход в область пламен с низкими показателями, которые для человека, попавшего в зону их проявления, не будут носить катастрофический характер.

- Снижение параметров проявления очага воспламенения, позволит ожидать затухания пламени, и нераспространения его по объему шахтной выработки в область присутствия пылевых осаждений с параметрами, позволяющими инициировать, а затем и интенсифицировать процесс распространения аварии.

Из литературных источников известно [3], что в большинстве случаев объемы скопления метана имеют место находиться:

- У исполнительных органов комбайнов 0,1-0,5 м³.
- В пространстве между корпусом комбайна и забоем до 1 м³.
- На машинной дороге в очистных выработках крутых пластов могут иметь протяженность до 10 м и более, а объем до 6 м³.
- В пространстве между корпусом комбайна и забоем, при нормальном проветривании очистных выработок, скорость скопления метана превышает 1,5 м³/мин.

- В пространстве над корпусом и машинной дороге выше, при нормальном проветривании очистных выработок, скорость скопления метана превышает 1 м³/мин.

- При обрушении свода, объем выделяющегося метана может достигать до 150 м³/с.

Наряду с этим комплексом исследований предлагаются следующие мероприятия, позволяющие повысить степень безопасности рассматриваемой технологии:

- Провести секционирование объема выработки и шахты в целом, ввести тамбура безопасности, представляющие собой водяные завесы (две водяные завесы с промежутком между ними в несколько метров), в этом объеме воздух насыщен водяным паром, точнее – туманом. Фронт пламени не пройдет через такой тамбур, только ударная волна. Сам же он будет проницаем для движущихся объектов.

- Для успешного функционирования водяных завес, рекомендуется использовать воду представляющую собой водовоздушную систему, прекрасно гасящую энергию взрыва.

- Встроить в технологическое оборудование систему, обеспечивающую очистку воздуха, с последующей подачей его в производственный объем.

В местах незначительного выделения метана, предлагается не удалять выделяемый газ на поверхность, что само по себе – опасный процесс, а утилизировать его на месте, в специально разработанном модуле.

Водовоздушная система, предлагаемая для эффективного функционирования водяных завес, представляет собой пузырковую водовоздушную среду (МВС), подразумевается покоящаяся или движущаяся пузырковая водовоздушная среда, в которой газ в виде дискретных образований – пузырьков микроскопического размера содержится в непрерывной жидкой фазе. Данную среду рекомендуется использовать как прекрасно гасящую энергию взрыва.

Некоторая качественная характеристика МВС:

- Газосодержание в МВС обычно не превышает 20-30 %.

- При уменьшении размера пузырька ниже 100 мкм его скорость всплытия уменьшается как квадрат диаметра.

- Наблюдается практически полное отсутствие процессов коалесценции в водовоздушных системах.

Значительный комплекс исследований выполнялся на водовоздушном стенде, где изучено влияние ряда факторов на МВС. Для создания дисперсионной среды использовалась: водопроводная вода и вода промышленного водопровода.

В результате проведенного исследования можно сделать следующий вывод:

- необходимо разработать систему секционирования производственных объемов;

- ввести тамбура безопасности, позволяющие секционировать наиболее опасные производственные участки;
- внутри секций установить очистные комплексы, позволяющие очищать производственную атмосферу;
- при организации тамбуров безопасности, применять водовоздушную среду, обеспечивающую непрохождение через тамбур волны взрыва;
- изучить возможность состава шахтной атмосферы снижающего параметры процесса горения, не носящие катастрофический характер для обслуживающего персонала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бариков А.Н., Корольченко А.Я. Пожаро-взрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения / Справочник. - М.: Химия. Т. 1., 2. 1990. –880 с.
2. Бесчастнов М.В. Промышленные взрывы оценка и предупреждение. М.: "Химия", 1991. - 432 с.
3. Нецепляев М.И., Любимова А.И., Петрухин П.М. и др. Борьба с взрывами угольной пыли в шахтах. – М.: Недра, 1992. – 298 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ

ТРИХЛОРФОСФАЗОСОЕДИНЕНИЙ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ И ЯКР-СПЕКТРОСКОПИИ

Сойфер Г.Б., Шуров С.Н.

*Пермский государственный университет
Пермь, Россия*

Строение десяти молекул трихлорфосфазосоединений типа $\text{Cl}_3\text{P}=\text{NR}$ с $\text{R} = \text{C}(\text{CH}_3)_3$, $\text{C}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$, $\text{C}(\text{CF}_3)_3$, $\text{CCl}(\text{CF}_3)_2$, CCl_2CF_3 , CCl_3 , CCl_2CCl_3 , $\text{CCl}(\text{CCl}_3)_2$, COClF_3 и COCl_3 рассмотрено на основе комплексного подхода с использованием результатов выполненных в настоящей работе квантовохимических расчётов и измеренных ранее [1] частот ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) хлора-35. Конформационная специфика названных соединений, обусловленная пространственной относительной ориентацией связей P–Cl и N–C фрагмента $\text{Cl}_3\text{P}=\text{NC}$, отражается в его рассчитанных геометрических параметрах, а также в спектрах ЯКР хлора-35 группы PCl_3 , тройственный характер которых отчётливо соотносится со структурными особенностями молекул.

Сравнение выводов из проведённых расчётов молекулярной геометрии квантовохимическими полуэмпирическими и неэмпирическими методами продемонстрировало большую эффективность последних с преимущественным значением уровня MP2/6-31G*. В результате сопоставления расчётных и квадрупольно-резонансных данных установлено, что в исследованных три-

хлорфосфазосоединениях только $\text{Cl}_3\text{P}=\text{NC}\text{Cl}(\text{CCl}_3)_2$ имеет *син*-перипланарное взаиморасположение одной из связей P–Cl и связи N–C, тогда как у всех остальных молекул конформация является *анти*-перипланарной.

Дополнительно проведена корреляция между полученными из расчётов зарядами атомов хлора групп PCl_3 и соответствующими частотами ЯКР, показавшая согласованность этих параметров в их отношении к структурным особенностям изученных молекул.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Кюнцель И.А., Сойфер Г.Б. Каталог спектров ЯКР ^{35}Cl соединений фосфора, содержащих связь P–Cl. Ч.1. Препринт. Пермь: Изд-во ТГУ. Перм. отделение, 1991.

О ПРЕПОДАВАНИИ ОСНОВ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОРОГОВЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРОТЕКАНИЯ В ТИТРИМЕТРИЧЕСКИХ МЕТОДАХ АНАЛИЗА

Чеботарёв В.К., Ильина Е.Г., Пасека А.Е.,

Полякова И.Ю., Терентьев Р.А.

*Алтайский государственный университет
Барнаул, Россия*

Развитие теоретических знаний, применение ЭВМ позволяет в настоящее время найти подходы к прогнозированию использования аналитических реагентов в различных методах анализа. Весьма актуально прогнозирование возможности использования аналитических реагентов в самых распространённых методах анализа – титриметрических. Разработка титриметрических методик количественных определений с различной фиксацией конечной точки титрования, с использованием различных химических реакций при определении индивидуальных веществ и их смесей продолжается и в настоящее время. Экспериментальный поиск оптимальных условий титрования – длительный и трудоёмкий процесс, потому теоретические способы прогнозирования использования реагентов-титрантов с выявлением их полных возможностей для хорошо известных и новых реагентов представляют большой интерес. Вершиной любой исследовательской работы является возможность теоретического расчета – прогноза результатов будущего эксперимента. В титриметрических методах анализа, как и в любых других, это особенно важно, так как позволяет значительно сэкономить время на разработку новых методик.

Наиболее подходящими критериями прогнозирования титрования индивидуальных соединений для аналитических реакций, на наш взгляд, могут быть:

а) теоретические кривые титрования,