

УДК 547.233.3: 614.841.41

Prediction of the Dialkylamine's Flash Points

Vitaliy V. Smirnov^{a,b},

Sergey G. Alexeev^{*a,b} and Nicolay M. Barbin^{a,c}

^aThe Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia
22 Mira Str., Yekaterinburg, 620062, Russia

^bScience and Engineering Centre "Reliability and Safety
of Large Systems" UB RAS

54a Studencheskaya Str., Yekaterinburg, 620049, Russia

^c Ural State Agrarian University

42 Karla Libknekhta Str., Yekaterinburg, 620075, Russia

Received 20.12.2015, received in revised form 13.01.2016, accepted 22.03.2016

QSPR research of the correlation of flash point and chemical structure was carried out in a number of dialkylamines. Flash points of secondary amines were predicted by carbon chain rules. For the convenient practical application of carbon chain rules following empirical equations were offered for calculating flash point (FP) by conditional chain (N_x), the beta coefficient (β), stoichiometric concentration (C_s), boiling point (BP): $FP(K) = -0,04N_x^2 + 16,82N_x + 185,16$; $FP(K) = -0,11\beta^2 + 11,22\beta + 176,17$; $FP(K) = 180,11 + 212,18/C_s$; $FP(K) = 11,4N_x + 0,16BP + 152,53$. Values of coefficients ($a = 0.639$ and $b = -59.44$) were determined for the modified Ormandy-Craven's formula. A comparative analysis was carried out for proposed flash point calculation methods with GOST 12.1.044-89, Rowley's method and ACD/Lab 2014 and T.E.S.T. software. It was shown that the new methods give better results than the comparison calculation methods.

Keywords: chemoinformatics, QSPR, flash point, prediction, dialkylamines.

DOI: 10.17516/1998-2836-2016-9-1-68-77.

© Siberian Federal University. All rights reserved

* Corresponding author E-mail address: 3608113@mail.ru

Прогнозирование температуры вспышки диалкиламинов

В.В. Смирнов,^{а,б} С.Г. Алексеев,^{а,б} Н.М. Барбин^{а,в}

^аУральский институт ГПС МЧС России

Россия, 620062, Екатеринбург, ул. Мира, 22

^бНИИЦ «Надежность и ресурс больших систем и машин» УрО РАН

Россия, 620049, Екатеринбург, ул. Студенческая, 54а

^вУральский государственный аграрный университет

Россия, 620075, Екатеринбург, ул. Карла Либкнехта, 42

Проведено QSPR-исследование зависимости температуры вспышки от химического строения в ряду диалкиламинов. С помощью правил углеродной цепи выполнено прогнозирование температуры вспышки вторичных аминов. Для удобства практического применения правил углеродной цепи предложены следующие эмпирические уравнения для расчета температуры вспышки от условной углеродной цепи (N_x), коэффициента бета (β), стехиометрической концентрации ($C_{смх}$), температуры кипения ($T_{кип}$): $T_{всп}(K) = -0.11N_x^2 + 16.82N_x + 185.16$; $T_{всп}(K) = -0.04\beta^2 + 11.22\beta + 176.17$; $T_{всп}(K) = 180.11 + 212.18/C_{смх}$; $T_{всп}(K) = 11.4N_x + 0.16T_{кип} + 152.53$. Определены коэффициенты для модифицированного уравнения Орманди-Крэвена ($a = 0.639$ и $b = -59.44$). Проведен сравнительный анализ предлагаемых методов расчета температуры вспышки с методами ГОСТ 12.1.044-89, Rowley и программных продуктов ACD/Lab 2014 и T.E.S.T. Показано, что новые методы дают более точные результаты расчета, чем методы сравнения.

Ключевые слова: хемоинформатика, QSPR, температура вспышки, прогноз, диалкиламины.

Введение

Использование информационных технологий в химии привело к появлению нового научного направления – хемоинформатики, под ней понимается применение методов информатики для решения химических проблем [1]. QSPR-подход (Quantitative Structure – Property Relationship) является частным направлением хемоинформатики, который включает в себя процесс разработки моделей, позволяющих по структурным формулам органических соединений рассчитывать физико-химические и другие показатели. На текущий момент наблюдается интенсивное развитие хемоинформатики, о чём говорит издание целого ряда монографий и учебных пособий за последние 15 лет [1-5].

Среди показателей пожарной опасности температура вспышки веществ и материалов – самый излюбленный показатель в QSPR-исследованиях. В области прогнозирования температуры вспышки органических соединений достигнут определенный прогресс, который нашел отражение в серии обзорных работ [6-13].

Существующие методы прогнозирования температуры вспышки и других показателей физико-химических и пожароопасных свойств можно разбить на три класса:

- 1) расчет через дескрипторы;
- 2) сравнительный метод;
- 3) правила углеродной цепи.

В дескрипторном методе температура вспышки выражается через функцию от одного или нескольких дескрипторов, в качестве которых выступают структурные, молекулярные, кванто-химические, физико-химические, пожаровзрывоопасные параметры химических соединений [6-13].

Во второй половине XX в. был разработан сравнительный метод, который базируется на уравнении (1) [14]. В последующем он был апробирован на предсказаниях показателей пожарной опасности [15].

$$f_2 = n \times f_i + m, \quad (1)$$

где f_i – физико-химический параметр i -класса химических соединений; n , m – константы.

Правила углеродной цепи (ПУЦ) разработаны как «синтез-методика». Из сравнительного метода ПУЦ взял подход сопоставления показателей физико-химических и пожароопасных свойств. Однако этот процесс осуществляется в пределах одного гомологического ряда, а не двух, как это делается в сравнительном методе. Для удобства практического применения ПУЦ введены новые дескрипторы – основная углеродная цепь (ОУЦ) и условная углеродная цепь (УУЦ). В настоящее время данный метод апробирован на различных классах органических соединений [16-19].

Объект, методы и результаты исследования

В качестве объекта исследования выбраны 24 диалкиламина (табл. 1). Данные по температуре кипения и вспышки в закрытом тигле этих соединений, взятые из справочной литературы и электронных баз данных [20-27], приведены в табл. 1 и 2. В качестве основного способа прогнозирования выбраны ПУЦ [16-19], а для сравнения взяты уравнения (2)–(4) [6, 28] и методы программных комплексов *ACD/Lab 2014* [29, 30] и *T.E.S.T.* [31]. Аномальные значения температуры вспышки, которые могут быть обусловлены ошибкой эксперимента, неточностями при переводе из одной температурной шкалы в другую, ошибками при копировании из одного справочника в другой и т.п., выделены жирным шрифтом в табл. 2, и они не учитывались в корреляционном анализе.

$$T_{всп} = a(T_{кин} - 273.15) + b, \quad (2)$$

$$T_{всп} = \frac{\sum (n_i \cdot f_i) + \delta}{\lambda \ln(8\beta) + 1} + \varepsilon, \quad (3)$$

$$T_{всп} = 0,659 \times (T_{кин} - 273.15) + \sum_{i=1}^n (a_i I_i) - 73.14, \quad (4)$$

где a , b – константы; β – коэффициент в реакции горения перед кислородом; n_i – количество i -группы; f_i – структурный дескриптор i - группы (табл. 3); δ , ε , λ – эмпирические коэффициенты (табл. 3); a_i – структурный дескриптор i -группы; l_i – количество i -группы (табл. 3).

В национальном стандарте [25] для модифицированного уравнения Орманди-Крэвена (Ormandy–Craven) (2) значения констант a и b отсутствуют, поэтому они найдены на основе корреляционного анализа данных табл. 1 и 2 ($a = 0.639$; $b = -59.44$).

Основные положения ПУЦ сводятся к простым постулатам:

- 1) свойства ближайших членов гомологического ряда изменяются по линейному закону;
- 2) свойства изомерных соединений можно предсказать по их линейным гомологам;
- 3) каждая метильная группа в боковой цепи увеличивает основную углеродную цепь молекулы не на 1, а на 0.5, этильная – на 1.5, пропиловая – на 2.5 и т.д.;
- 4) перемещение по углеродной цепи молекулы алкильного заместителя или функциональной группы не приводит к существенным изменениям физико-химических и пожароопасных свойств молекулы.

Для нормальных вторичных аминов УУЦ равна количеству атомов углерода в молекуле. Например, УУЦ метилэтиламина **2** равняется 3. Это означает, что физико-химические и пожароопасные показатели соединения (**2**) могут быть определены как среднеарифметическое значений соответствующих характеристик диметиламина **1** и диэтиламина **3**. Так, расчётное значение температуры вспышки по этому ручному варианту ПУЦ (далее ПУЦ1) для соединения (**2**) равно 237 К. Абсолютная ошибка расчета составляет 2 К.

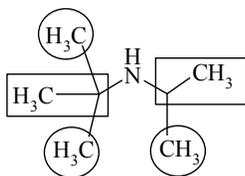
Аналогично по ПУЦ1 рассчитаны температуры вспышки других вторичных аминов с нормальными алкильными радикалами (см. табл. 2).

Ниже приведены примеры определения УУЦ для *трет*-бутилизопропиламина (**20**) и *трет*-амил-*трет*-бутиламина (**23**). Прямоугольниками выделены фрагменты ОУЦ, а овалом – боковые цепи.

Таблица 1. Экспериментальные данные температуры кипения вторичных аминов **1–24**

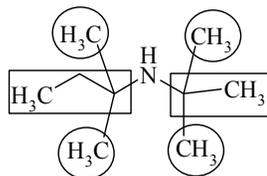
Соединение (УУЦ)	$T_{\text{кип}}$, К	Соединение (УУЦ)	$T_{\text{кип}}$, К
1. Диметиламин (2)	280	13. Метилдециламин (11)	490 ²
2. Метилэтиламин (3)	309	14. Дигексиламин (12)	509
3. Диэтиламин (4)	329	15. Метилдодеканиламин (13)	524
4. Бутилметиламин (5)	363	16. Метилизопропиламин (3.5)	323
5. Дипропиламин (6)	380	17. Изопропилэтиламин (4.5)	345 ³
6. Бутилэтиламин (6)	381	18. Диизопропиламин (5)	357
7. Гексилметиламин (7)	414	19. <i>Трет</i> -бутилэтиламин (5)	362 ⁴
8. Бутилпропиламин (7)	407	20. <i>Трет</i> -бутилизопропиламин (5.5)	371
9. Дибутиламин (8)	432	21. Ди (<i>втор</i> -бутил)амин (7)	407
10. Метилоктиламин (9)	454	22. Диизобутиламин (7)	410
11. Диамиламин (10)	476	23. <i>Трет</i> -амил- <i>трет</i> -бутил-амин (7)	417
12. Амилгексиламин (11)	491 ¹	24. Метил- (1,5-диметил)гексиламин (8)	437

Примечание. ¹ при 763 мм рт. ст. [32].² [33].³ [34].⁴ [35].



20

$$\text{УУЦ} = (2 + 2) + 3 \times 0.5 = 5.5$$



23

$$\text{УУЦ} = (3 + 2) + 4 \times 0.5 = 7$$

Таблица 2. Результаты прогнозирования температуры вспышки соединений 1–24

Амин	Температура вспышки, К											
	Эксперимент	Предлагаемые методы ¹					Методы сравнения					
		ПУЦ ¹	(5)	(6)	(7)	(8)	(2)	(3)	(4)	ACD ²	TEST ³	TEST ⁴
1	223	220	218	218	220	220	218	235	245	217	266	267
2	239	237	235	234	235	236	237	253	265	235	272	275
3	250; 234	254	251	250	250	251	249	269	278	244	273	266
4	269	267	267	266	266	268	271	284	300	273	292	278
5	281; 290	283	282	282	281	282	282	298	312	277	289	282
6	285; 281; 276	283	282	282	281	282	283	298	313	291	289	291
7	296	298	298	297	296	299	304	312	334	296	311	315
8	298	298	298	297	296	297	299	312	330	300	301	302
9	312; 316	317	313	313	311	313	315	325	346	314	317	313
10	336	329	328	328	326	328	329	338	361	324	344	344
11	345; 325	–	342	343	341	343	343	350	376	325	347	334
12	–	–	357	358	356	356	353	362	386	350	356	357
13	–	–	357	358	356	356	352	362	385	346	362	360
14	377	–	371	372	372	370	362	374	396	368	368	365
15	383	–	385	387	387	385	374	386	408	367	386	379
16	241	245	243	242	243	244	246	256	274	241	269	268
17	–	260	259	258	258	259	260	271	289	256	273	274
18	261; 266	269	267	266	266	267	267	274	297	267	285	276
19	–	269	267	266	266	267	267	277	300	266	281	280
20	270	276	274	274	273	275	276	279	306	270	285	289
21	292	297	298	297	296	297	299	302	330	292	297	296
22	297; 294	297	298	297	296	298	301	302	332	302	299	302
23	297	297	298	297	296	299	306	298	337	302	285	289
24	309	312	313	313	311	314	318	315	350	302	321	325

Примечания. ¹В скобках указан номер уравнения. ² ACD\lab 2014. ³Consensus method программы T.E.S.T. ⁴ Hierarchical method программы T.E.S.T.

Таблица 3. Значения коэффициентов и дескрипторов для уравнений (3) и (4)

Уравнение	Дескриптор	Значение	Дескриптор	Значение	Ссылка
3	λ	2.13	$-\text{CH}_3$ (НС)	-59.62	6
	δ	-510.49	$>\text{C}<$	108.68	
	ε	235.21	$>\text{CH}-$	119.79	
	$>\text{C}<$ (НС)	561.32	$>\text{CH}_2$	162.43	
	$>\text{CH}-$ (НС)	418.55	$-\text{CH}_3$	77.80	
	$>\text{CH}_2$ (НС)	191.61	$>\text{NH}$	354.79	
4	C-C	-2.03	C-H	1.105	25
	C-N	14.15	N-H	5.83	

Примечания. НС указывает на связь группы только с углеводородом.

Значения УУЦ, равные 5.5 и 7, означают, что в первом случае свойства соединения (**20**) определяются как среднееарифметическое соответствующих показателей диалкиламинов с УЦЦ, равной 5 и 6 (см. табл. 2). Во втором случае характеристики *трет*-амил-*трет*-бутиламина (**23**) могут быть рассчитаны через свойства соединений с УЦЦ, равной 6 и 8 (см. табл. 2).

Результаты расчетов температуры вспышки аминов **1–24** по методу ПУЦ1 приведены в табл. 2.

Для удобства практического применения ПУЦ выведены корреляционные уравнения (5)–(8) для вычисления температуры вспышки ($T_{всп}$) диалкиламинов.

$$T_{всп} = -0.11N_x^2 + 16.82N_x + 185.16, \text{ К}, \quad (5)$$

$$T_{всп} = -0.04\beta^2 + 11.22\beta + 176.17, \text{ К}, \quad (6)$$

$$T_{всп} = 180.11 + \frac{212.18}{C_{смх}}, \text{ К}, \quad (7)$$

$$T_{всп} = 11.4N_x + 0.16T_{кип} + 152.53, \text{ К}, \quad (8)$$

где N_x – УУЦ; β – стехиометрический коэффициент перед кислородом в реакции полного горения; $C_{смх}$ – стехиометрическая концентрация, % (об.); $T_{кип}$ – температура кипения, К.

Необходимо отметить, что уравнения (6) и (7) могут использоваться для аминов изостроения, но для этого необходимо применять псевдокоэффициент бета (β^*) и псевдостехиометрическую концентрацию $C_{смх}^*$, которые определяются по уравнениям (9) и (10).

$$\beta^* = N_x + (2N_x + 3)/4; \quad (9)$$

$$C_{смх}^* = 100/(1 + 4,76\beta). \quad (10)$$

Данные прогнозирования формулам (5)–(8) и методам сравнения приведены в табл. 2.

Обсуждение результатов

При оценке результатов прогнозирования температуры вспышки воспламеняющихся жидкостей необходимо учитывать, что точность расчета по физической природе не может быть

Таблица 4. Статистический анализ методов прогнозирования температуры вспышки диалкиламинов

Предлагаемые методы	<i>D</i>		Методы сравнения	<i>D</i>	
	%	К		%	К
ПУЦ1	1.17	3.28	Уравнение (2)	1.70	5.09
Уравнение (5)	1.03	2.98	Уравнение (3)	3.74	10.23
Уравнение (6)	1.01	2.92	Уравнение (4)	10.95	31.43
Уравнение (7)	0.99	2.94	ACDLabs 2014	1.85	5.70
Уравнение (8)	1.03	3.02	T.E.S.T. (Consensus method).	5.28	13.85
			T.E.S.T. (Hierarchical method).	4.99	13.25

меньше допустимой погрешности при экспериментальном определении данного показателя пожарной опасности. По ГОСТ 12.1.044 нормированные расхождения по воспроизводимости метода определения температуры вспышки в закрытом тигле составляют от 3.5 до 8.0 градусов в зависимости от температуры кипения горючего вещества [28].

В нашем случае точность прогнозов по ПУЦ и методам сравнения оценивалась с помощью среднего абсолютного отклонения *D* полученных величин от экспериментальных значений. Результаты статистической обработки методов прогнозирования температуры вспышки вторичных аминов приведены в табл. 4.

$$D = \frac{1}{n} \sum \left| \frac{T_{всп}^p - T_{всп}^э}{T_{всп}^э} \right| \cdot 100\% \quad (11)$$

где $T_{всп}^p$ – расчетное значение температуры вспышки, К; $T_{всп}^э$ – экспериментальное значение температуры вспышки, К; *n* – количество измерений.

Анализ данных табл. 4 показывает, что расчет по ПУЦ1 и ПУЦ2 по точности прогнозирования сопоставим с методами сравнения, а в ряде случаев превосходит его.

Заключение

В результате проведенного исследования показано, что правила углеродной цепи могут быть использованы для прогнозирования температуры вспышки диалкиламинов нормально-го и изостроения. По точности прогнозов температуры вспышки вторичных аминов правила углеродной цепи превосходят методы ГОСТ 12.1.044, Роули (Rowley), *ACD/Lab 2014* и *T.E.S.T.*

Список литературы

1. Chemoinformatics: A Textbook / by ed. J. Gasteiger, T. Engel. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2003. 671 p.
2. Advanced Methods an Applications in Chemoinformatics: Research Progress and New Applications / by ed. E.A. Castro, A.K. Haghi. Hershey: IGI Global, 2012. 513 p.
3. Gilani H.G., Samper K.G., Haghi R.K. Chemoinformatics. Advanced Control & Computational Techniques. Toronto: Aple Academic Press, 2012. 209 p.
4. Handbook of Chemoinformatics Alorihms / by ed. J.-L. Faulon, A. Bender. Boca Raton: Taylor and Francis Group, LLC., 2010. 434 p.

5. Karthikeyan M., Vyas R. Practical Chemoinformatics. New Delhi: Springer, 2014. 546 p.
6. Rowley J. Flammability limits, flash points, and their consanguinity: critical analysis, experimental exploration, and prediction: dis. ... doctor of philosophy. Brigham Young University, 2010. 261 p.
7. Vidal M., Rogers W.J., Holste J.C., Mannan M.S. A Review of estimation methods for flash points and flammability limits. *Process Safety Progress*. 2004. Vol. 23(1), P. 47-55.
8. Liu X., Liu Z. Research progress on flash point prediction. *Journal of Chemical & Engineering Data* 2010. Vol. 55(9), P. 2943-2950.
9. Katritzky A.R., Kuanar M., Slavov S., Hall C.D., Karelson M., Kahn I., Dobchev D.A. Quantitative correlation of physical and chemical properties with chemical structure: utility for prediction. *Chemical Reviews* 2010. Vol. 110(10), P. 5714-5789.
10. Батов Д.В. Использование аддитивно-группового метода для анализа, систематизации и прогнозирования показателей пожарной опасности горючих жидкостей. *Российский химический журнал*. 2014. Т. 58(2), С. 4-14. [Batov D.V. Use of an additive and group method for the analysis, systematization and forecasting of indicators of fire hazard of combustible liquids. *Russian Chemical Journal* 2014. Vol. 58(2), P. 4-14. (In Russ.)]
11. Алексеев С.Г., Смирнов В.В., Барбин Н.М. Температура вспышки. Часть II. Расчет через давление насыщенного пара. *Пожаровзрывобезопасность* 2012. Т. 21(10), С. 21-35. [Alexeev S.G., Smirnov V.V., Barbin N.M. Flash Point. Part II. Calculation via partial pressure. *Fire & Explosion Safety* 2012. Vol. 21(10), P. 21-35. (In Russ.)]
12. Алексеев С.Г., Смирнов В.В., Алексеев К.С., Барбин Н.М. Температура вспышки. Часть III. Методы расчета через температуру кипения. *Пожаровзрывобезопасность* 2014. Т. 23(3), С. 30-43. [Alexeev S.G., Smirnov V.V., Alexeev K.S., Barbin N.M. Flash Point. Part III. Calculation via boiling point. *Fire & Explosion Safety* 2014. Vol. 23(3), P. 30-43. (In Russ.)]
13. Алексеев С.Г., Алексеев К.С., Смирнов В.В., Барбин Н.М. Температура вспышки. Часть IV. Deskрипторный метод расчета. *Пожаровзрывобезопасность* 2014. Т. 23(5), С. 18-37. [Alexeev S.G., Alexeev K.S., Smirnov V.V., Barbin N.M. Flash Point. Part IV. Descriptors method of calculation. *Fire & Explosion Safety* 2014. Vol. 23(5), P. 18-37. (In Russ.)]
14. Карапетьянц М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. М.: Наука, 1965. 404 с. [Karapet'yants M.Kh. *Methods for the Relative Prediction Physicochemical Properties*. Moscow: Nauka, 1965. 404 p. (In Russ.)]
15. Монахов В.Т. Методы исследования пожарной опасности веществ. М.: Химия, 1979. 424 с. [Monakhov V.T. *Methods for Studying the Flammability of Substances*. New Delhi: Amerind Publishing Co., 1985. 436 p. (In Eng.)]
16. Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. I. Алканолаы. *Пожаровзрывобезопасность* 2010. Т. 19(5), С. 23-30. [Alexeev S.G., Barbin N.M., Alexeev K.S., Orlov S.A. Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. I. Alcohols. *Fire & Explosion Safety* 2010. Vol. 19(5), P. 23-30. (In Russ.)]
17. 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. [Alexeev S.G., Alexeev K.S., Zhivotinskaya L.O., Barbin N.M. Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. X. Esters (part 2). *Fire & Explosion Safety* 2013. Vol. 22(5), P. 9-19. (In Russ.)]

18. 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. [Smirnov V.V., Alexeev S.G., Barbin N.M., Kalach A.V. Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XI. Chloroalkanes. *Fire & Explosion Safety 2013*. Vol. 22(8), P. 25-37. (In Russ.)]
19. 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. [Alexeev S.G., Mavlyutova L.K., Koshelev A. Yu., Alexeev K.S., Barbin N.M. Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XII. Alkyl benzenes and dialkyl benzenes. *Fire & Explosion Safety 2014*. Vol. 23(6), P. 38-46. (In Russ.)]
20. Sigma-Aldrich. URL: <http://www.sigmaaldrich.com/catalog>.
21. DIPPR 801 (Brigham Young University). URL: <http://www.aiche.org/dippr/>.
22. Gestis Substance Database. URL: <http://http://gestis-en.itrust.de>.
23. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения: справочник: в 2-х ч. М.: Асс. «Пожнаука», 2004. Ч. 1. 713 с. [Korol'chenko A.Ya., Korol'chenko D. A. Fire and explosive hazard of compounds and materials, and their fire extinguishing means. Handbook. Moscow, Pozhnauka Publ., 2004, Vol. 1, 713 p. (In Russ.)].
24. Корольченко А.Я., Корольченко Д.А. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения: справочник: в 2 ч. М.: Асс. «Пожнаука», 2004. Ч. 2. 774 с. [Korol'chenko A.Ya., Korol'chenko D. A. Fire and explosive hazard of compounds and materials, and their fire extinguishing means. Handbook. Moscow, Pozhnauka Publ, 2004, Vol. 2, 774 p. (In Russ.)].
25. Keshavarz M.H., Moradi S., Madram A.R., Pouretedal H.R., Esmailpour K., Shokrolahi A. Reliable method for prediction of the flash point of various classes of amines on the basis of some molecular moieties for safety measures in industrial processes. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries 2013*. Vol. 26(4), P. 650-659.
26. Mitchell J.W., Vratsanos M.S., Hanley B.F., Parekh V.S. Experimental flash points of industrial amines. *Journal of Chemical and Engineering Data 1999*. Vol. 44(2), P. 209-211.
27. Katritzky A.R., Petrukhin R., Jain R., Karelson M. QSPR analysis of flash points. *Journal of Chemical Information and Modeling 2001*. Vol. 41(6), P. 1521-1530.
28. ГОСТ 12.1.044–89*. ССБТ. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения. М.: Стандартинформ, 2006. 100 с. [State Standard 12.1.044–89*. Occupational Safety Standards System. Fire and Explosion Hazard of Substances and Materials. Moscow: Standartinform, 2006. 100 p. (In Russ.)].
29. ACD/Labs Software. Version 2014 for Microsoft Windows. Installation guide. Installing and registering ACD/Labs Software. Toronto: AdvancedChemistryDevelopment, 2014. 52 p.
30. ACD/Boiling Point. Version for Microsoft Windows. User's guide. Calculating the boiling point, vapor pressure, and related properties. Toronto: AdvancedChemistryDevelopment, 2013. 29 p.
31. User's Guide for T.E.S.T. (version 4.1). (Toxicity Estimation Software Tool). A Program to Estimate Toxicity from Molecular Structure. Washington: U.S. Environmental Protection Agency, 2012. 69 p.
32. King H., Work T.S. Antiplasmodial action and chemical constitution. Part V. Carbinolamines derived from 6-methoxyquinoline. *Journal Chemical Society 1942*. P. 401-404.

33. Bedenbaugh A.O., Payton A.L., Bedenbaugh J.H. Lithium-methylamine studies. 3. Reduction of carboxamides. *Journal Organic Chemistry* 1979. Vol. 44(25), P. 4703-4705.
34. Bailey P.S., Southwick L.M., Carter T.P.Jr. Ozonation of nucleophiles. 8. Secondary amines. *Journal Organic Chemistry* 1978. Vol. 43(13), P. 2657-2662.
35. Bottaro J.C., Penwell P.E., Schmitt R.J. Improved synthesis of cubane-1,2,4,7-tetracarboxylic acid. *Journal Organic Chemistry* 1991. Vol. 56(3), P. 1305-1307.