ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 7, № 1 (2006) С. 113-117

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 7, № 1 (2006) P. 113-117

УДК544.475: 544.183.2 +544.723.54: 544.431.16

ISSN 1729-4428

В.В. Кукуєва[1], О.А. Кирилов[1], А.Г. Гребенюк[2], В.В. Лобанов[2]

Квантово-хімічне дослідження інгібуючої дії діетиламіну

[1]Черкаський інститут пожежної безпеки ім. Героїв Чорнобиля, вул. Онопрієнко, 8, м. Черкаси, 18034,Україна, тел. (80472)55-09-62, kukueva@yahoo.com
[2]Інститут хімії поверхні НАН України, вул. Ген. Наумова, 17, м. Київ, 03164, Україна

Шляхом неемпіричних квантово-хімічних розрахунків в базисі 6-31 G досліджені шляхи деструкції диетиламіну, що виявляє значну інгібуючу дію на горіння вуглеводневих палив. Показаний найбільш імовірний в енергетичному аспекті реакційний шлях розкладу молекули інгібітора і проаналізована вірогідність взаємодії продуктів деструкції з активними центрами полум'я. Доведено, що розклад інгібуючих частинок на поверхні кремнезему відбувається легше, ніж їх відщеплення від ізольованої молекули диетиламіну.

Ключові слова: негативний каталіз, інгібітор, квантово-хімічні розрахунки, механізм реакції.

Стаття поступила до редакції 17.07.2005; прийнята до друку 15.01.2006.

Хімічні реакції на межі розділу фаз завжди були об'єктом підвищеної уваги, як основа будь-якого гетерогенного каталітичного процесу. В останній час цей інтерес також підкріплений можливістю імобілізації активних молекулярних груп на поверхні кремнезему. У зв'язку з цим особливо цікаві елементарні реакції газоподібних реагуючих речовин на твердому тілі, процеси адсорбції, хемосорбції і десорбції, відповідно, а також вивчення кінетики деструкції поверхневих сполук, утворених ковалентними або йонними зв'язками на кремнеземі.

Ще до відкриття ланцюгових реакцій було виявлено уповільнення швидкості хімічних процесів малими домішками деяких речовин. Такі сполуки були названі інгібіторами і вони сьогодні широко застосовуються для гальмування самих різноманітних реакцій, у тому числі й ланцюгових. Ефективність дії інгібіторів на процес горіння вуглеводнів звичайно проявляється у ступені їх впливу на швидкість горіння. Швидкість горіння вуглеводнів обумовлена кінетикою хімічних реакцій, відповідальних за ланцюговий механізм. Вивчення інгібованого вуглеводневого полум'я дозволяє глибше зрозуміти механізм елементарних реакцій радикалів, а також їхню роль у кінетиці окиснення вуглеводнів.

Як інгібітори до недавнього часу широко застосовувались галогенвмісні вуглеводні. Але, як відомо, у зв'язку з негативним впливом таких сполук на озоновий шар Землі, виникла необхідність пошуку нових речовин, що інгібують горіння, але при цьому мінімально шкодять навколишньому середовищу. Давно помічено [1], що аліфатичні аміни не вступають у хімічні реакції з $^1O_2$, але ефективно інгібують окиснення інших сполук, що мають високу реакційну здатність по відношенню до синглетного кисню.

В останні роки виявлено, що досить активним інгібітором є диетиламін (ДЕА). Так, в роботі [7], було відмічено, що додавання цієї речовини у пропано-повітряне полум'я, у кількості 0,8% за об'ємом, зменшує швидкість горіння приблизно на 40%. У спектрі вуглеводнево-повітряного полум'я смуга NH при 336,0 нм ледь помітна. При додаванні ДЕА інтенсивність її помітно зростає і додатково з'являється смуга NH при 337,0 нм [1]. Зміни у спектрі полум'я, що спостерігаються при введенні ДЕА, свідчать про те, що ця речовина ефективно впливає на процес горіння вуглеводнів. Аліфатичні аміни інгібують окиснення вуглеводнів, альдегидів та етерів і підвищують межу спалаху. В роботі [7] автори припускають, що вплив ДЕА на процес горіння вуглеводневих палив пов'язаний з участю активних атомів азоту у кінетиці ланцюгового розгалуженого механізму окиснення вуглеводнів. Вільні атоми Нітрогену можуть утворюватися в інгібованому ДЕА полум'ї в процесі хімічних реакцій, що відбуваються в його реакційній зоні. Однак наші розрахунки шляхів термічної деструкції ДЕА показали, що імовірніше інгібування відбувається за рахунок інших частинок, що утворюються при розкладі молекули.

В літературі було запропоновано декілька різних механізмів, щоб урахувати дію амінів на окиснення вуглеводнів і їхніх похідних в газовій фазі, хоч не було дано ні детального кінетичного, ні аналітичного доказу [2]. У роботі [3] запропонована схема механізму інгібування, яка частково пояснює дію

галогенвмісних інгібіторів на швидкість ланцюгового горіння:

$RX \rightarrow R^{\bullet} + X^{\bullet}$ (I)

$X^{\bullet} + H\alpha \rightarrow HX + \alpha$ (II)

$HX+\beta \rightarrow H\beta+X$ (III)

(де $\beta = M^{\cdot}$, $OH^{\cdot}$, $O{:}$ – активні центри полум'я, α – вуглеводневий радикал). У передреакційній зоні відбувається розклад інгібітора (RX) з виділенням вільного галогену X (I), який потім взаємодіє з молекулою пального або вуглеводневим радикалом (Hα), утворюючи галогеноводень HX (II). Основний інгібуючий вплив виявляє галогеноводень, який зменшує концентрацію активних вільних радикалів у полум'ї. Реакція взаємодії між галогеноводнем і радикалами полум'я, що є носіями ланцюга (II), відбувається тим скоріше, чим менш міцний зв'язок H-галоген [4]. Так званий "scaveging effect" (ефект пастки) інгібіторів для радикалів, відповідальних за розвиток ланцюгового горіння наводиться і в багатьох більш пізніх роботах для пояснення механізму інгібування [5, 6]. Таким чином, є підстави вважати, що інгібування процесу горіння вуглеводнів полягає у захопленні інгібітором активних радикалів. Однак виникає питання, як відбувається захоплення активних радикалів із зони горіння: самою молекулою інгібітора або ж продуктами її розкладу. В даному випадку, коли мова йде про короткоживучі інтермедіати, корисними виявляються квантово-хімічні дослідження.

В роботі [7] диметиламін визнаний кращим інгібітором холодного полум'я н-гептану серед 29 досліджених органічних сполук з різними функціональними групами. При цьому, як відмічають автори, інгібітор діяв на стадії повільної реакції і, таким чином, попереджував виникнення холодного полум'я. Інгібуюча дія пояснювалась конкуренцією двух процесів: з одного боку – вплив домішки на зміну швидкості розгалудження ланцюгів, з іншої – на швидкість обриву ланцюгів. Цей висновок цікавий тим, що в разі інгібуючої дії амінів з різними вуглеводневими радикалами, можливо припустити, що уповільнення реакції відбувається скоріше за все, не за рахунок радикала, а безпосередньо за участю аміногрупи. На користь цього припущення також свідчать результати нашої попередньої роботи [8], в якій шляхом напівемпіричних квантово-хімічних розрахунків серед всіх продуктів термічної деструкції фосфатів амонію, найактивнішим інгібуючим компонентом був визнаний радикал $NH_2^{\bullet}$. Було показано, що, дана частинка взаємодіє з атомарним воднем (енергія зв'язування ~ 11 еВ). При цьому утворюється стабільна молекула амоніаку, і цей інгібуючий компонент може істотно зменшити швидкість горіння водневого полум'я.

Для подальшого з'ясування механізму інгібування ланцюгового горіння аміно-вмісними сполуками були проведені неемпіричні розрахунки необмеженим методом Хартрі-Фока в базисі 6-31G шляхів деструкції молекул етил-заміщених амінів, а також досліджені імовірності взаємодії продуктів розкладу з активними центрами полум'я (АЦП). В результаті проведених квантово-хімічних розрахунків було з'ясовано, що розклад досліджуваних молекул відбувається гомолітично; це дає підстави припустити їхню участь в ланцюгових реакціях. Як показали наші розрахунки ряду етил-заміщених амінів, найбільш низьку енергію термічної деструкції має етиламін $C_2H_5NH_2$. При цьому утворюється етил-радикал і іміно-радикал. Характерно, що величина енергії підвищується із збільшенням кількості замінників (таблиця 1).

Таблиця 1

Результати неемпіричного розрахунку необмеженим методом Хартрі-Фока шляхів термічної деструкції молекул етил-заміщених амінів.

№ п/п	Шляхи деструкції	Енергія розриву зв'язку, Е, ккал/моль
1	$C_2H_5NH_2 \rightarrow C_2H_5NH^{\bullet} + H^{\bullet}$	32,7
2	$C_2H_5NH_2 \rightarrow C_2H_5^{\bullet} + NH_2^{\bullet}$	51,4
3	$(C_2H_5)_2NH \rightarrow C_2H_5NH^{\bullet} + C_2H_5^{\bullet}$	56,9
4	$(C_2H_5)_2NH \rightarrow (C_2H_5)_2N^{\bullet} + H^{\bullet}$	64,1
5	$(C_2H_5)_2NH \rightarrow NH(C_2H_5\text{-}CH^{\bullet}\text{-}CH_3) + H^{\bullet}$	76,2
6	$(C_2H_5)_2NH \rightarrow NH(C_2H_5\text{-}CH_2\text{–}CH_2^{\bullet}) + H^{\bullet}$	84,5
7	$(C_2H_5)_2NH \rightarrow NH^{\bullet} + 2(C_2H_5)^{\bullet}$	96,7
8	$(C_2H_5)_3N \rightarrow (C_2H_5)_2N^{\bullet} + C_2H_5^{\bullet}$	97,0

Однак, для інгібованих реакцій, що відбуваються при горінні водневого полум'я, найбільш ефективним можна вважати саме диетиламін, оскільки при термічній деструкції етиламіну, як видно із таблиці 1, переважає розрив зв'язку з утворенням атому водню, який, як відомо, відіграє ключову роль в процесах розвитку ланцюгового горіння. Враховуючі ці висновки, а також те, що в експериментальних роботах саме диетиламін виявив інгібуючі властивості по відношенню до водневого полум'я, для подальшого дослідження ми обрали саме цю речовину. Для з'ясування імовірних інгібуючих компонентів був проведений розрахунок шляхів деструкції цієї молекули, результати якого представлені в таблиці 2.

Аналізуючи результати розрахунків, можна одразу визнати, що в цілому гомолітичний розклад відбувається достатньо легко, про що свідчить те, що майже всі енергії розриву зв'язків за абсолютною величиною менше або не набагато перевищують експериментальну теплоту утворення диетиламіну (ΔH ~ 72,4 ккал/моль) [9]. Порівнюючи значення енергій, можна визначити найбільш імовірний шлях термічної деструкції, як самої молекули диетиламіну, так і продуктів її розкладу. Як видно, етил-радикал порівняно легко відщеплюється від молекули діетиламіну. У подальшому при деструкції амін-етил радикал дає частинку NH: з найменшою енергією:

1. $(C_2H_5)_2NH \rightarrow C_2H_5^{\bullet} + C_2H_5NH^{\bullet}$ ($E_{розр.зв.}$ =

56,9103 ккал/моль),

2. $C_2H_5NH^{\bullet} \rightarrow C_2H_5^{\bullet} + NH^{\bullet}$ ($E_{розр.\ зв.}$ = 39,1839 ккал/моль).

Таблиця 2

Результати неемпіричного розрахунку в базисе 6-31G шляхів термічної деструкції молекули $(C_2H_5)_2NH$

№ п/п	Шляхи деструкції	Енергія розриву зв'язку Е, ккал/моль
1	$(C_2H_5)_2NH$ - $C_2H_5^{\bullet}$ + $C_2H_5NH^{\bullet}$	56,9
2	$(C_2H_5)_2NH$ - $(C_2H_5)_2N^{\bullet}$ + $H^{\bullet}$	64,1
3	$(C_2H_5)_2NH$ - $2(C_2H_5)^{\bullet}$ + NH:	96,7
4	$(C_2H_5)_2NH$ - $(CH_3C^{\bullet}H)NHC_2H_5$ + $H^{\bullet}$	76,2
5	$(C_2H_5)_2NH$ - $(C^{\bullet}H_2CH_2)NHC_2H_5$ + $H^{\bullet}$	84,5
6	$C_2H_5NH^{\bullet}$ - $C_2H_5^{\bullet}$ + NH:	39,2

На підставі цих даних можна припустит, що радикал $C_2H_5NH^{\bullet}$ і частинка $NH^{\bullet}$ – діючі інгібуючі компоненти молекули в зоні горіння. Даний висновок корелює з експериментальними результатами [1], де підтверджується наявність даних продуктів розкладу в спектрах вуглеводневого полум'я, при додаванні діетиламіну. Наступний етап дослідження – розрахунок взаємодії продуктів розкладу молекули інгібітора з АЦП (таблиця 3). Енергія взаємодії визначалася як різниця між сумою енергій імовірних продуктів розкладу і енергією вихідної частинки (або молекули). Для порівняння також розрахована взаємодія $NH_2^{\cdot}$ з АЦП.

Як видно із результатів розрахунку, найбільш активною інгібуючою частинкою по відношенню до всіх АЦП є $C_2H_5NH^{\bullet}$. Про це свідчать дещо більші значення енергії взаємодії. Лише у випадку атомарного кисню енергія взаємодії слабко залежить від природи інгібуючого компонента. Що стосується інших центрів полум'я, то в даному випадку спостерігається деяка вибірковість. Так, наприклад, при взаємодії з гідроксилом $NH^{\bullet}$- и $C_2H_5NH^{\bullet}$-радикали мають практично однакову енергію. Атомарний водень добре захоплюється, як молекулою диетиламіну, так і продуктами її розкладу. Однак необхідно визнати, що етил-радикал і частинка $(C_2H_5)_2N^{\bullet}$ мають дещо більші енергії взаємодії, тому можна припустити, що цей канал приєднання водневого радикала може відігравати значну роль при інгібуванні. Це природно, окільки при цьому утворюються стабільні молекули диетиламіну і етану, відповідно. Так, енергія взаємодії $(C_2H_5)_2N^{\bullet}+H^{\bullet}$ складає 75,3 ккал/моль. Оскільки, як відомо, атомарний водень відіграє принципово важливу роль в ланцюговому горінні, можливо активність досліджуваного інгібітора проявляється саме в цьому. Характерно, що радикали C_2H_5-$NH^{\bullet}$ і $NH^{\bullet}$ мають найменші значення енергії взаємодії з атомом водню ($E_{вз}$ = 33,0 і 56,5 ккал/моль, відповідно). Як видно, етил-радикал виявляє помітний вплив на реакційну здатність аміногрупи по відношенню до радикала $H^{\bullet}$, підвищуючі вірогідність їхньої взаємодії. В той же час, збільшеною виявляється енергія взаємодії C_2H_5-$NH^{\bullet}$ з атомарним киснем і гідроксо-радикалом. Для інших активних центрів полум'я енергії взаємодії дещо менше.

Цікаво прослідкувати зміну електронної густини на атомі Нітрогену в залежності від числа вуглеводневих радикалів, зв'язаних з аміногрупою в частинках: $(C_2H_5)_2$-NH, C_2H_5-$NH^{\bullet}$, $HN^{\bullet}$. Це, зокрема, допоможе зрозуміти вплив радикалу на рухливість аміногрупи, яка, як показано вище, проявляє значну інгібуючу активність.

Аналіз електронної заселенності показує, що вона неістотно збільшується зі збільшенням кількості вуглеводневих радикалів, зв'язаних з аміногрупою $NH^{\bullet}$. Із зменшенням заселеності на атомі Нітрогену, активність відповідної частинки по відношенню до АЦП збільшується. Таким чином, інгібуючі компоненти діетиламіну по мірі збільшення активності можно розмістить в такій послідовності:

$(C_2H_5)_2NH \rightarrow C_2H_5NH^{\bullet} \rightarrow (C_2H_5)_2N^{\bullet} \rightarrow NH^{\bullet}$

Одже, можна зробити висновок про те, що з активними центрами полум'я краще взаємодіють «уламки» молекули інгібітора (радикали, що утворюються при термічній деструкції), хоч і сама молекула проявляє значну інгібуючу дію, особливо по відношенню до атомарного водню. Проведене дослідження показало, що інгібуюча активність зростає по мірі зменшення розміру радикала, а також

Таблиця 3

Енергія взаємодії активних інгібуючих компонентів з активними центрами полум'я

№ п/п	Активні центри полум'я	Енергія взаємодії, Е, а.о.				
	Продукти деструкції	$(C_2H_5)_2N^{\bullet}$	$C_2H_5^{\bullet}$	$C_2H_5NH^{\bullet}$	NH:	$NH_2^{\cdot}$
1	$H^{\bullet}$	75,3	84,3	33,0	56,5	85,6
2	$OH^{\bullet}$	18,7	49,0	259,7	247,8	258,6
3	$O^{\bullet}$	90,4	113,6	94,2	74,9	94,7

підтвердило коректність механізму дії інгібіторів у якості пасток для активних центрів полум'я.

Таблиця 4

Заряди на атомі Нітрогену в аміногрупі в продуктах термічної деструкції діетиламіну

Інгібуючі частинки	Заряд на атомі N
$(C_2H_5)_2NH$	-0,764
$C_2H_5NH^{\bullet}$	-0,4807
$(C_2H_5)_2N^{\bullet}$	-0,3839
$NH^{\bullet}$	-0,2752

З метою пошуку шляхів підвищення ефективності інгібуючого компонента, а також пролонгування його дії, подальше дослідження пов'язане з імобілізацією диетиламіну, а також продуктів деструкції, що виявили активність по відношенню до АЦП на поверхні дисперсного кремнезему. Як показали наші розрахунки, енергії розриву зв'язків між поверхнею кремнезему та аміно- і алкільними радикалами, зв'язаними з поверхнею через кисневий місток, значно менші аналогічних енергій розриву, безпосередньо від атома кремнію на поверхні аеросилу (таблиця 5). Якщо порівнювати енергії розриву зв'язків досліджуваних частинок, зв'язаних з поверхнею кремнезема через кисень, то одразу можна помітити, що найменше значення відповідає деструкції з відривом частинки $NH_2^{\bullet}$ ($E_{розр.зв.}$ = 20,1 ккал/моль). При цьому, безпосередньо від кисневої поверхні відрив відбувається більш, ніж у тричі легше, ніж від імобілізованої етильної групи ($E_{розр.зв}$ = 62,8 ккал/моль). Приблизно така ж енергія необхідна для відриву іміноетильного радикала від поверхні.

Енергія розриву зв'язку між поверхнею кремнезема та аміногрупою в 1,4 рази менша, ніж аналогічна енергія між поверхнею та етильним радикалом. Отже частинка $NH_2^{\bullet}$ легше відщеплюється ніж радикал $CH^{\bullet}_2$-CH_3. Тому, якщо використовувати кремнезем, як підладку для аміно-групи, то звільнена від цього радикала в процесі термічної деструкції поверхня кремнезему, в свою чергу, буде вловлювати етильні радикали із вогнища полум'я, а частинка NH_2 діятиме на атомарний водень в газовій фазі. Таким чином, може бути досягнута подвійна інгібуюча дія. Цікаво відмітити той факт, що хоча енергія термічної деструкції етиламіну, імобілізованого на поверхні кремнезема, трохи більша аналогічної енергії при деструкції цієї ж молекули у вільному стані, однак серед продуктів розкладу цієї речовини з поверхні аеросилу, не утворюються такі активні центри полум'я, як атомарний водень (таблиця 5), а також додатково з'являється новий компонент, що являє собою поверхню кремнезема, який здатен активно нейтралізувати майже всі відомі активні центри полум'я.

Отже, як видно з таблиці 5, найбільш імовірний шлях термічної деструкції молекули диетиламіну, імобілізованої на поверхні кремнезему, відбувається з утворенням радикалів $NHC_2H_5^{\bullet}$ та $(OH)_3SiO\text{-}C_2H^{\bullet}_4$, причому енергія розриву зв'язку ($E_{р.зв.}$ = 61,2 ккал/моль) майже не відрізняється від енергії термічної деструкції молекули диетиламіну (таблиця 2). При цьому також утворюється радикал $NHC_2H_5^{\bullet}$, який, як ми показували раніше, проявляє високу інгібуючу здатність відносно процесів ланцюгового поширення полум'я.

Ще один факт на користь молекули диетиламіну, імобілізованої на поверхні кремнезему, як більш ефективної інгібуючого компонента процесів горіння, може бути те, що при розкладі цієї речовини не утворюється етил-радикал, котрий здатен підтримувати процеси горіння (як у випадку термічної деструкції молекули диетиламіну). Натомість, з'являється новий компонент, який, за нашими розрахунками може зв'язувати активні центри полум'я, тим самим зменшуючи сумарну швидкість поширення ланцюгових реакцій горіння. Тому, якщо використовувати кремнезем, як підкладку для молекули диетиламіну, то звільнена від цього радикала в процесі термічної деструкції поверхня кремнезему, в свою чергу, буде вловлювати активні центри полум'я із вогнища полум'я, а частинка $NHC_2H_5^{\bullet}$ діятиме на атомарний водень в

Таблиця 5

Результати неемпіричного розрахунку можливих шляхів термічної деструкції алкильних і аміно-радикалів на поверхні кремнезему в базисі 6-31G

Шлях деструкції	$E_{розр.зв.}$, ккал/моль
$(OH)_3SiO\text{-}C_2H_4\text{-}NHC_2H_5 \rightarrow (OH)_3SiO\text{-}C_2H^{\bullet}_4 + NHC_2H_5^{\bullet}$	61,2
$(OH)_3SiO\text{-}C_2H_4\text{–}NHC_2H_5 \rightarrow (OH)_3SiO\text{-}C_2H_4NH^{\bullet} + C_2H_5^{\bullet}$	124,9
$(OH)_3SiO\text{-}C_2H_4\text{-}NHC_2H_5 \rightarrow (OH)_3SiO + C_2H_4NH\,C_2H_5^{\bullet}$	387,5
$(OH)_3Si\text{-}NH_2 \rightarrow (OH)_3Si^{\bullet} + NH_2^{\bullet}$	108,5
$(OH)_3Si\text{-}NH^{\bullet} \rightarrow (OH)_3Si^{\bullet} + NH^{\bullet\bullet}$	136,7
$(OH)_3Si\text{-}NHC_2H_5 \rightarrow (OH)_3Si^{\bullet} + NH^{\bullet}\text{-}C_2H_5$	166,1
$(OH)_3SiO\text{-}NH_2 \rightarrow (OH)_3SiO^{\bullet} + NH_2^{\bullet}$	20,1
$(OH)_3Si\,O\text{-}NH^{\bullet} \rightarrow (OH)_3Si\,O^{\bullet} + NH^{\bullet\bullet}$	52,5
$(OH)_3SiO\text{-}C_2H_4\,NH_2 \rightarrow (OH)_3SiO\text{-}C_2H^{\bullet}_4 + NH_2^{\bullet}$	62,8
$(OH)_3SiO\text{-}C_2H_4\,NH_2 \rightarrow (OH)_3SiO^{\bullet} + C_2H_4\,NH_2^{\bullet}$	63,2

газовій фазі. Таким чином, може бути досягнута подвійна інгібуюча дія.

Кукуєва В.В. – к. х. н., доцент;
Кирилов О.А. – ад'юнкт кафедри процесів горіння, фізики та хімії;
Гребенюк А.Г. – к. х. н., ст. н. с.;
Лобанов В.В. – д. х. н., пров. н. с.

[1] C. Ouannes, T. Wilson. Quenching of singlet oxygen by tertiary aliphatic amines. *Effect of DABCO.-Ibid. //* **90**(23), pp. 6527-6528 (1968).
[2] Н.А. Нестерко, Є.Н. Таран. Спектроскопическое изучение механизма ингибирования диэтиламином и галогенсодержащими соединениями процесса горения ацетилено-воздушного пламени // *Физика горения и взрыва*, **14**(5), сс. 96-107 (1978).
[3] P.W. Jones, K. Selby, M.J. Tidball, and J. Waddington. Inhibition of Gas-Phase Oxydation Reactions by Aliphatic Amines // *Combustion and Flame*, **22,** pp. 209-217 (1974).
[4] W.A. Rosser, H. Wise, J. Miller. // *7th Sympos. on Combustion*. London, p. 36 (1959).
[5] С.Я. Янтовский, Н.А. Шварцман, М.И. Порсов. Спектрографическое исследование пламен предварительно смешанных пропано-воздушных смесей в процессе ингибирования // *Кинетика и катализ*, **11**(5), с. 1109 (1970).
[6] V. Babushok, G.T. Linteris, W. Tsang, and D. Reinelt. // *Combustion and Flame*, **115**, pp. 551-560 (1998).
[7] Vora Namrata, Siow Jia Eng, and Normand M. Laurendeau, // *Combustion and flame*, **126,** pp. 1393-1401 (2001).
[8] C.F.H. Topper and A. Titchard. // *Combustion and Flame*, **16**, pp. 223-332 (1971).
[9] В.В. Кукуєва. Хімічна природа інгібуючої дії вогнегасних речовин // *Пожежна безпека*, **52**(1), сс. 30-31 (2004).
[10] А.Н. Баратов, А.Я. Корольченко, Г.Н. Кравчук. *Пожаровзрывоопасность веществ и материалов и средства их тушения.* Химия, М. 315 с. (1990).
[11] З.Г. Дзоценидзе. Закономерности и механизмы неаддитивных эффектов гомогенного и гетерогенного ингибирования процессов горения.: *Автореф. дис. докт*., Тбилиси, (1984).

V.V. Kukueva[1], O.A. Kirillov[1], A.G. Grebenyuk[2], V.V. Lobanov[2]

Quantum-chemical research of diethyl amine inhibition action

[1]Fire Safety Institute of Chernobyl herois,Onoprienko str., 8, city Cherkassy, 18034,Ukraine,tel. (80472)55-09-62, kukueva@yahoo.com
[2]Surface Chemistry Institute NAS Ukraine,str.Gen.Naumova , 17, city Kiev, 03164, Ukraine

The destruction ways of diethylamine appeared to be a hydrocarbon fuel combustion inhibitor have been researched by the ab initio calculation with 6-31 G basis set. The best energy of probable destruction ways of inhibitor molecule was shown and was also analyzis the probability of interaction of the destruction products with active sites of flame. It was proved that the destruction of inhibiting particles on silica surface could be easily than that of isolated diethylamine molecule.