

## МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

УДК 614.84:536.7

DOI: 10.30977/BUL.2219-5548.2026.112.0.17

ОЦІНЮВАННЯ ПОЖЕЖНОЇ БЕЗПЕКИ ЕПОКСИДНИХ КОМПОЗИТІВ  
ДЛЯ БУДІВНИЦТВА СПОСОБОМ РОЗРАХУНКУ ТЕПЛОТИ ЗГОРЯННЯ АК-  
ТИВНИХ РОЗРІДЖУВАЧІВГапон Ю. К.<sup>1</sup>, Майборода А. О.<sup>2</sup>, Нуязін В. М.<sup>2</sup>, Власенко О. В.<sup>2</sup>, Гринько Ю. М.<sup>2</sup><sup>1</sup>Харківський національний автомобільно-дорожній університет<sup>2</sup>Національний університет цивільного захисту України

**Анотація.** У роботі проаналізовано й порівняно експериментальні й теоретичні значення теплоти згоряння активних розріджувачів епоксидних смол – аліфатичних гліцидилових етерів. Установлено, що молярна теплота згоряння досліджуваного ряду закономірно зростає від 2355,6 кДж/моль (для метилгліцидилового етеру) до 4392,2 кДж/моль (для н-бутилгліцидилового етеру). Доведено, що найбільш точним для прогнозування пожежної безпеки є метод, у якому беруться до уваги структурні особливості, де похибка становить лише 0,1–1,7 %. Метод розрахунку за елементним складом продемонстрував середню похибку 2,8–3,0 %, проте він не розрізняє структурні ізомери (н-бутил- і трет-бутилгліцидилові етери). Виявлено непридатність методу енергій хімічних зв'язків для зазначеного класу сполук, оскільки він систематично занижує результат на 482,1–933,1 кДж/моль, а похибка сягає 20,5–21,2 %. Отримані показники дають змогу оптимізувати склад епоксидних композитів для будівництва з метою підвищення їх вогнестійкості.

**Ключові слова:** активні розріджувачі, алкілгліцидилові етери, епоксидні смоли, пожежна небезпека, розрахункові методи, теплота згоряння.

**Вступ**

Епоксидні смоли широко застосовуються у виробництві сучасних полімерних композиційних матеріалів для будівництва. Завдяки високій адгезії, механічній міцності, хімічній стійкості та довговічності вони використовуються в складі клеїв, покриттів, композитів, полімербетонів, а також захисних і конструкційних матеріалів. Водночас експлуатаційні властивості епоксидних композицій значною мірою залежать від їх складу, зокрема від наявності модифікуючих добавок і розріджувачів [1–3].

Крім того, у виробництві комерційних епоксидних смол широко застосовуються їх розріджувачі – гліцидилові етери, які також містять епоксидні групи й здатні вбудовуватися в структуру епоксидного полімеру під час твердіння. Такі сполуки називають активними розріджувачами, оскільки вони не лише знижують в'язкість смоли, але й беруть участь у формуванні тривимірної полімерної сітки. Унаслідок зміни типу гліцидилового етеру можна регулювати властивості кінцевого матеріалу, зокрема його жорсткість, еластичність, міцність і технологічні властивості. Обраний для дослідження гомологічний ряд аліфатичних гліцидилових сполук

(метил-, етил-, пропіл-, бутилгліцидилові етери) зумовлений їх широким застосуванням у промисловості як реакційноздатних розріджувачів епоксидних систем. Крім того, варіювання довжини алкільного радикалу дає змогу простежити закономірності впливу молекулярної будови на енергетичні властивості й показники пожежної небезпеки.

Водночас широке виробництво й використання епоксидних сполук зумовлює необхідність приділяти значну увагу оцінюванню їх пожежної небезпеки.

Одним із важливих показників пожежної небезпеки органічних речовин є теплота згоряння, яка характеризує кількість теплової енергії, що виділяється під час повного окиснення речовини.

**Аналіз публікацій**

Процеси синтезу, особливості молекулярної структури й механізми формування просторових мереж епоксидних смол детально розглянуто в нещодавніх роботах [4, 5]. Окремий напрям досліджень присвячений розробленню й застосуванню активних розріджувачів – гліцидилових етерів, які не лише знижують в'язкість композицій, а й вбудовуються в структуру полімеру, забезпечу-

ючи необхідний баланс між міцністю та пластичністю [6–8].

Досліджено процеси отримання пероксидних, карбоксилвмісних і метакрилових похідних, що сприяє їх застосуванню як ефективних адгезивів, модифікаторів гумових сумішей і компонентів для високоміцних композитів [9, 10].

Питання пожежної безпеки епоксидних матеріалів переважно розглядаються в контексті оцінювання термостабільності та горючості вже готових композиційних систем. Існують ґрунтовні дослідження щодо впливу антипіренів на основі різних сполук на схильність до займання та самозгасання епоксидних композицій [11–13].

Однак, попри широке використання активних розріджувачів, їх індивідуальні показники пожежної небезпеки, зокрема теплота згоряння, залишаються висвітленими фрагментарно. Більша частина доступної інформації є результатом експериментальних досліджень лише окремих представників класу гліцидилових ефірів [14, 15].

Теоретичні методи розрахунку енергетичних властивостей, що ґрунтуються на законах термодинаміки й емпіричних адитивних схемах, в умовах застосування до епоксидних сполук часто дають значні похибки. Це зумовлено специфікою енергії напруження епоксидного циклу, що потребує уточнення наявних моделей. Зокрема в процесі порівняння *n*-бутилгліцидилового етеру та його ізомеру – трет-бутилгліцидилового етеру – стандартні розрахункові підходи не повною мірою беруть до уваги просторовий вплив розгалужених алкільних радикалів на загальну енергетику горіння [16–18].

#### Мета й постановка завдання

Метою роботи є дослідження точності визначення теплоти згоряння активних розріджувачів епоксидних смол – аліфатичних гліцидилових етерів – із застосуванням розрахункових методів і оцінювання впливу енергії напруження епоксидного циклу на достовірність отриманих результатів.

Для досягнення мети необхідно розрахувати теплоту згоряння типових представників класу алкілгліцидилових етерів за елементним складом, структурно-адитивним методом і за різницею енергій зв'язків, а також порівняти ці значення з експериментальними показниками. Результати дослідження сприятимуть підвищенню точності прогнозування показників пожежної безпеки епоксидних

композитів, що використовуються в будівельних конструкціях.

#### Методика дослідження

У роботі за допомогою розрахунку визначено теплоту згоряння алкілгліцидних етерів і отримані значення порівняно з експериментальними показниками.

Як вихідні експериментальні значення використано показники, наведені в роботі [15], де теплоту згоряння гліцидилових етерів було визначено способом спалювання ретельно очищених зразків у кисні в калориметричній установці з ізотермічною оболонкою.

Розрахунок теплоти згоряння досліджуваних сполук проводили трьома теоретичними методами, які широко застосовуються в теорії горіння органічних речовин.

Перший метод базується на використанні структурних характеристик з огляду на особливості будови молекули. У цьому методі теплота згоряння визначається за формулою

$$-\Delta H^{\circ}_{zg} = 4,184(\sum a_1 + 2\beta \sum b_1), \quad (1)$$

де  $a_1$  і  $b_1$  – структурні константи, що визначають внесок елементного складу й структурних особливостей молекули;  $\beta$  – стехіометричний коефіцієнт перед молекулою кисню в рівнянні реакції повного згоряння досліджуваної речовини.

Загалом розрахунок теплоти згоряння за структурно-адитивним методом може бути поданий як сума внесків окремих структурних фрагментів:

$$\Delta H = \sum n_i \Delta H_i + \Delta H_{кор}, \quad (2)$$

де  $n_i$  – кількість відповідних структурних елементів у молекулі;  $\Delta H_i$  – внесок кожного структурного фрагмента;  $\Delta H_{кор}$  – поправка, що бере до уваги особливості будови молекули, зокрема наявність епоксидного циклу й розгалуження.

Другий метод ґрунтується на використанні енергій хімічних зв'язків між атомами в молекулі. Теплоту згоряння визначали як різницю між сумою енергій зв'язків у продуктах реакції та сумою енергій зв'язків у вихідних речовинах:

$$-\Delta H^{\circ}_{zg} = \sum E_{прод} - \sum E_{вих}, \quad (3)$$

де  $\sum E_{прод}$  – сумарна енергія зв'язків у продуктах згоряння;  $\sum E_{вих}$  – сумарна енергія зв'язків у молекулах вихідних речовин.

Додатково застосовувався третій метод, оснований на масовому вмісті вуглецю, водню й кисню в молекулі речовини. Він дає змогу отримати наближене значення вищої теплоти згоряння без огляду на структурні особливості молекули:

$$Q_B = 339,4C + 1257H - 108,9O, \quad (4)$$

де  $C$ ,  $H$ ,  $O$  – масовий відсоток у суміші вуглецю, водню, кисню відповідно.

Молярна теплота згоряння обчислюється за формулою

$$Q_B = \frac{1000 \cdot \Delta H_{\text{зг.}}}{M}, \quad (5)$$

де  $M$  – молярна маса речовини.

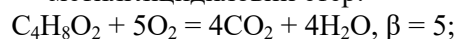
Порівняння розрахованих значень теплоти згоряння з експериментальними показниками дало змогу оцінити точність застосованих методів і встановити вплив структурних особливостей молекул, зокрема наявності епоксидного циклу, на енергетичні властивості досліджуваних алкілгліцидних етерів.

### Результати та їх обговорення

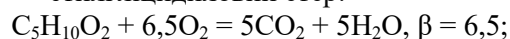
Для розрахунку теплоти згоряння з огляду на структурні особливості першочергово було складено рівняння реакцій повного згоряння досліджуваних алкілгліцидних етерів у

кисні для визначення стехіометричного коефіцієнта  $\beta$ :

– метилгліцидиловий етер:



– етилгліцидиловий етер:



– бутилгліцидиловий етер:



На основі отриманих коефіцієнтів і визначених структурних констант  $a_1$  і  $b_1$  (що містять основні значення для вуглеводнів, поправки на етерну групу, епоксидний цикл і розгалуження ланцюга) було розраховано теплоту згоряння за формулою (1). Результати подано в табл. 1.

Теплоту згоряння досліджуваних етерів за методом, який бере до уваги енергію хімічних зв'язків між атомами в молекулі, розраховано за формулою (3) та подано в табл. 2.

Аналіз результатів, отриманих за допомогою розрахунку за масовим вмістом елементів (4), дав змогу встановити загальну залежність теплоти згоряння від хімічного складу сполук. Результати подано в табл. 3.

Результати порівняння значень теплоти згоряння досліджуваних етерів гліцидолу, отриманих розрахунковими методами, з раніше отриманими експериментальними показниками [15] й абсолютні та відносні похибки кожного розрахунку подано в табл. 4.

Таблиця 1 – Вищі теплоти згоряння досліджуваних етерів з огляду на структурні особливості

| № | Етер                   | $\beta$ | $a_1$ | $b_1$ | $-\Delta H_{\text{зг.}}$ ,<br>кДж/моль | $M$ | $Q_B$ ,<br>кДж/кг |
|---|------------------------|---------|-------|-------|--|-----|-------------------|
| 1 | метилгліцидиловий      | 5       | 62,2  | 51,05 | 2396,18                                | 88  | 27229             |
| 2 | етилгліцидиловий       | 6,5     | 62,2  | 51,05 | 3036,96                                | 102 | 29774             |
| 3 | н-бутилгліцидиловий    | 9,5     | 62,2  | 51,05 | 4318,52                                | 130 | 33219             |
| 4 | трет-бутилгліцидиловий | 9,5     | 58,5  | 51,14 | 4310,19                                | 130 | 33155             |

Таблиця 2 – Вищі теплоти згоряння досліджуваних етерів з огляду на енергію хімічних зв'язків

| № | Етер                   | Енергія зв'язку, кДж/моль |                  | $-\Delta H_{\text{зг.}}$ ,<br>кДж/моль | $M$ | $Q_B$ ,<br>кДж/кг |
|---|------------------------|---------------------------|------------------|--|-----|-------------------|
|   |                        | продукти згоряння         | вихідні речовини |  |     |                   |
| 1 | метилгліцидиловий      | 8976,48                   | 7102,83          | 1873,50                                | 88  | 21289             |
| 2 | етилгліцидиловий       | 11220,60                  | 8818,22          | 2408,36                                | 102 | 23611             |
| 3 | н-бутилгліцидиловий    | 15708,84                  | 12249,71         | 3459,13                                | 130 | 26608             |
| 4 | трет-бутилгліцидиловий | 15708,84                  | 12249,71         | 3459,13                                | 130 | 26608             |

Таблиця 3 – Вищі теплоти згоряння досліджуваних етерів за масовим вмістом елементів

| № | Етер                   | $339,4 \cdot C$ | $1257 \cdot H$ | $-108,9 \cdot O$ | $-\Delta H_{\text{зг.}}$ ,<br>кДж/моль | $M$ | $Q_B$ ,<br>кДж/кг |
|---|------------------------|-----------------|----------------|------------------|--|-----|-------------------|
| 1 | метилгліцидиловий      | 18514,27        | 11426,13       | -3959,60         | 2286,3                                 | 88  | 29523             |
| 2 | етилгліцидиловий       | 19963,51        | 12318,60       | -3417,28         | 2944,2                                 | 102 | 28298             |
| 3 | н-бутилгліцидиловий    | 21932,03        | 13525,32       | -2681,12         | 4260,9                                 | 130 | 25212             |
| 4 | трет-бутилгліцидиловий | 21932,03        | 13525,32       | -2681,12         | 4260,9                                 | 130 | 25212             |

Таблиця 4 – Порівняння теплотворних здатностей досліджуваних етерів

| № | Експеримент [12] | Результати визначення теплоти згоряння, $-\Delta H_{\text{зг.}}^{\circ}$ , кДж/моль |          |              |                                    |          |              |                                       |          |              |
|---|------------------|---|----------|--------------|------------------------------------|----------|--------------|---------------------------------------|----------|--------------|
|   |                  | Розрахункові методи   |          |              |                                    |          |              |                                       |          |              |
|   |                  | за масовим вмістом елементів  |          |              | з огляду на структурні особливості |          |              | з огляду на енергію хімічних зв'язків |          |              |
|   |                  | $-\Delta H_{\text{зг.}}^{\circ}$  | $\Delta$ | $\delta, \%$ | $-\Delta H_{\text{зг.}}^{\circ}$   | $\Delta$ | $\delta, \%$ | $-\Delta H_{\text{зг.}}^{\circ}$      | $\Delta$ | $\delta, \%$ |
| 1 | 2355,6           | 2286,3  | 69,3     | 2,9          | 2396,2                             | 40,6     | 1,7          | 1873,5                                | 482,1    | 20,5         |
| 2 | 3033,9           | 2944,2  | 86,4     | 2,9          | 3037,0                             | 3,1      | 0,1          | 2408,3                                | 625,6    | 20,6         |
| 3 | 4392,2           | 4260,9  | 131,3    | 3,0          | 4318,5                             | 73,7     | 1,7          | 3459,1                                | 933,1    | 21,2         |
| 4 | 4379,0           | 4260,9  | 131,3    | 3,0          | 4310,2                             | 68,8     | 1,6          | 3459,1                                | 919,9    | 21,0         |

Результати порівняльного аналізу експериментальних і розрахункових значень теплоти згоряння для всього гомологічного ряду досліджуваних алкілгліцидилових етерів наочно подано на рис. 1.

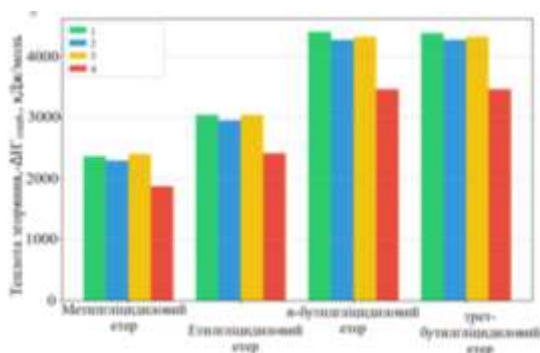


Рис. 1. Порівняння експериментальних і розрахункових значень теплоти згоряння алкілгліцидилових етерів: 1 – експериментальні показники; 2 – метод за масовим вмістом елементів; 3 – метод з огляду на структурні особливості; 4 – метод з огляду на енергію хімічних зв'язків

Аналіз експериментальних значень вказує на пряму кореляцію між молярною масою алкілгліцидилових етерів та їх теплотворною здатністю. Зростання значень від 2355,6 кДж/моль (метилгліцидиловий етер) до 4392,2 кДж/моль (н-бутилгліцидиловий етер) підтверджує адитивний внесок  $\text{CH}_2$ -груп гомологічного ряду в загальну енергетику окиснення. Проте порівняння результатів трьох розрахункових методів виявило суттєві розбіжності, зумовлені особливостями хімічної архітектури досліджуваних сполук.

Найбільше відхилення від експерименту (понад 21 %) зафіксовано в процесі застосування методу з огляду на енергію хімічних зв'язків. Розрахункові значення виявилися систематично нижчими за фактичні на величину від 482,1 до 933,1 кДж/моль. Така девіація зумовлена тим, що стандартні енергії зв'язків C–C і C–O, закладені в основу мето-

ду, розраховані для лінійних аліфатичних структур. У разі гліцидилових етерів наявність напруженого тричленного оксиранового циклу суттєво змінює термодинамічний баланс. Енергія напруження циклу, що вивільняється внаслідок розриву зв'язків під час горіння, є додатковим джерелом теплоти, перетворюючи епоксидну групу на ініціатор інтенсивної термічної деструкції. Отже, активні розріджувачі визначаються вищим енергетичним потенціалом, ніж лінійні етери з аналогічним атомним складом.

Обмеженість методу за масовим вмістом елементів найбільш чітко простежується під час аналізу структурних ізомерів. Цей метод генерує ідентичний результат (4260,9 кДж/моль) для н-бутил- і трет-бутилгліцидилових етерів, ігноруючи розбіжності в їх внутрішній будові. Зниження енергетичного виходу для трет-бутилового радикалу пояснюється стеричними факторами та змінною енергією дисоціації зв'язків у розгалужених структурах. Це підтверджує, що для точного прогнозування пожежної безпеки композитів недостатньо оперувати лише брутто-формулами сполук.

### Висновки

Проведено порівняльний аналіз експериментальних і теоретичних значень теплоти згоряння гомологічного ряду алкілгліцидилових етерів. Виявлено, що молярна теплота згоряння закономірно зростає з подовженням алкільного радикалу: від 2355,6 кДж/моль для метилгліцидилового етеру до 4392,2 кДж/моль для н-бутилгліцидилового етеру, що зумовлено збільшенням кількості енергоємних зв'язків у структурі.

Доведено, що метод, який бере до уваги структурні особливості, є найбільш точним для прогнозування пожежної безпеки активних розріджувачів. Мінімальна похибка за цим методом зафіксована для метилгліцидилового етеру (0,1 %), а максимальна не перевищує 1,7 %. Це пояснюється коректним врахуван-

ням енергії напруження епоксидного циклу та просторової будови алкільних замісників.

Установлено, що метод розрахунку за елементним складом забезпечує прийнятну для практичних цілей точність із середньою похибкою 2,8–3,0 %. Однак цей підхід є обмеженим, оскільки дає ідентичні розрахункові значення (4260,9 кДж/моль) для ізомерів бутилгліцидилового етеру, не зважаючи на їх структурні відмінності.

Доведено низьку точність методу енергій хімічних зв'язків для аналізу епоксидних сполук. Похибка за цим методом є стабільно високою й становить 20,5–21,2 %, що призводить до заниження розрахункових значень теплоти згоряння на 482,1–933,1 кДж/моль. Така розбіжність зумовлена додатковим енергетичним внеском циклічної структури, що не береться до уваги стандартними адитивними схемами.

Досягнуті результати дають змогу рекомендувати їх з огляду на структурні особливості як надійний інструмент для попереднього оцінювання пожежної безпеки нових епоксидних композитів ще на стадії проектування їх хімічного складу. Це дає змогу оптимізувати вміст активних розріджувачів у будівельних матеріалах для досягнення необхідних показників вогнестійкості. Практичне значення отриманих результатів полягає в можливості використання запропонованого підходу для попереднього оцінювання пожежної небезпеки нових епоксидних композитів ще на етапі їх проектування без необхідності проведення складних і ресурсомістких експериментальних досліджень.

#### Література

1. Verkoyen P., Frey H. Long Chain Alkyl Epoxides and Glycidyl Ethers: An Underrated Class of Monomers. *Macromolecular Rapid Communications*. 2020. Vol. 41. No. 15. P. 2000225. DOI:10.1002/marc.20200225.
2. Laskowska A. et al. The effect of reactive diluents on curing of epoxy resins and properties of the cured epoxy coatings. *Journal of Coatings Technology and Research*. 2022. Vol. 19. No. 6. P. 1743–1755. DOI:10.1007/s11998-022-00737-4.
3. Matthes R., Frey H. Polyethers Based on Short Chain Alkyl Glycidyl Ethers: Thermoresponsive and Highly Biocompatible Materials. *Biomacromolecules*. 2022. Vol. 23. No. 6. P. 2241–2260. DOI:10.1021/acs.biomac.2c00223.
4. Nishimura T., Arimitsu K., Matsumoto M. et al. Network Formation and Physical Properties of Epoxy Resins for Future Practical Applications. *JACS Au*. 2022. Vol. 2. No. 7. P. 1522–1542. DOI:10.1021/jacsau.2c00120.
5. Epoxy resins: Synthesis, structure, and properties. In: *Handbook of Thermosetting Foams, Aerogels, and Hydrogels*. Elsevier, 2024. P. 251–286. DOI:10.1016/B978-0-323-99452-1.00004-8.
6. Wang X., Li Y., Zhang H. Comparative study of reactive diluents with different molecular structures on the curing properties of epoxy adhesives and the interface bonding properties with mortar. *International Journal of Adhesion and Adhesives*. 2023. Vol. 125. P. 103473. DOI:10.1016/j.ijadhadh.2023.103473.
7. Laskowska A. et al. The effect of reactive diluents on curing of epoxy resins and properties of the cured epoxy coatings. *Journal of Coatings Technology and Research*. 2022. Vol. 19. No. 6. P. 1743–1755. DOI:10.1007/s11998-022-00737-4.
8. Baller J. et al. Biobased epoxy reactive diluents prepared from monophenol derivatives: effect on viscosity and glass transition temperature of epoxy resins. *Polymers*. 2023. Vol. 15. No. 19. P. 3856. DOI:10.3390/polym15193856.
9. Rudawska A., Frigione M. Effect of Diluents on Mechanical Characteristics of Epoxy Compounds. *Polymers*. 2022. Vol. 14. No. 11. P. 2277. DOI:10.3390/polym14112277.
10. Pastarnokienė L., Jonikaitė-Švėgždienė J., Lapinskaitė N. et al. The Effect of Reactive Diluents on Curing of Epoxy Resins and Properties of the Cured Epoxy Coatings. *Journal of Coatings Technology and Research*. 2023. Vol. 20. No. 4. P. 1207–1221. DOI:10.1007/s11998-022-00737-4.
11. Li J., Zhao H., Sui G. Renewable Green Reactive Diluent for Bisphenol A Epoxy Resin System: Curing Kinetics and Properties. *RSC Advances*. 2022. Vol. 12. No. 47. P. 31699–31710. DOI:10.1039/D2RA05160E.
12. Zhang Q., Yang J., Wang D., Song L., Hu Y. Recent advances in flame-retardant epoxy resins based on phosphorus-containing compounds. *Progress in Polymer Science*. 2021. Vol. 115. P. 101377. DOI:10.1016/j.progpolymsci.2021.101377.
13. Zhao H., Wang X., Liu Y., Chen L. Flame retardancy and thermal degradation of phosphorus-modified epoxy resin systems. *Polymer Degradation and Stability*. 2019. Vol. 167. P. 62–72. DOI:10.1016/j.polymdegradstab.2019.06.019.
14. Lu S., Hamerton I. Recent developments in the chemistry of halogen-free flame retardant polymers. *Progress in Polymer Science*. 2002. Vol. 27. P. 1661–1712. DOI:10.1016/S0079-6700(02)00018-7.
15. Нуянзін В. М., Майборода А. О., Мельник О. Г., Даник О. М., Ведула С., Лесечко Д. Визначення теплоти утворення алкільгліцидних етерів для оцінки їх пожежної небезпеки. *Надзвичайні ситуації: попередження та ліквідація*. 2024. Т. 8. № 2. С. 74–83.
16. Chickos J., Acree W. Enthalpies of combustion of organic compounds: experimental data and estimation methods. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 2017. Vol. 46. No. 1. P. 013104. DOI:10.1063/1.4976850.

17. Domalski E., Hearing E. Estimation of thermodynamic properties of organic compounds using group contribution methods. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 2016. Vol. 45. No. 4. P. 043102. DOI:10.1063/1.4966138.
18. Beyer G. Flame retardant properties of epoxy resins and epoxy composites. *Fire and Materials*. 2018. Vol. 42. No. 4. P. 437–449. DOI:10.1002/fam.2504.

### References

- Verkoyen P., Frey H. Long Chain Alkyl Epoxides and Glycidyl Ethers: An Underrated Class of Monomers. *Macromolecular Rapid Communications*. 2020. Vol. 41. No. 15. P. 2000225. DOI:10.1002/marc.202000225.
- Laskowska A. et al. The effect of reactive diluents on curing of epoxy resins and properties of the cured epoxy coatings. *Journal of Coatings Technology and Research*. 2022. Vol. 19. No. 6. P. 1743–1755. DOI:10.1007/s11998-022-00737-4.
- Matthes R., Frey H. Polyethers Based on Short Chain Alkyl Glycidyl Ethers: Thermoresponsive and Highly Biocompatible Materials. *Biomacromolecules*. 2022. Vol. 23. No. 6. P. 2241–2260. DOI:10.1021/acs.biomac.2c00223.
- Nishimura T., Arimitsu K., Matsumoto M. et al. Network Formation and Physical Properties of Epoxy Resins for Future Practical Applications. *JACS Au*. 2022. Vol. 2. No. 7. P. 1522–1542. DOI:10.1021/jacsau.2c00120.
- Epoxy resins: Synthesis, structure, and properties. In: *Handbook of Thermosetting Foams, Aerogels, and Hydrogels*. Elsevier, 2024. P. 251–286. DOI:10.1016/B978-0-323-99452-1.00004-8.
- Wang X., Li Y., Zhang H. Comparative study of reactive diluents with different molecular structures on the curing properties of epoxy adhesives and the interface bonding properties with mortar. *International Journal of Adhesion and Adhesives*. 2023. Vol. 125. P. 103473. DOI:10.1016/j.ijadhadh.2023.103473.
- Laskowska A. et al. The effect of reactive diluents on curing of epoxy resins and properties of the cured epoxy coatings. *Journal of Coatings Technology and Research*. 2022. Vol. 19. No. 6. P. 1743–1755. DOI:10.1007/s11998-022-00737-4.
- Baller J. et al. Biobased epoxy reactive diluents prepared from monophenol derivatives: effect on viscosity and glass transition temperature of epoxy resins. *Polymers*. 2023. Vol. 15. No. 19. P. 3856. DOI:10.3390/polym15193856.
- Rudawska A., Frigione M. Effect of Diluents on Mechanical Characteristics of Epoxy Compounds. *Polymers*. 2022. Vol. 14. No. 11. P. 2277. DOI:10.3390/polym14112277.
- Pastarnokienė L., Jonikaitė-Švėgždienė J., Lapinskaitė N. et al. The Effect of Reactive Diluents on Curing of Epoxy Resins and Properties of the Cured Epoxy Coatings. *Journal of Coatings Technology and Research*. 2023. Vol. 20. No. 4. P. 1207–1221. DOI:10.1007/s11998-022-00737-4.

- Li J., Zhao H., Sui G. Renewable Green Reactive Diluent for Bisphenol A Epoxy Resin System: Curing Kinetics and Properties. *RSC Advances*. 2022. Vol. 12. No. 47. P. 31699–31710. DOI:10.1039/D2RA05160E.
- Zhang Q., Yang J., Wang D., Song L., Hu Y. Recent advances in flame-retardant epoxy resins based on phosphorus-containing compounds. *Progress in Polymer Science*. 2021. Vol. 115. P. 101377. DOI:10.1016/j.progpolymsci.2021.101377.
- Zhao H., Wang X., Liu Y., Chen L. Flame retardancy and thermal degradation of phosphorus-modified epoxy resin systems. *Polymer Degradation and Stability*. 2019. Vol. 167. P. 62–72. DOI:10.1016/j.polyimdegradstab.2019.06.019.
- Lu S., Hamerton I. Recent developments in the chemistry of halogen-free flame retardant polymers. *Progress in Polymer Science*. 2002. Vol. 27. P. 1661–1712. DOI:10.1016/S0079-6700(02)00018-7.
- Nuianzin V. M., Maiboroda A. O., Melnyk O. H., Danyk O. M., Vedula S., Lesechko D. Vyznachennia teploty utvorennia alkilhlitsydneykh eteriv dlia otsinky yikh pozhezhoi nebezpeky. *Nadzvychni situatsii: poperedzhennia ta likvidatsiia*. 2024. T. 8. No. 2. S. 74–83.
- Chickos J., Acree W. Enthalpies of combustion of organic compounds: experimental data and estimation methods. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 2017. Vol. 46. No. 1. P. 013104. DOI:10.1063/1.4976850.
- Domalski E., Hearing E. Estimation of thermodynamic properties of organic compounds using group contribution methods. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 2016. Vol. 45. No. 4. P. 043102. DOI:10.1063/1.4966138.
- Beyer G. Flame retardant properties of epoxy resins and epoxy composites. *Fire and Materials*. 2018. Vol. 42. No. 4. P. 437–449. DOI:10.1002/fam.2504.

**Гапон Юліана Костянтинівна**<sup>1</sup>, канд. техн. наук, доцент, доцент кафедри хімії та хімічної технології, [yuliano4kah21@gmail.com](mailto:yuliano4kah21@gmail.com), тел. +38 096-137-23-24, ORCID 0000-0002-3304-5657;

**Майборода Артем Олександрович**<sup>2</sup>, канд. пед. наук, доцент, начальник кафедри інженерної та аварійно-рятувальної техніки навчально-наукового інституту оперативно-рятувальних сил, [maiboroda\\_artem@nuczu.edu.ua](mailto:maiboroda_artem@nuczu.edu.ua), тел. +38 093-786-25-44, ORCID 0000-0001-6108-9772;

**Нуянзін Віталій Михайлович**<sup>2</sup>, канд. техн. наук, доцент, начальник кафедри радіаційного і хімічного захисту навчально-наукового інституту інженерної та спеціальної підготовки, [nuianzin\\_vitalii@nuczu.edu.ua](mailto:nuianzin_vitalii@nuczu.edu.ua), тел. +38 068-391-23-93, ORCID 0000-0003-4785-0814;

**Власенко Олександр Васильович**<sup>2</sup>, викладач кафедри інженерної та аварійно-рятувальної

техніки навчально-наукового інституту  
оперативно-рятувальних сил,  
[vlasenko\\_oleksandr@nuczu.edu.ua](mailto:vlasenko_oleksandr@nuczu.edu.ua),

тел. +38 066-363-62-01,

ORCID 0009-0002-1326-6898;

**Гринько Юрій Миколайович**<sup>2</sup>, канд. наук з

держ. упр., старший викладач кафедри  
інженерної та аварійно-рятувальної техніки,

[hrynko\\_yurii@nuczu.edu.ua](mailto:hrynko_yurii@nuczu.edu.ua),

тел. +38 067-996-73-16,

ORCID 0000-0003-1957-025X.

<sup>1</sup>Харківський національний автомобільно-  
дорожній університет, 61002, Україна, м. Харків,  
вул. Ярослава Мудрого, 25.

<sup>2</sup>Національний університет цивільного захисту  
України, 18034, Україна, м. Черкаси, вул. Онопрі-  
єнка, 8.

### Fire safety assessment of epoxy composites for construction by calculating the combustion heat of reactive diluents

**Abstract. The relevance of the problem.** Epoxy resins are widely used in modern construction for adhesives, coatings, and polymer concretes. Their performance depends on reactive diluents – glycidyl ethers, which integrate into the polymer matrix. However, the wide use of these compounds requires a precise assessment of their fire hazard. One of the key indicators is the heat of combustion, but existing calculation methods often show significant discrepancies for epoxy compounds compared to experimental data. **Goal.** The research aims to investigate the accuracy of calculating the heat of combustion for active epoxy diluents (aliphatic glycidyl ethers) and to evaluate how the specific structure of the epoxy cycle affects the reliability of the results. **Methodology.** The heat of combustion for methyl, ethyl, n-butyl, and tert-butyl glycidyl ethers was determined using three theoretical methods: the structural-additive method (using structural constants), the chemical bond energy method, and the elemental composition method (based on mass fraction of C, H, O). The calculated values were compared with experimental calorimetric data to determine absolute and relative errors. **Results.** It was established that the molar heat of combustion increases with the length of the alkyl radical, ranging from 2355.6 kJ/mol to 4392.2 kJ/mol. The structural-additive method proved to be the most accurate, with a minimal error of 0.1–1.7 %. The elemental composition method provided acceptable accuracy (2.8–3.0 %) but failed to distinguish between structural isomers. The chemical bond energy method was found to be unsuitable for epoxy compounds, showing a high error of 20.5–21.2 % and underestimating the heat of combustion by 482.1–933.1 kJ/mol. **Scientific novelty.** The study quantified the accuracy of standard thermodynamic calculation models when applied to glycidyl ethers. It was demonstrated that the specific internal structure of the oxirane ring significantly alters the thermodynamic balance during combustion, which is

not accounted for by standard bond energy schemes, making the structural-additive approach the only reliable theoretical tool for these substances. **Practical value.** The results allow for the recommendation of the structural-additive method as a reliable tool for the preliminary fire safety assessment of new epoxy composites at the chemical design stage. This enables the optimization of active diluent content in building materials to achieve required fire resistance levels.

**Keywords:** reactive diluents, alkylglycidyl ethers, epoxy resins, fire hazard, calculation methods, heat of combustion.

**Hapon Yuliana**<sup>1</sup>, Ph.D. (Engineering), Associate Professor, Department of Chemistry and Chemical Technology,

[yuliano4kah21@gmail.com](mailto:yuliano4kah21@gmail.com),

tel. +38 096-137-23-24,

ORCID 0000-0002-3304-5657;

**Maiboroda Artem**<sup>2</sup>, Ph.D. (Pedagogical), Associate Professor, Head of the Department of Engineering and Rescue Equipment of the Educational and Scientific Institute of Operational and Rescue Forces,

[maiboroda\\_artem@nuczu.edu.ua](mailto:maiboroda_artem@nuczu.edu.ua),

tel. +380937862544,

ORCID 0000-0001-6108-9772;

**Nuianzin Vitalii**<sup>2</sup>, Ph.D. (Engineering), Associate Professor, Head of the Department of Radiation and Chemical Protection of the Educational and Scientific Institute of Engineering and Special Training,

[nuianzin\\_vitalii@nuczu.edu.ua](mailto:nuianzin_vitalii@nuczu.edu.ua),

tel. +38 068-391-23-93,

ORCID 0000-0003-4785-0814;

**Vlasenko Oleksandr**<sup>2</sup>, Lecturer, Department of Engineering and Rescue Equipment of the Educational and Scientific Institute of Operational and Rescue Forces,

[vlasenko\\_oleksandr@nuczu.edu.ua](mailto:vlasenko_oleksandr@nuczu.edu.ua),

tel. +38 066-363-62-01,

ORCID 0009-0002-1326-6898;

**Hrynko Yurii**<sup>2</sup>, Ph.D. (Public Administration), Senior Lecturer, Department of Engineering and Rescue Equipment of the Educational and Scientific Institute of Operational and Rescue Forces,

[hrynko\\_yurii@nuczu.edu.ua](mailto:hrynko_yurii@nuczu.edu.ua),

tel. +38 067-996-73-16,

ORCID 0000-0003-1957-025X.

<sup>1</sup>Kharkiv National Automobile and Highway University, 25 Yaroslava Mudroho St., Kharkiv, 61002, Ukraine.

<sup>2</sup>National University of Civil Protection of Ukraine, 8 Onoprienka str., Cherkasy, 18034, Ukraine.

Стаття надійшла до редакції / Received: 07.01.2026.

Прийнята до друку після рецензування / Revised and Accepted: 15.01.2026.

Дата публікації статті / Published: 11.05.2026.