

การใช้สมดุลออกซิเจนเพื่อประเมินความเสี่ยงอันตรายทางความร้อนเบื้องต้นของวัตถุระเบิด

Using Oxygen Balance for Preliminary Thermal Hazard Risk Assessment of Explosive Substances

สุราณี อโนทัยรุ่งรัตน์¹, โกวิท พิชะมังคลา^{2*}
Suranee Anothairungrat¹, Kowit Piyamongkala^{2*}

^{1,2}ภาควิชาเคมีอุตสาหกรรม คณะวิทยาศาสตร์ประยุกต์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าพระนครเหนือ

^{1,2}Department of Industrial Chemistry, Faculty of Applied Science, King Mongkut's University of Technology
North Bangkok, Thailand

*Corresponding Author. E-mail: kowit.p@sci.kmutnb.ac.th

บทคัดย่อ

วัตถุระเบิดที่ประกอบด้วยสารไฮโดรคาร์บอนเมื่อเกิดการสลายตัวทางความร้อน มีการแตกตัวออกไปเป็นโมเลกุลขนาดเล็กที่มีความเสถียร การประเมินความเสี่ยงเบื้องต้นของวัตถุระเบิดสามารถทำได้โดยการพิจารณาความรุนแรงต่อการระเบิด และโอกาสของการระเบิด ซึ่งประเมินจากสมดุลออกซิเจนและระดับความเป็นอันตราย ตามลำดับ ตัวอย่างวัตถุระเบิด 15 ชนิด ทำนายจากสมการซึ่งเขียนขึ้นมาอย่างง่ายโดยโปรแกรมไมโครซอฟท์ เอกซ์เซล สมดุลออกซิเจนแสดงตัวเลขบวก ลบและศูนย์ ในขณะที่ความเป็นอันตรายปรากฏตัวอักษรในระดับต่ำ ปานกลางและสูง

คำสำคัญ : วัตถุระเบิด การประเมินความเสี่ยง สมดุลออกซิเจน

ABSTRACT

The explosive substance containing the hydrocarbon occurs during thermal decomposition, it has broken into the stable small molecules. A preliminary risk assessment of the explosive substance can be done with the severity and probability of explosions which are evaluated from the oxygen balance and degree of explosive hazard, respectively. The 15 example types of explosive substance predicted from the equation which wrote very easy form the Microsoft Excel program. The oxygen balance showed the positive, negative and zero numbers whereas the degree of explosive hazard appeared in the letters of low, medium and high level.

Keyword: Explosive substance, Risk assessment, Oxygen balance

Received 08-01-2021

Revised 28-04-2021

Accepted 30-04-2021

1. บทนำ

สบู่ ยาสีฟัน ผงซักฟอก น้ำยาล้างห้องน้ำ สีทาบ้าน ยารักษาโรค สารปรุงแต่งอาหารและอื่น ๆ อีกหลายชนิด เป็นผลิตภัณฑ์ที่มนุษย์ได้สัมผัส สูดดม กลืน ตลอดจนกินกินลงไป มีความจำเป็นในชีวิตประจำวัน โดยผลิตภัณฑ์เหล่านี้เตรียมขึ้นจากสารเคมีหลากหลายชนิด ซึ่งมีการดำเนินงานภายในโรงงานอุตสาหกรรม โดยที่สารเคมีทุกชนิดจัดเป็น วัตถุอันตราย (Hazardous materials) ซึ่งมีความเป็นอันตรายแตกต่างกัน

พระราชบัญญัติวัตถุอันตราย พ.ศ. 2535 ได้มีการจัดแบ่งวัตถุอันตรายออกเป็น 10 ประเภท ดังต่อไปนี้ วัตถุระเบิด (Explosives) วัตถุไวไฟ (Inflammable substances) วัตถุออกซิไดซ์และ วัตถุเปอร์ออกไซด์ (Oxidizing agents and organic peroxide substances) วัตถุ มี พิ ษ (Toxic substances) วัตถุที่ทำให้เกิดโรค (Disease causing substances) วัตถุ กัม มั น ตรี ง สี (Radioactive substances) วัตถุที่ก่อให้เกิดการเปลี่ยนแปลงทาง พันธุกรรม (Mutagenic substances) วัตถุกัดกร่อน (Corrosive substances) วัตถุที่ก่อให้เกิดการระคายเคือง (Irritative substances) และวัตถุอย่างอื่นไม่ว่าจะเป็นเคมีภัณฑ์หรือสิ่งอื่นใดที่อาจทำให้เกิดอันตรายแก่บุคคล สัตว์ พืช ทรัพย์สินหรือสิ่งแวดล้อม (Other substances, whether chemicals or otherwise, which may be harmful to people, animals, plants, property or environment) [1]

เมื่อพิจารณาในส่วนของวัตถุระเบิด พบว่ามีสถานะเป็นได้ทั้งของแข็ง ของเหลว หรือสารผสมที่สามารถเกิดปฏิกิริยาทางเคมีได้ด้วยตัวเอง เป็นวัตถุที่สามารถระเบิดได้เมื่อได้รับความร้อน ประกายไฟ เปลวไฟ หรือเมื่อเกิดการเสียดสี การกระทบกระเทือน

หรือถูกกระทำโดยตัวจุดระเบิด เป็นผลทำให้เกิดการเคลื่อนที่ของแก๊สที่มีความดันและความร้อนเพิ่มสูงขึ้นอย่างรวดเร็ว ก่อให้เกิดการระเบิด สร้างความเสียหายแก่บริเวณโดยรอบได้ [2] โดยวัตถุระเบิดอาจผลิตขึ้นจากสารเคมีชนิดเดียว หรือสารเคมีผสมกันก็ได้ มีผลทำให้เกิดความร้อน แสงสว่าง เสียง แก๊ส ตลอดจนควัน

วัตถุระเบิดเมื่อมีการขนส่งสินค้าในปริมาณมาก และใช้ระยะเวลาขนส่งยาวนาน ได้แก่การขนส่งโดยเรือ รถบรรทุก รถไฟ ตลอดจนเครื่องบิน องค์การสหประชาชาติ United Nations (UN) โดยหน่วยงาน Recommendation on the Transport of Dangerous Goods ได้มีการจัดแบ่งวัตถุระเบิดออกเป็นกลุ่มย่อยไปอีก 6 กลุ่ม [3] ดังนี้ 1) สารและสิ่งของที่ก่อให้เกิดอันตรายจากการระเบิด อย่างรุนแรงของมวลสารทั้งหมดอย่างทันทีทันใด (Mass explosive) ตัวอย่างเช่น แอมโมเนียมเปอร์คลอเรต (Ammonium perchlorate) และไนโตรกลีเซอริน (Nitroglycerin) เป็นต้น 2) สารและสิ่งของที่มีอันตรายจากการระเบิด ซึ่งเกิดขึ้นจากการยิงขึ้นส่วนแต่ไม่เกิดการระเบิดอย่างทันทีทันใด เช่น ขนวนโลหะที่ใช้ในการจุดระเบิด (Fuse detonating metal clad) และ กระสุนปืน (Ammunition) เป็นต้น 3) สารหรือสิ่งของที่เสี่ยงต่อการเกิดเพลิงไหม้ และมีอันตรายเล็กน้อยจากการระเบิด และการยิงขึ้นส่วนแต่ไม่เกิดระเบิดทันทีทันใดทั้งหมด เช่น ไดไนโตรโซเบนซีน (Dinitrobenzene) และโซเดียมพิกราเมท (Sodium picramate) เป็นต้น 4) สารและสิ่งของที่ไม่แสดงความเป็นอันตรายจากการระเบิดอย่างชัดเจน หากเกิดการจุดระเบิดหรือปะทุในระหว่างการขนส่ง พบความเสียหายเกิดขึ้นเฉพาะกับ หีบห่อที่ใช้ในการห่อหุ้มหรือภาชนะบรรจุ โดยแหล่งกำเนิด

ของไฟจากภายนอกจะต้องไม่เป็นสาเหตุหลักให้เกิดการระเบิดอย่างทันทีทันใด เช่น 5 เมอร์แคปโตเตตระโซล-1-แอซิดิกแอซิด (5-Mercaptotetrazol-1-acetic acid) และเทอทาโซล-1-แอซิดิกแอซิด (Tertazol-1-acetic acid) เป็นต้น 5) สารที่มีความไวต่อการระเบิดต่ำมาก การระเบิดทั้งหมดเกิดขึ้นได้น้อยมาก การปะทุหรือการเผาไหม้จนนำไปสู่การระเบิดเกิดขึ้นได้น้อยมากในระหว่างการขนส่ง และ 6) สารที่ไวต่อการระเบิดต่ำมาก ๆ การระเบิดทั้งหมดไม่สามารถเกิดขึ้นได้ การปะทุหรือการแตกกระจายเกิดขึ้นได้โดยความไม่ตั้งใจกระทำ โดยสัญลักษณ์ความเป็นอันตรายของวัตถุระเบิดทั้ง 6 กลุ่มดังแสดงในภาพที่ 1



ภาพที่ 1 สัญลักษณ์ความเป็นอันตรายของวัตถุระเบิดของ DOT UN [4]

ในขณะที่ สัญลักษณ์ความเป็นอันตรายของวัตถุระเบิด ตามข้อกำหนดของประชาคมยุโรป [4] และขององค์การสหประชาชาติ ตามมาตรฐานการติดฉลากของวัตถุอันตราย The Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals (GHS) [5] ซึ่งปรากฏอยู่บริเวณภาชนะบรรจุ ได้กำหนดการติดฉลากของวัตถุระเบิดดังแสดงในภาพที่ 2 และ ภาพที่ 3 ตามลำดับ



ภาพที่ 2 สัญลักษณ์ความเป็นอันตรายของวัตถุระเบิดของ EEC [4]

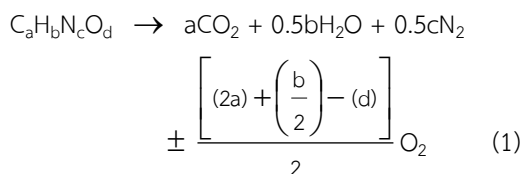


ภาพที่ 3 สัญลักษณ์ความเป็นอันตรายของวัตถุระเบิดของ GHS [5]

การพิจารณาความเป็นอันตรายของวัตถุระเบิดสามารถทำได้โดย การใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ CHETAH software การใช้เทคนิควิเคราะห์ทางความร้อน ได้แก่ Differential scanning calorimetry (DSC) และ Thermogravimetry (TG) [6]

วัตถุระเบิดที่ประกอบด้วยธาตุคาร์บอน-ไฮโดรเจน ไนโตรเจนและออกซิเจน เมื่อเกิดการสลายตัวทางความร้อน (Thermal decomposition) มีการแตกตัวไปเป็นอะตอม จากนั้นมีการจัดเรียงตัวใหม่เป็นโมเลกุลขนาดเล็กที่มีความเสถียร (Stable molecule) ได้เป็นสารผลิตภัณฑ์ ซึ่งประกอบด้วยแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (Carbon dioxide, CO₂) ไอน้ำ (Water, H₂O)

แก๊สไนโตรเจน (Nitrogen, N₂) และแก๊สออกซิเจน (Oxygen, O₂) เขียนได้ดังสมการที่ (1) [7]



เมื่อ a, b, c และ d หมายถึงจำนวนอะตอมของคาร์บอน ไฮโดรเจน ไนโตรเจน และออกซิเจนในสูตรโมเลกุล ตามลำดับ

การพิจารณาวัตถุอันตราย ใช้หรือไม่ใช้วัตถุระเบิดนั้น ในลำดับแรกให้พิจารณาจากหมู่ฟังก์ชันของสารเคมี (Functional groups) [8] โดยหมู่ฟังก์ชันของวัตถุระเบิด ที่สำคัญแสดงในตารางที่ 1

โดย Ckark [9] อธิบายหมู่ฟังก์ชันของ Peroxide, Ozonide เป็นหมู่ฟังก์ชันของวัตถุระเบิด เนื่องจากมีความว่องไวต่อความร้อนสูง (Thermal reactive) สามารถเกิดเป็นอนุมูลอิสระได้ง่าย (Free radical) พลังงานต่ำ 84-210 kJ/mol ก็สามารถสลายพันธะเหล่านี้ได้ ปัจจัยจากความร้อน การกระทบทางกล การเสียดสี โดยเฉพาะในกรณีที่มีตัวเร่งปฏิกิริยาร่วมด้วย มีผลทำให้เกิดการระเบิดได้ง่าย

ในขณะที่ หากต้องการประเมินความเสี่ยง (Risk assessment) ของวัตถุระเบิด พิจารณาถึงความรุนแรง (Impact) และโอกาสการเกิดระเบิด (Probability) ของวัตถุระเบิดร่วมด้วยนั้น การพิจารณาหมู่ฟังก์ชันของสารเคมีเพียงอย่างเดียวเป็นข้อมูลที่ไม่เพียงพอ ต้องมีข้อมูลตัวอื่นนำมาประกอบการพิจารณาร่วมด้วย

ตารางที่ 1 ตัวอย่างหมู่ฟังก์ชันที่เป็นวัตถุระเบิด [10]

หมู่ฟังก์ชัน	ชื่อหมู่ฟังก์ชัน	ตัวอย่าง
- N = N -, - N = N = N -, - N ₃	Azo, Diazo, Azide	Diazomethane, Lead azide
- ClO ₃ , - ClO ₄	Chlorate, Perchlorate	Ammonium perchlorate
M - C	Metal bond with carbon	Copper(I) acetylide
- NO ₂ , = N - NO ₂ , - O - NO ₂	Nitro, Nitric ester	Trinitrotoluent, Cyclonite
- O - O -, - O - O - O -	Peroxide, Ozonide	Acetone peroxide, Benzoyl peroxide
- C ≡ C -	Triple bond	Acetylene
NX, NX ₂ , NX ₃	Halogenated amine	Trichloamine

สมดุลออกซิเจน (Oxygen balance) หมายถึงปริมาณอะตอมออกซิเจนของวัตถุระเบิดเสถียรภาพต่ำมี เมื่อเกิดการสลายตัวทางความร้อนเกิดสารผลิตภัณฑ์เป็นแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ ไอน้ำ แก๊สไนโตรเจน และแก๊สออกซิเจน ซึ่งโมเลกุลมีขนาดเล็ก และมีเสถียรภาพสูง [11] ดังนั้นสมดุลออกซิเจนจึงเกิดขึ้นได้ 3 แนวทางดังนี้ 1) อะตอมออกซิเจนที่มี

อยู่ในสารตั้งต้น และสารผลิตภัณฑ์มีปริมาณเท่ากัน และไม่ปรากฏโมเลกุลของแก๊สออกซิเจนในสารผลิตภัณฑ์ อธิบายได้ว่าสมดุลออกซิเจนมีค่าเป็นศูนย์ (Zero oxygen balance) 2) อะตอมออกซิเจนที่อยู่ในสารตั้งต้นมีปริมาณมากกว่าในสารผลิตภัณฑ์ และปรากฏโมเลกุลของแก๊สออกซิเจนเพิ่มขึ้นในสารผลิตภัณฑ์ อธิบายได้ว่าสมดุลออกซิเจนมีค่าเป็นบวก

(Positive oxygen balance) และ 3) อะตอมออกซิเจนที่มีอยู่ในสารตั้งต้นมีปริมาณน้อยกว่าในสารผลิตภัณฑ์ และขาดแคลนโมเลกุลของแก๊สออกซิเจนในสารผลิตภัณฑ์ อธิบายได้ว่าสมดุลออกซิเจนมีค่าเป็นลบ (Negative oxygen balance) เมื่อสมดุลออกซิเจนของวัตถุระเบิดมีค่าเป็นศูนย์ สามารถอธิบายได้ว่า สารเคมีนั้นมีความเป็นอันตรายจากการระเบิดได้สูงมาก [12]

2. วิธีดำเนินการ

Lothrop and Handrick [13] นำเสนอสมการคณิตศาสตร์สำหรับการคำนวณหาสมดุลออกซิเจน (Oxygen balance, OB) เนื่องจากการสลายตัวทางความร้อนของวัตถุระเบิด ดังแสดงในสมการที่ (2) และในเวลาต่อมา Shanley and Melhem [14], Saraf et al., [15] และ Mannan [16] ได้นำเสนอเกณฑ์การประเมินความเสี่ยงของสมดุลออกซิเจนของวัตถุระเบิด จากโปรแกรมการประเมินความเสี่ยงสารเคมี CHETAH ทั้งในส่วนของความรุนแรงและโอกาสของวัตถุระเบิด ดังแสดงในตารางที่ 2 ในเวลาต่อมา Oluwoye et al., [17] และ Zawadzka-Matota [18] ได้นำสมดุลออกซิเจนมาใช้ประโยชน์ในการทำนายการระเบิดของวัตถุระเบิด

$$OB = \frac{-16 \left(2a + \frac{b}{2} - d \right)}{MW} \times 100 \quad (2)$$

เมื่อ OB หมายถึงสมดุลออกซิเจน และ MW หมายถึงน้ำหนักโมเลกุลของสารเคมี

การประเมินความเสี่ยงความเป็นอันตรายซึ่งประกอบด้วย ความรุนแรงต่อการระเบิด คำนวณได้

จากสมดุลออกซิเจน ในขณะที่ โอกาสของการระเบิดประเมินจากระดับความเป็นอันตราย

ตารางที่ 2 การประเมินความเสี่ยงความเป็นอันตรายจากสมดุลออกซิเจน [16]

สมดุลออกซิเจน	ความเป็นอันตราย
> (+160)	ต่ำ
(+80) – (+160)	ปานกลาง
(+80) – (-120)	สูง
(-120) – (-240)	ปานกลาง
< (-240)	ต่ำ

3. ผลการดำเนินการและอภิปรายผล

การประเมินความเสี่ยงความเป็นอันตรายจากการระเบิดของ Ethyl glycol dinitrate ($C_2H_4N_2O_6$) ที่มีสมดุลออกซิเจนเป็นศูนย์ แสดงดังสมการที่ (3)

$$OB \ C_2H_4N_2O_6 = \frac{-16 \left((2 \times 2) + \frac{4}{2} - 6 \right)}{152.1} \times 100 \quad (3)$$

$$= 0$$

อธิบายได้ว่า Ethyl glycol dinitrate มีความรุนแรงต่อการระเบิดเท่ากับ 0 ดังนั้นจึงมีโอกาสของการระเบิดในระดับสูง นอกจากนั้นยังสามารถอธิบายได้ว่าโมเลกุลของ Ethyl glycol dinitrate มีจำนวนอะตอมออกซิเจนในสารตั้งต้น เท่ากับจำนวนอะตอมออกซิเจนในสารผลิตภัณฑ์

ในขณะที่ การประเมินความเสี่ยงความเป็นอันตรายจากการระเบิดของ Nitroglycerine ($C_3H_5N_3O_9$) ที่มีสมดุลออกซิเจนเป็นบวก แสดงดังสมการที่ (4)

$$\text{OB } \text{C}_3\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_9 = \frac{-16 \left((2 \times 3) + \frac{5}{2} - 9 \right)}{227.1} \times 100 \quad (4)$$

$$= 3.5 \approx 4$$

อธิบายได้ว่า Nitroglycerine มีความรุนแรงต่อการระเบิดเท่ากับ 4 ดังนั้นมีโอกาสของการระเบิดในระดับสูง เช่นเดียวกันยังสามารถอธิบายเพิ่มเติมได้อีกว่าโมเลกุลของ Nitroglycerine มีจำนวนอะตอมออกซิเจนในสารตั้งต้น มากกว่าจำนวนอะตอมออกซิเจนในสารผลิตภัณฑ์

ในทางตรงกันข้าม การประเมินความเสี่ยงความเป็นอันตรายจากการระเบิดของ Nitrobenzoic acid ($\text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_4$) ที่มีสมมูลออกซิเจนเป็นลบ แสดงดังสมการที่ (5)

$$\text{OB } \text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_4 = \frac{-16 \left((2 \times 7) + \frac{5}{2} - 4 \right)}{167.1} \times 100 \quad (5)$$

$$= -119.7 \approx -120$$

ผลดังกล่าวอธิบายได้ว่า Nitrobenzoic acid มีความรุนแรงต่อการระเบิดเท่ากับ -120 ดังนั้นมีโอกาสของการระเบิดในระดับสูง นอกจากนั้นยังสามารถอธิบายเพิ่มเติมได้อีกว่า โมเลกุลของ Nitrobenzoic acid มีจำนวนอะตอมออกซิเจนในสารตั้งต้น น้อยกว่าจำนวนอะตอมออกซิเจนในสารผลิตภัณฑ์

ไมโครซอฟท์ เอกซ์เซล (Microsoft Excel) เป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่สามารถนำมาประยุกต์ใช้ในการคำนวณหาสมมูลออกซิเจนจากสูตรโมเลกุลได้เป็นอย่างดี มีความถูกต้องและมีความแม่นยำจากการคำนวณสูงมาก การใช้งานทำได้ง่าย ไม่ยุ่งยาก

ซับซ้อน เพียงเขียนสมการคณิตศาสตร์ลงในช่อง Formula bar จากนั้นป้อนข้อมูลลงไปในชีท (Sheet) ตรงตำแหน่ง Active cell ให้ถูกต้อง โปรแกรมการคำนวณจะดำเนินการประมวลผล และคำนวณผลลัพธ์ออกมาได้อย่างรวดเร็ว ภายในระยะเวลาที่สั้นมาก ๆ ดังนั้นการใช้ไมโครซอฟท์ เอกซ์เซล คำนวณสมมูลออกซิเจน สามารถดำเนินงานได้ดังต่อไปนี้ [19, 20]

กำหนดให้ 1 โมลอะตอมของธาตุคาร์บอน ไฮโดรเจน ไนโตรเจนและออกซิเจน มีค่าเท่ากับ 12.01, 1.01, 14.01 และ 16.00 กรัม ปรากฏอยู่ใน Active cell D2, E2, F2 และ G2 ตามลำดับ ดังนั้นหากป้อนสมการคณิตศาสตร์ให้ไมโครซอฟท์ เอกซ์เซล คำนวณหาน้ำหนักโมเลกุลของ Ethyl glycol dinitrate จึงเขียนสมการลงในช่อง Formula bar ได้ดังนี้

$$=(D4*12.01)+(E4*1.01)+(F4*14.01)+(G4*16)$$

โดยผลลัพธ์จากการคำนวณปรากฏขึ้นที่ Active cell ในตำแหน่ง H4 พบว่ามีค่าเท่ากับ 152.08 กรัมต่อโมล แสดงในภาพที่ 4

จากนั้นคำนวณหาสมมูลออกซิเจนจากสมการที่ (3) ซึ่งเป็นการพิจารณาถึงความรุนแรงของวัตถุระเบิด โดยการเขียนสมการลงในช่อง Formula bar ได้เป็น

$$=((-16*((2*D4)+(E4/2)-G4))/H4)*100$$

ผลลัพธ์การคำนวณสมมูลออกซิเจน ปรากฏที่ Active cell ในตำแหน่ง I4 พบว่ามีค่าเท่ากับ 0 แสดงในภาพที่ 5

เกณฑ์การพิจารณาถึงโอกาสของการระเบิด
แสดงในตารางที่ 2 เขียนเป็นสมการลงในช่อง
Formula bar ได้เป็น

$$=IF(I4<(-(240,"Low",IF(I4<(-$$

$$(120,"Medium",IF(I4>((80,"Medium","High"))))$$

ผลลัพธ์จากการคำนวณโอกาสของการระเบิด
ของสมมูลออกซิเจนเท่ากับ 0 ปรากฏขึ้นที่ Active
cell ในตำแหน่ง J4 อ่านค่าได้ High ดังแสดงในภาพ
ที่ 6

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1										
2				12.01	1.01	14.01	16.00			
3		Name	Formular	C	H	N	O	MW	%OB	Criterion
4		1 Ethyl glycol dinitrate	C2H4N2O6	2	4	2	6	152.08	0	High
5		2 Nitroglycerine	C3H5N3O9	3	5	3	9	227.11	4	High
6		3 Nitrobenzoic acid	C7H5NO4	7	5	1	4	167.13	-120	High
7										
8										
9										
10										
11										
12										
13										
14										

ภาพที่ 4 น้ำหนักโมเลกุลของ Ethyl glycol dinitrate

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1										
2				12.01	1.01	14.01	16.00			
3		Name	Formular	C	H	N	O	MW	%OB	Criterion
4		1 Ethyl glycol dinitrate	C2H4N2O6	2	4	2	6	152.08	0	High
5		2 Nitroglycerine	C3H5N3O9	3	5	3	9	227.11	4	High
6		3 Nitrobenzoic acid	C7H5NO4	7	5	1	4	167.13	-120	High
7										
8										
9										
10										
11										
12										
13										
14										

ภาพที่ 5 สมมูลออกซิเจนของ Ethyl glycol dinitrate

The screenshot shows an Excel spreadsheet with the following data:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1										
2				12.01	1.01	14.01	16.00			
3		Nane	Formular	C	H	N	O	MW	%OB	Criterion
4	1	Ethyl glycol dinitrate	C2H4N2O6	2	4	2	6	152.08	0	High
5	2	Nitroglycerine	C3H5N3O9	3	5	3	9	227.11	4	High
6	3	Nitrobenzoic acid	C7H5NO4	7	5	1	4	167.13	-120	High
7										
8										
9										
10										
11										
12										
13										
14										

The formula bar shows: `=IF(I4<(-240),"Low",IF(I4<(-120),"Medium",IF(I4>(80),"High")))`

ภาพที่ 6 ระดับความรุนแรงการระเบิดของ Ethyl glycol dinitrate

ในขณะที่การใช้ไมโครซอฟท์ เอกซ์เซล คำนวณหาน้ำหนักโมเลกุล สมดุลออกซิเจน และ โอกาสของการระเบิดของ Nitroglycerine และ Nitrobenzoic acid มีวิธีการดำเนินงานเช่นเดียวกัน กับที่กล่าวมาแล้วข้างต้น ดังปรากฏใน Active cell แถวที่ 5 และแถวที่ 6 โดยคำนวณสมดุลออกซิเจนได้ เท่ากับ 4 และ -120 ตามลำดับ โดยวัตถุระเบิดทั้งสองชนิดที่กล่าวมาข้างต้นนี้ มีโอกาสของการระเบิดอยู่ในระดับสูง ผลการคำนวณดังแสดงในภาพที่ 4-6

นอกจากนั้นการใช้ไมโครซอฟท์ เอกซ์เซล สำหรับการประเมินความเสี่ยงวัตถุระเบิดบางตัว แสดงในตารางที่ 3 พบว่า วัตถุระเบิดที่มีสมดุลออกซิเจนอยู่ในช่วง +80 ถึง -120 มีโอกาสของการระเบิดในระดับสูงได้แก่ Dinitrotoluene, Trinitrotoluene, Diazomethane, Acetyl peroxide และ Ammonium nitrate ในขณะเดียวกัน วัตถุระเบิดที่มีสมดุลออกซิเจนอยู่ในช่วง +80 ถึง +160 หรือ -120 ถึง -240 มีโอกาสของการระเบิดในระดับปานกลางได้แก่ Nitroaniline, Nononitrotoluene, Ethyl hydroperoxide, และ Benzoyl peroxide

นอกจากนั้น วัตถุระเบิดที่มีสมดุลออกซิเจนอยู่ในช่วง $>(+160)$ หรือ $<(-240)$ มีโอกาสของการระเบิดในระดับต่ำ ได้แก่ t-butyl peroxide, Ethylene และ Acetylene อย่างไรก็ตาม ถึงแม้วัตถุระเบิดที่ยกเป็นตัวอย่างมาทั้ง 3 ชนิดนี้ มีโอกาสของการระเบิดในระดับต่ำ แต่การระเบิดอาจเกิดขึ้นได้หากวัตถุระเบิดเหล่านี้มีปริมาณความเข้มข้นของไอระเหยที่ผสมกับอากาศอยู่ในช่วงขอบเขตของขีดจำกัดล่างการระเบิด และขีดจำกัดบนการระเบิด (Lower Explosive Limit (LEL) and Upper Explosive Limit (UEL)) ดังแสดงในตารางที่ 3

เมื่อเปรียบเทียบผลการคำนวณสมดุลออกซิเจนของวัตถุระเบิดบางตัว เช่น Trinitrotoluene จากบทความนี้กับ He, et al.,[21] พบว่าได้ค่าตัวเลขเท่ากับ -74 เท่ากันพอดี ดังนั้นการใช้ไมโครซอฟท์ เอกซ์เซล สามารถนำมาใช้งาน สำหรับการประเมินความเสี่ยงความเป็นอันตรายของวัตถุระเบิดได้เป็นอย่างดี มีความถูกต้องและแม่นยำสูง

จุดเด่นของการใช้สมดุลออกซิเจนในการประเมินความเสี่ยงวัตถุระเบิด ได้แก่ สามารถนำมาใช้

ได้อย่างถูกต้อง กับสารอินทรีย์ที่มีหมู่ฟังก์ชันเป็นไนโตร (Nitro compound, R-NO₂) ซึ่งประกอบด้วยธาตุคาร์บอน ไฮโดรเจน ไนโตรเจน และออกซิเจน ในขณะที่ข้อจำกัดของการใช้สมมูลออกซิเจน ได้แก่ ไม่สามารถประเมินความเสี่ยง สำหรับวัตถุระเบิด ที่ไม่มีธาตุออกซิเจนเป็นองค์ประกอบ แต่สารเคมีเหล่านี้จัดได้ว่าเป็นวัตถุระเบิด ยกตัวอย่างเช่น อะเซทิลีน (Acetylene, C₂H₂) มีสมมูลออกซิเจนของอะเซทิลีน ดังแสดงในสมการที่ (6)

$$OB \text{ C}_2\text{H}_2 = \frac{-16 \left((2 \times 2) + \frac{2}{2} - 0 \right)}{26} \times 100 \quad (6)$$

$$= -307.2 \approx -307$$

อะเซทิลีนมีสมมูลออกซิเจนเท่ากับ -307 อธิบายได้ว่า อะเซทิลีนมีโอกาสของการระเบิดในระดับต่ำ แต่ในความเป็นจริงพบว่า อะเซทิลีนเป็นสารไฮโดรคาร์บอนที่มีพันธะสาม ซึ่งมีสมบัติเป็นวัตถุระเบิด ดังนั้นอะเซทิลีนจึงเป็นวัตถุระเบิดที่มีความเป็นอันตรายสูงมาก นอกจากนั้นข้อจำกัดอีกอย่างหนึ่งได้แก่ สมการสมมูลออกซิเจนใช้งานได้กับวัตถุระเบิดเพียงหนึ่งชนิดเท่านั้น ไม่สามารถนำมาใช้งานกับวัตถุระเบิดแต่ละชนิดที่นำมาผสมกันได้

ตารางที่ 3 การใช้ไมโครซอฟต์แวร์ เอกซ์เซล ประเมินความเสี่ยงวัตถุระเบิดบางตัว

Name	Formula	MW	%OB	Criterion	LEL - UEL % (V/V)
Nitro group					
1 Dinitrotoluene	C ₇ H ₆ N ₂ O ₄	182.15	-114	High	-
2 Trinitrotoluene	C ₇ H ₅ N ₃ O ₆	227.15	-74	High	-
3 Nitroaniline	C ₆ H ₅ N ₂ O ₂	138.14	-151	Medium	-
4 Nonnitrotoluene	C ₇ H ₇ NO ₂	137.15	-181	Medium	-
Azo group					
5 Diazomethane	CH ₂ N ₂	42.05	-114	High	-
Peroxide group					
6 Acetyl peroxide	C ₄ H ₆ O ₄	118.10	-95	High	-
7 Ethyl hydroperoxide	C ₂ H ₆ O ₂	62.08	-129	Medium	-
8 Benzoyl peroxide	C ₁₄ H ₁₀ O ₄	242.24	-192	Medium	-
9 t-butyl peroxide	C ₈ H ₁₈ O ₂	146.26	-252	Low	5 - 10 [22]
Unsaturated group					
10 Ethylene	C ₂ H ₄	28.06	-342	Low	2.7 - 36 [22]
11 Acetylene	C ₂ H ₂	26.04	-307	Low	2.4 - 83 [22]
Inorganic group					
12 Ammonium nitrate	H ₄ N ₂ O ₃	80.06	20	High	-

4. สรุป

การใช้ไมโครซอฟต์แวร์ เอกซ์เซล ประเมินความเสี่ยงเบื้องต้นของวัตถุระเบิด สำหรับสารไฮโดรคาร์บอนที่มีอะตอมออกซิเจนอยู่ในโมเลกุล จากสมมูล

ออกซิเจนและระดับความเป็นอันตรายของการระเบิด พบว่าเป็นวิธีการที่ดีและมีความเหมาะสม สามารถทำได้ง่ายและสะดวก นอกจากนั้นยังให้ผลลัพธ์จากการคำนวณปรากฏออกมาอย่างรวดเร็ว และแสดงเกณฑ์

ความเป็นอันตรายของวัตถุระเบิดออกมาอย่าง
ทันทีทันใด เป็นตัวเลขทำให้สามารถเข้าใจได้ง่ายขึ้น

5. เอกสารอ้างอิง

- [1] สุคนธ์ทิพย์ เฟื่องโถม, โมนัย สุขแสงธรรม, ศิริศาสตร์ เอื้อใจ และคณะ. การประเมินอันตรายทางความร้อนของไฮโดรเจนเปอร์ออกไซด์ ความเข้มข้นต่ำโดยดีฟเฟอเรนเชียลสแกนนิ่งแคลอริมิเตอร์. วารสารวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยสยาม. 2560; 18(1): 62-9.
- [2] Espindola-Calderon CA, Patel SJ, Alkhawaldeh A, et al. QSPR studies using genetic function approximation to predict the chemical reactivity of noncyclic hydrazines. Journal of Safety, Health & Environmental research. 2012; 8(2): 34-42.
- [3] Suna Q, Jiang J, Li M, et al. Assessment on thermal hazards of reactive chemicals in industry: State of the Art and perspectives. Prog. Energy Combust Sci. 2020; 78: 100832.
- [4] Bender HF, Eisenbarth P. Hazardous chemicals: Control and regulation in the European market. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA; 2007.
- [5] Boelhouwer E, Davis J, Franco-Watkins A, et al. Comprehension of hazard communication: Effects of pictograms on safety data sheet and labels. J Saf Res. 2013; 46: 145-55.
- [6] Fondren NS, Fondren ZT, Unruh DK, et al. Study of physicochemical and explosive properties of a 2,4,6-trinitrotoluene/aniline cocrystal solvate. Cryst Growth & Des. 2020; 20(1): 116-29.
- [7] Pepekina VI, Korsunskii BL, Denisov AA. Energy characteristics of initiation of explosion. Dokl Phys Chem. 2008; 420: 104-5.
- [8] Gustin JL. Thermal stability screening and reaction calorimetry: Application to runaway reaction hazard assessment and process safety management. J Loss Prev Process Ind 1993; 6(5): 275-91.
- [9] Clark DE. Peroxides and peroxide-forming compounds. Chem Health Safety. 2001; 8(5): 12-22.
- [10] Akhavan J. The chemistry of explosives. 3rd ed. Cambridge: The Royal Society of Chemistry; 2011.
- [11] Urban PG, Pitt MJ. Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards, Vol. 2, 7th ed. Amsterdam: Elsevier; 2007.
- [12] Muthurajan H, Sivabalan R, Talwar MB, et al. Prediction of heat of formation and related parameters of high energy materials. J Hazard Mater. 2006; 133: 30-45.
- [13] Lothrop WC, Handrick GR. The relationship between performance and constitution of pure organic explosive

- compounds. Chem Rev. 1949; 44: 419-445.
- [14] Shanley ES, Melhem GA. The oxygen balance criterion for thermal hazards assessment. Process Saf Prog. 1995; 14(1): 29-31.
- [15] Saraf SR, Rogers WJ, Mannan MS. Prediction of reactive hazards based on molecular structure. J Hazard Mater. 2003; 98: 15-29.
- [16] Mannan S. Lees'Process Safety Essentials: Hazard Identification, Assessment and Control. Amsterdam: Butterworth-Heinemann; 2014.
- [17] Oluwoye I, Dlugogorski BZ, Gore J, et al. Atmospheric emission of NO_x from mining explosives. Atmos Environ. 2017; 167: 81-96.
- [18] Zawadzka-Małota I. Testing of mining explosives with regard to the content of carbon oxides and nitrogen oxides in their detonation products. J Sustain Min. 2015; 14: 173-8.
- [19] Billo EJ. Excel for Chemists: A Comprehensive Guide. 2nd ed. New York: Wiley-VCH; 2001.
- [20] Larsen RW. Engineering with Excel. 4th ed. Essex: Pearson; 2014.
- [21] He P, Zhang JG, Wang K, et al. Combination multinitrogen with good oxygen balance: Molecule and synthesis design of polynitro-substituted tetrazolotriazine-based energetic compounds. J Org Chem. 2015; 80(11): 5643-51.
- [22] International Labour Organization (ILO) [Internet]. ICSC database: International Chemical Safety Cards. c1996-2018 [cited 2021 April 19]. Available from: https://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.istcards3?p_lang=en