

М.С.МЕХТИЕВ, А.Д.АСЛАНОВ, Г.Д.ТАНРЫВЕРДИЕВ

*Мингячевирский политехнический институт*

### ЭМПИРИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕМПЕРАТУРЫ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ГОРЮЧИХ ВЕЩЕСТВ

Разработка эффективных пожарно-профилактических мероприятий и успешное тушение возникших пожаров в решающей степени зависят от правильности и полноты оценки пожарной опасности веществ, используемых в том или ином производстве.

Температура воспламенения является условным параметром пожарной опасности веществ и материалов, определение которого в значительной степени зависит от условий эксперимента. Это вызывает определенные трудности при разработке корректного метода расчета этого параметра.

Из многочисленных ориентировочных методов наиболее общим и достаточным является расчет по формуле Блинова [1]

$$T_{вс} = \frac{A_B}{P_{вс} D_0 \beta}, \quad (1)$$

где  $T_{вс}$  – температура воспламенения, К;  $P_{вс}$  – парциальное давление пара горючего вещества при температуре воспламенения, мм.рт.ст.;  $D_0$  – коэффициент диффузии, см<sup>3</sup>/с;  $\beta$  – количество кислорода, участвующего в

сгорании 1 моля вещества;  $A_B$  – константа метода определения; при расчете температуры воспламенения константа  $A_B=4000$  [1].

Расчет по формуле (1) ведут следующим образом. Вначале подставляют в данную формулу известные для рассчитываемого вещества величины  $A_B$ ,  $D_0$  и  $\beta$  и вычисляют производные  $P_{вс}$ ,  $T_{вс}$ . Далее по справочным данным или расчетным путем находят зависимость давления насыщенного пара от температуры в аналитической форме, например в виде формулы Антуана [1 – 4]. И, наконец, находят методом последовательных приближений искомую  $T_{вс}$ ; для этого вычисляют при различных температурах произведение  $PT$ , добиваясь минимальной разности между  $PT$  и  $P_{вс} T_{вс}$ .

Данный метод обычно достаточно точен при расчете параметров индивидуальных органических горючих веществ. Однако недостатком этого метода является сложность вычисления  $P_{вс}$  и  $D_0$  [1 – 3].

В данном сообщении представлен экспресс-метод для инженерного расчета температуры воспламенения индивидуальных

органических горючих веществ

$$T_{oc} = a \frac{T_{кип}}{\beta^b}, \quad (2)$$

где  $T_{oc}$  – температура воспламенения К;  $T_{кип}$  – температура кипения вещества при атмосферном давлении, К;  $\beta$  – количество кислорода, участвующего в сгорании 1 моля вещества, моль (для азотосодержащих соединений учитывается также выделение азота при их сгорании);  $a$ ,  $b$  – эмпирические константы для гомологического ряда, значение которых вычислено методом [4,5] наименьших квадратов (табл. 1).

$$T_a = 0,763 \frac{T_{кип}}{\beta^{0,0242}} = 0,763 \frac{383,75}{9^{0,0242}} = 277,63 \text{ К}$$

или  $t_a = 277,63 - 273,15 = 4,48^\circ\text{С}$ .

Таким образом, искомая температура воспламенения равна 277,63 или  $4,48^\circ\text{С}$ . Отклонение расчетного значения от литературного – 0,08 К; погрешность расчета составляет – 0,02%.

**Пример 2.** Вычислить по уравнению (2) температуру воспламенения  $T_v$  этиленгликоля  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2$ . Температура воспламенения –  $384,25 (111,1^\circ\text{С})$  [6];

Температура кипения –  $T_{кип} = 470,35 \text{ К}$  [6].

Т а б л и ц а 1

Постоянные для расчета температуры воспламенения по формуле (2)

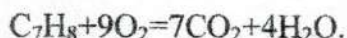
№ пп	Класс соединений	$a$	$B$
1	Углеводороды	0,7630	0,0242
2	Спирты и фенолы	0,8518	0,0481
3	Эфиры сложные	0,8598	0,0628
4	Альдегиды, кетоны	0,9008	0,0861
5	Азотсодержащие соединения	0,8412	0,0487

Расчет по формуле (2), предложенный нами, ведется следующим образом.

Вначале составляют суммарное стехиометрическое уравнение горения вещества в кислороде и находят значение  $\beta$ . Затем из справочника находят температуру кипения вещества  $T_{кип}$ , и оба значения подставляют в формулу (2).

**Пример 1.** Рассчитать температуру воспламенения толуола  $\text{C}_7\text{H}_8$ . Результаты расчета сравнить с литературными данными. Температура кипения толуола – 383,75 [6]; температура воспламенения – 277,55 К [6].

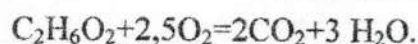
**Решение.** Суммарное стехиометрическое уравнение горения толуола в кислороде приобретает следующий вид:



Отсюда  $\beta = 9$ .

Рассчитываем температуру воспламенения по формуле (2)

**Решение.** Уравнение горения этиленгликоля



Отсюда  $\beta = 2,5$

$$T_a = 0,8518 \frac{T_{кип}}{\beta^{0,04810}} = 0,8518 \frac{470,35}{(2,5)^{0,04810}} =$$

$= 383,36 \text{ К};$

или  $383,36 - 273,15 = 110,25^\circ\text{С}$ .

Таким образом, искомая температура воспламенения равна 383,36 К или  $110,25^\circ\text{С}$ . Отклонение расчетного значения от литературного составляет – 0,89 К; погрешность – 0,23%.

В таблицах представлены температуры кипения, воспламенения ( $T_{в(лит)}$ ,  $T_{в(расч)}$ ), а также отклонения расчетного значения от литературного и оценка погрешности некоторых углеводородов (табл. 2), спиртов и фенолов (табл. 3), сложных эфиров, альдегидов, кетонов и азотсодержащих соединений (табл. 4) соответственно.

Т а б л и ц а 2

Значение температуры кипения и воспламенения [ $T_{\text{восп. (лит.)}}$  и  $T_{\text{восп. (расч.)}}$ ] углеводородов

№ п/п	Название	Формула	Температура кипения, К	Температура воспламенения, К		Отклонение расчетного значения от литературного, К	Относительная погрешность, %
				лит.	расч.		
1	Бензол	$C_6H_6$	353,25	262,45	256,70	5,74	2,18
2	<i>втор</i> -Бутил-бензол	$C_{10}H_{14}$	446,45	326,15	319,84	6,31	1,93
3	Гексан	$C_6H_{14}$	341,85	247,45	247,00	0,45	0,18
4	Гептан	$C_7H_{16}$	371,55	266,85	267,51	-0,66	-0,24
5	Декалин (декагидронафталин; смесь изомеров)	$C_{10}H_{18}$	464,85	330,95	332,45	-1,50	-0,45
6	Декан	$C_{10}H_{22}$	447,15	317,05	319,28	-2,23	-0,70
7	Диэтилбензол	$C_{10}H_{14}$	454,25	332,15	325,43	6,72	2,02
8	<i>орто</i> -Ксилол	$C_8H_{10}$	417,15	300,45	300,67	-0,22	-0,07
9	Кумол (изопропил-бензол)	$C_9H_{12}$	425,65	312,05	305,81	6,24	1,99
10	Метилциклогексан	$C_7H_{14}$	373,55	269,25	269,25	0,000	0,00
11	Нафталин	$C_{10}H_8$	491,15	353,15	352,87	0,28	0,07
12	Нонан	$C_9H_{20}$	423,85	303,15	303,38	-0,23	-0,07
13	Октан	$C_8H_{18}$	397,85	281,45	285,56	-4,11	-1,46
14	Пентан	$C_5H_{12}$	309,25	223,95	224,37	-0,42	-0,18
15	Стирол	$C_8H_8$	419,15	303,15	302,47	0,68	-0,22
16	Тетрадекан	$C_{14}H_{30}$	526,65	373,15	373,07	0,08	0,02
17	Толуол	$C_7H_8$	383,75	277,55	277,63	-0,08	-0,02
18	Циклогексан	$C_6H_{12}$	354,15	255,95	256,22	-0,27	-0,10
19	<i>н</i> -Цимол	$C_{10}H_{14}$	449,15	220,35	321,78	-1,43	-0,44
20	Этилбензол	$C_8H_{10}$	409,35	288,15	295,05	-6,90	-2,39

Примечание. Температуры кипения и воспламенения приведены для давления 1 атм.

Принятые сокращения: «лит»

- температура воспламенения, данные литературные [6]. «расч.» - температура воспламенения, данные расчетные по формуле (2).

Таблица 3

Значение температуры кипения и воспламенения [ $T_{\text{восп. (лит.)}}$  и  $T_{\text{восп. (расч.)}$ ]  
спиртов и фенолов

№ пп	Название	Формула	Температура кипения, К	Температура воспламенения, К		Отклонение расчетного значения от литатурного, К	Относительная погрешность, %
				лит.	расч.		
1	Аллиловый	$C_3H_6O$	369,75	294,63	-294,63	-0,38	-0,12
2	<i>n</i> -Амиловый	$C_5H_{12}O$	410,95	310,95	317,71	-6,76	-2,17
3	<i>изо</i> -Амиловый	$C_5H_{12}O$	405,15	318,75	313,23	5,52	1,73
4	Бензиловый	$C_7H_8O$	478,15	374,75	367,44	7,31	1,95
5	<i>n</i> -Бутиловый	$C_4H_{10}O$	390,85	310,95	305,43	5,52	1,77
6	<i>изо</i> -Бутиловый	$C_4H_{10}O$	381,15	300,95	297,85	3,10	1,03
7	<i>n</i> -Гексиловый	$C_6H_{14}O$	430,35	331,45	329,81	1,64	0,49
8	<i>орто</i> -Крезол	$C_7H_8O$	464,65	354,25	357,07	-2,82	-0,79
9	Метиловый	$CH_4O$	337,85	284,25	282,22	2,03	0,71
10	Пропиленгликоль	$C_3H_8O_2$	461,15	370,35	367,47	2,88	0,77
11	<i>n</i> -Пропиловый	$C_3H_8O$	370,35	288,15	293,44	-5,29	-1,83
12	<i>изо</i> -Пропиловый	$C_3H_8O$	355,35	284,85	281,56	3,29	1,15
13	Фенол	$C_6H_6O$	454,35	352,55	352,43	0,12	0,03
14	Циклогексан	$C_6H_{12}O$	434,25	340,95	333,71	7,24	2,12
15	Этиленгликоль	$C_2H_6O_2$	470,35	384,25	383,36	0,89	0,23
16	Этиловый	$C_2H_6O$	351,45	285,35	283,95	1,40	0,49

Таблица 4

Значения температуры кипения и воспламенения [ $T_{\text{восп. (лит)}}$  и  $T_{\text{восп. (расч.)}$ ] некоторых горючих органических веществ

№ пп	Название	Формула	Температура кипения, К	Температура воспламенения, К		Отклонение расчетного значения от литературного, К	Относительная погрешность, %
				лит.	расч.		
Эфиры сложные							
1	Амилформиат	$C_6H_{12}O_2$	403,55	297,65*	304,49	-6,84	-1,69
2	Бутилацетат	$C_6H_{12}O_2$	399,26	302,05	301,26	0,79	0,26
3	Дибутилфталат	$C_{16}H_{22}O_4$	613,15	444,25	437,47	6,78	1,52
4	Диметилкарбонат	$C_3H_6O_3$	363,65	292,15	291,82	0,33	0,11
5	Диэтилкарбонат	$C_5H_{10}O_3$	398,95	303,15	306,51	-3,36	-1,10
6	Метилацетат	$C_3H_6O_2$	329,47	263,15	261,84	1,31	0,49
7	Пропилформиат	$C_4H_8O_2$	354,45	270,15	275,45	5,30	1,96
8	Этилацетат	$C_4H_8O_2$	350,30	270,95	272,23	-1,28	-0,47
9	Этилбутират	$C_6H_{12}O_2$	393,15*	299,15	296,64	-2,51	-0,83
10	Этилпропионат	$C_6H_{12}O_2$	372,25	285,15	284,56	0,59	0,20
11	Этилформиат	$C_3H_6O_2$	327,30	253,15	260,12	-6,97	-2,75
Альдегиды, кетоны							
12	Ацетальдегид	$C_2H_4O$	293,95	245,95	244,70	1,25	0,50
13	Бензальдегид	$C_7H_6O$	452,15	347,05	340,52	6,53	1,88
14	Метилизобутилкетон	$C_6H_{12}O$	391,10	291,15	293,01	-1,86	-0,63
15	Масляный альдегид (гексан)	$C_4H_8O$	348,85	266,45	271,34	-4,84	-1,83
16	Метилэтилкетон	$C_4H_8O$	352,75	270,15	274,57	-4,22	-1,55
Азотсодержащие соединения							
17	Анилин	$C_6H_7N$	457,55	344,25	348,36	-4,11	-1,19
18	Метакрилонитрил	$C_4H_5N$	363,45	285,95	282,01	3,94	1,34
19	Нитрометан	$CH_3O_2N$	374,4	317,55	319,38	-1,83	-0,58
20	Нитробензол	$C_6H_5O_2N$	484,05	365,35	372,41	-7,06	-1,93
21	Нитропропан	$C_3H_7O_2N$	405,15	322,15	319,56	2,59	0,80
22	Нитроэтан	$C_2H_5O_2N$	387,95	314,25	313,71	0,54	0,17
23	Пиридин	$C_5H_5N$	388,75	296,45	299,09	-2,64	-0,89
24	Этилендиамин	$C_2H_8N_2$	389,65	307,05	306,37	0,68	0,22

Примечание: \* - средние значения.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный нами метод является достаточно надежным для практического использования инженерного расчета температуры воспламенения индивидуальных органических горючих веществ.

## ЛИТЕРАТУРА

1. М о н а х о в В. Т. Методы исследования пожарной опасности веществ. — М.: Наука, 1979. — 424 с.
2. С то л я р о в Е. А., О р л о в а Н. Г. Расчет физико-химических свойств жидкостей. — Л.: Химия, 1976. — 113 с.
3. В и к т о р о в М. М. Методы вычисления физико-химических величин и прикладные расчеты. — Л.: Химия, 1977. — 360 с.
4. М а р н и ч е в А. Н. и др. Физико-химические расчеты на микро ЭВМ. Справочник. — Л.: Химия, 1990. — 256 с.
5. Б а т у н е р Л. М., П о з и н М. Е. Математические методы в химической технике. — Л.: Химия, 1971. — 824 с.
6. Г о р о н о в с к и й И. Т., Н а з а р е н к о и др. Краткий справочник по химии. — Киев: Наукова думка, 1974. — 987 с.

## РЕЗЮМЕ

На основе обобщения литературных данных установлено эмпирическое уравнение, позволяющее определить температуры воспламенения углеводородов, спиртов, фенолов, сложных эфиров, альдегидов, кетонов и азотсодержащих соединений. Эту формулу можно применять в прикладных расчетах.

## XÜLASƏ

Ədəbiyyat məlumatlarının ümumiləşdirilməsi əsasında karbohidrogenlərin, spirtlərin, fenolların, mürəkkəb efirlərin, aldehidlərin, ketonların və azot-üzvi birləşmələrin alovlanma temperaturunu hesablamaq üçün empirik düstur təklif edilir. Bu düsturdan praktik məqsədlər üçün istifadə etmək olar.

## SUMMARY

On the basis of literature data the empiric formulation was set up to determine the temperature of burning carbohydrates, alcohols, phenols esters, aldehydes, ketones and nitrogen-containing organic compounds. This formulation can be used in applied calculation.