

June 1978

RIIS-RR-26-5

UDC 662.612 : 661.72

産業安全研究所研究報告

RESEARCH REPORT OF
THE RESEARCH INSTITUTE OF INDUSTRIAL SAFETY

RR-26-5

有機化合物の発火温度の体系化につ
いての研究 (第1報)

—鎖式飽和1価アルコール類の発火温度—

柳 生 昭 三

労働省産業安全研究所
MINISTRY OF LABOUR
THE RESEARCH INSTITUTE OF INDUSTRIAL SAFETY

有機化合物の発火温度の体系化に ついての研究 (第 1 報)

—鎖式飽和 1 価アルコール類の発火温度—

柳 生 昭 三*

Systematization of Spontaneous Ignition Temperatures of Organic Compounds (1st Report)

—Spontaneous Ignition Temperatures of Alkyl Alcohols—

by Shōzō Yagyū*

Ignition temperatures of combustible substances have so far been determined mainly by experiments. However, only a limited number of substances was taken up in this connection in the past, among a wide variety of combustible substances. So, still more sufficient experimental data must be accumulated from the standpoint of safety engineering.

The author has intended from some years ago to systematize the ignition temperatures of combustible substances, which are mainly organic compounds, to estimate the ignition temperature of a compound without experimental determination. For this purpose, it is necessary in the first place to investigate the relationship between ignition temperatures and molecular structures of organic compounds of various kinds.

Now, a relationship between the ignition temperature and the average carbon chain length has been already reported by Zabetakis for the paraffin hydrocarbon homologs¹⁾. In this paper is described the result of application of his method to alkyl alcohol homologs, as the first report of this series of study.

As a result, a similar relationship to that in the case of paraffin hydrocarbon was obtained also in alkyl alcohol homologs. Further, a very similar relationship to both mentioned above was also found between the boiling points and the ignition temperatures of alkyl alcohol homologs.

* 化学研究部 Chemical Engineering Research Division

1. 緒 言

発火温度は物質の発火に対する難易の程度を温度の尺度で表わす数値で、物質それ自身の発火危険防止に用いられるだけでなく、物質の危険性の分類や比較などにもしばしば利用され、安全上重要な数値である。しかし、可燃性物質全般については、その種類の多さに較べて実測値が知られている物質は比較的僅かであり、また適切な予測方法もないので、現状では未測定物質に対するその予知は一般に困難である。しかも、発火温度は測定法の相違による影響が大きいので、実測値を比較する場合でも、同じ測定法によるものでなければ比較の意味が薄いという性格がある。

このような現状を考えれば、個々の物質の発火温度データを実測により追加してゆくことも必要ではあるが、それよりも可燃性物質の主体である有機化合物全般の発火温度の体系化をはかることの方が急務であるとする。この目的をいくらかでも果すために、著者はまず基礎的物質の発火温度を同一方法で系統的に実測し、ここに得られたデータを利用して、物質の種類別あるいは分子構造別に発火温度との関連性を追究することを試みた。このような研究の結果として、発火温度が物質の一般的特性値とグラフ上に関係づけられたり、あるいはなんらかの経験的法則が見出されれば、未測定の多くの物質に対する発火温度の予知が容易になると思う。また、発火温度の正確な予知は困難で、最終的には実測に頼るとしても、ある程度の予測手段があれば実測の手間をかなり省くことができる。さらに、発火温度が実験条件に大きく影響を受けるものだとすれば、得られた測定値の妥当性をなんらかの方法でチェックしたいという希望も生ずる。実験誤差が比較的大きく作用する物性データの測定値は、測定後に既存の法則にもとづく適応性の検定を行なうことが現今では常識になっている（たとえば気液平衡データなど）。これらの目的のためにも、発火温度に関連する経験的法則を見出すことが早急に望まれるわけである。

ここでは、これら一連の研究のはじめとして、物質に鎖式飽和1価アルコール（以下アルキルアルコールという）の同族体を選び、実測でえた発火温度と分子構造などとの関係について検討したので、ここに報告する。

2. 従 来 の 研 究

この分野における研究は従来きわめて少なく、著名なものはずかに Zabetakis ら¹⁾のものがあつた程度である。

もともと発火温度は他の物性との関連に乏しいとき、たとえば物質の物理恒数の数値と発火温度を関係づけた例は見当たらない。ただ、炭化水素の同族体については、炭素数と発火温度の関係が種々検討されている²⁾。この場合、直鎖のパラフィンやオレフィン類だけを最低発火温度と炭素数の両軸でプロットすると、ある一定の曲線上に乗るが、側鎖のあるものはこの曲線から大きく外れる。そこで、Zabetakis ら¹⁾は直鎖パラフィンと側鎖のあるパラフィンが同一尺度で扱えるようにするために、炭素数の代わりに平均炭素鎖長という考え方を導入した。Fig.1 にこの関係を示す。ここで平均炭素鎖長 L は、 i 個の炭素原子をもつ炭素鎖の数を g_i 、メチル基（炭素鎖末端の炭素原子）の数を $M (M \geq 2)$ とすれば、次式で与えられる数値であ

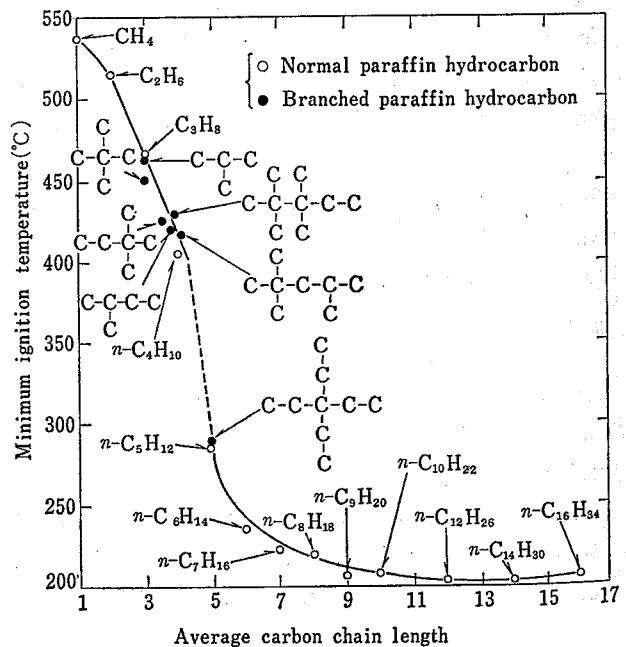


Fig. 1 Minimum ignition temperatures of paraffin hydrocarbons in air as function of average carbon chain length

(パラフィン系炭化水素の平均炭素鎖長と最低発火温度の関係)

る。

$$L = \frac{2 \sum_{i=2}^{\infty} i \cdot g_i}{M(M-1)} \quad (1)$$

Fig.1 で分るように、直鎖パラフィンでは炭素数の増加につれて最低発火温度が急激に低下し、炭素数9付近ではば一定になり、曲線全体としては逆S字状を示している。側鎖のあるパラフィンは同一炭素数の直鎖パラフィンより発火温度が一般にかなり高くなる。Zabetakis らはこの考え方をパラフィン系炭化水素だけでなく、側鎖をもつ芳香族炭化水素にも適用して、パラフィン類と類似の関係があることを示している³⁾。

著者は、Fig.1 に見られるような関係が、少なくとも鎖式化合物ではパラフィン類以外の他の同族体間でも成立するであろうと考え、これを確認することを主目的として、以下の研究に着手した。

3. 実験方法

発火温度の測定装置および測定方法は著者の他の報告⁴⁾に詳述してあるので、ここでは測定法を簡単に述べるにとどめる。

電気炉中で一定温度に加熱した 200 ml のテレックスガラス製三角フラスコ中に一定量の試料を注入して、発火の有無を観察し、発火する場合には発火おくれ時間を計測する。炉の温度を変化させてこの操作を繰り返し、ある一定の試料量における発火の有無の限界温度を求める。つぎに試料量を変えて同様に行ない、試料量と発火限界温度の関係を求めてグラフ上に記録する。このうちの最低の限界温度をその試料の最低発火温度と定める。つぎに、この最低発火温度を与える試料量により、温度と発火おくれ時間の関係を求めてグラフ上に記録する。

試料は市販の特級または1級試薬をそのまま使用した。

4. 実験結果

32 種の試料について実験でえた試料量-発火限界温度線図および温度-発火おくれ時間線図から、最低発火温度における温度、試料量および発火おくれ時間、おくれ時間 5 sec の温度、およびおくれ時間 1 sec の

温度 (以下この温度を瞬間発火温度という) を読みとり、これらをまとめたものが Table 1 である。なお、個々の物質の測定における詳しいデータは、著者の他の報告*を参照されたい。この Table 1 中には、のちの検討に必要なため、アルコール類の分子構造、沸点、アルキル基の平均炭素鎖長、および補正平均炭素鎖長の値も同時に記入した。

5. 分子構造と発火温度の関係の考察

5.1 アルキル基の平均炭素鎖長と発火温度の関係

分子構造と発火温度の関係を定量的にしらべるためには、まず分子構造をなんらかの方法で数値化しなければならない。アルキルアルコールの同族体は R-OH (Rはアルキル基) の構造を持つが、OH 基は共通であるから、それらの性状の違いはアルキル基の構造の違いに原因する。そこで、このアルキル基の構造を表わすのに Zabetakis らの提案による平均炭素鎖長を用いた。この場合、OH 基を水素原子とみなせば、炭化水素と同じ扱いができる。たとえば、イソブチルアルコールのアルキル基は $\begin{bmatrix} \text{C}-\text{C}-\text{C}- \\ | \\ \text{C} \end{bmatrix}$ であるから、その平均炭素鎖長はさきの (1) 式より

$$L = \frac{2(3 \times 3)}{3(3-1)} = 3.0 \quad \text{となる。このようにして 32 種の}$$

アルコールのアルキル基の平均炭素鎖長の値を求め、この数値でアルコール類の分子構造を代表させた。結果は Table 1 中に示してある。

この数値を見れば分るように、直鎖のアルキル基では炭素数と平均炭素鎖数は同一であるが、側鎖のあるアルキル基では炭素数より平均炭素鎖長が小さくなり、しかも小数点以下に端数がつく。

そこで、このアルキル基の平均炭素鎖長と発火温度の関係をグラフにプロットしてみる。発火温度としては最低発火温度、おくれ時間 5 sec の温度、および瞬間発火温度の3種を選び、これらをそれぞれ Fig.2, Fig.3 および Fig.4 に示した。Fig.2 に見られるように、アルキルアルコール類のアルキル基の平均炭素鎖長と最低発火温度の間には、Zabetakis らによって示されたパラフィン系炭化水素の場合と類似の関係が

* 柳生, “発火温度データ (第1集)”, 産業安全研究所技術資料, RIIS-TN-75-3 (1975)中の測定物質番号 1~32

Table 1 A summary of ignition temperatures of alkyl alcohols
(アルキルアルコール類の発火温度の測定結果)

No. of Sample	Alcohol	Meolecular structure	No. of carbon atoms	Boiling point (°C)	Average carbon chain length of alkyl radical	Revised average carbon chain length	Minimum ignition temperature			Temp. of 5 sec time lag (°C)	Momentary ignition temperature (°C)
							Temp. (°C)	Sample quantity (ml)	Time lag (sec)		
1	Methyl alcohol	C-OH	1	65	1.0	2.0	440	0.25	35	480	565
2	Ethyl alcohol	C-C-OH	2	78	2.0	3.0	400	0.15	28	460	540
3	<i>n</i> -Propyl alcohol	C-C-C-OH	3	97	3.0	4.0	400	0.15	30	460	550
4	<i>iso</i> -Propyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C-C-C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	3	82	3.0	3.0	430	0.175	18	460	555
5	<i>n</i> -Butyl alcohol	C-C-C-C-OH	4	117	4.0	5.0	340	0.125	25	415	530
6	<i>iso</i> -Butyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C-C-C-OH} \\ \\ \text{C} \end{array}$	4	108	3.0	3.7	405	0.175	22	455	540
7	<i>sec</i> -Butyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C-C-C-C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	4	100	4.0	3.7	395	0.175	19	445	540
8	<i>tert</i> -Butyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C} \\ \\ \text{C-C-C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	4	82	3.0	3.0	460	0.125	15	490	625
9	<i>n</i> -Amyl alcohol	C-C-C-C-C-OH	5	138	5.0	6.0	300	0.125	70	350	520
10	<i>iso</i> -Amyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C-C-C-C-OH} \\ \\ \text{C} \end{array}$	5	132	3.7	4.3	340	0.125	15	405	525
11	<i>sec</i> -Amyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C-C-C-C-C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	5	120	5.0	4.3	330	0.125	18	390	530
12	<i>tert</i> -Amyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C} \\ \\ \text{C-C-C-C} \\ \\ \text{HO} \end{array}$	5	102	3.7	3.5	410	0.15	17	485	585

13	Neopentyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C} \\ \\ \text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{C} \end{array}$	5	113	3.0	3.5	420	0.125	22	460	570
14	Diethyl carbinol	$\begin{array}{c} \text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	5	116	5.0	4.3	365	0.125	21	450	545
15	<i>n</i> -Hexyl alcohol	C-C-C-C-C-C-OH	6	158	6.0	7.0	285	0.125	150	335	465
16	Methyl- <i>iso</i> -butyl carbinol	$\begin{array}{c} \text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C} \\ \quad \\ \text{C} \quad \text{OH} \end{array}$	6	132	4.3	4.3	340	0.125	9	375	530
17	2-Methyl-2-pentanol	$\begin{array}{c} \text{C} \\ \\ \text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	6	121	4.3	4.0	415	0.125	19	475	570
18	<i>n</i> -Heptyl alcohol	C-(C) ₅ -C-OH	7	177	7.0	8.0	275	0.15	290	330	435
19	4-Heptanol	$\begin{array}{c} \text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	7	155	7.0	5.7	295	0.125	50	350	510
20	Di- <i>iso</i> -propyl carbinol	$\begin{array}{c} \text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C} \\ \quad \quad \\ \text{C} \quad \text{OH} \quad \text{C} \end{array}$	7	140	4.3	4.2	395	0.175	21	450	555
21	<i>n</i> -Octyl alcohol	C-(C) ₆ -C-OH	8	195	8.0	9.0	260	0.175	320	315	390
22	<i>sec</i> -Octyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C}-(\text{C})_5-\text{C}-\text{C} \\ \\ \text{OH} \end{array}$	8	180	8.0	6.3	265	0.15	350	320	420
23	2-Ethylhexyl alcohol	$\begin{array}{c} \text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{OH} \\ \\ \text{C} \\ \\ \text{C} \end{array}$	8	183	5.7	6.3	270	0.15	260	335	490
24	2,2,4-Trimethyl-1-pentanol	$\begin{array}{c} \text{C} \\ \\ \text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{OH} \\ \quad \\ \text{C} \quad \text{C} \end{array}$	8	—	4.2	4.6	395	0.15	29	455	550

No. of Sample	Alcohol	Molecular structure	No. of carbon atoms	Boiling Point (°C)	Average carbon chain length of alkyl radical	Revised average carbon chain length	Minimum ignition temperature			Temp. of 5 sec time lag (°C)	Momentary ignition temperature (°C)
							Temp. (°C)	Sample quantity (ml)	Time lag (sec)		
25	<i>n</i> -Nonyl alcohol	C-(C) ₇ -C-OH	9	213	9.0	10.0	260	0.175	400	310	375
26	Di- <i>iso</i> -butyl carbinol	$ \begin{array}{ccccccc} \text{C} & - & \text{C} & - & \text{C} & - & \text{C} \\ & & & & & & \\ \text{C} & & \text{OH} & & \text{C} & & \text{C} \end{array} $	9	—	5.7	5.4	300	0.1	16	335	520
27	<i>n</i> -Decyl alcohol	C-(C) ₈ -C-OH	10	233	10.0	11.0	250	0.175	350	310	355
28	Lauryl alcohol	C-(C) ₁₀ -C-OH	12	257	12.0	13.0	250	0.175	250	300	350
29	Myristyl alcohol	C-(C) ₁₂ -C-OH	14	291	14.0	15.0	240	0.175	180	290	340
30	7-Ethyl-2-methyl-4-undecanol	$ \begin{array}{ccccccc} \text{C} & - & (\text{C})_8 & - & \text{C} & - & (\text{C})_2 & - & \text{C} & - & \text{C} & - & \text{C} \\ & & & & & & & & & & & & \\ & & \text{C} & & \text{OH} & & \text{C} & & \text{C} & & \text{C} & & \text{C} \\ & & & & & & & & & & & & \\ & & \text{C} & & & & & & & & & & \text{C} \end{array} $	14	—	8.3	7.6	250	0.1	170	305	415
31	Cetyl alcohol	C-(C) ₁₄ -C-OH	16	344	16.0	17.0	245	0.15 g	160	290	335
32	Stearyl alcohol	C-(C) ₁₆ -C-OH	18	350	18.0	19.0	245	0.2 g	160	290	335

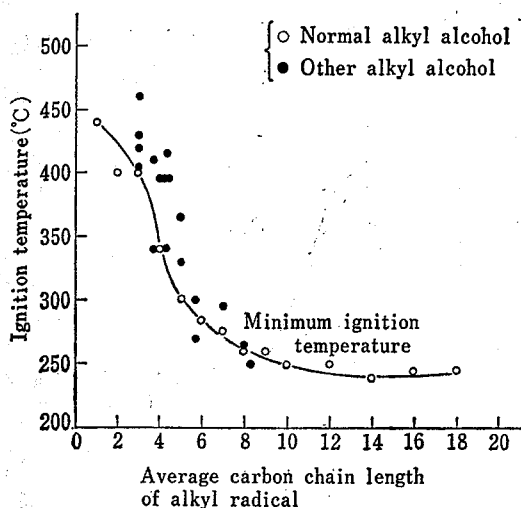


Fig. 2 Relation between average carbon chain length of alkyl radical and minimum ignition temperatures (アルキル基の平均炭素鎖長と最低発火温度の関係)

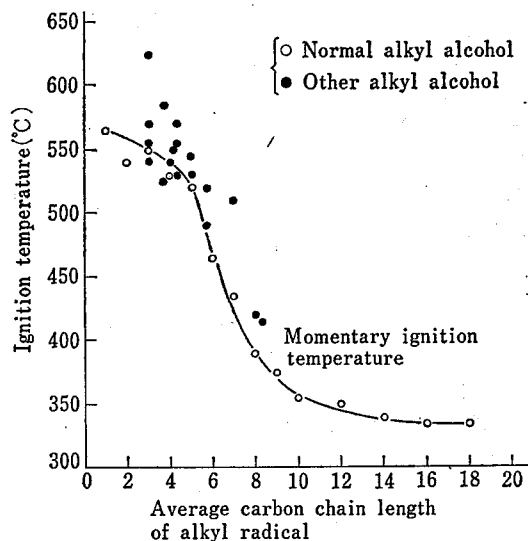


Fig. 4 Relation between average carbon chain length of alkyl radical and momentary ignition temperatures (アルキル基の平均炭素鎖長と瞬間発火温度の関係)

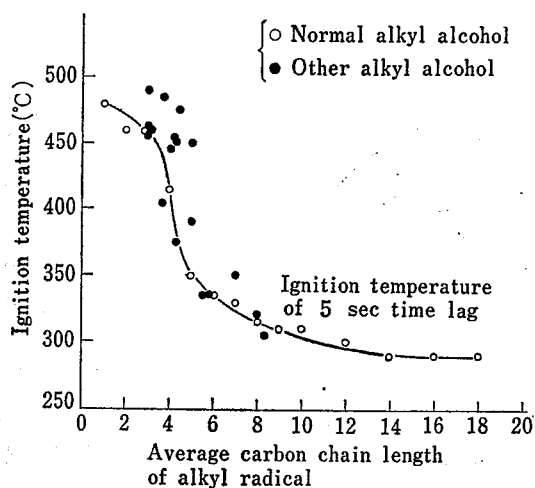


Fig. 3 Relation between average carbon chain length of alkyl radical and ignition temperatures of 5 sec time lag (アルキル基の平均炭素鎖長と発火おくれ時間 5sec の温度の関係)

認められる。さらに Fig.3 および Fig.4 から、このような関係は最低発火温度だけでなく、同一の発火おくれ時間を示す他の温度にも適応することがわかる。

5.2 補正平均炭素鎖長と発火温度の関係

前節の Fig.2~4 中の曲線は、直鎖第1級アルコールを基準にして引いたのであるが、その他のアルコー

ルはほとんど曲線の上方に外れており、この曲線を発火温度の予測に利用するには、いかにも精度が悪いと思う。ところで、アルコールの分子構造を表わすのに、前節では OH 基を水素原子とみなしてアルキル基の平均炭素鎖長で表わしたが、この方法ではもともとつぎの不都合があった。すなわち、直鎖アルコールのうちで、第1級アルコールと第2級アルコールの区別ができないことである。たとえば、*n*-ブチルアルコール [C-C-C-C-OH] と *sec*-ブチルアルコール $\begin{bmatrix} \text{C-C-C-C} \\ | \\ \text{OH} \end{bmatrix}$ では、それらのアルキル基の平均炭素鎖長は共に 4.0 であるが、両者の物性には明らかな相違があり、これは OH 基のつく炭素原子の位置が1位と2位の違いから生じている。

そこで、このような場合の区別を可能にするために、つぎに OH 基をメチル基とみなして平均炭素鎖長を求めると、*n*-ブチルアルコールは 5.0、*sec*-ブチルアルコールは 3.7 となる。このようにして求めた平均炭素鎖長を以下に補正平均炭素鎖長と呼び、この値も Table 1 中に示した。つぎに、この補正平均炭素鎖長を用いて、発火温度との関係を示したものが Fig.5、Fig.6 および Fig.7 である。Fig.5 はさきの Fig.2 に、Fig.6 は Fig.3 に、Fig.7 は Fig.4 に対応する。これらの両図をそれぞれ対比してみると、補正平均炭素鎖長を用いた方が、直鎖第1級アルコールを基準に

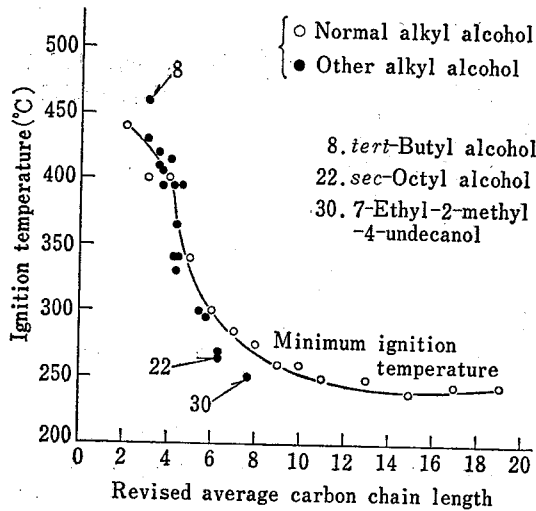


Fig. 5 Relation between revised average carbon chain length and minimum ignition temperatures
(補正平均炭素鎖長と最低発火温度の関係)

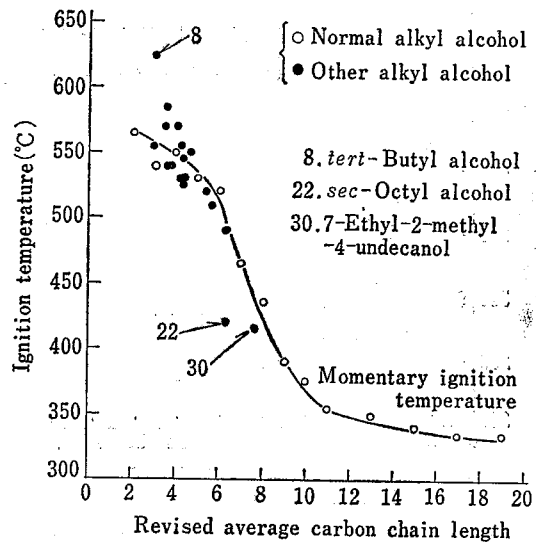


Fig. 7 Relation between revised average carbon chain length and momentary ignition temperatures
(補正平均炭素鎖長と瞬間発火温度の関係)

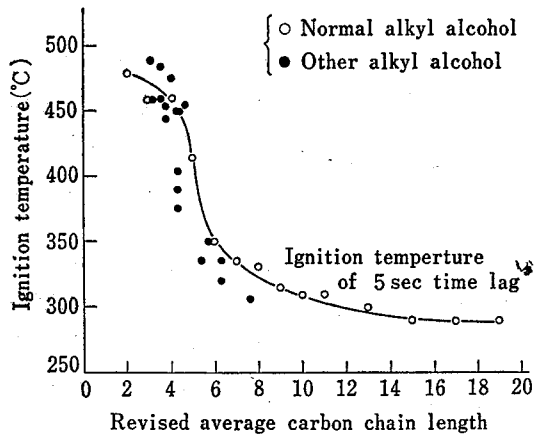


Fig. 6 Relation between revised average carbon chain length and ignition temperatures of 5 sec time lag
(補正平均炭素鎖長と発火おくれ時間 5sec の温度の関係)

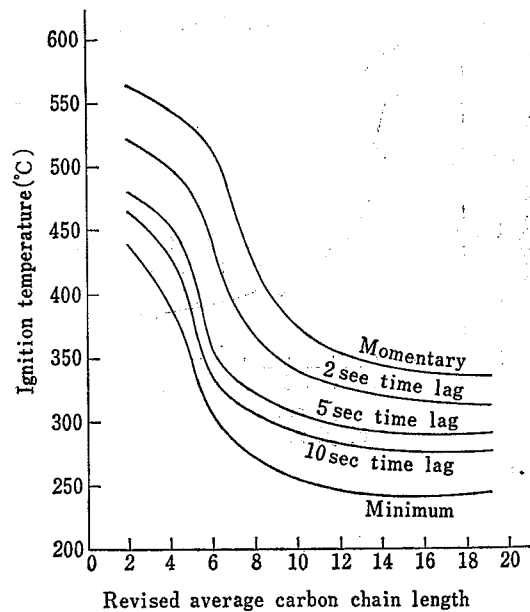


Fig. 8 Distribution chart of ignition temperatures of alkyl alcohols
(アルキルアルコール類の発火温度の分布図)

した曲線からのばらつきが小さいので、アルキルアルコール類の分子構造を表わす指標としては、補正平均炭素鎖長の方が勝れているようである。すなわち、このような考察では、アルコール類の OH 基を水素原子とみなすよりもメチル基とみなす方がより合理的であることを示している。

さて、この場合の曲線からの偏倚は、32 物質のうち、やや大きく外れる 2, 3 の物質 (*tert*-ブチルアルコール、*sec*-オクチルアルコール、7-エチル-2-メチル-4-ウンデカノールなど) を除き、他はいずれも

±25°C 以内の誤差である。したがって、Fig.5~7 の曲線を利用することにより、安全管理の実際上に差支えのない誤差範囲内で、アルキルアルコール類の発火温度を予測することができると思われる。とくに安全面

で重要な最低発火温度が、その発火おくれ時間は各物質まちまちであるにもかかわらず、比較的ばらつきの少ない結果を示していることは好都合である。

ここで、これらの曲線の数式化を検討したが、比較的簡単な1つの函数形として表わすことができなかった。

つぎに、Fig. 8は最低発火温度および発火おくれ時間が、それぞれ10, 5, 2, 1secの温度を示す曲線を同一グラフ上に記入したものである。この図からは、最低発火温度と瞬間発火温度の温度差が平均炭素鎖長によって変化することなどがわかる。すなわち、補正平均炭素鎖長が3付近ではその温度差は約130°Cであるが、前者が増せば後者は最大200°Cまで大きくなった後に逆に小さくなり、前者が13あたりになると後者は100°C程度になる。要するに、Fig. 8はアルキルアルコール類全体の発火温度の温度分布を示すものとみてよいと思う。

5.3. 沸点と発火温度の関係

上記の平均炭素鎖長は物質の構造式からただちに求められるので、物性定数などを調査しなくても発火温度の予測ができるところに実用的な価値がある。しかし、物質の物性値のうちで、基礎的でしかもデータが広く揃っているような数値と発火温度が関係づけられれば、これは平均炭素鎖長とは別の意味で、興味深かつ価値があると考えられる。そこで、実用上重要であり、しかもデータが比較的完備しているいくつかの物性値と発火温度の関係を検討してみた。その結果、沸点と発火温度の間にある特定の関係があり、この関係は平均炭素鎖長と発火温度の関係にきわめてよく類似していることを見出したので、それを以下に述べる。

まず、Table 1によって平均炭素鎖長と沸点の関係をしらべてみる。直鎖第1級アルコールでは炭素数が増すにつれて沸点は上昇し、これらの間にはほぼ直線関係が成立する。側鎖のあるものでは、同じ炭素数の直鎖のものより沸点は低く、また側鎖の数が増したり、その構造が複雑になるほど、一般にその傾向が強くなる。一方において、平均炭素鎖長は側鎖のあるものは、同じ炭素数の直鎖のものより小さく、また側鎖が複雑になるほどその傾向が強い。これらのことを考え合わせると、平均炭素鎖長と沸点の間にはある特定の関係があると予想される。これをプロットしたものがFig. 9である。すなわち、両者はほぼ直線関係を保

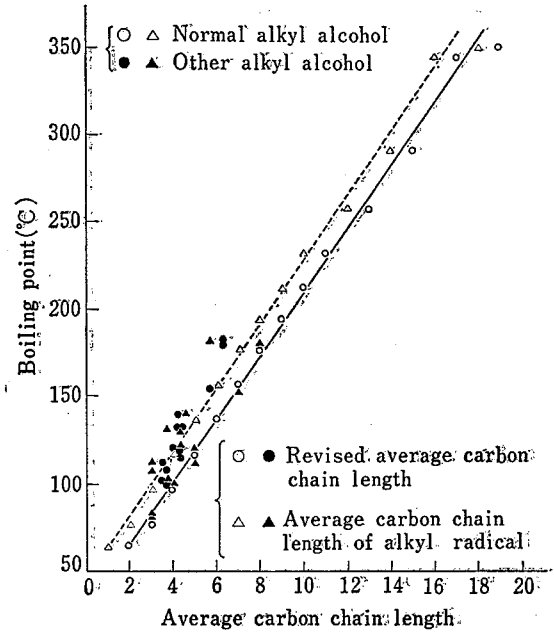


Fig. 9 Relation between average carbon chain length and boiling points (平均炭素鎖長と沸点の関係)

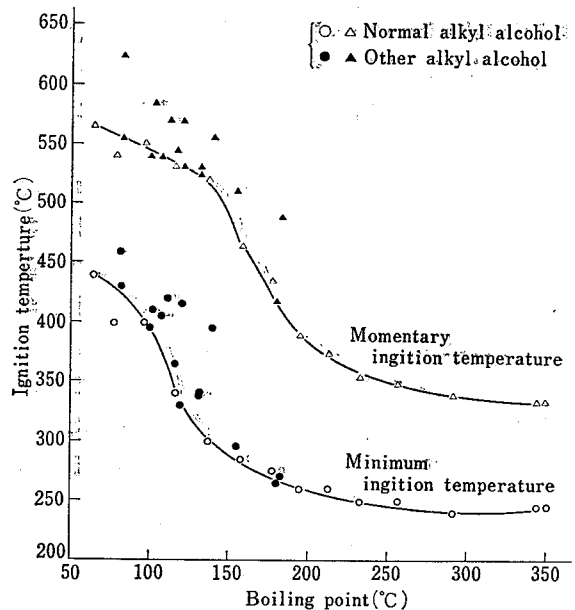


Fig. 10 Relation between boiling points and ignition temperatures (沸点と発火温度の関係)

っている。このことは、分子構造を表わす1つの指標として沸点が利用できることを示している。換言すれば、同族体間に限定すると、沸点は分子構造すなわち炭素数の大小および側鎖の性格などを比較的正確に代表する数値といえる。Fig. 9中の平均炭素鎖長には、アルキル基の平均炭素鎖長と補正平均炭素鎖長の両方

を用いたが、それらの直線性に大差はない。

沸点と平均炭素鎖長の間このような直線的関係があれば、沸点と発火温度の関係は、平均炭素鎖長と発火温度の関係に類似した逆S字状曲線になるはずである。Fig. 10 にこの関係を示す。この場合の曲線も直鎖第1級アルコールを基準とすれば、その他のアルコールはいずれも曲線の上方に外れている。

ここで、Fig. 10 とさきの Fig. 5 および Fig. 7 を対比してみると、発火温度の予測のためには、ばらつきの点で沸点よりも補正平均炭素鎖長を用いる方が適している。しかし、沸点と発火温度の間このような関係があるということは、一応留意してよいことだと思ふ。この関係はアルキルアルコール以外の他の鎖式化合物の同族体にも適用できるであろうから、その利用価値の判断はさらに多くの物質に対する検討を経たのちに決定されるべきであろう。

6. 結 論

有機化合物全般の分子構造と発火温度の関係を調べる第一歩として、鎖式化合物のアルキルアルコール類について検討した結果、つぎのことが明らかになった。

1) アルキルアルコールの分子構造をアルキル基の平均炭素鎖長で表わし、この数値と発火温度の関係をグラフ上にプロットすると、Fig. 2~4 に見られるように、Zabetakis らがパラフィン系炭化水素で示した Fig. 1 の関係と類似の逆S字状曲線が得られた。

2) アルキルアルコールの分子構造を表わすのに、上記のアルキル基の平均炭素鎖長に補正を加えた補正平均炭素鎖長を用いると、Fig. 5~7 に見られるよう

に、逆S字状曲線からのばらつきがさらに少ない関係が得られた。したがって、この関係図を利用してアルキルアルコール類の発火温度を±25°C 以内の精度で予測することができるであろう。

3) アルキルアルコールの沸点と発火温度の間にも、Fig. 10 に見られるように、上記2種の逆S字状曲線に類似した関係があることを見出した。ここでは、沸点のようなもっとも基礎的な物性値と発火温度がある程度関係づけられたことに意義があると思われる。

4) 32種のアルキルアルコールの発火温度の実測と、それらのデータと分子構造の関係の検討の結果、Fig. 8 に見られるように、アルキルアルコール全般の発火温度の温度分布を把握することができた。

今回の検討の結果、アルキルアルコール類の発火温度について以上の知見が得られたが、このような関係は他の鎖式化合物の同族体間にも存在すると予想されるので、今後はエステル類などについて検討を続け、とりあえず鎖式化合物の発火温度の体系化をはかりたいと考えている。
(昭和53年3月27日受理)

文 献

- 1) M. G. Zabetakis, A. L. Furno, G. W. Jones : Ind. Eng. Chem., 46, 2173 (1954)
- 2) たとえば L. C. Gibbons, H. C. Barnett : Ind. Eng. Chem., 46, 2150 (1954)
- 3) M. G. Zabetakis : "Flammability Characteristics of Combustible Gases and Vapors", U. S. Bur. Mines, Bull. 627, p. 64 (1965)
- 4) 柳生昭三 : "発火温度データ (第1集)", 産業安全研究所技術資料, RIIS-TN-75-3 (1975)

産業安全研究所研究報告 RIIS-RR-26-5

昭和 53 年 6 月 10 日 発行

発行所 労働省産業安全研究所

〒 108 東京都港区芝 5 丁目 35 番 1 号

電話 (03) 453-8441 (代)

印刷所 新日本印刷株式会社

UDC 662.612 : 661.72

有機化合物の発火温度の体系化についての研究 (第1報)

——鎖式飽和1価アルコール類の発火温度——

柳生 昭三

産業安全研究所研究報告 RIIS-RR-26-5, 1~10(1978)

有機化合物の発火温度を体系化するためには、まず物質の分子構造と発火温度の間の関連性を追究することが必要であろう。このことについては、すでに Zabetakis らによってパラフィン系炭化水素類の平均炭素鎖長と発火温度の関係が報告されている。

この報告では、上記の関係をアルキルアルコール類に適用してみた。その結果、パラフィン系炭化水素の場合と類似した関係が、アルキルアルコールについても認められた。

(図 10, 表 1, 参 4)



UDC 662.612 : 661.72

Systematization of Spontaneous Ignition Temperatures of Organic Compounds
(1st Report)

——Spontaneous Ignition Temperatures of Alkyl Alcohols——by S. Yagyû

Research Report of the Research Institute of Industrial Safety, RIIS-RR-26-5
1~10(1978)

For the systematization of ignition temperatures of organic compounds, it is necessary in the first place to investigate the relationship between ignition temperatures and molecular structures of substances. In this connection, a relationship between the ignition temperature and the average carbon chain length has been already reported by Zabetakis for the paraffin hydrocarbon homologs.

The present paper describes the result of application of his method to alkyl alcohol homologs. As a result, a similar relationship to that in the case of paraffin hydrocarbon was obtained also in alkyl alcohol homologs.

(10 figures, 1 table, 4 references)

