

UNIFAC 그룹 기여 모델에 의한 n-Octane+n-Decane 계와 n-Octane+n-Dodecane 계의 인화점 계산

하동명 · 이성진^{**}

세명대학교 보건안전공학과 · *세명대학교 임상병리학과
(2015. 6. 4. 접수 / 2015. 8. 5. 수정 / 2015. 8. 12. 채택)

Flash Point Calculation for n-Octane+n-Decane and n-Octane+n-Dodecane by UNIFAC Group Contribution Model

Dong-Myeong Ha · Sungjin Lee^{**}

Department of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University

*Department of Clinical Laboratory Science, Semyung University

(Received June 4, 2015 / Revised August 5, 2015 / Accepted August 12, 2015)

Abstract : The flash point is used to categorize inflammable liquids according to their relative flammability. Such a categorization is important for the safe handling, storage, and transportation of inflammable liquids. The flash point temperature of two binary liquid mixtures(n-octane+n-decane and n-octane+n-dodecane) has been measured for the entire concentration range using Seta-flash closed cup tester based on the ASTM D3278 method. The closed cup flash point temperature was estimated using the UNIFAC(Universal Functional Activity Coefficient) group contribution model. The experimentally derived flash point was also compared with the predicted flash point from the UNIFAC model. The UNIFAC model is able to estimate the flash point fairly well for n-octane+n-decane mixture and n-octane+n-dodecane mixture.

Key Words : flash point, Seta-flash closed cup tester, UNIFAC, n-octane+n-decane, n-octane+n-dodecane

1. 서론

국내 산업 현장에서는 여러 종류의 인화성 물질을 취급하고 있다. 산업의 발전에 따라 인화성 물질의 사용량은 함께 증가하고 있으며, 그에 따라 폭발과 화재 사고의 발생 가능성도 함께 커지고 있다.

인화성 물질을 안전하게 사용하기 위해서는, 그 물질에 대한 여러 정보를 확보해야 하는데 그 중 가장 중요한 정보가 인화점이다¹⁾.

가연성 액체의 표면 위에 불꽃을 가할 때, 인화가 발생하는 가연성 액체의 가장 낮은 온도를 인화점이라 한다^{2,3)}.

2008년 유엔(UN)은 GHS(Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals)를 도입할 것을 모든 나라에 권장하고 있다. 우리나라 역시 GHS의 도입을 고려하고 있다. GHS는 유해화학물질에 대한 분

류를 국제적으로 통일하여 위험성 정보에 대한 인프라를 구축하는 시스템이다.

GHS에서 액체 혼합물의 인화 위험성에 대한 가장 중요한 분류 기준은 인화점이다. 그러나 현재까지 확보된 액체 혼합물의 인화점 데이터는 매우 부족하며, 새롭게 실험을 통해 인화점을 확보하기에는 많은 시간이 걸린다. 이에 따라 2015년까지 인화 위험성에 따른 액체 혼합물의 분류는 유보되었다⁴⁾. 이와 같은 GHS의 국내 도입에 대비하기 위해서 본 연구에서는 액체 혼합물의 인화점을 측정하고 예측 방법을 제시하고자 한다.

인화점을 실험적으로 결정할 때 두 종류의 방법이 사용된다. 개방식 방법과 밀폐식 방법이다⁵⁾. 본 연구에서는 밀폐식 방법을 선택하였으며 그에 맞는 Seta-flash 밀폐식 장치를 사용하였다. 이 장치의 장점은 소량(2 ml)의 액체 용액으로 인화점을 측정할 수 있다는 점과,

^{*} Corresponding Author : Sungjin Lee, Tel : +82-43-649-1286, E-mail : pappi68@hanmail.net

Department of Clinical Laboratory Science, Semyung University, 65, Semyung-ro, Jecheon-si, Chungbuk 27136, Korea

측정 시간이 비교적 짧다는 점이다. 즉 인화점 측정에 투입되는 시약과 시간 비용을 절약할 수 있다는 장점이 있다.

산업체에서 취급되는 수많은 액체 혼합물의 인화점을 측정하는 것은 많은 비용과 시간이 소요된다. 따라서 인화점 실험의 대안으로 액체 혼합물의 인화점을 계산하는 방법이 선택되었고, 이에 대해 많은 연구가 진행되어 왔다.

Affens와 McLaren⁶⁾은 Raoult의 법칙, Dalton의 법칙과 Le Chatelier의 법칙⁷⁾을 함께 적용하여 탄화수소 액체 혼합물의 인화점을 계산하는 방법을 개발하였다. 이 방법은 순수 물질의 인화점을 이용하여 혼합물의 인화점을 예측하는 방법이었으며, 액상을 이상 용액으로 가정하는 것이었다. 따라서 액상의 활동도계수(activity coefficient, γ)가 “1”에서 일정 정도 벗어난 비이상 용액의 인화점 예측에는 적용할 수 없다는 단점이 있다.

Hanley⁸⁾는 순수 물질의 연소열과 혼합물의 LFL(Low Flammability Limit)를 토대로 액체 혼합물의 인화점을 계산하는 방법을 제시하였다. 그는 액상의 활동도계수는 Margules 식⁹⁾을 사용하여 계산하였다. 이 방법은 비가연성 물질이 포함된 액체 혼합물의 인화점을 계산하는 데에 이용할 수 있으며 이상 용액과 비이상 용액의 인화점 계산에 적용할 수 있다.

Liaw 등¹⁰⁾은 액체 혼합물의 인화점을 계산하기 위해서 Le Chatelier의 법칙과 수정된 Raoult의 법칙⁹⁾을 이용하였다. 또한 액상의 비이상성을 반영하는 활동도계수는 UNIQUAC 식⁹⁾과 NRTL 식¹¹⁾을 이용하여 계산하였다. 그러나 이 예측 방법은 활동도계수 식의 이성분계 파라미터를 확보하지 못할 경우 액체 혼합물의 인화점을 계산할 수 없다는 단점이 있다.

Ha 등¹²⁾은 액상의 비이상성을 반영하는 활동도계수를 van Laar 식⁹⁾과 Wilson 식¹³⁾에 의해 계산하여 이성분계 액체 혼합물의 인화점을 예측하였다.

Kim과 Lee¹⁴⁾는 다변수 통계 분석법을 이용하여 이성분계 액체 혼합물의 인화점을 계산하였다. 이 예측 방법은 그들의 논문에 제시된 5가지 종류의 이성분계 액체 혼합물만을 고려한 통계적 예측 방법이다. 따라서 추후 다른 종류의 액체 혼합물의 인화점을 효과적으로 계산할 수 있는지에 대한 검토가 필요하다고 판단된다.

Balasubramonian 등¹⁵⁾은 2개의 이성분계 혼합물의 인화점을 예측하는 방법을 제안하였다. 이들은 활동도 계수를 UNIFAC 식에 의해 계산하였으며, 각 성분의 증기압은 Kumar 등¹⁶⁾의 방법과 Yaws¹⁷⁾의 방법을 이용하여 계산하였다. 본 연구에서는 증기압을 계산하기 위해

Antoine 식⁹⁾을 활용하였으며, 각 성분들의 Antoine 상수는 문헌에서 쉽게 구할 수 있다. 반면 Kumar 등의 방법과 Yaws의 방법에서는 각 성분의 온도에 따른 증기압 데이터가 반드시 필요하며, 증기압을 계산하기 위한 각 성분의 상수는 온도와 증기압을 상관시켜 얻어야 한다는 단점이 있다.

본 연구에서는 액체 혼합물의 인화점을 계산하기 위하여 그룹기여 모델인 UNIFAC 식⁹⁾을 활용하였다. 이 방법은 Liaw 등¹⁰⁾과 Ha 등¹²⁾의 예측 방법과 달리 이성분계 파라미터를 확보할 수 없는 액체 혼합물의 인화점도 계산할 수 있다는 장점이 있다. 또한 Affens와 McLaren⁶⁾의 예측 방법과 달리 액상이 비이상 용액인 경우에도 인화점을 계산할 수 있다.

본 연구에서 인화점을 측정하고 계산하기 위한 액체 혼합물로 n-octane+n-decane 계와 n-octane+n-dodecane 계를 선정하였다. n-Octane, n-decane과 n-dodecane은 가솔린의 주된 성분들이며, 이들이 포함된 액체 용액은 도로, 세정, 추출 용매 등으로 산업체에서 사용되고 있다. 산업 현장의 화재와 폭발 위험성을 감소시키기 위하여 이들이 포함된 액체 혼합물의 인화점 정보를 확보하고자 하였다. 인화점은 Seta-flash 밀폐식 장치를 이용하여 측정하였다. 그룹기여 모델인 UNIFAC 식을 이용하여 인화점을 계산하였고, 그 계산치와 측정치를 비교하여 검토하였다.

2. 이성분계 액체 혼합물의 인화점 측정

n-Octane(99.0%)은 Lancaster 회사의 제품을 구입하여 사용하였다. n-Decane(99.0%)과 n-n-dodecane(99.0%)은 Alfa Aesar 회사의 제품을 구입하여 실험에 사용하였다. 이들은 별도의 정제 과정을 거치지 않았다.

인화점을 측정하기 위해 Seta-flash 밀폐식 장치가 사용되었으며, 그것은 미국의 Koehler사에서 제작된 장치이다. 측정 장치는 시료컵(용량 2ml), 시간 조절기, 화염 조절기, 시험염 공급부, 온도계와 온도 조절기 등으로 구성되어 있다. 측정 장치의 기본 구조도는 앞서 발표한 논문¹⁸⁾에 제시되어 있다.

시약들을 각각 다른 물분율로 혼합하여 ASTM D3278¹⁹⁾의 측정 방법으로 n-octane+n-decane 계와 n-octane+n-dodecane 계의 인화점을 측정하였다.

3. UNIFAC 그룹기여 모델에 의한 인화점 계산

본 연구에서는 액상의 비이상성을 반영하는 활동도 계수를 다음과 같은 UNIFAC 식으로 계산하였다.

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (1)$$

위 수식에서 “ $\ln \gamma_i^C$ ”는 다음과 같으며,

$$\ln \gamma_i^C = 1 - J_i + \ln J_i - 5q_i \left(1 - \frac{J_i}{L_i} + \ln \frac{J_i}{L_i}\right) \quad (2)$$

“ $\ln \gamma_i^R$ ”는 다음과 같다.

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left(1 - \sum_{k=1}^{N_k} \left(\theta_k \frac{\beta_{ik}}{s_k} - e_{ki} \ln \frac{\beta_{ik}}{s_k}\right)\right) \quad (3)$$

여기서

$$J_i = \frac{r_i}{\sum_{j=1}^N (r_j \cdot x_j)} \quad (4)$$

$$L_i = \frac{q_i}{\sum_{j=1}^N (q_j \cdot x_j)} \quad (5)$$

$$r_i = \sum_{k=1}^{N_k} (\nu_k^{(i)} \cdot R_k) \quad (6)$$

$$q_i = \sum_{k=1}^{N_k} (\nu_k^{(i)} \cdot Q_k) \quad (7)$$

$$e_{ki} = \frac{\nu_k^{(i)} \cdot Q_k}{q_i} \quad (8)$$

$$\beta_{ik} = \sum_{m=1}^{N_k} (e_{mi} \cdot \tau_{mk}) \quad (9)$$

$$\theta_k = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i \cdot q_i \cdot e_{ki})}{\sum_{j=1}^N (x_j \cdot q_j)} \quad (10)$$

$$s_k = \sum_{m=1}^{N_k} (\theta_m \cdot \tau_{mk}) \quad (11)$$

$$\tau_{mk} = \exp \frac{-a_{mk}}{T} \quad (12)$$

이다. i 는 성분을 표시하고, j 는 모든 성분들을 포함하는 지수이다. k 는 부그룹이며, m 은 모든 부그룹들을 포함하는 지수이다. N 은 성분들의 총 갯수이며, N_k 는 부그룹의 총 개수이며, $\nu_k^{(i)}$ 은 i 성분의 k 형태의 부그룹

의 개수이다. R_k 와 Q_k 는 부그룹의 매개변수이고 a_{mk} 는 주그룹의 상호작용 매개변수이며, 이 값들은 문헌²⁰⁾에서 얻을 수 있다.

Le Chatelier의 법칙⁷⁾을 적용하면 가연성 이성분계 액체 혼합물은 다음과 같은 관계식을 따른다.

$$\frac{y_1}{LFL_1} + \frac{y_2}{LFL_2} = 1 \quad (13)$$

여기서 y 는 기체상의 몰분율, LFL은 하부인화한계를 의미하며 아래 첨자 1, 2는 성분을 나타낸다.

i 성분의 하부인화한계는 다음의 식으로 계산할 수 있다.

$$LFL_i = \frac{P_{i,fp}^{sat}}{P} \quad (14)$$

여기서 $P_{i,fp}^{sat}$ 는 인화점에서의 i 성분의 포화증기압이며 P 는 혼합물의 전체 압력이다.

혼합물의 기상을 이상기체로 가정하고 액상을 비압축성 유체로 가정할 수 있다면, 기-액 상평형 상태는 아래와 같이 표현할 수 있다.

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{P} \quad (15)$$

여기서 x 는 액상의 몰분율, γ 는 액상의 활동도계수, P_i^{sat} 는 포화증기압이다.

Liaw 등¹⁰⁾의 제안을 적용하여 식 (14)와 식 (15)를 식 (13)에 대입하면 다음과 같은 식이 성립한다.

$$\sum_{i=1}^2 \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{P_{i,fp}^{sat}} = \frac{x_1 \gamma_1 P_1^{sat}}{P_{1,fp}^{sat}} + \frac{x_2 \gamma_2 P_2^{sat}}{P_{2,fp}^{sat}} = 1 \quad (16)$$

식 (16)의 i 성분의 액상 활동도계수(γ_i)는 앞서 제시한 그룹기여 모델인 UNIFAC 식에 의해 계산된다.

또한 i 성분의 포화증기압(P_i^{sat})과 i 성분의 인화점에서의 포화증기압($P_{i,fp}^{sat}$)은 아래의 Antoine 식⁹⁾으로 계산한다.

$$\log P_i^{sat} = A_i - \frac{B_i}{C_i + t} \quad (17)$$

여기서 t 는 온도(°C)이며 A_i , B_i 와 C_i 는 i 성분의 Antoine 상수이다.

시약들의 Antoine 상수는 문헌²¹⁾에서 얻었으며 Table 1에 제시한다.

Table 1. The antoine coefficients of each component

Components	A	B	C
n-Octane	6.93142	1358.8	209.855
n-Decane	6.94363	1495.17	193.858
n-Dodecane	6.98291	1627.714	180.521

식 (16)을 만족시키는 온도를 계산하였으며 그것을 인화점으로 결정하였다.

4. 결과 및 고찰

n-Octane+n-decane 계와 n-octane+n-dodecane 계의 인화점을 Seta-flash 밀폐식 장치에 의해 측정하였다. 그 결과를 Table 2와 3에 그리고 Fig. 1과 2에 제시하였다.

n-Octane+n-decane 계와 n-octane+n-dodecane 계의 인화점을 UNIFAC 식을 이용하여 계산하였다. 그 계산 결과를 Table 2와 3에, 그리고 Fig. 1과 2에 제시하였다. 계산치와 측정치 간의 일치 정도를 나타내는 척도로 다음의 AAE(average absolute error)²²⁾를 사용하였다.

$$AAE = \sum_{i=1}^N \frac{|T_i^{exp} - T_i^{cal}|}{N} \quad (18)$$

여기서 T_i^{exp} 는 i번째 인화점 측정값, T_i^{cal} 는 i번째 인화점 계산치, N 은 측정치의 총 개수이다.

표에서 알 수 있듯이, n-octane+n-decane 계의 경우 그룹기어 모델인 UNIFAC 식에 의한 계산치와 측정치 간의 절대평균오차(AAE)는 0.97°C이었다. n-Octane+n-dodecane 계의 절대평균오차는 0.46°C 이었다.

절대평균오차 값에서 알 수 있듯이 UNIFAC 식에 의거한 계산 방법이 이성분계 액체 혼합물(n-octane+n-decane, n-octane+n-dodecane)의 인화점을 잘 예측할 수 있음을 알 수 있다.

또한 Table 2와 3에는 Raoult의 법칙⁹⁾에 의거한 계산치가 제시되어 있다. 이 계산 방법에서는 액상을 이상 용액으로 가정하여 활동도계수 값을 “1”으로 고정시킨다. 그러면 식 (16)은 다음과 같이 정리된다.

$$\sum_{i=1}^2 \frac{x_i P_i^{sat}}{P_{i,fp}^{sat}} = \frac{x_1 P_1^{sat}}{P_{1,fp}^{sat}} + \frac{x_2 P_2^{sat}}{P_{2,fp}^{sat}} = 1 \quad (19)$$

Raoult의 법칙에 의한 인화점은 식 (19)를 만족시키는 온도로 결정되었다¹⁰⁾. n-Octane+n-decane 계에서 측정치와 계산치 간의 절대평균오차는 0.98°C이었고, n-octane+n-dodecane 계에서는 0.48°C이었다.

Table 2. The experimental and the calculated flash points for the n-octane(1)+n-decane(2) system

Mole Fractions		Flash points (°C)		
x1	x2	Exp.	Raoult's law	UNIFAC
1.000	0.000	13.0	-	-
0.900	0.100	15.0	14.50	14.50
0.700	0.300	18.0	18.04	18.05
0.500	0.500	22.5	22.62	22.64
0.301	0.699	26.0	28.92	28.96
0.100	0.900	40.0	38.69	38.72
0.000	1.000	46.0	-	-
A.A.D.		-	0.98	0.97

Table 3. The experimental and the calculated flash points for the n-octane(1)+n-dodecane(2) system

Mole Fractions		Flash points (°C)		
x1	x2	Exp.	Raoult's law	UNIFAC
1.000	0.000	13.0	-	-
0.899	0.101	15.0	14.69	14.69
0.700	0.300	19.0	18.76	18.77
0.500	0.500	24.0	24.42	24.45
0.300	0.700	34.0	33.41	33.46
0.100	0.900	54.0	53.17	53.25
0.000	1.000	83.0	-	-
A.A.D.		-	0.48	0.46

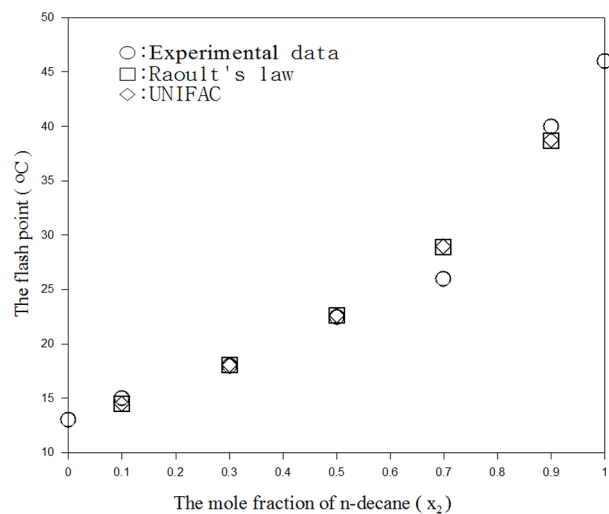


Fig. 1. The comparison of calculated flash points with experimental flash points for the n-octane(1)+n-decane(2) system

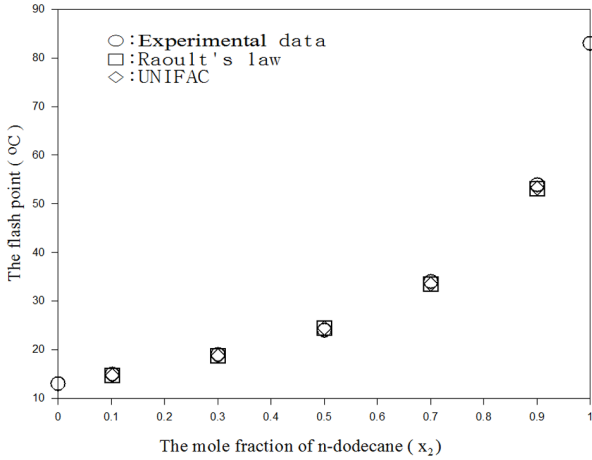


Fig. 2. The comparison of calculated flash points with experimental flash points for the n-octane(1)+n-dodecane(2) system

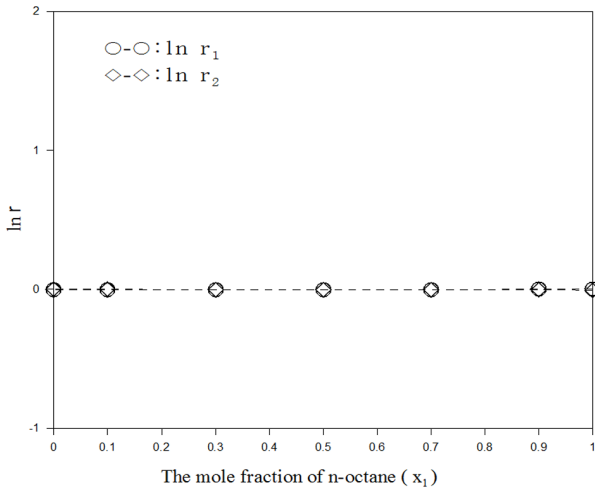


Fig. 3. Activity coefficient-liquid mole fraction diagram for the n-octane(1)+n-decane(2) system

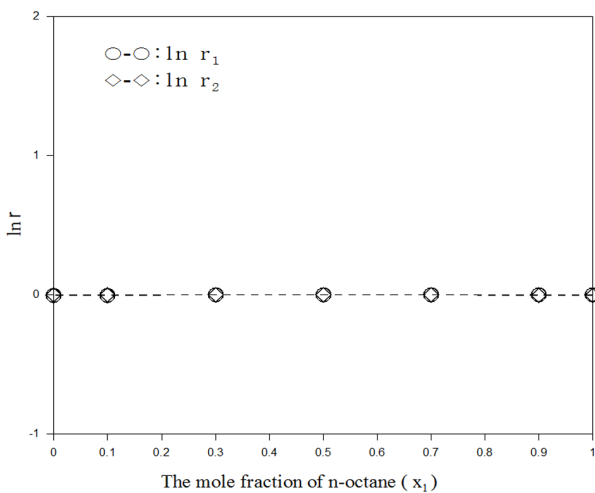


Fig. 4. Activity coefficient-liquid mole fraction diagram for the n-octane(1)+n-dodecane(2) system

절대평균오차 값을 통해서 Raoult의 법칙을 이용한 계산치가 측정치를 잘 모사할 수 있음을 확인하였다.

Fig. 3과 4는 n-octane+n-decane 계와 n-octane+n-dodecane 계의 액상 몰분율과 활동도계수 간의 관계를 나타낸 그림이다. 활동도계수는 UNIFAC 식에 의해 계산하였다.

그림에서 알 수 있듯이, “ $\ln \gamma$ ” 값은 거의 “0”에 가깝다. 즉 활동도계수(γ) 값이 거의 “1”에 가깝다. 이는 본 연구의 이성분계 혼합물이 이상 용액에 가깝다는 의미이다. 이는 액상을 이상 용액으로 가정한 Raoult의 법칙에 의한 계산치가 측정치에 가까운 근본적인 원인이다.

기존의 Liaw의 모델¹⁰에서 식 (16)을 만족하는 온도의 계산은, 문헌을 통해 활동도계수 식의 이성분계 파라미터를 얻었을 때만 가능하였다. 한편 본 연구에서 제시한 UNIFAC 식에 의거한 계산 방법은 이성분계 파라미터의 문헌 자료가 없는 경우에도 인화점을 계산할 수 있다는 장점이 있다. 또한 Raoult의 법칙에 의한 계산 방법은 이상 용액에만 한정하여 적용이 가능하지만, UNIFAC 식에 의한 방법은 이상 용액과 더불어 비이상 용액에도 적용이 가능한 계산 방법이다. 따라서 본 연구에서 제시한 방법을 이성분계 액체 혼합물의 인화점 예측에 활용되기를 기대한다.

5. 결론

n-Octane+n-decane 계와 n-octane+n-dodecane 계의 인화점을 Seta-flash 밀폐식 장치를 사용하여 측정하였다.

그룹기여 모델인 UNIFAC 식에 의거한 방법으로 인화점을 계산하였고 측정치와 비교하였다. 절대평균오차 값을 비교한 결과, 제시된 계산 방법이 인화점을 잘 예측함을 확인하였다.

또한 Raoult의 법칙에 의한 방법으로 인화점을 계산하였다. 이 방법 역시 측정치와 거의 일치하였다. 이는 본 실험 시스템이 이상 용액에 가까운 액체 혼합물이기 때문이다.

여기서 제시된 UNIFAC 식에 의한 방법은 활동도계수 식의 이성분계 파라미터가 없는 경우에도 인화점을 예측할 수 있으며, 이상 용액과 더불어 비이상 용액에도 적용이 가능한 인화점 계산 방법이다. 따라서 본 연구에서 제시한 방법을 가연성 이성분계 액체 혼합물의 인화점 예측에 활용하기를 기대한다.

감사의 글: 이 논문은 2014학년도 세명대학교 교내 학술연구비 지원에 의한 연구임.

References

- 1) D. A. Crowl and J. F. Louver, "Chemical Process Safety Fundamentals with Applications", Prentice-Hall, 1990.
- 2) L. Y. Phoon, A. A. Mustafa, H. Hashim and R. Mat, "A Review of Flash Point Prediction Models for Flammable Liquid Mixtures", *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 53, pp. 12523-12565, 2014.
- 3) T. Khalili and A. Z. Moghaddam, "Measurement and Calculation of Flash Point of Binary Aqueous-Organic and Organic-Organic Solutions", *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 312, pp. 101-105, 2006.
- 4) Regulations, "Regulation(EC) No. 1272/2008 of the European Parliament and of the Council, on Classification, Labeling and Packaging of Substances and Mixtures, Amending and Repealing Directives 67/548/EEC and 1999/45/EC, and Amending Regulation(EC) No. 1907/2006", *Official J. Eur. Union*, L353, 2008.
- 5) R. C. Lance, A. J. Barnard and J. E. Hooyman, "Measurement of Flash Points : Apparatus, Methodology, Applications", *J. of Hazardous Materials*, Vol. 3, pp. 107-119, 1979.
- 6) W. A. Affens and G. W. McLaren, "Flammability Properties of Hydrocarbon Solutions in Air", *J. of Chem. Ind. Eng. Chem.*, Vol. 17, No. 4, pp. 482-488, 1972.
- 7) H. L. Chatelier, "Estimation of Firedamp by Flammability Limits", *Ann. Minnes.*, Vol. 19, No. 8, pp. 388-395, 1891.
- 8) B. Hanley, "A Model for the Calculation and the Verification of Closed Cup Flash Points for Multicomponent Mixtures", *Process Saf. Prog.*, Vol. 17, No. 2, pp. 86-97, 1998.
- 9) B. E. Poling, J. M. Prausnitz, and J. P. O'Connell, "The Properties of Gases and Liquids", 5th Ed., McGraw-Hill, New York, 2001.
- 10) H. J. Liaw, Y. H. Lee, C. L. Tang, H. H. Hsu and J. H. Liu, "A Mathematical Model for Predicting the Flash Point of Binary Solutions", *J. of Loss Prevention in the Process Industries*, Vol. 15, pp. 429-438, 2002.
- 11) H. Renon and J. M. Prausnitz, "Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures", *AIChE Journal*, Vol. 14, pp. 135-144, 1968.
- 12) D. M. Ha, S.J. Lee and M. H. Back, "The Measurement and Estimation of the Lower Flash Points for the Flammable Binary Systems using Tag Open-Cup Tester", *Korean J. Chem. Eng.*, Vol. 24, No. 4, pp. 551-555, 2007.
- 13) G. M. Wilson, "Vapor Liquid Equilibrium. XI. A New Expression for the Excess Free Energy of Mixing", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 86, pp. 127-130, 1964.
- 14) S. Y. Kim and B. A. Lee, "A Prediction Model for Flash Point of Binary Liquid Mixtures", *J. of Loss Prevention in the Process Industries*, Vol. 23, No. 1, pp. 166-169, 2010.
- 15) S. Balasubramanian, R. K. Srivastava, S. Kumar, D. Sivakumar, M. Sampath, U. Kamachi, and R. Natarajan, "Flash Point Prediction for the Binary Mixture of Phosphatic Solvents and n-Dodecane from UNIFAC Group Contribution Model", *J. of Loss Prevention in the Process Industries*, Vol. 33, pp. 183-187, 2015.
- 16) S. Kumar and S.B. Koganti, "An Empirical Equation for Vapor Pressure of tri-n-Butyl Phosphate in the Temperature Range of 273.15 to 562.15 K", *Nucl. Technol.*, Vol. 126, pp. 237-239, 1999.
- 17) C. L. Yaws, *Chemical Properties Hand Book*, McGraw-Hill Education, 1999.
- 18) D. M. Ha and S. J. Lee, "The Flash Point Measurement for Binary Flammable Mixture", *KIGAS*, Vol. 18, No. 5, pp. 60-65, 2014.
- 19) In 2011 Annual Book of ASTM Standards ; ASTM International, "Standard Test Methods for Flash Point of Liquids by Small Scale Closed-Cup Apparatus(ASTM D3278)", West Conshohocken, PA, 2011.
- 20) A. Fredenslund, J. Gmehling and P. Rasmussen, Connell, "Vapor-Liquid Equilibria using UNIFAC", Elsevier, 1977.
- 21) J. Gmehling, U. Onken and W. Arlt, "Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection", Vol. 1, Part1-Part7, DECHEMA, 1980.
- 22) J. Lim, S. Jang, H. Kim, H. K. Cho, and M. S. Shin, "Solubility of Triclocarban in Pure Alkanols at Different Temperatures", *Korean J. Chem. Eng.*, Vol. 30, No. 1, pp. 181-186, 2013.