



n-Pentanol과 Ethylbenzene 혼합물의 최소자연발화온도의 예측

†하동명

세명대학교 보건안전공학과
(2012년 3월 28일 접수, 2012년 4월 26일 수정, 2012년 4월 26일 채택)

Prediction of Minimum Spontaneous Ignition Temperature(MSIT) of the Mixture of n-Pentanol and Ethylbenzene

† Dong-Myeong Ha

Dept. of Occupational Health and Safety Engineering., Semyung University, Jecheon
390-711, Korea

(Received March 28, 2011; Revised April 26, 2012; Accepted April 26, 2012)

요약

최소자연발화온도는 가연성혼합물이 화염이나 스파크 없이 주위로부터 충분한 열에너지를 받아서 스스로 발화하는 최저온도를 말한다. 본 연구에서는 ASTM E659 장치를 이용하여 가연성 혼합물인 n-Pentanol+Ethylbenzene 계를 구성하는 순수물질과 혼합물의 최소자연발화온도를 측정하였다. Pentanol과 Ethylbenzene의 측정된 최소자연발화온도는 각각 285°C, 475°C 였다. 그리고 n-Pentanol+Ethylbenzene 계의 예측된 최소자연발화온도는 실험값과 적은 평균절대오차에서 일치하였다.

Abstract - The MSITs(Minimum Spontaneous Ignition Temperatures) or AITs(Autoignition Temperatures) describe the minimum temperature to which a substance must be heated, without the application of a flame or spark, which will cause that substance to ignite. This study measured the MSITs(Minimum Spontaneous Ignition Temperatures) of n-pentanol+ethylbenzene system by using ASTM E659 apparatus. The MSITs of pure n-pentanol and ethylbenzene were 285°C and 475°C, respectively. The experimental MSITs of n-pentanol+ethylbenzene system were in good agreement with the MSIT calculated by the proposed equations with a few A.A.D.(average absolute deviation).

Key words : MSIT(Minimum Spontaneous Ignition Temperatures), ignition delay time, ASTM E659, n-pentanol+ethylbenzene system

1. 서론

최근 새로운 공정과 물질의 개발로 인해 발생될 수 있는 화재 및 폭발을 방호하기 위해 공정에서 취급하는 가연성물질의 연소특성치인 최소자연발화온도, 인화점, 폭발한계 등에 관한 연구는 활발히 진행되고 있다.

자연발화(Autoignition 혹은 Spontaneous Ignition)는 가연성혼합기체에 열 등의 형태로 에너지가 주어졌을 때 스스로 타기 시작하는 산화 현상으로, 주위로부터 충분한 에너지를 받아서 스스로 점화할 수 있는 최저온도를 최소자연발화온도(Minimum Spontaneous Ignition Temperatures(MSIT) or Autoignition Temperatures(AIT))라고 한다. 최소자연발화온도는 실험 개시온도, 증기 농도, 용기 크기, 산소농도, 계의 압력, 촉매, 발화지연시간 등 다양한 실험

†주저자:hadm@semyung.ac.kr

조건에 영향을 받는다. 따라서 다양한 조건 및 장치에 의해서 실험이 이루어지므로 문헌들마다 다른 값들이 제시되고 있다. 최소자연발화온도는 공정 상에서 발생할 수 있는 화재 및 폭발 위험성에 대해 공정 조업에 있어 과잉 온도, 고온 표면에 연소물질의 누출, 저장 및 수송에서 과잉 온도 등의 형태에서 공정 상에서 도움을 줄 수 있다[1].

자연발화온도 연구는 대부분 순수물질에 국한되어 연구되어지고 있으나, 공정에서는 순수물질 보다 혼합물 취급하는 경우가 많다. 그러나 혼합물의 자연발화온도 연구는 거의 없는 편이다. 이 가운데 혼합물의 자연발화온도 연구로 Zabetakis 등[2]은 n-Heptane과 iso-Octane 계의 자연발화온도에 대한 실험적 연구를 하였으며, Cullis 등[3]은 n-Decane과 2,2,5-Trime-thyllhexane 계의 자연발화온도를 연구하였다. 최근 Ha 등[4, 5]은 o-Xylene과 n-Pentanol 계 그리고 Dichlorosilane와 Trichlorosilane 계의 자연발화온도에 대해 실험적 연구를 하였다.

지금까지 자연발화온도에 관한 문헌들을 고찰하면, 동일 물질인데도 불구하고 문헌들에 따라 다른 최소발화온도 값들이 제시되고 있다. 문헌에 제시된 자료들은 과거 표준 장치 및 자체 제작된 장치 등을 사용해서 얻은 결과가 대부분이다. 따라서 최근에 널리 사용되고 있는 표준 장치를 이용하여 결과를 얻을 필요가 있다.

본 연구에서는 ASTM E659(Standard Test Method for Autoigniton Temperature of Liquid Chemicals) 장치[5]를 사용하여 n-Pentanol과 Ethylbenzene의 혼합물에 대한 자연발화온도를 측정하였다. 이성분계를 구성하는 순수성분인 n-Pentanol과 Ethylbenzene의 발화온도와 발화지연시간 관계를 측정하였으며, 측정된 최소자연발화온도를 문헌값과 비교 고찰하였다. 또한 n-Pentanol과 Ethylbenzene 계에 대해 최소자연발화온도를 측정하였으며, 혼합조성에 의한 최소발화온도의 예측 모델을 제시하였다. 제시된 실험자료 및 예측 모델은 이들 물질을 생산, 취급, 처리, 수송 및 저장하는 공정에서 화재 및 폭발을 방호하는 자료로 제공하고자 한다.

II. 열발화 이론에 의한 자연발화온도와 발화지연시간

열발화 이론은 여러 문헌에 소개 되었을 뿐만 아니라, 과거 순수물질 연구를 위해 열발화 이론을 전개한 바 있어 여기서는 간략히 소개한다[5, 6].

일반적으로 열발화 이론은 두 가지로 대별할 수 있다. 하나는 발열과 방열의 관계를 정상상태라고

가정한 Semenov이론이며, 다른 하나는 Semenov이론을 보강한 것으로 실제 착화는 계의 한 장소에서 온도 상승이 계속되면 이곳에 착화가 일어난다. 이러한 경우를 고려하여 비교적 간단한 모델을 이용하여 착화를 설명한 Frank-Kamenetskii 이론이다.

본 연구에서는 Frank-Kamenetskii 이론을 도입하여 발화온도와 발화지연시간의 관계를 나타내고자 한다. 계의 크기 변화와 발화임계 주위 온도 관계로 Frank-Kamenetskii 매개변수로 다음과 같이 사용한다.

$$\delta = \frac{x_0^2 Q \rho A \exp\left(-\frac{E}{RT_a}\right)}{k \frac{RT_a^2}{E}} \quad (1)$$

여기서 δ 는 주위온도에서의 열방출률, 반응물의 차원, r_0 는 반응물의 차원, T_0 는 주위온도, Q 는 연소열, ρ 는 밀도, E 는 활성화에너지, k 는 열전도도, R 는 기체상수이다.

활성화에너지(E)는 식(1)으로부터 얻는 대수온도 곡선 대 $1/T_a$ 의 관계를 이용하여 결정할 수 있다.

발화지연은 열 생성(발열화학반응)과 열 손실(액체연료의 증발사이의 경쟁 때문에 절연물질 안에 가연성의 증발유체에 대한 특성을 갖는다. 따라서 Frank-Kamenetskii 방법과 비슷하게 발화지연시간과 초기온도 역수의 배치(Plot)를 이용한다. 일반적으로 실험에서 측정된 값들을 발화지연시간 $\ln t$ 와 초기온도의 관계로 표현할 수 있다.

$$\ln t \approx a \left(\frac{1000}{TG_0} \right) + b \quad (2)$$

따라서 식 (2)에서 발화지연시간과 초기발화온도의 관계에서 선형최소자승법 사용하여 매개변수인 a 와 b 를 결정할 수 있다.

III. 자연발화온도 실험

3.1. 실험장치 및 방법(ASTM E659)

본 실험에서는 액체 화학물질의 자연발화점 측정 장치로서 ASTM E659 장치를 사용하여 자연발화온도를 측정하였으며, 장치는 크게 Furnace, Temperature Controller, Thermocouple, Test Flask, Hypodermic Syringe, Mirror, Air Gun으로 구성되어 있다[5].

실험 방법은 기준 온도를 설정하고, 실험 장치를 가열하고, 설정온도에 도달하면 플라스크 내부에 주

사기로 시료를 0.1 ml를 넣는다. 그리고 10분 동안 관찰 후 발화가 일어나지 않으면 다시 온도를 설정한 다음 10분 전까지 발화가 일어나면 설정 온도 보다 30℃ 낮게 설정하고 2~5℃ 혹은 10℃씩 증가시키면서 측정하며, 발화가 일어났을 때 시간과 온도를 기록한다.

3.2. 실험재료

본 실험에 사용된 n-Pentanol은 Acros(USA) 그리고 Ethylbenzene은 Samchun(Korea)사 로서 순도는 각각 99%의 시약을 사용하였으며, 혼합물의 발화온도 측정은 순수물질을 각각 다른 몰비(Mole Fraction)로 혼합하여 실험하였다.

IV. 발화지연시간 및 혼합물의 최소자연발화 온도의 예측 모델

4.1. 다중회귀분석

변수와 응답의 관계를 보다 정량적으로 표시하기 위해서 사용된 방법으로 수학과 통계학적인 방식에 의거해서 종속변수와 독립변수의 관계식을 구하는 방법을 다중회귀(Multiple Regression)이라 하며, 이 방법론은 그 동안 최적조건(Optimum Condition)을 구하는 방식 또는 최적화(Optimization)에 널리 이용되어 왔다. 변수들에 의한 화재 위험성 평가를 위한 상관관계를 나타낼 수 있는 추산 모델을 가운데 최적화된 예측 모델을 찾기 위해 다중회귀분석(Multiple Regression Analysis)을 이용하였다[7].

제시한 모델을 다항식의 일반적인 형태로 표시하면 다음과 같다.

$$Y = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 + \dots + px^p + \dots \quad (3)$$

여기서 각 매개변수 a, b, c, d, e, \dots 을 추산하기 위해 최소화 방법을 이용하였다. 이 방법은 S.S.D.(Sum of Square of Deviation)을 구하기 위해 각 매개변수를 편미분하여 이를 영(Zero)으로 두어서 얻어지는 정규식(Normal Equation)의 해를 구하면 된다.

4.2. 자연발화온도에 의한 발화지연시간 예측 모델

대부분의 가연성 물질에 대해 자연발화온도와 발화지연시간 사이에서의 관계는 다음과 같은 선형 식을 사용하여 AIT에 의한 발화지연시간과의 관계를 고찰하였다[4, 8].

$$\log\tau = \left(\frac{A}{T}\right) + B \quad (4)$$

여기서 τ 는 발화지연시간, T 는 자연발화온도[K], 그리고 A 와 B 는 상수이다.

본 연구에서는 실험에서 얻은 자연발화온도와 발화지연시간의 관계를 식 (5)를 사용하여 실험값과 예측값을 비교하였다.

$$\ln\tau = A + \left(\frac{E}{RT}\right) = A + B\left(\frac{1}{T}\right) \quad (5)$$

식 (4)를 이용하면 활성화에너지(E)도 계산이 가능하다.

실험에서 얻어진 자료를 회귀분석하여 최적화된 A 와 B 의 상수를 얻고, 식 (4)와 Semenov[9]가 제시한 식 (6)을 이용하면 활성화에너지(E, Activation Energy)를 얻을 수 있다.

$$\log\tau = \frac{52.55E}{T} + B \quad (6)$$

여기서 E 는 활성화에너지(kJ/mol), B 는 상수이다.

4.3. 혼합물의 최소자연발화온도 예측 모델

본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과, Ethylbenzene의 농도 증가에 따라 최소자연발화온도가 증가하는 경향을 보이고 있다. 따라서 조성에 의한 최소자연발화온도 예측 모델을 제시할 수 있다고 판단되어 다음과 같은 모델을 제시하여 최적화된 예측 모델을 찾고자 한다.

$$T_{AIT, MIX} = a + bX_1 \quad (7)$$

$$T_{AIT, MIX} = a + bX_1 + cX_1^2 \text{ (or } T_{AIT, MIX} = aX_1 + bX_2 + cX_1X_2) \quad (8)$$

$$T_{AIT, MIX} = a + bX_1 + cX_1^2 + dX_1^3 \quad (9)$$

4.4. 문헌값과 추산값의 비교 방법

측정값과 예측값의 차이의 정도를 알기 위해서 A.A.D.(Average Absolute Deviation)를 사용하였다 [4].

$$A.A.D. = \sum \frac{|\tau_{est.} - \tau_{exp.}|}{N} \quad (10)$$

$$A.A.D. = \sum \frac{|AIT_{est.} - AIT_{exp.}|}{N} \quad (11)$$

여기서 $\tau_{est.}$ 는 예측된 발화지연시간, $\tau_{exp.}$ 는 실험에서 얻은 발화지연시간, $AIT_{est.}$ 는 예측된 자연발화온도, $AIT_{exp.}$ 는 실험에서 얻은 자연발화온도, 그리고 N 은 자료수이다.

또한 측정값과 예측값의 통계 분석을 위해 표준편차, 표본 결정계수를 사용하였다[7].

$$S = \sqrt{\frac{\sum (Y_i - y_i)^2}{n-1}} \quad (12)$$

$$r^2 = \frac{SSR}{SST} \quad (13)$$

여기서 S 는 결정값의 표준오차, r^2 는 표본 결정계수, SSR 은 회귀에 의한 제곱합(sum of squares due to regression), SST 는 총 제곱합(total sum of squares)이다.

v. 결과 및 고찰

5.1. 순수물질의 최소자연발화온도 고찰

5.1.1. n-Pentanol의 자연발화온도 고찰

n-Pentanol의 최소자연발화온도를 찾기 위해 자연발화온도와 발화지연시간의 관계를 실험하여 그 결과를 Table 1에 나타내었다. 그러나 본 실험에서는 280℃에서는 발화가 일어나지 않았으며, 30℃ 상승시켜 310℃에서 측정한 결과 33.77sec에서 발화가 되었다. 온도를 1℃~2℃ 계속 낮추어서 측정한 결과 285℃에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있었으며, 그때 발화시간은 187.95sec였다. 발화시작 온도를 기점으로 온도를 5℃ 혹은 10℃ 상승시켜 발화지연시간을 측정한 결과 390℃에서 1.50sec에 발화하였다.

n-Pentanol의 최소자연발화점은 모든 문헌이 300℃로 제시하고 있으나, 본 실험 결과 285℃에서 발화하는 것을 알 수 있음에 따라 안전을 위해서는 자료 제시를 고려해야 할 것으로 본다.

제시한 실험 자료를 Arrhenius 형태인 식 (5)를 이용한 예측식은 다음과 같다.

$$\ln \tau = -25.38 + 16938.5 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (14)$$

활성화에너지를 계산하기 위해서 $\log \tau$ 와 $(1/T)$ 의 관계로 나타내면 다음과 같다.

Table 1. Comparison of experimental and calculated ignition delay time by MSIT for n-pentanol

No.	T[k]	$\tau_{exp.}$ [s]	$\ln \tau_{exp.}$	$\tau_{pred.}$ (Eqn. 14)
1	558.15	187.95	5.23618	144.27
2	563.15	118.85	4.77786	110.19
3	568.15	106.63	4.66936	84.56
4	573.15	83.00	4.41884	65.20
5	583.15	33.75	3.51898	39.28
6	593.15	16.32	2.79239	24.07
7	603.15	9.41	2.24177	14.99
8	613.15	6.85	1.92425	9.48
9	623.15	5.19	1.64673	6.09
10	633.15	3.90	1.36098	3.96
11	643.15	3.28	1.18784	2.61
12	653.15	2.19	0.78390	1.75
13	663.15	1.50	0.40547	1.18
A.A.D.	-	-	-	8.93

$$\log \tau = -11.02 + 7356.3 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (15)$$

Semenov가 제시한 식 (6)을 식 (15)에 대입한 결과 활성화에너지(E)는 약 140.0 kJ/mole이 된다.

Table 1은 실험값과 식 (14)에 의한 예측된 발화지연시간을 나타내었다. 실험값과 예측값의 평균오차는 8.93sec, 결정계수(r^2)는 0.93로서 예측값과 실험값의 모사성은 크다고 판단된다.

5.1.2. Ethylbenzene의 자연발화온도 고찰

Ethylbenzene의 최소자연발화온도를 찾기 위해 자연발화온도와 발화지연시간의 관계를 실험하여 그 결과를 Table 2에 나타내었다. 그러나 본 실험에서는 440℃에서는 발화가 일어나지 않았으며, 30℃ 상승시킨 470℃에서도 발화가 발생되지 않았다. 다시 10℃ 상승시켜 480℃에서 측정한 결과 10.19sec에서 발화되었다. 온도를 1℃~2℃ 낮추어 측정한 결과 475℃, 10.88sec에서 최소자연발화온도를 측정하였다. 475℃를 기점으로 온도를 5℃ 혹은 10℃ 상승시켜 발화지연시간을 측정한 결과 540℃, 1.77sec에

서 발화하였다.

제시한 실험자료를 Arrhenius 형태인 식 (5)를 이용한 예측식은 다음과 같다.

$$\ln \tau = -21.30 + 17692.14 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (16)$$

활성화에너지를 계산하기 위해서 $\log \tau$ 와 $(1/T)$ 의 관계로 나타내면 다음과 같다.

$$\log \tau = -9.13 + 7683.6 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (17)$$

Semenov가 제시한 식 (6)을 식 (17)에 대입한 결과 활성화에너지(E)는 약 146.2 kJ/mole이 된다.

Table 2은 실험값과 식 (16)에 의한 예측된 발화 지연시간을 나타내었다. 실험값과 예측값의 평균오차는 0.41sec, 결정계수(r^2)는 0.97로서 예측값과 실험값의 거의 일치하고 있다.

Table 2. Comparison of experimental and calculated ignition delay time by the MSIT for ethylbenzene

No.	T[K]	$\tau_{exp.}$ [s]	$\ln \tau_{exp.}$	$\tau_{est.}$ (Eqn.16)
1	748.15	10.88	2.38692	10.43
2	753.15	10.19	2.32140	8.92
3	763.15	5.99	1.79009	6.55
4	773.15	4.48	1.49962	4.86
5	783.15	3.32	1.19996	3.63
6	793.15	2.63	0.96698	2.73
7	803.15	2.07	0.72754	2.07
8	813.15	1.77	0.57097	1.58
A.A.D.	-	-	-	0.41

Table 3. Comparison of MSITs between experimental and several reported data for pure substances

Compound	MSITs(°C)									
	This study	NFPA [10]	SFPE [11]	Sigma [12]	SAX [13]	Babrauskas [1]	Hilado [14]	Jackson [15]	Scott [16]	Zabetakis [2]
n-Pentanol	285	300	300	300	-	427	300	-	427	300
Ethylbenzene	475	432	430	432	432	477	432	460	477	432

5.1.3. 순수물질의 자연발화온도 비교

본 연구에서는 n-Pentanol+Ethylbenzene 계를 구성하는 순수물질에 대하여 최소자연발화온도를 측정하였으며, 측정된 실험값을 기존 문헌값들과 비교하여 Table 3에 나타내었다.

n-Pentanol의 경우 NFPA 등 대부분의 문헌에서 300°C 제시되고 있으며, Babrauskas와 Scott 문헌에서는 427°C로서 문헌에 따라 약 130°C의 차이를 보이고 있다. 그러나 본 연구에서의 측정값은 기존의 문헌값 보다 약 15°C 낮은 285°C에서 측정되었다. 따라서 본 실험에서 제시한 285°C는 공정 안전을 위해 새로운 자료로 고려할 수 있다. Ethylbenzene의 경우 문헌에 따라 430°C~477°C로서 약 50°C의 차이를 보이고 있다. 본 연구에서 측정값은 475°C로서 Jackson과 Scott의 문헌값과 비슷한 결과를 보였다.

5.2. n-Pentanol+Ethylbenzene 혼합물의 최소자연 발화온도 고찰

5.2.1. n-Pentanol(0.1)+Ethylbenzene(0.9) 계의 자연 발화온도

본 실험에서는 Ethylbenzene의 순수물질 자연발화온도를 고려하여 470°C에서 실험하여 5.87sec에 발화가 됨을 확인하였다. 온도를 50°C 내린 420°C에서 실험을 했으나 발화가 일어나지 않았다. 10°C 상승 시킨 430°C에서는, 10.27sec에 발화가 되었으며, 최소자연발화온도를 찾기 위해 5°C 내린 425°C에서는, 20.81sec에 결과로 발화되었다. 423°C에는 발화가 되지 않았다. 최소자연발화온도인 425°C를 근거로 하여 5°C 혹은 10°C씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 500°C에서 4.02sec, 520°C에서 2.47sec 그리고 530°C에서 1.93sec에 발화하였다.

5.2.2. n-Pentanol(0.3)+Ethylbenzene(0.7)계의 자연 발화온도

본 실험에서는 340°C에서는 발화가 일어나지 않았으며, 350°C, 10.92sec에서 발화가 되었다. 5°C 내린 345°C에서 실험을 했으나 발화가 되지 않아 2°C 상승 시킨 347°C에서 실험한 결과 11.67sec에 최소자연발화

온도를 찾아냈다. 최소자연발화온도를 기점으로 온도를 5°C 혹은 10°C 상승시켜 발화지연시간을 측정 한 결과 480°C에서 2.48sec, 490°C에서 2.44sec 그리고 500°C에서 1.99sec에 발화하였다.

5.2.3. n-Pentanol(0.5)+Ethylbenzene(0.5)계의 자연 발화온도

본 실험에서는 310°C에서 발화가 일어나지 않아서 10°C상승시킨 320°C에 실험을 진행하여 15.82sec에 발화점을 찾아냈다. 최소자연발화온도를 찾기 위해 5°C내린 315°C에는 발화가 일어나지 않아 다시 2°C상승시킨 317°C에서 실험한 결과 20.19sec에서 최소자연발화온도를 찾았다. 최소자연발화온도를 기점으로 온도를 5°C 혹은 10°C 상승시켜 발화지연시간을 측정한 결과 350°C에서 6.59sec, 390°C에서 3.30sec, 450°C에서 2.53sec, 그리고 460°C에서 1.92sec에 발화하였다.

5.2.4. n-Pentanol(0.7)+Ethylbenzene (0.3)계의 자연 발화온도

본 실험에서는 300°C에서 발화가 일어나지 않아서 10°C상승시킨 310°C에 실험을 진행하여 24.13sec에 발화점을 찾아냈다. 최소자연발화온도를 찾기 위해 5°C 내린 305°C에 실험한 결과 34.27sec 발화가 되어 다시 2°C내린 303°C에 실험하여, 40.55sec에서 최소자연발화온도를 찾았다. 최소자연발화온도를 기점으로 온도를 5°C 혹은 10°C 상승시켜 발화지연시간을 측정한 결과 370°C에서 3.46sec, 390°C에서 3.09sec 그리고 400°C에서 3.01sec에 발화하였다.

5.2.5. n-Pentanol+Ethylbenzene 계의 최소자연 발화온도의 예측

본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과 조성 변화에 따라 최소자연발화온도가 증가하는 경향을 보이고 있으므로 앞에서 제시한 식 (8)과 (9)를 이용하여 최적화 된 추산 모델을 제시하였다.

$$T_{AIT, MIX} = 290.5 - 78.2X_1 + 255.6X_1^2 \quad (18)$$

$$T_{AIT, MIX} = 285.1 + 108.3X_1 - 269.3X_1^2 + 352.8X_1^3 \quad (19)$$

n-Pentanol+Ethylbenzene 계에서 각각의 혼합조성에서 얻은 최소자연발화온도 실험값을 예측식에 의한 예측값과 비교하여 Table 4와 Figure 1에 나타내었다. 본 연구에서 제시한 식 (14)에 의한 예측값은 실험값의 결정계수값은 0.99로서 거의 일치하고 있다. 따라서 본 연구에서 제시한 식을 이용하여 다른

Table 4. The experimental and the predicted MSITs for n-pentanol+ethylbenzene system

Mole fractions		MSITs(°C)		
X ₁	X ₂	Exp.	Eqn.(18)	Eqn.(19)
0	1	285	290	285
0.3	0.7	303	290	303
0.5	0.5	317	315	316
0.7	0.3	347	361	350
0.9	0.1	425	427	422
1	0	475	468	477
A.A.D.		-	7.23	1.56

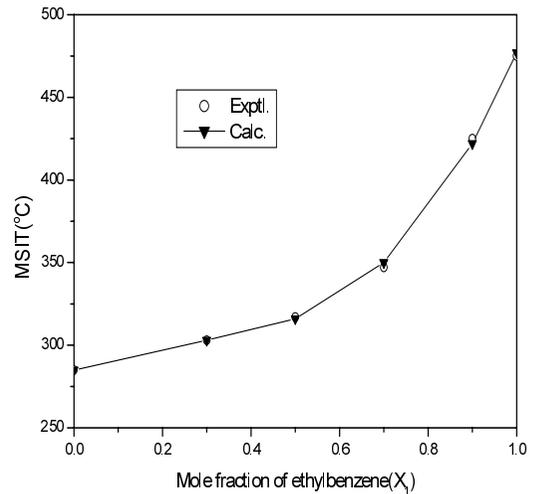


Fig. 1. Comparison of MSITs prediction curves with experimental data for n-pentanol(X₁)+ethylbenzene(X₂) system.

조성에서의 최소자연발화온도 예측이 가능해 졌다.

VI. 결 론

본 연구는 최근에 이용되고 있는 자연발화온도 측정 장치(ASTM E659)를 사용하여 2성분계 혼합물의 자연발화온도를 측정하였다. 이성분계를 구성하는 순수성분인 n-Pentanol과 Ethylbenzene의 자연발화온도를 측정하여 문헌값들과 비교 고찰하였다. 또한 n-Pentanol+Ethylbenzene 계에 대해 최소자연

발화온도를 측정하였고, 조성 변화에 따라 최소자연 발화온도를 예측하는 모델을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 순수물질의 최소자연발화온도를 측정한 결과 n-Pentanol은 285°C, Ethylbenzene은 475°C 로 나타났다. 특히 n-Pentanol의 측정값은 기존의 문헌값들 보다 약 15°C정도 낮게 측정되었으므로 안전을 위해서는 기존 자료 보다는 본 연구에서 제시한 자료를 사용하는 것이 타당하다.

2) n-Pentanol과 Ethylbenzene의 활성화에너지(E)는 각각 140 kJ/mol과 146.2 kJ/mol로 계산되었다.

3) n-Pentanol+Ethylbenzene 계에 대해 조성 변화에 의한 최소자연발화온도를 측정한 결과, n-Pentanol(0.1)+Ethylbenzene(0.9)에서는 425°C, n-Pentanol(0.3)+Ethylbenzene(0.7)에서는 347°C, n-Pentanol(0.5)+Ethylbenzene(0.5)에서는 317°C, n-Pentanol(0.7)+Ethylbenzene(0.3)에서는 303°C으로 측정되었다.

4) n-Pentanol+Ethylbenzene 계의 조성 변화에 의한 최소자연발화온도 예측 모델은 다음과 같다.

$$T_{AIT,MIX} = 285.1 + 108.3X_1 - 269.3X_1^2 + 352.8X_1^3$$

참고문헌

- [1] Babrauskas, V., Ignition Handbook, Fire Science Publishers, SFPE, (2003)
- [2] Zabetakis, M.G., A.L. Furno and G.W. Jones, "Minimum Spontaneous Ignition Temperature of Combustibles in Air", Industrial and Engineering Chemistry, 46(10), 2173-2178, (1954)
- [3] Cullis, C.F. and C.D. Foster, "Studies of the Spontaneous Ignition in the Air of Binary Hydrocarbon Mixtures", Combustion and Flame, 23, 347-356, (1974)
- [4] Ha, D.M. and S.J. Lee, "Measurement of Autoignition Temperature of o-Xylene+n-Pentanol System", J. of the Korean Society of Safety, 21(4), 66-72, (2006)
- [5] Ha, D.M., "Characteristics of Auto-ignition for Trichlorosilane and Dichlorosilane-Trichlorosilane Mixtures", J. of the Korean Institute of Gas, 14(4), 24-30, (2010)
- [6] Goldfrab, I. and A. Zinoviev, "A Study of Delay Spontaneous Insulation Fires", Physics Letter, 311, 491-500, (2003)
- [7] Box, G.E.P. and N.R. Draper, Empirical Model-Building and Response Surface, John Wiley and Sons, Inc., (1987)
- [8] Drysdale, D., An Introduction to Fire Dynamics, 2nd ed., Jone Wiley & Sons, (1998)
- [9] Semenov, N.N., Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity, Vol. 2, Princeton University Press, Princeton, N.J.,(1959)
- [10] NFPA, Fire Hazard Properties of Flammable Liquid, Gases, and Volatile Solids, NFPA 325M, NFPA, (1991)
- [11] Kanury, A.M., SFPE Handbook of Fire Protection Engineering ; Ignition of Liquid Fuels, 2nd ed., SFPE, (1995)
- [12] Lenga, R.E. and K.L. Votoupal, The Sigma Aldrich Library of Regulatory and Safety Data, Volume I~III, Sigma Chemical Company and Aldrich Chemical Company Inc., (1993)
- [13] Lewis, R.J., SAX's Dangerous Properties of Industrial Materials, 11th ed., John Wiley & Son, Inc., N.J., (2004)
- [14] Hilado, C.J. and S.W. Clark, "Autoignition Temperature of Organic Chemicals", Chemical Engineering, 4, 75-80, (1972)
- [15] Jackson, J.L., "Spontaneous Ignition Temperature -Commercial Fluids and Pure Hydrocarbons-", Industrial and Engineering Chemistry, 43(12), 2869-2870, (1951)
- [16] Scott, G.S., G.W. Jones and F.E. Scott, "Determination of Ignition Temperature of Combustible Liquids and Gases", Analytical Chemistry, 20(3), 238-241, (1948)