

n-Decane과 Acetic acid 혼합물의 최소자연발화온도 거동

하동명

세명대학교 보건안전공학과
(2013. 1. 21. 접수 / 2013. 4. 5. 채택)

The Minimum Autoignition Temperature Behavior(MAITB) of n-Decane and Acetic acid Mixture

Dong-Myeong Ha

Department of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University
(Received January 21, 2013 / Accepted April 5, 2013)

Abstract : The autoignition temperature(AIT) is important index for the safe handling of flammable liquids which constitute the solvent mixtures. This study measured the AITs and ignition delay time for n-Decane and Acetic acid system by using ASTM E659 apparatus. The AITs of n-Decane and Acetic acid which constituted binary system were 212°C and 512°C, respectively. The experimental AITs of n-Decane and Acetic acid system were a good agreement with the calculated AITs by the proposed equations with a few A.A.D.(average absolute deviation). And n-Decane and Acetic acid system was shown the minimum autoignition temperature behavior(MAITB).

Key Words : AIT(autoignition temperature), Ignition delay time(time lag), ASTM E659, n-Decane and Acetic acid system

1. 서론

구미공단 T화학 폭발사고, 청구 L화학의 폭발사고, 인천청라지구 주물 공장화재와 화성 페인트 공장의 화재 사고 등을 살펴보면, 취급물질의 부주의로 인한 재해로서 인재라고 볼 수 있다. 특히 T화학 폭발사고는 실험 중 헵탄이 폭발한 사고로서, 공정에서 화재 및 폭발을 방지하기 위해서 기술자들은 물질의 연소특성, 공정의 특성 그리고 재해를 줄이기 위한 절차를 반드시 알아야 한다. 공정의 안전관리를 어렵게 하는 이유는 취급하는 물질의 화재 및 폭발특성치(연소특성치)에 관한 자료가 부족하거나, 정확하지 않은 연소특성치를 사용하기 때문이다.

가연성물질의 연소현상인 자연발화(Autoignition 혹은 Spontaneous Ignition)는 가연성혼합기체에 열 등의 형태로 에너지가 주어졌을 때 스스로 타기 시작하는 산화현상으로, 주위로부터 충분한 에너지를 받아서 스스로 점화할 수 있는 최저온도를 최소자연발화온도(AIT: Autoignition Temperature)라고 한다. 최소자연발화온도는 개시온도, 증기농도, 용기 크기, 산소농도, 계의 압력, 촉매, 발화지연시간 등 다양한 실험 조건에 영향을 받는다¹⁾.

순수물질 보다 혼합물질의 자연발화온도 연구는 적은 편이다. 혼합물의 자연발화온도 연구를 살펴보면, 가연성혼합물인 n-Decane과 2,2,5-Trimethylhexane 혼합물의 자연발화온도를 측정하였고²⁾, 산업현장에서 널리 사용되고 있는 n-Decane과 sec-Butanol 계의 최소자연발화온도를 측정하였다³⁾.

순수물질의 최소자연발화온도를 문헌을 통해 고찰하면, 동일 물질인데도 불구하고 문헌에 따라 다른 최소자연발화온도가 제시되고 있다⁴⁾. 따라서 사업장에서 사고를 예방하기 위해서는 일반적이고 정확한 연소 특성 자료를 이용해야 한다. 그러나 문헌에 제시된 대부분의 자료들은 과거 표준 장치 및 자체 제작된 장치 등에 의해 측정된 값들이 대부분이다.

본 연구에서는 최근에 널리 사용되고 있는 ASTM E659 (Koehler)³⁾를 사용하여 n-Decane과 Acetic acid 계의 최소자연발화온도를 측정하였다. 이성분계의 최소자연발화온도 측정에 앞서 이를 구성하는 순수성분인 n-Decane과 Acetic acid의 자연발화온도와 발화지연시간 관계를 측정하였으며, 측정된 최소자연발화온도는 문헌값들과 비교 고찰하였다. 또한 n-Decane과 Acetic acid 계에 대해 최소자연발화온도와 발화지연시간을 측정하였고, 또한 혼합 조성 변화에 따른 최소자연발화온도를 예측할 수 있는 모델을 제시하였다. 제시된 실험자료 및 예측 모델은 이들 물질을 취급하는 공정에서 화재 및 폭발의 방호 자료로 제공하는데 목적이 있다.

2. 열발화 이론에 의한

자연발화온도와 발화지연시간의 관계

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

*Corresponding Author: Dong-Myeong Ha, TEL : +82-43-649-1321, E-mail : hadm@semyung.ac.kr
Department of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University, 65, Semyeong-ro, Jecheon-si, Chungbuk 390-711, Korea

nov이론이며, 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 이론이 Frank-Kamenetskii 이론이다^{3,5)}.

본 연구에서는 Frank-Kamenetskii 이론을 도입하여 발화 온도와 발화지연시간의 관계를 간략히 설명하고자 한다. 계의 크기 변화와 발화임계 주위 온도 관계로 Frank-Kamenetskii의 매개변수(δ)는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\delta = \frac{r_0^2 Q E \rho A \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right)}{k R T_0^2} \quad (1)$$

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

발화지연은 열 생성(발열화학반응)과 열 손실(액체연료의 증발)사이의 경쟁 때문에 절연물질 안에 가연성의 증발 유체에 대한 특성을 갖는다. 따라서 Frank-Kamenetskii 방법과 비슷하게 발화지연시간과 초기온도 역수를 이용한다.

이를 간략히 설명하면 다음과 같다. 일반적으로 실험에서 측정된 값들은 발화지연시간 $\ln t$ 와 초기온도의 관계로 표현할 수 있다. 즉, 온도가 높을수록 발화지연시간이 짧아진다는 것을 의미한다.

$$\ln t \approx a \left(\frac{1}{T_0} \right) + b \quad (2)$$

따라서 식 (2)에서 발화지연시간과 초기발화온도의 관계에서 선형최소자승법(Least Square Method)을 사용하여 매개변수인 a 와 b 를 결정할 수 있다. 실험에서 얻어진 발화 온도와 발화지연시간을 이용하면, 활성화에너지(E)는 식 (1)으로부터 얻은 대수온도곡선 대 $1/T_0$ 의 관계를 이용하여 결정할 수 있다.

식 (2)를 이용하면, 발화온도에 대한 발화지연시간을 예측할 수 있다.

3. 자연발화온도 실험

3.1. 실험장치 및 방법

본 실험에서는 액체 화학물질의 자연발화점 측정 장치로서 ASTM E659(Koehler 사)를 사용하여 자연발화온도를 측정하였으며, 장치는 크게 Furnace, Temperature Controller, Thermocouple, Test Flask, Hypodermic Syringe, Mirror, Air Gun으로 구성되어 있다.

실험 방법은 기준 온도를 설정하고, 실험 장치를 가열하고, 설정온도에 도달하면 플라스크 내부에 주사기로 시료를 0.1 mL를 넣는다. 그리고 10분 동안 관찰 후 발화가 일어나지 않으면 다시 온도를 설정한다. 만약 10분전에

발화가 일어나면 설정 온도 보다 30°C 낮게 설정하고 3~5°C 혹은 10°C씩 증가시키면서 측정하며, 발화가 일어났을 때 시간과 온도를 기록한다³⁾.

3.2. 실험재료

본 실험에 사용된 시약은 n-Decane과 Acetic acid는 Junsei (Japan) 사로서 순도는 각각 99%의 시약을 사용하였으며, 혼합물의 발화온도 측정은 순수물질을 각각 다른 몰비(Mole Fraction)로 혼합하여 실험하였다.

4. 발화지연시간 및 혼합물의 최소자연발화온도의 예측 모델

4.1. 다중회귀분석

본 연구에서는 순수물질인 경우는 발화온도에 따른 발화지연시간의 관계를 분석하고, 혼합물에서는 조성변화에 의한 최소자연발화온도의 관계를 설명하기 위해 다중회귀분석(Multiple Regression Analysis)을 사용하였다. 다중회귀분석은 변수와 응답의 관계를 보다 정량적으로 표시하기 위해서 사용된 방법으로 수학과 통계학적인 방식에 의거해서 종속변수와 독립변수의 관계식을 구하는 방법이다. 이 방법론은 그 동안 최적조건(Optimum Condition)을 구하는 방식 또는 최적화(Optimization)에 널리 이용되어 왔다³⁾.

이를 간략히 소개하면, 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 발화지연시간의 예측 모델

대부분의 문헌들에서는 자연발화온도와 발화지연시간의 관계를 다음과 같은 선형 식으로 표현하고 있다⁴⁾.

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

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

본 실험에서 얻은 각 순수물질의 자연발화온도와 발화지연시간을 식 (5)에 의해 회귀분석하여 최적화된 예측식을 얻을 수 있다.

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

또한 활성화에너지(E)를 다음과 같은 식으로 계산할 수 있다⁶⁾. 즉 식 (4)의 계수를 계산하다면 이를 식 (6)에 대입하여 활성화에너지를 계산할 수 있다.

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

4.3. 혼합물의 최소자연발화온도의 예측 모델

본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과, 조성 변화에 따른 최소자연발화온도가 증가하는 경향을 보이고 있다. 따라서 조성에 의한 최소자연발화온도 예측 모델을 다음과 같은 모델을 제시하여 최적화 된 모델을 찾고자 한다.

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

$$T_{AIT, MX} = a + bX_1 + cX_1^2 \quad (8)$$

(or $T_{AIT, MX} = aX_1 + bX_2 + cX_1X_2$)

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

4.4. 실험값과 예측값의 비교 방법

측정값과 예측값의 차이의 정도를 알기 위해서 A.A.D. (Average Absolute Deviation)을 사용하였다³⁾.

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

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

여기서 $\tau_{est.}$ 는 예측된 발화지연시간, $\tau_{exp.}$ 는 실험에서 얻은 발화지연시간이고, $AIT_{est.}$ 는 예측된 자연발화온도, $AIT_{exp.}$ 는 실험에서 얻은 자연발화온도이며, 그리고 N은 자료수이다.

또한 측정값과 예측값의 통계 분석을 위해 결정계수를 사용하였다³⁾.

$$r^2 = \frac{SSR}{SST} \quad (12)$$

여기서 r^2 는 표본 결정계수, SSR은 회귀에 의한 제곱합 (Sum of Squares due to Regression), SST는 총 제곱합(Total Sum of Squares)이다.

5. 결과 및 고찰

5.1. 순수물질의 최소자연발화온도 고찰

5.1.1. n-Decane의 자연발화온도 고찰

n-Decane의 자연발화온도와 발화지연시간을 측정하여 Table 1에 나타내었다. 본 실험에서는 초기설정온도를 230°C로 하여 실험한 결과 24.45 sec에서 발화가 일어나서, 초

기온도 보다 30°C 낮게 200°C에서 다시 실험한 결과 발화가 일어나지 않았으며, 다시 5°C 씩 상승 시킨 205°C와 210°C에서도 역시 발화가 일어나지 않았다. 따라서 5°C 상승 시킨 215°C에서 실험한 결과 71.59 sec에서 발화가 되어서, 3°C내린 결과 212°C, 80.57 sec에서 최소자연발화온도를 찾았다. 최소자연발화온도 212°C 기점으로 5°C 혹은 10°C씩 상승시켜 발화지연시간을 측정한 결과, 240°C에서는 13.78 sec, 255°C에서는 6.4 sec 그리고 275°C에서는 1.51 sec에 발화하였다³⁾.

제시한 실험에서 얻은 발화온도와 발화지연 자료를 식 (5)을 이용하여 발화온도 의한 발화지연시간을 회귀분석한 결과 예측식은 다음과 같다.

$$\ln\tau = -27.49 + 15465.13 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (13)$$

식 (13)을 $\log\tau$ 와 $\left(\frac{1}{T} \right)$ 로 나타내면 식 (14)과 같다.

$$\log\tau = -11.94 + 6716.67 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (14)$$

Semenov가 제시한 식 (6)을 식 (14)에 대입한 결과 활성화에너지(E)는 약 127.8 kJ/mol이 된다.

Table 1은 식 (13)에 의한 실험값과 예측값의 평균오차가 1.26sec, 결정계수(r^2)는 0.99로써 모사성이 크게 나타났다.

5.1.2. Acetic acid의 자연발화온도 고찰

Acetic acid의 자연발화온도와 발화지연시간을 측정하여 Table 2에 나타내었다. 본 실험에서는 초기설정온도를 450°C, 470°C, 490°C 그리고 510°C에서 3번의 실험결과 발화가 일어나지 않았으며, 2°C 올린 결과 512°C, 80.57 sec에서 최소자연발화온도를 찾았다. 최소자연발화온도 512°C를 기점으로 5°C 혹은 10°C 상승시켜 실험한 결과 530°C에서는 4.47 sec, 550°C에서는 2.54 sec 그리고 560°C에서는 1.87 sec에 발화하였다.

Table 1. Comparison of experimental and calculated ignition delay time by the AIT for n-decane.

No.	T[K]	$\tau_{exp.}$ [s]	$\ln\tau_{exp.}$	$\tau_{est.}$ (Eq.13)
1	485.15	80.57	4.38913	80.57
2	488.15	71.59	4.27096	66.25
3	493.15	47.75	3.86598	48.05
4	498.15	37.02	3.61146	35.08
5	503.15	24.45	3.19663	25.77
6	508.15	15.57	2.74535	19.04
7	513.15	13.78	2.62322	14.16
8	518.15	10.73	2.37304	10.58
9	528.15	6.40	1.85630	6.01
10	538.15	4.04	1.39624	3.49
11	543.15	3.43	1.23256	2.68
12	548.15	1.51	0.41211	2.07
A.A.D.	-	-	-	1.26

Table 2. Comparison of experimental and calculated ignition delay time by AIT for acetic acid.

No.	T[K]	τ_{exp} [s]	$\ln \tau_{exp}$	τ_{pred} (Eq.15)
1	785.15	5.67	1.73519	6.46
2	788.15	5.65	1.73166	5.98
3	795.15	5.42	1.69010	5.00
4	798.15	5.07	1.62334	4.64
5	803.15	4.47	1.49739	4.09
6	813.15	3.23	1.17248	3.20
7	823.15	2.54	0.93216	2.53
8	828.15	2.20	0.78846	2.24
9	833.15	1.87	0.62594	2.00
A.A.D.	-	-	-	0.29

제시한 실험에서 얻은 발화온도와 발화지연 자료를 식 (5)을 이용하여 발화온도 의한 발화지연시간을 회귀분석한 결과 예측식은 다음과 같다.

$$\ln \tau = -18.51 + 16001.25 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (15)$$

식 (15)을 $\log \tau$ 와 $\left(\frac{1}{T} \right)$ 로 나타내면 식 (16)과 같다.

$$\log \tau = -8.04 + 6949.27 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (16)$$

Semenov가 제시한 식 (6)을 식 (16)에 대입한 결과 활성화에너지(E)는 약 132.24 kJ/mol이 된다.

Table 2는 식 (15)에 의한 실험값과 예측값의 평균오차는 0.29 sec, 결정계수(r^2)는 0.99로써 모사성이 크게 나타났다.

5.1.3. 순수물질의 최소자연발화온도 비교

본 연구에서는 이성분계 인화성 액체혼합물인 n-Decane 과 Acetic acid 계를 구성하는 2개의 순수물질에 대하여 최소자연발화온도를 측정하였으며, 측정된 실험값을 기존 문헌값들^{3,7-15})과 비교하여 Table 3에 나타내었다.

n-Decane의 최소자연발화온도 측정값은 212°C로서, NFPA, Sigma, Hilado, SFPE, Zabetakis 그리고 Lange의 문헌값보다는 약 2°C~12°C 높게 측정되었다. Ignition과 Jackson 보다는 20°C, Scott의 문헌값 보다는 38°C 낮게 측정되었다. 그러나 기존 문헌들이 대부분 210°C로 제시되고 있으므로, 본 실험에서 얻은 자료를 이용하여도 타당하다고 본다.

Acetic acid의 최소자연발화온도 측정값은 512°C로서, NFPA, SAX, Hilado, SFPE, CRC 그리고 Lange의 문헌값 보다는 45°C 정도 높게 측정되었다. 그러나 Scott보다는 40°C

정도 낮게 측정되었으며, Sigam 문헌과는 거의 일치하고 있다. 따라서 본 연구에서 제시한 측정값은 공정에서 고려할 수 있다고 판단된다.

5.2. n-Decane and Acetic acid 계의 자연발화온도 측정

5.2.1. n-Decane(0.9)과 Acetic acid(0.1)계의 자연발화온도

본 실험에서는 얻은 n-Decane의 순수물질 자연발화온도를 고려하여 180°C, 185°C, 190°C에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 여기서 30°C 올린 220°C에서 실험한 결과 22.8 sec에서 발화되어, 2~3°C씩 낮게 설정하여 실험한 결과 200°C, 80.17 sec에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있었다. 최소자연발화온도를 기준으로 5°C 혹은 10°C씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 240°C에서는 8.19 sec, 260°C에서는 3.43 sec 그리고 280°C에서는 2.14 sec에 발화하였다.

5.2.2. n-Decane(0.7)과 Acetic acid(0.3)계의 자연발화온도

본 실험에서는 200°C, 205°C 그리고 207°C 에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 여기서 13°C 올린 220°C에서 실험한 결과 33.47 sec에서 발화되어, 2~3°C씩 낮게 설정한 결과 210°C, 56.81 sec에서 최소자연발화온도로 찾을 수 있었다. 최소자연발화온도를 기준으로 5°C 혹은 10°C씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 240°C에서는 9.99 sec, 250°C에서는 5.67 sec, 260°C에서는 4.43 sec 그리고 280°C에서는 1.93 sec에 발화하였다.

5.2.3. n-Decane(0.5)+Acetic acid(0.5)계의 자연발화온도

본 실험에서는 220°C, 230°C, 235°C에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 여기서 15°C 올린 250°C에서 실험한 결과 7.52 sec에서 발화되어, 2~3°C씩 낮게 설정한 결과 240°C, 11.69 sec에서 최소자연발화온도로 찾을 수 있었다. 최소자연발화온도를 기준으로 5°C 혹은 10°C씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 260°C에서는 5.38 sec, 270°C에서는 3.98 sec, 280°C에서는 3.33 sec 그리고 300°C에서는 1.81 sec에 발화하였다.

5.2.4. n-Decane(0.3)+Acetic acid(0.7)계의 자연발화온도

본 실험에서는 250°C, 260°C, 280°C, 285°C에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 여기서 15°C 올린 300°C에서 실험한 결과 2.04 sec에서 발화되어, 2~3°C씩 낮게 설정한 결과 290°C, 2.98 sec에서 최소자연발화온도로 찾을 수 있었다. 최소자연발화온도를 기준으로 10°C 상승시켜 발화

Table 3. Comparison of autoignition temperatures(AIT) between experimental data and several reported data for pure substances.

Compounds	AITs(°C)										
	This study	NFPA	Sigma	SAX	Ignition	Hilado	SFPE	Scott	Zabetakis	CRC	Lange
n-Decane	212	210	210	210	232	201	210	250	208	-	210
Acetic acid	512	463	516	465	465	464	465	550	-	463	465

온도를 측정된 결과, 310°C에서는 1.89 sec에 발화하였다.

5.2.5. n-Decane과 Acetic acid 계의 최소자연발화온도 예측 및 최소자연발화온도 거동(MAITB)

본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과 조성 변화에 따른 최소자연발화온도가 증가하는 경향을 보이고 있다. 따라서 조성 변화에 의한 최소자연발화온도 예측 모델을 제시할 수 있다고 판단되어, 식 (8)과 식 (9)를 회귀분석한 결과 다음과 같은 최적화된 식을 얻었다.

$$T_{AIT, MX} = 504.51 - 797.95X_1 + 511.36X_1^2 \quad (17)$$

$$T_{AIT, MX} = 510.88 - 10180.56X_1 + 1132.69X_1^2 - 417.48X_1^3 \quad (18)$$

n-Decane+Acetic acid 계에서 각각의 혼합조성에서 얻은 최소자연발화온도 실험값과 예측식에 의한 예측값을 비교하여 Table 4와 Fig. 1에 나타내었다. 본 연구에서 제시한 식 (18)에 의한 예측값은 실험값의 결정계수(r^2)가 0.99로서 모사성이 크게 나타나고 있다. 따라서 본 연구에서

Table 4. Experimental and the predicted AITs for n-decane(X_1)+ acetic acid(X_2) system.

Mole fractions		AITs(°C)		
X_1	X_2	Exp.	Eqn.(17)	Eqn.(18)
0	1	512	505	511
0.3	0.7	290	311	296
0.5	0.5	240	233	233
0.7	0.3	210	197	210
0.9	0.1	200	201	207
1	0	212	218	208
A.A.D.			9.20	4.43

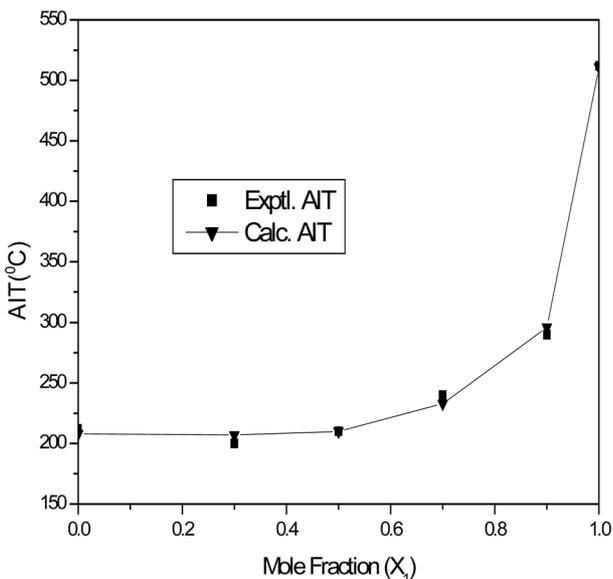


Fig. 1. Comparison of AIT prediction curves with experimental data for n-Decane+Acetic acid system.

제시한 식을 이용하여 다른 조성에서의 최소자연발화온도 예측이 가능해 졌다.

이 조성에서 혼합물을 구성하는 두 개의 순수물질의 AIT 보다 낮게 측정된 최소자연발화온도거동(MAITB, Minimum Autoignition Temperature Behavior)을 보이고 있다. 일반적으로 화학공정에서 혼합물을 취급할 때 공정 안전을 목적으로 자료를 활용하는 경우 혼합물 가운데 낮은 순수물질의 연소특성치를 활용하고 있는 것이 사실이다. 따라서 본 연구에서 제시한 자료는 n-Decane+Acetic acid 계를 취급하는 공정에서 매우 중요한 자료로서 활용될 수 있다.

6. 결론

본 연구는 자연발화온도측정 장치(ASTM E659)를 사용하여 n-Decane과 Acetic acid 계의 자연발화온도를 측정하였다. 이 계를 구성하는 n-Decane과 Acetic acid의 최소자연발화온도를 측정하여 문헌값들과 비교 고찰하였고, 활성화에너지를 계산하였다. 또한 n-Decane과 Acetic acid 계의 측정된 최소자연발화온도를 이용하여 조성 변화에 따른 최소자연발화온도를 예측할 수 모델을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 이성분계를 구성하는 순수물질인 n-Decane과 Acetic acid의 최소자연발화온도는 각각 212°C와 512°C로 측정되었다.
- 2) n-Decane과 Acetic acid의 활성화에너지는 각각 127.8 kJ/mol과 132.24 kJ/mol 이다.
- 3) n-Decane과 Acetic acid 계에서 혼합조성 변화에 의한 최소자연발화온도를 측정된 결과, n-Decane(0.9)과 Acetic acid(0.1)에서는 200°C, n-Decane(0.7)과 Acetic acid(0.3)계에서는 210°C, n-Decane(0.5)+Acetic acid(0.5)에서는 240°C 그리고 n-Decane(0.3)+Acetic acid(0.7)에서는 290°C로 측정되었다.
- 4) 혼합 조성에서 이성분계를 구성하는 물질 순수물질의 최소자연발화온도보다 낮은 최소자연발화온도를 보이고 있는 계로서 이를 혼합물의 최소자연발화온도 거동(Minimum Autoignition Temperature Behavior(MAITB)) 이라고 한다.
- 5) n-Decane+Acetic acid 계에서 조성 변화에 의한 최소자연발화온도를 예측식은 다음과 같다.

$$T_{AIT, MX} = 510.88 - 10180.56X_1 + 1132.69X_1^2 - 417.48X_1^3$$

여기서 X_1 은 n-Decane의 조성이다.

Reference

- 1) F.P. Lees, "Loss Prevention in the Process Industries Vol. 1", 2nd ed., Oxford Butterworth-Heinemann, 1996.
- 2) C.F. Cullis and C.D. Foster, "Studies of the Spontaneous Ignition in the Air of Binary Hydrocarbon Mixtures", Combustion and flame, Vol. 23, pp. 347-356, 1974.

- 3) D.M. Ha, "Prediction of Autoignition Temperature of n-Decane and sec-Butanol Mixture", *Journal of the Korean Institute of Fire Sci. & Eng.*, Vol. 26, No. 3, pp. 85-90, 2012.
- 4) C.J. Hilado and S. W. Clark, "Autoignition Temperature of Organic Chemicals", *Chemical Engineering*, Vol. 4, pp.75-80, 1972.
- 5) I. Goldfrab and A. Zinoviev, "A Study of Delay Spontaneous Insulation Fires", *Physics Letter*, A 311, pp. 491-500, 2003.
- 6) N.N. Semenov, "Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity, Vol. 2", Princeton University Press, Princeton, N.J., 1959.
- 7) NFPA, "Fire Hazard Properties of Flammable Liquid, Gases, and Volatile Solids", NFPA 325M, NFPA, 1991.
- 8) R.E. Lenga 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.
- 9) R.J. Lewis, "SAX's Dangerous Properties of Industrial Materials", 11th ed., John Wiley & Son, Inc., New Jersey, 2004.
- 10) V. Babrauskas, "Ignition Handbook", Fire Science Publishers, SFPE, 2003.
- 11) A.M. Kanury, "SFPE Handbook of Fire Protection Engineering ; Ignition of Liquid Fuels", 2nd ed., SFPE, 1995.
- 12) G.S. Scott, G.W. Jones and F.E. Scott, "Determination of Ignition Temperature of Combustible Liquids and Gases", *Analytical Chemistry*, Vol. 20, No. 3, pp. 238-241, 1948.
- 13) M.G. Zabetakis, A.L. Furno and G.W. Jones, "Minimum Spontaneous Ignition Temperature of Combustibles in Air", *Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 46, No. 10, pp. 2173-2178, 1954.
- 14) D.R. Lide, "Handbook Chemistry and Physics", 76th ed., CRC Press, 1996.
- 15) J.A. Dean, "Lange's Handbook of Chemistry", 14th ed., McGraw Hill, 1992.