

# Propionic acid와 3-Hexanone 계의 최소자연발화온도의 측정

하동명

세명대학교 보건안전공학과

## Measurement of Autoignition Temperature of Propionic Acid and 3-Hexanone System

Dong-Myeong Ha

Dept. of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University

(Received June 10, 2014; Revised August 8, 2014; Accepted August 14, 2014)

### 요 약

혼합물의 최소자연발화온도는 가연성액체의 안전한 취급을 위해서 중요한 지표가 된다. 본 연구에서는 ASTM E659 장치를 이용하여 가연성 혼합물인 Propionic acid와 3-Hexanone 계의 최소자연발화온도와 발화지연시간을 측정하였다. 2 성분계를 구성하는 순수물질인 Propionic acid와 3-Hexanone 계의 최소자연발화온도는 각각 511 °C와 425 °C로 측정되었다. 그리고 측정된 Propionic acid와 3-Hexanone 혼합물의 최소자연발화온도 실험값은 제시된 식에 의한 예측값과 적은 평균절대오차에서 일치하였다. 그리고 Propionic acid와 3-Hexanone 계는 일부 혼합 조성에서 두 개의 순수물질 가운데 작은 AIT 보다 낮게 측정된 AIT를 보이는 최소자연발화온도거동(Minimum Autoignition Temperature Behavior, MAITB)을 보이고 있다.

### ABSTRACT

The autoignition temperatures (AIT) of solvent mixture is important index for the safe handling of flammable liquids which constitute the solvent mixtures. This study measured the AIT and ignition delay time for Propionic acid and 3-Hexanone system by using ASTM E659 apparatus. The AITs of Propionic acid and 3-Hexanone which constituted binary system were 511 °C and 425 °C, respectively. The experimental AIT of Propionic acid and 3-Hexanone system were a good agreement with the calculated AIT by the proposed equations with a few average absolute deviation (A.A.D.). And Propionic acid and 3-Hexanone system was shown the minimum autoignition temperature behavior (MAITB).

**Keywords :** Solvent mixture, Autoignition temperature (AIT), ASTM E659, Propionic acid and 3-hexanone system, Minimum autoignition temperature behavior (MAITB)

## 1. 서 론

최근 화학산업의 사고 원인을 살펴보면, 공정에서 사용되고 있는 물질의 안전관리가 되지 않아서 일어나는 사례가 많다. 특히 산업 현장에서 취급하고 있는 각종 화학물질의 안전관리가 되지 않고 있는 이유는 취급하는 물질의 화재 및 폭발 특성치(연소특성치)에 관한 자료가 부족하거나, 정확하지 않은 연소특성치를 사용하기 때문이다. 따라서 사업장 내에서 제조, 취급, 저장되는 순수물질뿐만 아니라 혼합물질을 포함한 원료, 중간제품 및 완제품에 대한 정확한 물질보건안전자료(MSDS)를 확보해야 한다.

연소특성 가운데 자연발화(Autoignition 혹은 Spontaneous

Ignition)는 가연성혼합기체에 열 등의 형태로 에너지가 주어진 때 스스로 타기 시작하는 산화현상이다. 그리고 최소자연발화온도(Autoignition Temperature, AIT)는 주위로 부터 충분한 에너지를 받아서 스스로 점화할 수 있는 최저 온도를 말한다. 일반적으로 AIT는 농도, 용기 크기, 산소 농도, 압력, 촉매, 발화지연시간 등 다양한 실험 조건에 영향을 받으므로 문헌들 마다 다른 값들이 제시되고 있다<sup>(1)</sup>.

그동안 AIT의 연구는 순수물질 가운데 탄화수소류에 국한되어 연구가 진행되고 있으며, 혼합물에 대한 연구는 거의 없는 실정이다. Cullis 등<sup>(2)</sup>은 n-Decane과 2,2,5-Trimethylhexane 혼합물의 자연발화온도 및 연소 특성을 하였으며, 최근 Ha<sup>(3)</sup>는 n-Propanol과 n-Octane 계의 AIT

를 측정하여 혼합 조성 변화에 의한 최소자연발화온도를 예측할 수 있는 모델을 제시하였다.

순수물질의 AIT의 문헌들을 고찰하면, 동일 물질인데도 불구하고 문헌에 따라 다른 최소자연발화온도가 제시되고 있다. 따라서 순수물질의 정확한 AIT 연구는 혼합물질의 AIT 연구에 중요한 기반이 된다. 따라서 혼합물질의 AIT를 연구하기 위해서는 그 계를 구성하는 순수물질의 AIT 연구가 선행되어야 한다.

본 연구에서는 화학산업에서 널리 사용되고 있는 Propionic acid와 3-Hexanone<sup>(4)</sup>의 혼합물을 선정하였다. 혼합물을 구성하는 Propionic acid는 식품첨가물(방부제), 농약, 의약, 향료, 폴리머, 사료용 등으로 다양하게 사용되고 있으며, 3-Hexanone은 케톤류로서, 상온에서 액체 상태이며 무색이고, 용제와 화학제품의 중간제품으로서 접착제 원료, 페인트, 왁스 용제 등에도 사용되고 있는 산업에서 중요한 물질이다. 본 실험에서는 ASTM E659 (Koehler사)<sup>(5)</sup>, 장치를 사용하여 Propionic acid와 3-Hexanone 계에 대해 AIT를 측정하였다. 그리고 이성분계를 구성하는 순수성분인 Propionic acid와 3-Hexanone의 자연발화온도와 발화지연시간 관계를 측정하였다. 측정된 순수물질의 AIT는 문헌값들과 비교 고찰하였다. 또한 Propionic acid와 3-Hexanone계에 대해 AIT와 발화지연시간을 측정하였고, 혼합 조성 변화에 따른 AIT를 예측할 수 있는 모델을 제시하였다. 제시된 실험자료 및 예측 모델은 이들 물질을 취급하는 공정에서 화재 및 폭발의 방호 자료로 제공하는 데 목적이 있다.

## 2. 열발화 이론에 의한 자연발화온도와 발화지연시간의 관계

본 연구에서는 Frank-Kamenetskii 이론<sup>(3,6)</sup>을 도입하여 발화온도와 발화지연시간의 간략히 설명하고자 한다. 계의 크기 변화와 발화임계 주위 온도 관계로 Frank-Kamenetskii의 매개변수( $\delta$ )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  $\delta$ 는 주위온도에서의 열방출률,  $r_0$ 는 반응물의 차원,  $T_0$ 는 주위온도,  $Q$ 는 연소열,  $\rho$ 는 밀도,  $E$ 는 활성화에너지,  $k$ 는 열전도도,  $R$ 는 기체상수이다.

발화지연은 열생성(발열화학반응)과 열손실(액체연료의 증발)사이의 경쟁 때문에 절연물질 안에 가연성의 증발유체에 대한 특성을 갖는다. 따라서 Frank-Kamenetskii 방법과 비슷하게 발화지연시간과 초기온도 역수를 이용한다.

이를 간략히 설명하면 다음과 같다. 일반적으로 실험에서 측정된 값들은 발화지연시간  $\text{Int}$ 와 초기온도의 관계로 표현할 수 있다. 즉, 온도가 높을수록 발화지연시간을 짧

아진다는 것을 의미한다.

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

따라서 식(2)에서 발화지연시간과 초기발화온도의 관계에서 선형최소자승법(Least Square Method)을 사용하여 매개변수  $a$ 와  $b$ 를 결정할 수 있다. 실험에서 얻어진 발화온도와 발화지연시간을 이용하면, 활성화에너지( $E$ )는 식(1)으로부터 얻는 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 설정한 후 10분 전에 발화가 일어나면 설정 온도 보다 30 °C 낮게 설정하고 3~5 °C 혹은 10 °C씩 증가시키면서 측정하며, 발화가 일어났을 때 시간과 온도를 기록한다<sup>(3,5)</sup>.

### 3.2 실험재료

본 실험에 사용된 시약은 Propionic acid는 Junsei (Japan), 3-Hexanone는 Acros (US) 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 AIT의 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 왔다<sup>(5,7)</sup>.

이를 간략히 소개하면, 제시한 모델을 다항식의 일반적

인 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 발화지연시간의 예측과 활성화에너지

대부분의 문헌들에서는 자연발화온도와 발화지연시간의 관계를 다음과 같은 선형 식으로 표현하고 있다.

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

여기서  $\tau$ 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 Semenov<sup>(8)</sup>는 활성화에너지( $E$ )를 계산하기 위해 다음과 같은 식을 제시하였다. 즉 식(4)의 계수를 계산한다면 이를 식(6)에 대입하여 활성화에너지를 계산할 수 있다.

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

#### 4.3 혼합물의 최소자연발화온도(AIT)의 예측 모델

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

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

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

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

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

#### 4.4 실험값과 예측값의 비교 방법

측정값과 예측값의 차이의 정도를 알기 위해서 평균절대오차(A.A.D.)을 사용하였고, 또한 측정값과 예측값의 통계 분석을 위해 표본 결정계수를 사용하였다<sup>(3)</sup>.

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

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

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

여기서  $\tau_{est.}$ 는 추산식에 의해 추산된 발화지연시간이고,  $\tau_{exp.}$ 는 실험값이며,  $N$ 은 자료수,  $r^2$ 는 표본 결정계수, SSR은 회귀에 의한 제곱합(Sum of Squares due to Regression), SST는 SSR과 잔차에 의한 제곱합(Sum of Squares due to Residual Error)의 합이다.

## 5. 결과 및 고찰

### 5.1 순수물질의 자연발화온도 고찰

#### 5.1.1 Propionic Acid의 자연발화온도 고찰

본 실험에서 얻은 최소자연발화온도를 고찰하기 위해서 여러 문헌에 제시된 Propionic acid의 자연발화온도를 조사하였다. Sigma<sup>(9)</sup>는 513 °C, NFPA<sup>(10)</sup>는 465 °C, Hilado<sup>(11)</sup>는 475 °C 그리고 Yagyu<sup>(12)</sup>는 435 °C (0.2 mL, 24 s, 근간 발화온도 585 °C)를 제시하고 있다. 제시된 자료에 따라 80 °C의 차이를 보이로 보이고 있다.

본 실험에서는 기존의 자료를 근거로 430 °C, 460 °C 그리고 490 °C에서 실험한 결과 발화가 되지 않아서 다시 10 °C 상승시킨 500 °C에서 3번의 실험결과 발화가 일어나지 않았으며, 1~2 °C 상승시켜 실험한 결과, 511 °C에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있었으며, 그때의 발화지연시간은 11.99 s였다. 511 °C의 최소자연발화온도를 기점으로 하여 5~10 °C를 상승시켜 실험한 결과 520 °C에서는 7.65 s, 530 °C에서는 4.16 s, 540 °C에서는 3.47 s 그리고 555 °C에서는 1.79 s에 발화하였다.

제시한 실험 자료를 선형식인 Arrhenius 형태 식을 이용한 최적화된 식은 다음과 같다.

$$\ln \tau = -32.81 + 27610.75 \left( \frac{1}{T} \right) \quad (13)$$

**Table 1.** Comparison of Experimental and Calculated Delay Time by AIT for Propionic Acid

No.	T [K]	$\tau_{exp.}$ [s]	$\ln \tau_{exp.}$	$\tau_{pred.}$ (Eq. 13)
1	784.15	11.99	2.48407	11.01
2	787.15	10.68	2.36837	9.63
3	793.15	7.65	2.03471	7.39
4	798.15	4.65	1.53687	5.94
5	803.15	4.16	1.42552	4.79
6	813.15	3.49	1.24990	3.14
7	823.15	2.09	0.73716	2.08
8	828.15	1.79	0.58222	1.70
A.A.D.				0.58

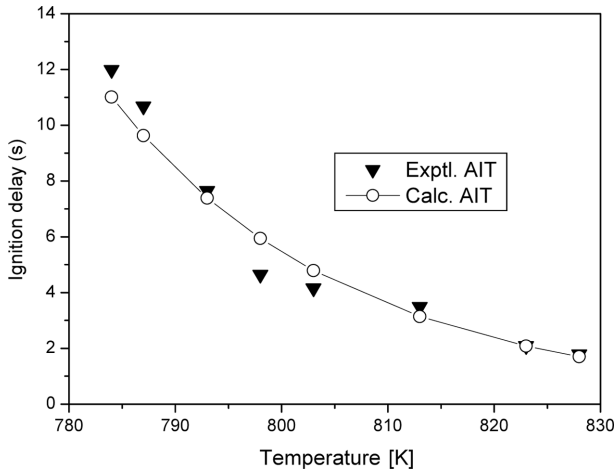


Figure 1. A comparison between the experimental and calculated delay times for propionic acid.

식(13)를  $\log\tau$ 와  $(1/T)$ 의 관계로 다시 표현하면 다음과 같다.

$$\log\tau = -14.25 + 11991.22\left(\frac{1}{T}\right) \quad (14)$$

식(14)에 의한 예측된 발화지연시간들을 실험값과 비교하여 Table 1과 Figure 1에 나타내었다.

식(13)에 의한 예측값과 실험값 사이의 평균절대오차는 0.58 s이며, 결정계수( $r^2$ )는 0.97로서 실험값과 계산값의 모사성은 크다. (14)을 식(6)에 대입하여 계산된 활성화에너지는 228 kJ/mol이다.

### 5.1.2 3-헥사논의 자연발화온도 고찰

3-헥사논의 기존 AIT 자료가 없으므로 2-헥사논의 NFPA<sup>(10)</sup>에서 제시한 423 °C를 근거로 430 °C에서 실험한 결과 6.06 s에서 발화하였다. 30 °C 낮게 400 °C에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않아서 다시 20 °C 상승시킨 420 °C에서도 발화가 되지 않았다. 따라서 420 °C를 기준으로 1~2 °C 상승시켜 실험한 결과 425 °C, 8.94 s에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있었다. 이를 시작점으로 5~10 °C를 상승시켜 발화지연시간을 측정한 결과, 440 °C에서는 4.86 s, 450 °C에서는 4.02 s, 460 °C에서는 3.96 s 그리고 480 °C에서는 1.68 s에서 발화하였다. 본 연구에서 측정된 3-헥사논의 AIT 425 °C는 공정 안전에 활용할 수 있는 새로운 자료라고 할 수 있다.

제시한 실험 자료를 선형식인 Arrhenius 형태 식을 이용한 최적화된 식은 다음과 같다.

$$\ln\tau = -16.94 + 13273.5\left(\frac{1}{T}\right) \quad (15)$$

식(15)를  $\log\tau$ 와  $(1/T)$ 의 관계로 다시 표현하면 다음과 같다.

$$\log\tau = -7.36 + 5764.62\left(\frac{1}{T}\right) \quad (16)$$

Table 2. Comparison of Experimental and Calculated Ignition Delay Time by the AIT for 3-Hexanone

No.	T [K]	$\tau_{exp}$ [s]	$\ln\tau_{exp}$	$\tau_{est.}$ (Eq. 15)
1	698	8.94	2.1905	7.97
2	703	6.06	1.8017	6.96
3	713	4.86	1.5810	5.34
4	723	4.02	1.3913	4.12
5	733	3.96	1.3762	3.21
6	743	2.81	1.0332	2.52
7	753	1.67	0.5128	1.99
A.A.D.	-	-	-	0.54

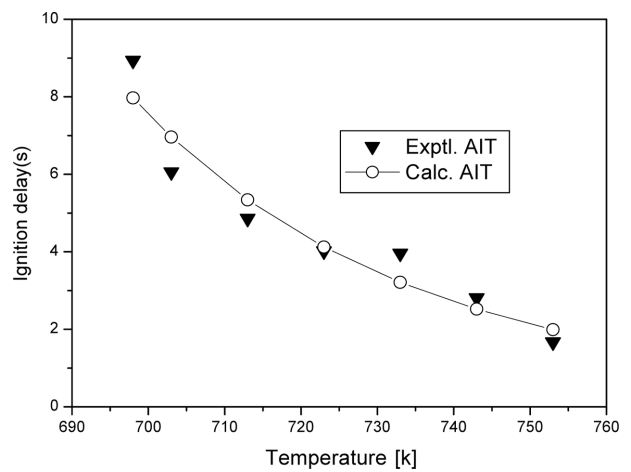


Figure 2. A comparison between the experimental and calculated delay times for 3-hexanone.

식(16)에 의한 예측된 발화지연시간들을 실험값과 비교하여 Table 2과 Figure 2에 나타내었다.

식(15)에 의한 예측값과 실험값 사이의 평균절대오차는 0.54 s이며, 결정계수( $r^2$ )는 0.92로서 실험값과 계산값의 모사성은 큰 편이다. 식(16)을 식(6)에 대입하여 계산된 활성화에너지는 110 kJ/mol이다.

## 5.2 Propionic acid와 3-Hexanone 계의 자연발화온도 고찰

### 5.2.1 Propionic acid(0.1) + 3-Hexanone(0.9)계의 자연발화온도

본 실험에서는 얻은 Propionic acid의 순수물질 최소자연발화온도 425 °C를 근거로 410 °C에서 실험한 결과 발화가 되지 않아, 30 °C 상승시킨 440 °C에서 실험한 결과 4.38 s에서 발화가 되었다. 10 °C 내린 430 °C에서는 6.17 s에서 발화되어 2~3 °C씩 내려 실험한 결과 420 °C, 7.29 s에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있었다. 최소자연발화온도를 기준으로 5 °C 혹은 10 °C씩 상승시켜 발화온도를 측정 한 결과, 460 °C에서는 4.19 s, 480 °C에서는 3.64 s, 500 °C에

서는 3.19 s, 510 °C에서는 2.53 s, 그리고 520 °C에서는 1.86s 에 발화하였다.

### 5.2.2 Propionic acid (0.3) + 3-Hexanone (0.7)계의 자연 발화온도

본 실험에서는 420 °C, 430 °C, 435 °C 그리고 440 °C 에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 다시 2 °C씩 올려서 실험한 결과 450 °C, 13.93 s에서 최소자연발화온도를 찾았다. 최소자연발화온도를 기준으로 5 °C 혹은 10 °C씩 상승시켜 발화온도를 측정 한 결과, 470 °C에서는 7.60 s, 480 °C에서는 7.43 s, 490 °C에서는 6.88 s, 500 °C에서는 6.47 s, 510 °C에서는 5.21 s, 520 °C에서는 4.33 s, 530 °C에서는 3.18 s 그리고 540 °C에서는 1.74 s에 발화하였다.

### 5.2.3 Propionic acid (0.5) + 3-Hexanone (0.5)계의 자연 발화온도

본 실험에서는 440 °C, 450 °C, 460 °C, 470 °C 그리고 475 °C에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 다시 2 °C씩 올려서 실험한 결과 477 °C, 6.78 s에서 최소자연발화온도를 찾았다. 최소자연발화온도를 기준으로 5 °C 혹은 10 °C씩 상승시켜 발화온도를 측정 한 결과, 480 °C에서는 6.81 s, 490 °C에서는 6.43 s, 500 °C에서는 5.17 s, 510 °C에서는 4.92 s, 520 °C에서는 4.46 s, 530 °C에서는 4.44 s, 540 °C에서는 3.21 s, 550 °C에서는 2.78 s 그리고 560 °C에서는 1.91 s에 발화하였다.

### 5.2.4 Propionic acid (0.7) + 3-Hexanone (0.3)계의 자연 발화온도

본 실험에서는 480 °C, 485 °C 그리고 488 °C에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 다시 2 °C씩 올려서 실험한 결과 490 °C, 8.84 s에서 최소자연발화온도를 찾았다. 최소자연발화온도를 기준으로 5 °C 혹은 10 °C씩 상승시켜 발화온도를 측정 한 결과, 500 °C에서는 6.47 s, 510 °C에서는 4.26 s, 520 °C에서는 3.51 s, 530 °C에서는 2.76 s, 540 °C에서는 2.29 s, 550 °C에서는 2.02 s 그리고 560 °C에서는 1.47 s에 발화하였다.

### 5.2.5 Propionic acid와 3-Hexanone계의 최소자연발화온도 예측

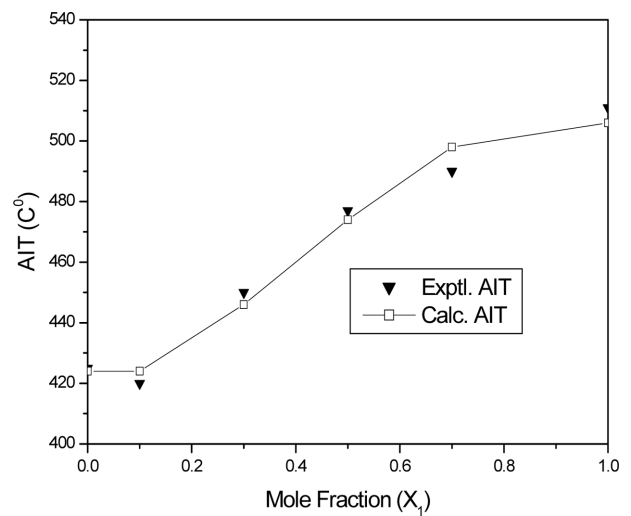
본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과 조성 변화에 따른 최소자연발화온도가 증가하는 경향을 보이고 있다. 따라서 조성 변화에 의한 최소자연발화온도 예측 모델을 제시할 수 있다고 판단되어, 식(8)과 식(9)를 회귀분석한 결과 다음과 같은 최적화된 식을 얻었다.

$$T_{AIT, MIX} = 421.06 + 11.03X_1 + 79.21X_1^2 \quad (17)$$

$$T_{AIT, MIX} = 424.13 - 95.45X_1 + 379.06X_1^2 - 201.5X_1^3 \quad (18)$$

**Table 3.** Experimental and the Predicted AITs for Propionic Acid and 3-hexanone System

Mole fractions		AITs (°C)		
X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	Exp.	Eq. (17)	Eq. (18)
0	1	425	421	424
0.1	0.9	420	432	424
0.3	0.7	450	446	446
0.5	0.5	477	468	474
0.7	0.3	490	495	498
1	0	511	511	506
A.A.D.			5.65	4.20



**Figure 3.** Comparison of AIT prediction curves with experimental data for propionic acid (X<sub>1</sub>) + 3-hexanone (X<sub>2</sub>) system.

Propionic acid와 3-Hexanone 계에서 각 각의 혼합조성에서 얻은 AIT의 실험값과 예측식에 의한 예측값을 비교하여 Table 3과 Figure 3에 나타내었다. 본 연구에서 제시한 식(18)에 의한 예측값은 실험값의 결정계수( $r^2$ )가 0.97로서 모사성이 크게 나타나고 있다. 따라서 본 연구에서 제시한 식을 이용하여 다른 조성에서의 AIT의 예측이 가능해 졌다.

Propionic acid와 3-Hexanone 계의 경우 혼합물을 구성하는 두 개의 순수물질의 AIT 보다 낮게 측정된 최소자연발화온도거동(Minimum Autoignition Temperature Behavior, MAITB)을 보이고 있다. 이와같은 현상은 분자간의 인력이 작용하여 생기는 것으로 판단된다.

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 Propionic acid와 3-Hexanone 계를 취급하는 공정에서 매우 중요한 자료로 활용될 수 있다.

## 6. 결 론

본 연구는 자연발화온도측정장치(ASTM E659)를 사용하여 Propionic acid와 3-Hexanone 계의 AIT를 측정하였다. 이성분계를 구성하는 Propionic acid와 3-Hexanone의 AIT를 측정하여 문헌값들과 비교 고찰하였고, 이들의 활성화에너지를 계산하였다. 또한 Propionic acid와 3-Hexanone 계의 측정된 AIT를 사용하였으며, 측정된 조성에서의 AIT 이외의 다른 조성에서도 AIT를 예측할 수 모델을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 이성분계를 구성하는 Propionic acid와 3-Hexanone의 AIT는 각각 511 °C와 425 °C로 측정되었으며, 활성화에너지는 228 kJ/mol과 110 kJ/mol로 계산되었다.

2) Propionic acid와 3-Hexanone 계에 대해 조성 변화에 의한 AIT를 측정한 결과, Propionic acid (0.1)+3-Hexanone (0.9)계에서는 420 °C, Propionic acid (0.3)+3-Hexanone (0.7)계에서는 450 °C, Propionic acid (0.5)+3-Hexanone (0.5)계에서는 477 °C 그리고 Propionic acid (0.7)+3-Hexanone (0.3)계에서는 490 °C로 측정되었다.

3) Propionic acid와 3-Hexanone 계에서 조성 변화에 의한 AIT의 예측식은 다음과 같다.

$$T_{AIT, MIX} = 424.13 - 95.45X_1 + 379.06X_1^2 - 201.5X_1^3$$

여기서  $X_1$ 은 Propionic acid의 조성이다.

4) Propionic acid와 3-Hexanone 계의 경우, 일부 혼합 조성에서 두 개의 순수물질 가운데 작은 AIT인 3-Hexanone의 425 °C보다 낮게 측정된 AIT를 보이는 최소자연발화온도거동을 지니고 있다.

## References

1. D. A. Crowl and J. F. Louvar, "Chemical Process Safety Fundamentals with Application", 2nd ed., Pearson Education Inc. (2002).
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-Propanol and n-Octane Mixture", *Journal of the Korean Institute of Gas*, Vol. 17, No. 2, pp. 21-27 (2013).
4. J. Gmehing, U. Onken and W. Arlt, "Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection", DECHEMA (1980).
5. D. M. Ha, "The Measurement of Fire and Explosion Properties of n-Pentadecane", *J. of the Korean Society of Safety*, Vol. 28, No. 4, pp. 53-57 (2013).
6. V. Babrauskas, "Ignition Handbook", Fire Science Publishers, SFPE (2003).
7. G. E. P. Box and N. R. Draper, "Empirical Model-Building and Response Surface", John-Wiley & Sons, Inc. (1987).
8. N. N. Semenov, "Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity, Vol. 2", Princeton University Press, Princeton, N.J. (1959).
9. 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).
10. NFPA, "Fire Hazard Properties of Flammable Liquid, Gases, and Volatile Solids", NFPA 325M, NFPA (1991).
11. C. J. Hilado and S. W. Clark, "Autoignition Temperature of Organic Chemicals", *Chemical Engineering*, Vol. 4, pp. 75-80 (1972).
12. S. Yagyū, "Systematization of Spontaneous Ignition Temperatures of Organic Compounds (1st Report)", *Research Report of the Research, Institute of Industrial Safety*, RR-26-5, Japan (1978).