

# 톨루엔과 2-부탄올 계의 최소자연발화온도의 측정 및 예측

하동명<sup>†</sup>

세명대학교 보건안전공학과  
(2015. 3. 16. 접수 / 2015. 7. 20. 수정 / 2015. 8. 11. 채택)

## Prediction and Measurement of Autoignition Temperature of Toluene and 2-Butanol System

Dong-Myeong Ha<sup>†</sup>

Department of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University  
(Received March 16, 2015 / Revised July 20, 2015 / Accepted August 11, 2015)

**Abstract :** The autoignition temperatures(AIT) of solvent mixture is important index for the safe handling of flammable liquids which constitute the solvent mixtures. Therefore, the AITs of common pure chemical substances are widely reported, but very limited data are available for mixtures. This study, the toluene and 2-butanol system which used mixture solution solvent was measured the AIT and ignition delay time by using ASTM E659 apparatus. The AITs of toluene and 2-butanol constituted binary system were 547°C and 400°C, respectively. The experimental AIT of toluene and 2-butanol were a good agreement with the calculated AIT by the proposed equations with a few average absolute deviation(A.A.D.).

**Key Words :** solvent mixture, AIT(Autoignition temperature), ASTM E659, toluene and 2-butanol system

### 1. 서론

사업장에서 사용되고 있는 각종 화학물질의 취급 부주의로 인해 발생하는 화재 혹은 폭발 사고는 그 물질의 정확하지 않은 연소특성치를 사용해서 생기는 경우가 많다. 따라서 사업장 내에서 제조, 취급, 저장되는 순수물질과 혼합물질에 정확한 물질보건안전자료(MSDS)의 확보는 재해 예방에 기반이 된다.

연소 특성치 가운데 최소자연발화온도(AIT: autoignition temperature)는 주위로부터 충분한 에너지를 받아서 스스로 점화할 수 있는 최저온도를 말한다. 일반적으로 AIT는 농도, 용기 크기, 산소농도, 압력, 촉매, 발화지연시간 등 다양한 실험 조건에 영향을 받으므로 문헌들마다 다른 값들이 제시되고 있다<sup>1)</sup>.

AIT의 연구를 살펴보면 대부분 순수물질에 국한되어 연구가 진행되고 있으며, 혼합물에 대한 연구는 거의 없는 실정이다. Zabetakis 등<sup>2)</sup>은 n-heptane과 iso-octane 혼합물의 자연발화온도에 대한 실험적 연구를 하였으며, Cullis 등<sup>3)</sup>은 n-decane과 2,2,5-trimethylhexane

혼합물의 자연발화온도를 연구하였다. 최근 Ha<sup>4)</sup>는 propionic acid와 3-hexanone 계의 AIT를 측정하여 혼합 조성에 의한 최소자연발화온도를 예측할 수 있는 모델을 제시하였다.

혼합물질의 AIT를 연구하기 위해서는 그 계를 구성하는 순수물질의 AIT의 연구가 선행되어야 한다. 이는 순수물질의 AIT의 경우 문헌에 따라 다른 AIT가 제시되고 있기 때문이다. 따라서 순수물질의 정확한 AIT 연구는 혼합물질의 AIT 연구에 중요한 인자가 된다.

본 연구에서는 화학산업에서 널리 사용되고 있는 톨루엔과 2-부탄올의 혼합물을 선정하였다. 혼합물을 구성하는 톨루엔은 발암성 때문에 가솔린 첨가제로는 제한되었지만 화학 공정에서 용해제, 염료, 폭약, 살충제 원료뿐만 아니라 중요한 용매 등으로 다양하게 사용되고 있으며, 2-부탄올은 유기합성에 시작 물질로서 사용될 뿐 아니라 화학반응에서 용제로도 사용된다. 또한 과일에센스용의 에스테르 합성원료, 페인트, 인조향료, 도료, 가솔린대체재료, 자동차의 윤활류 첨가제 등으로 폭 넓게 사용되고 있다.

<sup>†</sup> 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, Semyung-ro, Jecheon-si, Chungbuk 27136, Korea

본 실험에서는 ASTM E659(Koehler사) 장치를 사용하여 톨루엔과 2-부탄올 계에 대해 AIT를 측정하였다. 그리고 이성분계를 구성하는 순수성분인 톨루엔과 2-부탄올의 자연발화온도와 발화지연시간 관계를 측정하였다. 측정된 순수물질의 AIT는 문헌값들과 비교 고찰하였다. 또한 톨루엔과 2-부탄올 계에 대해 AIT와 발화지연시간을 측정하였고, 혼합 조성 변화에 따른 AIT를 예측할 수 있는 모델을 제시하였다. 제시된 실험자료 및 예측 모델은 이들 물질을 취급하는 공정에서 방호 자료로 제공하고자 한다.

## 2. 열발화 이론에 의한 자연발화온도와 발화지연시간의 관계

본 연구에서는 Frank-Kamenetskii 이론<sup>5)</sup>을 도입하여 발화온도와 발화지연시간의 관계를 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, 반응물의 차원,  $r_0$ 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  $\ln t$ 와 초기온도의 관계로 표현할 수 있다. 즉, 온도가 높을수록 발화지연시간을 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 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 Co.)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>6)</sup>.

### 3.2 실험재료

본 실험에 사용된 시약은 톨루엔은 Junsei(Japan), 2-부탄올은 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 조성 변화에 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>7)</sup>.

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 최

소화 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 있다<sup>8)</sup>.

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

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>9)</sup>는 활성화에너지(E)를 계산하기 위해 다음과 같은 식을 제시하였다. 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 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 A.A.D.(Average Absolute Deviation)을 사용하였고, 또한

측정값과 예측값의 통계 분석을 위해 표본 결정계수를 사용하였다<sup>10)</sup>.

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

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

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

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 톨루엔의 자연발화온도 고찰

톨루엔의 경우 NFPA 325M<sup>11)</sup>, SFPE Handbook<sup>12)</sup> 그리고 Hilado 등<sup>13)</sup>에서는 약 480°C로 제시하였으며, Sigma<sup>14)</sup>는 536°C, Jackson<sup>15)</sup>은 568°C 그리고 Swarts 등<sup>16)</sup>은 635°C로 제시하고 있다. 따라서 문헌들에 따라 약 155°C의 차이를 보이고 있다.

본 실험에서는 초기설정온도를 570°C로 하여 실험한 결과 발화 21.27 sec에서 발화가 되어, 초기온도 보다 30°C 낮게 540°C에서 다시 실험한 결과 발화가 일어나지 않았다. 따라서 5°C 상승 시킨 545°C에서도 발화가 일어나지 않아 다시 2°C 상승시킨 547°C에서 실험한 결과 39.18 sec에서 AIT를 찾았고, 이를 기점으로 5°C 혹은 10°C 씩 상승시켜 발화지연시간과 발화온도를 측정 한 결과 665°C에서 1.77 sec에 발화하였다.

실험 자료를 이용한 발화온도에 의한 발화지연시간의 관계식을 다음과 같이 제시할 수 있다.

$$\ln\tau = -20.80 + 20132.81\left(\frac{1}{T}\right) \quad (13)$$

식 (13)에 의한 예측값과 실험값 사이의 평균절대오차는 0.65 sec이며, 결정계수는 0.99로서 예측값과 실험값은 일치하고 있다. Semenov가 제시한 식 (6)에 의한 활성화에너지는 166.38 kJ/mol이다.

Fig. 1에는 식 (13)에 의해 예측된 발화지연시간들을 실험값과 비교하여 나타내었다.

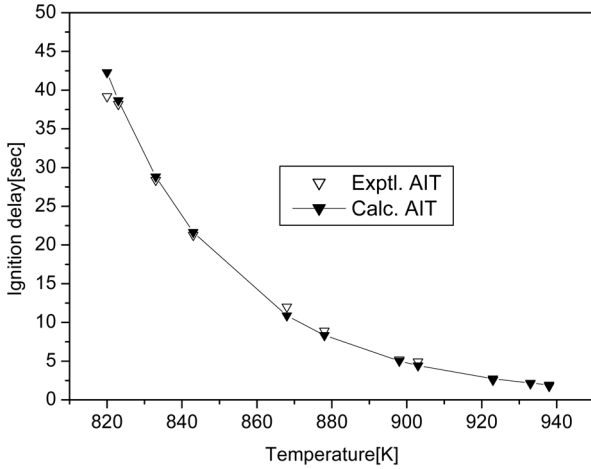


Fig. 1. Comparison between the experimental and calculated delay times of the equation (13) for toluene

### 5.2 2-부탄올의 자연발화온도 고찰

2-부탄올의 AIT는 Yagyu<sup>17)</sup>의 405°C, NFPA 325M<sup>11)</sup>와 Hilado 등<sup>13)</sup>에서는 415°C, SFPE Handbook<sup>12)</sup>는 427°C, 그리고 Sigma<sup>14)</sup>와에서는 434°C로 제시하고 있으며, 문헌들에 따라 약 30°C의 차이를 보이고 있다.

본 실험에서는 초기설정온도를 360°C로 하여 실험한 결과 비발화 되어, 다시 30°C를 상승 시켜 390°C에서 실험한 결과 역시 비발화 되었다. 다시 30°C 상승시킨 420°C에서 실험한 결과 9.44 sec에서는 발화되었다. 다시 2~5°C 낮추어 실험한 결과 400°C에서 AIT를 찾았고 이를 기점으로 5°C 혹은 10°C씩 상승시켜 발화지연 시간과 발화온도를 측정한 결과 500°C에서는 1.97 sec에서 발화하였다.

본 연구에서 측정된 AIT인 400°C는 현재 많이 인용하고 있는 427°C 보다는 약 27°C 낮은 온도로 측정되었으며, Yagyu의 405°C(22 sec)와 비슷한 결과로서, 공정에서는 본 연구에서 측정된 AIT 400°C를 사용하는 것이 타당하다고 본다.

실험 자료를 이용한 발화온도에 의한 발화지연시간의 관계식을 다음과 같이 제시할 수 있다.

$$\ln \tau = -15.87 + 12706.95 \left( \frac{1}{T} \right) \quad (14)$$

식 (14)에 의한 예측값과 실험값 사이의 평균절대오차는 1.29 sec이며, 결정계수는 0.92로서 예측값과 실험값은 일치하고 있다. Semenov가 제시한 식 (6)에 의한 활성화에너지는 105.02 kJ/mol이다.

Fig. 2에는 식 (14)에 의해 예측된 발화지연시간들을 실험값과 비교하여 나타내었다.

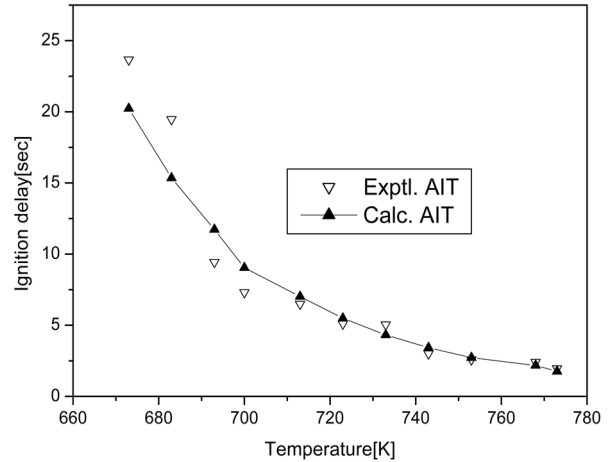


Fig. 2. Comparison between the experimental and calculated delay times of the equation (14) for 2-butanol.

### 5.3. 톨루엔과 2-부탄올 계의 자연발화온도 고찰

#### 5.3.1 톨루엔(0.1)+2-부탄올(0.9) 계의 자연발화온도

본 실험에서는 얻은 2-부탄올의 최소자연발화온도(AIT) 400°C를 근거로 370°C에서 실험한 결과 비발화가 되어, 30°C 상승시킨 400°C에서도 비발화 되었다. 다시 30°C 상승시켜 430°C에서 실험한 결과 11.48 sec에서 발화가 되었다. 10°C 내린 420°C에서는 12.78 sec에서 발화되어 2~3°C씩 내려 실험한 결과 413°C, 20.43 sec에서 AIT를 찾을 수 있었다. AIT를 기준으로 5°C 혹은 10°C씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 440°C에서는 7.57 sec, 450°C에서는 6.14 sec, 460°C에서는 5.87 sec, 470°C에서는 4.54 sec, 480°C에서는 3.98 sec, 490°C에서는 2.77 sec, 500°C에서는 2.34 sec, 510°C에서는 2.17 sec 그리고 520°C에서는 1.88 sec에 발화하였다.

#### 5.3.2 톨루엔(0.3)+2-부탄올(0.7) 계의 자연발화온도

톨루엔(0.1)+2-부탄올(0.9) 계의 AIT 413°C를 근거로, 400°C에서 실험한 결과 발화가 되지 않아, 30°C 상승시켜 430°C에서 실험한 결과 21.77 sec에서 발화가 되었다. 5°C 내린 425°C에서는 24.91 sec에서 발화되어 2~3°C씩 내려 실험한 결과 423°C, 25.17 sec에서 AIT를 찾을 수 있었다. AIT를 기준으로 5°C 혹은 10°C씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 440°C에서는 12.39 sec, 450°C에서는 8.33 sec, 460°C에서는 6.52 sec, 470°C에서는 5.17 sec, 480°C에서는 3.49 sec, 490°C에서는 2.60 sec 그리고 500°C에서는 1.74 sec에 발화하였다.

#### 5.3.3 톨루엔(0.5)+2-부탄올(0.5) 계의 자연발화온도

톨루엔(0.3)+2-부탄올(0.7) 계의 AIT 423°C를 근거로,

410°C에서 실험한 결과 발화가 되지 않아, 30°C 상승시켜 440°C에서 실험한 결과 24.84 sec에서 발화가 되었다. 10°C내린 430°C, 26.0 sec에서 AIT를 찾을 수 있었다. AIT를 기준으로 5 혹은 10°C씩 상승시켜 발화온도를 측정하는 결과, 450°C에서는 17.40 sec, 460°C에서는 10.96 sec, 470°C에서는 7.38 sec, 480°C에서는 5.33 sec, 490°C에서는 3.59 sec, 500°C에서는 2.77 sec 그리고 510°C에서는 1.94 sec에 발화하였다.

**5.3.4 톨루엔(0.7)+2-부탄올(0.3) 계의 자연발화온도**

톨루엔(0.3)+2-부탄올(0.7) 계의 AIT 430°C를 근거로, 410°C에서 실험한 결과 발화가 되지 않아, 30°C 상승시켜 440°C에서도 비발화 되었다. 다시 30°C 상승시킨 470°C에서 실험한 결과 14.85 sec에서 발화가 되었다. 다시 20°C내린 450°C에서 실험한 결과 36.61 sec에서 발화되어 2~3°C씩 내려 실험한 결과 447°C, 37.20 sec에서 AIT를 찾을 수 있었다. AIT를 기준으로 5°C 혹은 10°C씩 상승시켜 발화온도를 측정하는 결과, 480°C에서는 11.15 sec, 490°C에서는 8.10 sec, 500°C에서는 6.78 sec, 510°C에서는 4.92 sec, 520°C에서는 3.10 sec, 530°C에서는 2.24 sec 그리고 540°C에서는 1.63 sec에 발화하였다.

**5.3.5 톨루엔(0.9)+2-부탄올(0.1) 계의 자연발화온도**

톨루엔(0.3)+2-부탄올(0.7) 계의 AIT 447°C를 근거로, 460°C에서 실험한 결과 비발화 되어, 30°C 상승시켜 490°C에서도 비발화 되었다. 다시 30°C 상승시킨 520°C에서 실험한 결과 26.81 sec에서 발화가 되었다. 다시 2~3°C씩 내려 실험한 결과 511°C, 38.81 sec에서 AIT를 찾을 수 있었다. AIT를 기준으로 5 혹은 10°C씩 상승시켜 발화온도를 측정하는 결과, 530°C에서는 14.88 sec, 540°C에서는 13.50 sec, 560°C에서는 7.72 sec, 580°C에서는 5.28 sec, 600°C에서는 3.72 sec, 620°C에서는 2.94 sec 그리고 630°C에서는 1.52 sec에 발화하였다.

**5.2.6 톨루엔+2-부탄올 계의 최소자연발화온도 예측**

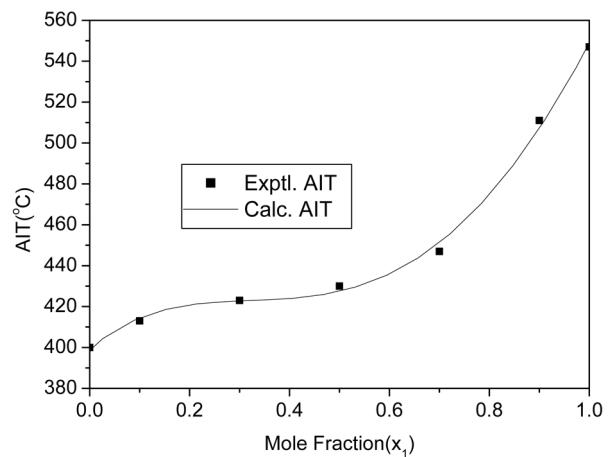
본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과 조성 변화에 따른 최소자연발화온도가 증가하는 경향을 보이고 있다. 따라서 조성 변화에 의한 최소자연발화온도 예측 모델을 제시할 수 있다고 판단되어, 식 (8)과 식 (9)를 회귀분석한 결과 다음과 같은 최적화된 식을 얻었다.

$$T_{AIT, MIX} = 410.01 - 53.01X_1 + 183.56X_1^2 \quad (15)$$

$$T_{AIT, MIX} = 400.58 + 151.89X_1 - 374.56X_1^2 + 372.06X_1^3 \quad (16)$$

**Table 1.** Experimental and predicted AITs for toluene and 2-butanol system

Mole fractions		AITs(°C)		
X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	Exp.	Eqn.(15)	Eqn.(16)
0	1	400	410	400
0.1	0.9	413	407	412
0.3	0.7	423	411	422
0.5	0.5	430	429	429
0.7	0.3	447	462	541
0.9	0.1	511	511	505
1	0	547	541	550
A.A.D.		-	7.39	2.16



**Fig. 3.** Comparison of AIT prediction curves with experimental data for toluene(X<sub>1</sub>)+2-butanol(X<sub>2</sub>) system.

톨루엔과 2-부탄올 계에서 각각의 혼합조성에서 얻은 AIT의 실험값과 예측식에 의한 예측값을 비교하여 Table 1과 Fig. 3에 나타내었다. 본 연구에서 제시한 식 (16)에 의한 예측값은 실험값의 결정계수(r<sup>2</sup>)가 0.99로서 모사성이 일치하고 있다. 따라서 본 연구에서 제시한 식을 이용하여 다른 조성에서의 AIT의 예측이 가능해 졌다.

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 톨루엔과 2-부탄올 계를 취급하는 공정의 안전을 위해서는 중요한 자료로 활용될 수 있다.

**6. 결론**

본 연구는 자연발화온도측정장치(ASTM E659)를 사용하여 톨루엔과 2-부탄올 계의 AIT를 측정하였다. 이

성분계를 구성하는 톨루엔과 2-부탄올의 AIT를 측정하여 문헌값들과 비교 고찰하였고, 이들의 활성화에너지를 계산하였다. 그리고 톨루엔과 2-부탄올 계의 측정된 AIT를 사용하였으며, 측정된 조성 이외의 조성에서도 AIT를 예측할 수 있는 모델을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 이성분계를 구성하는 톨루엔과 2-부탄올의 AIT는 각각 547°C와 400°C로 측정되었으며, 활성화에너지는 166.38 kJ/mol과 105.02 kJ/mol로 계산되었다.

2) 톨루엔과 2-부탄올 계에 대해 조성 변화에 의한 AIT를 측정한 결과, 톨루엔(0.1)+2-부탄올(0.9) 계에서는 413°C, 톨루엔(0.3)+2-부탄올(0.7) 계에서는 423°C, 톨루엔(0.5)+2-부탄올(0.5) 계에서는 430°C, 톨루엔(0.7)+2-부탄올(0.3) 계에서는 447°C, 톨루엔(0.9)+2-부탄올(0.1) 계에서는 511°C로 측정되었다.

3) 톨루엔과 2-부탄올 계에서 조성 변화에 의한 AIT의 예측식은 다음과 같다.

$$T_{AIT,MAX} = 400.58 + 151.89X_1 - 374.56X_1^2 + 372.06X_1^3$$

여기서  $X_1$ 은 톨루엔의 조성이다.

4) 본 연구에서 제시한 톨루엔과 2-부탄올 계의 AIT 예측식은 다른 조성에서도 AIT의 예측이 가능해 졌다.

## References

- 1) D. A. Crowl and J.F. Louvar, "Chemical Process Safety Fundamentals with Application", 2nd ed., Pearson Education Inc., 2002.
- 2) 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.
- 3) 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.
- 4) D. M. Ha, "Measurement of Autoignition Temperature of Propionic acid and 3-Hexanone System", Fire Science and Engineering, Vol. 28, No. 4, pp. 44-49, 2014.

- 5) I. Goldfrab and A. Zinoviev, "A Study of Delay Spontaneous Insulation Fires", Physics Letter, A 311, pp. 491-500, 2003.
- 6) 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.
- 7) G. E. P. Box and N.R. Draper, "Empirical Model-Building and Response Surface", John-Wiley & Sons, Inc., 1987.
- 8) 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.
- 9) N. N. Semenov, "Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity, Vol. 2", Princeton University Press, Princeton, N.J., 1959.
- 10) 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.
- 11) NFPA, "Fire Hazard Properties of Flammable Liquid, Gases, and Volatile Solids", NFPA 325M, NFPA, 1991.
- 12) A. M. Kanury, "SFPE Handbook of Fire Protection Engineering : Ignition of Liquid Fuels", 2nd ed., SFPE, 1995.
- 13) C. J. Hilado and S. W. Clark, "Autoignition Temperature of Organic Chemicals", Chemical Engineering, Vol. 4, pp.75-80, 1972.
- 14) 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.
- 15) J. L. Jackson, "Spontaneous Ignition Temperature - Commercial Fluids and Pure Hydrocarbons-", Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 43, No. 12, pp.2869-2870, 1951.
- 16) D. Swarts and M. Orchin, "Spontaneous Ignition Temperature of Hydrocarbons", Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 49, No. 3, pp. 432-436, 1957.
- 17) S. Yagyu, "Systematization of Spontaneous Ignition Temperatures of Organic Compounds(1st Report)", Research Report of the Research, Institute of Industrial Safety, RR-26-5, Japan, 1978.