

[Research Paper]

MSDS 개선을 위한 tert-Butylbenzene의 연소특성치의 측정

하동명

세명대학교 보건안전공학과

The Measurement of the Combustible Properties of tert-Butylbenzene for the Improvement of MSDS (Material Safety Data Sheet)

Dong-Myeong Ha

Department of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University

(Received April 18, 2017; Revised May 29, 2017; Accepted June 9, 2017)

요 약

가연성 물질의 다양한 연소 특성 때문에 이들 물질의 안전한 사용, 취급 및 운송을 위해서는 정확한 물질 안전 정보가 필수적이다. 인화점, 연소점, 폭발한계 및 최소자연발화온도(AIT)는 위험한 물질을 취급하는 화학산업과 실험실 등에서 특별한 관심을 필요로 하는 중요한 안전 매개변수이다. 본 연구에서는 화학산업에 중간재로 널리 사용되고 있는 tert-butylbenzene을 선정하였다. tert-Butylbenzene 연소특성치의 신뢰도를 고찰하기 위해서 인화점, 연소점, 최소발화온도를 측정하였고, 폭발한계는 측정된 인화점을 이용하여 계산하였다. Setaflash와 Pensky-Martens 밀폐식 장치에 의한 tert-butylbenzene의 하부인화점은 39 °C와 44 °C로 측정되었으며, Tag와 Cleveland 개방식에서는 51 °C와 54 °C로 측정되었다. 그리고 Tag와 Cleveland에 의한 연소점은 54 °C와 58 °C로 측정되었다. ASTM E659 장치를 사용하여 tert-butylbenzene의 자연발화온도와 발화지연시간을 측정하였고, 그 결과 tert-butylbenzene의 최소자연발화온도(AIT)는 450 °C로 측정되었다. 또한 Setaflash에 의해 측정된 하부인화점 39 °C를 이용한 결과 폭발한계는 0.68 vol%로 계산되었다.

ABSTRACT

Because of the vertical combustion characteristics of combustible substances, accurate substance safety information for their safe use, handling and transportation is essential. The flash point, fire point, explosion limits and autoignition temperature (AIT) are important safety parameters which need special attention in chemical plants and laboratories that handle dangerous materials. In this study, tert-butylbenzene which is widely used as an intermediate material in the chemical industry was selected. For the reliability of the flammable properties of tert-butylbenzene, this study was investigated the explosion limits of tert-butylbenzene in the reference data. The flash points, fire points and AITs by the ignition delay time for tert-butylbenzene were experimented. The lower flash points of tert-butylbenzene by using the Setaflash and Pensky-Martens closed-cup testers measured 39 °C and 44 °C, respectively. The flash points of tert-butylbenzene by using the Tag and Cleveland open cup testers are measured 51 °C and 54 °C. And the fire points of tert-butylbenzene by the Tag and Cleveland open cup testers were 54 °C and 58 °C respectively. The AIT of tert-butylbenzene measured by the ASTM 659E tester was measured as 450 °C. The lower explosion limit of 39 °C which measured by the Setaflash flash point tester was calculated to be 0.68 vol%.

Keywords: tert-Butylbenzene, Safety Information, Reliability of Combustible Properties, Lower Flash Point, Lower Explosion Limit, Autoignition Temperature (AIT)

1. 서 론

화학산업을 비롯해 유해·위험물을 취급하는 사업장과 실험실 등에서 사용하는 물질의 잘못된 안전관리로 인해 화재 및 폭발 그리고 누출 사고가 발생할 수 있다. 특히 화

학물질의 사고 발생 빈도는 낮으나 결과는 중대 재해로 전이되는 경우가 많다. 이러한 사고의 피해를 최소화하기 위해서는 체계적인 안전관리 구축이 이루어져야 하는데 무엇보다 중요한 것은 취급 물질의 정확한 유해·위험성 평가가 선행되어야 하는 것이다. 화학공정의 본질적 방화 및 방폭

설계를 위해서는 물질의 위험특성치인 인화점, 연소점, 폭발한계, 자연발화온도 등에 대한 정확한 자료를 확보해야 한다.^(1,2)

인화점은 가연성물질의 잠재적 위험성을 나타내는 연소 특성으로서 위험물을 취급하는 현장에서 안전 기준을 마련 하는데 중요한 자료이다. 인화점은 가연성액체 표면에 발화원이 존재할 때 인화에 필요한 증기를 발산하는 액체의 최저온도이다. 또한 연소점은 개방계 화재일 때 잠재적 위험성 나타내는 특성치로서, 일반적으로 연소점은 가연성물질에 따라 차이는 있지만 하부인화점 보다 약 5~10 °C 정도 높다. 폭발한계(연소한계)는 하한계와 상한계로 구분하며, 가연성가스 혹은 증기가 존재하는 설비에서 안전 설계에 필요한 중요한 특성치이다. 가연성물질이 독성을 포함하여 폭발한계 측정이 어려운 경우에는 증기압 자료를 이용하여 예측이 가능하다. 자연발화는 가연성기체나 증기가 주위의 공기와 혼합하여 열, 고온표면, 고온가스 등의 발화원에 의해 스스로 타는 산화 현상이다. 그리고 발화원 등에 의해 스스로 발화할 수 있는 최저온도를 그 물질의 최소자연발화온도(autoignition temperature, AIT)로 라고 한다.^(3,4)

본 연구에서 물질보건안전자료(material safety data sheet, MSDS)의 연소특성치의 신뢰도를 살펴보기 위해 tert-butylbenzene을 선정하였다. 이를 선정한 이유는 tert-butylbenzene이 유기물과 염료뿐만 아니라 약품의 중요한 중간체로서 합성에 사용되고 있으며, 특히 특수 용매 등으로 널리 이용되기 때문이다. tert-Butylbenzene은 동의어로 1,1-dimethylbenzene, 2-methyl-2-phenylpropane 그리고 pseudobuthylbenzene이라고 하며, 방향성을 갖는 무색 액체로서 물에는 녹지 않으나, 알코올과 에테르 등에 용해된다.

본 연구에서는 tert-butylbenzene의 화재 및 폭발 특성치인 인화점, 연소점 그리고 AIT에 대해서 ASTM 표준 장치를 이용하여 측정하였고, 측정된 값들을 문헌들에 제시된 값들과 비교하여 신뢰성을 검토하였다. 또한 문헌들에 제시된 tert-butylbenzene의 폭발한계의 타당성을 고찰하기 위해 측정된 인화점을 이용하여 계산된 폭발한계는 문헌 자료들과 비교하였다. 본 실험에서 측정된 인화점, 연소점, AIT 그리고 추산된 폭발한계는 MSDS의 9번 항목에 있는 연소특성치의 최신화에 적용하고, 공정안전의 가이드를 마련에 적용하는데 목적이 있다.

2. tert-Butylbenzene의 연소 특성 평가를 위한 이론적 배경

2.1 tert-Butylbenzene의 물리적 및 연소특성

화학산업에서 중간체로 널리 사용되고 있는 tert-butylbenzene의 물리적 특성치를 정리하여 Table 1에 나타내었다.⁽⁵⁻⁷⁾

우리나라뿐만 아니라 각 국에서는 사업장 근로자의 안전과 보건을 위해서 취급하고 있는 유해·위험물질에 대해

Table 1. Physical Properties of tert-Butylbenzene

Properties	Component	tert-Butylbenzene
CAS Number		98-06-6
Molecular Formula		C ₁₀ H ₁₄
Molecular Weight		134.24
Boiling Point		169.1 °C
Melting Point		-57.6 °C
Vapor Pressure		0.280 kPa(at 25 °C)
Solubility (Water)		29.5 mg/L(at 25 °C)
Critical Temperature		387 °C
Critical Pressure		2.93 Mpa
Vapor Density (Air=1)		4.62
Specipic Gravity (Water=1)		0.8669(at 20 °C)

MSDS를 제공하고 있다. 국내에서는 산업안전보건공단의 물질안전보건자료, 국립환경과학원의 화학물질정보시스템, 국민안전처의 국가위험물질정보시스템 등에서 제공하고 있다. 그러나 국내뿐만 아니라 국외에서도 제공되고 있는 MSDS의 유해·위험성에 대한 정보가 물질에 따라 차이를 보이는 경우가 많다. 그 가운데 연소특성에 대한 정보는 더욱 차이를 보이고 있다.⁽⁸⁾

본 연구에서 선정한 tert-butylbenzene은 산업안전보건법에 의한 공정안전보고서 (PSM)의 제출 대상물질이고, 위험물안전관리법에서는 제4류위험물질의 제2석유류(비수용성액체, 지정수량 1000 L)에 해당되며, 폐기물관리법에 의해 규제를 받는 물질이다. tert-Butylbenzene은 Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS)의 인화성 액체구분되며 Category 3 (인화점 23 °C 이상 60 °C 이하)에 해당되어 있다.⁽⁹⁾

tert-Butylbenzene은 다른 인화성물질과 마찬가지로 인화점이나 그 이상에서 증기를 형성하여 주위 공기와 혼합하여 화재 혹은 폭발할 수 있다. 일반적으로 피해야할 에너지로는 전기적 발화원뿐만 아니라 물리적 발화원인 열, 화염, 고열 등이 있다. 또한 산화제와 같이 보관하지 말아야 한다. tert-Butylbenzene의 증기 비중은 공기의 비중 보다 약 4.6배 정도 크므로 누출을 방지하기 위한 가이드 마련과 방폭 시스템이 필요하다. 소화약제로는 이산화탄소, 폼(Foam), 분말, 물 분무 등을 사용할 수 있다.

2.2 tert-Butylbenzene의 연소특성치 분석

사업장뿐만 아니라 대학 및 연구소의 실험실 등에서 사고를 방지하기 위해서는 사용하고 있는 물질의 위험특성치에 대한 정보를 정확하게 알고 있어야 한다. 대표적인 위험특성치로 인화점, 연소점, 폭발한계 그리고 AIT 등을 들 수 있다.⁽³⁾

Table 2. Comparison of Explosion Limit, Flash Point and AIT of tert-Butylbenzene by Several References

References	Flash Point (°C)	AIT (°C)	LEL-UEL (vol%)
NFPA ⁽¹⁰⁾	60 (OC)	450	0.7*-5.7*
Ignition ⁽¹¹⁾	44	445	0.8-5.6
SAX ⁽¹²⁾	60	450	0.7*-5.7*
Lange ⁽⁵⁾	60(OC)	450	0.7*-5.7*
KOSHA ⁽¹³⁾	44	450	-
Stephenson ⁽¹⁴⁾	34,44,55 (CC), 60 (OC)	-	-
Zabetakis ⁽¹⁵⁾	-	450 (80 s)	-
Jackson ⁽¹⁶⁾	-	477	-
Hilado ⁽¹⁷⁾	-	450	-

* The Value are Measured at 100 °C

인화점은 하부 및 상부인화점으로 나눌 수 있다. 실험 장치로는 밀폐식(Closed-cup, CC)과 개방식(Open cup, OC)이 있다. 밀폐식은 Setaflash와 Pensky-Martens 방식이 사용되며, 개방식은 Tag와 Cleveland 방식 등이 있다. 폭발한계(연소한계)는 하한계(lower explosion limit, LEL)와 상한계(upper explosion limit, UEL)로 구분하며, 측정에 있어 실험 조건 및 재료 등에 따라 영향을 받으므로 문헌들마다 상이한 값들이 제시되고 있는 경우가 많다. AIT 역시 실험 주변의 조건 및 재료의 순도 등에 따라 측정값이 달라지므로 문헌들마다 차이를 보이고 있다.⁽⁴⁾

본 연구에서 선정한 tert-butylbenzene의 화재 및 폭발 특성치를 분석하기 위해서 NFPA와 한국산업안전보건공단의 MSDS를 비롯해 그동안 문헌들에서 제시하고 있는 자료들을 정리하여 Table 2에 나타내었다.^(5,10-17)

문헌들에 따라 tert-butylbenzene의 인화점은 밀폐식에서는 가장 낮은 34 °C와 높은 55 °C로 약 20 °C의 차이를 보이고 있으나, 대부분의 문헌에서는 44 °C로 제시되고 있다. 한편 개방식은 모든 문헌에서 60 °C로 나타나고 있는데 이는 한문헌에서 그대로 인용한 것으로 판단된다.

tert-Butylbenzene의 AIT는 대부분의 문헌에서 450 °C로 제시되어 있는데 이는 하나의 문헌에서 모두 인용된 것으로 판단된다. 또한 tert-butylbenzene의 폭발한계는 NFPA, SAX 그리고 Lange에서 하한계 0.7 vol% (100 °C), 상한계 5.7 vol% (100 °C)를 제시하였고, Ignition에서는 하한계 0.8 vol%, 상한계 5.6 vol%를 제시하고 있다. 따라서 문헌에 따라 차이가 있으므로 고찰이 필요하다. 특히 KOSHA의 MSDS에서는 폭발한계를 제시하지 않고 있으므로 현장의 안전관리에 문제가 발생될 수 있으므로 폭발한계의 고찰은 안전가이드를 마련하는데 무엇보다 중요하다. 사업장에서 널리 사용되고 있는 tert-butylbenzene의 안전한 취급 및 처리를 위해서는 보다 정확한 연소특성 연구가 이루어져야 한다.

3. 실험재료 및 측정장치

3.1 재료

본 연구에서 사용된 tert-butylbenzene (Alfa Aesar, 97%, UK)은 별도의 정제 과정 없이 사용하였다.

3.2 인화점 측정

tert-Butylbenzene의 인화점 측정은 Setaflash (ASTM D3278)와 Pensky-Martens (ASTM D93) 밀폐식 그리고 Tag (ASTM D1310)와 Cleveland (ASTM D92) 개방식을 사용하였다. 여러 문헌들에서 장치의 구조 및 측정 방법을 언급하여 간략히 설명하고자 한다.^(18,19)

Setaflash 장치는 몸체부, 시료컵 장치부 그리고 화염 공급부로 구성되어 있다. Pensky-Martens 장치는 몸체부, Test Cup 장치부, 교반부 그리고 화염 공급부로 구분된다. Tag 장치는 가연성액체의 인화점 및 연소점 측정이 가능하며 시료컵, 승온다이얼, 수조 그리고 화염 발생장치 등으로 구성되어 있다. 또한 Cleveland 장치도 인화점 및 연소점을 측정할 수 있고, 몸체부, 시료컵, 장치부 그리고 화염 공급부로 이루어진다.^(18,19)

각 인화점 장치들의 용기 특성 및 가열방법 그리고 ASTM 기준을 시험방법을 요약하여 Table 3에 나타내었다. 각 장치에 의한 인화점 측정은 3회 혹은 5회를 실시하였다. 3회 동안 동일한 값으로 측정되면 이를 인화점으로 채택하였고, 만일 3회 측정에서 동일한 측정값이 되지 않은 경우는 5회까지 측정하여 3회 이상 동일하게 측정된 값을 채택하였다.

3.3 자연발화온도와 발화지연시간 측정

tert-Butylbenzene의 측정 장치는 ASTM E659를 사용하였으며, 발화지연시간에 의한 자연발화온도 측정을 통해 AIT를 결정하였다. 장치는 크게 로, 온도 조절기, 열전대,

Table 3. Comparison of Several Flash Point Test Methods^(18,19)

Test Methods	Test Vessel Diameter (cm)	Test Vessel Depth (cm)	Test Vessel Volume (ml)	Heating Method	ASTM Designation
Setaflash Closed-cup	5.0	1.0	2 or 4	Sample cup is electrically heated or chilled and sample temperature is kept constant	ASTM D3278
Pensky-Martens Closed-cup	5.085	5.6	100	For ordinary liquids, the temperature of the specimen is increased at 5-6 °C/min	ASTM D93
Tag Open Cup	5.3	5.0	70	The temperature of the specimen is increased at 1±0.25 °C/min.	ASTM D1310
Cleveland Open Cup	6.4	3.4	80	The temperature of the specimen is increased at 5-6 °C/min	ASTM D92

Table 4. Comparison of Estimated Explosion Limits by Experimental Flash and Fire Points for tert-Butylbenzene

Testers	Experimental (°C)		Estimated (LEL) (vol%)	
	Lower Flash Points	Fire Points	by Lower Flash Points	by Fire Points
Setaflash	39	-	0.68	-
Pensky-Martens	44	-	0.91	-
Tag	51	54	1.33	1.56
Cleveland	54	58	1.56	1.92

플라스크, 주사기, 거울, 에어건 등으로 구성되었으며, 실험은 ASTM 규정에 의해 진행하였다.^(18,19)

4. 결과 및 고찰

4.1 tert-Butylbenzene의 인화점, 연소점 측정과 폭발하한계 예측

Table 2에 제시된 tert-Butylbenzene의 폭발하한계에 대한 타당성을 살펴보기 위해서 증기압식인 Antoine 식을 사용하여 폭발하한계를 추산하였다.⁽²⁰⁾

$$\log P^f = 6.92255 - \frac{1505.987}{(t + 203.49)} \quad (1)$$

여기서, P^f 는 증기압(mmHg)이고, t 는 온도(°C)이다.

본 연구에서는 Setaflash와 Pensky-Martens의 밀폐식(CC), Tag와 Cleveland의 개방식(OC)에 의해 측정된 하부인화점과 연소점을 이용하여 계산된 폭발하한계를 예측하였고 Table 4에 나타내었다.

tert-Butylbenzene의 밀폐식인 Setaflash는 39 °C, Pensky-Martens는 44 °C 그리고 개방식인 Tag는 51 °C 그리고 Cleveland에서는 54 °C로 측정되었다. 본 연구에서 Setaflash 장치에 의해 측정된 하부인화점 39 °C는 Table 2에 제시된 인화점 가운데 Stephenson이 제시한 34 °C보다는 5 °C 높게 측정되었으나, KOSHA, MSDS를 비롯해 대부분 문헌에서

제시된 밀폐식 인화점 44 °C보다는 5 °C 낮게 측정되었다. 그리고 본 연구에서 개방식인 Tag의 51 °C는 NFPA, Lange 그리고 Stephenson의 60 °C 보다는 9 °C 정도 낮게 측정되었다. 또한 Tag와 Cleveland에서 측정된 연소점은 각각 54 °C와 58 °C로 측정되었다.

Setaflash에 의해 측정된 하부인화점 39 °C를 식 (1)에 대입한 결과 폭발하한계는 0.68 vol%로 계산되었다. 추산된 폭발하한계 0.68 vol%는 NFPA, SAX 그리고 Lange에서 제시한 100 °C의 0.7 vol%와 비슷한 결과를 보이고 있으며, Tag와 Cleveland에서 측정된 연소점의 폭발하한계는 각각 1.56 vol%와 1.92 vol%로 계산되었다.

NFPA, SAX 그리고 Lange에서 제시한 100 °C의 0.7 vol%를 폭발하한계 온도의존식을 적용하여 25 °C일때의 폭발하한계를 계산할 필요가 있어서 Zabetakis 등이 제시한 탄화수소의 폭발하한계 온도의존식인 식 (2)를 사용하였다.⁽²¹⁾

$$L_i(t) = L_{25}[1 - 7.21 \times 10^{-4}(t - 25)] \quad (2)$$

식 (2)에 NFPA 등이 제시한 100 °C의 0.7 vol%를 적용한 결과 25 °C일 때는 0.74 vol%로 계산되었다.

본 실험에서 측정된 인화점과 측정된 인화점을 이용하여 추산된 폭발하한계를 공정 안전에 적용이 가능하며, 또한 제시한 방법론은 폭발하한계 예측 연구의 도움을 줄 것으로 본다. 그리고 측정된 연소점은 이를 취급하는 개방계 공정에서 방호 자료로 이용될 수 있다.

Table 5. Comparison of Experimental and Calculated Ignition Delay Time by the AIT for tert-Butylbenzene

No.	T [K]	$\tau_{exp.}$ [s]	$\ln\tau_{exp.}$	$\tau_{est.}$ (Eq. 3)
1	723	137.41	4.92297	83.74
2	733	57.19	4.04638	56.46
3	743	37.38	3.62114	38.48
4	753	21.75	3.07961	26.49
5	763	13.84	2.62756	18.41
6	773	10.12	2.31451	12.92
7	783	7.78	2.05156	9.15
8	793	6.53	1.87641	6.54
9	813	4.00	1.38629	3.42
10	833	2.22	0.79751	1.85
11	843	1.47	0.38526	1.37
AAE	-	-	-	6.37

4.2 tert-Butylbenzene의 발화온도와 발화시간 그리고 최소자연발화온도 측정

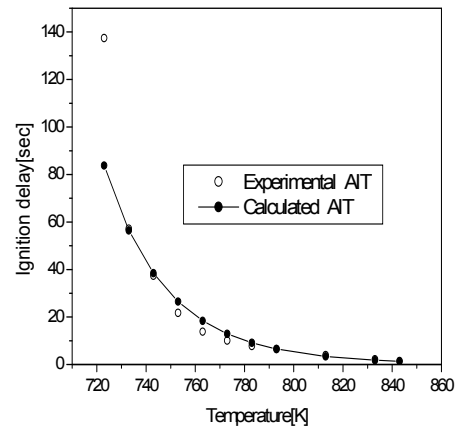
Table 2의 제시된 문헌들 가운데 tert-butylbenzene의 AIT가 가장 낮은 445 °C를 근거로 400 °C에서 실험하였으나 비발화되어 다시 30 °C 높인 430 °C에서 실험한 결과 역시 비발화가 되었다. 다시 30 °C를 상승시켜 460 °C에서 실험한 결과 57.19 s에서 발화되었다. 다시 20 °C 낮춘 440 °C에서는 비발화되어 1~2 °C 높여서 실험한 결과 445 °C와 449 °C에서도 비발화 되었으며 450 °C, 137.41s에서 AIT를 찾을 수 있었다.

AIT 450 °C를 근거로 10~20 °C 상승시켜 실험한 결과 470 °C에서는 37.38 s, 480 °C에서는 21.75 s, 490 °C에서는 13.84 s, 500 °C에서는 10.12 s, 510 °C에서는 7.78 s, 520 °C에서는 6.538 s, 540 °C에서는 4.08 s, 560 °C에서는 2.22 s 그리고 570 °C에서는 1.47 s에서 발화하였다. tert-Butylbenzene의 측정된 발화온도와 발화지연 시간을 Table 5에 나타내었다.

본 연구에서 측정된 tert-butylbenzene의 AIT 450 °C는 Table 2에 제시된 기존의 문헌값들 가운데 가장 낮은 값인 Ignition의 445 °C보다는 5 °C 높게 측정되었으나, Jackson 보다는 27 °C 낮게 측정되었으며, 대부분의 문헌에서 제시된 450 °C와 같은 결과를 얻었다. 그러나 발화지연시간에서 Zabetakis가 제시한 80 s 보다는 늦은 137 s에서 발화되었다. 이는 방화 설계에 활용이 가능하다고 본다. 또한 tert-butylbenzene을 취급하고 처리하는 공정에서는 AIT를 약 450 °C로 적용하는 것이 방호시스템 구축에 타당하다고 본다.

tert-Butylbenzene의 발화온도와 발화지연시간의 실험 자료를 이용하여 회귀분석에 의한 최적화된 선형식은 다음과 같다.

$$\ln\tau = -24.47 + 20896.5 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (3)$$

**Figure 1.** A comparison between the experimental and calculated delay times of tert-Butylbenzene.

식 (3)을 $\log\tau$ 와 $\left(\frac{1}{T}\right)$ 로 다시 계산하면 다음과 같다.

$$\log\tau = -10.63 + 9075.25 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (4)$$

본 연구에서 측정된 발화지연시간과 식 (4)에 의한 계산된 발화지연시간들을 비교하여 Table 5와 Figure 1에 나타내었다.

추산값과 측정값의 차이 정도는 평균절대오차(average absolute error, AAE)와 결정계수(r^2)를 사용하였다.^(3,4)

$$AAE = \sum \frac{|\tau_{est.} - \tau_{exp.}|}{N} \quad (5)$$

$$r^2 = \left(\frac{SSR}{SST} \right) \quad (6)$$

여기서 $\tau_{est.}$ 는 계산된 발화지연시간이고, $\tau_{exp.}$ 는 측정된 발화지연시간이며, N은 자료수, r^2 은 결정계수이다. 그리고 결정계수 계산을 위한 SSR은 회귀에 의한 제곱합(sum of squares due to regression), SST는 SSR과 잔차에 의한 제곱합(sum of squares due to residual error)의 합이다.^(3,4)

식 (4)에 의한 예측값과 실험값의 AAE는 6.37 s, 결정계수 (r^2)는 0.82로서 측정값과 계산값과 모사성이 있으나, 다른 가연성물질에 비해 결정계수값이 약간 작은 것은 AIT의 발화 시간이 긴 것으로 사료된다.

식 (4)를 이용하여 활성화에너지 (E)는 화재 및 폭발 분야에서 많이 적용하는 Semenov가 제시한 식 (7)을 사용하였다.⁽²²⁾

$$\log\tau = \frac{52.55E}{T} + B \quad (7)$$

본 연구에서 얻은 식 (3)을 식 (6)에 적용한 결과 활성화 에너지는 172.7 kJ/mol로 계산되었다.

5. 결 론

본 연구에서는 유기화학의 중간원료로 널리 사용되고 있는 tert-butylbenzene의 안전한 취급과 처리를 위해서 인화점, 연소점 그리고 최소자연발화온도(AIT)를 측정하여 기존 문헌값들과 비교하였으며, 측정된 하부인화점과 연소점을 이용하여 폭발하한계를 계산하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 밀폐식 인화점 측정 장치인 Setaflash는 39 °C, Pensky-Marten은 44 °C, 개방식 장치인 Tag는 51 °C 그리고 Cleveland는 58 °C로 측정되었다.

2) Tag에 의한 연소점은 54 °C 그리고 Cleveland의 연소점은 58 °C로 측정되었다.

3) Setaflash 장치에 의한 하부인화점 39 °C를 이용하여 예측된 폭발하한계는 0.68 vol%로서, 기존의 문헌값인 0.74 vol% 보다는 약 0.06 vol% 낮게 계산되었다.

4) tert-Butylbenzene의 최소자연발화온도는 137.41 s에서 450 °C로 측정되었으며, 기존의 문헌들과 같은 결과를 얻었다.

5) tert-Butylbenzene의 자연발화온도와 발화지연시간은 다음과 같이 최적화가 되었다.

$$\ln \tau = -24.47 + 20896.5 \left(\frac{1}{T} \right) t$$

6) Semenov식을 이용한 tert-butylbenzene의 활성화에너지(E)는 172.7 kJ/mol로 계산되었다.

7) 본 연구에서 측정된 인화점과, 최소자연발화온도 그리고 계산된 폭발하한계는 MSDS의 9번 항목에 있는 연소특성치의 최신화에 적용되기를 기대한다.

References

1. F. P. Lees, "Loss Prevention in the Process Industries", Vol. 2, 2nd ed., Butterworth-Heinemann (1996).
2. M. J. Yoo, J. Y. Moon, J. B. Kim and Y. W. Hwang, "Chemical Flow Analysis of Hydrogen Fluoride (Hydrofluoric Acid) in the Korean Chemical Industry", Korean Journal of Hazardous Materials, Vol. 4, No. 1, pp. 25-34 (2016).
3. D. M. Ha, "The Measurement and Prediction of Fire and Explosion Properties of n-Nonane", Journal of the Korean Society Safety, Vol. 31, No. 4, pp. 42-48 (2016).
4. D. M. Ha, "A Study on the Reliability of the Combustible Properties for Acrylic Acid", Journal of Energy Engineering, Vol. 24, No. 3, pp. 22-26 (2015).
5. J. A. Dean, "Lange's Handbook of Chemistry", 14th ed., McGraw-Hill (1992).
6. R. C. Reid, J. M. Prausnitz and B. E. Poling, "The Properties of Gases and Liquid", 4th ed., McGraw-Hill (1987).
7. D. R. Lide, "Handbook Chemistry and Physics", 76th ed., CRC Press (1996).
8. D. M. Ha, "The Measurement and Prediction of the Combustible Properties of Benzyl-Alcohol for MSDS (Material Safety Data Sheet)", Korean Chem. Eng. Res., Vol. 55, No. 2, pp. 190-194 (2017).
9. United Nations, "Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals" (2016).
10. NFPA, "Fire Hazard Properties of Flammable Liquid, Gases, and Volatile Solids", NFPA 325M, National Fire Protection Association (1991).
11. V. Babrauskas, "Ignition Handbook", Fire Science Publishers, Society of Fire Protection Engineers (2003).
12. R. J. Lewis, "SAX's Dangerous Properties of Industrial Materials", 11th ed., John Wiley & Son, Inc., New Jersey (2004).
13. KOSHA, www.kosha.or.kr/msds/msdsMain.do?menuId=69.
14. S. M. Stephenson, "Flash Points of Organic and Organometallic Compounds", Elsevier (1987).
15. 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).
16. J. L. Jackson, "Spontaneous Ignition Temperature-Commercial Liquids and Pure Hydrocarbons-", Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 43, No. 12, pp. 2869-2870 (1951).
17. C. J. Hilado and S. W. Clark, "Autoignition Temperature of Organic Chemicals", Chemical Engineering, Vol. 4, pp. 75-80 (1972).
18. D. M. Ha, "The Study on Measurement and Prediction of the Combustible Properties for Aniline", Journal of the Korean Institute of Gas, Vol. 18, No. 4, pp. 44-50 (2014).
19. D. M. Ha, "The Measurement of Fire and Explosion Properties of n-Hexadecane", Journal of the Korean Society Safety, Vol. 29, No. 3, pp. 39-45 (2014).
20. R. C. Reid, J. M. Prausnitz and T. K. Sherwood, "The Properties of Gases and Liquid", 3th ed., McGraw-Hill (1977).
21. G. M. Zabetakis, "Flammability Characteristics of Combustible Gases and Vapors", US Bureau of Mines, Bulletin (1965).
22. N. N. Semenov, "Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity, Vol. 2", Princeton University Press, Princeton, N. J. (1959).