

[Research Paper]

n-Pentanol과 p-Xylene 혼합물의 최소자연발화온도와 발화지연시간의 측정 및 예측

하동명

세명대학교 보건안전공학과

Measurement and Prediction of Autoignition Temperature (AIT) and Ignition Delay Time of n-Pentanol and p-Xylene Mixture

Dong-Myeong Ha

Department of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University

(Received September 5, 2017; Revised September 28, 2017; Accepted October 1, 2017)

요 약

가연성물질의 화재 및 폭발 특성치는 안전한 취급, 저장, 수송, 처리 및 폐기하는데 반드시 필요하다. 공정 안전을 위한 대표적인 연소특성치로 최소자연발화온도(AIT)를 들 수 있다. 최소자연발화온도는 가연성 액체의 안전한 취급을 위해서 중요한 지표가 된다. 최소자연발화온도는 가연성물질이 주위의 열에 의해 스스로 발화하는 최저온도이다. 본 연구에서는 ASTM E659 장치를 이용하여 가연성 혼합물인 n-Pentanol과 p-Xylene 혼합물의 최소자연발화온도와 발화지연시간을 측정하였다. 2성분계를 구성하는 순수물질인 n-Pentanol과 p-Xylene의 최소자연발화온도는 각각 285 °C, 557 °C로 측정되었다. 그리고 측정된 n-Pentanol과 p-Xylene 혼합물의 최소자연발화온도와 AIT에서의 발화지연시간의 실험값은 제시된 식에 의한 계산값과 적은 평균절대오차에서 일치하였다. 따라서 본 연구에서 제시한 예측식들을 이용하여 n-Pentanol과 p-Xylene 혼합물의 다른 조성에서도 최소자연발화온도와 발화지연시간을 예측이 가능하다.

ABSTRACT

The fire and explosion properties of combustible materials are necessary for the safe handling, storage, transportation and disposal. Typical combustion characteristics for process safety include auto ignition temperature(AIT). The AIT is an important index for the safe handling of combustible liquids. The AIT is the lowest temperature at which the material will spontaneously ignite. In this study, the AITs and ignition delay times of n-pentanol and p-xylene mixture were measured by using ASTM E659 apparatus. The AITs of n-pentanol and p-xylene which constituted binary system were 285 °C and 557 °C, respectively. The experimental AITs and ignition delay times of n-pentanol and p-xylene mixture were a good agreement with the calculated AITs and ignition delay times by the proposed equations with a few A.A.D. (average absolute deviation). Therefore, it is possible to estimate the AITs and ignition delay times in other compositions of n-pentanol and p-xylene mixture by using the predictive equations which presented in this study.

Keywords : Fire and Explosion Properties, AIT (Autoignition temperature), Ignition Delay Time, ASTM E659, n-Pentanol and p-Xylene Mixture

1. 서 론

화학 사고를 보면 화학 및 반도체 산업을 비롯해 대학의 실험실 등에서 사용하는 물질에 대한 정확한 화재 및 폭발 특성치를 파악하지 못해서 재해가 발생하는 경우가 허다하다. 따라서 산업현장에서 취급하는 가연성물질들의 정확한 연소특성치를 적용하는 하는 것은 사고 예방에서 가장 중

요한 부분이다. 가연성물질의 대표적인 연소특성으로 최소 자연발화온도(autoignition temperature, AIT)를 들 수 있다.^(1,2)

연소이론에서 자연발화는 인화성액체가 높은 온도에서 증기로 발생되고 이 증기가 주위 공기와 혼합되어 주위에 열에너지가 주어졌을 때 스스로 타는 산화 현상이다. AIT는 자연발화 가운데 스스로 점화할 수 있는 액체의 최저온도로서, 동일한 물질에서도 실험조건에 따라 측정값이 달

라지므로 문헌에 따라 다른 AIT가 제시되는 경우가 있다.⁽³⁾

최근 순수물질의 AIT연구로 Chen 등은 18개의 가연성액체의 AIT에 대해 4개 문헌들과 비교한 연구를 하였으며, 그 결과 Acetaldehyde는 문헌에 따라 AIT가 약 300 K 이상의 차이가 있음을 확인하였다.⁽⁴⁾ Peper 등은 메탄올을 비롯해 4개 물질의 AIT를 여러 문헌과 비교한 결과 메탄올은 80 K 그리고 Hexadecanoic Acid는 170 K 이상의 차이가 있음을 보고하였다.⁽⁵⁾ 따라서 몇 개의 사례 연구를 보아도 혼합물질의 AIT를 연구하기 위해서는 순수물질의 AIT 연구가 정확하게 반드시 선행되어야 한다.

최근 가연성 혼합물의 AIT의 온도 측정과 예측 연구가 활발히 이루어지고 있다. Ha는 n-Butanol과 p-Xylene 혼합물의 AIT 실험적 연구를 통해 혼합물의 AIT의 예측 방법론을 제시하였고,⁽⁶⁾ 또한 n-Propanol과 Acetic Acid 계의 AIT 연구에서는 순수성분인 n-Propanol의 AIT 435 °C 보다 낮은 AIT의 거동을 연구하였다.⁽⁷⁾ 또한 Zhang 등은 n-Heptane과 n-Butanol 계 3개의 조성에 대해 자연발화온도의 실험과 예측 모델을 제시하였다.⁽⁸⁾

본 연구에서는 화학제품의 중간재료로 자주 이용되고 있는 n-Pentanol과 p-Xylene의 가연성 혼합물을 선정하였다. 본 혼합물 가운데 n-Pentanol은 향료, 의약품 그리고 가소제 제조 등에 사용되고 있다.⁽⁹⁾ 그리고 p-Xylene은 고무와 가죽산업을 비롯해 합성고분자 등의 중요한 원료로 사용되고 있다.⁽¹⁰⁾ n-Pentanol과 p-Xylene의 순수물질 자체로도 널리 사용될 뿐만 아니라 이들 혼합물은 다양한 화학산업의 중간 제품으로 널리 사용되고 있다. 따라서 n-Pentanol과 p-Xylene 계를 사용하고 있는 공정에서 안전한 취급, 저장, 수송 및 폐기하기 위해서는 계를 구성하는 순수물질과 혼합물의 AIT의 연구가 반드시 필요하다.

본 연구에서는 ASTM E659 (Koehler사) 장치를 이용하여 n-Pentanol과 p-Xylene 계의 5개 혼합 조성에서 자연발화온도와 발화지연시간을 측정하였다. 실험에서 얻은 자료를 이용하여 다른 조성에서도 AIT와 AIT에서의 발화지연시간을 예측할 수 있는 모델을 제시하였다. 제시된 실험 자료와 방법론은 이를 취급하는 공정에서 안전을 확보할 수 있는 자료로 활용하고, 다른 가연성 혼합물의 자연발화온도와 발화지연시간의 연구에도 도움을 주는데 목적이 있다.

2. 자연발화온도와 발화시간 예측을 위한 이론적 배경

2.1 열발화이론에 의한 초기온도와 발화지연시간의 관계

인화성물질이 공기와 산소 등과 반응했을 때 발열반응인 경우 반응에 의한 자체발열과 열전달에 의한 외부 방열을 비교함으로써 계의 열적인 균형을 설명하는 이론이 열발화이론(theory of thermal explosion)이다. 발열과 방열의 관계를 정상상태라고 가정하여 발화현상을 고찰한 것이

Semenov이론이며, 다른 하나는 반응물질의 유동이 없는 경우, 방열은 물질내의 열전도에 따른다는 것이 Frank-Kamenetskii 이론이다.^(9,11)

계에서 인화성물질의 발화지연은 열 발생과 열 손실 사이에서 일어나는 현상으로 발화지연시간과 발화온도의 관계를 유도할 수 있다. 일반적으로 실험에서 측정된 값들은 발화지연시간 $\ln t$ 와 초기온도($1/T_0$)의 관계를 선형적으로 나타낼 수 있다. 이는 초기온도가 상승할수록 발화지연시간이 짧아지므로 다음과 같이 표현될 수 있다.^(9,11)

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

실험에서 발화지연시간과 발화온도를 얻을 수 있다면 회귀분석의 최소자승법(Least Square Method)을 이용하면 식 (1)의 계수 a와 b를 결정할 수 있다.

2.2 발화온도에 의한 발화지연시간 및 활성화에너지의 계산

본 연구에서는 실험에서 측정된 자연발화온도와 발화지연시간의 관계를 고찰하기 위해서 특정초기온도에 의한 자연발화시간을 예측하기 위해 다음과 같은 식을 사용하였다.⁽¹²⁾

$$\ln \tau = A + \left(\frac{E}{RT} \right) \left(A + B \left(\frac{1}{T} \right) \right) \quad (2)$$

여기서 τ 는 자연발화지연시간, T 는 발화온도[K], R 은 기체상수, E 는 활성화에너지 그리고 A 와 B 는 계수이다.

식 (2)에 의해 E 를 계산할 수 있으며, 본 연구에서는 Semenov가 제시한 식을 이용하였고, 식은 다음과 같다.⁽¹³⁾

$$\log \tau = \frac{52.55E}{T} + B \quad (3)$$

2.3 회귀분석을 이용한 혼합 조성에 의한 최소자연발화온도 예측 모델

본 연구에서는 실험에서 얻은 두 개의 순수물질^(9,10)과 혼합물의 조성 5개의 AIT를 이용하여 혼합물의 다른 조성에서도 AIT를 예측할 수 있는 모델을 찾고자 다중회귀분석을 사용하였다. 다중회귀분석은 변수들간의 함수적인 관련성을 규명하기 위해 어떤 수학적 모델(model)을 가정하고, 측정된 독립변수와 종속변수들의 자료로부터 추정하는 통계적 분석 방법이다.^(6,14)

본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과, 혼합 조성과 AIT는 서로 상관관계가 있어서, 조성 변화에 따른 AIT를 예측 할 수 있는 모델을 식(4)에서 (6)에 제시하였다.⁽⁶⁾

$$T_{AIT, MIX} = a + bX_1 + cX_1^2 \quad (\text{or} \quad T_{AIT, MIX} = aX_1 + bX_2 + cX_1X_2) \quad (4)$$

$$T_{AIT,MIX} = a + bX_1 + cX_1^2 + dX_1^3 \quad (5)$$

$$T_{AIT,MIX} = a + bX_1 + cX_1^2 + dX_1^3 + eX_1^4 \quad (6)$$

2.4 혼합 조성에 의한 발화지연 시간의 관계

본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과, 혼합 조성에서 AIT의 발화지연시간(ignition delay)은 서로 상관관계가 있음을 알 수 있어, 조성 변화에 의한 발화지연시간을 예측할 수 있는 모델 역시 다음과 같이 제시하였다.

$$\tau_{MIX} = a + bX_1 + cX_1^2 \quad (\text{or } \tau_{AIT,MIX} = aX_1 + bX_2 + cX_1X_2) \quad (7)$$

$$\tau_{MIX} = a + bX_1 + cX_1^2 + dX_1^3 \quad (8)$$

2.5 실험값과 계산값의 비교

AIT와 발화지연시간의 최적화 모델을 찾기 위해서 절대 평균오차(A.A.D.)와 결정계수(r^2)를 사용하였다.^(5,7,15,16)

$$A.A.D. = \sum \frac{|AIT_{est.} - AIT_{exp.}|}{N} \quad (9)$$

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

$$r^2 = \left(\frac{SSR}{SST} \right) \quad (11)$$

여기서 $AIT_{est.}$ 는 예측된 최소자연발화온도, $AIT_{exp.}$ 는 실험의 최소자연발화온도, $\tau_{est.}$ 는 예측된 발화지연시간, $\tau_{exp.}$ 는 실험의 발화지연시간이다. N은 자료수, r^2 은 결정계수, SSR은 회귀에 의한 제곱합(sum of squares due to regression) 그리고 SST는 SSR과 잔차에 의한 제곱합(sum of squares due to residual error)의 합이다.^(7,15)

3. 최소자연발화온도 실험 재료 및 방법

3.1 실험 재료

본 실험에 사용된 시약 가운데 n-Pentanol은 Acros (USA), p-Xylene은 Lancaster (USA)로서 각 각 순도는 99%이며, 5개의 혼합 조성의 AIT를 측정하기 위해 각 순수물질을 다른 몰비(mole fraction)로 혼합하여 시료로 사용하였다.

3.2 장치 및 측정 방법

n-Pentanol과 p-Xylene 계의 AIT뿐만 아니라 발화지연시간에 의한 자연발화온도를 측정하기 위해서 ASTM E659 (Koehler 사)를 사용하였다. 본 장치는 온도조절기, 열전대, 플라스크, 거울 등으로 구성되어 있다. 실험방법은 혼합물을 구성하는 물질들 가운데 가장 낮은 물질의 AIT를 근거로 하였다.

설정 온도에 도달하면 플라스크 내부에 주사기로 시료

를 0.1 ml를 넣는다. 10분 동안 관찰 후 발화가 일어나지 않으면 다시 온도를 설정하고 시료를 넣은 후 10분 내에 발화가 일어나면, 측정된 발화온도 보다 30 °C 낮게 설정하고, 1~2 °C씩 증가시키면서 AIT를 찾은 후 이를 근거로 5~10 °C씩 증가시켜 발화온도와 시간을 기록한다.^(6,7)

4. 결과 및 고찰

4.1 순수물질의 최소자연발화온도

4.1.1 n-Pentanol의 최소자연발화온도

n-Pentanol의 AIT는 대부분의 문헌에서 300 °C로 제시되고 있어 이를 근거로 하여 250 °C에서 실험한 결과 비발화되어 다시 30 °C 상승시켜 280 °C에서 실험한 결과 역시 비발화되었다. 다시 30 °C 상승시켜 310 °C에서 측정한 결과 33.77 s에서 발화가 되어 온도를 1~2 °C 계속 낮추어서 실험한 결과 285 °C, 187.95s에서 AIT를 찾았다.⁽⁹⁾ 발화지연시간과 발화온도의 관계는 다음과 같이 최적화 되었다.

$$\log \tau = -11.02 + 7356.3 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (12)$$

4.1.2 p-Xylene의 최소자연발화온도

본 실험에서는 p-Xylene의 AIT를 측정하기 위해 기존 문헌들에 제시된 Xylene 이성질체의 AIT를 근거로 550 °C에서 실험한 결과 비발화되어, 다시 30 °C상승시킨 580 °C에서 실험한 결과 20.99 s에서 발화되었다. AIT를 찾기 위해 20 °C 낮춘 560 °C에서 측정하였을 때 29.86 s에서 발화되어 5 °C도 낮춘 555 °C에서 실험을 하였으나 비발화되어 1~2 °C상승시킨 결과 557 °C, 33.57 s에서 AIT를 찾았다.⁽¹⁰⁾ 발화지연시간과 발화온도의 관계는 다음과 같이 최적화 되었다.

$$\log \tau = -8.78 + 8546.07 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (13)$$

4.2 n-Pentanol과 p-Xylene 계의 자연발화온도와 발화지연시간

4.2.1 n-Pentanol (0.9)+p-Xylene (0.1) 계의 자연발화온도와 발화지연시간

실험에서 얻은 n-Pentanol의 AIT 285 °C를 근거로⁽⁹⁾ 250 °C에서 실험한 결과 비발화가 되어, 30 °C 상승시킨 280 °C에서도 비발화되었다. 다시 30 °C 올린 310 °C에서 실험한 결과 21.65 s에서 발화되어 10 °C 내린 300 °C에서는 34.00 s에서 발화되었다. 다시 1~2 °C 낮추면서 실험한 결과 295 °C, 37.88 s에서 AIT를 찾았다. AIT 295 °C를 기준으로 5 °C 혹은 10 °C씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 320 °C에서는 13.83 s, 330 °C에서는 8.34 s, 350 °C에서는 5.28 s, 360

℃에서는 4.37 s, 370 ℃에서는 3.03 s, 380 ℃에서는 2.82 s, 390 ℃에서는 2.19 s, 400 ℃에서는 2.00 s, 그리고 410 ℃에서는 1.53 s에 발화하였다.

4.2.2 n-Pentanol (0.7)+p-Xylene (0.3) 계의 자연발화온도와 발화지연시간

n-Pentanol (0.9)+p-Xylene (0.1) 계의 AIT 295 ℃를 근거로, 290 ℃에서 실험한 결과 비발화되어, 10 ℃ 상승시킨 300 ℃에서도 비발화되었다. 다시 1~2 ℃ 씩 상승시켜 실험한 결과 306 ℃, 22.59 s에서 AIT를 찾았다. AIT 306 ℃를 기준으로 5 ℃ 혹은 10 ℃씩 상승시켜 발화온도를 측정한다. 결과, 310 ℃에서는 13.31 s, 320 ℃에서는 10.09 s, 330 ℃에서는 8.49 s, 340 ℃에서는 7.91 s, 350 ℃에서는 5.93 s, 360 ℃에서는 5.11 s, 370 ℃에서는 4.27 s, 380 ℃에서는 3.10 s, 390 ℃에서는 2.92 s, 400 ℃에서는 2.10 s 그리고 410 ℃에서는 1.62 s에 발화하였다.

4.2.3 n-Pentanol (0.5)+p-Xylene (0.5) 계의 자연발화온도와 발화지연시간

n-Pentanol (0.7)+p-Xylene (0.3) 계의 AIT 306 ℃를 근거로, 310 ℃에서 실험한 결과 비발화되어, 10 ℃ 상승시킨 320 ℃에서도 비발화되었다. 다시 10 ℃ 상승시킨 330 ℃에서는 13.11 s에 발화되어 1~2 ℃ 씩 낮추어서 실험한 결과 326 ℃, 15.84 s에서 AIT를 찾았다. AIT 326 ℃를 기준으로 5 ℃ 혹은 10 ℃씩 상승시켜 발화온도를 측정한다. 결과, 340 ℃에서는 9.78 s, 350 ℃에서는 8.06 s, 360 ℃에서는 7.21 s, 370 ℃에서는 5.94 s, 380 ℃에서는 5.62 s, 390 ℃에서는 4.88 s, 400 ℃에서는 4.52 s, 420 ℃에서는 4.00 s, 440 ℃에서는 3.19 s, 460 ℃에서는 2.75 s, 480 ℃에서는 2.53 s, 500 ℃에서는 2.28 s 그리고 510 ℃에서는 1.62 s에 발화하였다.

4.2.4 n-Pentanol(0.3)+p-Xylene(0.7) 계의 자연발화온도와 발화지연시간

n-Pentanol(0.5)+p-Xylene(0.5) 계의 AIT 326 ℃를 근거로, 330 ℃에서 실험한 결과 비발화되어, 30 ℃ 상승시킨 360 ℃에서도 비발화되었다. 다시 30 ℃ 상승시킨 390 ℃에서도 비발화되어 계속 30 ℃ 상승시킨 결과 450 ℃에서 19.47

s에서 발화되어 1~2 ℃ 씩 낮추어서 실험한 결과 446 ℃, 24.94 s에서 AIT를 찾았다. AIT 446 ℃를 기준으로 5 ℃ 혹은 10 ℃씩 상승시켜 발화온도를 측정한다. 결과, 460 ℃에서는 19.32 s, 470 ℃에서는 13.34 s, 480 ℃에서는 10.81 s, 490 ℃에서는 8.22 s, 500 ℃에서는 7.11 s, 510 ℃에서는 4.94 s, 520 ℃에서는 4.12 s, 530 ℃에서는 3.38 s, 540 ℃에서는 2.74 s, 550 ℃에서는 2.18 s 그리고 560 ℃에서는 1.88 s에 발화하였다

4.2.5 n-Pentanol(0.1)+p-Xylene(0.9) 계의 자연발화온도와 발화지연시간

n-Pentanol(0.3)+p-Xylene(0.7) 계의 AIT 446 ℃를 근거로, 450 ℃에서 실험한 결과 비발화되어, 30 ℃ 상승시킨 480 ℃에서도 비발화되었다. 다시 30 ℃ 상승시킨 510 ℃에서도 역시 비발화되어 다시 5 ℃ 상승시켜 실험하였으나 비발화되었다. 1~2 ℃ 씩 상승시켜 실험한 결과 520 ℃, 34.19 s에서 AIT를 찾았다. AIT 520 ℃를 기준으로 5 ℃ 혹은 10 ℃씩 상승시켜 발화온도를 측정한다. 결과, 540 ℃에서는 17.47 s, 560 ℃에서는 11.62 s, 580 ℃에서는 7.76 s, 600 ℃에서는 4.97 s, 620 ℃에서는 2.23 s 그리고 630 ℃에서는 1.73 s에 발화하였다

4.2.6 n-Pentanol과 p-Xylene 계의 AIT 예측

본 연구에서 얻은 혼합조성에서의 AIT를 고찰한 결과 p-Xylene의 조성이 클수록 AIT가 증가하는 경향을 나타내고 있다. 따라서 n-Pentanol과 p-Xylene 계의 혼합 조성에 의한 AIT를 예측이 가능할 것으로 판단되어 앞서 제시한 식 (4)와 (6)의 모델을 회귀분석에 의해 최적화한 결과 다음과 같은 예측식을 얻었다.

$$T_{AIT,MAX} = 286.15 - 15.40X_1 + 298.07X_1^2 \quad (14)$$

$$T_{AIT,MAX} = 293.95 - 185.11X_1 + 760.38X_1^2 - 308.19X_1^3 \quad (15)$$

$$T_{AIT,MAX} = 285.03 - 212.44X_1 - 1289X_1^2 + 2996X_1^3 - 1651.5X_1^4 \quad (16)$$

여기서 X_1 은 p-Xylene이다.

Table 1. Experimental and Predicted AITs of n-Pentanol and p-Xylene System

Mole Fractions		AITs (°C)			
X_1	X_2	Exp.	Eqn. (14)	Eqn. (15)	Eqn. (16)
1	0	285	286	293	285
0.9	0.1	295	288	283	296
0.7	0.3	306	308	299	300
0.5	0.5	326	353	353	340
0.3	0.7	446	421	431	433
0.1	0.9	520	514	519	532
0	1	557	569	561	552
A.A.D.		-	11.79	11.41	7.82

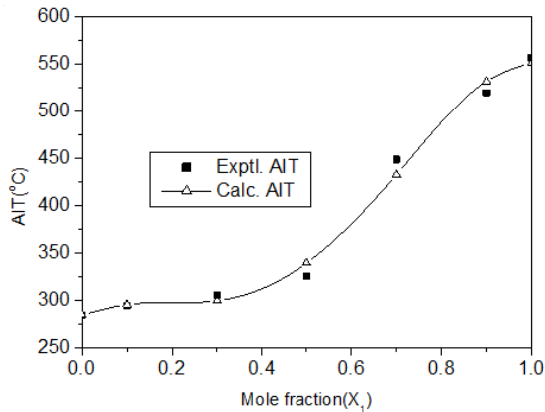


Figure 1. Comparison of AIT prediction curves with experimental data for n-pentanol and p-xylene system.

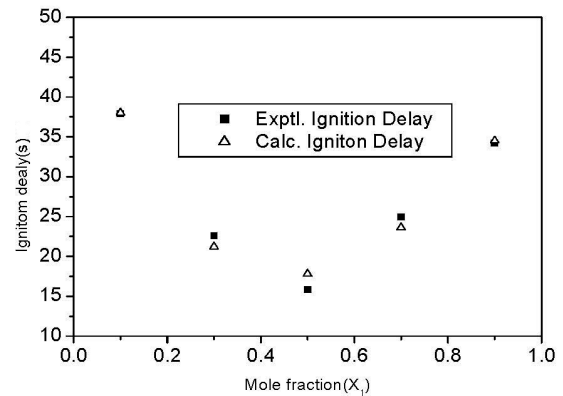


Figure 2. Comparison between experimental and calculated ignition delay of n-pentanol and p-xylene system.

Table 2. Experimental and Predicted Ignition Delay of n-Pentanol and p-Xylene System

Mole Fractions		Ignition Delay {s}		
X ₁	X ₂	Exp.	Eqn. (17)	Eqn. (18)
1	0	-	-	-
0.9	0.1	37.88	37.37	38.02
0.7	0.3	22.59	22.95	21.23
0.5	0.5	15.84	17.81	17.81
0.3	0.7	24.94	21.95	23.62
0.1	0.9	34.19	35.34	34.52
0	1	-	-	-
A.A.D.		-	1.40	1.05

n-Pentanol과 p-Xylene 계의 순수물질과 5개의 조성에서 얻은 AIT의 실험값과 예측 모델에 의한 계산값을 비교하여 Table 1과 Figure 1 나타내었다. 본 연구에서 제시한 식 (16)에 의한 실험값과 예측값의 평균오차는 7.82 s, 결정계수(r^2)는 0.99로써 모사성이 크게 나타났다. 따라서 본 연구에서 제시한 식을 이용하여 다른 조성에서의 AIT 예측도 가능해졌다.

연시간의 실험값과 예측 모델에 의한 계산값을 Table 2와 Figure 2에 나타내었다. 본 연구에서 제시한 식 (18)에 의한 실험값과 예측값의 평균오차는 1.05 s, 결정계수(r^2)는 0.98로써 모사성이 크게 보이므로 식(18)을 이용하여 조성 0.1과 0.9 사이에서의 다른 조성에서도 발화지연시간의 예측이 가능하다.

4.2.7 n-Pentanol과 p-Xylene 계의 조성과 발화지연시간의 관계

본 연구에서 얻은 혼합조성과 발화지연시간의 관계를 살펴보기 위해 Plotting을 한 결과 조성과 발화지연시간의 상관관계가 있음을 확인하였다. 따라서 n-Pentanol과 p-Xylene 계의 혼합 조성에 의한 발화지연시간의 예측이 가능할 것으로 판단되어 앞서 제시한 식 (7)와 (8)을 회귀분석한 결과 다음과 같은 예측식을 얻었다.

$$\tau_{MIX} = 48.06 - 118.46X_1 + 115.95X_1^2 \quad (17)$$

$$\tau_{MIX} = 53.04 - 172.12X_1 + 247.03X_1^2 - 87.39X_1^3 \quad (18)$$

n-Pentanol과 p-Xylene 계 5개의 조성에서 AIT의 발화지

5. 결론

본 연구는 자연발화온도 측정 장치(ASTM E659)를 사용하여 n-Pentanol과 p-Xylene 가연성혼합물의 자연발화온도와 발화지연시간 그리고 최소자연발화온도(AIT)를 측정하였다. n-Pentanol과 p-Xylene 계를 구성하는 순수물질의 AIT는 기존 측정값을 활용하였고,^(9,10) n-Pentanol과 p-Xylene 계 5개의 조성에서 AIT를 측정하였다. 또한 측정된 혼합물의 다른 조성에서도 AIT와 AIT에서의 발화지연시간(Ignition Delay)을 예측할 수 있는 모델을 제시하였다.

1) 이성분계를 구성하는 순수물질인 n-Pentanol과 p-Xylene의 AIT는 각각 285 °C와 557 °C로 측정되었다.

2) n-Pentanol과 p-Xylene 계의 5개 조성에서 측정된 AIT는 n-Pentanol(0.9)+p-Xylene(0.1) 계에서는 295 °C, n-Pentanol(0.7)

+p-Xylene(0.3) 계에서는 306 °C, n-Pentanol(0.5)+p-Xylene (0.5) 계에서는 326 °C, n-Pentanol(0.3)+ p-Xylene(0.7) 계에서는 446 °C 그리고 n-Pentanol(0.1)+p-Xylene(0.1) 계에서는 520 °C로 측정되었다.

3) n-Pentanol과 p-Xylene 계의 조성변화에 의한 AIT의 예측식은 다음과 같다.

$$T_{AIT, MX} = 285.03 - 212.44X_1 - 1289X_1^2 + 2996X_1^3 - 1651.5X_1^4$$

여기서 X_1 은 p-Xylene이다.

4) n-Pentanol과 p-Xylene 계의 조성변화에 의한 발화지연시간의 예측식은 다음과 같다.

$$\tau_{MX} = 53.04 - 172.12X_1 + 247.03X_1^2 - 87.39X_1^3$$

여기서 X_1 은 p-Xylene이다.

6) 본 연구에서 제시한 자료와 예측식은 n-Pentanol과 p-Xylene 계를 취급하는 공정에서 중요한 안전 자료로 활용될 수 있다.

References

1. V. Babrauskas, "Ignition Handbook", Fire Science Publishers, SFPE (2003).
2. F. P. Lees, "Loss Prevention in the Process Industries Vol. 1", 2nd ed., Oxford Butterworth-Heinemann (1996).
3. C. J. Hilado and S. W. Clark, "Discrepancies and Correlation of Reported Autoignition Temperature", Fire Technology, Vol. 8, No. 3, pp. 218-227 (1972).
4. C. C. Chen and Y. C. Hsieh, "Effect of Experimental Conditions on Measuring Autoignition Temperature of liquid Chemicals", Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 49, No. 12, pp. 5925-5932 (2010).
5. S. Peper, R. Dohrmand and K. Konejung, "Methods for the Prediction of Thermodynamics Properties of Polyurethane Raw Materials Mixture", Fluid Phase Equilibria, Vol. 424, pp. 137-151 (2016).
6. D. M. Ha, "Measurement and Prediction of Autoignition Temperature n-Butanol+p-Xylene Mixture", Journal of the Korean Institute of Gas, Vol. 20, No. 5, pp. 1-8 (2016).
7. D. M. Ha, "Measurement and Prediction of Autoignition Temperature(AIT) n-Propanol and Acetic acid System", Journal of the Korean Society of Safety, 32, No. 2, pp. 66-71 (2017).
8. J. Zhang, S. Niu, Y. Zhang, C. Tang, X. Jiang, E. Hu and Z. Huang, "Experimental and Modeling Study of Auto-ignition of n-Heptane/n-Butanol Mixtures", Combustion and Flame, Vol. 160, pp. 31-39 (2013).
9. D. M. Ha and S. J. Lee, "Measurement of Autoignition Temperature of o-Xylene+n-Pentanol System", Journal of the Korean Society of Safety, Vol. 21, No. 4, pp. 66-72 (2006).
10. D. M. Ha, "Measurement and Prediction of Autoignition Temperature (AIT) n-Hexanol+p-Xylene Mixture", Journal of Energy Engineering, Vol. 25, No. 1, pp. 48-55 (2016).
11. I. Goldfrab and A. Zinoviev, "A Study of Delay Spontaneous Insulation Fires", Physics Letters A, Vol. 311, No. 6, pp. 491-500 (2003).
12. C. J. Hilado and S. W. Clark, "Autoignition Temperature of Organic Chemicals", Chemical Engineering, Vol. 79, No. 19, pp. 75-80 (1972).
13. N. N. Semenov, "Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity, Vol. 2", Princeton University Press, Princeton, N.J. (1959).
14. G. E. P. Box. and N. R. Draper, "Empirical Model-Building and Response Surface", John Wiley and Sons, Inc. (1987).
15. J. V. Beck and K. J. Arnold, "Parameter Estimation in engineering and Science", John Wiley and Sons, Inc. (1977).
16. S. J. Cho, J. S. Shin, S. H. Choi, E. S. Lee and S. J. Park, "Optimization Study for Pressure Swing Distillation Process for the Mixture of Isobutyl-Acetate and Isobutyl-Alcohol System", Korean Chemical Engineering Research, Vol. 52, No. 3, pp. 307-313 (2014).