

초산부틸의 화재 및 폭발 특성치 측정 및 예측

하동명[†]

세명대학교 보건안전공학과

(2017. 7. 11. 접수 / 2017. 9. 14. 수정 / 2017. 10. 10. 채택)

Measurement and Prediction of Fire and Explosion Characteristics of n-Butylacetate

Dong-Myeong Ha[†]

Dept. of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University

(Received July 11, 2017 / Revised September 14, 2017 / Accepted October 10, 2017)

Abstract : The flash point, explosion limits, autoignition temperature(AIT) are important combustible properties which need special concern in the chemical safety process that handle hazardous substances. For the evaluation of the flammable properties of n-butylacetate, this study was investigated the explosion limits of n-butylacetate in the reference data. The flash points, fire points and AIT by the ignition delay time of n-butylacetate were experimented. The lower flash points of n-butylacetate by using the Setaflash and Pensky-Martens closed-cup testers were 24°C and 26°C, respectively. The flash points of n-butylacetate using the Tag and Cleveland open cup testers are measured 31°C and 40°C, respectively. And the fire points of n-butylacetate by the Tag and Cleveland open cup testers were measured 32°C and 41°C. The AIT of n-butylacetate measured by the ASTM 659E tester was measured as 411°C. The lower explosion limit of lower flash point 24°C, which was measured by the Setaflash tester, was calculated to be 1.40 vol%. Also, the upper explosion limit of upper flash point 67°C the Setaflash tester was calculated to be 12.5 vol%.

Key Words : n-butylacetate, flash point, explosion limit, autoignition temperature(AIT), prediction, setaflash tester, ASTM 659E

1. 서론

2012년 경기도 접착제 제조 작업장에서 4명의 사망과 9명이 크게 부상을 당하는 대형폭발사고 그리고 D산업의 폭발사고로 6명이 사망하고, 11명이 중경상을 입은 중대 재해사고가 발생한 적이 있다. 이들 사고의 원인 가운데 하나가 사업장에서 취급 및 처리하는 과정에서 해당 물질에 대한 정확한 안전관리가 이루어지지 않아서 발생한 대표적인 사고 사례라고 볼 수 있다.

각국에서는 근로자의 알 권리를 보장하기 위해서 사업장에 취급하는 물질의 물질보건안전자료(MSDS, Material Safety Data Sheet)를 제공하고 있다. MSDS는 대상 화학물질마다 구성성분의 명칭 및 함유량, 취급시 주의사항 그리고 물리적 및 화학적 특성 등 16개 항목을 기재 하도록 하고 있다¹⁾. MSDS의 9번째 항목인 물리적 및 화학적 특성에서는 연소특성치를 표시해

야 한다. 연소특성치들로는 인화점, 연소점, 폭발한계, 자연발화온도 등을 들 수 있다. 이들 연소특성치는 화학공정의 본질적 방화 및 방폭 설계에서 매우 중요한 특성치로서 정확한 자료를 적용해야 한다^{2,3)}.

인화점은 가연성물질의 잠재적 위험성을 나타내는 연소특성으로서 가연성액체 표면에 발화원이 존재할 때 인화에 필요한 증기를 발산하는 액체의 최저온도이다⁴⁾. 연소점은 인화 이후 화염이 5초 이상 지속시킬 수 있는 온도로서 물질에 따라 차이는 있지만 하부인화점보다 약 5 ~ 10°C 정도 높다. 폭발한계(연소한계)는 하한계와 상한계로 나누어지며, 공정 상에서 가연성가스 혹은 증기가 존재하는 설비에서 방폭 설비를 위한 특성치이다. 여건 상 폭발한계의 측정이 어려운 경우에는 증기압 식을 사용하여 계산이 가능하다. 자연발화는 가연성가스나 증기가 주위의 공기와 혼합하여 열, 고온표면 등의 발화원에 의해 스스로 타는 산화 현상

[†] 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 city, Chungbuk 27136, Korea

이다. 그 때 스스로 발화할 수 있는 최저온도를 그 물질의 최소자연발화온도(autoignition temperature, AIT)로 라고 하며 공정의 안전 기준을 마련하는데 중요한 자료가 된다⁵⁾.

본 연구에서 화학 및 제과산업 등에서 다양하게 사용되고 있는 초산부틸(n-butylacetate)을 선정하여 MSDS의 연소특성치를 측정하고 자료의 신뢰도를 살펴보고자 한다. 초산부틸은 초산부틸에스테르라고도 하며, 황산 등을 쓰는 촉매 속에서 아세트산과 노말-부틸알코올을 결합시켜 증류하여 에스테르화하여 만든다. 무색 투명한 액체로서 물에 약간 녹고, 에탄올, 에테르, 탄화수소에 녹는다. 용도로는 산업용 용제, 도료, 합성수지, 인쇄용잉크, 접착제, 유기합성용, 정정제, 인조피혁 등에 사용되며, 과일계와 버터용 향료 등을 배합할 때 사용되고 있다. 특히 초산부틸은 GHS(Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals)⁶⁾의 인화성액체로 구분되며 Category 3(인화점 23℃이상 60℃이하)의 경계선에 해당하는 물질로서 정확한 안전관리를 위해 인화점 연구는 매우 중요하다.

본 연구에서는 초산부틸의 안전한 취급, 처리 및 저장을 위해서 화재 및 폭발 특성치인 인화점, 연소점 그리고 AIT를 측정하였고, 측정된 값들을 문헌들에 제시된 값들과 비교하였다. 그리고 초산부틸 폭발한계의 타당성을 고찰하기 위해 측정된 하부와 상부인화점을 이용하여 폭발하한계와 상한계를 계산하여 문헌 자료와 비교하였다. 본 연구에서 측정된 인화점, 연소점, AIT 그리고 추산된 폭발하한계와 상한계는 MSDS의 9번 항목에 있는 연소특성치의 최신화에 적용하고, 이를 취급하는 공정에서 안전을 확보하는데 도움을 주고자 한다.

2. 초산부틸의 연소 특성 평가를 위한 물리적 및 연소특성치 분석

2.1 초산부틸의 물리적 특성

화학산업뿐만 아니라 제과산업 등에서 중간체로 다양하게 사용되고 있는 초산부틸의 물리적 특성치를 요약하여 Table 1에 나타내었다^{7,8)}.

우리나라를 비롯해 각 국에서는 근로자의 안전 및 보건을 위해서 사업장에서 취급하고 있는 각종 물질에 대해 MSDS를 제공하고 있다. 제공되고 있는 MSDS의 유해·위험 정보에 대해 동일한 물질인데도 불구하고 다른 연소특성 값들을 제시하는 경우가 많다. 이는 물질에 대한 연소특성을 실험에 의해서 적용하여야 하나 정확하지 않은 문헌값을 그대로 사용하는 경우에서 생

Table 1. Physical properties of n-butylacetate

| Properties | Component | n-Butylacetate |
|---------------------------|-----------|---|
| CAS number | | 123-86-4 |
| Molecular formula | | C ₆ H ₁₂ O ₂ |
| Molecular weight | | 116.16 |
| Boiling point | | 126.1℃ |
| Melting point | | -78℃ |
| Vapor pressure | | 1.66 kPa(at 25℃) |
| Solubility(Water) | | 8.4 g/L(at 25℃) |
| Critical temperature | | 306℃ |
| Viscosity | | 0.685 in mPa · s |
| Vapor density(Air=1) | | 4.0 |
| Specipic gravity(Water=1) | | 0.8813(at 20℃) |

기는 현상이라고 판단된다⁹⁾.

초산부틸은 산업안전보건법에 의한 규제에 의해 작업환경측정물질 (측정주기 : 6개월) 관리대상유해물질, 노출기준설정물질에 해당된다. 그리고 소방법의 위험물안전관리법에서는 제4류위험물의 제2석유류(비수용성액체, 지정수량 1000 L)이며, 폐기물관리법은 지정폐기물로 정하고 있다.

초산부틸은 다른 가연성물질과 마찬가지로 인화점에서는 증기를 형성하여 주위 공기와 혼합되어 연소범위가 만들어지고 존재 발화원이 존재한다면 화재나 폭발이 발생할 수 있다. 일반적으로 관리해야 할 발화원으로 전기적에너지에 비롯해 열, 화염, 고열 등이 있다. 초산 부틸의 증기는 공기보다 약 4배 정도 무거우므로 누출을 방지하기 위한 방폭시스템이 반드시 필요하다. 소화약제로는 알코올 폼(Foam), 이산화탄소, 분말 등을 들 수 있다.

2.2 초산부틸의 연소특성치 분석

위험물을 취급하는 공정의 안전을 위해서 정확히 파악해야 할 연소특성치는 인화점, 연소점, 폭발한계 그리고 AIT 등이 있다¹⁰⁾.

인화점은 하부 및 상부인화점으로 나눌 수 있으며, 측정 장치는 밀폐식(Closed-cup, CC)과 개방식(Open cup, OC)이 있으며 장치에 따라 측정값이 달라지는데, 이에 영향을 주는 변수로는 용기형태, 시료량, 발화원, 온도조절기, 주위압력, 시료의 균일성, 실험자, 자료의 편차 등을 들 수 있다. 일반적으로 밀폐식은 Setflash와 Pensky-Martens 방식 등이 있으며, 개방식은 Tag와 Cleveland 방식 등이 있다. 폭발한계(연소한계) 역시 하한계(LEL)와 상한계(UEL)로 나누어지며 실험 장치의 종류, 실험조건 및 방법 등에 의해 영향을 받으므로 문헌들 마다 다른

값들이 제시되고 있다. 또한 AIT 역시 동일 물질인데도 불구하고 실험 장치, 발화지연시간 그리고 순도(Purity) 등에 따라 측정값이 차이를 보이고 있다⁵⁾.

본 연구에서 선정한 초산부틸의 인화점, 연소점 그리고 AIT를 실험하기 앞서 초산부틸의 연소특성치를 분석할 필요가 있어 한국산업안전보건공단의 MSDS를 비롯해 그동안 핸드북과 문헌 등에서 제시한 특성치를 정리하여 Table 2에 제시하였다^{6,7,11-12)}.

초산부틸의 인화점은 밀폐식에서는 가장 낮은 22°C와 높은 37°C(TCC)로 15°C의 큰 차이를 보이고 있으며, 개방식은 가장 낮은 28°C와 높은 33°C로 5°C의 차이를 나타내고 있으므로 공정에 적용하기에는 보다 정확한 실험이 필요하다. 그리고 초산부틸의 연소점은 문헌에 전혀 제시되지 않고 있다. Table 2에서도 알 수 있듯이 Lange의 TCC(Tag Closed-Cup) 표시 이외에는 어떤 장치에 의한 인화점의 측정값인지 알 수 없으므로 본 연구에서는 널리 사용되고 있는 장치를 이용하여 측정하고자 하였다.

초산부틸의 AIT는 대부분의 문헌에 따라 407°C에서 425°C로 제시되고 있으며, 약 18°C의 차이를 보이고 있다. 또한 초산부틸의 폭발하한계는 KOHSA의 MSDS에서 가장 작은 1.2 vol%, CRC에서 가장 큰 2.0vol%로 0.8vol%로서 큰 차이를 보이고 있으므로 이에 대한 교찰이 필요하다. 초산부틸의 폭발상한계는 SAX, Lange에서 가장 작은 7.5vol%, Smallwood에서는 가장 큰 15.0vol%로 무려 7.5vol%의 차이를 보이므로 이에 대한 충분한 검토가 필요하다.

사업장에서 중간제품으로 널리 사용되고 있는 초산

부틸의 안전한 관리를 위해서는 보다 정확한 연소특성치의 실험적 연구가 필요하다고 본다.

3. 실험재료 및 측정장치

3.1 재료

본 연구에서 사용된 초산부틸(Daejung, 99.5%, Korea)은 별도의 정제 과정 없이 사용하였다.

3.2 인화점과 연소점 측정

초산부틸의 인화점 측정은 Setaflash(ASTM D3278)와 Pensky-Martens(ASTM D93) 밀폐식 그리고 Tag (ASTM D1310)와 Cleveland(ASTM D92) 개방식을 사용하였다. 연소점은 Tag와 Cleveland 개방식을 이용하였으며, 여러 문헌들에서 장치의 구조 및 측정 방법을 제시하였으므로 간략히 설명하고자 한다²³⁾.

밀폐식인 Setaflash는 몸체부, 시료컵 장치부 그리고 화염 공급부로 이루어졌으며, Pensky-Martens는 몸체부, Test Cup 장치부, 교반부 그리고 화염 공급부로 구성되었다. 개방식인 Tag는 인화점 및 연소점 측정이 가능하고, 시료컵, 승온다이얼, 수조 그리고 화염 발생 장치 등으로 구성되어 있고, Cleveland 장치도 인화점 및 연소점을 측정할 수 있고, 몸체부, 시료컵, 장치부 그리고 화염 공급부로 이루어졌다²⁴⁾.

각 장치에 의한 인화점과 연소점 측정은 3회 혹은 5회를 실시하였다. 3회 동안 동일한 값으로 측정되면 이를 인화점과 연소점으로 채택하였고, 만일 3회 측정에서 동일한 측정값이 되지 않은 경우는 5회까지 측정하

Table 2. Comparison of explosion limit, flash point and AIT of n-butylacetate by several references

| References | Flash point(°C) | AIT(°C) | LEL - UEL(vol%) |
|---------------------------|----------------------------|---------|-----------------|
| KOSHA ¹¹⁾ | 27 | 415 | 1.2 - 7.6 |
| NFPA ¹²⁾ | 22 | 425 | 1.7 - 7.6 |
| Ignition ¹³⁾ | 22 | 421 | 1.4 - 7.6 |
| SAX ¹⁴⁾ | 22 | 425 | 1.4 - 7.5 |
| Lange ⁸⁾ | 37(TCC)* | 425 | 1.4 - 7.5 |
| CRC ⁷⁾ | 22 | 425 | 2.0 - 8.0 |
| SFPE ¹⁵⁾ | 22(CC). 32(OC) | 425 | 1.4 - 8.0 |
| Sigma ¹⁶⁾ | 22 | 425 | 1.38 - 7.6 |
| Smallwood ¹⁷⁾ | 22 | 407 | 1.7 - 15.0 |
| Stephenson ¹⁸⁾ | 24, 27(CC). 28, 29, 33(OC) | - | - |
| Zabetakis ¹⁹⁾ | - | 425 | 1.4 - 8.0 |
| Scott ²⁰⁾ | - | 421 | - |
| Hilado ²¹⁾ | - | 422 | - |
| Yagy ²²⁾ | - | - | 1.39 - 9.55 |

* TCC ; Tag Closed-Cup

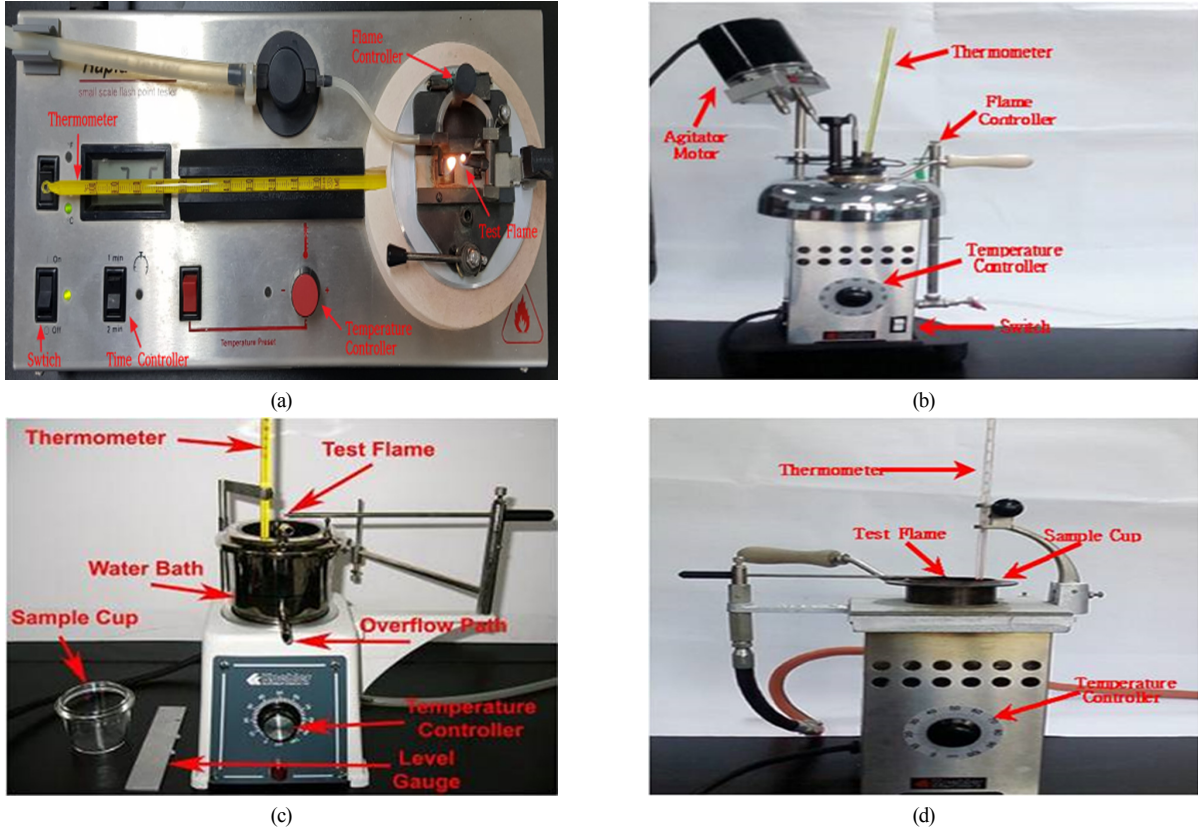


Fig. 1. Photography of flash point tester ((a) Setaflash(ASTM D3278), (b) Pensky–Martens(ASTM D93), (c) Tag(ASTM D1310), (d) Cleveland(ASTM D92)).

여 3회 이상 동일하게 측정된 값을 채택하였다.
 각 장치의 그림을 Fig. 1의 (a)에서 (d)에 나타내었다.

3.3 자연발화온도와 발화지연시간 측정

초산부틸의 자연발화온도와 발화지연시간 측정은 ASTM E659를 이용하였고, 발화지연시간에 의한 발화온도를 통해 최소자연발화온도(AIT)를 측정하였다. 장치는 크게 로, 온도 조절기, 열전대, 플라스크, 주사기, 거울, 에어건 등으로 구성되었으며, 장치의 그림은 Fig. 2에 나타내었으며, 실험은 ASTM 규정에 의해 진행하였다^{13,24)}.

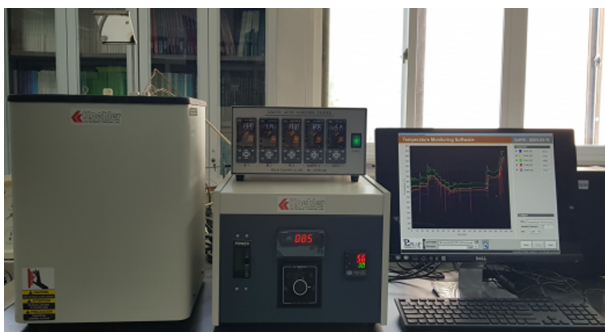


Fig. 2. Photograph of autoignition temperature apparatus.

4. 결과 및 고찰

4.1 초산부틸의 인화점, 연소점 측정과 폭발한계의 예측

앞서 문헌들에 제시된 초산부틸의 폭발하한계와 상한계의 타당성을 검토하기 위해서 증기압식인 Antoine 식을 사용하여 폭발하한계와 상한계를 계산하였다²⁵⁾.

$$\log P^f = 7.02845 - \frac{1368.5}{(t + 204)} \quad (1)$$

여기서, P^f 는 증기압(mmHg)이고, t 는 온도(°C)이다.

본 연구에서는 밀폐식인 Setaflash와 Pensky-Martens, 개방식인 Tag와 Cleveland에 의해 하부인화점과 연소점을 측정하였고, 측정된 하부인화점과 연소점을 이용하여 폭발하한계를 계산하였고, Setaflash에 의해 측정된 상부인화점을 이용하여 폭발상한계를 계산하여 Table 3에 나타내었다.

초산부틸을 밀폐식인 Setaflash의 Manual에서는 24°C, Auto에서는 25°C 그리고 Pensky-Martens는 26°C로 측정되었다. 개방식인 Tag는 31°C 그리고 Cleveland에서는 40°C로 측정되었고, 연소점은 Tag는 32°C, Cleveland는 4

Table 3. Comparison of estimated explosion limits by experimental lower flash point, upper flash point and fire point for n-butylacetate

| Testers | | Experimental (°C) | | | Estimated(LEL) (vol%) | | |
|----------------|--------|--------------------|-------------------|-------------|-----------------------|----------------------|----------------|
| | | Lower flash points | Upper flash point | Fire points | by Lower flash points | by Upper flash point | by Fire points |
| Setaflash | Manual | 24 | 67 | - | 1.40 | 12.5 | - |
| | Auto | 25 | - | - | 1.48 | - | - |
| Pensky-Martens | | 26 | - | - | 1.58 | - | - |
| Tag | | 31 | - | 32 | 2.11 | - | 2.23 |
| Cleveland | | 40 | - | 41 | 3.46 | - | 3.65 |

1°C로 측정되었다. 또한 Setaflash의 Manual에 의해 측정된 상부인화점은 67°C로 측정되었다.

본 연구에서 Setaflash Manual 장치에 의해 측정된 하부인화점 24°C는 Table 2에 제시된 인화점 가운데 Stephenson이 제시한 24°C와 동일한 측정값을 보이고 있으나, KOSHA MSDS의 27°C보다는 3°C 낮게 측정되었다. 그리고 개방식인 Tag의 31°C는 SFPE의 32°C보다는 1°C 그리고 Stephenson이 제시한 가장 높은 값인 33°C 보다는 2°C 낮게 측정되었다.

Setaflash Manual 장치에 의해 측정된 하부인화점 24°C를 식 (1)에 대입한 결과 폭발하한계는 1.40vol%로 계산되었다. 계산된 폭발하한계 1.40vol%는 가장 낮은 값을 제시하고 있는 KOSHA MSDS의 1.2vol% 보다는 0.2vol% 보다는 높게 추산되었으나, 가장 높게 제시한 CRC 보다는 0.6vol% 낮게 계산되었다. 그러나 대부분 문헌에서 1.40vol%와 일치하고 있다. 또한 Setaflash Manual 장치에 의해 측정된 상부인화점 67°C를 식 (1)에 대입한 결과 폭발상한계는 12.5vol%로 계산되었고, 대부분의 문헌값 약 7.5vol%보다는 약 5vol% 높게 계산되었으나, Smallwood가 제시한 15.0vol% 보다는 2.5vol% 낮게 계산되어 본 연구에서 제시한 폭발상한계를 공정에 적용하는 것에 대한 고찰이 필요하다. Tag와 Cleveland에서 측정된 연소점의 폭발하한계는 각각 2.23vol%와 3.65vol%로 계산되었다.

본 실험에서 측정된 인화점과 측정된 인화점에 의해 계산된 폭발하한계와 상한계는 공정 안전을 위해 현장에 적용하는 것이 타당하다고 판단되며, 제시한 방법론을 이용하여 폭발하한계의 예측 연구에 도움을 줄 것으로 본다. 그리고 측정된 연소점은 초산부틸의 개방계 공정에서 화재 예방의 가이드로 활용할 수 있다고 본다.

특히 초산부틸은 GHS의 인화성액체로 Category 3 (인화점 23°C이상 60°C이하)에 해당되는 물질로서 정확한 안전관리를 위해 보다 많은 인화점 연구가 필요하다.

4.2 초산부틸의 발화온도, 발화지연시간 그리고 최소자연 발화온도 측정

Table 2의 제시된 문헌들 가운데 초산부틸의 AIT가 가장 낮은 Smallwood의 407°C를 근거로 350°C에서 실험하였으나 비발화되어 다시 30°C 높은 380°C에서 실험한 결과 역시 비발화가 되었다. 다시 20°C를 상승시켜 400°C에서도 비발화되어 다시 5°C 상승시켜 405°C에서 실험한 결과 비발화되었다. Smallwood의 407°C를 근거로 1°C씩 상승시켜 실험한 결과 411°C, 3.28sec에서 AIT를 찾을 수 있었다.

AIT 411°C를 근거로 1 ~ 2°C를 상승시켜 실험한 결과 412°C에서는 2.97sec, 413°C에서는 2.01sec, 416°C에서는 1.75sec 에서 발화하였다. 초산부틸의 측정된 발화온도와 발화지연시간을 Table 5에 나타내었다.

본 연구에서 측정된 초산부틸의 AIT 411°C는 Table 2에 제시된 기존의 문헌값들 가운데 가장 낮은 값인 Smallwood의 407°C보다는 4°C 높게 측정되었으나, 가장 높은 NFPA의 425°C 보다는 14°C 낮게 측정되었으며, 따라서 본 측정에서 제시한 초산부틸의 AIT 411°C는 문헌들의 중간 정도의 값이므로 공정안전을 위한 방화 설계에 적용이 가능하다고 판단된다.

초산부틸의 활성화에너지(E, activation energy)를 계산하기 위해서 발화지연시간과 발화온도의 측정 자료를 이용하여 선형 회귀분석한 결과 다음과 같은 식을 얻었다.

$$\ln \tau = -88.37 + 61240 \left(\frac{1}{T} \right) \quad (2)$$

여기서 τ 는 발화지연시간이고, T는 발화지연시간에 대응하는 발화온도[K]이다.

본 연구에서 측정된 발화지연시간과 식 (2)에 의해 계산된 발화지연시간들을 비교하여 Table 4와 Fig. 3에 나타내었다. 본 연구에서 제시한 식 (2)을 활용하여 다른 발화온도에서 발화지연시간의 예측이 가능해졌으며

Table 4. Comparison between experimental and calculated ignition delay time by the AIT for n-butylacetate

| No. | T[K] | $\tau_{exp.}[s]$ | $\ln\tau_{exp.}$ | $\tau_{est.}(Eq. 3)$ |
|-----|------|------------------|------------------|----------------------|
| 1 | 684 | 3.28 | 1.18784 | 3.14 |
| 2 | 685 | 2.97 | 1.08856 | 2.76 |
| 3 | 686 | 2.01 | 0.69813 | 2.42 |
| 4 | 689 | 1.75 | 0.55962 | 1.64 |
| AAE | - | - | - | 0.22 |

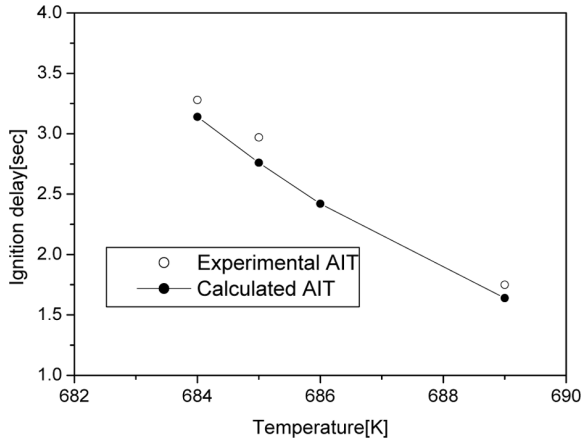


Fig. 3. Comparison between the experimental and calculated delay times of n-butylacetate.

이를 활용하여 화재 방호에 적용할 수 있다고 본다. 발화지연시간의 계산값과 실험값의 차이 정도는 평균절대오차(AAE, Average Absolute Error)와 결정계수(r^2)를 사용하였다^{23,24}.

$$AAE = \sum \frac{|\tau_{est.} - \tau_{exp.}|}{N} \quad (3)$$

$$r^2 = \left(\frac{SSR}{SST} \right) \quad (4)$$

여기서 $\tau_{est.}$ 는 발화지연시간 계산값이고, $\tau_{exp.}$ 는 측정값이며, 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 (2)에 의한 계산값과 실험값의 AAE는 0.22 sec, 결정계수(r^2)는 0.85로서 측정값과 계산값과 모사성이 있으나, 다른 가연성물질에 비해 결정계수값이 약간 작은 것은 본 실험에서는 실제 보다 길게 측정되어서 생긴 결과로 볼 수 있다.

활성화에너지(E)를 계산하기 위해서 화재 및 폭발 분야에서 많이 적용하는 Semenov 식을 사용하였다²⁶.

$$\log\tau = \frac{52.55E}{T} + B \quad (5)$$

본 연구에서 얻은 식 (2)을 식 (5)에 적용한 결과 활성화에너지는 506.11 kJ/mol로 계산되었다.

5. 결론

본 연구에서는 산업용 용제, 도료, 합성수지, 인쇄용 잉크, 접착제, 유기합성용, 청정제, 인조피혁 등에 사용되며, 과일계와 버터용 향료 등으로 널리 사용되고 있는 초산부틸의 인화점, 연소점 그리고 최소자연발화온도(AIT)를 측정하여 기존 문헌값들과 비교하였으며, 측정된 하부인화점, 상부인화점 그리고 연소점을 이용하여 폭발한계를 계산하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 밀폐식 인화점 측정 장치인 Setaflash의 Manual은 24°C이고 Auto는 25°C로 측정되었으며, Pensky-Marten은 26°C, 개방식 장치인 Tag는 31°C 그리고 Cleveland는 40°C로 측정되었다.

2) Tag에 의한 연소점은 32°C 그리고 Cleveland의 연소점은 41°C로 측정되었다.

3) Setaflash의 Manual 장치에 의한 하부인화점 24°C를 이용하여 계산된 폭발하한계는 1.40vol%로서, 기존의 문헌값들의 중간값으로 계산되었으며, 상부인화점 67°C에 의한 폭발상한계는 12.5vol%로 역시 기존의 문헌값들의 중간값으로 계산되었다.

4) 초산부틸의 최소자연발화온도는 3.28 sec에서 41°C로 측정되었다.

5) Semenov식을 이용한 초산부틸의 활성화에너지(E)는 506.11 kJ/mol로 계산되었다.

6) 본 연구에서 제시한 발화온도와 발화지연시간의 관계식을 활용하여 다른 발화온도에의 발화지연시간의 예측이 가능해 졌으며 이를 활용하여 화재 방호에 적용할 수 있다.

References

- 1) R. J. Willey, "Understanding a Safety Data Sheet in Regards to Process Safety", *Procedia Engineering*, vol. 45, pp. 857-867, 2012.
- 2) D. A. Crowl and J. F. Louvar, "Chemical Process Safety Fundamentals with Application", 2nd ed., Pearson Education Inc., 2002.
- 3) T. N. M. Borhani, A. Afzali and M. Bagheri, "QRPR Estimation of the Auto-ignition Temperature for Pure Hydrocarbons", *Process Safety Environment Protection*,

- Vol. 103, pp. 115-112, 2016.
- 4) D. M. Ha, "The Measurement and Prediction of Combustible of Dimethylacetamide(DMAc)", Korean Chem. Eng. Res., Vol 53, No. 5, pp. 553-556, 2014.
 - 5) D. M. Ha, "The Measurement and Prediction of Fire and Explosion Properties of n-Nonane", J. of the Korean Society of Safety, Vol. 31, No. 4, pp. 42-48, 2016.
 - 6) United Nations, "Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals", 2016.
 - 7) D. R. Lide, "Handbook Chemistry and Physics", 76th ed., CRC Press, 1996.
 - 8) J. A. Dean, "Lange's Handbook of Chemistry", 14th ed. McGraw-Hill, 1992.
 - 9) F. P. Lees, "Loss Prevention in the Process Industries Vol. 1", 2nd ed., Oxford Butterworth-Heinemann, 1996.
 - 10) D. M. Ha, "A Study on the Reliability of the Combustible Properties for Acrylic Acid", J. of Energy Engineering, Vol. 24, No. 3, pp. 22-26, 2015.
 - 11) KOSHA, <http://msds.kosha.or.kr/kcic/msdsdetailGet.do>
 - 12) NFPA, "Fire Hazard Properties of Flammable Liquid, Gases, and Volatile Solids", NFPA 325M, National Fire Protection Association, 1991.
 - 13) V. Babrauskas, "Ignition Handbook", Fire Science Publishers, Society of Fire Protection Engineers, 2003.
 - 14) R. J. Lewis, "SAX's Dangerous Properties of Industrial Materials", 11th ed., John Wiley & Son, Inc., New Jersey, 2004.
 - 15) A. M. Kanury, "SFPE Handbook of Fire Protection Engineering -Chapter 8 -", 2nd ed., Society of Fire Protection Engineers, 1995.
 - 16) 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.
 - 17) I. M. Smallwood, "Handbook Organic Solvent Properties", Arnold, A member of the Hodder Headline Group, 1996.
 - 18) S. M. Stephenson, "Flash Points of Organic and Organometallic Compounds", Elsevier (1987).
 - 19) G. M. Zabetakis, "Flammability Characteristics of Combustible Gases and Vapors", US Bureau of Mines, Bulletin, 1965.
 - 20) 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.
 - 21) C. J. Hilado and S. W. Clark, "Autoignition Temperature of Organic Chemicals", Chemical Engineering, Vol. 4, pp.75-80, 1972.
 - 22) 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.
 - 23) 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. 54, No. 2, pp. 190-194, 2017.
 - 24) D. M. Ha, "The Measurement and Prediction of the Combustible Properties of Propionic Anhydride", J. of the Korean Institute of Gas, Vol. 20, No. 3, pp. 66-72, 2016.
 - 25) J. Gmehing, U. Onken and W. Arlt, "Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection, Vol. 1, Part1-Part7", DECHEMA, 1980.
 - 26) N. N. Semenov, "Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity, Vol. 2", Princeton University Press, Princeton, N.J. (1959).