벤젠과 노말헥산 혼합물의 최소자연발화온도 거동에 관한 연구

하동명[†]·김규현^{*}

세명대학교 보건안전공학과, *(주)남도TEC

A Study of Minimum Autoignition Temperature Behavior (MAITB) of Benzene and n-Hexane Mixture

Dong-Myeong Ha[†] · Kyu-Hyun Kim^{*}

Dept. of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University *NAMDO TEC. CO., LTD

(Received September 27, 2012; Revised February 1, 2013; Accepted February 1, 2013)

요 약

최소자연발화온도는 가연성액체의 안전한 취급을 위해서 중요한 지표가 된다. 본 연구에서는 ASTM E659 장치를 이 용하여 가연성 혼합물인 Benzene과 n-Hexane 계의 최소자연발화온도와 발화지연시간을 측정하였다. 2성분계를 구성하 는 순수물질인 Benzene과 n-Hexane의 최소자연발화온도는 각 각 583 °C, 240 °C로 측정되었다. 그리고 측정된 Benzene과 n-Hexane 계의 최소자연발화온도는 제시된 식에 의한 예측값과 적은 평균절대오차에서 일치하였다.

ABSTRACT

The autoignition temperature (AIT) is important index for the safe handling of flammable liquids which constitute the solvent mixtures. This study measured the AITs and ignition delay time for Benzene and n-Hexane system by using ASTM E659 apparatus. The AITs of Benzene and n-Hexane which constituted binary system were 583 °C and 240 °C, respectively. The experimental AITs of Benzene and n-Hexane system were a good agreement with the calculated AITs by the proposed equations with a few A.A.D. (average absolute deviation).

Keywords: AIT (Autoignition temperature), Ignition delay time (time lag), ASTM E659, Benzene and n-Hexane system

1. 서 론

화학 관련 산업은 고온, 고압 뿐만 아니라 반응성이 큰 물질들을 사용하는 복잡한 공정으로 이에 맞는 안전기술 이 요구된다. 최근 8명의 사망자를 포함해 15명의 사상자 를 낸 청주 L화학의 폭발사고, 인천 청라지구 주물 공장과 화성 페인트 공장의 화재 사고 등은 취급물질의 부주의로 인한 재해로써 인재라고 볼 수 있다. 산업 현장에서 취급 하고 있는 각종 화학물질의 안전관리를 어렵게 하는 이유 는 취급하는 물질의 화재 및 폭발 특성치(연소특성치)에 관한 자료가 부족하거나, 정확하지 않은 연소특성치를 사 용하기 때문이다.

가연성물질의 연소현상 가운데 하나인 자연발화(Autoignition 혹은 Spontaneous Ignition)는 가연성혼합기체에 열 등의 형태로 에너지가 주어졌을 때 스스로 타기 시작하 는 산화현상으로, 주위로부터 충분한 에너지를 받아서 스 스로 점화할 수 있는 최저온도를 최소자연발화온도(AIT: Autoignition Temperature)라고 한다. 최소자연발화온도는 개시온도, 증기농도, 용기 크기, 산소농도, 계의 압력, 촉매, 발화지연시간 등 다양한 실험 조건에 영향을 받는다⁽¹⁾.

그동안 연구를 살펴보면 대부분 순수물질에 국한되어 연구가 진행되고 있으며, 혼합물에 대한 연구는 거의 없는 실정이다. 최근 Ha^(2,3)은 n-Decane과 sec-Butanol 계와 n-Pentanol과 Ethylbenzene 계의 최소자연발화온도를 측정 하였다.

순수물질의 최소자연발화온도를 문헌들을 고찰하면, 동 일 물질인데도 불구하고 문헌에 따라 다른 최소자연발화 온도가 제시되고 있다⁽⁴⁾. 따라서 사업장에서 사고를 예방 하기 위해서는 정확한 연소 특성 자료를 이용해야 해야 한 다. 그러나 문헌에 제시된 대부분의 자료들은 과거 표준 장치 및 자체 제작된 장치 등을 사용해서 얻은 결과이므로, 최근에 고안된 표준 장치를 이용한 결과가 매우 유용한 자

[†]Corresponding Author, E-Mail: hadm@semyung.ac.kr

TEL: +82-43-649-1321, FAX: +82-43-649-1777

ISSN: 1738-7167 DOI: http://dx.doi.org/10.7731/KIFSE.2013.27.1.008

료가 될 것으로 본다.

본 연구에서는 ASTM E659(Koehler)^(2,3)를 사용하여 Benzene과 n-Hexane의 혼합물에 대해 최소자연발화온도 를 측정하였다. 이성분계의 최소자연발화온도를 측정에 앞 서 이성분계를 구성하는 순수성분인 Benzene과 n-Hexane 계의 자연발화온도와 발화지연시간 관계를 측정하였으며, 측정된 최소자연발화온도는 문헌값들과 비교 고찰하였다. 또한 Benzene과 n-Hexane 계에 대해 최소자연발화온도와 발화지연시간을 측정하였고, 또한 혼합 조성 변화에 따른 최소자연발화온도를 예측 할 수 있는 모델을 제시하였다. 제시된 실험자료 및 예측 모델은 이들 물질을 취급하는 공정에서 화재 및 폭발의 방호 자료로 제공하는데 목적이 있다.

열발화 이론에 의한 자연발화온도와 발화지연시간의 관계

일반적으로 열발화 이론은 두 가지로 대별 할 수 있다. 하 나는 발열과 방열의 관계를 정상상태라고 가정한 Semenov 이론이며, 다른 하나는 Semenov 이론을 보강한 것으로 실 제 착화는 계의 한 장소에서 온도 상승이 계속되면 이곳에 착화가 일어난다. 이러한 경우를 고려하여 비교적 간단한 모델을 이용하여 착화를 설명한 이론이 Frank-Kamenetskii 이론이다^(3,5).

본 연구에서는 Frank-Kamenetskii 이론을 도입하여 발화 온도와 발화지연시간의 간략히 설명하고자 한다. 계의 크 기 변화와 발화임계 주위 온도 관계로 Frank-Kamenetskii 의 매개변수(δ)는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\delta = \frac{r_0^2 Q E \rho A exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right)}{kRT_0^2}$$
(1)

여기서 δ는 주위온도에서의 열방출률, 반응물의 차원, r₀는 반응물의 차원, T₀는 주위온도, Q는 연소열, ρ는 밀도, E 는 활성화에너지, k는 열전도도, R는 기체상수이다.

발화지연은 열 생성(발열화학반응)과 열 손실(액체연료 의 증발)사이의 경쟁 때문에 절연물질 안에 가연성의 증발 유체에 대한 특성을 갖는다. 따라서 Frank-Kamenetskii 방 법과 비슷하게 발화지연시간과 초기온도 역수를 이용한다.

이를 간략히 설명하면 다음과 같다. 일반적으로 실험에 서 측정된 값들은 발화지연시간 lnt와 초기온도의 관계로 표현할 수 있다. 즉, 온도가 높을수록 발화지연시간을 짧 아진다는 것을 의미한다.

$$\ln t \approx a \left(\frac{1}{T_0}\right) + b \tag{2}$$

따라서 식(2)에서 발화지연시간과 초기발화온도의 관계에 서 선형최소자승법(Least Square Method)을 사용하여 매

개변수인 a와 b를 결정할 수 있다. 실험에서 얻어진 발화 온도와 발화지연시간을 이용하면, 활성화에너지(E)는 식 (1)으로부터 얻는 대수온도곡선 대 1/T₀의 관계를 이용하 여 결정할 수 있다.

식(2)를 이용하면, 발화온도에 대한 발화지연시간을 예 측할 수 있다.

3. 자연발화온도 실험

3.1 실험장치 및 방법

본 실험에서는 액체 화학물질의 자연발화점 측정 장치로 서 ASTM E659(Koehler 사)를 사용하여 자연발화온도를 측 정하였으며, 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 시료 를 0.1 ml를 넣는다. 그리고 10분 동안 관찰 후 발화가 일 어나지 않으면 다시 온도를 설정한 후 10분 전에 발화가 일어나면 설정 온도 보다 30 ℃ 낮게 설정하고 3~5 ℃ 혹 은 10 ℃씩 증가시키면서 측정하며, 발화가 일어났을 때 시간과 온도를 기록한다^(2,3).

3.2 실험재료

본 실험에 사용된 시약은 Benzene은 Acros이고, n-Hexane은 Aldrich로서 순도는 각각 99 %의 시약을 사용 하였으며, 혼합물의 발화온도 측정은 순수물질을 각각 다 른 몰비(Mole Fraction)로 혼합하여 실험하였다.

발화지연시간 및 혼합물의 최소자연발화 온도의 예측 모델

4.1 다중회귀분석

본 연구에서는 순수물질인 경우는 발화온도에 따른 발 화지연시간의 관계를 분석하고, 혼합물에서는 조성변화에 의한 최소자연발화온도의 관계를 설명하기 위해 다중회귀 분석(Multiple Regression Analysis)을 사용하였다. 다중회 귀분석은 변수와 응답의 관계를 보다 정량적으로 표시하 기 위해서 사용된 방법으로 수학과 통계학적인 방식에 의 거해서 종속변수와 독립변수의 관계식을 구하는 방법이다. 이 방법론은 그 동안 최적조건(Optimum Condition)을 구 하는 방식 또는 최적화(Optimization)에 널리 이용되어 왔 다^(2,3).

이를 간략히 소개하면, 제시한 모델을 다항식의 일반적 인 형태로 표시하면 다음과 같다.

$$Y=a+bx+cx^{2}+dx^{3}+ex^{4}+\cdots+px^{p}+\cdots$$
(3)

여기서 각 매개변수 a, b, c, d, e, …을 추산하기 위해 최

J. of Korean Institute of Fire Sci. & Eng., Vol. 27, No. 1, 2013

소화 방법을 이용하였다. 이 방법은 S.S.D.(Sum of Square of Deviation)을 구하기 위해 각 매개변수를 편미분하여 이 를 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^(1,3,5).

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

여기서 τ는 발화지연시간, T는 자연발화온도[K], 그리고 A와 B는 상수이다.

본 실험에서 얻은 각 순수물질의 자연발화온도와 발화 지연시간을 식(5)에 의해 회귀분석하여 최적화된 예측식을 얻을 수 있다.

$$\ln \tau = A + \left(\frac{E}{RT}\right) \left(=A + B\left(\frac{1}{T}\right)\right)$$
 (5)

또한 Semenov⁽⁶⁾는 활성화에너지(E)를 계산하기 위해 다 음과 같은 식을 제시하였다. 즉 식(4)의 계수를 계산하다면 이를 식(6)에 대입하여 활성화에너지를 계산할 수 있다.

$$\log \tau = \frac{52.55E}{T} + B \tag{6}$$

4.3 혼합물의 최소자연발화온도의 예측 모델

본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과, 조성 변화에 따른 최소자연발화온도가 증가하는 경향을 보이고 있다. 따라서 조성에 의한 최소자연발화온도 예측 모델을 다음 과 같은 모델을 제시하여 최적화 된 모델을 찾고자 한다.

$$T_{AIT, MIX} = a + bX_1 \tag{7}$$

 $T_{AIT, MIX} = a + bX_1 + cX_1^2$ (or $T_{AIT, MIX} = aX_1 + bX_2 + cX_1X_2$) (8)

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

4.4 실험값과 예측값의 비교 방법

측정값과 예측값의 차이의 정도를 알기 위해서 A.A.D. (Average Absolute Deviation)을 사용하였다^(2,3).

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

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

여기서 τ_{est} 는 예측된 발화지연시간, τ_{exp} 는 실험에서 얻은 발화지연시간이고, AIT $_{est}$ 는 예측된 자연발화온도, AIT $_{exp}$. 는 실험에서 얻은 자연발화온도이며, 그리고 N은 자료수

한국화재소방학회 논문지, 제27권 제1호, 2013년

이다.

또한 측정값과 예측값의 통계 분석을 위해 표준편차, 표 본 결정계수를 사용하였다.

$$\mathbf{S} = \sqrt{\frac{\sum (\mathbf{Y}_{i} - \mathbf{y}_{i})^{2}}{n-1}}$$
(12)

$$r^2 = \frac{SSR}{SST}$$
(13)

여기서 S는 결정값의 표준오차, r²는 표본 결정계수, SSR 은 회귀에 의한 제곱합(Sum of Squares due to Regression), SST는 총 제곱합(Total Sum of Squares)이다.

5. 결과 및 고찰

5.1 순수물질의 최소자연발화온도 고찰

5.1.1 벤젠의 자연발화온도와 발화지연시간 측정

본 실험에서는 초기설정온도를 600 °C로 하여 실험한 결과 발화 42.03 sec에서는 발화가 일어나서, 초기온도 보 다 30 °C 낮게 570 °C에서 다시 실험한 결과 발화가 일어 나지 않았다. 따라서 10 °C 상승시킨 580 °C에서도 발화가 일어나지 않아 다시 3 °C 상승시킨 583 °C에서 실험한 결 과 70.45 sec에서 최소자연발화온도를 찾았다. 최소자연발 화온도 583 °C 기점으로 5~10 °C씩 상승시켜 발화지연시 간을 측정한 결과 625 °C에서는 14.208 sec, 635 °C에서는 5.90 sec, 650 °C에서는 4.50 sec 그리고 675 °C에서 1.58 sec에 발화하였다.

제시한 실험에서 얻은 발화온도와 발화지연 자료를 식 (5)을 이용하여 발화온도 의한 발화지연시간을 회귀분석한 결과 예측식은 다음과 같다⁽⁷⁾.

Figure 1. Comparison between the experimental and calculated ignition delay time for benzene.



50

45

$$\ln\tau = -32.79 + 31765 \left(\frac{1}{T}\right) \tag{14}$$

(14)를 log 자와 (1/T)로 나타내면 식(15)과 같다.

$$\log \tau = -14.24 + 13792.88 \left(\frac{1}{T}\right) \tag{15}$$

Semenov가 제시한 식(6)을 식(15)에 대입한 결과 활성화 에너지(E)는 약 262.47 kJ/mol이 된다.

식(14)에 의한 실험값과 예측값의 평균오차는 2.90 sec, 결정계수(r²)는 0.96으로써 예측값과 실험값은 거의 일치 하였다. Figure 1은 발화지연시간과 온도의 경향을 쉽게 볼 수 있도록 나타내었다.

5.1.1 노말헥산의 자연발화온도와 발화지연시간의 측정

본 실험에서 초기설정온도를 260 ℃로 하여 실험한 결 과 발화 11.66 sec에서는 발화가 일어나서, 초기온도 보다 30 ℃ 낮게 230 ℃에서 다시 실험한 결과 발화가 일어나지 않았으며, 237 ℃까지 상승시켜 실험한 결과 역시 발화가 발생되지 않았다. 따라서 3 ℃ 상승시킨 240 ℃에서 실험 한 결과 39.41 sec에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있었 다. 최소자연발화온도 240 ℃를 기점으로 5~10 ℃씩 상승 시켜 발화지연시간을 측정한 결과 260 ℃에서는 11.66 sec, 270 ℃에서는 7.02 sec, 275 ℃에서는 3.84 sec 그리고 285 ℃에서 1.85 sec에 발화하였다.

제시한 실험 자료를 Arrhenius 형태 식을 이용하여 회귀 분석한 결과 다음과 같은 예측식을 얻었다⁽⁸⁾.

$$\ln\tau = -33.7913 + 19257.88 \left(\frac{1}{T}\right) \tag{16}$$

식(16)을 log 자와 (1/T)로 나타내면 식(17)과 같다.

$$\log \tau = -14.67 + 8362.08 \left(\frac{1}{T}\right) \tag{17}$$

Semenov가 제시한 식(6)을 식(17)에 대입한 결과 활성 화에너지(E)는 약 159.13 kJ/mol이 된다.

식(17)에 의한 실험값과 예측값의 평균오차는 1.90 sec, 결정계수(r²)는 0.97로써 예측값과 실험값은 일치하였다. Figure 2는 발화지연시간과 온도의 경향을 쉽게 볼 수 있 도록 나타내었다.



Figure 2. Comparison between the experimental and calculated ignition delay time for for n-hexane.

5.1.3 순수물질의 최소자연발화온도 비교

본 연구에서는 이성분계 인화성 액체혼합물인 Benzene+ n-Hexane 계를 구성하는 2개의 순수물질에 대하여 최소자 연발화온도를 측정하였으며, 측정된 실험값을 기존 문헌값 들⁽⁹⁻²⁰⁾과 비교하여 Table 1에 나타내었다.

Benzene의 최소자연발화온도 측정값은 583 ℃로써, NFPA 325 M, SFPE, Hilado 등에서는 약 500 ℃, Sigma와 Zabetakis 는 약 560 ℃, Scott는 580 ℃ 그리고 Jackson은 약 590 ℃ 로써 문헌에 따라 100 ℃ 정도의 차이를 보이고 있다. 본 연구에서 측정된 583 ℃는 Ignition과 Scott의 문헌값과 비 슷하므로 본 연구에서 제시한 측정값은 공정에서 고려할 수 있다고 판단된다.

n-Hexane의 최소자연발화온도 측정값은 240 °C로써, NFPA, SAX, Ignition, Hilado, CRC, Lange 등에서는 225 °C, Sigma, Scott 등 250 °C 그리고 Jackson은 260 °C 로써 약 35 °C의 차이를 보이고 있다. 본 연구에서 제시한 240 °C는 Setchkin과 일치하므로 공정에 이용하여도 타당 하고 판단된다.

5.2. Benzene과 n-Hexane 계의 자연발화온도 측정

5.2.1 Benzene(0.9)+n-Hexane(0.1) 계의 자연발화온도 본 실험에서는 얻은 Benzene의 순수물질 자연발화온도

 Table 1. Comparison of Autoignition Temperatures (AIT) between Experimental Data and Several Reported Data for Pure Substances

Compounds	AITs (°C)												
Compounds	This study	NFPA	Sigma	SAX	Ignition	Hilado	SFPE	Scott	Zabetakis	Jackson	CRC	Lange	Setchkin
Benzene	583	498	561.7	562	580	498	498	580	562	591.7	498	562	559
n-Hexane	240	225	250	225	223	227	233	248	234	260	225	225	240

를 고려하여 400 ℃, 410 ℃, 450 ℃에서 실험한 결과 발 화가 일어나지 않았고, 여기서 10 ℃ 올린 460 ℃에서 실 험한 결과 11.78 sec에서 발화되어, 2~3 ℃씩 낮게 설정하 여 실험한 결과 455 ℃, 13.91 sec에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있었다. 최소자연발화온도를 기준으로 5~10 ℃씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 480 ℃에서는 5.68 sec, 500 ℃에서는 3.26 sec, 520 ℃에서는 2.74 sec 그리고 550 ℃ 에서는 2.32 sec에 발화하였다.

5.2.2 Benzene(0.7)+n-Hexane(0.3) 계의 자연발화온도

본 실험에서는 320 °C, 330 °C에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 여기서 10 °C 올린 340 °C에서 실험한 결과 2.62 sec에서 발화되어, 2~3 °C씩 낮게 설정하여 실 험한 결과 333 °C, 2.91 sec에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있었다. 최소자연발화온도를 기준으로 5~10 °C씩 상승 시켜 발화온도를 측정한 결과, 350 °C에서는 2.24 sec 그리 고 360 °C에서는 1.87 sec에 발화하였다.

5.2.3 Benzene(0.5)+n-Hexane(0.5) 계의 자연발화온도

본 실험에서는 260 ℃, 265 ℃에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 여기서 15 ℃ 올린 270 ℃에서 실험한 결과 9.93 sec에서 발화되어, 2 ℃ 낮게 설정하여 실험한 결과 268 ℃, 9.93 sec에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있 었다. 최소자연발화온도를 기준으로 5~10 ℃씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 280 ℃에서는 5.33 sec, 300 ℃에 서는 3.27 sec, 320 ℃에서는 2.32 sec, 그리고 340 ℃에서 는 1.84 sec에 발화하였다.

5.2.4 Benzene(0.3)+n-Hexane(0.7) 계의 자연발화온도

본 실험에서는 220 °C, 225 °C에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않았고, 여기서 15 °C 올린 240 °C에서 실험한 결과 27.82 sec에서 발화되어, 2~3 °C씩 낮게 설정하여 실 험한 결과 228 °C, 71.46 sec에서 최소자연발화온도를 찾 을 수 있었다. 최소자연발화온도를 기준으로 5~10 °C씩 상승시켜 발화온도를 측정한 결과, 250 °C에서는 17.07 sec, 270 °C에서는 7.67 sec, 290 °C에서는 5.53 sec 그리고 310 °C에서는 2.35 sec에 발화하였다.

5.2.5 Benzene과 n-Hexane 계의 최소자연발화온도 예측 및 최소자연발화온도 거동(MAITB)

본 연구에서 얻은 측정값을 분석한 결과 조성 변화에 따 른 최소자연발화온도가 증가하는 경향을 보이고 있다. 따 라서 조성 변화에 의한 최소자연발화온도 예측 모델을 제 시할 수 있다고 판단되어, 식(8)과 식(9)를 회귀분석한 결 과 다음과 같은 최적화된 식을 얻었다.

 $T_{AIT MIX} = 245.977 - 267.46X_1 + 583.54X_1^2$ (18)

 $T_{AIT, MIX} = 238.3 - 2.14X_1 - 163.78X_1^2 + 502.09X_1^3$ (19)

Table 2. Experimental and the Predicted AITs for Benzene(X1)+n-Hexane (X2) System

Mole F	ractions	AITs (°C)					
X1	X ₂	Exp.	Eqn. (18)	Eqn. (19)			
0	1	240	246	238			
0.3	0.7	228	218	236			
0.5	0.5	268	258	259			
0.7	0.3	333	344	329			
0.9	0.1	455	478	470			
1	0	583	562	574			
A.A	A.D.		13.52	7.77			



Figure 3. Comparison of AIT prediction curves with experimental data for Benzene+n-Hexane system.

Benzene+n-Hexane 계에서 각각의 혼합조성에서 얻은 최 소자연발화온도 실험값과 예측식에 의한 예측값을 비교하 여 Table 2와 Figure 3에 나타내었다. 본 연구에서 제시한 식(19)에 의한 예측값은 실험값의 결정계수(r²)는 0.99로써 모사성이 크다. 따라서 본 연구에서 제시한 식을 이용하여 다른 조성에서의 최소자연발화온도 예측이 가능해 졌다.

이 조성에서 혼합물을 구성하는 두 개의 순수물질의 AIT 보다 낮게 측정된 최소자연발화온도거동(MAITB, Minimum Autoignition Temperature Behavior)을 보이고 있다. 일반적으로 화학공정에서 혼합물을 취급할 때 공정 안전을 목적으로 자료를 활용하는 경우 혼합물 가운데 낮 은 순수물질의 연소특성치를 활용하고 있는 것이 사실이 다. 따라서 본 연구에서 제시한 자료는 Benzene과 n-Hexane 계를 취급하는 공정에서 매우 중요한 자료로서 활 용될 수 있다.

6. 결 론

본 연구는 자연발화온도측정 장치(ASTM E659)를 사용

하여 Benzene과 n-Hexane 혼합물의 자연발화온도를 측정 하였다. 본 계를 구성하는 Benzene과 n-Hexane의 최소자 연발화온도를 측정하여 문헌값들과 비교 고찰하였고, 활성 화에너지를 계산하였다. 또한 Benzene과 n-Hexane 계의 측정된 최소자연발화온도를 이용하여 조성 변화에 따른 최소자연발화온도를 예측할 수 모델을 제시하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

1) 이성분계를 구성하는 순수물질인 Benzene과 n-Hexane 의 최소자연발화온도는 각각 583 ℃와 240 ℃로 측정되었다.

2) Benzene과 n-Hexane의 활성화에너지는 각각 262.47 kJ/mol과 159.13 kJ/mol이다.

3) Benzene과 n-Hexane계에서 혼합조성 변화에 의한 최 소자연발화온도를 측정한 결과, Benzene(0.9)+n-Hexane(0.1) 계에서는 455 °C, Benzene(0.7)+n-Hexane(0.3) 계에서는 333 °C, Benzene(0.5)+n-Hexane(0.5) 계에서는 268 °C 그 리고 Benzene(0.3)+n-Hexane(0.7)계에서는 228 °C로 측정 되었다.

4) 혼합 조성에서 이성분계를 구성하는 물질 가운데 낮 은 최소자연발화온도보다 최자연발화온도를 보이고 있는 계로서 이를 혼합물은 최소자연발화온도 거동(Minimum Autoignition Temperature Behavior(MAITB)을 보이고 있다.

4) Benzene과 n-Hexane 계에서 조성 변화에 의한 최소 자연발화온도를 예측식은 다음과 같다.

 $T_{AIT, MIX} = 238.3 - 2.14X_1 - 163.78X_1^2 + 502.09X_1^3$

여기서 X₁은 Benzene의 조성이다.

참고문헌

- 1. D. Drysdale, "An Introduction to Fire Dynamics", 2nd ed., John Wiley & Sons (1998).
- D. M. Ha, "Prediction of Autoignition Temperature of n-Decane and sec-Butanol Mixture", Journal of the Korean Institute of Fire Science & Engineering, Vol. 26, No. 3, pp. 85-90 (2012).
- D. M. Ha, "Prediction of Minimum Spontaneous Ignition Temperature (MSIT) of the Mixture of n-Pentanol and Ethylbenzene", Journal of the Korean Institute of Gas, Vol. 16, No. 2, pp. 45-51 (2012).
- 4. D. A. Crowl and J. F. Louvar, "Chemical Process Safety Fundamentals with Application", 2nd ed., Pearson Education Inc. (2002).
- I. Goldfrab and A. Zinoviev, "A Study of Delay Spontaneous Insulation Fires", Physics Letter, A 311, pp. 491-

500 (2003).

- N. N. Semenov, "Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity, Vol. 2", Princeton University Press, Princeton, N.J. (1959).
- D. M. Ha, "Investigation of Combustible Characteristics for Risk Assessment of Benzene", Journal of the Korean Society of Safety, Vol. 24, No. 5, pp. 28-33 (2009).
- D. M. Ha, "Measurement and Investigation of Combustible Properties for n-Hexane", Journal of the Korean Society of Safety, Vol. 26, No. 2, pp. 36-41 (2011).
- NFPA, "Fire Hazard Properties of Flammable Liquid, Gases, and Volatile Solids", NFPA 325M, NFPA (1991).
- 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).
- R. J. Lewis, "SAX's Dangerous Properties of Industrial Materials", 11th ed., John Wiley & Son, Inc., New Jersey (2004).
- V. Babrauskas, "Ignition Handbook", Fire Science Publishers, SFPE (2003).
- C. J. Hilado and S. W. Clark, "Autoignition Temperature of Organic Chemicals", Chemical Engineering, Vol. 4, pp. 75-80 (1972).
- 14. A. M. Kanury, "SFPE Handbook of Fire Protection Engineering; Ignition of Liquid Fuels", 2nd ed., SFPE (1995).
- 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).
- 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).
- J. L. Jackson, "Spontaneous Ignition Temperature Commercial Fluids and Pure Hydrocarbons-", Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 43, No. 12, pp. 2869-2870 (1951).
- D. R. Lide, "Handbook Chemistry and Physics", 76th ed., CRC Press (1996).
- J. A. Dean, "Lange's Handbook of Chemistry", 14th ed., McGraw Hill (1992).
- N. P. Setchkin, "Self-Ignition Temperatures of Combustible Liquids", Journal of Research, National Bureau of Standards, Vol. 53, No. 1. pp. 49-66 (1954).