

## 2성분계 가연성액체혼합물의 인화점

하동명<sup>†</sup> · 목연수\* · 최재욱\*

세명대학교 산업안전공학과

\*부경대학교 안전공학과

(1998년 2월 3일 접수, 1998년 12월 21일 채택)

## Flash Points of a Flammable Liquid Mixture of Binary System

Dong-Myeong Ha<sup>†</sup>, Yun-Soo Mok\* and Jae-Wook Choi\*

Dept. of Industrial Safety Engineering, Semyung University, Jecheon 390-711, Korea

\*Dept. of Safety Engineering, Pukyong National University, Pusan 608-739, Korea

(Received 3 February 1998; accepted 21 December 1998)

### 요 약

가연성액체의 위험지수는 인화점에 따라 구분된다. 인화점의 구분은 혼합용제와 같은 가연성액체를 안전하게 취급하기 위해서 매우 중요하다. 모든 인화점 거동의 기초는 증기압과 폭발한계이다. 순수성분 및 혼합용제의 인화점은 라울의 법칙, 달톤의 법칙, 트사틀리에 법칙 그리고 활동도계수 모델을 사용함으로써 계산할 수 있다. 본 연구에서는 가연성 2성분계인 메틸에틸케톤과 톨루엔계의 하부인화점과 상부인화점의 실험자료를 라울의 법칙과 van Laar식에 의해 계산된 값과 비교하였다. 그 결과 메틸에틸케톤과 톨루엔계의 하부인화점의 실험자료는 라울의 법칙에 의해 예측된 값과 일치하였고, 상부인화점의 실험자료는 van Laar식에 의해 예측된 값과 일치하였다. 제시한 방법론에 의해 가연성혼합용제의 인화점 실험자료의 신뢰도 평가가 가능하다.

**Abstract**—The hazardous index of a flammable liquid is classified according to its flash point. A classification of the flash points is important for the safe handling of flammable liquids such as solvent mixtures. Basic to all flash points behavior are vapor pressure and explosive limits(lower explosive limit and upper explosive limit). The flash points of pure substances and solvent mixtures can be calculated with the appropriate use of the fundamental laws of Raoult, Dalton, Le Chatelier and activity coefficient models. In this study, experimentally determined lower and upper flash points of M.E.K.-toluene system were compared with the calculated values by using Raoult's law and van Laar equation. The lower flash points were in agreement with the predicted values by Raoult's law, and the upper flash points were in agreement with the predicted values by van Laar equation. By means of this methodology, it is possible to evaluate reliability of experimental data of the flash points of the flammable mixtures.

Key words: Flash Point, Flammable Liquid, Vapor Pressure, Explosive Limits, Le Chatelier

### 1. 서 론

화학공정설계에서 가장 먼저 해야 할 것은 반응물, 중간생성물, 생성물 및 부산물에 대한 물성치인 물리 및 화학적 특성, 안전성(폭발성, 산화성, 급수성, 인화성, 발화성, 부식성), 독성 등을 파악하는 것이다.

공정상에서 가연성물질의 생산, 처리, 운송, 저장시 취급 부주의로 화재, 폭발 및 유해물질의 누출이 야기될 수 있다. 따라서 가연성물질의 안전한 취급을 위해서는 이들 물질의 기초적 안전특성(safety property) 자료인 인화점(flash point)에 대한 지식이 필요하다. 인화점은 가연성액체의 화재 위험성을 나타내는 지표로, 가연성액체 액면 가까에서 인화할 때 필요한 증기를 발산하는 액체의 최저온도로

정의된다. 인화점은 하부인화점(lower flash point)과 상부인화점(upper flash point)으로 나뉘며, 일반적으로 인화점이란 하부인화점을 말한다[1].

인화점 측정 방법으로는 Abel방식, Tag방식, Pensky-Martens방식, Cleveland개방식 그리고 Setaflash방식 등이 있으며, 일반적으로 인화점이 80 °C 이하인 경우에는 Tag밀폐식을, 80 °C 이상인 경우에는 Cleveland개방식을 사용하고 있다[2]. Yagyu[3, 4]은 Tag밀폐식의 인화점 측정은 인화점 시험기의 증기농도가 지시온도에서 포화농도에 도달하지 않고, 용기 중에 균일농도가 되지 않으며, 시험불꽃의 위치가 용기의 상부에 있으므로 화염이 하향전파된다는 등의 원인으로 실제의 하부인화점과의 사이에 오차가 발생한다고 지적하였다. 이 때문에 유통법의 인화점 측정 장치를 사용하는 것이 가연성액체의 기액평형(vapor-liquid equilibrium) 상태를 만족시키는 하부인화점과 상부인화점을 얻을 수 있다고 보고되고 있다. 이 방법은 증발관

<sup>†</sup>E-mail: hadm@venus.semyung.ac.kr(www.chollian.net/~Hadm)

의 건조 증기를 유통시키기 때문에 유통법이라고 하며, 기존의 측정 방식들이 하부인화점만 측정할 수 있는데 비해 상부인화점도 측정할 수 있는 특징을 지니고 있다.

화학물질은 순수물질로 사용되는 경우보다는 몇 가지 순수물질이 섞인 혼합물질로 사용되는 경우가 대부분이다. 물질보건안전자료(MSDS, Material Safety Data Sheets) 제도가 의도하는 것은 화학물질을 안전하게 취급함으로써 사고를 예방하는 것이다. 이러한 목적을 달성하기 위해서 물질안전보건자료는 혼합물 자체의 위험성 시험을 거쳐 평가되고 이를 바탕으로 작성하는 것이 원칙이다. 그러나 현실적으로 유해 위험성, 안전성 등의 제약때문에 장기적이고 종합적 시험을 거쳐 정확하게 평가된 경우는 전세계적으로도 그리 많지 않으며, 특히 우리 나라에서는 이에 대한 연구가 거의 없는 상태이다. 따라서 대부분의 화학산업에서 사용하고 있는 수많은 가연성혼합용제의 위험성을 판정하기는 그만큼 어려움이 있다.

본 연구에서는 산업 현장에서 많이 취급하는 혼합용제의 인화점을 유통법에 의해 하부인화점과 상부인화점을 측정하고, 실험자료의 신뢰성을 살펴보기 위해서 실험값과 이상용액과 비이상용액 개념에 의한 이론값을 비교 검토하였다. 제시한 방법론을 이용하여 여러 혼합용제의 실험자료의 신뢰성을 검증하는 방법으로 사용하고, 본 연구에서 얻은 실험자료를 화재 및 폭발을 방지하는 기초자료로 제공하고자 한다. 또한 인화성혼합용액의 위험성 판정 기준이 되는 인화점을 예측하는 방법으로도 이용되기를 기대한다.

## 2. 폭발한계와 증기압 관계에 의한 인화점

### 2-1. 인화점과 폭발한계

인화점이란 화재, 폭발 위험성을 나타내는 기준으로 공기중에서 액체를 가열할 때 액체 표면에 증기가 발생하여 그 증기가 착화원에 접근할 경우 인화되는 액체의 최저온도를 말한다. 즉, 인화점은 가연성물질의 증기압이 폭발하한계(LEL, lower explosive limit)의 농도와 같을 때의 온도를 하부인화점이라 하고, 폭발상한계(UEL, upper explosive limit)와 증기압이 만나는 점을 상부인화점이라 한다. 증기압과 폭발한계에 대한 순수가연성 액체의 인화점을 Fig. 1에 나타내었다.

### 2-2. 혼합용제의 인화점 예측

가연성혼합용제의 인화점을 예측할 경우 이상용액(ideal solution)인 경우 Raoult의 법칙을 이용하여 인화점을 예측하고, 비이상용액(non-ideal solution)에 대해서는 활동도계수(activity coefficient)를 계산한 후 이를 사용하여 예측이 가능하다.

지금까지 가연성혼합용제의 인화점 연구를 살펴보면, Johnston[5]은 이상용액의 개념인 Raoult의 법칙을 이용하여 유기수용액(물과

에탄올)에 대한 인화점을 추산하는 식을 제시하였다. Thorne[6]은 가연 및 난연성분으로 이루어진 혼합물의 인화점 추산을 van Laar 식과 Clausius-Clapeyron식으로부터 활동도계수를 계산하고, 이를 이용하여 인화점을 추산한 바 있다. Gmehling 등[7]은 가연성 3성분계에 대해 그룹기여법(group contribution method)인 UNIFAC법을 이용하여 활동도계수를 계산하고, 이를 사용하여 인화점을 예측하여 문헌값과 비교하였다. Nakano[8]는 에멀션(emulsion)화된 연료의 인화점 연구로, Gmehling 등[7]이 제안한 방식과 큰 차이가 없으며 이 추산방법 역시 활동도계수를 UNIFAC법을 이용하여 계산한 후 증기압을 계산하여 인화점을 추산하였다.

본 연구에서는 실험에서 얻어진 가연성 2성분계 인화점 자료의 신뢰성을 살펴보기 위해서 먼저 순수가연성물질에 대한 하부인화점과 상부인화점을 Fig. 1에 나타낸 바와 같이 폭발한계와 증기압이 만나는 점에서 예측할 수 있다.

$$\frac{P_i^s}{L_i} = 1 \quad (1)$$

$$\frac{P_i^s}{U_i} = 1 \quad (2)$$

여기서  $P_i^s$ 는 포화증기압,  $L_i$ 는 폭발하한계 그리고  $U_i$ 는 폭발상한계이다.

순수성분의 인화점 예측 이론을 근거로 하여 2성분계 이상 다성분계의 인화점을 예측을 위해 Le Chatelier 법칙을 이용하였다. 이 법칙을 각 물질의 분압과 폭발한계로 나타내면 다음과 같다.

$$\sum_{i=1}^n \frac{P_i}{L_i} = 1 \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^n \frac{P_i}{U_i} = 1 \quad (4)$$

여기서  $P_i$ 는 부분압이다. 이상용액인 경우 Raoult의 법칙에 의해 부분압은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$P_i = x_i P_i^s \quad (5)$$

비이상용액인 경우  $P_i$ 는 보정계수인 활동도계수( $\gamma$ )를 이용한 식으로 다음과 같이 표현된다.

$$P_i = \gamma_i x_i P_i^s \quad (6)$$

또한 식 (3)과 (4)에 의한 혼합용제의 하부인화점과 상부인화점을 예측하기 위해서 증기압 계산식은 널리 사용되는 Antoine식[9]을 이용하였다.

인화점을 예측하기 위해서는 증기압에 대한 자료뿐만 아니라 폭발한계(연소한계)에 대한 지식도 필요하다. 폭발한계란 발화원이 존재할 때 가연성가스와 공기가 혼합하여 일정 농도범위내에서만 연소가 이루어지는 범위를 말한다. 폭발한계는 폭발하한계와 상한계로 나누어지며 이들은 온도, 압력, 산소의 농도, 불활성가스 등의 영향을 받는다. 일반적으로 폭발한계의 자료는 1기압, 25 °C에서 가연성 물질의 부피백분율(volume percent)과 부피분율(volume fraction)로 제시되고 있다.

폭발한계는 압력이 일정할 경우 온도가 증가하면 폭발범위가 변하므로 이에 관한 실험식을 Zabetakis[10]는 다음과 같이 제시하였다.

$$L_i(t) = L_i(25) - 0.182(t - 25)/\Delta H_{ci} \quad (7)$$

$$U_i(t) = U_i(25) + 0.182(t - 25)/\Delta H_{ci} \quad (8)$$

여기서  $L_i(25)$ 는 1기압, 25 °C에서의 폭발하한계,  $L_i(t)$ 는 온도변화에

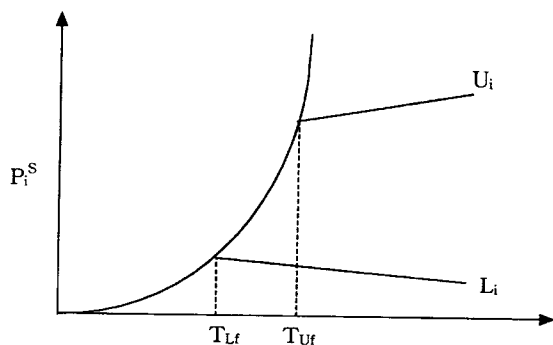


Fig. 1. Flash temperature( $T_{Lf}$  and  $T_{Uf}$ ) for a pure substance by means of vapor pressure and explosive limits.

다른 폭발한계,  $U(25)$ 는 1기압, 25 °C에서의 폭발상한계,  $U(t)$ 는 온도변화에 따른 폭발상한계 그리고  $\Delta H_c$ 는 연소열이다.

비이상용액인 경우 van Laar을 이용하여 활동도계수를 계산하였으며, 이성분계 적용시 계산식은 다음과 같다.

$$\ln \gamma_1 = A_{12} \left( \frac{A_{21} x_2}{A_{12} x_1 + A_{21} x_2} \right)^2 \quad (9)$$

$$\ln \gamma_2 = A_{21} \left( \frac{A_{12} x_1}{A_{12} x_1 + A_{21} x_2} \right)^2 \quad (10)$$

여기서  $A_{12}$ 와  $A_{21}$ 는 van Laar 상수로서, 이들은 기액평형 자료가 있을 경우 문헌에 제시되어 있다[11].

이와 같이 Modified Raoult의 법칙, Dalton의 법칙, Le Chatelier의 법칙 그리고 활동도계수 추산식 등을 사용하여 가연성물질의 인화점들을 예측할 수 있다.

### 3. 실험

#### 3-1. 실험장치

본 실험에 사용된 장치를 Fig. 2에 나타내었다. 이 장치는 냉동장치, 항온조, 폭발통(연소통) 등으로 구성되어 있다.

냉동장치는 항온조내의 온도를 -35 °C까지 냉각시킬 수 있는 냉동기로서 냉매는 R-502를 사용하였고, 압축 냉각된 R-502의 냉매의 유량을 조절하여 냉각관의 압력을 조절함으로써 임의의 저온을 유지할 수 있도록 하였다.

항온조는 35 cm × 35 cm × 35 cm의 크기로 내부에 냉각용 코일과 전열기를 설치하고, 단열이 완전히 되도록 제작하였으며, 액매(液媒)로는 50%의 에틸렌글리콜 수용액을 사용하였다. 항온조내의 가열은 2 kW의 밀폐형 전열기를 사용하였고, 온도의 조절은 비례 전류 제어 방식으로 하였다.

포화기로는 하부에 측정하고자 하는 혼합용제를 적당량을 넣고 증발관을 거쳐 오는 혼합가스를 통과시켜, 혼합용제와의 접촉면적을 최대로 하기 위해 스테인레스 거즈를 충전하였다.

폭발통은 혼합용제와 접촉 면적을 최대로 하기 위해 스테인레스 거즈로 충전된 포화기를 통과한 포화증기를 항온조에서 등온시키

고, 99.999 % Pt전극간에 아크방전을 일으켜 폭발이 일어나도록 하였다. 특히 고온하에서는 폭발통의 끝부분이 가열액매로부터 대기 중에 노출되고 있기 때문에 관내의 냉각을 방지할 필요가 있다. 이를 위해 내경 5.0 cm인 폭발통 상부 약 1/4을 2.6 cm로 좁히고, 액매에서의 노출된 높이를 2.0 cm이하로 제한하였으며, 이 부분을 피복된 전열선으로 항온조와 동일한 온도로 조정하여 주어진 온도에서 포화온도를 나타내는 혼합가스를 얻을 수 있도록 하였다.

#### 3-2. 실험재료

본 실험에서는 석유화학공업에서 널리 사용되고 있는 메틸에틸케톤과 톨루엔을 대상으로 하였으며, 각 시료는 순정화학(純正化學)주식회사의 시약 1급(동경, 일본)을 사용하였다. 이들 시약을 각각 몰비(mole fraction)로 혼합하여 혼합용제를 만들어 실험에 사용하였다. 혼합물질의 조제는 두 혼합물질의 증기압을 6 °C에서 계산하고  $P_{xy}$  diagram으로 도시하여, 증기상태에서의 몰비를 계산하여 그래프에서 구하였다.

#### 3-3. 실험방법

항온조를 설정한 온도에 이르게 한 후 장치를 항온조의 액매 중에 설치하고, 송풍기로부터 나온 공기를 건조기로 통과시켜 건조공기로 한 후 외부에 있는 증발관의 시료 액체 중에 250-300 mL/min의 양으로 분출시켜 건조공기 중에 증기를 예비 포화시켰다. 이 증기를 더욱 정확히 포화시키기 위해 항온조내의 포화기를 통과시킨다.

이 조작을 15-20분 계속하면 연소관내에는 항온조의 설정온도에 해당하는 포화증기의 혼합가스로 채워진다. 여기서 공기의 분출을 중지하고 고압변압기로부터 Pt전극간에 아크방전을 시킨다. 이때 혼합가스가 폭발범위(연소범위)내에 있으면 화염이 폭발통내에 상승하고, 폭발이 격렬할 경우에는 폭음과 함께 폭발통의 쉘리콘 마개가 튀어 오르게 된다. 폭발한계 부근에 있어서의 화염전파의 판별은 화염이 최소로 되기 때문에 육안관찰과 폭발통내에 삽입한 열전대에 의한 온도 변화로 행하였다.

폭발한계 부근에서 항온조의 온도를 1 °C폭으로 변화시켜, 동일한 방법으로 실험조작을 반복하여 행한다. 이렇게하여 얻어진 화염전파 유무의 한계에 해당하는 항온조의 온도를 시료의 인화점으로 하였으며, 동일한 실험을 반복하였을 때, 인화점 판정에 있어서의 재현성은 좋은 결과를 나타내었다.

### 4. 결과 및 고찰

그동안 우리의 연구는 가연성혼합용제에 대해 인화점을 측정하여 그 자료를 제시하는데 국한하였으나, 본 연구에서는 실험에서 얻어진 자료와 이론식에서 얻어진 추산값을 비교 검토하여 제시된 실험 자료의 신뢰성을 고찰하였다.

본 연구에서는 M.E.K.(methylethylketone)-toluene계의 인화점 실험자료가 이상용액과 비이상용액의 성질 가운데 어느 용액의 성질을 지니고 있는지 살펴보기 위해서 이상용액으로 가정할 경우 Raoult의 법칙을 적용하였고, 비이상용액인 경우에는 활동도계수를 이용한 예측식을 사용하였다.

실험자료의 신뢰성 고찰을 위해 비이상용액인 경우 활동도계수의 계산이 필요하며, 이 계산을 위해 기액평형자료가 있어야 하다. M.E.K.-toluene계의 기액평형자료는 DECHEMA 문헌[11]에서 얻었으며, van Laar식을 이용하여 활동도계수를 계산한 후 인화점을 예측하였다. Table 1에는 인화점 계산에 필요한 각 순수물질의 Antoine 상수[11], 폭발한계[12] 그리고 연소열[13]을 나타내었다.

Table 2과 3에서는 실험값과 이론식(Raoult식 및 van Laar식)에 의

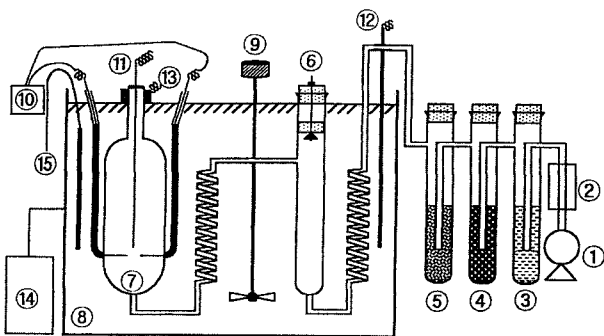


Fig. 2. Schematic diagram of experimental apparatus.

- |                             |                                    |
|-----------------------------|------------------------------------|
| ① Blower                    | ⑨ Agitator                         |
| ② Air flow meter            | ⑩ High voltage transformer         |
| ③ E.G. column               | ⑪ Thermocouple(explosion detector) |
| ④ CaCl <sub>2</sub> column  | ⑫ Thermocouple(bath)               |
| ⑤ Evaporator                | ⑬ Heater                           |
| ⑥ Saturator                 | ⑭ Refrigerator                     |
| ⑦ Explosion column          | ⑮ Bath heater                      |
| ⑧ Constant temperature bath |                                    |

Table 1. Antoine constants, explosive limits and heats of combustion for M.E.K. and toluene

Properties Components	A	B	C	LEL (vol %)	UEL (vol %)	$\Delta H_{ci}$
M.E.K.	7.06356	1261.34	221.969	2	11	2478.7
Toluene	6.95087	1342.31	219.187	1	7	3948.3

Table 2. Comparison of experimental and calculated lower flash points by Raoult's law and van Laar equation for M.E.K. (X1)-toluene(X2) system

Mole fraction		Flash point(°C)		
X1	X2	Exp.	Raoult	van Laar
0.0	1.0	5.0	1.98	1.98
0.1	0.9	6.0	0.79	0.01
0.2	0.8	3.0	-0.33	-1.60
0.3	0.7	2.0	-1.39	-2.90
0.4	0.6	1.0	-2.40	-3.97
0.5	0.5	0	-3.35	-4.86
0.6	0.4	-1.0	-4.26	-5.61
0.7	0.3	-2.0	-5.13	-6.23
0.8	0.2	-3.0	-5.95	-6.74
0.9	0.1	-4.0	-6.74	-7.17
1.0	0.0	-5.0	-7.49	-7.49
A.A.D.		-	3.30	4.24

Table 3. Comparison of experimental and calculated upper flash points by Raoult's law and van Laar equation for M.E.K. (X1)-toluene(X2) system

Mole fraction		Flash point(°C)		
X1	X2	Exp.	Raoult	van Laar
0.0	1.0	37.0	37.74	37.74
0.1	0.9	35.0	35.83	34.70
0.2	0.8	34.0	34.07	32.29
0.3	0.7	33.0	32.42	30.34
0.4	0.6	31.0	30.89	28.75
0.5	0.5	27.0	29.44	27.43
0.6	0.4	26.0	28.09	26.32
0.7	0.3	24.0	26.81	25.39
0.8	0.2	24.0	25.60	24.60
0.9	0.1	23.0	24.46	23.93
1.0	0.0	22.0	23.38	23.38
A.A.D.		-	1.28	1.16

한 예측값을 비교하여 나타내었고, 실험값과 예측값의 차이의 정도를 알기 위해 A.A.D.(average absolute deviation)를 사용하였다[14, 15].

실험자료와 Raoult식 및 van Laar식에 의한 예측값을 비교한 결과를 보다 쉽게 볼 수 있도록 Fig. 3와 4에 나타내었다.

M.E.K.-toluene계에서 하부인화점의 경우에는 Raoult의 법칙에 의해 계산된 값과 실험값의 평균온도 차이가 3.3 °C이며, 비이상성용액의 개념에 의한 van Laar식에 의한 온도 차이는 4.24 °C로써 Raoult의 법칙에 의해 계산된 결과와 일치하였다. 한편 상부인화점에서는 Raoult의 법칙에 의한 계산값과 실험값의 평균온도 차이가 1.28 °C이며, van Laar식에 의해서는 1.16 °C로써 van Laar식에 의한 계산결과와 일치함을 보여주고 있다. 우리가 제시한 실험값과 이론식에 의한 예측값의 차이는 다른 문헌에 제시된 실험값과 이론식에 의한 예측값의 차이보다 작은 결과를 보여주고 있다.

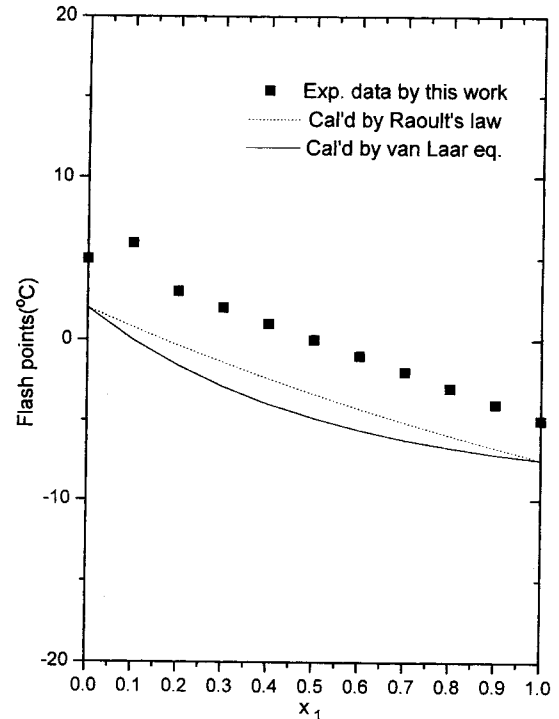


Fig. 3. Comparison of lower flash points of experimental and predicted for M.E.K.(1)-toluene(2) system.

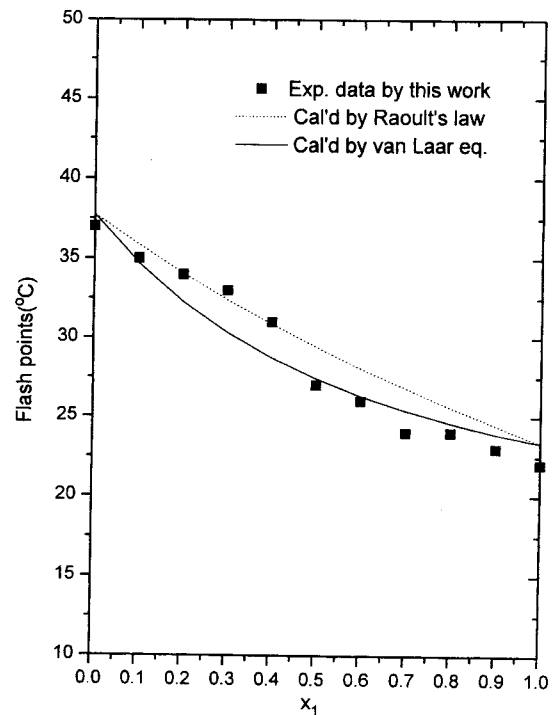


Fig. 4. Comparison of upper flash points of experiment and predicted for M.E.K.(1)-toluene(2) system.

인화점 예측에 사용된 온도변화에 따른 폭발한계 계산식인  $L_i(t)$ 는  $L_i(25)$ 에 강하게 의존하므로  $L_i(25)$  값에 따라 계산 결과가 크게 영향을 받으며,  $L_i(25)$  값은 문헌에서 인용된 값이므로 정확한 값의 사용에 따라 예측 결과에 영향을 주는 것으로 본다.  $U_i(t)$ 도  $L_i(t)$ 와 마찬가지로  $U_i(25)$ 에 크게 의존한다. M.E.K.의 낮은 농도 경우 Raoult의

법칙에 잘 따르고, toluene의 농도가 낮은 경우 van Laar식에 보다 일치하고 있는데 이는 각 물질에 사용된  $U_i(25)$  값에 영향이 있는 것으로 사료되며, 또한 M.E.K. 경우 Antoine식의 사용에 있어서 적용 온도 범위가 벗어난 범위에서 얻어진 증기압 자료이므로 이 역시 계산 결과에 약간의 영향은 준 것으로 본다. 따라서 인화성 혼합용제의 위험성을 보다 정확한 정량적 예측을 위해서는 활동도계수 추산식에 대한 연구와 증기압 계산식인 Antoine식 이외의 다른 식에 대한 연구도 계속 이루어져야 할 것으로 본다.

인화성 혼합용액의 인화점 실험자료의 신뢰성 평가가 처음 시도됨으로써 앞으로 산업 현장에서 많이 사용되고 있는 혼합용제의 실험자료에 대한 신뢰성 평가의 방법론으로 사용될 수 있다고 본다. 또한 본 연구에서 제시한 2성분계 혼합용제의 자료는 산업현장에서 안전성을 확보하는데 기초 자료로 이용할 수 있다. 앞으로 본 연구에서 제시한 방법론이 실험에서 조차 찾기 어려운 산업현장에서 취급하는 수 많은 인화성혼합용제의 위험성 판정 기준인 인화점들을 예측할 수 있는 방법으로 이용되기를 기대한다.

## 5. 결 론

2성분계 가연성액체혼합물에 대한 인화점을 측정하여 얻어진 실험값과 이론식인 Raoult의 법칙, Dalton의 법칙, Le Chatelier의 법칙 그리고 활동도계수 추산식을 이용한 계산값을 비교 검토하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- (1) M.E.K.-toluene계에서 하부인화점의 실험자료는 Raoult의 법칙에 의한 계산값과 3.3 °C 차이를 보였고, 상부인화점의 실험자료는 van Laar식에 의한 계산값과 1.16 °C 차이를 보였다.
- (2) 인화점 예측에 사용된 식에서 예측값은 폭발한계값에 큰 영향을 받는다.
- (3) 제시된 방법론에 의해 실험자료를 평가할 수 있는 방도가 모색되었다.
- (4) M.E.K.-toluene계의 인화점 자료는 화학공정설계에서 안전성을 확보하는데 기본적인 자료로 제공되었다.

## 감 사

본 연구는 1997년도 세명대학교 교내학술연구비 지원에 의해 수행된 연구이므로 이에 감사드립니다.

## 사용기호

A, B, C : Antoine constants

$A_{12}$ ,  $A_{21}$  : parameter in the equation of van Laar

$\Delta H_{ci}$  : heat of combustion of component i [kJ/mol]

$L_i(25)$  : lower explosive limit at 1 atm, 25 °C [vol%]

$L_i(t)$  : lower explosive limit at t °C [vol%]

$P_i$  : actual partial pressure of component i in vapor-air mixture [kPa]

$P_i^s$  : vapor pressure of component i [kPa]

t : temperature [°C]

$U_i(25)$  : upper explosive limit at 1 atm, 25 °C [vol%]

$U_i(t)$  : upper explosive limit at t °C [vol%]

## 그리스 문자

$\gamma_i$  : activity coefficient of component i

## 참고문헌

1. Meyer, E.: "Chemistry of Hazardous Materials", 2nd ed., Prentice-Hall(1990).
2. Lee, S. K. and Ha, D. M.: "Newest Chemical Engineering Safety Engineering", Donghwagisul Press, Seoul(1997).
3. Yagyu, S.: *J. of Japan Society for Safety Engineering*, **24**(3), 152 (1985).
4. Yagyu, S.: *J. of Japan Society for Safety Engineering*, **26**(5), 299 (1987).
5. Johnston, J. C.: *Chem. Eng.*, **81**(25), 122(1974).
6. Thorne, P. F.: *Fire and Materials*, **1**, 134(1977).
7. Gmehling, J. and Rasmussen, P.: *I & EC Fundam.*, **21**(2), 186 (1982).
8. Nakano, Y.: *J. of Japan Society for Safety Engineering*, **29**(2), 77 (1990).
9. Smith, J. M. and Van Ness, H. C.: "Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics", 4th ed., McGraw-Hill(1987).
10. Zabetakis, M. G.: US Bureau of Mines, Bulletin 627(1965).
11. Gmehling, J., Onken, U. and Arlt, W.: "Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection, Vol. 1, Part 1-Part 7", Deutsche Gesellschaft für Chemisches Apparatewesen(DECHEMA)(1980).
12. Lenga, R. E. and Votoupal, K. L.: "The Sigma-Aldrich Library of Regulatory and Safety Data, Vol. I-Vol. III", Sigma Chemical Company and Aldrich Chemical Company Inc.(1993).
13. Lide, D. R.: "CRC Handbook of Chemistry and Physics", 75th ed., CRC Press(1994).
14. Ha, D. M. and Park, J. C.: *HWAHAK KONGHAK*, **29**, 284(1991).
15. Kim, M. G., Ha, D. M. and Park, J. C.: *Korean J. Chem. Eng.*, **12**, 39(1995).