

# 비등점에 의한 인화점 예측 (Estimation of Flash Point)

이 두 형  
(본 협회부설 방재시험소 연구원)

“  
본고에서는 인도의 Regional Research Laboratory의 G. S. Patil 이 발표한 “비등점에 의한 인화점 예측방법”에 대하여 소개하고자 한다.

”

## 1. 서론

가연성 액체를 각각의 상대적 인화성에 따라 분류하는 데에는 밀폐

컵(Closed Cup) 인화점이 사용된다. 매년 수천 종류의 새로운 유기 화합물이 합성되어지고, 이러한 새로운 화합물에 대해선 인화점을 기준으로 위험도를 분류한다. 위험도는 곧 안전과 직결되기 때문에 인화점 측정 데이터가 필요한 것이다.

인화점 측정에는 실험적 데이터가 가장 바람직하긴 하지만 실험적 방법에 의한 데이터가 존재치 않을

경우에는 예측방법에 의존하지 않을 수 없다. 이러한 견지에서 볼 때 비등점으로부터 인화점을 예측하는 방법의 개발은 매우 유용하다.

현재 탄화수소나 윤활유와 같은 특정부류의 화합물에 대한 인화점의 예측 상관관계식이 보편적이며 할로젠(halogens)을 포함한 액체를 제외한 공유 및 비공유결합 액체 전체에 대한 인화점 예측의 실험적 상관관계식이 보고되어 있다. 이들 관계식들은 비등점, 총압력 및 액체 1몰의 완전 연소에 필요한 산소의 몰수 등에 바탕을 두고 있다. 그러나 알콜 알데히드, 케톤, 산 및 이외의 산소함유 화합물과 질소함유 화합물에 대해서 비등점에만 바탕을 둔 밀폐컵 인화점 예측관계식이 보고되지는 않았다.

이미 보고된 바 있는 밀폐컵 인화점과 비등점의 분석을 위한 실험 데이터 자료는 ‘Lange’s Handbook of Chemistry’와 ‘Aldrich Catalogue



Handbook of Fine Chemicals'에서 찾아볼 수 있다. 여기에서는 비등점(Normal Boiling Point)과 밀폐 컵 인화점 사이의 상관관계 등을 알아보고 인화점 예측 상관관계식을 도출시켰다.

## 2. 재료와 방법

151종의 알콜, 133종의 에스테르, 92종의 케톤, 45종의 알데히드, 26종의 산 및 110종의 산소함유 화합물과 393종의 질소함유 화합물을 각각의 화합물 분류별로 분석하고 이들이 결합한 화합물에 대해서도 분석하였다. 이렇게 분류한 화합물들을 Least Squares regression on analysis를 통하여 인화점 예측을 위한 상관관계식을 얻었다.

문헌상의 인화점과 비등점 사이의 관계식을 표시하는 regression line을 알콜, 산 및 기타 화합물에 대해 나타내면 다음과 같다.

$$T_F = a + bT_B + cT_B^2 \dots\dots\dots (1)$$

여기서  $T_F$  및  $T_B$ 는 각각 켈빈(kelvin)으로 나타낸 인화점 및 비등점 온도이고  $a$ ,  $b$ ,  $c$ 는 상수이다. 이들 상수들은 상관계수와 함께 <표1>에 나타내었다.

문헌상의 인화점과 예측결과 사이의 최대편차는 알콜은 약5%, 기타 산소함유 화합물은 8%, 산은 4% 및 알데히드는 약 15%이다. <표1>의 데이터를 검토해보면 식(1)은 알데히드의 인화점에 대해 만족스러운 결과를 나타내주지 못함을 보여준다.

에스테르, 케톤 및 질소함유 화합물에 대한 인화점 데이터를 나타내는 regression line은 다음과 같다.

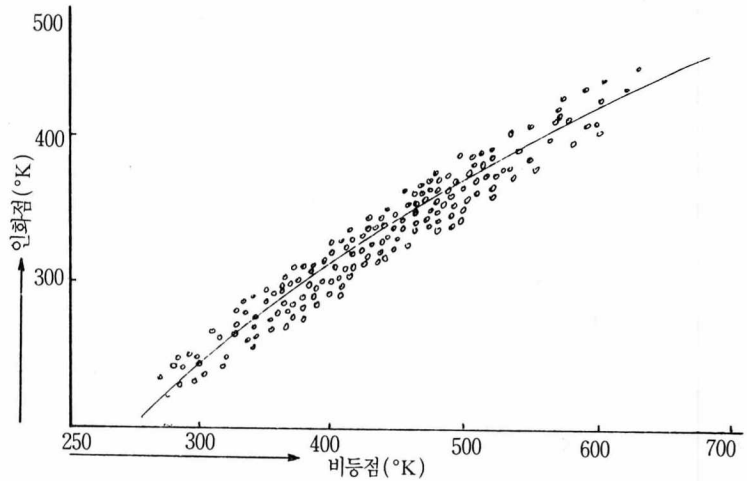
$$T_F = a + bT_B \dots\dots\dots (2)$$

<표1> 식(1)의 상수 및 상관계수 값

화합물명	a	b	c	상관계수
알콜류	241.7	-0.210	$9.57 \times 10^{-4}$	0.93
산 류	314.0	-0.429	$1.14 \times 10^{-3}$	0.94
알데히드류	-782.7	4.806	$-5.14 \times 10^{-3}$	0.46
그외 산소함유 화합물	-30.0	0.973	$-3.59 \times 10^{-4}$	0.91

<표2> 식(2)의 상수 및 상관계수 값

화합물명	a	b	상관계수
에스테르류	39.0	0.660	0.97
케톤류	46.5	0.634	0.94
질소함유화합물	55.7	0.628	0.90



<그림1> 예측 인화점 - 문헌상의 인화점도표

여기서  $a$ 와  $b$ 는 상수이다. 이 상수와 상관계수는 표(2)에 나타내었다.

이때 문헌상의 인화점과 예측 인화점 사이의 최대편차는 에스테르와 케톤은 약 6.5%, 질소함유 화합물은 7%이다.

상기 내용으로부터 식(1)은 알콜, 산 및 기타 화합물에 대한 인화점 예측에, 그리고 식(2)는 에스테르, 케톤 및 질소함유 화합물에 대한 인화점 예측식으로 이용할 수 있음을 결론지을 수 있다.

또한 위의 모든 화합물이 함께

결합되었을 때의 인화점들을 분석하여서 모든 부류의 유기화합물에서 하나의 일반 상관관계식을 찾아낼 수 있는지를 조사하였다. 이러한 경우에 인화점 데이터를 나타내는 regression line은 다음과 같이 표시할 수 있다.

$$T_F = 4.656 + 0.844T_B - 0.234 \times 10^{-3}T_B^2 \dots\dots\dots (3)$$

여기서 상관계수는 0.90이다.

식(3)을 사용했을 경우 문헌상의 인화점과 예측인화점 사이의 최대 편차는 모든 화합물에 대해 약 7.5%이다.

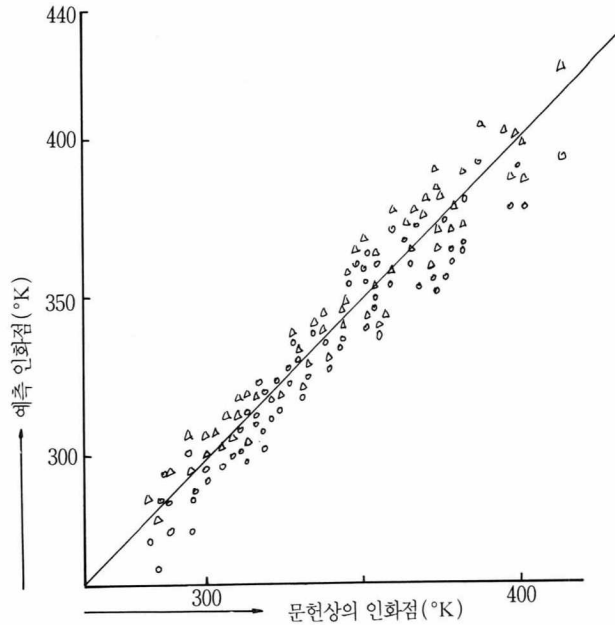
〈그림1〉은 비등점에 대한 문헌상의 인화점 데이터를 도표로 나타낸 것이다. 그림1에서의 선은 식(3)에 의한 인화점 결과를 나타낸다. 이러한 도표로부터 식(3)은 여기에서 고려한 모든 부류의 화합물의 인화점 예측에 사용할 수 있을 것을 결론지을 수 있다.

식(1) 또는 식(3) 및 식(2) 또는 식(3)을 사용하여 인화점을 비교해보면 이들 식으로부터 얻은 인화점은 알데히드를 제외하고 크게 차이가 나지 않는다는 것을 알 수 있다. 그러므로 이들에 대해서는 식(1)보다는 식(3)을 사용하는 것이 바람직하다. 이는 식(1)이 인화점 데이터를 만족스럽게 대표하지 못하기 때문이다.

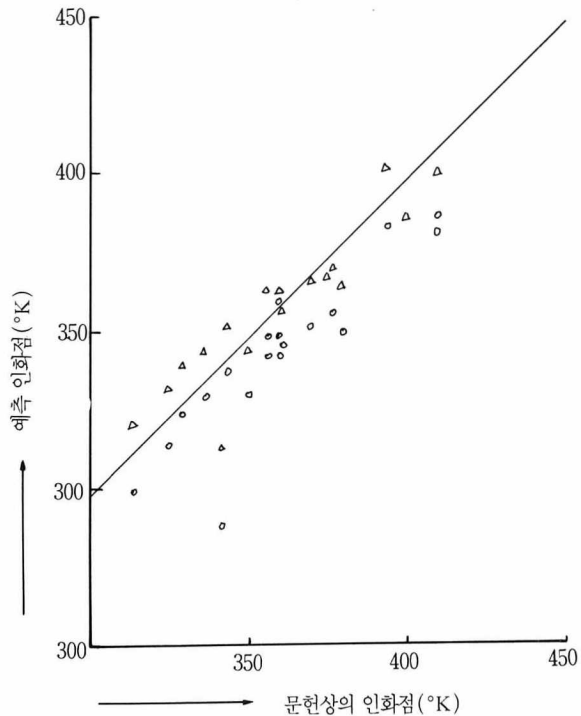
식(1)과 식(3)을 사용한 값과 문헌상의 인화점 데이터를 이용, 알콜과 산에 대한 예측인화점을 〈그림2〉와 〈그림3〉에 나타냈다.

식(3)이 알콜과 산의 인화점 예측에 사용될 수는 있지만 〈그림1〉과 〈그림3〉에서 볼 때 더욱 정확한 인화점 예측을 위해서는 식(1)이 식(3)보다 더욱 적합한 것으로 결론지을 수 있다.

또한 식(3)을 모든 부류의 유기 화합물의 인화점 예측에 사용이 가능한지의 여부를 시험해보았다. 이 시험결과 할로젠을 포함한 일부를 제외하고는 거의 모든 부류의 유기 화합물에 대해 문헌상의 인화점의 약 10%편차 범위내에서 밀폐점 인화점의 예측이 가능하다는 것을 알 수 있었다. 그러나 탄화수소의 경우에는 Butler 등의 실험관계식이 더욱 정확한 것으로 나타났다. 〈표3〉에 식(3)을 사용하여 탄화수소의 일부와 유황 및 인을 함유한



〈그림2〉 알콜류에 대한 예측 인화점 △ : 식(1)을 이용한 예측 인화점  
—문헌상의 인화점 도표 ○ : 식(3)을 이용한 예측 인화점



〈그림3〉 산에 대한 예측 인화점 △ : 식(1)을 이용한 예측 인화점  
—문헌상의 인화점 도표 ○ : 식(3)을 이용한 예측 인화점

화합물에 대한 비등점, 문헌상의 인화점 및 예측인화점을 나타내었다.

〈표3〉과 〈그림1〉의 데이터를 보면 식(3)은 상이한 유기화합물의 인화점을 예측하는데 사용될 수 있음을 나타낸다.

### 3. 결론

모든 부류의 유기화합물에 대해 비등점으로부터 밀폐 컵 인화점의 예측이 가능한 상관관계식을 도출시킬 수 있었다.

그러나 알콜, 산, 알데히드 및 기타 모든 화합물에 대해서는 다음의 특정 계산식을 추천하는 바이다.

〈표3〉 문헌상의 인화점과 예측인화점의 비교

#### (1) 탄화수소계 화합물

	화합물명	비등점 (°K)	인화점(°K)	
			문헌치	예측치
1	Benzene	352.1	262.0	272.9
2	Butylcyclohexane	461.0	314.0	344.2
3	Cyclohexane	354.0	255.0	274.4
4	Cyclohexene	356.0	261.0	275.7
5	Cyclo-octane	424.1	303.0	320.8
6	2,2-dimethylbutane	323.0	245.0	252.9
7	1,4-Diethylbenzene	454.0	329.0	339.8
8	Ethylbenzene	409.0	293.0	310.9
9	1-Hexane	342.0	250.0	266.1
10	1-Hexene	337.0	247.0	262.7
11	1-Hexyne	344.0	252.0	267.5
12	1-Decene	443.0	320.0	332.9
13	2-Methylhexane	363.0	270.0	280.5
14	1,3-Dimethylnaphthalene	536.0	382.0	390.2
15	2-Methyl-1-hexene	365.0	267.0	281.7
16	1-Octane	399.0	288.0	304.4
17	1-Octene	395.0	294.0	301.7
18	1-Tetradecane	530.0	372.0	386.3
19	Toluene	383.6	280.0	294.1
20	1,2,3-Trimethylbenzene	449.1	321.0	336.7
21	1,2,4-Trimethylbenzene	442.4	321.0	332.5
22	1,2,5-Trimethylbenzene	437.7	317.0	329.6
23	2,2,3-Trimethylbutane	353.9	267.0	274.2
24	Styrene	418.0	304.0	316.8
25	2-Hexyne	357.0	262.0	276.4
26	o-Xylene	417.4	305.0	316.4
27	m-Xylene	412.1	298.0	313.0
28	p-Xylene	411.4	303.0	312.5
29	Naphthalene	490.7	351.0	362.7
30	2-Octene	396.0	294.0	302.3

- 산 :  $T_F = 314.0 - 0.429T_B + 1.14 \times 10^{-3}T_B^2$
- 알콜 :  $T_F = 241.7 - 0.210T_B + 9.57 \times 10^{-4}T_B^2$
- 알데히드 및 기타 모든 화합물 :  $T_F = 4.656 + 0.844T_B - 0.234 \times 10^{-5}T_B^2$  ㉞

#### (2) 황화합물

	화합물명	비등점 (°K)	인화점(°K)	
			문헌치	예측치
1	Benzyl methyle sulfide	469.0	346.0	349.3
2	tert Butyl disulfide	473.0	335.0	351.8
3	1-Butanethiol	371.0	285.0	285.6
4	Cyclohexanethiol	431.0	316.0	325.6
5	Diallyl sulfide	411.0	319.0	312.2
6	Dibutyl disulfide	504.2	366.0	371.0
7	Dibutyl sulfide	461.9	349.0	344.8
8	Dimethyl sulfite	399.0	303.0	304.4
9	Dipropyl sulfone	543.0	399.0	394.1
10	2-Ethyl thiophene	406.0	294.0	309.0
11	2-Ethyl 2-thiocarboxylate	491.0	361.0	362.9
12	Phenylmethanethiol	467.0	343.0	348.0
13	1,4-Thioxane	420.0	315.0	318.1
14	2-Thiophenecarbaldehyde	471.0	350.0	350.5
15	2,2'-Thiodiethanol	555.0	383.0	401.3
16	p-Thiocresol	468.0	341.0	348.6
17	Phenyl isocyanate	435.0	328.0	327.8
18	Phenyl isothiocyanate	494.0	360.0	364.8
19	2-Methylthiophene	385.6	280.0	295.5
20	3-Methylthiophene	388.4	284.0	297.4
21	3-Methyl-2-butanethiol	391.4	291.0	299.4
22	Diethyl sulfate	482.0	351.0	357.3
23	Diethyl sulfite	431.0	326.0	325.6
24	2-Acetylthiophene	487.0	364.0	360.5
25	Allyl sulfide	411.0	309.0	312.2
26	Benzyl mercaptan	467.0	343.0	348.1
27	Vinyl sulfone	507.0	375.0	372.6
28	o-Thiocresol	468.0	336.0	348.6
29	m-Thiocresol	469.0	345.0	349.3
30	Ethyl phenyl sulfide	477.0	346.0	354.3
31	Phenethyl mercaptan	490.0	363.0	362.3

#### (3) 인화합물

	화합물명	비등점 (°K)	인화점(°K)	
			문헌치	예측치
1	Dimethyl methylphosphonate	454.0	335.2	339.8
2	Dimethyl hydrogen phosphate	443.0	333.0	332.9
3	Triphenyl phosphite	633.0	491.0	445.5
4	Triphenyl phosphine	650.0	454.0	454.8
5	Trimethyl phosphite	385.0	300.0	295.1
6	Hexamethyl phosphoramidate	506.0	378.0	372.1