



### 3-헥사논의 화재 및 폭발 특성치의 측정 및 예측

†하동명

세명대학교 보건안전공학과  
(2013년 8월 27일 접수, 2013년 12월 17일 수정, 2013년 12월 17일 채택)

## Measurement and Prediction of Fire and Explosion Properties of 3-Hexanone

†Dong-Myeong Ha

Dept. of Occupational Health and Safety Engineering, Semyung University,  
Jecheon 390-711, Korea

(Received August 27, 2013; Revised December 17, 2013; Accepted December 17, 2013)

### 요약

3-헥사논의 안전한 취급을 위해, 폭발한계는 문헌을 통해 고찰하였고, 인화점과 발화지연시간에 의한 발화온도를 측정하였다. 그 결과, 밀폐식 장치에 의한 3-헥사논(에틸프로필케톤)의 하부인화점은 18 °C로 측정되었으며, 개방식에서는 27 °C ~ 32 °C로 측정되었다. ASTM E659 장치를 사용하여 자연발화온도와 발화지연시간을 측정하였고, 3-헥사논의 최소자연발화온도는 425 °C로 측정되었다. 측정된 인화점에 의한 폭발하한계는 1.21 Vol%로 계산되었다.

**Abstract** - For the safe handling of 3-hexanone(ethyl propyl ketone), this study was investigated the explosion limits of 3-hexanone in the reference data. The flash points and AITs(auto-ignition temperatures) by ignition delay time were experimented. The lower flash points of 3-hexanone by using closed-cup tester were experimented at 18 °C. The lower flash points of 3-hexanone by using open cup tester were experimented in 27 °C ~ 32 °C. This study measured relationship between the AITs and the ignition delay times by using ASTM E659 tester for 3-hexanone. The experimental AIT of 3-hexanone was at 425 °C. The lower explosion limit(LEL) by the measured lower flash point of 3-hexanone was calculated as 1.21 Vol%.

**Key words** : 3-Hexanone, Flash point tester, Explosion limit, Autoignition temperature(AIT), ASTM E659

### 1. 서론

사업장에서 재해를 예방하거나, 최소화하기 위해서는 사업장내에서 제조, 취급, 저장되는 순수물질 뿐만 아니라 혼합물질을 포함한 원료, 중간제품 그리고 완제품의 정확한 MSDS(material safety data sheet)의 확보는 매우 중요하다. MSDS의 화재 및 폭발 관련 특성치로 폭발하한계와 상한계, 인화점, 최

소발화온도, 연소열 등을 들 수 있다[1].

인화점은 하부인화점과 상부인화점으로 나누고 있으며, 일반적으로 하부인화점을 인화점이라 한다. 인화점은 가연성 액체의 화재 위험성을 나타내는 지표로써, 가연성액체의 액면 가까에서 인화할 때 필요한 증기를 발산하는 액체의 최저온도로서 사용 장치에 따라 다른 측정값을 갖는다[2].

폭발한계는 가연성물질(가스 및 증기)을 다루는 공정안전에 중요한 변수로써, 발화원이 존재할 때 가연성가스와 공기가 혼합하여 일정 농도범위 내에서만 연소가 이루어지는 혼합범위를 말한다. 특히 폭발한

†Corresponding author:hadm@semyung.ac.kr

Copyright © 2013 by The Korean Institute of Gas

계에 영향을 주는 인자로는 온도, 압력, 불활성가스의 농도, 화염전파 방향, 장치의 표준상태, 물리적 상태 능력 등을 들 수 있으며, 폭발한계 측정이 어려운 경우 인화점을 사용하면 예측이 가능하다[2].

자연발화(Autoignition)는 가연성 혼합기체에 열 등의 형태로 에너지가 주어졌을 때 스스로 타기 시작하는 산화현상이다. 주위로부터 충분한 에너지를 받아서 스스로 점화할 수 있는 최저온도를 최소자연발화온도(Autoignition Temperature, AIT)라고 한다. AIT는 증기의 농도, 증기의 부피, 계의 압력, 실험 개시온도, 촉매, 발화지연시간 등에 영향을 받는다[3].

3-헥사논(3-Hexanone)은 케톤류로서, 상온에서 액체 상태이며 무색이고, 용제와 화학제품의 중간제품으로서 접착제 원료, 페인트, 왁스 용제 등에도 사용되고 있는 화학산업에서 중요한 물질이다. 그러나 3-헥사논에 대한 연소특성 연구는 거의 없는 실정이다. 특히 3-헥사논은 소방법의 위험물 구분에서 제4류 위험물 제2석유류(인화점 21℃미만)로 구분되어 있으나 이에 대한 검토가 필요하며, 또한 최소자연발화온도는 문헌에 제시되지 않고 있다.

본 연구에서는 3-헥사논의 인화점과 자연발화온도를 측정하고, 또한 측정된 인화점을 이용하여 폭발한계를 예측하여 기존자료에 비교 고찰하였다. 그리고 본 연구에서 제시된 3-헥사논의 자료를 활용하여 이를 사용하는 공정에서 보다 정확한 안전을 확보하고, 측정된 인화점을 통해 소방법의 위험물 구분의 재검토 연구에 이용하는데 목적이 있다.

## II. 3-헥사논의 물리적 및 연소 특성

### 2.1. 3-헥사논의 물리적 특성

각국에서는 사업장에서 사용되고 있는 유해·위험물질에 대한 안전한 취급, 처리, 수송 및 보관을 위해 MSDS 자료를 제공하고 있다. 또한 많은 핸드북과 논문들에서도 물리적 및 화학적 특성치를 제공하고 있다. 본 연구에 사용된 3-헥사논은 관용명으로 에틸프로필케톤(Ethyl Propyl Ketone)이라고 한다. Table 1에 3-헥사논의 물리적 특성을 요약하여 나타내었다[4].

### 2.2. 3-헥사논의 연소특성

3-헥사논은 위험물안전관리법에서는 제 4류 위험물의 제 2석유류이며, 산업안전보건법과 유해화학물질보건법에서는 규정되어 있지 않다. 그러나 최근 3-헥사논의 인화점을 살펴보면 제 2석유류의 기준인 인화점 21℃보다 낮은 문헌값들이 제시되고 있으므로 이에 대한 검토가 필요한 물질이다.

3-헥사논은 화재 및 폭발의 위험이 크고, 증기는 공기보다 무겁기 때문에 지면을 따라 확산하고 저지대나 밀폐공간에 축적될 수 있다. 증기 또는 가스는 원거리의 발화원으로부터 점화되어 순식간에 확산될 수 있다. 인화점이나 그 이상에서 폭발성 혼합물을 형성할 수 있고, 가열시 용기가 폭발할 수 있다. 고인화성으로서 열, 스파크, 화염에 의해 쉽게 점화된다. 증기는 점화원까지 이동하여 역화할 수 있고, 격렬하게 중합 반응하여 화재와 폭발을 일으킬 수 있다. 특히 화재시 자극성, 부식성, 독성 가스를 발생할 수 있다. 피해야할 조건은 열, 스파크 화염 등이며, 소화 시 알콜 포말, 이산화탄소 또는 물분무를 사용해야 한다.

## III. 3-헥사논의 화재 및 폭발 특성치 분석

폭발한계는 점화원의 위치에 따라 값이 달라지는데, 일반적으로 폭발범위는 점화시 화염이 위쪽으로 올라가는 상향전파에서 폭발하한계(LEL, Lower Explosion Limit)는 낮고, 폭발상한계(UEL, Upper Explosion Limit)는 높아져서 폭발범위는 넓어진다[3].

3-헥사논의 폭발한계는 유일하게 NFPA에서 하한계 1.0 Vol% 그리고 상한계 8.0Vol%를 제시하고 있으며, 최소자연발화온도는 모든 문헌에 제시되지

Table 1. Physical properties of 3-hexanone

Properties \ Component	3-Hexanone
CAS number	589-38-8
Molecular formula	C6H12O
Boiling point	123℃
Melting point	-55℃
Density	0.828 g/cm <sup>3</sup>
Vapor pressure	13.9mmHg(25℃)
Solubility(Water)	14.7g/L
Critical temperature	309.67℃
Critical pressure	33.2atm
Vapor density(Air=1)	3.46
Specipic gravity(Water=1)	0.812
Enthalpy of vaporization	35.36kJ/mol(T <sub>b</sub> )
Enthalpy of fusion	13.49kJ/mol(T <sub>m</sub> )

**Table 2.** The flash points of several reported data for 3-hexanone

Compound	Flash points [°C]						
	NFPA[5]	Sigma[6]	Dean[7]	SAX[8]	Fulka[9]	Nabert[10]	Kirk-Othmer[11]
3-Hexanone	35	35	35(O.C.)	14	14	35	35

**Table 3.** Comparison of several flash point test methods

Test methods	Test vessel diameter(cm)	Test vessel depth(cm)	Test vessel volume(ml)	Heating method
ASTM D3278 Setaflash closed-cup	5.0	1.0	2	Sample cup is electrically heated or chilled and sample temperature is kept constant
ASTM D1310 Tag open cup	5.3	5.0	70	The temperature of the specimen is increased at 1±0.25°C/min.
ASTM D92 Cleveland open cup	6.4	3.4	80	The temperature of the specimen is increased at 5-6°C/min

않고 있다.

인화점을 결정하는데 사용되는 측정 방법은 몇 가지 있다. 가장 일반적으로 사용되는 측정법은 밀폐식(Closed-cup, C.C.)과 개방식(Open cup, O.C.)이 있다. 밀폐식은 Pensky-Martens과 Setaflash 방식이 있으며, 개방식은 Tag와 Cleveland방식 등을 들 수 있다. Table 2에서는 3-헥사논의 하부인화점을 정리하였다. SAX와 Fulka는 14°C를 제시하고 있으며, NFPA를 비롯해 다른 문헌들에서는 동일하게 35°C를 제시하였다. 이는 35°C의 인화점은 개방식에 의한 측정값으로 판단되며, 14°C의 인화점은 밀폐식 장치에 의한 측정값으로 판단된다.

## IV. 실험장치 및 재료

### 4.1. 실험재료

본 연구에서 사용한 3-헥사논은 Kanto사(순도 99%)의 시료로서 별도의 정제과정을 거치지 않고 사용한다.

### 4.2. 실험장치

#### 4.2.1. 인화점 측정 장치

인화점 측정은 여러 매개변수(Parameter)에 의해 영향을 받는다. 영향을 주는 변수로는 용기형태, 시료량, 발화원, 온도조절기, 주위압력, 시료의 균일성, 실험자, 자료의 편차 등이 있다.

본 연구에서 사용된 장치인 Setaflash 밀폐식 그리고 Tag와 Cleveland 개방식의 구성 요소를 간략히 소개한다[12].

Setaflash 밀폐식 장치는 몸체부, 시료컵 장치부, 화염 공급부로 크게 나눌 수 있다. 몸체부는 가열공기조, 전원 개폐기, 전열 조절기 등으로 구성되어 있다. Tag 개방식 장치는 가연성 액체의 인화점 및 연소점 측정이 가능한 장치로서, 구성은 시료컵, 승온 다이얼, 수조, 시험염 발생 장치 등으로 구성되어 있으며, 부가 장치로는 시료 컵의 시료 수위를 조절할 수 있는 레벨수준 유지장치(Level Device)가 있다. Cleveland 개방식 장치는 인화점 및 연소점을 측정하는 장치로서, 몸체부, 시료컵 장치부, 화염 공급부로 크게 나눌 수 있다.

각 인화점 측정 장치들의 용기 특성 및 시험 방법을 요약하여 Table 3에 나타내었다.

#### 4.2.2. 자연발화온도 측정장치(ASTM E659)

본 실험에서는 액체 화학물질의 자연발화점 측정 장치로서 ASTM E659 장치를 사용하여 자연발화온도를 측정하였으며, 장치는 로, 온도조절기, 열전대, 시험플라스크, 주사기, 거울, 에어건 등으로 구성되어 있다[12].

실험 방법은 기준 온도를 설정하고, 실험 장치를 가열하고, 설정온도에 도달하면 플라스크 내부에 주사기로 시료를 0.1 ml를 넣는다. 그리고 10분 동안 관찰 후 발화가 일어나지 않으면 다시 온도를 설정한 후 10분전에 발화가 일어나면 설정 온도보다 3 0°C 낮게 설정하고 3~5°C 혹은 10°C씩 증가시키면서 측정하며, 발화가 일어났을 때 시간과 온도를 기록한다.

## V. 결과 및 고찰

### 5.1. 측정된 인화점에 의한 폭발한계의 비교

3-헥사논의 폭발한계 자료를 검토한 결과 유일하게 NFPA에서 하한계는 1 Vol% 그리고 상한계는 8 Vol%를 제시되고 있다.

측정된 인화점을 이용하여 헥사논의 폭발한계의 자료를 검증하기 위해 다음과 같은 Antoine 식을 사용하여 폭발한계를 계산하였다[13].

$$\ln P^f = 9.5000 - \frac{3144.85}{(T - 65.19)} \quad (1)$$

여기서,  $P^f$ 는 증기압(atm)이고, T는 온도(K)이다.

식 (1)을 이용하여 폭발한계를 예측할 수 있는데, Setaflash 밀폐식, Tag 그리고 Cleveland 개방식에 의해 얻어진 인화점을 이용하여 폭발한계와 상한계의 계산 결과를 Table 4에 나타내었다.

Setaflash 밀폐식 장치를 이용한 3-헥사논의 하부 인화점은 밀폐식에서는 18 °C로서 기존 자료보다는 4 °C 정도 높게 측정되었고, Tag와 Cleveland 개방식 장치를 이용한 3-헥사논의 인화점은 27 °C~33 °C로서 기존의 자료 보다 2 °C~8 °C 정도 낮게 측정되었다. 본 연구에서 측정된 인화점 18°C는 소방법의 위험물 구분에서 제4류위험물의 제 1석유류에 해당되므로 기존의 제 2석유류의 품목 지정에 대한 재검토가 필요하다.

본 실험에서 얻은 하부인화점을 적용하는 경우 폭발한계(LEL)를 예측한 결과, Setaflash 밀폐식에서 얻은 실험값 18 °C는 1.21 Vol.%로 계산되었는데, 이는 NFPA에서 제시한 1.0 Vol.%보다 약간 높게 계산되었으나 비슷한 결과를 보이고 있다. Tag 개방식에서 얻은 27°C에서는 2.06 Vol%, Cleveland 개방식 얻은 33°C는 2.87 Vol% 로 계산되었다.

### 5.2. 3-헥사논의 자연발화온도 고찰

3-헥사논의 기존 AIT 자료가 없으므로 2-헥사논의 NFPA[5]에서 제시한 423 °C를 근거로 430 °C에서

실험한 결과 6.06sec에서 발화하였다. 30°C 낮게 40 °C에서 실험한 결과 발화가 일어나지 않아서 다시 20 °C 상승시킨 420 °C에서 측정한 결과 역시 발화가 되지 않았다. 420 °C를 기준으로 1~2 °C 상승시켜 실험한 결과 425 °C, 8.94 sec에서 최소자연발화온도를 찾을 수 있었다. 이를 시작점으로 5°C 혹은 10°C 씩 상승시켜 발화지연시간을 측정한 결과 440°C에서는 4.86 sec, 450 °C에서는 4.02sec, 460 °C에서는 3.96 sec 그리고 480 °C에서는 1.68sec에서 발화하였다. 본 연구에서 측정된 3-헥사논의 AIT 425 °C는 공정 안전에 활용할 수 있는 새로운 자료라고 할 수 있다.

제시한 실험 자료를 선형적인 Arrhenius 형태 식과 비선형 형태 식을 이용한 최적화된 식은 다음과 같다.

$$\ln \tau = -16.94 + 13273.5 \left( \frac{1}{T} \right) \quad (2)$$

식 (2)를  $\log \tau$ 와  $\left( \frac{1}{T} \right)$ 의 관계로 다시 표현하면 다음과 같다.

$$\log \tau = -7.36 + 5764.62 \left( \frac{1}{T} \right) \quad (3)$$

식 (3)에 의한 예측된 발화지연시간들을 실험값과 비교하여 Table 5과 Fig. 1에 나타내었다. 추산값과 문헌값의 차이의 정도를 알기 위해 A.A.D.(Average Absolute Deviation)을 와 결정계수( $r^2$ )을 사용하였다[12].

$$A.A.D. = \sum \frac{|\tau_{est.} - \tau_{exp.}|}{N} \quad (4)$$

$$r^2 = \frac{SSR}{SST} \quad (5)$$

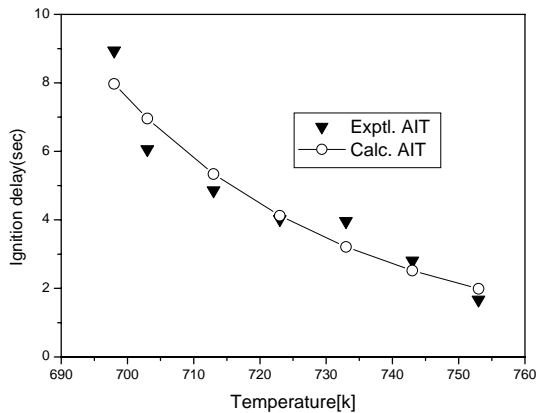
여기서  $\tau_{est.}$ 는 추산식에 의해 추산된 발화지연시간이고,  $\tau_{exp.}$ 는 실험값이며, N은 자료수,  $r^2$ 는 표본 결정계수, SSR은 회귀에 의한 제곱합(Sum of Squares due to Regression), SST는 SSR과 잔차에

**Table 4.** Estimated explosion limits by experimental lower flash point for 3-hexanone

Testers	Experimental lower flash points(°C)	Estimated LEL by lower flash points(Vol.%)
Setaflash	18	1.21
Tag	27	2.06
Cleveland	33	2.87

**Table 5.** Comparison of experimental and calculated ignition delay time by the AIT for 3-hexanone

No.	T[K]	$\tau_{exp.}[s]$	$\ln\tau_{exp.}$	$\tau_{est.}(Eq. 2)$
1	698	8.94	2.1905	7.97
2	703	6.06	1.8017	6.96
3	713	4.86	1.5810	5.34
4	723	4.02	1.3913	4.12
5	733	3.96	1.3762	3.21
6	743	2.81	1.0332	2.52
7	753	1.67	0.5128	1.99
A.A.D.	-	-	-	0.54



**Fig. 1.** A comparison between the experimental and calculated delay times for 3-hexanone.

의한 제곱합(Sum of Squares due to Residual Error)의 합이다.

식 (2)에 의한 예측값과 실험값 사이의 평균절대 오차는 0.54초이며, 결정계수( $r^2$ )는 0.92로서 실험값과 일치하고 있다. 일반적으로 Semenov가 제시한 식 (6)를 이용하면 활성화에너지(E, Activation Energy)를 얻을 수 있다[14].

$$\log\tau = \frac{52.55E}{T} + B \quad (6)$$

식 (3)을 식 (6)에 대입하여 계산된 활성화에너지는 109.70 kJ/mol이다.

## VI. 결론

본 연구에서는 3-헥사논의 인화점과 최소자연발화온도(AIT)를 측정하였고, 폭발한계는 측정된 인화점을 사용하여 예측하였다. 또한 3-헥사논의 측정된 발화온도와 발화지연 시간을 이용하여 활성화에너지를 계산하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 밀폐식 장치에 의한 3-헥사논의 하부인화점은 18 °C, 개방식에서는 27 °C와 33 °C로 측정되었다
- 2) Setaflash 장치에서 얻은 3-헥사논의 하부인화점 18 °C를 이용하여 계산된 폭발한계는 1.21 Vol.%였다.
- 3) 3-헥사논의 최소자연발화온도는 모든 문헌에 제시되지 않고 있으나, 본 연구에서는 425 °C로 측정되었다.
- 4) 3-헥사논의 자연발화온도와 발화지연시간의 관계는 다음과 같다.

$$\log\tau = -7.36 + 5764.62\left(\frac{1}{T}\right)$$

- 5) Semenov식에 의한 3-헥사논의 활성화에너지 (E)는 109.70 kJ/mol이었다.
- 6) 본 연구에서 측정된 3-헥사논의 하부인화점 18 °C는 소방법의 위험물 구분에서 제4류위험물의 제1석유류에 해당되므로 기존의 제2석유류의 품목 지정에 대한 재검토가 필요하다.

## 참고문헌

- [1] Willey, R." Understanding a Safety Data Sheet (SDS) in Regarding to Process Safety" Procedia

- Engineering, 45, 857-867, (2012)
- [2] Lees F.P., *Loss Prevention in the Process Industries*, Vol. 2, 2nd ed., Butterworth-Heinemann, (1996)
- [3] Cote, A.E., *Fundamentals of Fire Protection*, NFPA, (2004)
- [4] Lide, D.R., *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 75th ed., CRC Press, (1994)
- [5] NFPA, *Fire Hazard Properties of Flammable Liquid, Gases, and Volatile Solids*, NFPA 325M, NFPA, (1991)
- [6] Lenga, R.E. 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)
- [7] Dean, J.A., *Lange's handbook of Chemistry*, 14th Ed. McGraw-Hill, (1992)
- [8] Lewis, R.J., "SAX's *Dangerous Properties of Industrial Materials*", 11th ed., John Wiley & Son, Inc., N.J., (2004)
- [9] Flick, E.W., *Industrial Solvent Handbook*, 3rd. ed., Noyes, Data Corp., Park Ridge, New Jersey, (1985)
- [10] Nabert, N. and G. Schoen, *Sicherheitstechnische Kennzahlen Brennbarer Gases und Daempfe*, 2nd ed., Deutscher Eichverlag GmbH, Brannschweig, West Germany.
- [11] *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, 3rd ed., John Wiley and Sons Inc., (1978)
- [12] Ha, D.M. "The Investigation of Compatibility of Combustible Characteristics for n-Tridecane", *J. of the Korean Society of Safety*, Vol. 27, No. 3, pp. 83-88, 2012.
- [13] Reid, R.C., J.M. Prausnitz, B.E. Poling, *The Properties of Gases & Liquids*, 4th ed. McGraw-Hill, (1992)
- [14] Semenov, N.N., *Some Problems in Chemical Kinetics and Reactivity*, Vol. 2, Princeton University Press, Princeton, N.J., (1959)