

化学工学量論 2012 伊東

4/10(火) 第1回 化学工学とは・単位と次元・単位換算法

4/17(火) 第2回 データの取り扱い・グラフ

4/24(火) 第3回 モデル解析の道具

5/1(火) 第4回 物質収支

5/8(火) 第5回 反応系の物質収支

5/15(火) 第6回 プロセスの物質収支

5/22(火) 第7回 理想気体と実在気体

5/29(火) 第8回 蒸気圧と湿度

6/5(火) 第9回 相平衡

6/12(火) 第10回 熱力学第一法則・気体のエンタルピー

6/19(火) 第11回 熱化学・生成熱・燃焼熱

■6/26(火) 第12回 反応熱・断熱反応温度

7/3(火) 第13回 反応速度と平衡

7/10(火) 第14回 非定常物質収支・エネルギー収支

7/24(火) 第15回 熱および物質移動と湿球温度

7/31(火) 期末試験

火曜 3,4 限(10:45-12:15) 講義室 S323

演習: 情報ネットワーク演習室第2(E)(S4 3F)

毎回演習レポート(筆記および Excel プリントアウト)を課します。講義時間内に提出のこと。

(講義時間内に提出できなかった場合の×切は当日17:00, 提出は南1 421 伊東居室前の Box へ。)

演習・実習用の Excel シートテンプレートファイルは以下にあります。当日のフォルダ“bce_”をデスクトップにコピーして使ってください。

1. [エクスプローラ]
2. “¥nest2.g.sic.titech.ac.jp¥home0”を入力
3. “usr2/ito-a-ac/”に入る

第12回 エネルギー収支3 断熱反応温度

1 標準生成熱 $\Delta_f H^\circ$ [kJ/mol]からの標準反応熱 $\Delta_r H^\circ$ [kJ]の計算

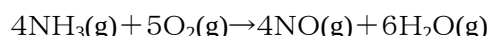
どんな反応でも反応中の各物質の標準生成熱の値があれば, 反応に関わるモル数 n を考慮して, 次式により標準状態における標準反応熱が求められる。(「アトキンス」では n (mol, 物質質量)でなく ν (量論係数))

$$\Delta_r H^\circ = \sum n_i \Delta_f H^\circ_{i\text{生成物質}} - \sum n_i \Delta_f H^\circ_{i\text{反応物質}}$$

(標準状態の反応熱) = (生成物質の Σ (物質質量) $\times$ (標準生成熱)) - (反応物質の Σ (物質質量) $\times$ (標準生成熱))

【例題1】生成熱から反応熱1

右の生成熱のデータより反応:

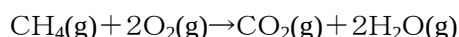


の標準反応熱を求めよ。(基準: NH_3 4 mol)

	$\Delta_f H^\circ$ [kJ/mol]
$\text{NH}_3(\text{g})$	-46.14
$\text{O}_2(\text{g})$	0
$\text{NO}(\text{g})$	90.3
$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	-241

【例題2】生成熱から反応熱2

メタンの燃焼反応:



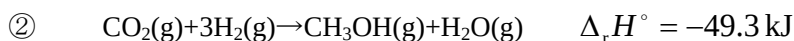
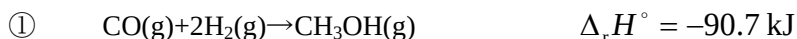
(各成分の標準生成熱 $\Delta_f H^\circ$ [kJ/mol]) -74.9 0 -393.8 -242.0

の反応熱を求めよ。

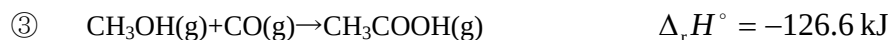
【例題3】反応熱から生成熱

メタノールは水素と一酸化炭素または二酸化炭素の反応で合成される。その反応と反応熱は以下のようで

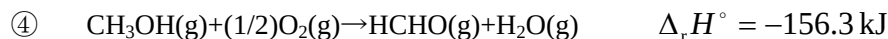
ある。基準は着目物質 1 mol。



合成されたメタノールを原料として次の反応:



により酢酸が合成され、次の反応:



によりホルムアルデヒドが生成する。

酢酸の生成熱は $\Delta_f H^\circ = -438.1 \text{ kJ/mol}$,ホルムアルデヒドの生成熱は $\Delta_f H^\circ = -115.8 \text{ kJ/mol}$

である。(酸素および水素の生成熱は 0。)メタノール, 一酸化炭素, 二酸化炭素, 水($\text{H}_2\text{O(g)}$)の生成熱 [kJ/mol]を求めよ。(私が作った入試問題)

(解) メタノール, 一酸化炭素, 二酸化炭素, 水($\text{H}_2\text{O(g)}$)の生成熱を各々 a, b, c, d とすると、

$$\textcircled{1} \quad -90.7 = a - b$$

$$\textcircled{2} \quad -49.3 = d + a - c$$

$$\textcircled{3} \quad -126.6 = -438.1 - a - b$$

$$\textcircled{4} \quad -156.3 = -115.8 + d - a$$

である。この連立方程式を解いて、 $a = -201, b = -111, c = -393, d = -241$ 。

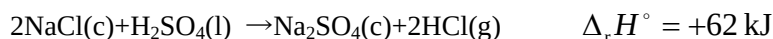
【例題4】ルブラン法の諸反応

石鹼およびガラスの原料であるソーダ(炭酸ナトリウム)のはじめての工業的製法であるルブラン法は近代化学工業の発祥の技術である。このプロセスをエンタルピー変化で検討する。

(解) ルブラン法では先ず食塩と硫酸から硫酸ソーダと塩酸が作られる。



この合わせた反応の反応熱は次のようである。(基準: NaCl 2 mol)

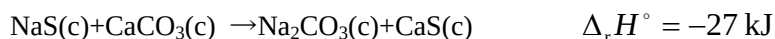


$$\Delta_f H^\circ [\text{kJ/mol}] \quad -411 \quad -811 \quad -1387 \quad -92$$

次に得られた硫酸ソーダに石灰石とコークスを混合し、灼熱融解させ、黒灰とよばれる溶融塊を作る。(各 1 mol あたり)



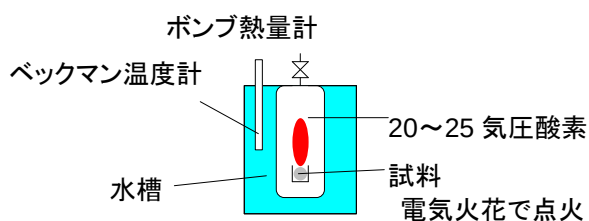
$$\Delta_f H^\circ [\text{kJ/mol}] \quad -1387 \quad 0 \quad -373 \quad -393$$



$$\Delta_f H^\circ [\text{kJ/mol}] \quad -373 \quad -1207 \quad -1130 \quad -477$$

この黒灰を水で抽出したのち、硫化カルシウムを分離し、得られる炭酸ソーダ水溶液を濃縮することで結晶炭酸ソーダが得られる。これを焼いてソーダ灰とする。ルブラン法は生成熱の低い(反応性の小さい)無機物質の反応を巧みに組み合わせたものである。

2 標準燃焼熱 $\Delta_c H^\circ$ と生成熱 $\Delta_f H^\circ$



標準生成熱はすべての反応熱が計算できる基準であるが、我々が実際に測定できるのは標準燃焼熱 $\Delta_c H^\circ$ である。燃焼熱は熱量計で実際に分子を燃やして測定される。標準生成熱は燃焼熱などから推算される値である。

燃焼熱を測定する方法: ボンベ中で試料を加圧酸素で燃やし、室温に戻ってから外側の水槽の温度変化で発生熱量を測定する。この過剰酸素下での燃焼により測定された発熱量が燃焼熱 $\Delta_c H^\circ$ (Combustion) である。物性値としては物質 mol あたりで表す。

この測定方法に基づく標準燃焼熱 $\Delta_c H^\circ$ の定義:

(a) 炭素はすべて $\text{CO}_2(\text{g})$, 水素はすべて $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$ となる。他の元素も指定。

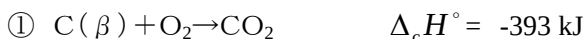
(b) 基準は標準状態 25°C , 1気圧

なお、実際の燃焼反応では発生 H_2O は水には戻らず水蒸気として系を去るので、生成物は $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ である。燃焼熱の定義のように生成物が $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$ の場合を総発熱量, $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ の場合を真発熱量という。つまり実用上は燃焼熱のうち水蒸気の潜熱分: $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \quad \Delta H^\circ = +44.0 \text{ kJ}$

は利用できない。

【例題5】燃焼熱から生成熱を求める1

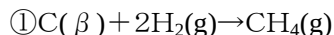
以下の燃焼熱から CO の生成熱を求めよ。



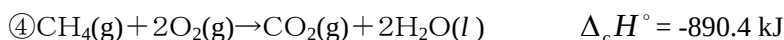
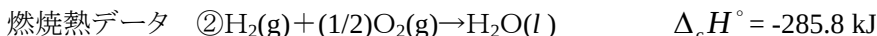
以上は CO 1 mol あたりで計算しているので、これより CO の標準生成熱 $\Delta_f H^\circ = -110 \text{ kJ/mol}$ である。

【例題6】燃焼熱から生成熱を求める2

以下の燃焼熱データからメタン CH_4 の標準生成熱:



を求めよ。



$2 \times \text{②} + \text{③} - \text{④} = \text{①}$ なので、①の $\Delta_f H^\circ = 2 \times (-285.8) + (-393.5) - (-890.4) = -74.85 \text{ kJ}$ 。以上は CH_4 1 mol あたりで計算しているので、これより CH_4 の標準生成熱 $\Delta_f H^\circ = -74.85 \text{ kJ/mol}$ である。

【参考】都市ガスの主成分はメタンである。この燃焼熱をガスの体積 1m^3 (44.6 mol) 当りに換算すると、(メタンの燃焼で発生する熱量) = 890.4 kJ/mol (-(メタンの燃焼熱))

$$= 39,750 \text{ kJ/m}^3 = 9,510 \text{ kcal/m}^3 = 9.5 \text{ Mcal/m}^3$$

(プロパンの燃焼で発生する熱量) = 2220 kJ/mol (-(プロパンの燃焼熱))

$$= 99,000 \text{ kJ/m}^3 = 23,700 \text{ kcal/m}^3 = 24 \text{ Mcal/m}^3$$

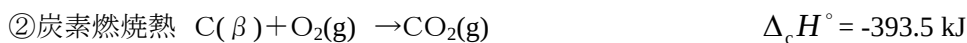
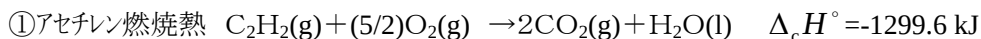
となる。ガス器具に「12A, 13A 用」などと書かれているように、都市ガスは 4A~13A までの種類で分類されているが、数字はおおよそ Mcal/m^3 単位での燃焼熱をあらわす。小さいガストーブの 13A ガスの流量(消費量)が $0.23 \text{ m}^3/\text{h}$ とした場合、発生熱量は 3,000



kcal/h=3.5 kW。)

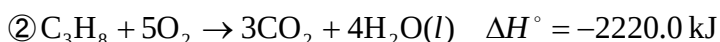
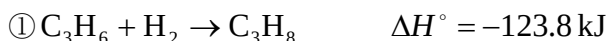
【例題7】 燃焼熱から生成熱の計算2

以下の燃焼熱からアセチレン $C_2H_2(g)$ (生成反応: $2C(\beta) + H_2(g) \rightarrow C_2H_2(g)$)の生成熱を求めよ。



【例題8】 反応熱等からの生成熱の計算3

以下の燃焼熱等からプロピレンの生成熱を求めよ。



【演習1】指定の反応について量論係数を決めて反応式を書き, 表の生成熱データを用いて着目物質 1 mol あたりの標準反応熱 $\Delta_r H^\circ$ [kJ]を計算せよ。この反応は発熱反応か吸熱反応か?

	(反応物)	(生成物)
①メタンから水素を作る反応	$CH_4(g)$ と $H_2O(g)$	$CO(g)$ と $H_2(g)$
② $CO \rightarrow CO_2$	$CO_2(g)$ と $H_2O(g)$	$CO_2(g)$ と $H_2(g)$
③ $CO_2 \rightarrow CO$	$CO_2(g)$ と $H_2(g)$	$CO(g)$ と $H_2O(g)$
④メタノール合成反応	$CO_2(g)$ と $H_2(g)$	$CH_3OH(g)$ と $H_2O(g)$
⑤ナフサ(ヘプタン)から水素	$C_7H_{16}(g)$ と $H_2O(g)$	$H_2(g)$ と $CO(g)$
⑥ホルムアルデヒド合成	$CH_3OH(g)$ と O_2	$HCHO$ と $H_2O(g)$
⑦ガソリン(ヘキサン)の燃焼	$C_6H_{14}(g)$ と $O_2(g)$	$CO_2(g)$ と $H_2O(g)$
⑧Claus 反応	$H_2S(g)$ と $O_2(g)$	$S(s)$ と $H_2O(g)$

	$\Delta_f H^\circ$ [kJ/mol]		$\Delta_f H^\circ$ [kJ/mol]
$H_2(g)$	0	$HCHO$	-115.9
$H_2O(g)$	-241.8	$CH_4(g)$	-74.8
$H_2S(g)$	-20.2	$CH_3OH(g)$	-201.3
$CO(g)$	-110.5	$C_7H_{16}(g)$	-187.8
$CO_2(g)$	-393.5	$C_6H_{14}(g)$	-167.2
$S(s)$	0		

3 反応温度での反応熱

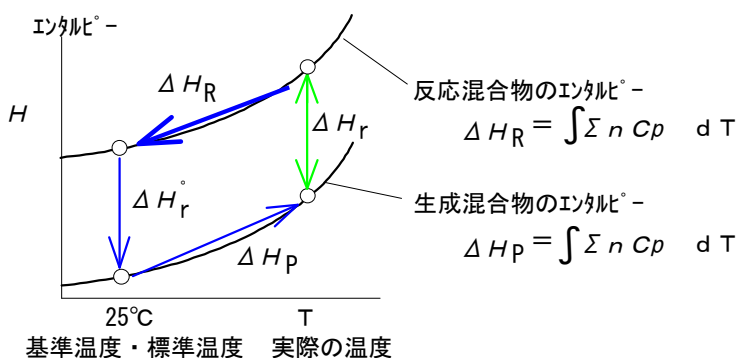
標準生成熱から推算される標準反応熱は 25℃での値である。実際の反応温度 T における反応熱は反応ガスと生成ガスのエンタルピーを考慮して次式で推算される:

$$\Delta_r H = (\Delta H_p - \Delta H_R) + \Delta_r H^\circ$$

ΔH_p : 25℃～ T 間の生成物質エンタルピー変化

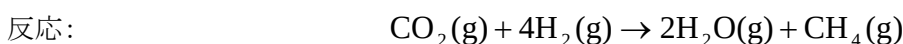
ΔH_R : 25℃～ T 間の反応物質エンタルピー変化

【反応温度の反応熱】



【例題 9】反応温度での反応熱1

アンモニアプロセスで二酸化炭素をメタンに戻す反応*がおこなわれる。(メタネーション)この反応(次式)の実際の反応温度 500℃での反応熱を求めよ。



標準生成熱 $\Delta_f H^\circ$ [kJ/mol] -393.5 0 -241.8 -74.8

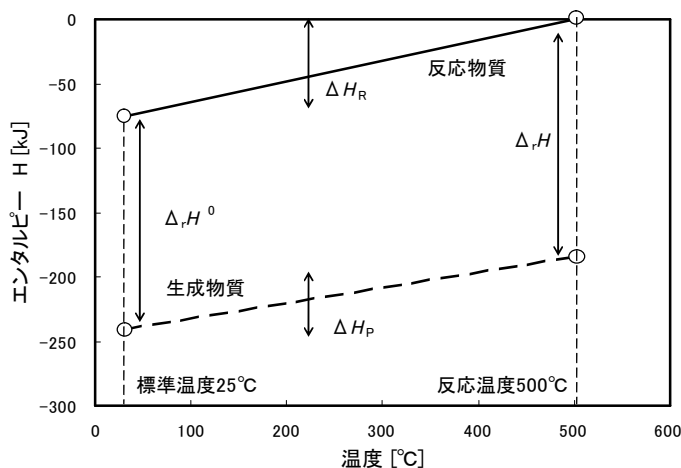
(解) 反応の標準反応熱は, $\Delta_r H^\circ = 2 \times (-241.8) + 1 \times (-74.8) - 1 \times (-393.5) = -165.0 \text{ kJ}$ (発熱)。

$$(\Delta H_p - \Delta H_R) = \int_{\text{基準温度}}^T \{(2 \times C_{p\text{H}_2\text{O}} + 1 \times C_{p\text{CH}_4}) - (1 \times C_{p\text{CO}_2} + 4 \times C_{p\text{H}_2})\} dT$$

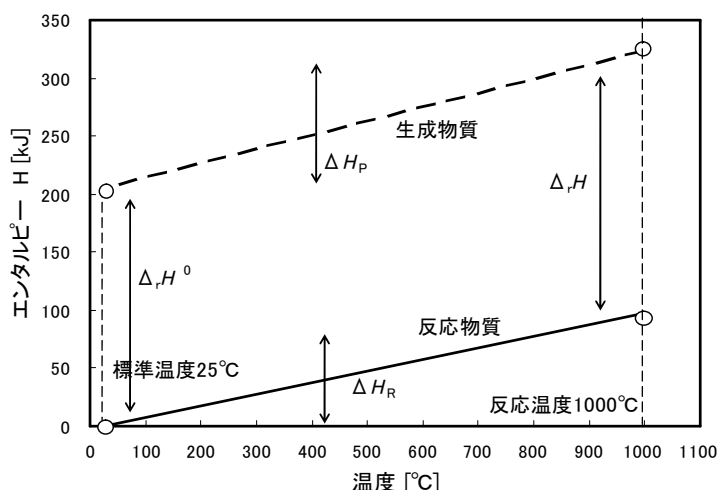
$$= (500 - 25) \times \{(2 \times C_{pm\text{H}_2\text{O}} + 1 \times C_{pm\text{CH}_4}) - (1 \times C_{pm\text{CO}_2} + 4 \times C_{pm\text{H}_2})\}$$

$$= (500 - 25) \times \{(2 \times 35.8 \text{ J/mol-K} + 1 \times 48.6 \text{ J/mol-K}) - (1 \times 44.9 \text{ J/mol-K} + 4 \times 29.1 \text{ J/mol-K})\} = -19552 \text{ J}$$

$$\therefore \Delta_r H = (-19.5) + (-165.0) = -184.5 \text{ kJ}$$

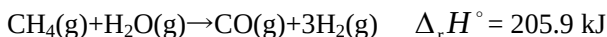


*) この反応(二酸化炭素を水素で還元してメタンを生成)は動物(ほ乳類)の体内でもおこなわれ、地球温暖化の一要因としても挙げられている。(人間を含む動物の体内では腸内細菌が炭水化物を消化して酸、水分、ガス(CO_2 , H_2 , CH_4)を生じている。糖質 1 g につき 200～250 ml のガスが発生し、そのうち約 50 ml が水素で残りは二酸化炭素とのこと。)



【例題 10】反応温度での反応熱2(吸熱反応)

メタンの水蒸気改質により水素を製造する反応は、



の吸熱反応である。この反応を 1000°C に保つために加えるべき熱量を求めよ。各気体の平均熱容量 $C_{pm, 25-1000^\circ\text{C}} [\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})]$ は CH_4 60.77, H_2O 38.66, CO 31.70, H_2 29.78 である。

(解) この反応の 1000°C における反応熱 $\Delta_r H$ を求めることである。

$$(\Delta H_P - \Delta H_R)$$

$$= \int_{25^\circ\text{C}}^{1000^\circ\text{C}} \{(C_{p\text{CO}} + 3 \times C_{p\text{H}_2}) - (1 \times C_{p\text{CH}_4} + 1 \times C_{p\text{H}_2\text{O}})\} dT = (1000 - 25) \{(C_{p\text{CO}} + 3C_{p\text{H}_2}) - (C_{p\text{CH}_4} + C_{p\text{H}_2\text{O}})\} \\ = (1000 - 25) \times \{(1 \times 31.70 + 3 \times 29.78) - (1 \times 60.77 + 1 \times 38.66)\} = 118 - 96.9 = 21.1 \text{ kJ}$$

よって, $\Delta_r H = (\Delta H_P - \Delta H_R) + \Delta_r H^\circ = 21.1 + 205.9 = 227.0 \text{ kJ}$ (吸熱)

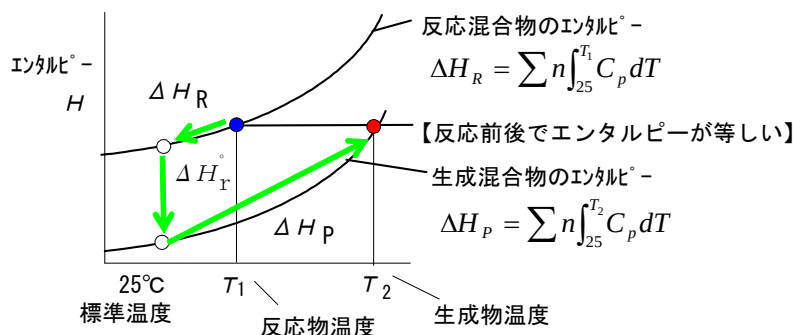
この反応を 1000°C に維持するには反応熱(吸熱)分の熱を外部から補う必要がある。すなわちこれが反応を 1000°C に保つために加えるべき熱量である。なお、これをメタン自身の燃焼で補うとすると、メタンの標準燃焼熱は -890.4 kJ/mol なので、上の反応 1 mol に対して約 0.25 mol のメタンを使う必要がある。

4 断熱反応温度, 断熱火炎温度

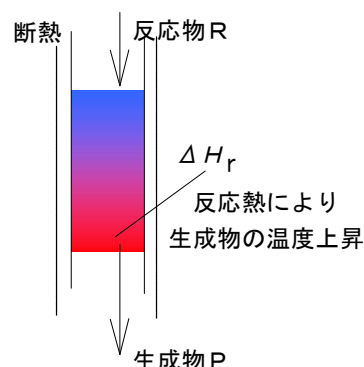
燃焼で生成する熱が外部に失われることなく、すべて燃焼ガスの加熱に使われるものと仮定して理論的に計算した温度を理論燃焼温度という。(断熱火炎温度, 断熱反応温度とも言う)

断熱条件での反応におけるエンタルピー収支は次式となる。

$$(\Delta H_P - \Delta H_R) + \Delta_r H^\circ = 0$$



【断熱反応温度】

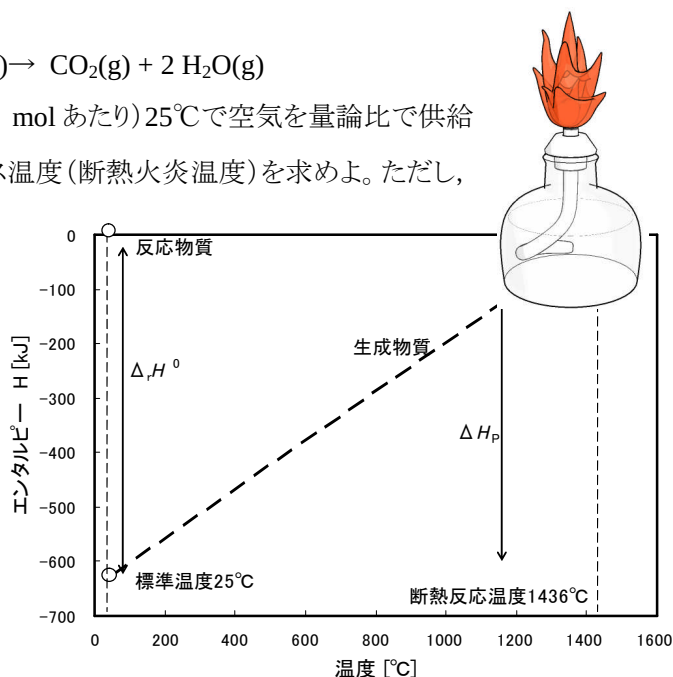


【例題 11】断熱火炎温度



の標準反応熱は $\Delta_r H^\circ = -635 \text{ kJ}$ である。(メタノール 1 mol あたり) 25°C で空気を量論比で供給してメタノール $\text{CH}_3\text{OH}(\text{l})$ を燃焼させた場合の燃焼ガス温度(断熱火炎温度)を求めよ。ただし、簡単のため空気は $\text{O}_2:\text{N}_2$ モル比が $1:4$ とし、生成ガスの熱容量は全て等しく一定値の $0.05 \text{ kJ}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ とする。

(解) 反応物が 25°C (標準温度) 供給なので $\Delta H_R = 0$ である。メタノール 1 mol あたりの生成ガ



スは, $\text{CO}_2(\text{g})$: 1 mol, $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$: 2 mol, $\text{N}_2(\text{g})$: 6 mol, 合計 9 mol である。生成ガスの温度上昇を ΔT として熱収支が次式である。



上の例題はガスの熱容量を一定としたが、実際は C_p の温度依存性を考慮する必要がある。したがって一般に断熱反応温度の問題は以下のように非線形方程式を解く問題となる。

【例題 12】断熱火炎温度

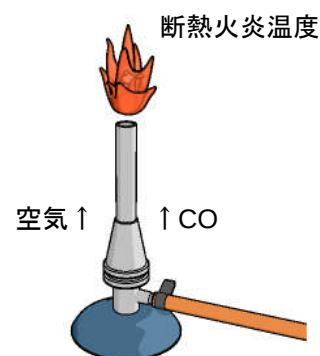
CO を 100% 過剰空気を用いて定圧で燃焼する際の断熱火炎温度を計算せよ。反応物は 100°C で供給する。

(解) 反応: $\text{CO}(\text{g}) + (1/2)\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2(\text{g})$

基準: $\text{CO}(\text{g})$ 1 mol

物質収支表:

	【反応物質R】	【生成物質P】
$\text{CO}(\text{g})$	1 mol	
$\text{CO}_2(\text{g})$		1
$\text{O}_2(\text{g})$	0.5+0.5	0.5
$\text{N}_2(\text{g})$	3.76	3.76



① 反応物質Rの供給温度 $100^\circ\text{C} \rightarrow$ 標準状態へのエンタルピー変化

$$\begin{aligned} \Delta H_R &= \int_{25^\circ\text{C}}^{100^\circ\text{C}} \{1 \times C_{p\text{CO}} + 1 \times C_{p\text{O}_2} + 3.76 \times C_{p\text{N}_2}\} dT \\ &= \int_{25^\circ\text{C}}^{100^\circ\text{C}} \{1 \times (28.95 + 0.41 \times 10^{-2} T + 0.3548 \times 10^{-5} T^2 - 2.22 \times 10^{-9} T^3) \\ &\quad + 1 \times (29.1 + 1.158 \times 10^{-2} T - 0.6076 \times 10^{-5} T^2 + 1.331 \times 10^{-9} T^3) \\ &\quad + 3.76 \times (29.0 + 0.2199 \times 10^{-2} T + 0.5723 \times 10^{-5} T^2 - 2.871 \times 10^{-9} T^3)\} dT \\ &= \int_{25}^{100} \{167.1 + 2.396 \times 10^{-2} T + 1.899 \times 10^{-5} T^2 - 10.48 \times 10^{-9} T^3\} dT = 12650 \text{ J} \end{aligned}$$

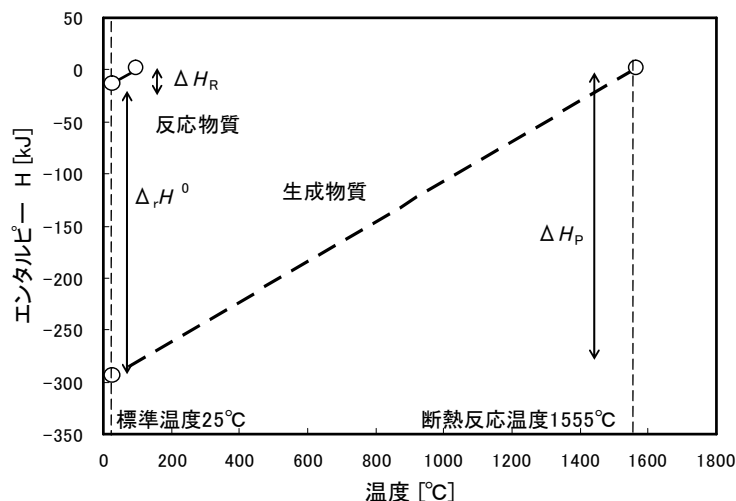
② 反応熱(この場合はCOの標準燃焼熱そのもの)

$$\Delta H_r^\circ = 1 \text{ mol} \times \Delta \hat{H}_c^\circ = -283.0 \text{ kJ} \quad (\text{発熱})$$

③ 生成物質Pの標準状態 $\rightarrow T$ へのエンタルピー変化

$$\begin{aligned} \Delta H_P &= \int_{25}^T \{1 \times C_{p\text{CO}_2} + 0.5 \times C_{p\text{O}_2} + 3.76 \times C_{p\text{N}_2}\} dT \\ &= \int_{25}^T \{1 \times (36.11 + 4.233 \times 10^{-2} T - 2.887 \times 10^{-5} T^2 + 7.464 \times 10^{-9} T^3) \\ &\quad + 0.5 \times (29.1 + 1.158 \times 10^{-2} T - 0.6076 \times 10^{-5} T^2 + 1.331 \times 10^{-9} T^3) \\ &\quad + 3.76 \times (29.0 + 0.2199 \times 10^{-2} T + 0.5723 \times 10^{-5} T^2 - 2.871 \times 10^{-9} T^3)\} dT \\ &= \int_{25}^T \{159.7 + 5.639 \times 10^{-2} T - 1.039 \times 10^{-5} T^2 - 2.675 \times 10^{-9} T^3\} dT \\ &= 159.7(T - 25) + (5.639 \times 10^{-2} / 2)(T^2 - 25^2) - (1.039 \times 10^{-5} / 3)(T^3 - 25^3) - (2.675 \times 10^{-9} / 4)(T^4 - 25^4) \end{aligned}$$

よって外部との熱の出入りがない条件
 $(\Delta H_p - \Delta H_R) + \Delta H_r^\circ = 0$ は未知温度 T に関する4次方程式となる。これを解いて、 $T = 1555^\circ\text{C}$ 。



【例題 13】理論燃焼温度

<bce28.xls> (<bce28_temp>で実習)

ガソリンを 20%過剰空気率で完全燃焼させたときの理論燃焼温度を求めよ。ガソリンは 25°C で供給され、ガソリンの主成分は n-ヘキサンとする。

(解) 反応: $\text{C}_6\text{H}_{14}(\text{l}) + 9.5 \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 6 \text{CO}_2(\text{g}) + 7 \text{H}_2\text{O}(\text{g})$

基準: ヘキサン 1 mol

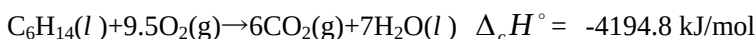
これより (理論酸素量) = 9.5 mol、(供給酸素量) = $9.5 \times (1 + 0.20) = 11.4 \text{ mol}$

物質収支表

	【反応物】	【生成物】
ヘキサン	1 mol	
O_2 (0.21	<u>11.4 mol</u>	<u>1.90 mol</u>
N_2 :0.79)	<u>42.89 mol</u>	<u>42.89 mol</u>
CO_2		6 mol
$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$		7 mol

①反応物は 25°C 供給なので $\Delta H_R = 0$

②標準反応熱 $\Delta_r H^\circ$ はヘキサン(l)の標準燃焼熱 $\Delta_c H^\circ$:



に水の蒸発潜熱: $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \quad \Delta_v H^\circ = +44.0 \text{ kJ/mol}$

を考慮して、 $\Delta_r H^\circ = 1 \text{ mol} \times \Delta_c H^\circ + 7 \text{ mol} \times \Delta_v H^\circ = -3887 \text{ kJ} = -3.887 \times 10^6 \text{ J}$

$$\textcircled{3} \Delta H_p = \int_{25}^T \{6 \times C_{p\text{CO}_2} + 7 \times C_{p\text{H}_2\text{O}} + 42.87 \times C_{p\text{N}_2} + 1.9 \times C_{p\text{O}_2}\} dT$$

$$= \int_{25}^T \{6 \times (36.11 + 4.233 \times 10^{-2} T - 2.887 \times 10^{-5} T^2 + 7.464 \times 10^{-9} T^3)$$

$$+ 7 \times (33.46 + 0.6880 \times 10^{-2} T + 0.7604 \times 10^{-5} T^2 - 3.593 \times 10^{-9} T^3)$$

$$+ 42.89 \times (29.00 + 0.2199 \times 10^{-2} T + 0.5723 \times 10^{-5} T^2 - 2.871 \times 10^{-9} T^3)$$

$$+ 1.9 \times (29.10 + 1.1580 \times 10^{-2} T - 0.6076 \times 10^{-5} T^2 + 1.311 \times 10^{-9} T^3)\} dT$$

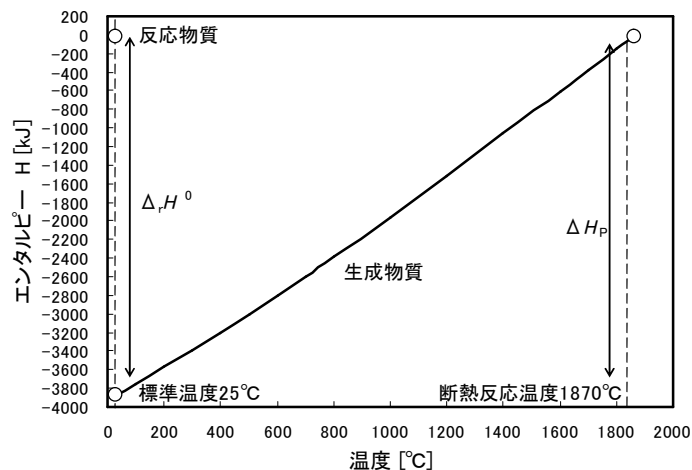
$$= \int_{25}^T \{A + BT + CT^2 + DT^3\} dT = A(T - 25) + B(T^2 - 25^2)/2 + C(T^3 - 25^3)/3 + D(T^4 - 25^4)/4$$

$$(A=1749.9, B=41.84 \times 10^{-2}, C=11.39 \times 10^{-5}, D=-101.0 \times 10^{-9})$$

④ $\Delta H_p + \Delta_r H^\circ = 0$ であるから, $E = \Delta_r H^\circ = -3.887 \times 10^6 \text{ J}$ として, 4次方程式:

$$A(T-25) + B(T^2-25^2)/2 + C(T^3-25^3)/3 + D(T^4-25^4)/4 + E = 0$$

を解く。これを解いて, (理論燃焼温度) = 1865°C。



下図が同じ計算を Excel シートでおこなったもの。③ ΔH_p を L10 に設定し, ゴールシークでこのセルの値が 3887 となる温度 T2 (セル D6) を求める。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1										理論酸素=	9.5	mol		
2										過剰空気率=	20	%		
3										ΔH°			=J6*K6*0.001	
4			T1	T2	Cp at T2					$\int C_p dt$	n	$\Delta H = n \Delta H^\circ$		
5			[°C]	[°C]	[J/(mol·K)]	a	b	c	d	[J/mol]	[mol]	[kJ]		
6	二酸化炭素	CO ₂	25	1864.5	63.05	36.11	4.233E-02	-2.887E-05			6	600.98		
7	水蒸気	H ₂ O	25	1864.5	49.43	33.46	6.880E-03	7.604E-06			7	553.56		
8	窒素	N ₂	25	1864.5	34.39	29.00	2.199E-03	5.723E-06	-2.871E-09	60858	42.89	2609.93		
9	酸素	O ₂	25	1864.5	38.07	29.10	1.158E-02	-6.076E-06	1.311E-08	61187	1.9	122.53		
10												3887.00		
11														
12														

【Excel 演習レポート課題12】(作成した Excel シートの 1 ページ目をプリントアウトして提出)

<bce28_temp.xls>を元に上の例題の計算シートを作成する。これを使い, 過剰空気0~100%での理論燃焼温度を求め, シート中に記入して提出せよ。

【筆記レポート課題12】(A4 レポート用紙で提出)

p. 94 演習1を, 学籍番号下1桁の番号の反応についておこなえ。(0 は④, 9 は⑤)