

燃焼の熱力学および燃焼計算

(A) 燃焼の熱力学

3.1 燃焼の熱力学

3.1.1 反応の確率と反応熱



のように反応する分子AとBが互いに近付く場合、分子の周囲には図3.1に模型的に示したような特異なポテンシャル場が存在する。

ポテンシャルの山、すなわち反応殻を突破してポテンシャルの谷に落ち込み、AとBとが結合するためには、相対運動のエネルギー、すなわち衝突エネルギーがある臨界値以上に高くなければならない。しかし、高すぎると過励起の状態となり、ふたたびポテンシャルの山を越えて離れていって

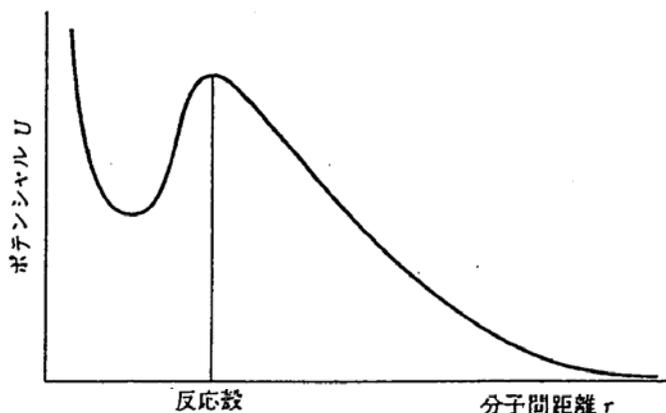


図 3.1 2分子間のポテンシャル場

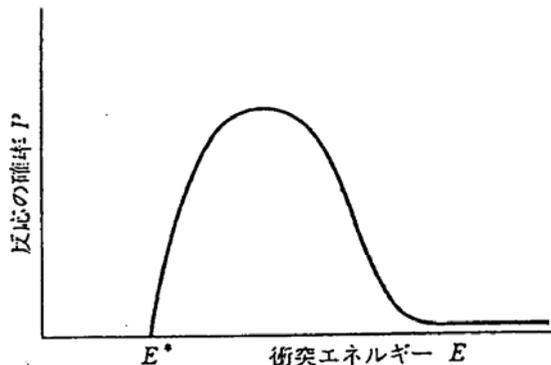


図 3.2 衝突エネルギーと反応の確率

しまう。衝突によりAとBとが反応してCを生成する確率Pと衝突エネルギーEとの関係を模型的に示すと、図3.2のようになる。すなわち、反応が起こるためには、 E^* 以上の衝突エネルギーが必要である。この臨界エネルギーに相当する分子速度 c^* は、

$$E^* = (1/2)m(c^*)^2 \quad (3.1)$$

で与えられる。ただし、 m は分子の質量である。

ところで、気体運動論で周知のように、気体分子はマクスウェルの速度分布

$$\frac{dn}{n_T} = 4\pi \left(\frac{M}{2\pi RT} \right)^{3/2} c^2 \exp\left(-\frac{Mc^2}{2RT} \right) dc \quad (3.2)$$

を持っている。ここで、 dn は c と $c+dc$ の間の速度を持つ分子の数、 n_T は分子の総数、 M は分子量、 R は一般ガス定数、 T は絶対温度である。上式から E^* 以上の運動エネルギーを持つ分子の数 n^* を計算すると、

$$\frac{n^*}{n_T} = \int_c^{\infty} \frac{dn}{n_T} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{E^*}{RT} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E^*}{RT}\right) \quad (3.3)$$

したがって、温度が高くなるほど、反応にあずかる分子の数 n^* は増加する。ここで、 $T^{-1/2}$ は指数関数部分に比べて T の緩やかな関数であることを考えると、近似的には

$$\frac{n^*}{n_T} \propto \exp\left(-\frac{E^*}{RT}\right) \quad (3.4)$$

となり、よく知られたアレニウスの反応速度則中の温度関数が得られる。このことから、活性化エネルギー E は分子がポテンシャルの山、すなわち反応殻を突破するために持つべき臨界エネルギーに対応することが分かる。

このようにポテンシャルの山、すなわち反応殻を突破して衝突分子間の化学反応が起こる際のポテンシャルの変化する様子を図 3.3 に示す。ただし E^* は活性化エネルギー、 $\Delta_r H$ は反応熱（吸熱反応を正とする）である。図から、一般に発熱反応では E^* 、すなわちポテンシャル障壁が低く、低温でも反応が起こり得るが、吸熱反応は逆で、低温で起こりにくいことが分かる。もちろん、分子の総数 n_T が多いほど、したがって各分子の濃度が高いほど、反応の頻度は高くなる。これがアレニウスの反応速度則の理論的根拠である。

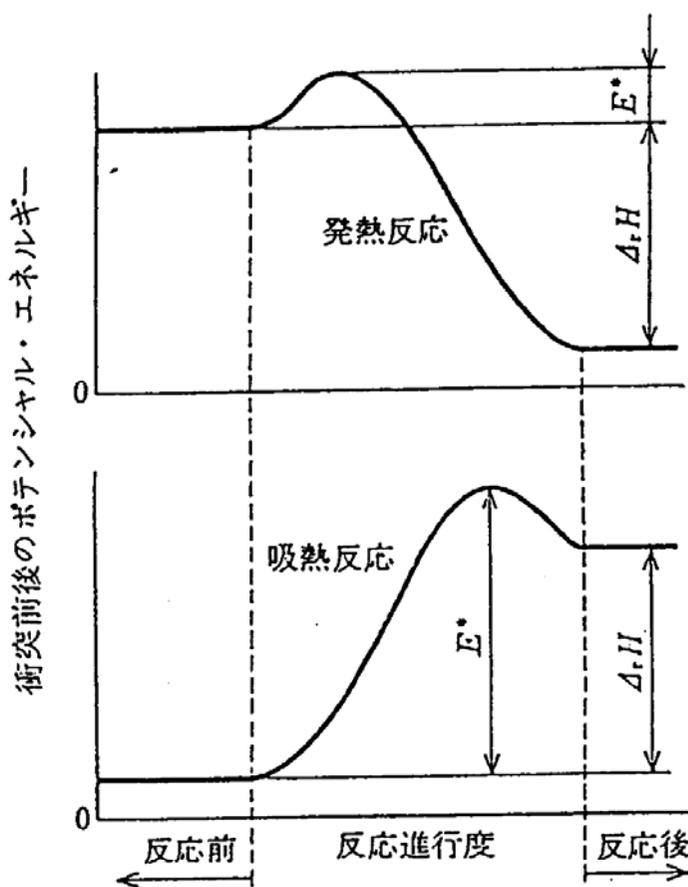


図 3.3 活性化エネルギーと反応熱

(B) 燃焼計算

2.4 燃焼計算

2.4.1 燃焼に要する酸素量と空気量

通常の燃料は炭素 (C) と水素 (H) を主成分とし、それ以外に若干の硫黄 (S)、酸素 (O)、窒素 (N)、灰分などを含んでいる。これら構成元素の完全燃焼を表 2.2 に示す。O は他の元素の燃焼に使われて、必要な酸素量と空気量を減じるので、負の必要酸素量と負の必要空気量を持つとした。また、N は燃焼に関与することなく、生成物となる。

いま、燃料中の炭素、水素、燃焼性硫黄、酸素、窒素、灰分の質量分率を c, h, s, o, n, a [kg/kg] とすると、1 kg の燃料が完全燃焼するのに必要な酸素量 (理論酸素量または量論酸素量と呼ぶ) O_0 は、表 2.2 を使って、

$$O_0 = 2.66c + 7.94h + (s - o) \quad [\text{kg/kg}] \quad (2.20)$$

$$O_0 = 1.87c + 5.56h + 0.70(s - o) \quad [\text{m}^3_{\text{N}}/\text{kg}] \quad (2.21)$$

なお、 c, h, s, o の値には小数を使い、パーセントの数値を使わないよう、くれぐれも注意されたい。

表 2.3 に示すように、標準乾き空気中の酸素の質量分率は 0.232 [kg/kg]、体積分率は 0.210 [m³/m³] であるから、1 kg の燃料が完全燃焼するのに必要

表 2.2 燃料構成元素の完全燃焼表*

名称	元素記号	原子量	完全燃焼反応	高発熱量 MJ/kg	低発熱量 MJ/kg	必要酸素量		必要空気量		生成物量	
						kg/kg	m ³ _N /kg	kg/kg	m ³ _N /kg	kg/kg	m ³ _N /kg
炭素	C	12.01	C + O ₂ = CO ₂	32.76	32.76	2.66	1.87	11.48	8.89	3.66	1.87
水素	H	1.01	H + 1/4 O ₂ = 1/2 H ₂ O	141.8	120.0	7.94	5.56	34.21	26.48	8.94	11.12
硫黄	S	32.06	S + O ₂ = SO ₂	9.26	9.26	1.00	0.70	4.30	3.33	2.00	0.70
酸素	O	16.00	O - 1/2 O ₂ = 0	0	0	-1.00	-0.70	-4.31	-3.34	0	0
窒素	N	14.01	N = 1/2 N ₂	0	0	0	0	0	0	1.00	0.50

*高・低発熱量は燃料元素が基準物質の形をとっているものとして算出した。

表 2.3 標準乾き空気の組成

(平均分子量 28.97)

成分名	酸素	窒素	炭酸ガス	アルゴン	水素
分子式	O ₂	N ₂	CO ₂	Ar	H ₂
質量分率 %	23.20	75.47	0.046	1.28	0.001
体積分率 %	20.99	78.03	0.030	0.933	0.01

注) ほかにネオン, ヘリウム, クリプトン, キセノンが含まれるが, 含有率は 0.001% 以下である。

な空気量 (理論空気量または量論空気量と呼ぶ) A_0 は

$$A_0 = O_0 / 0.232 = 11.48c + 34.2h + 4.31(s - o) \quad [\text{kg/kg}] \quad (2.22)$$

$$A_0 = O_0 / 0.210 = 8.89c + 26.5h + 3.33(s - o) \quad [\text{m}^3_{\text{N}}/\text{kg}] \quad (2.23)$$

なお, s と o の係数には両者の平均値をとった。

たとえば, 水素ガス (H₂) では $h=1, c=s=o=n=a=0$ であるから, 式 (2.20) より $O_0 = 7.94 \times 1 = 7.94 \text{ kg/kg}$, 式 (2.22) より $A_0 = 7.94 / 0.232 = 34.2 \text{ kg/kg}$ となる。また, 炭化水素 (C_{*m*}H_{*n*}) では $c=12.01m / (12.01m + 1.01n)$, $h=1.01n / (12.01m + 1.01n)$, $s=o=n=a=0$ であるから,

$$O_0 = (2.66 \times 12.01m + 7.94 \times 1.01n) / (12.01m + 1.01n)$$

$$\approx 8.00(4m + n) / (12.01m + 1.01n) \quad [\text{kg/kg}]$$

$$A_0 = (138m + 34.5n) / (12.01m + 1.01n)$$

$$\approx 34.5(4m + n) / (12.01m + 1.01n) \quad [\text{kg/kg}]$$

気体燃料の場合, 元素の質量分率 c, h, s, o, n, a を使うよりは, 燃料ガス中の各成分ガスの体積分率 {H₂}, {CO}, {CH₄} [m³/m³] 等を使う方が便利ながことが多い。そこで, 燃料ガスを構成する単純ガスの完全燃焼表を表 2.4 に示しておく。この表を使って理論酸素量 O_0 と理論空気量 A_0 を計算すると, 次のようになる。

$$O_0 = 0.5\{H_2\} + 0.5\{CO\} + 2.0\{CH_4\} + \dots - \{O_2\} \quad [\text{m}^3/\text{m}^3] \quad (2.24)$$

$$A_0 = O_0 / 0.210 = 2.38\{H_2\} + 2.38\{CO\} + 9.53\{CH_4\} + \dots - 4.76\{O_2\} \quad [\text{m}^3/\text{m}^3] \quad (2.25)$$

なお, {H₂}, {CO} 等の数値には小数を使い, 百分率値は使わないよう注意されたい。

表 2.4 単純ガスの完全燃焼表

燃 料	燃 焼 反 応	理論酸素量 O_0 ($m^3 N/m^3 N$)	理論空気量 A_0 ($m^3 N/m^3 N$)	理論湿り燃焼 ガス体積 V_{w0} ($m^3 N/m^3 N$)	理論乾き燃焼 ガス体積 V_{d0} ($m^3 N/m^3 N$)	高発熱量 H_h ($MJ/m^3 N$)	低発熱量 H_l ($MJ/m^3 N$)
水	$H_2 + 1/2 O_2 = H_2O$	0.5	2.381	2.881	1.881	12.75	10.79
一酸化炭素	$CO + 1/2 O_2 = CO_2$	0.5	2.381	2.881	2.881	12.63	12.63
メタン	$CH_4 + 2O_2 = CO_2 + 2H_2O$	2.0	9.524	10.53	8.524	39.72	35.79
アセチレン	$C_2H_2 + 5/2 O_2 = 2CO_2 + H_2O$	2.5	11.91	12.41	11.44	58.00	56.04
エチレン	$C_2H_4 + 3O_2 = 2CO_2 + 2H_2O$	3.0	14.29	15.29	13.29	62.95	59.03
エタン	$C_2H_6 + 7/2 O_2 = 2CO_2 + 3H_2O$	3.5	16.67	18.17	15.17	69.64	63.76
プロピレン	$C_3H_6 + 9/2 O_2 = 3CO_2 + 3H_2O$	4.5	21.44	22.94	19.94	91.82	85.93
プロパン	$C_3H_8 + 5O_2 = 3CO_2 + 4H_2O$	5.0	23.82	25.82	21.82	99.00	91.15
1-ブチレン	$C_4H_8 + 6O_2 = 4CO_2 + 4H_2O$	6.0	28.59	30.59	26.59	121.3	113.4
n-ブタン	$C_4H_{10} + 13/2 O_2 = 4CO_2 + 5H_2O$	6.5	30.97	33.47	28.47	128.4	118.5
ベンゼン	$C_6H_6 + 15/2 O_2 = 6CO_2 + 3H_2O$	7.5	35.73	37.23	34.23	147.3	141.4
炭化水素	$C_m H_n + (m+n/4) O_2 = mCO_2 + (n/2) H_2O$	$m+n/4$	$4.76(m+n/4)$	$4.76m+1.44n$	$4.76m+0.94n$	—	—
酸	$O_2 - O_2 = 0$	-1.0	-4.76	-3.76	-3.76	0	0
窒素	$N_2 = N_2$	0	0	1	1	0	0
水蒸気	$H_2O = H_2O$	0	0	1	0	0	-1.96

2.4.2 混合比と混合気濃度の表示法

混合比と混合気濃度の表示法としては、燃空比 (F/A)、空燃比 (A/F)、当量比 ϕ 、空気比 (空気過剰率) α 等があり、次のように定義される。

a. 燃空比 (F/A) 気体燃料の予混合燃焼では燃料と空気の質量比、拡散燃焼や液体・固体燃料の燃焼では燃料と空気の供給質量比と定義される。量論混合比を燃空比で表したものを量論燃空比 (理論燃空比) ($F/A)_{st}$ と呼び、 $1/A_0$ に等しい。

b. 空燃比 (A/F) 燃空比の逆数である。量論空燃比 (理論空燃比) ($A/F)_{st}$ は A_0 に等しい。 C_mH_{2m} なる平均化学式を持つ石油系燃料の量論空燃比 (理論空燃比) ($A/F)_{st}$ は 14.8 kg/kg である。

c. 当量比 ϕ 一定量の空気に対して量論比の何倍の燃料が供給されたかを表す量で、

$$\phi = \frac{(F/A)}{(F/A)_{st}} \quad (2.32)$$

と定義される。 $\phi < 1$ の燃焼を希薄燃焼、 $\phi > 1$ の燃焼を過濃燃焼という。

d. 空気比 α 一定量の燃料に対して量論比の何倍の空気が供給されたかを表す量で、

$$\alpha = \frac{(A/F)}{(A/F)_{st}} = \frac{1}{\phi} \quad (2.33)$$

と定義される。内燃機関では空気過剰率と呼ぶことが多い。理論空気量 A_0 が分かっており、空気比 α の値が指定されると、単位燃料量当たりの供給空気量は次式で計算される。

$$A = \alpha A_0 \quad (2.34)$$

気体燃料では燃料と空気の体積比 [m^3/m^3] や、燃料の体積%が使われることもある。

2.4.3 発熱量

単位量の燃料が完全燃焼し、もとの温度まで冷却される際に発生する熱量を発熱量と呼ぶ。燃焼前の温度が常温の場合、燃焼過程で反応または蒸発により発生した水蒸気の蒸発の潜熱も放出されるが、これを含めたものを高発熱量(総発熱量) H_b , 除外したものを低発熱量(真発熱量) H_l と呼ぶ。通常、水蒸気の蒸発の潜熱は利用できないので後者が使われるが、米国などでは前者が使われるので、熱効率の数値に差が生じる。 $(H_b - H_l)$ の値は単位量の燃料から発生する水蒸気量 G_s [kg] もしくは V_s [m^3_N] が分かれば、それに蒸発の潜熱 r (25°C において 2.44 MJ/kg または 1.96 MJ/ m^3_N) を掛けることによって求められるが、石油系燃料ではほぼ H_l の10%に当たる。

分子や化合物の発熱量を表 2.5 に示しておく。気体成分に対して 1 m^3_N 当たりの発熱量を必要とするときは、1 mol 当たりの発熱量に 44.6 mol/ m^3_N なる換算係数を掛ければよい。

多数の成分からなる混合燃料の発熱量を求めるには、次のようにする。まず、気体燃料に対しては、表 2.4 に示された成分ガスの発熱量の値を用いて、

$$H_b = 12.75 \{H_2\} + 12.63 \{CO\} + 39.72 \{CH_4\} + \dots \quad [MJ/m^3_N] \quad (2.35)$$

$$H_l = H_b - 1.96 V_s = 10.79 \{H_2\} + 12.63 \{CO\} + 35.79 \{CH_4\} + \dots - 1.96 \{H_2O\} \quad [MJ/m^3_N] \quad (2.36)$$

液体燃料や固体燃料は複雑な分子構造や結晶構造を持つ多数の成分からできていることが多いので、表 2.2 を用いて、 c, h, s, o の値から発熱量を計算することはできない。したがって、実測に頼る外はないが、0.4 MJ/kg 程度の誤差を覚悟するなら、次のデューロンの式を用いて概算できる。

$$H_b = 33.8c + 144.3(h - o/7.94) + 9.42s \quad [MJ/kg] \quad (2.37)$$

$$H_l = H_b - 2.44G_s = H_b - 2.44(8.94h + w) \\ = 33.8c + 122.5h - 18.2o + 9.42s - 2.44w \quad [MJ/kg] \quad (2.38)$$

ただし、 w は全水分で、これを燃料から除外して c, h 等の値を決めれば無水試料ベースの発熱量が、 w も含めたものを燃料として扱えば含水試料ベースの発熱量が得られる。

表 2.5 主要燃料の熱化学的性質表*

燃料名	分子式	状態	標準生成熱**		高発熱量**		低発熱量**		沸点† [°C]
			[kJ/mol]	[MJ/kg]	[kJ/mol]	[MJ/kg]	[kJ/mol]	[MJ/kg]	
水素	H ₂	気体	0	0	285.8	141.8	241.8	120.0	-252.7
グラファイト	C	固体	0	0	393.5	32.76	393.5	32.76	
硫黄	S	〃	0	0	296.8	9.259	296.8	9.259	
一酸化炭素	CO	気体	-110.53	-3.946	283.0	10.10	283.0	10.10	-191.5
メタン	CH ₄	〃	-74.87	-4.667	890.3	55.50	802.3	50.01	-161.5
エタン	C ₂ H ₆	〃	-84.0	-2.794	1561	51.90	1429	47.51	-89.0
プロパン	C ₃ H ₈	〃	-104.5	-2.370	2219	50.33	2043	46.34	-42.1
n-ブタン	C ₄ H ₁₀	〃	-126.5	-2.176	2877	49.49	2657	45.71	-0.5
〃	〃	液体	-147.5	-2.538	2856	49.13	2636	45.35	
n-ペンタン	C ₅ H ₁₂	気体	-146.5	-2.030	3536	49.01	3272	45.35	36.1
〃	〃	液体	-173.2	-2.401	3509	48.64	3245	44.98	
n-ヘキサン	C ₆ H ₁₄	気体	-167.1	-1.939	4195	48.68	3887	45.10	68.7
〃	〃	液体	-198.6	-2.305	4163	48.31	3855	44.74	
n-ヘプタン	C ₇ H ₁₆	気体	-187.5	-1.871	4854	48.44	4502	44.93	98.4
〃	〃	液体	-224.0	-2.235	4817	48.08	4465	44.56	
n-オクタン	C ₈ H ₁₈	気体	-208.5	-1.825	5512	48.25	5116	44.79	125.7
〃	〃	液体	-250.0	-2.189	5471	47.89	5075	44.42	
n-デカン	C ₁₀ H ₂₂	気体	-249.5	-1.754	6830	48.00	6346	44.60	174.1
〃	〃	液体	-300.9	-2.115	6778	47.64	6294	44.24	
n-ドデカン	C ₁₂ H ₂₆	気体	-289.7	-1.701	8148	47.84	7576	44.48	216.3
〃	〃	液体	-350.9	-2.060	8087	47.48	7515	44.12	
n-ヘキサデカン (セタン)	C ₁₆ H ₃₄	気体	-374.8	-1.655	10781	47.61	10033	44.30	286.8
〃	〃	液体	-456.1	-2.014	10699	47.25	9951	43.95	
エチレン	C ₂ H ₄	気体	52.47	1.870	1411	50.30	1323	47.17	-103.7
プロピレン	C ₃ H ₆	〃	20.2	0.480	2058	48.91	1926	45.78	-47.0
アセチレン	C ₂ H ₂	〃	226.73	8.708	1300	49.91	1256	48.22	83.6
ベンゼン	C ₆ H ₆	〃	82.9	1.061	3302	42.27	3170	40.58	80.1
〃	〃	液体	49.0	0.627	3268	41.83	3136	40.14	
シクロヘキサン	C ₆ H ₁₂	気体	-123.3	-1.465	3953	46.97	3689	43.83	80.7
〃	〃	液体	-156.3	-1.857	3920	46.58	3656	43.44	
メタノール	CH ₃ O	気体	-201.6	-6.292	763.6	23.83	675.6	21.08	64.7
〃	〃	液体	-239.1	-7.462	726.1	22.66	638.1	19.91	
エタノール	C ₂ H ₅ O	気体	-234.8	-5.097	1410	30.60	1278	27.74	78.3
〃	〃	液体	-277.1	-6.015	1367	29.68	1235	26.82	

* 25°C における蒸発の潜熱は気体と液体の標準生成熱の差である。

** 0.1 MPa, 25°C における値。

† 1 atm (=0.1013 MPa) における値。

2.5 燃 燒 温 度

2.5.1 断熱燃焼温度

燃焼過程の間に、炉壁への熱伝達や、ふく射による熱損失がないときの燃焼ガスの最終温度を断熱燃焼（ガス）温度（もしくは断熱火炎温度）と呼ぶ。この場合、どのような燃焼反応を考えるかによって最終温度が違って来るが、燃料中の可燃成分が表 2.2 もしくは表 2.4 に示したような完全燃焼反応を起こして、二酸化炭素、水蒸気、二酸化硫黄を生成するときの最終温度を理論断熱燃焼（ガス）温度（理論断熱火炎温度） T_{bt} と呼ぶ。実際には完全燃焼は起こらず、せいぜい化学平衡までしか反応は進まないが、そのときの最終温度を平衡断熱燃焼（ガス）温度 T_b と呼ぶ。これについては次章で説明することとし、ここでは理論断熱燃焼温度を計算する方法について説明する。

燃料 1 kg が完全燃焼して、水蒸気が凝縮しなければ、低発熱量 H_l [kJ/kg] が解放される。燃焼が断熱的に行われるならば、この熱はすべて湿り燃焼ガス（質量 G_w [kg/kg]）の温度上昇に使われ、その顕熱に変わる。燃焼前の温度を T_0 (=298 K=25°C)、温度 T_0 と T_{bt} の間での燃焼ガスの定圧比熱 c_p の平均値を c_{pm} [kJ/(kg·K)] とする（298 K→3000 K の温度変化で炭酸ガスや水蒸気の c_p は1.66～1.68倍に増加する）。熱のバランスから

$$G_w c_{pm} (T_{bt} - T_0) = H_l$$
$$\therefore T_{bt} = \frac{H_l}{G_w c_{pm}} + T_0 \quad (2.76)$$

気体燃料の場合は燃料 1 m^3_N 当たりの低発熱量 H_l [kJ/ m^3_N] が与えられることが多いが、この場合は 0°C, 1 atm における燃料の密度 ρ_{l0} [kg/ m^3_N] を使って、1 kg 当たりの低発熱量 H_l [kJ/kg] に換算すればよい。あるいは式 (2.76) を湿り燃焼ガス体積 V_w [m^3_N/m^3_N] と、燃焼ガス 1 m^3_N 当たりの熱容量と定義される定圧比熱 c_{pm}' [kJ/($m^3_N \cdot K$)] を使って書き直す。

$$T_{bt} = \frac{H_l}{V_w c_{pm}'} + T_0 \quad (2.77)$$

式 (2.76) を計算するに当たっての問題は、 c_{pm} が燃焼ガスの組成と温度によって変化することである。 c_{pm} の見積もりに必要となる温度 T_0 (=298 K) と T [K] の間の完全燃焼ガス成分の平均定圧比熱を表 2.8 に示しておく。

計算に当たっては、 T_{bt} を適当な値に仮定して、表 2.8 から i 番目の燃焼ガス成分の温度 $T_0 \sim T_{bt}$ における平均定圧比熱 $c_{pi}(T_0 \sim T_{bt})$ を読み取る（必要なら内そうを行う）。そして、これをその成分の質量分率 m_i [kg/kg] で荷重平均することにより、燃焼ガスの平均定圧比熱を求める。すなわち、

$$c_{pm} = \sum_i (c_{pi} m_i) \quad (2.78)$$

この c_{pm} を用いて式(2.76)から T_{bt} を計算し、それが先に仮定した値と一致すればよい。一致しなければ、算出された T_{bt} の値を新しい仮定値として、 c_{pi} の読み取りからやり直す。

表 2.8 完全燃焼ガス成分の $T_0 (=298.15 \text{ K}) \sim T$ [K] 間の平均定圧比熱

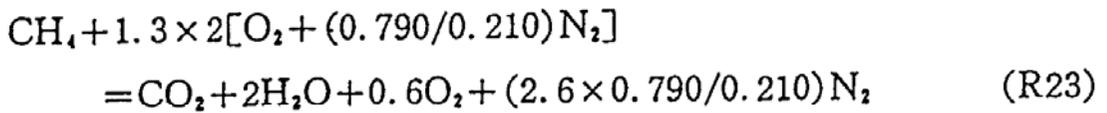
T [K]	O_2		N_2		H_2		H_2O		CO_2		SO_2	
	kg*	m^3_N *	kg*	m^3_N *	kg*	m^3_N *	kg*	m^3_N *	kg*	m^3_N *	kg*	m^3_N *
1000	1.011	1.443	1.092	1.364	14.62	1.315	2.056	1.653	1.081	2.123	.7658	2.189
1200	1.031	1.472	1.113	1.391	14.74	1.326	2.124	1.707	1.121	2.200	.7870	2.249
1400	1.048	1.496	1.132	1.415	14.89	1.340	2.191	1.761	1.153	2.263	.8036	2.297
1600	1.063	1.517	1.149	1.436	15.07	1.355	2.256	1.813	1.179	2.316	.8169	2.335
1800	1.075	1.535	1.164	1.455	15.25	1.372	2.317	1.862	1.202	2.360	.8278	2.366
2000	1.087	1.551	1.178	1.472	15.43	1.388	2.374	1.908	1.221	2.397	.8370	2.392
2200	1.097	1.566	1.189	1.486	15.62	1.405	2.427	1.951	1.237	2.429	.8449	2.415
2400	1.107	1.580	1.200	1.499	15.80	1.421	2.476	1.990	1.252	2.458	.8517	2.434
2600	1.116	1.594	1.209	1.511	15.97	1.436	2.520	2.026	1.264	2.482	.8576	2.451
2800	1.125	1.606	1.217	1.522	16.13	1.451	2.562	2.059	1.275	2.504	.8630	2.466
3000	1.134	1.618	1.225	1.531	16.29	1.465	2.600	2.090	1.285	2.524	.8677	2.480

* kg 欄の単位は $\text{kJ}/(\text{kg}\cdot\text{K})$, m^3_N 欄の単位は $\text{kJ}/(m^3_N\cdot\text{K})$.

表 2.9 理論断熱燃焼温度の計算表

項 目	単 位	CO ₂	H ₂ O	O ₂	N ₂
生 成 量	kg/kgCH ₄	2.743	2.246	1.197	17.084
G_w	"	23.270			
質 量 分 率 m_i	kg/kg	0.1179	0.0965	0.0514	0.7342
c_{pi} (298~2000 K)	kJ/(kg·K)	1.221	2.374	1.087	1.178
$\sum_i (c_{pi} m_i)$	"	1.294			

一例として、メタン (CH₄) を空気比 1.3 で燃焼させた場合の T_{bt} を計算してみる。簡単のために、酸素以外の乾き空気成分を窒素と見なすと、完全燃焼反応は、



とりあえず、 $T_{bt}=2000\text{ K}$ と仮定する。上の完全燃焼反応式を用いて燃料 1 kg から発生する湿り燃焼ガス成分の質量 [kg/kg] を計算すると、表 2.9 の第 1 欄のようになる。その総和をとると第 2 欄の湿り燃焼ガス質量 G_w が得られる。各成分の質量を G_w で割れば、質量分率 m_i が得られる。各成分の 298 K~2000 K の間の平均定圧比熱 c_{pi} を表 2.8 から読み取る。式 (2.78) に基づいて m_i と c_{pi} の積の総和をとると、 $c_{pm}=1.293\text{ kJ}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ が得られる。これらの計算結果をメタンの低発熱量 $H_f=50.01\text{ MJ}/\text{kg}=50.01 \times 10^3\text{ kJ}/\text{kg}$ とともに式 (2.76) に代入すると、

$$T_{bt} = \frac{50.01 \times 10^3}{23.27 \times 1.293} + 298 = 1960\text{ K}$$

この値は仮定値 2000 K と一致しないので、 $T_{bt}=1960\text{ K}$ と仮定して計算をやり直すと、 $T_{bt}=1964\text{ K}$ が得られる (c_{pi} の読み取りは内挿による)。さらに $T_{bt}=1964\text{ K}$ として計算を繰り返すと、 $T_{bt}=1964\text{ K}$ となって収束する。

なお、空気比が1以下の過濃混合気に対しては、理論燃焼温度という概念は適用できず、したがって T_{b_i} の値は計算できない（酸素不足分だけ二酸化炭素が一酸化炭素に変わると仮定して、理論燃焼温度の定義を拡張することはできる）。また、燃焼温度が 2000 K を越えると熱解離の影響が目立つようになり、それまで 20 K 以内に収まっていた理論燃焼温度と平衡燃焼温度との差が急増し始める。このような場合には第3章で述べる化学平衡計算によって燃焼温度を決定するのが最良である。

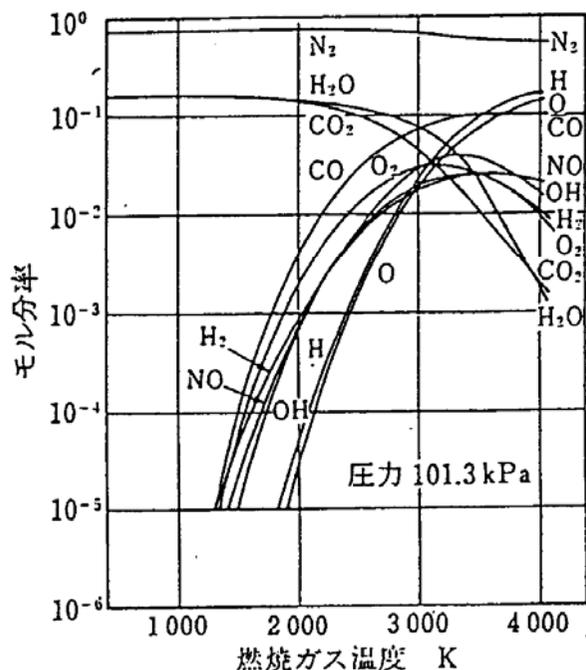


図 3.4 燃焼ガスの平衡組成（エチレン-空気量論混合気）

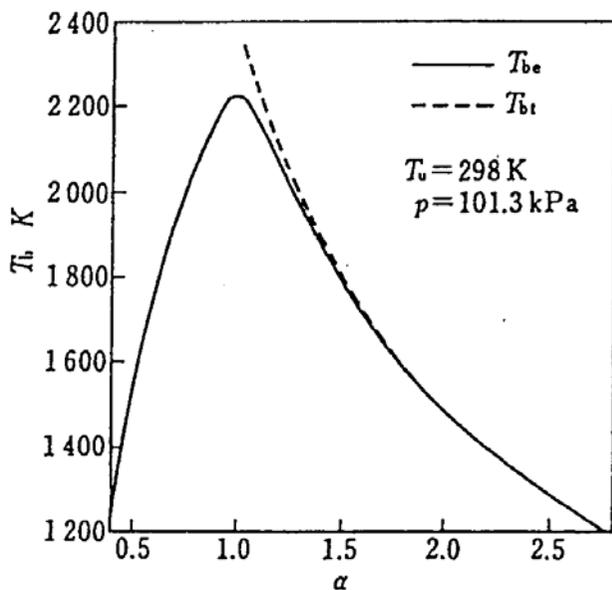


図 3.5 平衡断熱燃焼温度と理論断熱燃焼温度（空気比 α のメタン-空気混合気）

演習問題

- (1) ある炉に灯油 1 kg 当たり空気を 18 kg の割で供給したという。このとき燃空比、空燃比、当量比、空気比はいかほどか。ただし、灯油の元素分析を行ったところ $c=0.846$, $h=0.154$ で、それ以外の成分は検出されなかったという。
- (2) メタンを空気比 1.1 で燃焼させたい。そのためには、メタン 1 m³ 当たり何 m³ の空気を供給しなければならないか。
- (3) 高炉ガス [CO₂ 11%, CO 27%, H₂ 2%, N₂ 60% (by vol.)] の高発熱量と低発熱量 [MJ/m³_N], 理論酸素量と理論空気量 [m³/m³], 理論湿り燃焼ガス量と理論乾き燃焼ガス量 [m³/m³], 初期温度 298 K, 空気比 1.2 で燃焼させたときの理論断熱火炎温度 [K] を計算せよ。

地球環境科学 演習問題 <必ず自分で解答し次回(1/6)に持参すること>

[燃焼計算]

1. プロパン (C_3H_8) を空気中で完全燃焼させたとき、排ガス中の O_2 濃度を分析したら体積分率で3%であった。このときの空気比 (空気過剰率) を求めよ。
2. 石炭を燃焼させる場合、天然ガスを燃焼させる場合に比べて、単位発熱量当たりの二酸化炭素発生量は何倍になるか求めよ。ただし、石炭の原炭基準の元素分析値 (wt%) は、C: 63.0 %, H: 5.0 %, O: 12.6 %, N: 1.1 %, S: 0.3 %, (灰分+水分): 18.0 % で、高発熱量は 26.5 MJ/kg である。また、天然ガスは100%メタンであり、高発熱量は質量基準で 55.5 MJ/kg である。
3. 水素およびメタンを空気比1.0で完全燃焼させたとき、それぞれの理論断熱燃焼温度 T_{bt} を求めよ。燃焼前の燃料および空気の温度は $T_0=298K$ (25℃) とする。また、単位体積当たりの発熱量はメタンの方が水素よりはるかに大きいにもかかわらず、 T_{bt} は水素の方が高い理由は何か。(体積基準で計算せよ)
4. 石炭をガス化して得られた燃料ガスの組成を測定したら、体積分率で H_2 が40%、 CO_2 が30%、 CO が30%であった。この燃料ガスを空気比1.2で完全燃焼させたとき、次の問に答えよ。ただし、燃焼前の燃料および空気の温度は $T_0=298K$ (25℃) とする。
 - (1) この燃料ガス 1 m^3_N 当たりの湿り燃焼ガス体積を求めよ。
 - (2) 湿り燃焼ガス中の CO_2 の体積分率を求めよ。
 - (3) 理論断熱火炎温度を求めよ。
5. メタン (CH_4) を酸素過剰率 (空気比) 1.2 で、通常空気中で燃焼させた場合と O_2 を40%に酸素富化した空気中で燃焼させた場合のそれぞれについて、理論断熱火炎温度を求めよ。また、 O_2 を富化するとなぜ火炎温度が大幅に上昇するのか理由を述べよ。燃焼前の燃料および空気の温度は $298K$ (25℃) とする。

上記の設問で、必要ならば次の値を用いよ。

通常空気中の体積分率	O_2 : 0.20, N_2 : 0.80
低発熱量 H_0 [MJ/m^3_N]	H_2 : 10.8, CO : 12.6, CH_4 : 35.8
定圧比熱 C_p [$kJ/m^3_N \cdot K$]	CO_2 : 2.5, H_2O : 2.0, O_2 : 1.6, N_2 : 1.5
(簡単のため比熱は温度によらず一定とする)	

付録 A 化学種の熱化学的性質表

化石燃料の燃焼に関係する主要化学種の熱化学的性質表を JANAF の熱化学的性質表⁽¹⁾から抜粋して示す。表中に記入された注は省略された別の表に関するものであるから、詳細は文献(1)を参照されたい。また各表の右上に記入された西暦年は SI 単位系への移行以外の改定があった年である。もとの表は 0-6000K の間を 100K 刻みに与えている。

記号

T 絶対温度 [K]

C_p^0 絶対圧力 1 bar におけるモル定圧比熱 [J/(mol·K)]

S^0 絶対圧力 1 bar におけるモルエントロピー [J/(mol·K)]

H^0 絶対圧力 1 bar におけるモルエンタルピー [kJ/mol]

$$=10^{-3} \int_{T_0}^T C_p^0 dT + \Delta_f H^0(T_0) = 10^{-3} [H^0 - H^0(T_0)] + \Delta_f H^0(T_0)$$

(10^{-3} は J と kJ の変換定数, $T_0 = 298.15\text{K}$)

$\Delta_f H^0$ 絶対圧力 1 bar におけるモル生成熱 [kJ/mol]

$\Delta_f G^0$ 絶対圧力 1 bar におけるモル生成自由エネルギー [kJ/mol]

K_f 生成平衡定数 (基準物質との間の平衡定数) [bar ^{ν}]

文献

- (1) Chase, M. W., Jr ほか, NIST JANAF Thermochemical Tables, Pt. 1 & Pt. 2, 4th Edition, (1988), Am. Chem. Soc.

炭素(C) [基準状態=グラファイト] $M=12.011$ (1978)						
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	8.517	5.740	0.	0.	0.	0.
300	8.581	5.793	0.016	0.	0.	0.
400	11.817	8.713	1.039	0.	0.	0.
500	14.623	11.662	2.365	0.	0.	0.
600	16.844	14.533	3.943	0.	0.	0.
700	18.537	17.263	5.716	0.	0.	0.
800	19.827	19.826	7.637	0.	0.	0.
900	20.824	22.221	9.672	0.	0.	0.
1000	21.610	24.457	11.795	0.	0.	0.
1100	22.244	26.548	13.989	0.	0.	0.
1200	22.766	28.506	16.240	0.	0.	0.
1300	23.204	30.346	18.539	0.	0.	0.
1400	23.578	32.080	20.879	0.	0.	0.
1500	23.904	33.718	23.253	0.	0.	0.
1600	24.191	35.270	25.658	0.	0.	0.
1700	24.448	36.744	28.090	0.	0.	0.
1800	24.681	38.149	30.547	0.	0.	0.
1900	24.895	39.489	33.026	0.	0.	0.
2000	25.094	40.771	35.525	0.	0.	0.
2100	25.278	42.000	38.044	0.	0.	0.
2200	25.453	43.180	40.581	0.	0.	0.
2300	25.618	44.315	43.134	0.	0.	0.
2400	25.775	45.408	45.704	0.	0.	0.
2500	25.926	46.464	48.289	0.	0.	0.
2600	26.071	47.483	50.889	0.	0.	0.
2700	26.212	48.470	53.503	0.	0.	0.
2800	26.348	49.426	56.131	0.	0.	0.
2900	26.481	50.353	58.773	0.	0.	0.
3000	26.611	51.253	61.427	0.	0.	0.
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

メタン(CH ₄) [理想気体] $M=16.043$ (1961)						
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	35.639	186.251	0.	-74.873	-50.768	8.894
300	35.708	186.472	0.066	-74.929	-50.618	8.813
400	40.500	197.356	3.861	-77.969	-42.054	5.492
500	46.342	207.014	8.200	-80.802	-32.741	3.420
600	52.227	215.987	13.130	-83.308	-22.887	1.993
700	57.794	224.461	18.635	-85.452	-12.643	0.943
800	62.932	232.518	24.675	-87.238	-2.115	0.138
900	67.601	240.205	31.205	-88.692	8.616	-0.500
1000	71.795	247.549	38.179	-89.849	19.492	-1.018
1100	75.529	254.570	45.549	-90.750	30.472	-1.447
1200	78.833	261.287	53.270	-91.437	41.524	-1.807
1300	81.744	267.714	61.302	-91.945	52.626	-2.115
1400	84.305	273.868	69.608	-92.308	63.761	-2.379
1500	86.556	279.763	78.153	-92.553	74.918	-2.609
1600	88.537	285.413	86.910	-92.703	86.088	-2.810
1700	90.283	290.834	95.853	-92.780	97.265	-2.989
1800	91.824	296.039	104.960	-92.797	108.445	-3.147
1900	93.188	301.041	114.212	-92.770	119.624	-3.289
2000	94.399	305.853	123.592	-92.709	130.802	-3.416
2100	95.477	310.485	133.087	-92.624	141.975	-3.531
2200	96.439	314.949	142.684	-92.521	153.144	-3.636
2300	97.301	319.255	152.371	-92.409	164.308	-3.732
2400	98.075	323.413	162.141	-92.291	175.467	-3.819
2500	98.772	327.431	171.984	-92.174	186.622	-3.899
2600	99.401	331.317	181.893	-92.060	197.771	-3.973
2700	99.971	335.080	191.862	-91.954	208.916	-4.042
2800	100.489	338.725	201.885	-91.857	220.058	-4.105
2900	100.960	342.260	211.958	-91.773	231.196	-4.164
3000	101.389	345.690	222.076	-91.705	242.332	-4.219
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

アセチレン(C ₂ H ₂) [理想気体] M=26.038						(1961)
T	C _p ⁰	S ⁰	H ⁰ -H ⁰ (T ₀)	Δ _f H ⁰	Δ _f G ⁰	logK _f
298.15	44.095	200.958	0.	226.731	209.200	-36.651
300	44.229	201.231	0.082	226.728	209.092	-36.406
400	50.480	214.856	4.833	226.527	203.241	-26.540
500	54.869	226.610	10.108	226.227	197.453	-20.627
600	58.287	236.924	15.771	225.805	191.736	-16.692
700	61.149	246.127	21.745	225.295	186.099	-13.887
800	63.760	254.466	27.992	224.747	180.534	-11.788
900	66.111	262.113	34.487	224.198	175.040	-10.159
1000	68.275	269.192	41.208	223.669	169.607	- 8.859
1100	70.245	275.793	48.136	223.170	164.227	- 7.798
1200	72.053	281.984	55.252	222.706	158.888	- 6.916
1300	73.693	287.817	62.540	222.275	153.587	- 6.171
1400	75.178	293.334	69.985	221.876	148.319	- 5.534
1500	76.530	298.567	77.572	221.507	143.080	- 4.982
1600	77.747	303.546	85.286	221.160	137.861	- 4.501
1700	78.847	308.293	93.117	220.833	132.663	- 4.076
1800	79.852	312.829	101.053	220.521	127.488	- 3.700
1900	80.760	317.171	109.084	220.222	122.326	- 3.363
2000	81.605	321.335	117.203	219.933	117.183	- 3.060
2100	82.362	325.335	125.401	219.647	112.051	- 2.787
2200	83.065	329.183	133.673	219.366	106.935	- 2.539
2300	83.712	332.890	142.012	219.088	101.829	- 2.313
2400	84.312	336.465	150.414	218.809	96.735	- 2.105
2500	84.858	339.918	158.873	218.528	91.661	- 1.915
2600	85.370	343.256	167.384	218.241	86.587	- 1.740
2700	85.846	346.487	175.945	217.950	81.530	- 1.577
2800	86.295	349.618	184.553	217.653	76.485	- 1.427
2900	86.713	352.653	193.203	217.345	71.449	- 1.287
3000	87.111	355.600	201.895	217.032	66.423	- 1.157
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

エチレン(C ₂ H ₄) [理想気体] M=28.054						(1965)
T	C _p ⁰	S ⁰	H ⁰ -H ⁰ (T ₀)	Δ _f H ⁰	Δ _f G ⁰	logK _f
298.15	42.886	219.330	0.	52.467	68.421	-11.987
300	43.063	219.596	0.079	52.408	68.521	-11.930
400	53.048	233.343	4.882	49.354	74.360	-9.710
500	62.477	246.215	10.668	46.641	80.933	-8.455
600	70.663	258.348	17.335	44.294	88.017	-7.663
700	77.714	269.783	24.763	42.300	95.467	-7.124
800	83.840	280.570	32.847	40.637	103.180	-6.737
900	89.200	290.761	41.505	39.277	111.082	-6.447
1000	93.899	300.408	50.665	38.183	119.122	-6.222
1100	98.018	309.555	60.266	37.318	127.259	-6.043
1200	101.626	318.242	70.252	36.645	135.467	-5.897
1300	104.784	326.504	80.576	36.129	143.724	-5.775
1400	107.550	334.372	91.196	35.742	152.016	-5.672
1500	109.974	341.877	102.074	35.456	160.331	-5.583
1600	112.103	349.044	113.181	35.249	168.663	-5.506
1700	113.976	355.898	124.486	35.104	177.007	-5.439
1800	115.628	362.460	135.968	35.005	185.357	-5.379
1900	117.089	368.752	147.606	34.938	193.712	-5.326
2000	118.386	374.791	159.381	34.894	202.070	-5.278
2100	119.540	380.596	171.278	34.864	210.429	-5.234
2200	120.569	386.181	183.284	34.839	218.790	-5.195
2300	121.491	391.561	195.388	34.814	227.152	-5.159
2400	122.319	396.750	207.580	34.783	235.515	-5.126
2500	123.064	401.758	219.849	34.743	243.880	-5.096
2600	123.738	406.598	232.190	34.688	252.246	-5.068
2700	124.347	411.280	244.595	34.616	260.615	-5.042
2800	124.901	415.812	257.058	34.524	268.987	-5.018
2900	125.404	420.204	269.573	34.409	277.363	-4.996
3000	125.864	424.463	282.137	34.269	285.743	-4.975
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

一酸化炭素(CO) [理想気体] $M=28.010$ (1965)						
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	29.142	197.653	0.	-110.527	-137.163	24.030
300	29.142	197.833	0.054	-110.516	-137.328	23.911
400	29.342	206.238	2.976	-110.102	-146.338	19.110
500	29.794	212.831	5.931	-110.003	-155.414	16.236
600	30.443	218.319	8.942	-110.150	-164.486	14.320
700	31.171	223.066	12.023	-110.469	-173.518	12.948
800	31.899	227.277	15.177	-110.905	-182.497	11.916
900	32.577	231.074	18.401	-111.418	-191.416	11.109
1000	33.183	234.538	21.690	-111.983	-200.275	10.461
1100	33.710	237.726	25.035	-112.586	-209.075	9.928
1200	34.175	240.679	28.430	-113.217	-217.819	9.481
1300	34.572	243.431	31.868	-113.870	-226.509	9.101
1400	34.920	246.006	35.343	-114.541	-235.149	8.774
1500	35.217	248.426	38.850	-115.229	-243.740	8.488
1600	35.480	250.707	42.385	-115.933	-252.284	8.236
1700	35.710	252.865	45.945	-116.651	-260.784	8.013
1800	35.911	254.912	49.526	-117.384	-269.242	7.813
1900	36.091	256.859	53.126	-118.133	-277.658	7.633
2000	36.250	258.714	56.744	-118.896	-286.034	7.470
2100	36.392	260.486	60.376	-119.675	-294.372	7.322
2200	36.518	262.182	64.021	-120.470	-302.672	7.186
2300	36.635	263.809	67.683	-121.278	-310.936	7.062
2400	36.741	265.359	71.324	-122.133	-319.164	6.946
2500	36.836	266.854	74.985	-122.994	-327.356	6.840
2600	36.924	268.300	78.673	-123.854	-335.514	6.741
2700	37.003	269.695	82.369	-124.731	-343.638	6.648
2800	37.083	271.042	86.074	-125.623	-351.729	6.562
2900	37.150	272.345	89.786	-126.532	-359.789	6.480
3000	37.217	273.605	93.504	-127.457	-367.816	6.404
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

二酸化炭素(CO ₂) [理想気体] $M=44.010$ (1965)						
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	37.129	213.795	0.	-393.522	-394.389	69.095
300	37.221	214.025	0.069	-393.523	-394.394	68.670
400	41.325	225.314	4.003	-393.583	-394.675	51.539
500	44.627	234.901	8.305	-393.666	-394.939	41.259
600	47.321	243.283	12.907	-393.803	-395.182	34.404
700	49.564	250.750	17.754	-393.983	-395.398	29.505
800	51.434	257.494	22.806	-394.188	-395.586	25.829
900	52.999	263.645	28.030	-394.405	-395.748	22.969
1000	54.308	269.299	33.397	-394.623	-395.886	20.679
1100	55.409	274.528	38.884	-394.838	-396.001	18.805
1200	56.342	279.390	44.473	-395.050	-396.098	17.242
1300	57.137	283.932	50.148	-395.257	-396.177	15.919
1400	57.802	288.191	55.896	-395.462	-396.240	14.784
1500	58.379	292.199	61.705	-395.668	-396.288	13.800
1600	58.886	295.983	67.569	-395.876	-396.323	12.939
1700	59.317	299.566	73.480	-396.090	-396.344	12.178
1800	59.701	302.968	79.431	-396.311	-396.353	11.502
1900	60.049	306.205	85.419	-396.542	-396.349	10.896
2000	60.350	309.293	91.439	-396.784	-396.333	10.351
2100	60.622	312.244	97.488	-397.039	-396.304	9.858
2200	60.865	315.070	103.562	-397.309	-396.262	9.408
2300	61.086	317.781	109.660	-397.596	-396.209	8.998
2400	61.287	320.385	115.779	-397.900	-396.142	8.622
2500	61.471	322.890	121.917	-398.222	-396.062	8.275
2600	61.647	325.305	128.073	-398.562	-395.969	7.955
2700	61.802	327.634	134.246	-398.921	-395.862	7.658
2800	61.952	329.885	140.433	-399.299	-395.742	7.383
2900	62.095	332.061	146.636	-399.695	-395.609	7.126
3000	62.229	334.169	152.852	-400.111	-395.461	6.886
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

水素原子(H) [理想気体] $A=1.0079$

(1982)

T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	20.786	114.716	0.	217.999	203.278	--35.613
300	20.786	114.845	0.038	218.011	203.186	--35.378
400	20.786	120.825	2.117	218.637	198.150	--25.876
500	20.786	125.463	4.196	219.254	192.957	--20.158
600	20.786	129.253	6.274	219.868	187.640	--16.335
700	20.786	132.457	8.353	220.478	182.220	--13.597
800	20.786	135.232	10.431	221.080	176.713	--11.538
900	20.786	137.681	12.510	221.671	171.132	--9.932
1000	20.786	139.871	14.589	222.248	165.485	--8.644
1100	20.786	141.852	16.667	222.807	159.782	--7.587
1200	20.786	143.660	18.746	223.346	154.028	--6.705
1300	20.786	145.324	20.824	223.865	148.230	--5.956
1400	20.786	146.865	22.903	224.361	142.394	--5.313
1500	20.786	148.299	24.982	224.836	136.522	--4.754
1600	20.786	149.640	27.060	225.289	130.620	--4.264
1700	20.786	150.900	29.139	225.721	124.689	--3.831
1800	20.786	152.088	31.217	226.132	118.734	--3.446
1900	20.786	153.212	33.296	226.525	112.757	--3.100
2000	20.786	154.278	35.375	226.898	106.760	--2.788
2100	20.786	155.293	37.453	227.254	100.744	--2.506
2200	20.786	156.260	39.532	227.593	94.712	--2.249
2300	20.786	157.184	41.610	227.916	88.664	--2.014
2400	20.786	158.068	43.689	228.224	82.603	--1.798
2500	20.786	158.917	45.768	228.518	76.530	--1.599
2600	20.786	159.732	47.846	228.798	70.444	--1.415
2700	20.786	160.516	49.925	229.064	64.349	--1.245
2800	20.786	161.272	52.004	229.318	58.243	--1.087
2900	20.786	162.002	54.082	229.560	52.129	--0.939
3000	20.786	162.706	56.161	229.790	46.007	--0.801
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

 水素分子(H₂) [基準状態=理想気体] $M=2.0159$

(1977)

T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	28.836	130.680	0.	0.	0.	0.
300	28.849	130.858	0.053	0.	0.	0.
400	29.181	139.216	2.959	0.	0.	0.
500	29.260	145.737	5.882	0.	0.	0.
600	29.327	151.077	8.811	0.	0.	0.
700	29.441	155.606	11.749	0.	0.	0.
800	29.624	159.548	14.702	0.	0.	0.
900	29.881	163.051	17.676	0.	0.	0.
1000	30.205	166.216	20.680	0.	0.	0.
1100	30.581	169.112	23.719	0.	0.	0.
1200	30.992	171.790	26.797	0.	0.	0.
1300	31.423	174.288	29.918	0.	0.	0.
1400	31.861	176.633	33.082	0.	0.	0.
1500	32.298	178.846	36.290	0.	0.	0.
1600	32.725	180.944	39.541	0.	0.	0.
1700	33.139	182.940	42.835	0.	0.	0.
1800	33.537	184.846	46.169	0.	0.	0.
1900	33.917	186.669	49.541	0.	0.	0.
2000	34.280	188.418	52.951	0.	0.	0.
2100	34.624	190.099	56.397	0.	0.	0.
2200	34.952	191.718	59.876	0.	0.	0.
2300	35.263	193.278	63.387	0.	0.	0.
2400	35.559	194.785	66.928	0.	0.	0.
2500	35.842	196.243	70.498	0.	0.	0.
2600	36.111	197.654	74.096	0.	0.	0.
2700	36.370	199.021	77.720	0.	0.	0.
2800	36.618	200.349	81.369	0.	0.	0.
2900	36.856	201.638	85.043	0.	0.	0.
3000	37.087	202.891	88.740	0.	0.	0.
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

水(H ₂ O)[液($p=1$ bar)] $M=18.015$ (1979)						
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	75.351	69.950	0.	-285.830	-237.141	41.546
300	75.349	70.416	0.139	-285.771	-236.839	41.237
320	75.344	75.279	1.646	-285.137	-233.598	38.131
340	75.388	79.847	3.153	-284.506	-230.396	35.396
360	75.679	84.164	4.664	-283.874	-227.231	32.970
372.780	75.962	86.808	5.633LIQUIDREAL GAS
380	76.154	88.267	6.182	-283.237	-224.102	30.805
400	76.770	92.189	7.711	-282.591	-221.006	28.860
420	77.547	95.952	9.254	-281.934	-217.943	27.105
440	78.543	99.582	10.814	-281.262	-214.912	25.513
460	79.793	103.100	12.397	-280.569	-211.911	24.063
480	81.463	106.530	14.009	-279.850	-208.941	22.737
500	83.694	109.898	15.659	-279.095	-206.002	21.521
水(H ₂ O)[液-実在ガス ($p=1$ bar)]						
水(H ₂ O)[液-実在ガス ($p=10$ bar)]						
水(H ₂ O)[液-実在ガス ($p=100$ bar)]						
水(H ₂ O)[液-実在ガス ($p=500$ bar)]						
水(H ₂ O)[液-実在ガス ($p=5000$ bar)]						
の表も与えられている						
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

水蒸気(H ₂ O)[理想気体] $M=18.015$ (1979)						
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	33.590	188.834	0.	-241.826	-228.582	40.047
300	33.596	189.042	0.062	-241.844	-228.500	39.785
400	34.262	198.788	3.452	-242.846	-223.901	29.238
500	35.226	206.534	6.925	-243.826	-219.051	22.884
600	36.325	213.052	10.501	-244.758	-214.007	18.631
700	37.495	218.739	14.192	-245.632	-208.812	15.582
800	38.721	223.825	18.002	-246.443	-203.496	13.287
900	39.987	228.459	21.938	-247.185	-198.083	11.496
1000	41.268	232.738	26.000	-247.857	-192.590	10.060
1100	42.536	236.731	30.191	-248.460	-187.033	8.881
1200	43.768	240.485	34.506	-248.997	-181.425	7.897
1300	44.945	244.035	38.942	-249.473	-175.774	7.063
1400	46.054	247.407	43.493	-249.894	-170.089	6.346
1500	47.090	250.620	48.151	-250.265	-164.376	5.724
1600	48.050	253.690	52.908	-250.592	-158.639	5.179
1700	48.935	256.630	57.758	-250.881	-152.883	4.698
1800	49.749	259.451	62.693	-251.138	-147.111	4.269
1900	50.496	262.161	67.706	-251.368	-141.325	3.885
2000	51.180	264.769	72.790	-251.575	-135.528	3.540
2100	51.823	267.282	77.941	-251.762	-129.721	3.227
2200	52.408	269.706	83.153	-251.934	-123.905	2.942
2300	52.947	272.048	88.421	-252.092	-118.082	2.682
2400	53.444	274.312	93.741	-252.239	-112.252	2.443
2500	53.904	276.503	99.108	-252.379	-106.416	2.223
2600	54.329	278.625	104.520	-252.513	-100.575	2.021
2700	54.723	280.683	109.973	-252.643	-94.729	1.833
2800	55.089	282.680	115.464	-252.771	-88.878	1.658
2900	55.430	284.619	120.990	-252.897	-83.023	1.495
3000	55.748	286.504	126.549	-253.024	-77.163	1.344
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

窒素原子(N)[理想気体] $M=14.007$						(1982)
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	20.786	153.300	0.	472.683	455.540	-79.809
300	20.786	153.429	0.038	472.694	455.434	-79.298
400	20.786	159.408	2.117	473.314	449.587	-58.710
500	20.786	164.047	4.196	473.923	443.584	-46.341
600	20.786	167.836	6.274	474.510	437.461	-38.084
700	20.786	171.041	8.353	475.067	431.242	-32.180
800	20.786	173.816	10.431	475.591	424.945	-27.746
900	20.786	176.264	12.510	476.081	418.584	-24.294
1000	20.786	178.454	14.589	476.540	412.171	-21.530
1100	20.786	180.436	16.667	476.970	405.713	-19.266
1200	20.786	182.244	18.746	477.374	399.217	-17.377
1300	20.786	183.908	20.824	477.756	392.688	-15.778
1400	20.786	185.448	22.903	478.118	386.131	-14.407
1500	20.786	186.882	24.982	478.462	379.548	-13.217
1600	20.786	188.224	27.060	478.791	372.943	-12.175
1700	20.786	189.484	29.139	479.107	366.318	-11.256
1800	20.787	190.672	31.218	479.411	359.674	-10.437
1900	20.788	191.796	33.296	479.705	353.014	-9.705
2000	20.790	192.863	35.375	479.990	346.339	-9.045
2100	20.793	193.877	37.454	480.266	339.650	-8.448
2200	20.797	194.844	39.534	480.536	332.947	-7.905
2300	20.804	195.769	41.614	480.799	326.233	-7.409
2400	20.813	196.655	43.695	481.057	319.507	-6.954
2500	20.826	197.504	45.777	481.311	312.770	-6.535
2600	20.843	198.322	47.860	481.561	306.024	-6.148
2700	20.864	199.109	49.945	481.809	299.268	-5.790
2800	20.891	199.868	52.033	482.054	292.502	-5.457
2900	20.924	200.601	54.124	482.299	285.728	-5.147
3000	20.963	201.311	56.218	482.543	278.946	-4.857
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

酸化窒素(NO)[理想気体] $M=30.006$						(1963)
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	29.845	210.758	0.	90.291	86.600	-15.172
300	29.841	210.943	0.055	90.292	86.577	-15.074
400	29.944	219.529	3.040	90.332	85.331	-11.143
500	30.486	226.263	6.059	90.352	84.079	-8.784
600	31.238	231.886	9.144	90.366	82.822	-7.210
700	32.028	236.761	12.307	90.381	81.564	-6.086
800	32.767	241.087	15.548	90.398	80.303	-5.243
900	33.422	244.985	18.858	90.417	79.041	-4.587
1000	33.987	248.536	22.229	90.437	77.775	-4.063
1100	34.468	251.799	25.653	90.457	76.508	-3.633
1200	34.877	254.816	29.120	90.476	75.239	-3.275
1300	35.226	257.621	32.626	90.493	73.969	-2.972
1400	35.524	260.243	36.164	90.508	72.697	-2.712
1500	35.780	262.703	39.729	90.518	71.425	-2.487
1600	36.002	265.019	43.319	90.525	70.151	-2.290
1700	36.195	267.208	46.929	90.526	68.878	-2.116
1800	36.364	269.282	50.557	90.522	67.605	-1.962
1900	36.514	271.252	54.201	90.511	66.332	-1.824
2000	36.647	273.128	57.859	90.494	65.060	-1.699
2100	36.767	274.919	61.530	90.469	63.788	-1.587
2200	36.874	276.632	65.212	90.438	62.519	-1.484
2300	36.971	278.273	68.904	90.398	61.251	-1.391
2400	37.060	279.849	72.606	90.350	59.984	-1.306
2500	37.141	281.363	76.316	90.295	58.720	-1.227
2600	37.216	282.822	80.034	90.231	57.458	-1.154
2700	37.285	284.227	83.759	90.160	56.199	-1.087
2800	37.350	285.585	87.491	90.081	54.943	-1.025
2900	37.410	286.896	91.229	89.994	53.689	-0.967
3000	37.466	288.165	94.973	89.899	52.439	-0.913
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

二酸化窒素(NO ₂) [理想気体] M=46.005 (1964)						
T	C _p ⁰	S ⁰	H ⁰ -H ⁰ (T ₀)	Δ _f H ⁰	Δ _f G ⁰	log K _f
298.15	36.974	240.034	0.	33.095	51.258	-8.980
300	37.029	240.262	0.068	33.083	51.371	-8.944
400	40.171	251.342	3.927	32.512	57.560	-7.517
500	43.206	260.638	8.099	32.154	63.867	-6.672
600	45.834	268.755	12.555	31.959	70.230	-6.114
700	47.986	275.988	17.250	31.878	76.616	-5.717
800	49.708	282.512	22.138	31.874	83.008	-5.420
900	51.076	288.449	27.179	31.923	89.397	-5.188
1000	52.166	293.889	32.344	32.005	95.779	-5.003
1100	53.041	298.903	37.605	32.109	102.152	-4.851
1200	53.748	303.550	42.946	32.226	108.514	-4.724
1300	54.326	307.876	48.351	32.351	114.867	-4.615
1400	54.803	311.920	53.808	32.478	121.209	-4.522
1500	55.200	315.715	59.309	32.603	127.543	-4.441
1600	55.533	319.288	64.846	32.724	133.868	-4.370
1700	55.815	322.663	70.414	32.837	140.186	-4.307
1800	56.055	325.861	76.007	32.940	146.497	-4.251
1900	56.262	328.897	81.624	33.032	152.804	-4.201
2000	56.441	331.788	87.259	33.111	159.106	-4.155
2100	56.596	334.545	92.911	33.175	165.404	-4.114
2200	56.732	337.181	98.577	33.223	171.700	-4.077
2300	56.852	339.706	104.257	33.255	177.993	-4.042
2400	56.958	342.128	109.947	33.270	184.285	-4.011
2500	57.052	344.455	115.648	33.268	190.577	-3.982
2600	57.136	346.694	121.357	33.248	196.870	-3.955
2700	57.211	348.852	127.075	33.210	203.164	-3.930
2800	57.278	350.934	132.799	33.155	209.460	-3.908
2900	57.339	352.945	138.530	33.082	215.757	-3.886
3000	57.394	354.889	144.267	32.992	222.058	-3.866
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

窒素分子(N ₂) [基準状態=理想気体] M=28.013 (1977)						
T	C _p ⁰	S ⁰	H ⁰ -H ⁰ (T ₀)	Δ _f H ⁰	Δ _f G ⁰	log K _f
298.15	29.124	191.609	0.	0.	0.	0.
300	29.125	191.789	0.054	0.	0.	0.
400	29.249	200.181	2.971	0.	0.	0.
500	29.580	206.739	5.911	0.	0.	0.
600	30.110	212.176	8.894	0.	0.	0.
700	30.754	216.866	11.937	0.	0.	0.
800	31.433	221.017	15.046	0.	0.	0.
900	32.090	224.757	18.223	0.	0.	0.
1000	32.697	228.170	21.463	0.	0.	0.
1100	33.241	231.313	24.760	0.	0.	0.
1200	33.723	234.226	28.109	0.	0.	0.
1300	34.147	236.943	31.503	0.	0.	0.
1400	34.518	239.487	34.936	0.	0.	0.
1500	34.843	241.880	38.405	0.	0.	0.
1600	35.128	244.138	41.904	0.	0.	0.
1700	35.378	246.275	45.429	0.	0.	0.
1800	35.600	248.304	48.978	0.	0.	0.
1900	35.796	250.234	52.548	0.	0.	0.
2000	35.971	252.074	56.137	0.	0.	0.
2100	36.126	253.833	59.742	0.	0.	0.
2200	36.268	255.517	63.361	0.	0.	0.
2300	36.395	257.132	66.995	0.	0.	0.
2400	36.511	258.684	70.640	0.	0.	0.
2500	36.616	260.176	74.296	0.	0.	0.
2600	36.713	261.614	77.963	0.	0.	0.
2700	36.801	263.001	81.639	0.	0.	0.
2800	36.883	264.341	85.323	0.	0.	0.
2900	36.959	265.637	89.015	0.	0.	0.
3000	37.030	266.891	92.715	0.	0.	0.
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

酸素原子(O) [理想気体] $A=15.999$ (1982)						
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	21.911	161.058	0.	249.173	231.736	-40.599
300	21.901	161.194	0.041	249.187	231.628	-40.330
400	21.482	167.430	2.207	249.868	225.670	-29.469
500	21.257	172.197	4.343	250.474	219.549	-22.936
600	21.124	176.060	6.462	251.013	213.312	-18.570
700	21.040	179.310	8.570	251.494	206.990	-15.446
800	20.984	182.116	10.671	251.926	200.602	-13.098
900	20.944	184.585	12.767	252.320	194.163	-11.269
1000	20.915	186.790	14.860	252.682	187.681	-9.803
1100	20.893	188.782	16.950	253.018	181.165	-8.603
1200	20.877	190.599	19.039	253.332	174.619	-7.601
1300	20.864	192.270	21.126	253.627	168.047	-6.752
1400	20.853	193.816	23.212	253.906	161.453	-6.024
1500	20.845	195.254	25.296	254.171	154.840	-5.392
1600	20.838	196.599	27.381	254.421	148.210	-4.839
1700	20.833	197.862	29.464	254.659	141.564	-4.350
1800	20.830	199.053	31.547	254.884	134.905	-3.915
1900	20.827	200.179	33.630	255.097	128.234	-3.525
2000	20.826	201.247	35.713	255.299	121.552	-3.175
2100	20.827	202.263	37.796	255.488	114.860	-2.857
2200	20.830	203.232	39.878	255.667	108.159	-2.568
2300	20.835	204.158	41.962	255.835	101.450	-2.304
2400	20.841	205.045	44.045	255.992	94.734	-2.062
2500	20.851	205.896	46.130	256.139	88.012	-1.839
2600	20.862	206.714	48.216	256.277	81.284	-1.633
2700	20.877	207.502	50.303	256.405	74.551	-1.442
2800	20.894	208.261	52.391	256.525	67.814	-1.265
2900	20.914	208.995	54.481	256.637	61.072	-1.100
3000	20.937	209.704	56.574	256.741	54.327	-0.946
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar

水酸基(OH) [理想気体] $M=17.007$ (1977)						
T	C_p^0	S^0	$H^0-H^0(T_0)$	$\Delta_f H^0$	$\Delta_f G^0$	$\log K_f$
298.15	29.986	183.708	0.	38.987	34.277	-6.005
300	29.977	183.894	0.055	38.988	34.248	-5.963
400	29.650	192.466	3.035	39.029	32.660	-4.265
500	29.521	199.066	5.992	38.995	31.070	-3.246
600	29.527	204.447	8.943	38.902	29.493	-2.568
700	29.663	209.007	11.902	38.764	27.935	-2.085
800	29.917	212.983	14.880	38.598	26.399	-1.724
900	30.264	216.526	17.888	38.416	24.884	-1.444
1000	30.676	219.736	20.935	38.230	23.391	-1.222
1100	31.124	222.680	24.024	38.046	21.916	-1.041
1200	31.586	225.408	27.160	37.867	20.458	-0.891
1300	32.046	227.955	30.342	37.697	19.014	-0.764
1400	32.492	230.346	33.569	37.535	17.583	-0.656
1500	32.917	232.602	36.839	37.381	16.163	-0.563
1600	33.319	234.740	40.151	37.234	14.753	-0.482
1700	33.694	236.771	43.502	37.093	13.352	-0.410
1800	34.044	238.707	46.889	36.955	11.960	-0.347
1900	34.369	240.557	50.310	36.819	10.575	-0.291
2000	34.670	242.327	53.762	36.685	9.197	-0.240
2100	34.950	244.026	57.243	36.551	7.826	-0.195
2200	35.209	245.658	60.752	36.416	6.462	-0.153
2300	35.449	247.228	64.285	36.278	5.103	-0.116
2400	35.673	248.741	67.841	36.137	3.750	-0.082
2500	35.881	250.202	71.419	35.992	2.404	-0.050
2600	36.075	251.613	75.017	35.843	1.063	-0.021
2700	36.256	252.978	78.633	35.689	-0.271	0.005
2800	36.426	254.300	82.267	35.530	-1.600	0.030
2900	36.586	255.581	85.918	35.365	-2.924	0.053
3000	36.736	256.824	89.584	35.194	-4.241	0.074
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

酸素分子(O ₂) [基準状態=理想気体] M=31.999 (1977)						
T	C _p ⁰	S ⁰	H ⁰ -H ⁰ (T ₀)	Δ _f H ⁰	Δ _f G ⁰	log K _f
298.15	29.376	205.147	0.	0.	0.	0.
300	29.385	205.329	0.054	0.	0.	0.
400	30.106	213.871	3.025	0.	0.	0.
500	31.091	220.693	6.084	0.	0.	0.
600	32.090	226.451	9.244	0.	0.	0.
700	32.981	231.466	12.499	0.	0.	0.
800	33.733	235.921	15.835	0.	0.	0.
900	34.355	239.931	19.241	0.	0.	0.
1000	34.870	243.578	22.703	0.	0.	0.
1100	35.300	246.922	26.212	0.	0.	0.
1200	35.667	250.010	29.761	0.	0.	0.
1300	35.988	252.878	33.344	0.	0.	0.
1400	36.277	255.556	36.957	0.	0.	0.
1500	36.544	258.068	40.599	0.	0.	0.
1600	36.796	260.434	44.266	0.	0.	0.
1700	37.040	262.672	47.958	0.	0.	0.
1800	37.277	264.796	51.673	0.	0.	0.
1900	37.510	266.818	55.413	0.	0.	0.
2000	37.741	268.748	59.175	0.	0.	0.
2100	37.969	270.595	62.961	0.	0.	0.
2200	38.195	272.366	66.769	0.	0.	0.
2300	38.419	274.069	70.600	0.	0.	0.
2400	38.639	275.709	74.453	0.	0.	0.
2500	38.856	277.290	78.328	0.	0.	0.
2600	39.068	278.819	82.224	0.	0.	0.
2700	39.276	280.297	86.141	0.	0.	0.
2800	39.478	281.729	90.079	0.	0.	0.
2900	39.674	283.118	94.036	0.	0.	0.
3000	39.864	284.466	98.013	0.	0.	0.
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

硫黄(S) [基準状態=α, β結晶, 液, 理想気体] M=32.06 (1977)						
T	C _p ⁰	S ⁰	H ⁰ -H ⁰ (T ₀)	Δ _f H ⁰	Δ _f G ⁰	log K _f
298.15	22.698	32.056	0.	0.	0.	0.
300	22.744	32.196	0.042	0.	0.	0.
400	32.162	44.793	4.639	0.	0.	0.
500	37.986	53.532	8.567	⋮	⋮	⋮
600	34.308	60.078	12.152			
700	32.681	65.241	15.499			
800	31.699	69.530	18.710			
900	18.483	133.448	74.967			
1000	18.638	135.403	76.823			
1100	18.792	137.187	78.694			
1200	18.947	138.829	80.581			
1300	19.103	140.352	82.484			
1400	19.257	141.773	84.402			
1500	19.409	143.107	86.335			
1600	19.556	144.364	88.283			
1700	19.697	145.554	90.246			
1800	19.830	146.684	92.223			
1900	19.956	147.759	94.212			
2000	20.072	148.786	96.213			
2100	20.176	149.768	98.226			
2200	20.274	150.708	100.248			
2300	20.364	151.612	102.280			
2400	20.448	152.480	104.321			
2500	20.526	153.316	106.370			
2600	20.589	154.123	108.426	0.	0.	0.
2700	20.650	154.901	110.488	0.	0.	0.
2800	20.707	155.653	112.555	0.	0.	0.
2900	20.762	156.381	114.629	0.	0.	0.
3000	20.813	157.085	116.708	0.	0.	0.
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

α結晶 ⇌ β結晶
遷移点 368.300K

$$H^0 - H^0(T_0) = \begin{cases} 1.648(\alpha) \\ 2.049(\beta) \end{cases}$$

β結晶 ⇌ 液
遷移点 388.360K

$$H^0 - H^0(T_0) = \begin{cases} 2.550(\beta) \\ 4.271(\text{液}) \end{cases}$$

液 ⇌ ガス
遷移点 882.117K

$$H^0 - H^0(T_0) = \begin{cases} 21.310(\text{液}) \\ 74.636(\text{ガス}) \end{cases}$$

二酸化硫黄(SO ₂)[理想気体] M=64.059 (1961)						
T	C _p ⁰	S ⁰	H ⁰ -H ⁰ (T ₀)	Δ _f H ⁰	Δ _f G ⁰	log K _f
298.15	39.878	248.212	0.000	-296.842	-300.125	52.581
300	39.945	248.459	0.074	-296.865	-300.145	52.260
400	43.493	260.448	4.250	-300.257	-300.971	39.303
500	46.576	270.495	8.758	-302.736	-300.871	31.432
600	49.049	279.214	13.544	-304.694	-300.305	26.144
700	50.961	286.924	18.548	-306.291	-299.444	22.345
800	52.434	293.829	23.721	-307.667	-298.370	19.482
900	53.580	300.073	29.023	-362.026	-296.051	17.182
1000	54.484	305.767	34.428	-361.940	-288.725	15.081
1100	55.204	310.995	39.914	-361.835	-281.409	13.363
1200	55.794	315.824	45.464	-361.720	-274.102	11.931
1300	56.279	320.310	51.069	-361.601	-266.806	10.720
1400	56.689	324.496	56.718	-361.484	-259.518	9.683
1500	57.036	328.419	62.404	-361.372	-252.239	8.784
1600	57.338	332.110	68.123	-361.268	-244.967	7.997
1700	57.601	335.594	73.870	-361.176	-237.701	7.304
1800	57.831	338.893	79.642	-361.096	-230.440	6.687
1900	58.040	342.026	85.436	-361.031	-223.183	6.136
2000	58.229	345.007	91.250	-360.981	-215.929	5.639
2100	58.400	347.853	97.081	-360.948	-208.678	5.191
2200	58.555	350.573	102.929	-360.931	-201.427	4.782
2300	58.702	353.179	108.792	-360.930	-194.177	4.410
2400	58.840	355.680	114.669	-360.947	-186.927	4.068
2500	58.965	358.085	120.559	-360.980	-179.675	3.754
2600	59.086	360.400	126.462	-361.030	-172.422	3.464
2700	59.199	362.632	132.376	-361.095	-165.166	3.195
2800	59.308	364.787	138.302	-361.175	-157.908	2.946
2900	59.413	366.870	144.238	-361.270	-150.648	2.713
3000	59.513	368.886	150.184	-361.379	-143.383	2.497
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v

三酸化硫黄(SO ₃)[理想気体] M=80.058 (1965)						
T	C _p ⁰	S ⁰	H ⁰ -H ⁰ (T ₀)	Δ _f H ⁰	Δ _f G ⁰	log K _f
298.15	50.661	256.769	0.	-395.765	-371.016	65.000
300	50.802	257.083	0.094	-395.794	-370.862	64.573
400	57.672	272.674	5.530	-399.412	-362.242	47.304
500	63.100	286.152	11.580	-401.878	-352.668	36.843
600	67.255	298.041	18.107	-403.675	-342.647	29.830
700	70.390	308.655	24.997	-405.014	-332.365	24.801
800	72.761	318.217	32.160	-406.068	-321.912	21.019
900	74.570	326.896	39.531	-460.062	-310.258	18.007
1000	75.968	334.828	47.060	-459.581	-293.639	15.338
1100	77.065	342.122	54.714	-459.063	-277.069	13.157
1200	77.937	348.866	62.466	-458.521	-260.548	11.341
1300	78.639	355.133	70.296	-457.968	-244.073	9.807
1400	79.212	360.983	78.189	-457.413	-227.640	8.493
1500	79.685	366.465	86.135	-456.863	-211.247	7.356
1600	80.079	371.620	94.124	-456.323	-194.890	6.363
1700	80.410	376.485	102.149	-455.798	-178.567	5.487
1800	80.692	381.090	110.204	-455.293	-162.274	4.709
1900	80.932	385.459	118.286	-454.810	-146.009	4.014
2000	81.140	389.616	126.390	-454.351	-129.768	3.389
2100	81.319	393.579	134.513	-453.919	-113.549	2.824
2200	81.476	397.366	142.653	-453.514	-97.350	2.311
2300	81.614	400.990	150.807	-453.137	-81.170	1.843
2400	81.735	404.466	158.975	-452.790	-65.006	1.415
2500	81.843	407.805	167.154	-452.472	-48.855	1.021
2600	81.939	411.017	175.343	-452.183	-32.716	0.657
2700	82.025	414.111	183.541	-451.922	-16.587	0.321
2800	82.102	417.096	191.748	-451.690	-0.467	0.009
2900	82.171	419.978	199.961	-451.487	15.643	-0.282
3000	82.234	422.765	208.182	-451.311	31.748	-0.553
K	J/(mol·K)		kJ/mol			log bar ^v