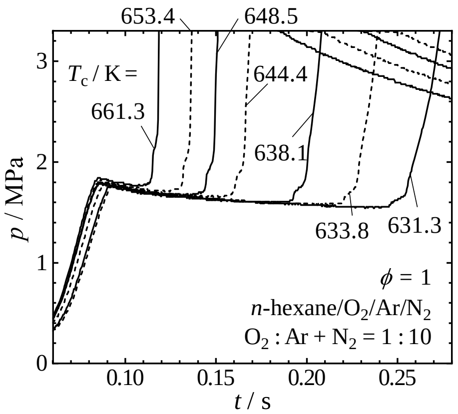

図 0.1: ヘキサン/空気混合気の圧縮自着火

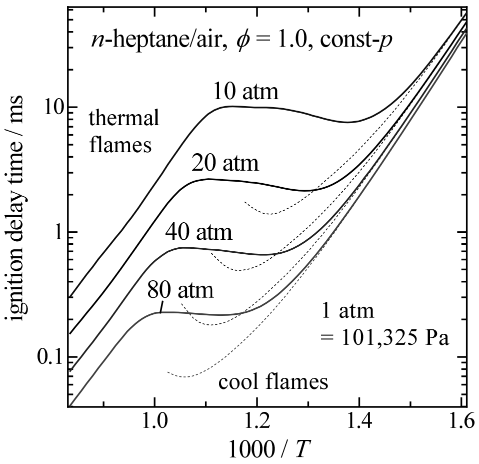

図 0.2: ヘプタン/空気混合気の着火遅れ時間の温度依存性

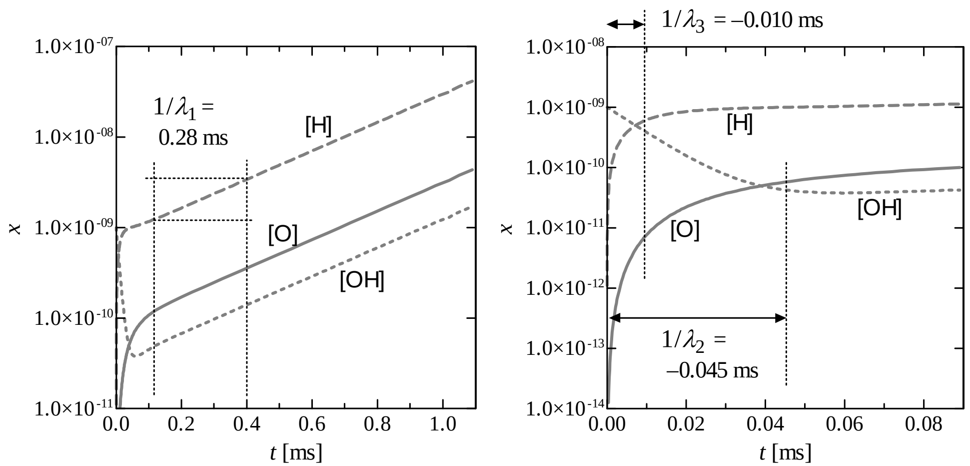

図 1.1: H_2-O_2 連鎖反応

[H_2:O_2 = 2:1, p = 1013.25 Pa (0.01 atm), T = 1000 K, $x(OH)_0 = 1\times10^{-9}$]

表 1.1: Cl_2-H_2 連鎖反応系の反応速度定数

反応	A [m^3 mol^{-1} s^{-1}]	E_a / R [K]	k (298 K) [m^3 mol^{-1} s^{-1}]
(1) $Cl + H_2 \rightarrow H + HCl$	2.2×10^7	2300	9.8×10^3
(2) $H + Cl_2 \rightarrow Cl + HCl$	4.8×10^7	416	1.2×10^7

表 1.2: H_2-O_2 連鎖反応系の反応速度定数

反応	A [m^3 mol^{-1} s^{-1}]	b	E_a / R [K]	k (1000 K) [m^3 mol^{-1} s^{-1}]
(1) $H + O_2 \rightarrow OH + O$	9.8×10^7	0	7470	5.6×10^4
(2) $O + H_2 \rightarrow OH + H$	5.1×10^{-2}	2.67	3160	2.2×10^5
(3) $OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$	1.0×10^2	1.6	1660	1.2×10^6
*(4) $H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$	1.7×10^6	–0.8	0	6.8×10^3

*(4) のみ A と k (1000K) の単位: cm^6 mol^{-2} s^{-1}

[H$_2$]:[O$_2$] = 2:1, p = 1013.25 Pa (0.01 atm), T = 1000 K で

[H$_2$] = 8.12×10^{-2}, [O$_2$] = 4.06×10^{-2}, [M] = [H$_2$] + [O$_2$] = 1.22×10^{-1} (mol m^{-3})

$r_1 = k_1[O_2] = 2.3 \times 10^3$ s^{-1}

$r_2 = k_2[H_2] = 1.8 \times 10^4$ s^{-1}

$r_3 = k_3[H_2] = 9.7 \times 10^4$ s^{-1}

$r_4 = k_4[O_2][M] = 3.4 \times 10^1$ s^{-1}

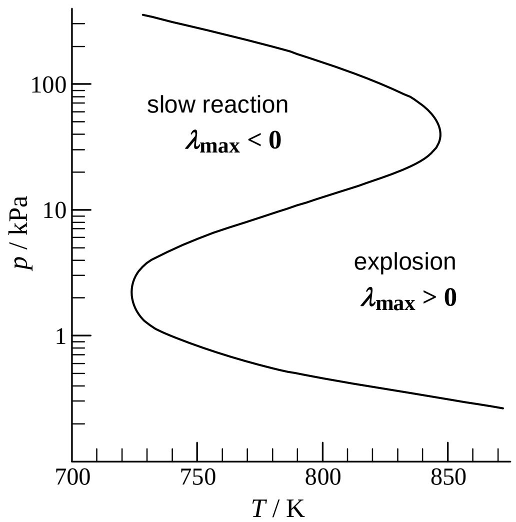

図 4.1: H_2-O_2 自着火限界 (爆発限界)

800 K 付近を見たときに限界曲線を下から (低圧から) 順に、第一限界，第二限界，第三限界と呼ぶ.

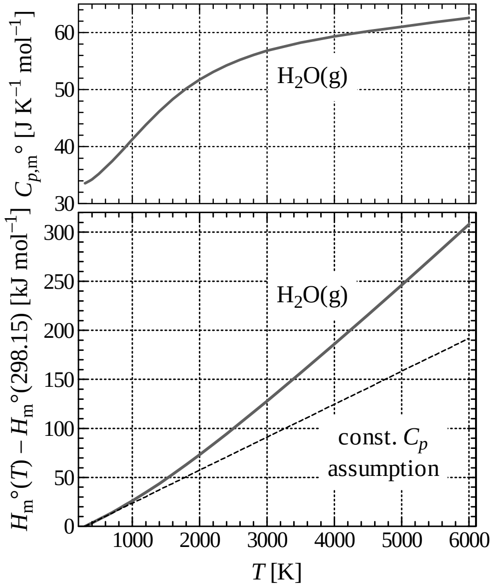

図 5.1: 水蒸気 H_2O(g) のモル定圧熱容量

表 5.1: 断熱定圧平衡 (H_2:O_2=2:1, 101.325 kPa [1 atm])

温度 [K]	3075
モル分率 [%]	
H_2O	58.16
H_2	14.89
OH	11.25
H	7.58
O_2	4.92
O	3.20

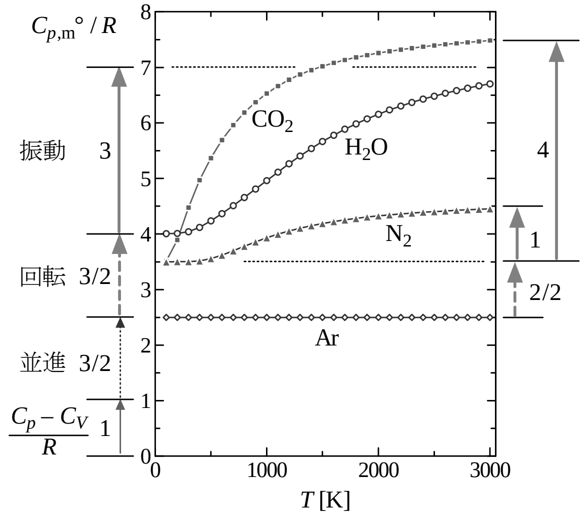

図 6.1: 定圧モル熱容量への分子運動の寄与

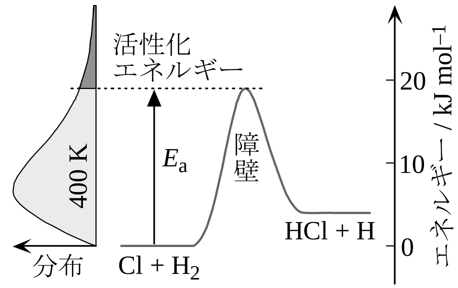

図 7.1: 反応障壁と活性化エネルギー

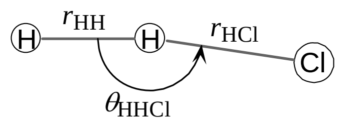

図 7.2: 反応に関わる分子座標

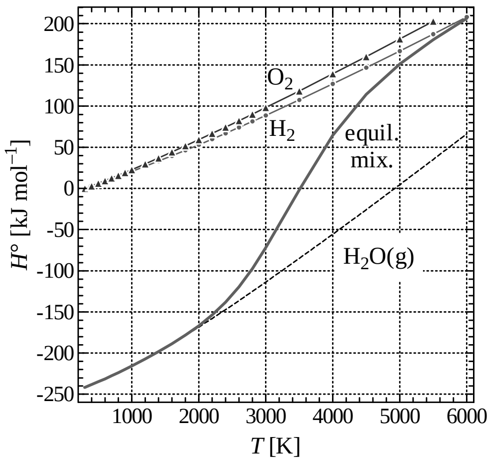

図 5.2: エンタルピーの温度変化

表 5.2: 熱力学関数の近似式 (NASA 多項式)

$$\frac{C_{p,\mathrm{m}}^\circ}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4$$

$$\frac{H_\mathrm{m}^\circ}{RT} = \frac{1}{T}\int \frac{C_{p,\mathrm{m}}^\circ}{R}\,\mathrm{d}T$$

$$= a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T}$$

$$\frac{S_\mathrm{m}^\circ}{R} = \int \frac{C_{p,\mathrm{m}}^\circ}{RT}\,\mathrm{d}T$$

$$= a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4 + a_7$$

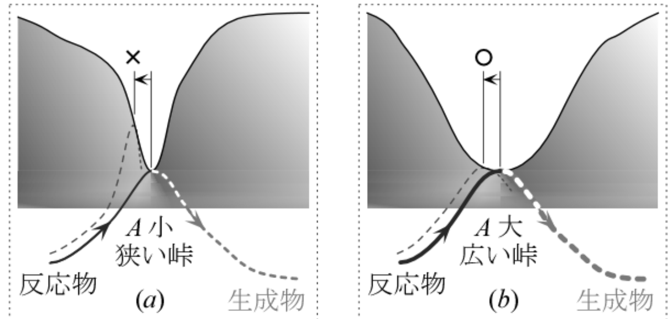

図 7.3: 前指数因子と遷移状態の性質