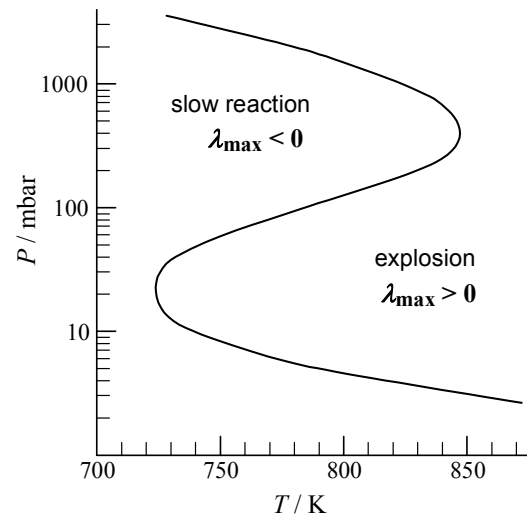


図 2.1: H₂-O₂ 爆発限界

800 K 付近を見る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。

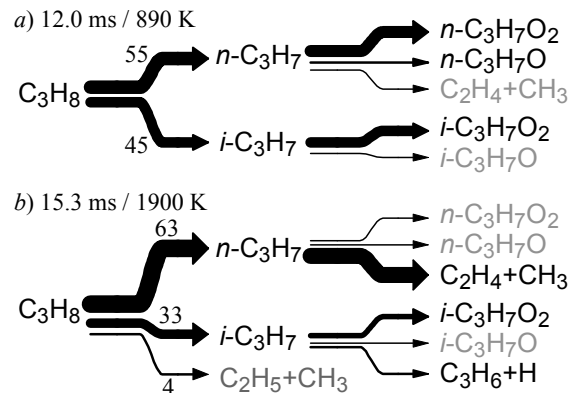


図 2.2: 反応経路解析の例

プロパン-空気当量混合気の定容断熱計算
40 atm, 850 K における燃料消費過程の経路解析。
a) 着火誘導期, b) 熱炎領域

表 2.1: CH₄-Cl₂ 連鎖反応系の反応速度定数

反応	A [cm ³ mol ⁻¹ s ⁻¹]	b	E_a / R [K]	k (500 K) [cm ³ mol ⁻¹ s ⁻¹]
(1) Cl + CH ₄ → HCl + CH ₃	7.83×10^4	2.69	500	5.26×10^{11}
(2) CH ₃ + Cl ₂ → CH ₃ Cl + Cl	3.02×10^{12}	0	270	1.77×10^{12}
(3) Cl + CH ₃ Cl → HCl + CH ₂ Cl	2.41×10^{10}	0.92	800	1.49×10^{12}
(4) CH ₂ Cl + Cl ₂ → CH ₂ Cl ₂ + Cl	9.11×10^{11}	0	490	3.40×10^{11}
(5) Cl + CH ₂ Cl ₂ → HCl + CHCl ₂	8.91×10^7	1.58	360	7.93×10^{11}
(6) CHCl ₂ + Cl ₂ → CHCl ₃ + Cl	5.13×10^{11}	0	1240	4.31×10^{10}

[CH₄]:[Cl₂]:[Ar]:[Cl]₀ = 0.01:0.04:0.95:4×10⁻⁸, $p = 1$ atm, $T = 500$ K で

$$[\text{CH}_4] = 2.44 \times 10^{-7} \text{ mol cm}^{-3}$$

$$[\text{Cl}_2] = 9.75 \times 10^{-7} \text{ mol cm}^{-3}$$

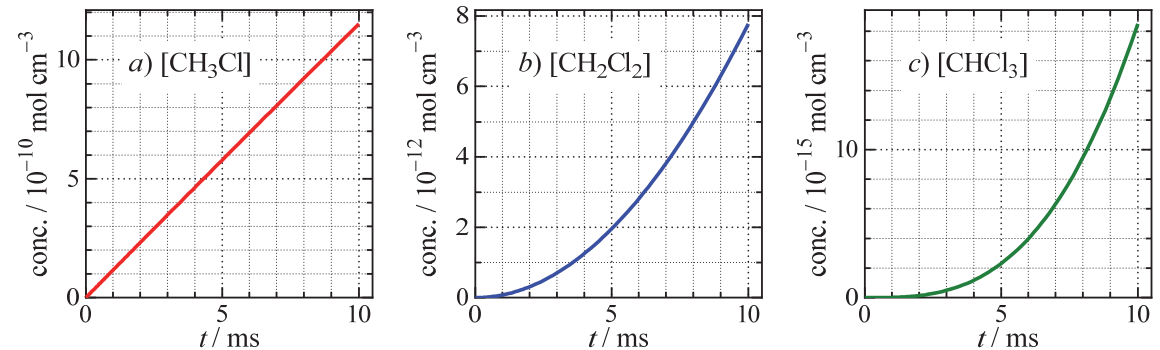
$$[\text{Cl}]_0 = 9.75 \times 10^{-13} \text{ mol cm}^{-3}$$

$$r_1 = k_1[\text{CH}_4] = 1.28 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$$

$$r_2 = k_2[\text{Cl}_2] = 1.73 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$$

$$r_4 = k_4[\text{Cl}_2] = 3.31 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$$

$$r_6 = k_6[\text{Cl}_2] = 4.21 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$$

図 2.3: CH₄-Cl₂ 連鎖反応 ([CH₄]:[Cl₂]:[Ar]:[Cl]₀ = 0.01:0.04:0.95:4×10⁻⁸, $p = 1$ atm, $T = 500$ K).

[23 化学種 82 素反応を含む反応機構による計算結果]