

表 3.1: (低位)発熱量と断熱火炎温度

化合物	構造	化学式	Q_c [kJ mol ⁻¹]	$Q_c/n_{O_2}^{*1}$ [kJ mol ⁻¹]	T_b^{*2} [K]
水素		H ₂	242	484	2380
一酸化炭素		CO	283	566	2380
メタン		CH ₄	802	401	2220
ペンタン		C ₅ H ₁₂	3272	409	2270
イソペンタン		C ₅ H ₁₂	3265	408	2270
シクロヘキサン		C ₆ H ₁₂	3689	410	2280
エチレン		C ₂ H ₄	1323	441	2370
1-ペンテン		C ₅ H ₁₀	3155	421	2310
アセチレン		C ₂ H ₂	1257	503	2540
エタノール		C ₂ H ₆ O	1277	426	2240
DME		C ₂ H ₆ O	1328	443	2280
ETBE		C ₆ H ₁₄ O	3740	416	2270
ベンゼン		C ₆ H ₆	3169	423	2340
トルエン		C ₇ H ₈	3772	419	2330
吉草酸メチル		C ₆ H ₁₂ O ₂	3341	418	2250
カプリン酸メチル		C ₁₁ H ₂₂ O ₂	6415	414	2260

*1 n_{O_2} = 完全燃焼に必要な酸素のモル数

*2 空気との当量混合気の 1 atm における断熱火炎温度

表 3.2: 断熱定圧平衡
(H₂:O₂=2:1, 1 atm)

温度 [K]	3075
モル分率 [%]	
H ₂ O	58.16
H ₂	14.89
OH	11.25
H	7.58
O ₂	4.92
O	3.20

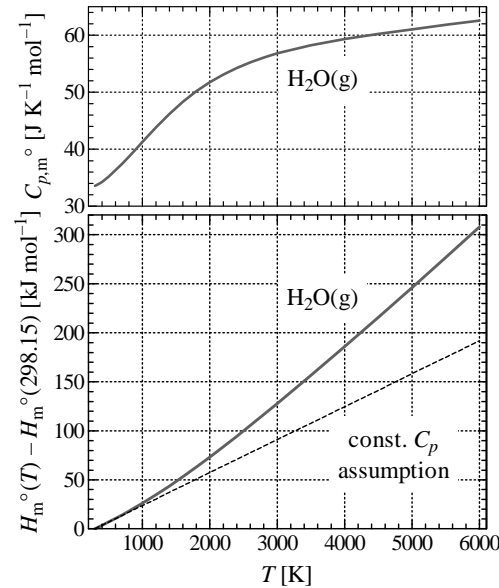


図 3.1: 水蒸気 H₂O(g) のモル定圧熱容量

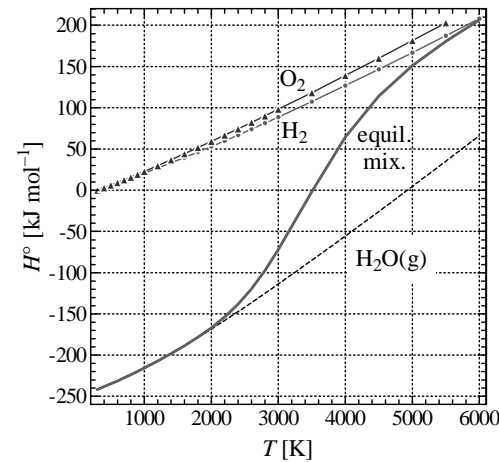


図 3.2: エンタルピーの温度変化

表 3.3: NASA CEA2 平衡計算入力例

i) H₂-O₂ (束縛条件なし)

```
problem case=h2-o2 hp p(atm)=1
phi,eq.ratio=1
react
fuel= H2 wt%=100 t(k)= 298.15
oxid= O2 wt%=100 t(k)= 298.15
end
```

ii) H₂-O₂ (生成物を H₂O, H₂, O₂ に限定)

```
problem case=h2-o2 hp p(atm)=1
phi,eq.ratio=1
react
fuel= H2 wt%=100 t(k)= 298.15
oxid= O2 wt%=100 t(k)= 298.15
only H2O H2 O2
end
```

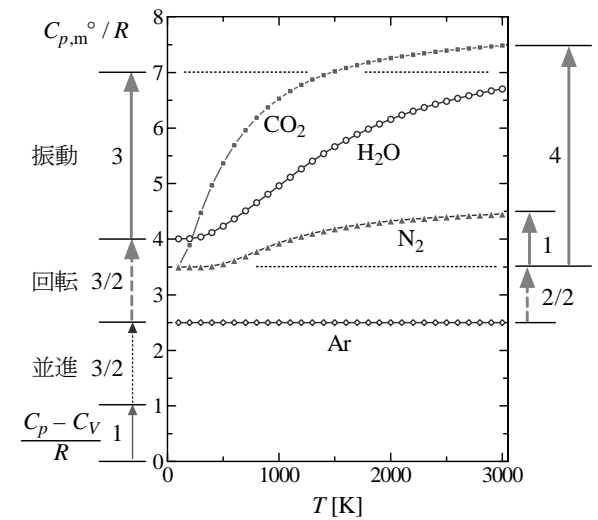


図 3.3: 定圧モル熱容量への分子運動の寄与