

ろうそくの科学 熱力学編 その2

「ろうそくの科学」の本は数多く出版されています。興味深い実験が紹介されています。しかし本には、その融点や沸点や燃焼式に関する情報が載っていません。そこで本書は、熱力学データを用いて燃焼を説明します。

- 5章 3グラムの ろうそくの燃焼 を計算してみる
- 6章 すず（煤）が生じる環境 を計算してみる

本書で用いた熱力学計算ソフトウェア： CaTCalc SE

参考：

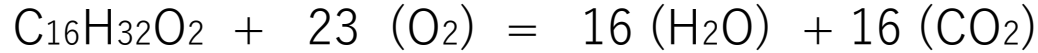
「ろうそくの科学」、M.Faraday/著、竹内敬人/訳、岩波書店(2010).

株式会社 材料設計技術研究所

第5章 3グラムのろうそくの燃焼

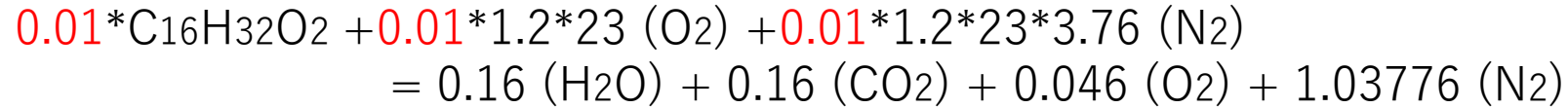
パルミチン酸

1 モル当たりの反応式



パルミチン酸の 0.01 モルは、約3グラムに相当する。

窒素を含む反応、空気過剰率 1.2 とし、



入力原料を $\text{C}_{16}\text{H}_{32}\text{O}_2$ (Liq) とし、入力はモル単位とする。

系の圧力は 1 気圧、

断熱燃焼温度を求める基準を $T (\text{C}) = 70 \text{ }^\circ\text{C}$ と指定した。

計算結果は、温度 1830°C であり、これは 1 モルの時と同じ値になる。

ガス種のモル比率も、1 モルと時と同じ値になる。

計算結果より、生成物 H_2O ガスのモル数は、 $1.406455 * 0.112126 = 0.1577$

生成物 CO_2 ガスのモル数は、 $1.406455 * 0.111873 = 0.1573$

となる。ほぼ反応式のモル数を再現できた。熱分解が生じている。



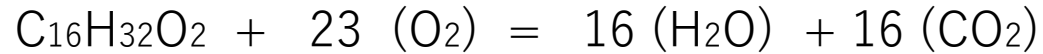
計算結果	
断熱燃焼温度	1830 °C
ガス相モル数	1.406455
ガス種のモル比率	
CO	0.001888
CO2	0.111873
H	0.000062
H2	0.000382
H2O	0.112126
N2	0.735982
NO	0.003744
O	0.000250
O2	0.031246
OH	0.002443

第6章 すず（煤）が生じる環境 を計算してみる

6-1 窒素ガスを含まない系

パルミチン酸

1 モル当たりの反応式



予想： 入力原料としての酸素の量（モル数）が23未満になると、すずが生じるのではないか？

計算してみよう： 窒素を含まない系とする。

固相の炭素を計算対象に入れる。これは固体の炭素である。

入力原料を $\text{C}_{16}\text{H}_{32}\text{O}_2$ (Liq) と酸素ガスとし、酸素ガス量を変化させる。0 から 30 モルまで 0.1 刻み。

系の圧力を 1 圧とし、温度は70°C固定とする。これは平衡計算。

Feed/Activity Conditions				Default Unit: mol (formula)
Phase	Species	Unit	Value	X 0 30 0.1
C16H32O2LL	16C*32H*2O	mol	1	
Gas	O2	mol	x	

計算結果を図6-1 と図6-2 に示す。

温度400 °Cの結果を図6-3 と図6-4 に示す。

温度800 °Cの結果を図6-5 と図6-6 に示す。

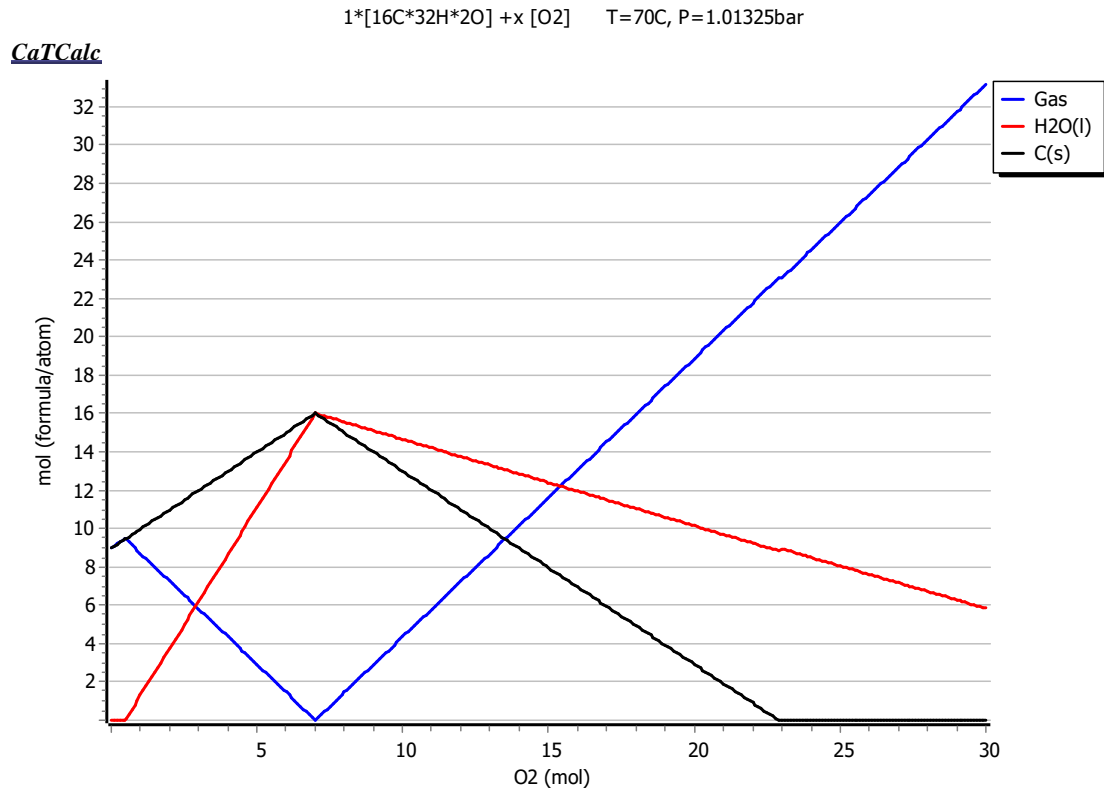


図6-1 酸素量を変化させた時の平衡相
温度70°Cでは
固体の炭素 C(s) は、酸素量22.9モルまで存在する。

酸素量7モルにおいては、丁度
H2O(Liq)が16モル、C(s)が16モルとなる。

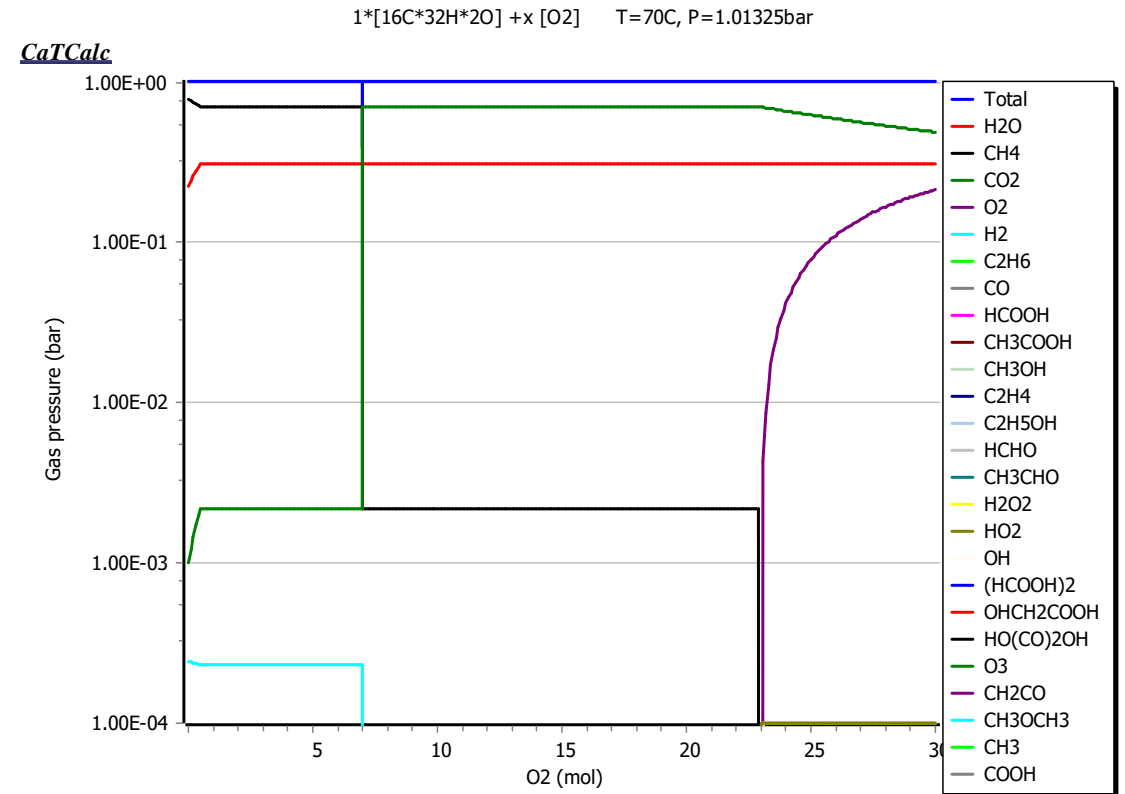


図6-2 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率
温度70°C、酸素量23モル以上のガス相では、
H2O, CO2, O2 が主な構成となる。

酸素量20モルでは
H2O, CO2, CH4 が主な構成となる。
0.306, 0.691, 0.002

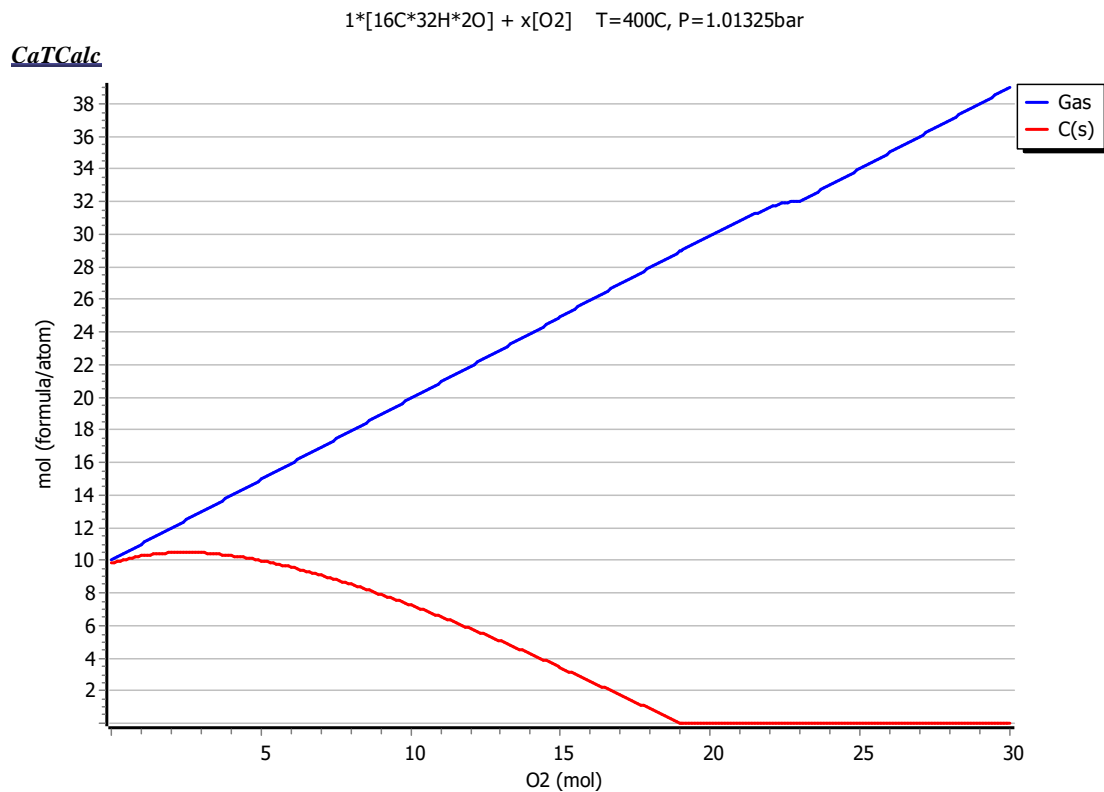


図6-3 酸素量を変化させた時の平衡相
 温度400°Cでは
 固体の炭素 C(s) は、酸素量19.0 モルまで存在する。

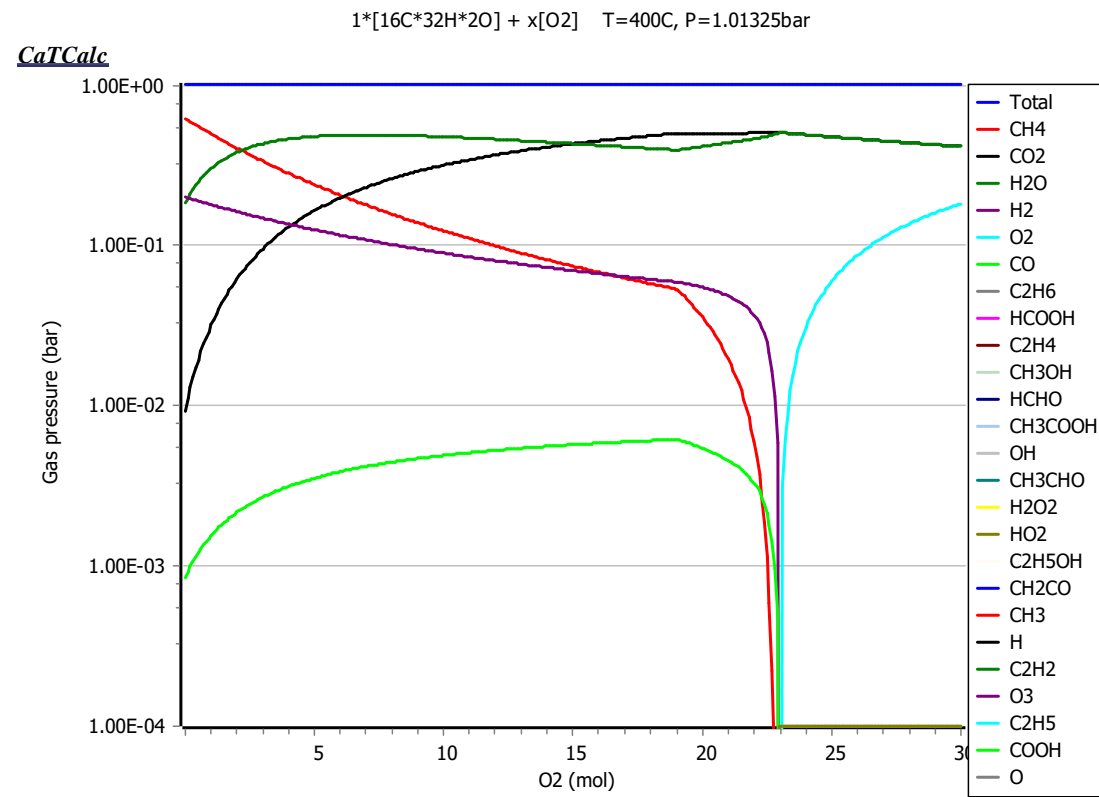


図6-4 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率
 温度400°C、酸素量23モル以上のガス相では、
 H2O, CO2, O2 が主な構成となる。

酸素量20モルでは
 H2O, CO2, CH4, H2, CO が主な構成となる。
 0.411, 0.495, 0.035, 0.054, 0.005

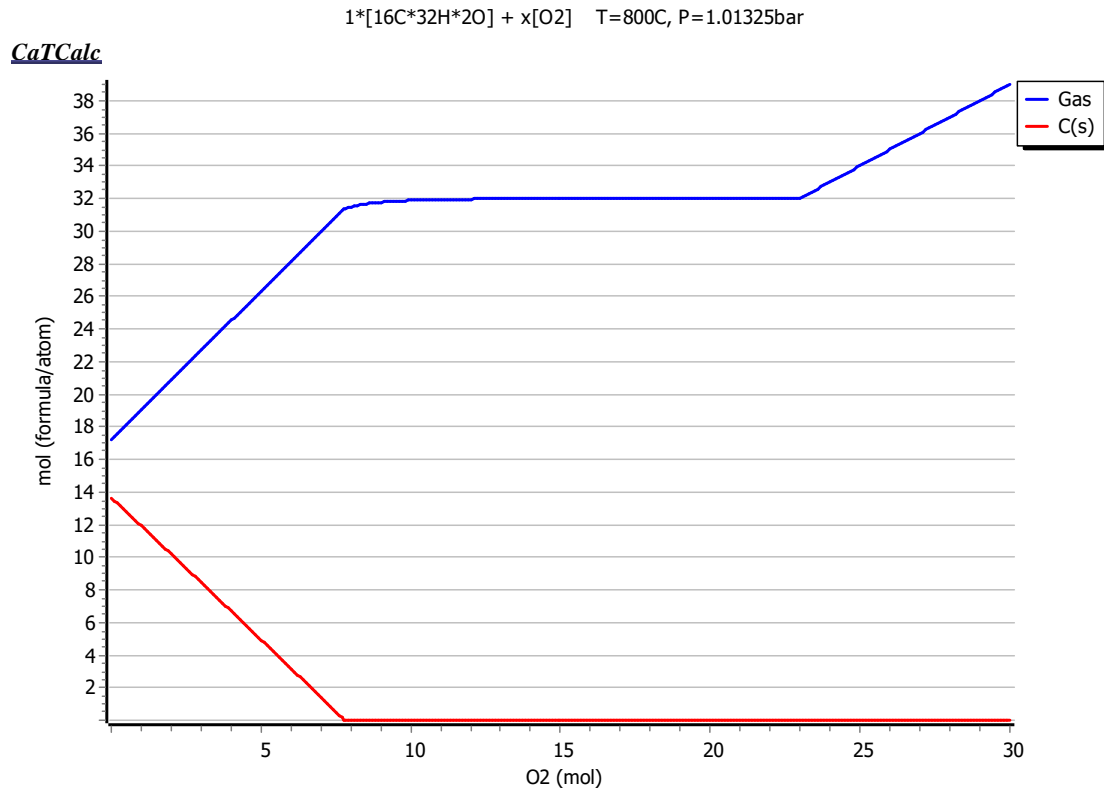


図6-5 酸素量を変化させた時の平衡相
 温度800°Cでは
 固体の炭素 C(s) は、酸素量 7.8 モルまで存在する。

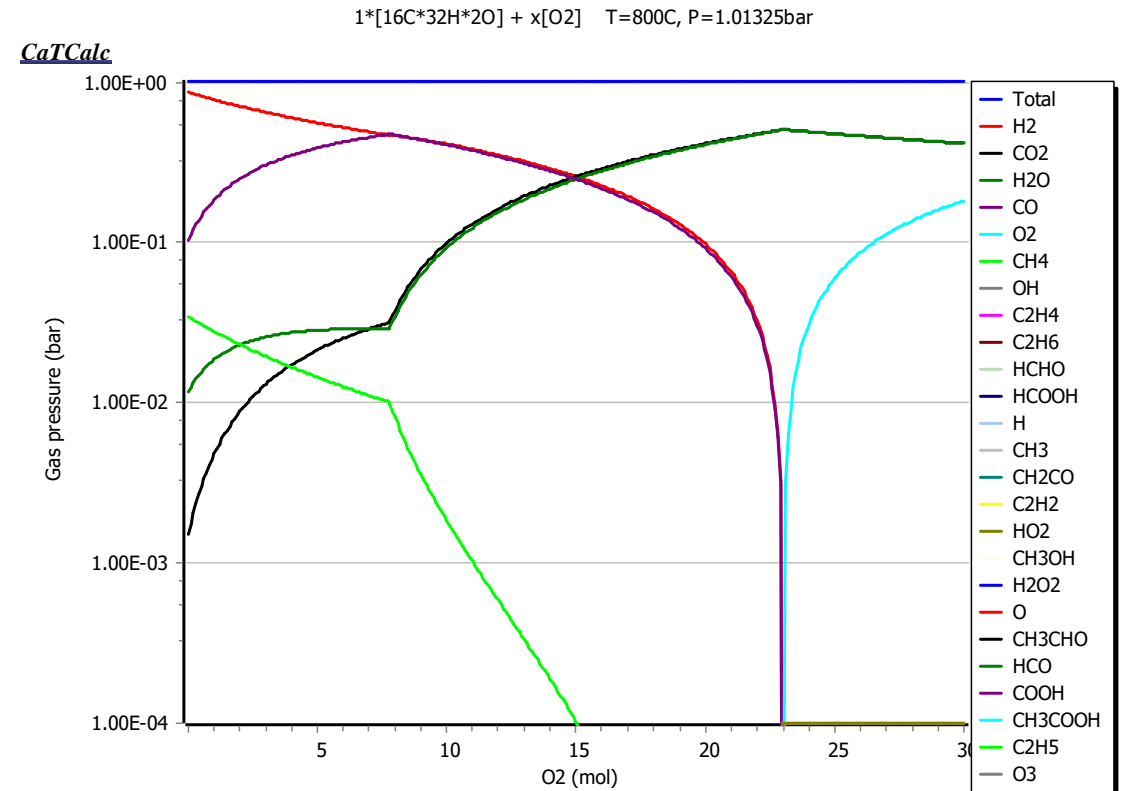


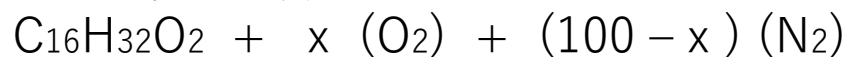
図6-6 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率
 温度800°C、酸素量23モル以上のガス相では、
 H2O, CO2, O2 が主な構成となる。

酸素量20モルでは
 H2O, CO2, H2, CO が主な構成となる。
 0.403, 0.409, 0.097, 0.091

6 - 2 窒素ガスを含む系

パルミチン酸

1 モル当たりの反応



計算してみよう： 固相の炭素を計算対象に入れる。 これは固体の炭素である。
 ガスの入力量を100 モルとする。
 酸素ガス量を 0 から 30 モルまで変化させる。 変数 x と置く。
 窒素ガス量を 100 から 70 モルまで変化させる。 $(100 - x)$
 入力原料を $\text{C}_{16}\text{H}_{32}\text{O}_2$ (Liq) と酸素ガスと窒素ガスとする。
 系の圧力を 1 圧とし、温度は70°C固定とする。 これは平衡計算。

Feed/Activity Conditions				Default Unit: mol (formula)	
Phase	Species	Unit	Value		
Gas	N2	mol	100-x	x 0 30 0.1	
Gas	O2	mol	x		
	C16H32O2LL	mol	1		

計算結果を図6-7 と図6-8 に示す。
 温度400 °Cの結果を図6-9 と図6-10 に示す。
 温度800 °Cの結果を図6-11 と図6-12 に示す。

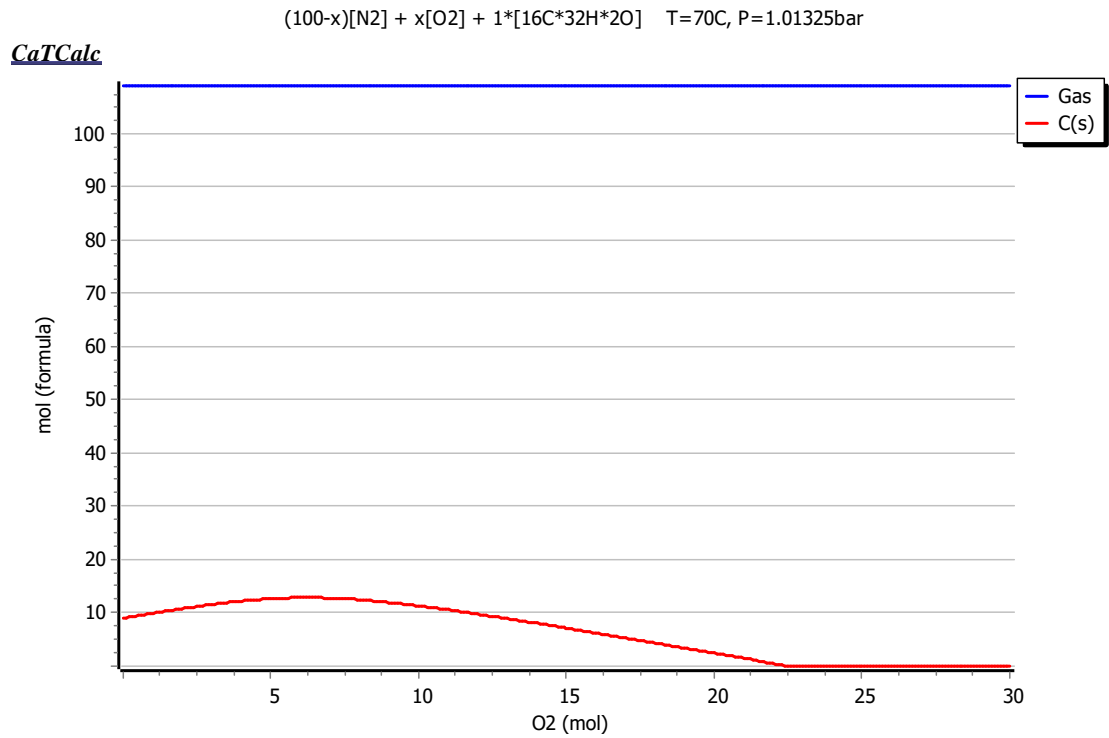


図6-7 酸素量を変化させた時の平衡相
 温度70°Cでは
 固体の炭素 C(s) は、酸素量22.5 モルまで存在する。

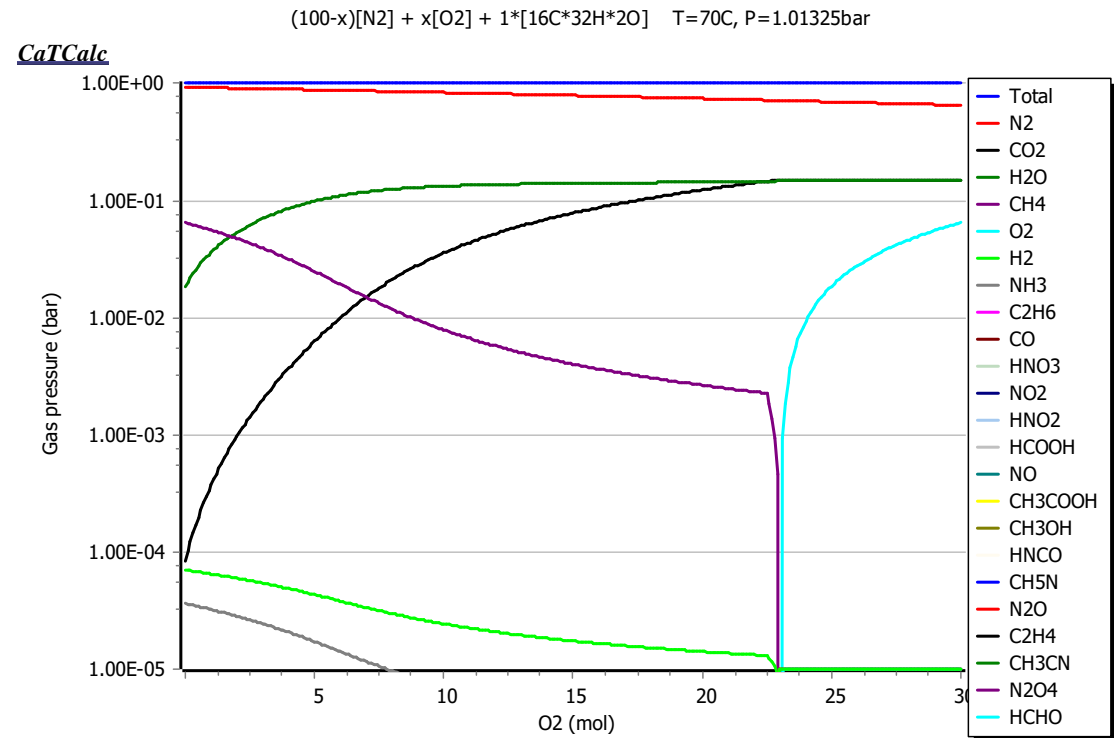


図6-8 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率
 温度70°C、酸素量23モル以上のガス相では、
 N2, H2O, CO2, O2 が主な構成となる。

酸素量20モルでは
 N2, H2O, CO2, CH4 が主な構成となる。
 0.743, 0.142, 0.122, 0.002

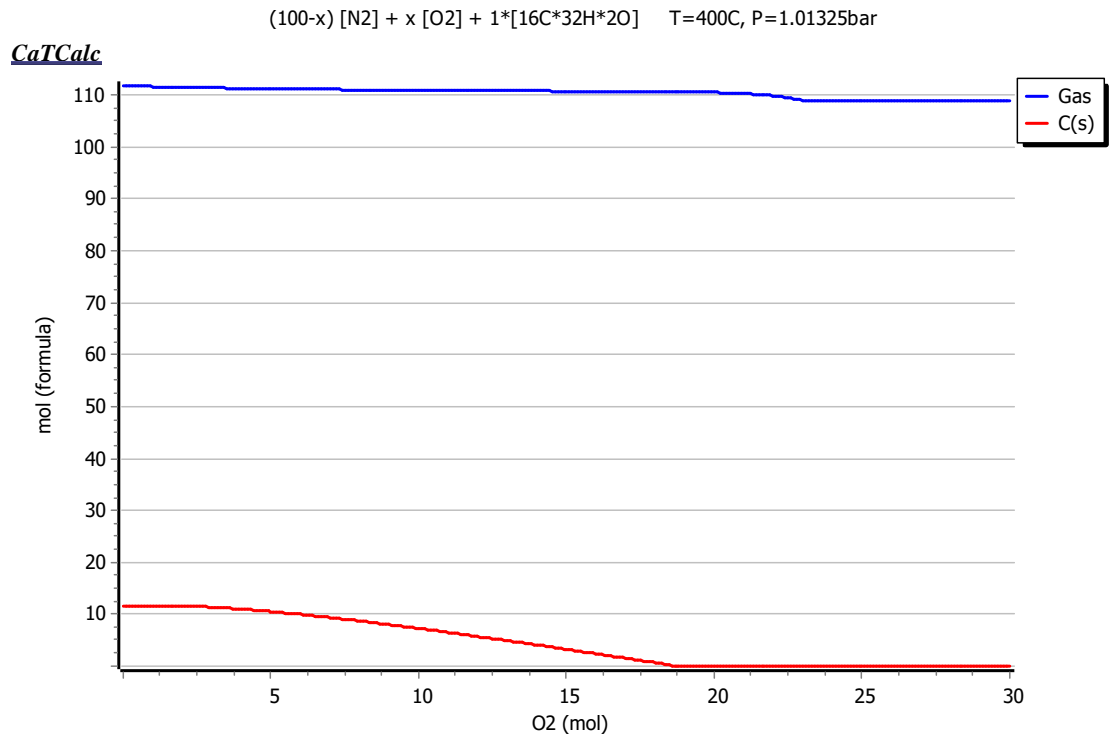


図6-9 酸素量を変化させた時の平衡相
 温度400°Cでは
 固体の炭素 C(s) は、酸素量18.7 モルまで存在する。

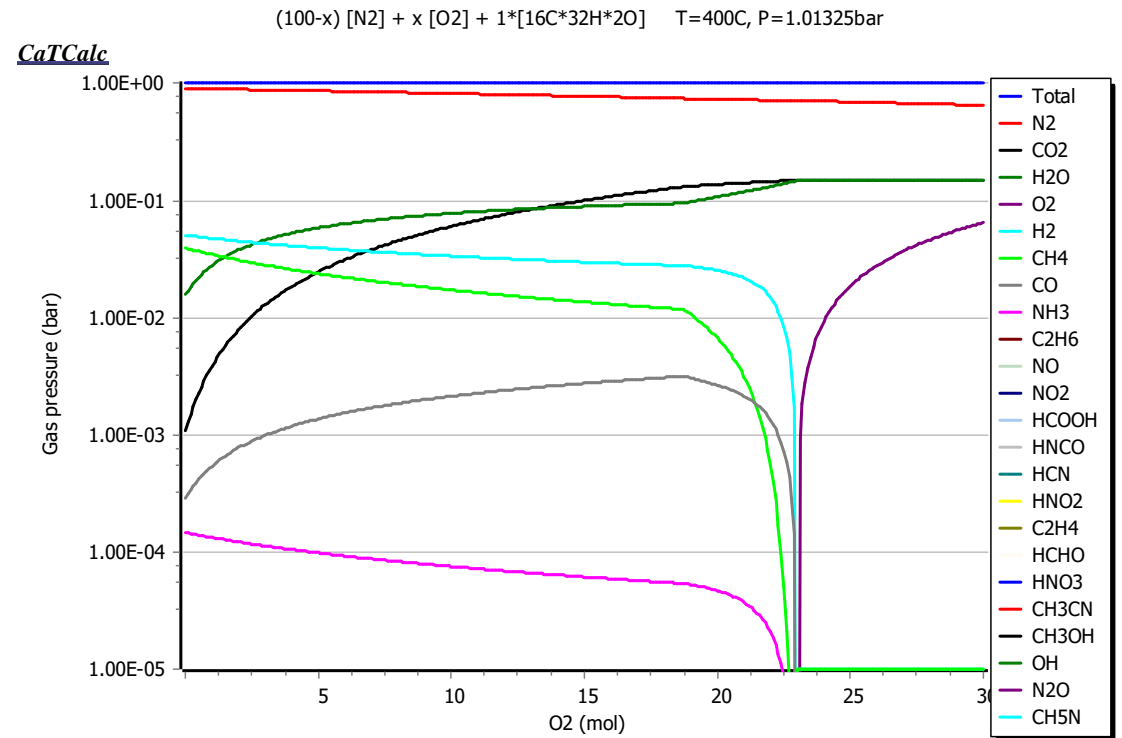


図6-10 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率
 温度400°C、酸素量23モル以上のガス相では、
 N2, H2O, CO2, O2 が主な構成となる。

酸素量20モルでは
 N2, H2O, CO2, H2, CH4, CO が主な構成となる。
 0.724, 0.106, 0.136, 0.025, 0.006, 0.002

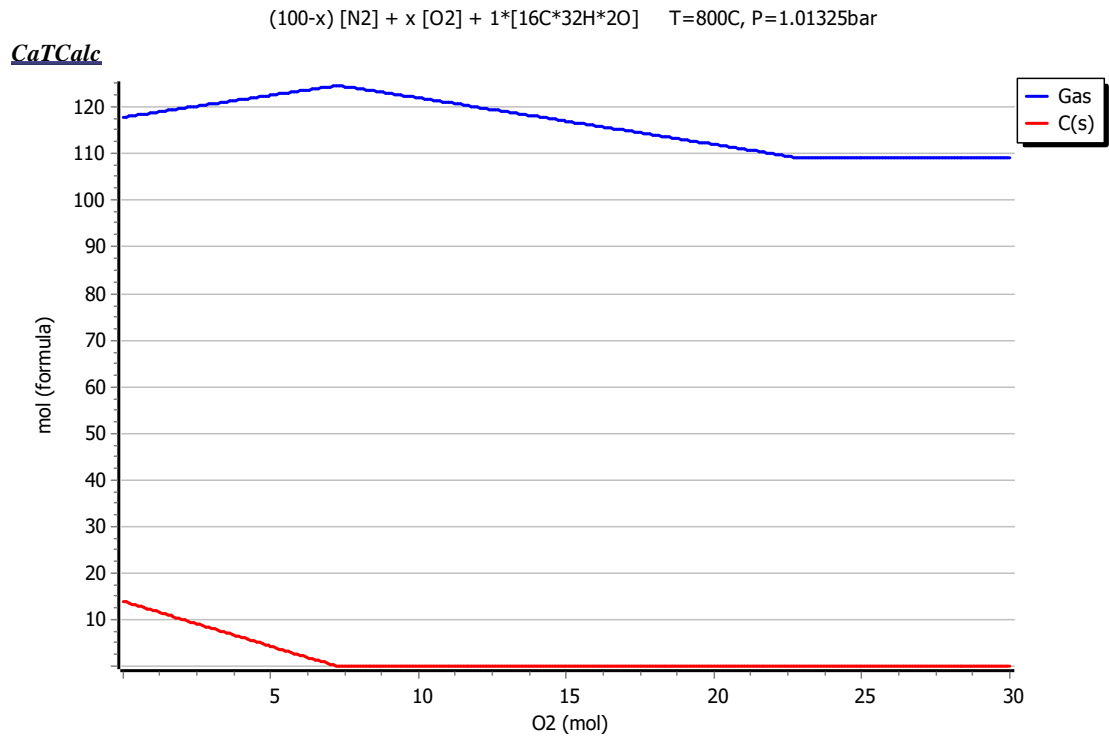


図6-11 酸素量を変化させた時の平衡相
 温度800°Cでは
 固体の炭素 C(s) は、酸素量 7.2 モルまで存在する。

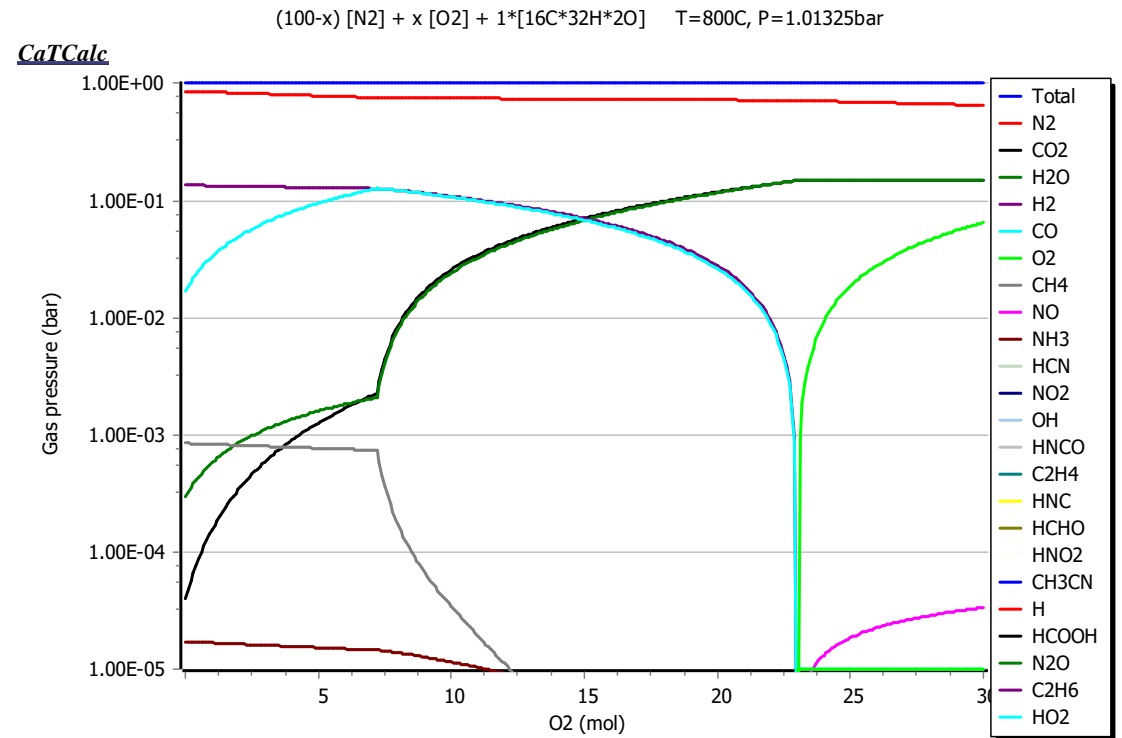


図6-12 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率
 温度800°C、酸素量23モル以上のガス相では、
 N2, H2O, CO2, O2 が主な構成となる。

酸素量20モルでは
 N2, H2O, CO2, H2, CO が主な構成となる。
 0.714, 0.115 0.117, 0.028, 0.026

まとめ

ろうそくの燃焼を、ソフトウェアを用いて、計算することが出来た。

5円玉の1枚の重さ（約4グラム）よりも軽い

約3グラムのろうそくを入力原料にした場合、燃焼温度は1830℃になる。

256グラムのろうそくを入力原料にした場合でも、燃焼温度は1830℃になる。（第3章を参照）

酸素が適量に供給されれば完全燃焼になる。

酸素が適量に供給されない場合を考え、

酸素量を0から30モルに変化させる計算を行い、酸素量が少ない時には、固体の炭素が安定になる。すす（煤）が生じる。

ガス相中のCOを「すす」という情報もあるが、これは未確認。

株式会社材料設計技術研究所