

## ろうそくの科学 熱力学編 その2

「ロウソクの科学」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 すす（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：

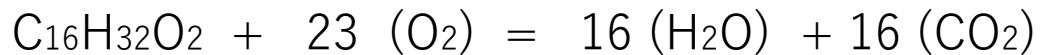
「ロウソクの科学」、M.Faraday/著、竹内敬人/訳、岩波書店 (2010).

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  $T (\text{C}) = 70^\circ\text{C}$  と指定した。

計算結果は、温度  $1830^\circ\text{C}$  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  $\text{H}_2\text{O}$  ガスのモル数は、 $1.406455*0.112126 = 0.1577$

生成物  $\text{CO}_2$  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。



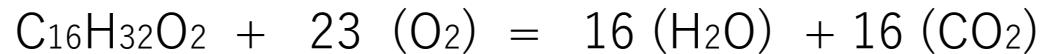
計算結果	
断熱燃焼温度	1830 °C
ガス相モル数	1.406455
ガス種のモル比率	
CO	0.001888
CO <sub>2</sub>	0.111873
H	0.000062
H <sub>2</sub>	0.000382
H <sub>2</sub> O	0.112126
N <sub>2</sub>	0.735982
NO	0.003744
O	0.000250
O <sub>2</sub>	0.031246
OH	0.002443

## 第6章 すす（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、すす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		
C16H32O2LL	$16\text{C}^*\text{32H}^*\text{2O}$	mol	1	X	0 30 0.1
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。

$1*[16C*32H*2O] +x [O_2]$  T=70C, P=1.01325bar

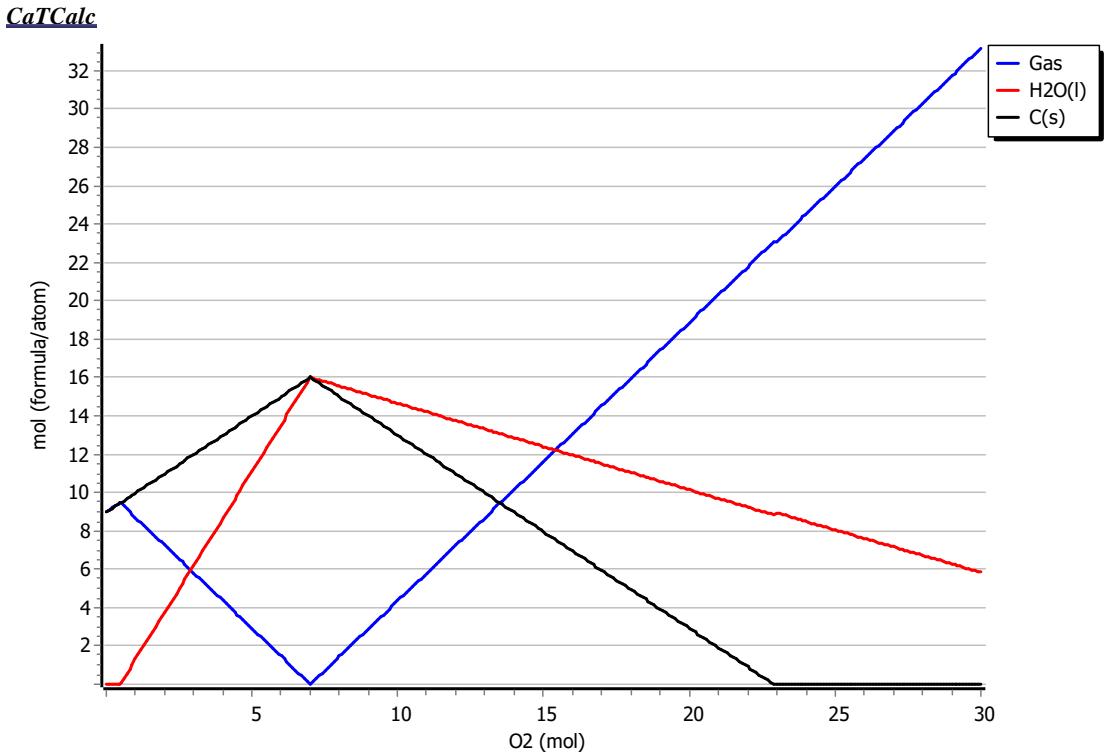


図6-1 酸素量を変化させた時の平衡相  
温度70°Cでは  
固体の炭素 C(s) は、酸素量22.9モルまで存在する。

酸素量7モルにおいては、丁度  
 $H_2O(Liq)$ が16モル、C(s)が16モルとなる。

$1*[16C*32H*2O] +x [O_2]$  T=70C, P=1.01325bar

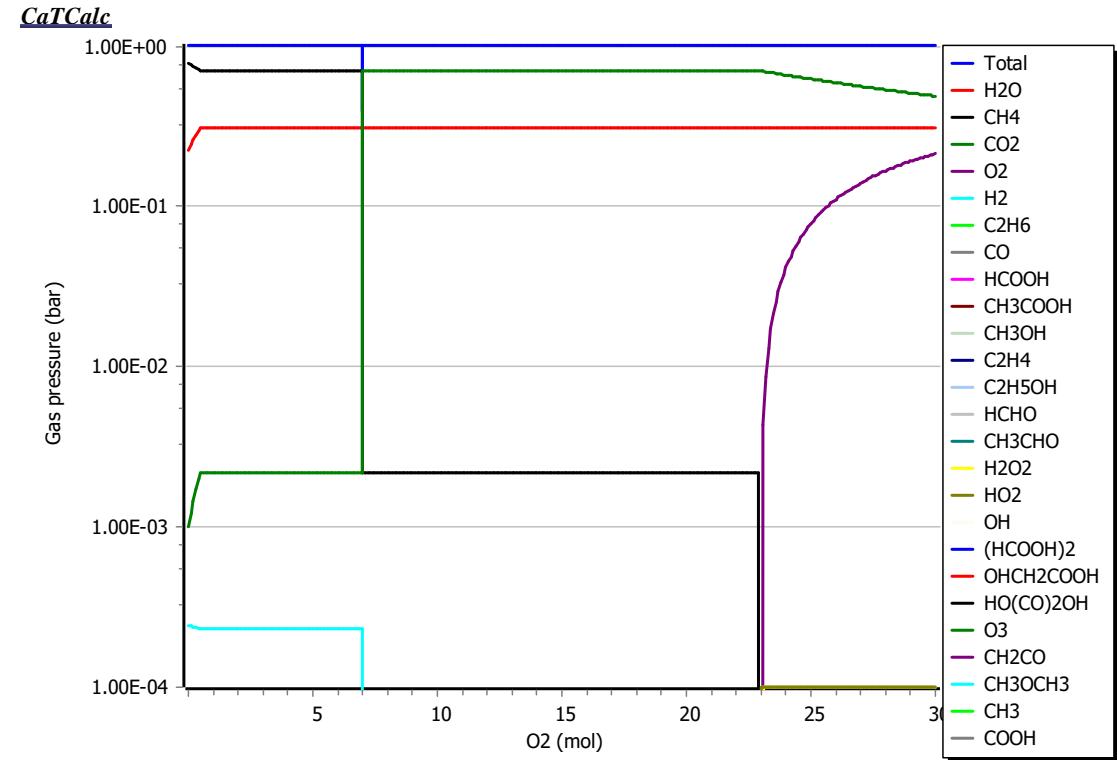


図6-2 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率  
温度70°C、酸素量23モル以上のガス相では、  
 $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $O_2$  が主な構成となる。

酸素量20モルでは  
 $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$  が主な構成となる。  
0.306, 0.691, 0.002

$1*[16C*32H*2O] + x[O_2]$  T=400C, P=1.01325bar

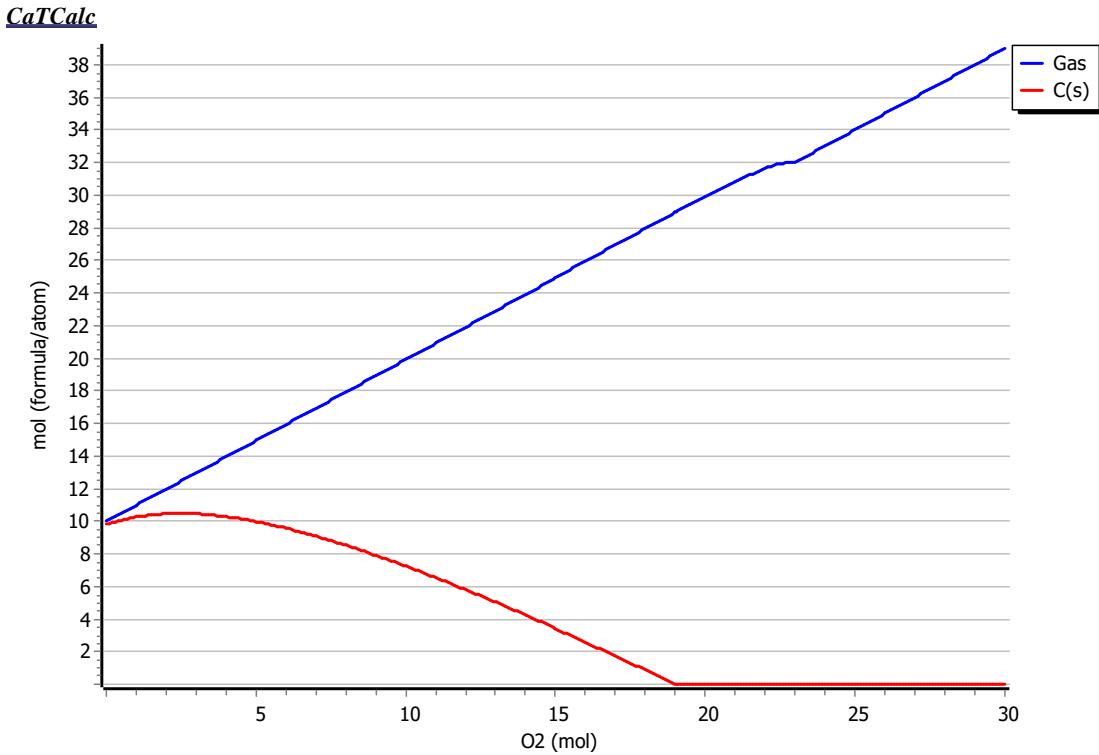


図6-3 酸素量を変化させた時の平衡相  
温度400°Cでは  
固体の炭素 C(s) は、酸素量19.0 モルまで存在する。

$1*[16C*32H*2O] + x[O_2]$  T=400C, P=1.01325bar

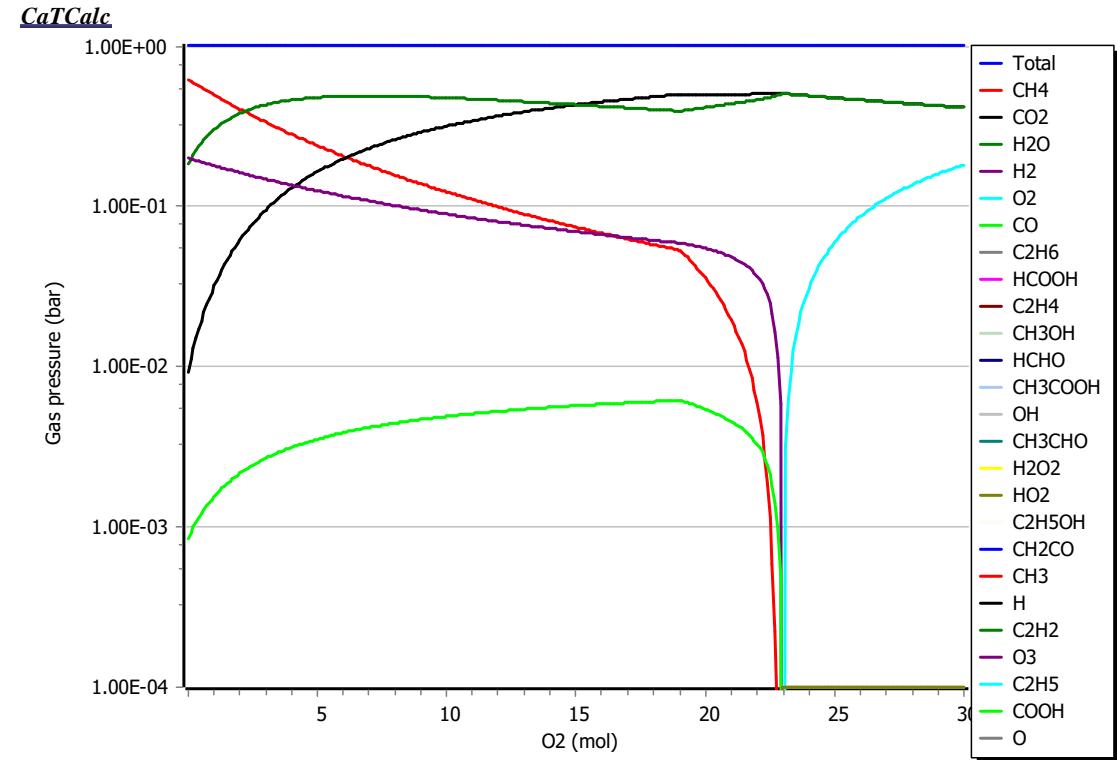


図6-4 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率  
温度400°C、酸素量23モル以上のガス相では、  
H2O, CO2, O2 が主な構成となる。

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

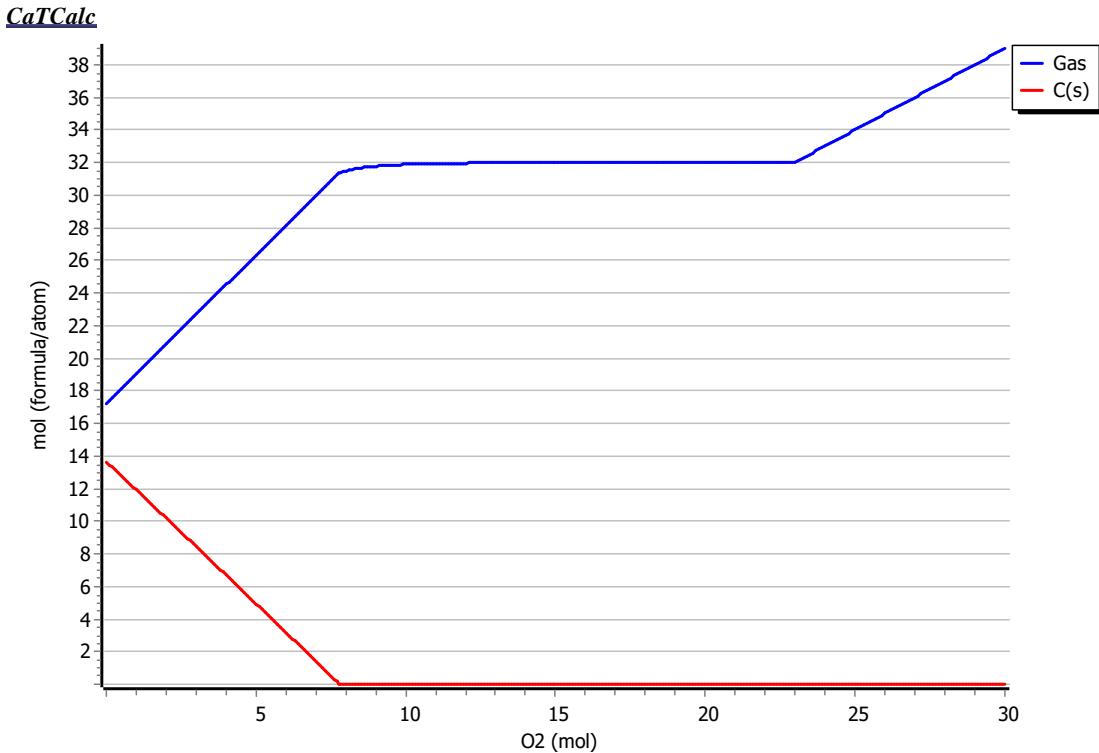


図6-5 酸素量を変化させた時の平衡相  
温度800°Cでは  
固体の炭素 C(s) は、酸素量 7.8 モルまで存在する。

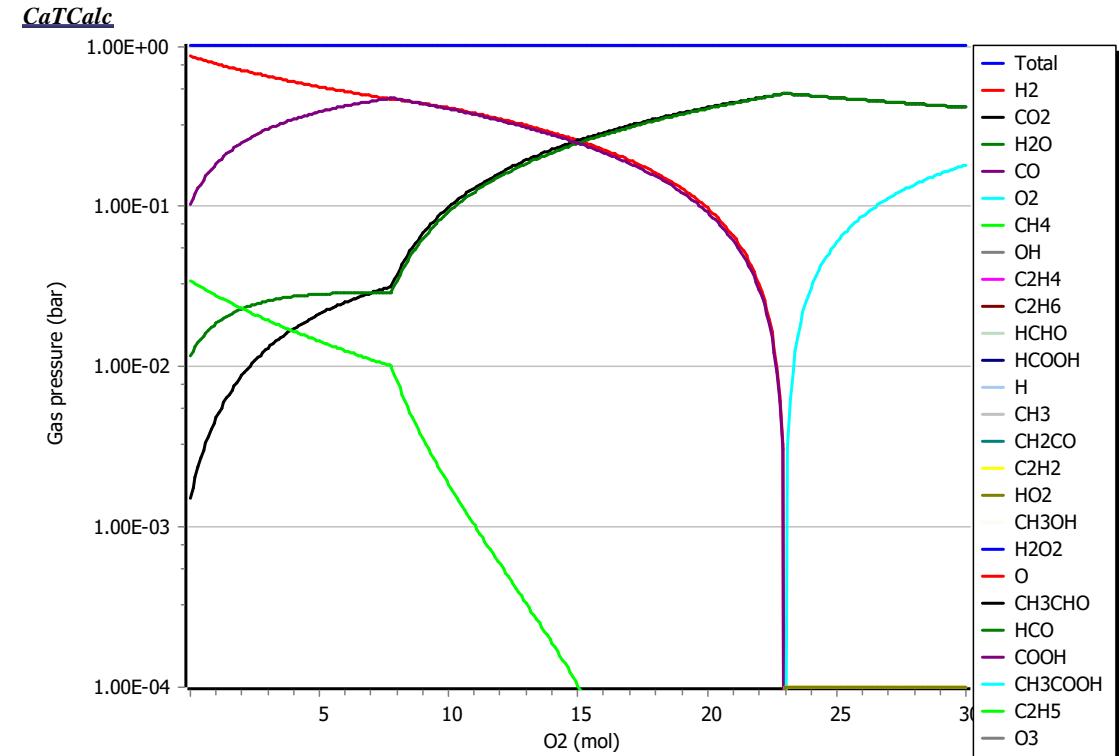
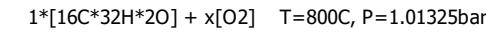


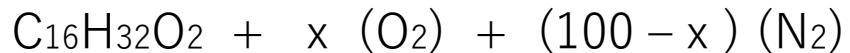
図6-6 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率  
温度800°C、酸素量23モル以上のガス相では、  
H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CO が主な構成となる。

酸素量20モルでは  
H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, 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	N <sub>2</sub>	mol	100-x	X 0 30 0.1
Gas	O <sub>2</sub>	mol	x	
C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub> LL	16C*32H*2O	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。

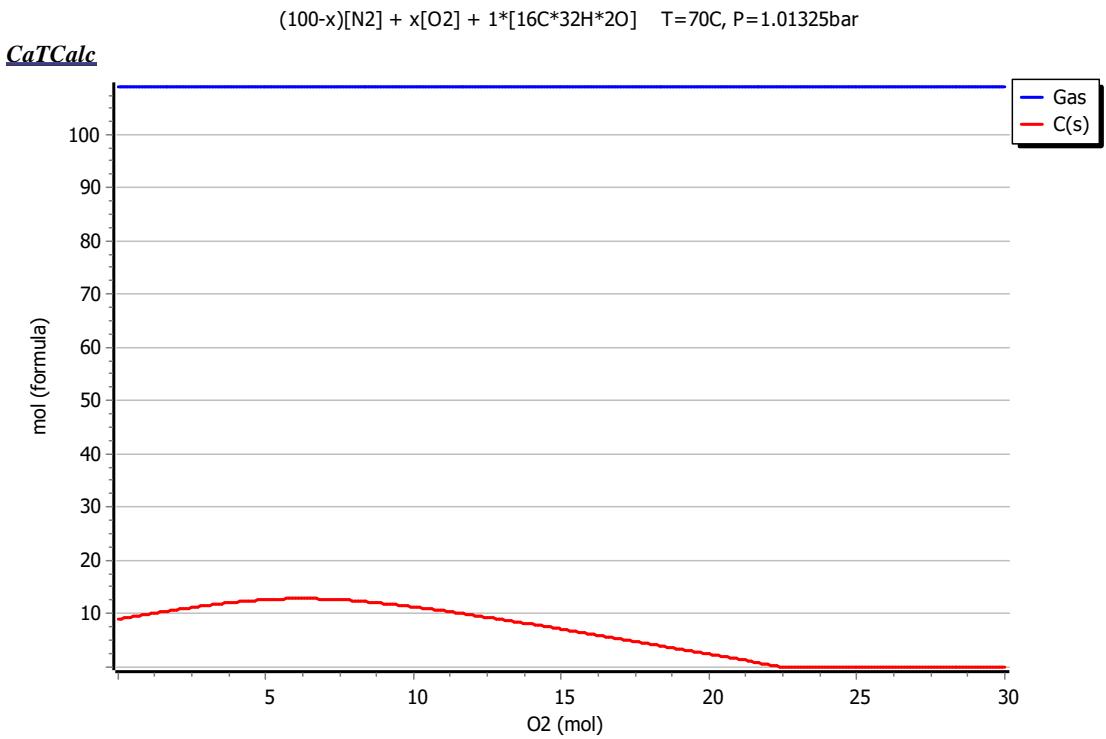


図6-7 酸素量を変化させた時の平衡相  
温度70°Cでは  
固体の炭素 C(s) は、酸素量22.5 モルまで存在する。

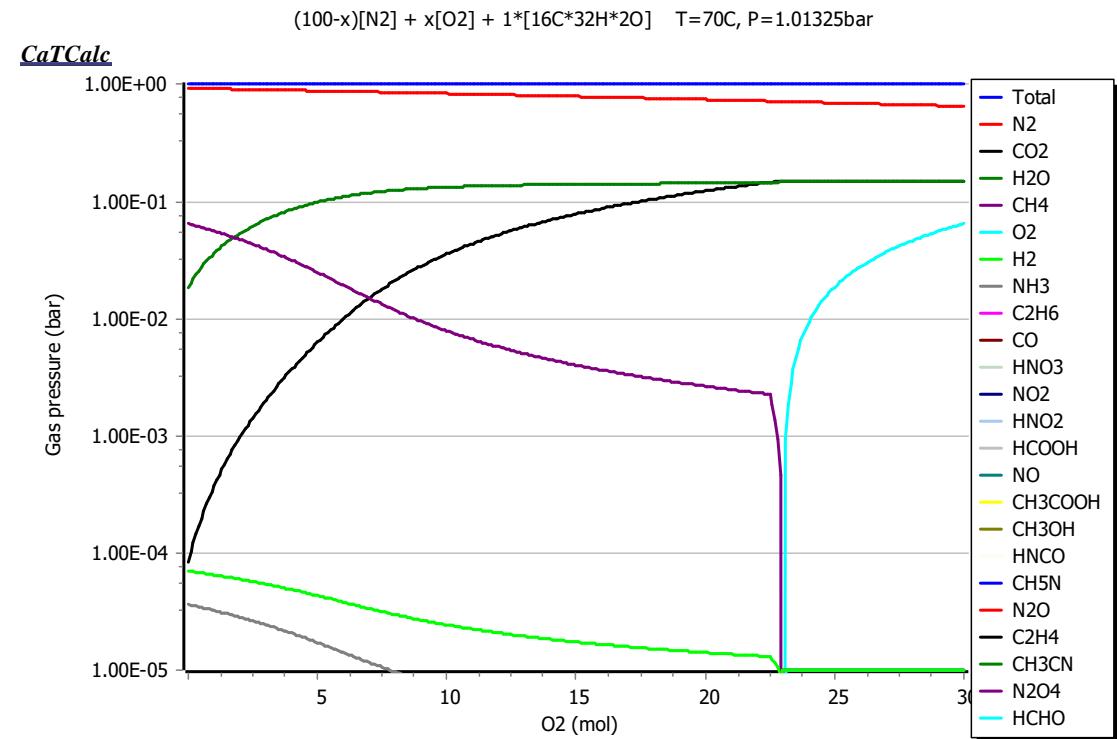


図6-8 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率  
温度70°C、酸素量23モル以上のガス相では、  
N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> が主な構成となる。

酸素量20モルでは  
N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> が主な構成となる。  
0.743, 0.142, 0.122, 0.002

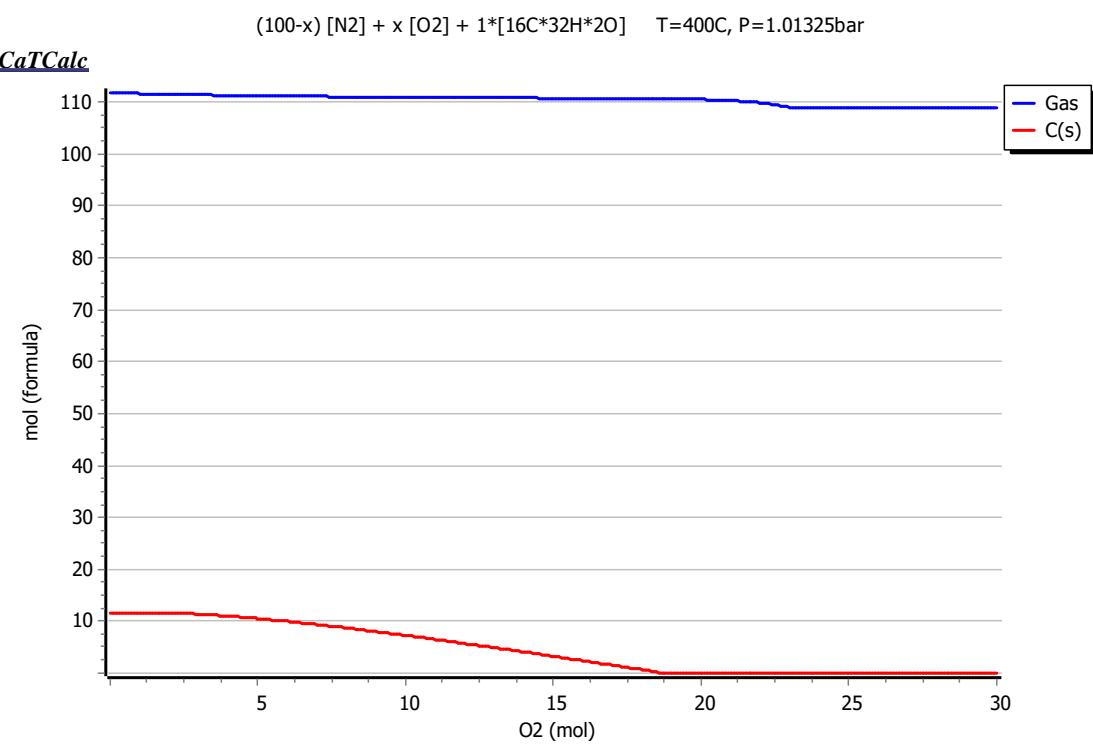


図6-9 酸素量を変化させた時の平衡相  
温度400°Cでは  
固体の炭素 C(s) は、酸素量18.7 モルまで存在する。

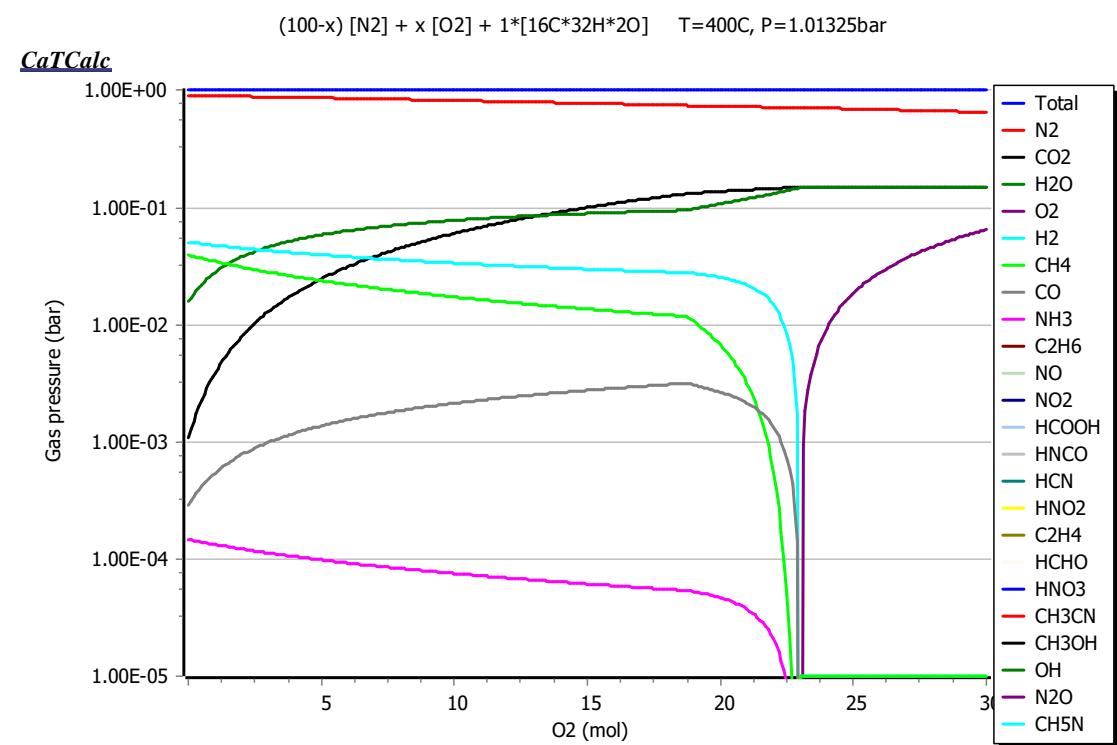


図6-10 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率  
温度400°C、酸素量23モル以上のガス相では、  
N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> が主な構成となる。

酸素量20モルでは  
N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO が主な構成となる。  
0.724, 0.106, 0.136, 0.025, 0.006, 0.002

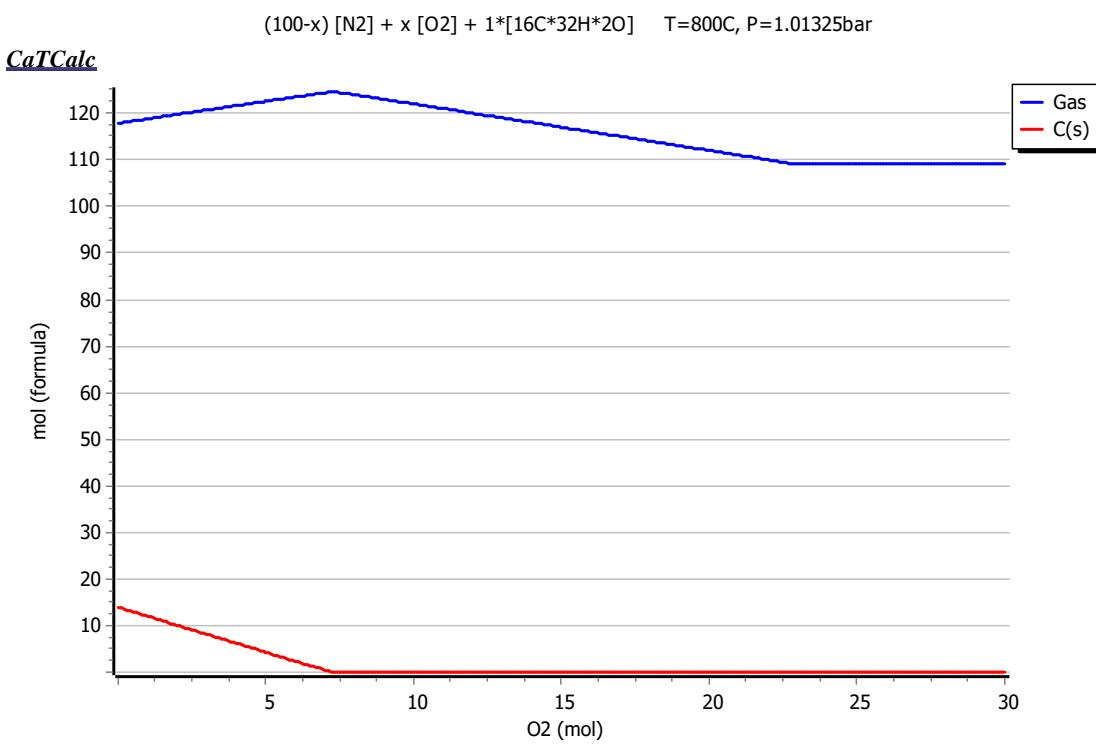


図6-11 酸素量を変化させた時の平衡相  
温度800°Cでは  
固体の炭素 C(s) は、酸素量 7.2 モルまで存在する。

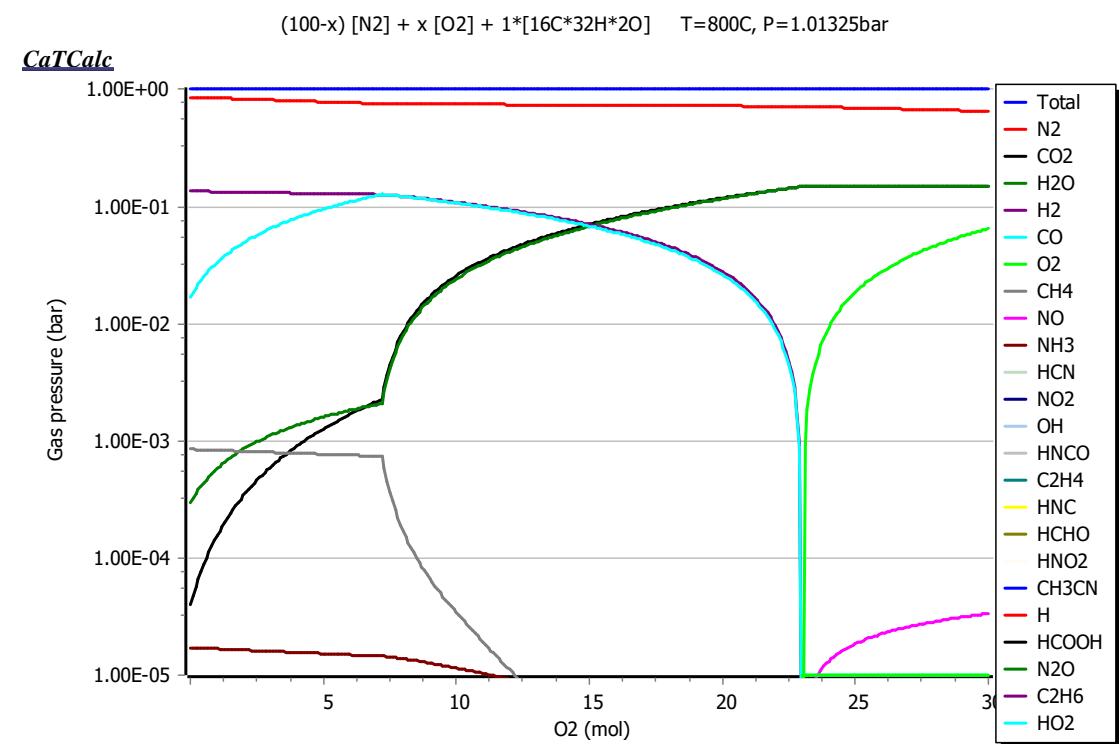


図6-12 酸素量を変化させた時のガス相中の構成比率  
温度800°C、酸素量23モル以上のガス相では、  
N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> が主な構成となる。

酸素量20モルでは  
N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, 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°C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°C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