

表 3.1: 標準生成エンタルピー ($\Delta_f H^\circ_{298}$)、炭素あたりの燃焼
エンタルピー ($\Delta_c H^\circ_{298} / n_C$)、当量空気混合気の断熱火炎温度 (T_b)

	構造	化学式	$\Delta_f H^\circ_{298}$ [kJ mol ⁻¹]	$\Delta_c H^\circ_{298} / n_C^*$ [kJ mol ⁻¹]	T_b [K]
		CO ₂	-393.5		
		H ₂ O(g)	-241.8		
ブタン	<chem>CCCC</chem>	C ₄ H ₁₀	-125.7	-664	2268
イソブタン	<chem>CC(C)C</chem>	C ₄ H ₁₀	-134.2	-662	2264
ペンタン	<chem>CCCCC</chem>	C ₅ H ₁₂	-146.8	-654	
イソペンタン	<chem>CC(C)CC</chem>	C ₅ H ₁₂	-152.9	-653	2268
シクロペンタン	<chem>C1CCCC1</chem>	C ₅ H ₁₀	-76.4	-620	2291
シクロヘキサン	<chem>C1CCCCC1</chem>	C ₆ H ₁₂	-123.1	-615	
1-ブテン	<chem>CCC=C</chem>	C ₄ H ₈	-0.5	-635	2320
2-ブテン	<chem>CC=CC</chem>	C ₄ H ₈	-11.0	-633	2315
イソブテン	<chem>CC(C)=C</chem>	C ₄ H ₈	-17.9	-631	2312
1-ペンテン	<chem>CCCC=C</chem>	C ₅ H ₁₀	-21.5	-631	2312
メタノール	<chem>CO</chem>	CH ₄ O	-201.1	-676	2220
エタノール	<chem>CCO</chem>	C ₂ H ₆ O	-235.3	-639	
1-プロパノール	<chem>CCC=O</chem>	C ₃ H ₈ O	-255.1	-631	2250
ジメチルエーテル	<chem>CCOC</chem>	C ₂ H ₆ O	-184.1	-664	
ベンゼン	<chem>c1ccccc1</chem>	C ₆ H ₆	82.8	-528	
トルエン	<chem>Cc1ccccc1</chem>	C ₇ H ₈	50.0	-539	2328

* n_C = 炭素原子数

表 3.2: プロピレン*-空気当量混合気の
定圧断熱 (hp) 平衡計算の入力 (NASA-CEA2)

```

problem hp p(atm)=1 phi, eq. ratio=1
react
fuel= C3H6, propylene wt%=100 t(k)= 298.15
oxid= Air wt%=100 t(k)= 298.15
end

```

* 燃料の名称はファイル thermo.inp に登録されている
ものでなければならない。

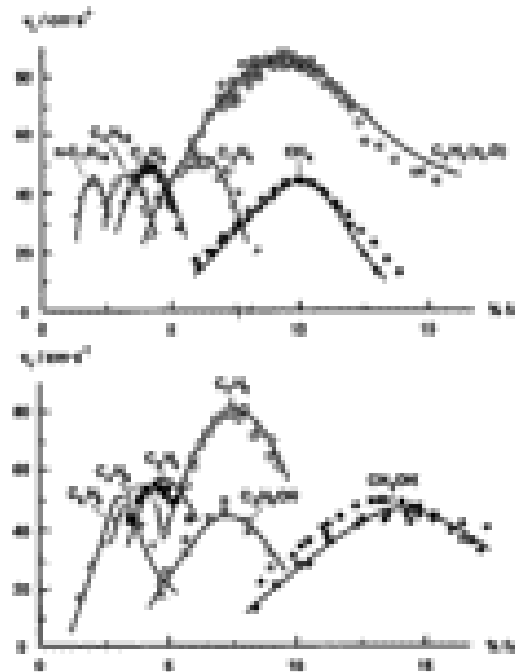


図 3.1: 燃料-空気混合気中の火炎伝播速度

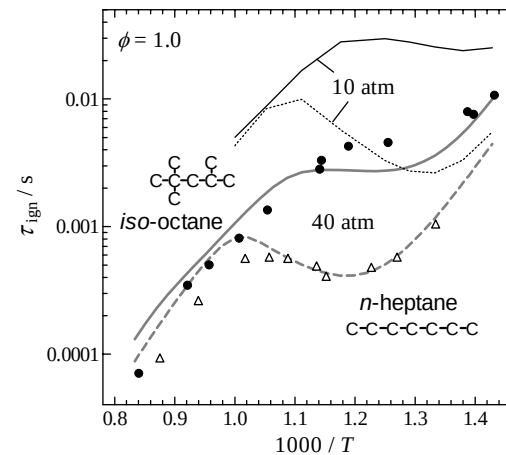


図 3.2: 燃料-空気当量混合気の着火遅れ

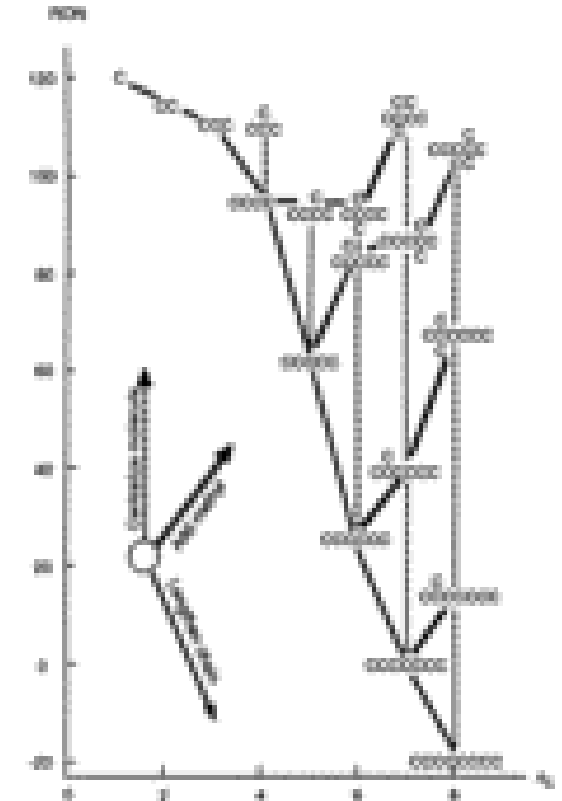


図 3.3: オクタン価と燃料分子構造

表 3.3: 連鎖分岐率の推算パラメータ (800 K)

$k(\text{H-prim})$	3	OH による水素引抜の速度
$k(\text{H-sec})$	4	比 [1(prim), 2(sec), 3(tert)級
$k(\text{H-tert})$	6	炭素 1 つあたり]
$k(\text{El-pOO})$	0.2	RO ₂ の HO ₂ 脱離速度比
$k(\text{El-sOO})$	0.3	[水素を持つ隣接炭素 1 つあ
$k(\text{El-tOO})$	0.8	たり] pOO:1 級 RO ₂ , sOO:2
		級 RO ₂ , tOO:3 級 RO ₂
$k(\text{Iso-prim})$	1	RO ₂ の異性化速度比 [2 つ
$k(\text{Iso-sec})$	3	隣の 1(prim), 2(sec), 3(tert)
$k(\text{Iso-tert})$	6	級炭素 1 つあたり]