Vypočtěte teplotu plamene směsi, která obsahuje 5.4 mol.% CH_4, 24.7 mol.% O_2 a 69.9 mol.% N_2. Při hoření vzniká vodní pára a oxid uhličitý. Vstupující směs má teplotu 25 °C, tlak je 1 bar, plyny se chovají ideálně. Použijte data (nejlépe Shomateovu rovnici) podle databáze NIST.

Rady:

1. Je vhodné použít integrovanou formu Shomateovy rovnice. Základní varianta vhodná pro postup blízký postupu z přednášek a cvičení je

$$\begin{aligned} H_\mathrm{m}(T) - H_\mathrm{m}(298.15\,\mathrm{K}) &= \int_{298.15\,\mathrm{K}}^{T} C_{p\mathrm{m}}(t)\,\mathrm{d}T \\ &= (At + Bt^2/2 + Ct^3/3 + Dt^4/4 - E/t + F - H)\,\mathrm{kJ\,mol^{-1}}, \\ &\quad \text{kde } t = \frac{T}{1000\,\mathrm{K}}. \end{aligned}$$

   Tím dostaneme přepočet entalpie látky z teploty 25 °C na jinou teplotu. V entalpické bilanci potřebujeme reakční entalpii za teploty 25 °C; v ní použijeme slučovací entalpii vodní páry (ne kapalné vody).

2. Protože H ve výše uvedené rovnici není nic jiného než slučovací entalpie za teploty 25 °C, vynecháním tohoto členu dostaneme přímo (slučovací) entalpii dané látky za dané teploty vzhledem k prvkům za teploty 25 °C:

$$H_\mathrm{m}(T) = (At + Bt^2/2 + Ct^3/3 + Dt^4/4 - E/t + F)\,\mathrm{kJ\,mol^{-1}}.$$

   Nemusíme tedy již přičítat reakční entalpii za teploty 25 °C (a starat se o to, v jakém skupenství je vznikající voda), ale nesmíme zapomenout na slučovací entalpie vstupujících látek za teploty 25 °C: pro dusík a kyslík jsou 0, ale pro methan to nula není.

3. Šikovné je použít excel, protože je do něj možno přímo zkopírovat tabulku s konstantami. Pokud ale používáte českou verzi excelu, musíte použít nějakou metodu pro převod čárek a teček v excelu.

4. Abyste nemuseli zkoušet několik verzí konstant Shomateovy rovnice pro různé rozsahy teplot, předpokládejte, že teplota plamene je v rozsahu 1300–1700 K (hodnota ±50 K mimo tento rozsah nevadí). Shomateovu rovnici pro reaktanty nepotřebujete, protože teplota je 25 °C (v druhé metodě ale potřebujete slučovací $H_\mathrm{m}(25\,°\mathrm{C})$ pro methan).