

to L = -42.5

to bar = -42.5

Vypočtete teplotu plamene směsi, která obsahuje

xmi=4.6+rand(14)/10 = 5.6 mol.% CH₄,

xoi=21+rand(55)/10 = 25.6 mol.% O₂ a

xni=100-xmi-xoi = 68.8 mol.% N₂. 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

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

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 kapalně 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:

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

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.

Am=-0.703029 = -0.703

Bm=108.4773 = 108.5

Cm=-42.52157 = -42.52

Dm=5.862788 = 5.863

Em=0.678565 = 0.6786

Fm=-76.84376 = -76.84

Gm=158.7163 = 158.7
Hm=-74.87310 = -74.87

Ao=30.03235 = 30.03
Bo=8.772972 = 8.773
Co=-3.988133 = -3.988
Do=0.788313 = 0.7883
Eo=-0.741599 = -0.7416
Fo=-11.32468 = -11.32
Go=236.1663 = 236.2
Ho=0.0 = 0

An=19.50583 = 19.51
Bn=19.88705 = 19.89
Cn=-8.598535 = -8.599
Dn=1.369784 = 1.37
En=0.527601 = 0.5276
Fn=-4.935202 = -4.935
Gn=212.3900 = 212.4
Hn=0.0 = 0

Aw=30.09200 = 30.09
Bw=6.832514 = 6.833
Cw=6.793435 = 6.793
Dw=-2.534480 = -2.534
Ew=0.082139 = 0.08214
Fw=-250.8810 = -250.9
Gw=223.3967 = 223.4
Hw=-241.8264 = -241.8

Ac=58.16639 = 58.17
Bc=2.720074 = 2.72
Cc=-0.492289 = -0.4923
Dc=0.038844 = 0.03884
Ec=-6.447293 = -6.447
Fc=-425.9186 = -425.9
Gc=263.6125 = 263.6
Hc=-393.5224 = -393.5

def Hmt=Am*t + Bm*t**2/2 + Cm*t**3/3 + Dm*t**4/4 - Em/t + Fm = (defined)
def Hot=Ao*t + Bo*t**2/2 + Co*t**3/3 + Do*t**4/4 - Eo/t + Fo = (defined)
def Hnt=An*t + Bn*t**2/2 + Cn*t**3/3 + Dn*t**4/4 - En/t + Fn = (defined)
def Hwt=Aw*t + Bw*t**2/2 + Cw*t**3/3 + Dw*t**4/4 - Ew/t + Fw = (defined)
def Hct=Ac*t + Bc*t**2/2 + Cc*t**3/3 + Dc*t**4/4 - Ec/t + Fc = (defined)

xci=0 = 0
xwi=0 = 0
xmf=0 = 0
xcf=xmi = 5.6

```
xnf=xni = 68.8  
xwf=2*xmi = 11.2  
xof=xoi-2*xmi = 14.4
```

```
t=298.15/1000 = 0.2981  
Hi=Hm*xmi = -419.3
```

```
solve t=1.5 Hmt*xmf+Hot*xof+Hnt*xnf+Hct*xcf+Hwt*xwf-Hi = 1.6  
t*1000[K] = 1600 [K]
```