

# Berekening adiabatische vlamtemperatuur H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> niet dissociatief

Jasper Spaans jasper@spaans.ds9a.nl

Revision: 1.6 -- Date: 2001/12/09 00:07:17

## Dit is niet de bedoelde uitwerking. Copy-pasten doe je maar ergens anders

De chemische reactie die hier van belang is, is  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ ; de reactie-enthalpie volgens [*Handbook of Chemistry and Physics*, pp 5-4 - 5-47] is dan -241.8 kJ/mol H<sub>2</sub>O(g)<sup>1</sup>.

Bij de gegeven massamengverhouding (5 O<sub>2</sub> : 1 H<sub>2</sub>) is de molaire verhouding (5 / 32.000) : (1 / 2.016) = 1 : 3.17. Met de aanname dat deze reactie volledig verloopt is er dus een overmaat aan waterstof van 1.17 mol waterstof per mol zuurstof, oftewel, het reactieproduct is als volgt samengesteld:

Compound	Molar fraction	
	before	after
O <sub>2</sub>	1.00	0.00
H <sub>2</sub>	3.17	1.17
H <sub>2</sub> O	0.00	2.00

Wat enthalpie betreft zijn nu de volgende stappen te onderscheiden:

Opwarmen 3.17 mol/2mol H <sub>2</sub> van 20 °C naar 25 °C	(3.17/2)*5*28.8 J/mol K	0.228 kJ/mol H <sub>2</sub> O
Opwarmen 1 mol/2mol O <sub>2</sub> 20 °C naar 25 °C	1/2*5*29.4 J/mol K	0.074 kJ/mol H <sub>2</sub> O
Vormen H <sub>2</sub> O (g)	-241.8 kJ/mol	-241.8 kJ/mol H <sub>2</sub> O
Energie die resteert voor verwarming	$H^0 - H_{298.15}^0$	241.5 kJ/mol H <sub>2</sub> O

Deze 241.5 kJ/mol volgt uit het optellen van de verschillende enthalpiën hierboven.

Op <http://webbook.nist.gov/> kunnen voor H<sub>2</sub> en H<sub>2</sub>O de volgende parameters voor de enthalpie gevonden worden (als gebruik gemaakt wordt van de Shomate-vergelijking):

$$H^0 - H_{298.15}^0 = A * t + B * t^2 / 2 + C * t^3 / 3 + D * t^4 / 4 + E / t + F - \Delta_f H_{f,298}^0$$

(waarin t = temperature(K)/1000)

Voor H<sub>2</sub>O (g), boven 1700K: A = 41.96426, B = 8.622053, C = -1.499780, D = 0.098119, E = -11.15764, F = -272.1797,  $\Delta_f H_{f,298}^0 = -241.82$ ; voor waterstof (g), boven 1500K: A = 34.14340, B = 0.503927, C = 0.372036, D = -0.038599, E = -8.074761, F = -21.2880,  $\Delta_f H_{f,298}^0 = -0$

Het op te warmen mengsel heeft de hierboven gegeven mengverhouding, en om nu een energieuitdrukking te krijgen die voor het hele mengsel geldt, kunnen deze parameters met de verhoudingen 1.17 en 2.00 opgeteld worden, dus,  $A_{mengsel} = 1.17A_{\text{H}_2} + 2.00A_{\text{H}_2\text{O}} = 123.876298$ . Dit voor de andere parameters uitvoeren levert dan de volgende tabel op voor het complete mengsel:

<sup>1</sup>Omdat ik aangenomen heb dat de temperatuur wel boven de 100°C zal liggen, heb ik hier direct de vormingsenthalpie voor stoom genomen, en hieronder ook de bijbehorende Shomate-parameters

<i>A</i>	123.876298
<i>B</i>	17.8337006
<i>C</i>	0.13532612
<i>D</i>	0.15107717
<i>E</i>	-31.7627504
<i>F</i>	-569.266360
$\Delta_f H_{f,298}^0$	-483.64

Nu zijn deze parameters per 2 mol H<sub>2</sub>O, dus is  $H^0 - H_{298.15}^0$  gelijk aan  $2 \cdot 241.5 = 483.0$  kJ.

Als een tabel gemaakt wordt van de temperaturen en de enthalpiën, dan verschijnen voor 3600K en 3700K respectievelijk de enthalpiën 475.50 en 495.56 kJ/mol; lineair interpoleren tussen deze twee waarden geeft dan

$$T = 3600 + \frac{483.0 - 475.50}{495.56 - 475.50} \cdot 100 = 3637K$$

Verificatie van deze temperatuur in de Shomate-vergelijking geeft een enthalpie van 482.9, wat gezien de nauwkeurigheden hierboven genoeg in de buurt is.

Als dit getal vergeleken wordt met de in de hand-outs gegeven figuur lijkt deze temperatuur erg hoog; dit is eenvoudig te verklaren: in een echte raket is de begintemperatuur van de brandstoffen een stuk lager, wat een lagere vlamtemperatuur tot gevolg zal hebben.