

問題 22 代替燃料としての水素とメタノール

現在、化石燃料は人類にとって最も重要なエネルギー資源である。化石燃料を使うことには2つの問題がある。1つは、化石燃料からエネルギーを生成する際、大気中に多くの二酸化炭素を排出することである。これは、今、地球温暖化につながっていると考えられている。さらに、化石燃料を現在のペースで使い続ければ、比較的近い将来、その資源が使い果たされると予想されている。多くの専門家は、水素やメタノールなどの代替資源を化石燃料に代わる環境に優しい代用燃料としてもっと広く使えるだろうと考えている。

水素は一次エネルギー資源ではない。すなわち、水素は、原子力や太陽光など他のエネルギー源を用いて生成する必要がある。最もよいのは、水から水素を生成する方法だろう。その方法は一般に水分解と呼ばれている。

- a) 1.6 V の電圧下で 90 % の収率で電気分解が起こるとしたとき、1 kg の水素を生成するのに何 kWh の電力量が必要か計算せよ。また、現在の工業電力と水素の価格をもとに、この方法を経済的な観点から評価せよ。（電力の平均価格を kWh あたり 0.10 ユーロ、水素の平均価格を kg あたり 2 ユーロとする。）

水素には、生産の問題に加え、その保存や輸送にもいくつかの課題がある。その観点からは、体積エネルギー密度と重量エネルギー密度が中心的な概念となる。体積エネルギー密度とは、ある資源から回収可能なエネルギーをその資源の全体積で割ったものである。重量エネルギー密度とは、ある資源から回収可能なエネルギーをその資源の質量で割ったものである。

- b) 大気圧下、298 K における水素の体積エネルギー密度と重量エネルギー密度を計算せよ。（この条件下で、水素は理想気体の法則に従うと仮定せよ。）

多くの場合、水素はボンベ（円筒状の金属製高圧ガス容器）中に詰められて輸送される。そのとき、ボンベ内の圧力は通常 200 bar に達する。典型的な鉄製（密度 7.8 g/cm³）大型ガスボンベは、内空の容積が 50 dm³ あり、空の状態で重量は 93 kg ある。このような高圧下では、水素は理想気体の法則に従うと見なすことはできない。この場合、次のファンデルワールズ方程式を用いるのが妥当である。

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT$$

ここで、 p は圧力、 V_m はモル体積、 R は気体定数、 T は温度であり、 a と b は気体ごとに決められる定数である。水素の場合、 $a = 2.48 \times 10^{-2} \text{ Pa m}^6 \text{ mol}^{-2}$ および $b = 2.66 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ mol}^{-1}$ である。圧縮水素を輸送するには必ずボンベが必要である。

- c) 圧縮水素の体積エネルギー密度と重量エネルギー密度を求めよ。

水素は金属水素化物としても輸送することができる。NaBH₄は、触媒存在下で水と反応し水素を生成することから、水素の輸送のための物質として有望視されている。

d) 1 molのNaBH₄から生成できる水素は何molか？

水はどこでも手に入るため、金属水素化物と一緒に輸送する必要がない。

e) 水素資源としてのNaBH₄の体積エネルギー密度と重量エネルギー密度を求めよ。なお、NaBH₄の密度は 1.07 g/cm³である。

これらのデータを従来のエネルギー資源のデータと比較することも重要である。

f) 先程計算したエネルギー密度を広い視野から考察するため、以下のエネルギー資源の体積エネルギー密度と重量エネルギー密度を求めよ。

i. 石炭のモデルとしての黒鉛

黒鉛において、その原子間結合長は 145.6 pm であり、層間距離は 335.4 pm である。この事実に基づき、黒鉛の密度を計算せよ。

ii. ガソリンのモデルとしてのn-オクタン (C₈H₁₈)

n-オクタンの密度は 0.70 g/cm³である。

iii. メタノール (1994年のノーベル賞受賞者オラー・ジェルジは、水素の代わりにメタノールを用いることを提案した。)

メタノールの密度は 0.79 g/cm³である。

iv. 円筒状 (直径 14.1 mm、高さ 47.3 mm、重量 26.58 g) の単3形ニッケル水素充電電池 (容量 1900 mAh、起電力 1.3 V)

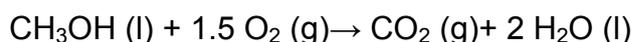
v. ¹Hを⁴Heに変換する仮想的な核融合炉における水素供給物質としての水
原子量はA_r(¹H) = 1.00782, A_r(⁴He) = 4.00260 である。

水素は低温液体として極低温下で保存することも可能である。沸点 (-253 °C) における液体水素の密度は 0.071 g/cm³である。

g) 液体水素の体積エネルギー密度と重量エネルギー密度を求めよ。

h) 仮想的な未来経済において、水素の代わりに液体のメタノールを使うことの利点は何か？

メタノールはメタノール燃料電池として使うこともできる。メタノール燃料電池の正味の反応は次のとおりである。



i) 陰極反応と陽極反応を書け。

j) 25 °C におけるメタノール燃料電池の最大起電力を計算せよ。

k) メタノール燃料電池は 120 °C で最大の機能を発揮する。120 °C における電池の反応電位は 1.214 V である。この数値とあなたが計算した値を比較せよ。

298 K における熱力学パラメータ

H ₂ O(l)	$\Delta_f H^\circ = -286 \text{ kJ/mol}$	O ₂ (g)	$S^\circ = 205 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
H ₂ O(g)	$\Delta_f H^\circ = -242 \text{ kJ/mol}$	CO ₂ (g)	$\Delta_f G^\circ = -394.4 \text{ kJ/mol}$
H ₂ O(l)	$S^\circ = 70 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$	C ₈ H ₁₈ (l)	$\Delta_f G^\circ = 6.4 \text{ kJ/mol}$
H ₂ O(g)	$S^\circ = 189 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$	CH ₃ OH(l)	$\Delta_f G^\circ = -166.3 \text{ kJ/mol}$
H ₂ (g)	$S^\circ = 131 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$		