

図3. pHを保つために必要なNaOH量を計算する式

代謝産物をpH5.5に保つために必要なNaOH量の計算									代謝産物をpH6.0に保つために必要なNaOH量の計算.xlsx								
			「実験結果一覧2」よりコピー			Glucose 2%=111.1mmol/L, pH=6.0											
			FeCl(III)	acetate [mmol/L]	butyrate [mmol/L]	ethanol [mmol/L]	formate [mmol/L]	lactate [mmol/L]	H2 [L/L]	H2 [mmol/L]	H2収率						
代謝産物をpH5.5に保つために必要なNaOH量の計算			FeCl(III) 無添加	60.60	8.29	35.67	16.55	109.53	3.67	163.9	1.5						
ヘンダーソン-ハッセルバルハの式で計算できる。			FeCl(III) 100mg/L	97.01	16.61	54.48	0.00	24.27	6.16	275.2	2.5						
特定のpHにおける[A-]/[AH]の比は pKa で決まる。			FeCl(III) 200mg/L	104.82	13.66	59.47	3.45	29.39	5.70	254.7	2.3						
AH ⇌ A- + H ⁺			FeCl(III) 400mg/L	91.42	15.68	51.63	1.92	33.04	5.62	250.9	2.3						
a - x x 10 ^{-pH}			pKa	4.76	4.82		3.75	3.86									
Ka = (x * 10 ^{-pH}) / (a - x)																	
x = a*Ka / (Ka + 10 ^{-pH})																	
K = [A-][H ⁺] / [AH]																	
pKa = pH - log[A-]/[AH]																	
解離している[A-]と等量のNaOHが特定のpHに保つために必要。			pH 6.0で解離した酸濃度 [mmol/L]														
Glucose	2%		FeCl(III) 無添加	57.3	7.8		16.5	108.7									
酢酸	濃度a[mol/L]	0.09701	FeCl(III) 100mg/L	91.7	15.6		0.0	24.1									
	pKa=4.76	1.738E-05	FeCl(III) 200mg/L	99.1	12.8		3.4	29.2									
	pH=6.0	1.000E-06	FeCl(III) 400mg/L	86.4	14.7		1.9	32.8									
	a*Ka=	1.686E-06															
	[A-] = a*Ka / (Ka + [H ⁺])	0.0917	必要NaOH量[g/L]						合計	NaOH [g/L-H2]							
	必要NaOH量[g/L]	3.67	FeCl(III) 無添加	2.29	0.31		0.66	4.35	7.61	2.07							
			FeCl(III) 100mg/L	3.67	0.62		0.00	0.96	5.26	0.85							
			FeCl(III) 200mg/L	3.96	0.51		0.14	1.17	5.78	1.01							
			FeCl(III) 400mg/L	3.46	0.59		0.08	1.31	5.43	0.97							

NaOH量を計算する式

代謝産物をpH6.0に保つために必要なNaOH量の計算
ヘンダーソン-ハッセルバルハの式で計算できる。
特定のpHにおける[A-]/[AH]の比は pK_a で決まる。



$$a - x \quad x \quad 10^{-pH}$$

$$Ka = (x * 10^{-pH}) / (a - x)$$

$$x = a * Ka / (Ka + 10^{-pH})$$

$$K = [A^-][H^+] / [AH]$$

$$pK_a = pH - \log[A^-]/[AH]$$

解離している[A-]と等量のNaOHが特定のpHに保つために必要。

Glucose	2%	1.50%
---------	----	-------

酢酸	濃度a[mol/L]	0.111	0.083333
----	------------	-------	----------

$$pK_a = 4.76 \quad 1.7378E-05$$

$$pH = 5.5 \quad 3.16228E-06$$

$$a * Ka = 1.92896E-06$$

$$[A^-] = a * Ka / (Ka + [H^+]) \quad 0.093911006$$

必要NaOH量[g/L]	3.76
--------------	------

$$[A^-] = a * 10^{(pH - pK_a)} \quad 0.60999037$$

$$[A^-] = a * Ka / [H^+] \quad 0.60999037$$

$$x = a * Ka / (Ka + 10^{-pH}) \quad 0.093911006$$

必要NaOH量[g/L]	3.76
--------------	------

乳酸	pH=6	0.000001
----	------	----------

	$pK_a = 3.86$	0.000138038
--	---------------	-------------

	160/100	0.1776
--	---------	--------

(e) FERMENTATION BALANCES FOR CLOSTRIDIA

Products	mMoles/100 mmoles glucose fermented						
	Clostridium butyricum ^a	Clostridium lacticum ^a acetobutylicum ^b	Clostridium perfringens ^a	Clostridium acetobutylicum ^a	Clostridium butylicum ^c	Bacillus bacterium reitgeri ^d	
Butyric acid	76	73	9 ^e	34 ^b	4.3	17.2	29
Acetic acid	42	28	15	60	14.2	17.2	88
Lactic acid	—	—	160	33	—	—	107
Carbon dioxide	188	190	24	176	221	203.5	48
Hydrogen	235	182	21	214	135	77.6	74
Ethanol	—	—	10	26	7.2	—	—
Butanol	—	—	—	—	56	53.6	—
Acetone	—	—	—	—	22.4	—	—
Acetoin	—	—	—	—	6.4	—	—
Isopropanol	—	—	—	—	—	12.1	—
Carbon recovered, % O/R balance	96.0	91.0	98.3	97.1	99.6	96.2	110.0 ^e
	0.97	1.16	0.81	1.05	1.01	1.06	0.74

(b) ANAEROBIC DISSIMILATION OF GLUCOSE BY *Aerovacter aerogenes*

Fermentations run under the same conditions as for *B. polymyxia* (Table I)

Product	pH 5.00 ^a	pH 5.00	pH 5.20	pH 5.60	pH 6.00	pH 6.60	pH 7.00	pH 7.60	pH 8.00
	Millimoles per 100 millimoles of glucose dissimilated								
2,3-Butanediol	40.2	38.7	48.8	47.9	47.5	38.8	10.78	Nil	Nil
Acetoin	2.43	2.46	1.39	2.39	1.58	2.10	3.08	3.85	5.82
Ethanol	56.4	60.5	61.2	56.3	57.4	55.2	57.7	54.7	60.9
Glycerol	4.13	2.22	1.81	3.91	3.34	4.37	5.79	7.72	6.55
Acetone	Nil	Nil	0.53	Nil	0.07	Nil	Nil	Nil	Nil
Butyric acid	1.07	0.59	0.29	0.23	Nil	0.44	0.68	1.79	3.95
Acetic acid	23.7	20.8	3.89	4.23	7.96	12.95	42.3	52.7	52.6
Formic acid	0.50	0.26	0.43	0.36	0.77	0.44	22.5	52.4	119.6
Succinic acid	1.25	1.29	2.17	2.04	1.80	3.08	6.19	4.10	9.29
Lactic acid	3.15	3.49	2.34	2.64	3.35	7.59	25.0	36.5	9.80
Carbon dioxide	188.0	190.5	183.8	171.1	174.0	167.0	106.8	77.4	19.60
Hydrogen	98.9	103.0	69.8	57.6	74.2	80.7	81.4	69.7	10.37
Glucose carbon assimilated	—	37.0	42.5	66.2	65.1	93.0	87.6	53.2	83.1
Fermentation time, hr.	143	142	94	29 ^j	14 ^j	10 ^j	10	9 ^j	21
% glucose used	65.5	68.0	99.9	100.0	100.0	100.0	100.0	99.9	93.4
% carbon accounted for	91.1	96.9	97.0	97.9	99.0	101.8	98.6	94.9	95.9
O/R Index	1.10	1.10	1.07	1.06	1.03	1.06	1.00	1.07	1.07

* Duplicate runs were made at pH 5.00 because the sudden increase in acetic acid and hydrogen was unexpected and needed confirmation.