Capítol 1

Combustió

Determinació de la reacció teòrica de combustió del n-octà amb aire

La base de càlcul és 1 mol de C_8H_{18} . Plantegem la reacció de combustió de 1 mol amb A moles d'aire:

$$C_8H_{18} + a(0.21O_2 + 0.79N_2) \longrightarrow bCO_2 + cH_2O + dN_2$$
 (1.1)

Els coeficients estequiomètrics A, b, c, d es calculen mitjançant el balanç de les espècies atòmiques C, H, O i N:

- Balanç de C: $8 = b \Rightarrow b = 8 \text{ molCO}_2/1 \text{ molC}_8 H_{18}$
- Balanç de H: 18 = 2c \Rightarrow $c = 9 \text{ molH}_2\text{O}/1 \text{ molC}_8\text{H}_{18}$
- Balanç de O₂: 0.21 $A=b+\frac{c}{2}$ \Rightarrow $A=59.52\,\mathrm{molaire}/1\,\mathrm{molC_8H_{18}}$
- Balanç de N₂: $0.79A = d \Rightarrow d = 47.02 \,\mathrm{molN_2/1\,molC_8H_{18}}$

Així, la reacció teòrica de combustió és:

$$C_8H_{18} + 59.52(0.21 O_2 + 0.79 N_2) \longrightarrow 8 CO_2 + 9 H_2O + 47.02 N_2$$
 (1.2)

Un mètode alternatiu és plantejar la reacció de combustió en funció només de l'oxigen:

$$C_8H_{18} + a\left(O_2 + \frac{79}{21}N_2\right) \longrightarrow bCO_2 + cH_2O + dN_2$$
 (1.3)

Els balanços es fan com segueix:

- Balanç de C: $8 = b \Rightarrow b = 8 \text{ molCO}_2/1 \text{ molC}_8 H_{18}$
- Balanç de H: 18 = 2c \Rightarrow $c = 9 \text{ molH}_2\text{O}/1 \text{ molC}_8\text{H}_{18}$
- Balanç de O₂: $a = b + \frac{c}{2}$ \Rightarrow $a = 12.5 \,\mathrm{molO_2/1\,molC_8H_{18}}$
- Balanç de N₂: $\frac{79}{21}a = d \implies d = 47.02 \,\mathrm{molN_2/1\,molC_8H_{18}}$