

Combustió

0.1 El motor de combustió interna

Un motor de combustió interna (IC) és un conjunt d'elements mecànics que permeten obtenir energia mecànica a partir de l'estat tèrmic d'un fluid de treball generat en el seu propi interior mitjançant un procés de combustió.

Els motors de combustió interna, ja siguin alternatius o de reacció, són les principals fonts d'energia en el transport terrestre, marítim i aeri gràcies a la seva elevada potència específica. Aquests motors només competeixen amb els motors elèctrics en algunes aplicacions del transport ferroviari i, de manera creixent, en vehicles elèctrics purs o en configuració híbrida[2].

En un motor de combustió interna s'introdueix aire i combustible. En els motors d'encesa per espurna, la mescla d'aire i combustible es preparava antigament en el carburador i es conduïa al cilindre. Ara es realitza per mitjà d'injectors, cosa que permet un estalvi de combustible i un millor aprofitament d'aquest. En els motors d'encesa per compressió (Diesel), la mescla es realitza directament dins del cilindre, on el combustible s'injecta després d'haver-hi introduït i comprimit l'aire. Cada cilindre del motor té una vàlvula d'admissió i una d'escapament, que s'obren i tanquen en el moment oportú per permetre l'entrada i sortida de gasos. Els motors típics tenen entre 3 i 12 cilindres, i la potència es pot augmentar afegint més cilindres.

La paret de la cambra de combustió està formada per una camisa de ferro o alumini, i està inserida en un bloc de ferro o acer.

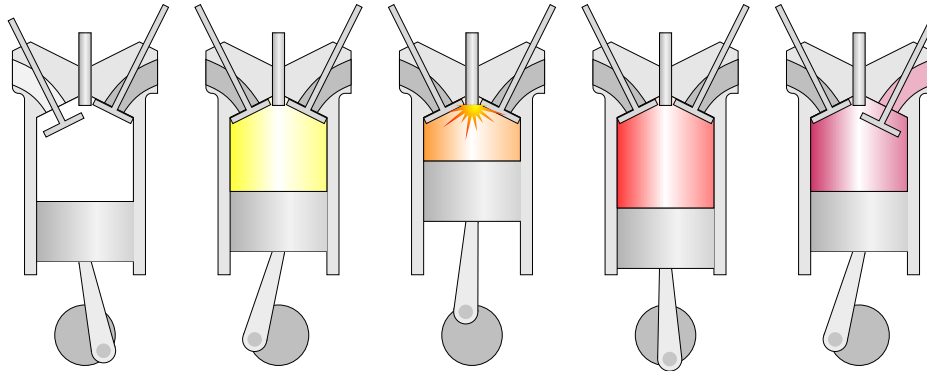
La mescla comprimida a la cambra de combustió es transforma, per efecte de la combustió, en vapor d'aigua (H_2O), diòxid de carboni (CO_2) i nitrogen (N_2). El nitrogen, un gas inert contingut a l'aire, no intervé en la combustió. El vapor d'aigua produït en la combustió es manté i es comporta com un gas permanent.

Entre els altres productes de la combustió es troben altres gasos com: monòxid de carboni (CO), hidrogen (H_2), metà (CH_4) i oxigen (O_2), quan la combustió és incompleta. La quantitat d'oxigen que participa en el procés depèn directament de l'excés d'aire introduït respecte al necessari per a la combustió.

En conseqüència, el fluid de treball està format inicialment per l'aire i el combustible i, després, pel conjunt de gasos produïts durant la combustió. Com és evident, la seva composició química varia durant el cicle de treball.

0.1.1 El motor de quatre temps

Un motor de quatre temps és aquell que necessita quatre recorreguts del pistó, dues voltes completes del cigonyal, per completar el seu cicle termodinàmic (veure animació a <https://www.grc.nasa.gov/www/k-12/airplane/engopt.html>).



- **Primer pas o admissió** En aquesta etapa, quan el pistó baixa des del Punt Mort superior (PMS o, en anglès, top dead center, TDC) al Punt Mort Inferior (PMI o, en anglès bottom dead center, BDC), permet que el nou combustible entri per la vàlvula d'injecció. Mentre s'obre aquesta vàlvula, la d'escapament es manté tancada.
- **Segon pas o compressió** Al final de l'execució anterior, el gas dins del cilindre es comprimeix per mitjà del moviment ascendent del pistó, de manera que la vàlvula d'injecció es tanca per la pressió.
- **Tercer pas o explosió/expansió** Després del temps de compressió, quan el pistó torna a la posició superior, s'obté la pressió màxima dins del cilindre. En el nostre cas, tenim un motor dièsel, per la qual cosa el combustible s'injecta polvoritzat i es crema per mitjà de la pressió i la temperatura dins del cilindre. Aleshores, l'expansió del gas fa que el pistó es mogui de nou cap avall; és en aquest moment quan es crea el treball de tot el procés. El treball d'expansió obtingut és aproximadament cinc vegades el treball de compressió necessari.
- **Quart pas o escapament** En aquest últim pas, el moviment superior del pistó fa que els gasos de combustió surtin a través de la vàlvula d'escapament. Quan el pistó està a la part superior, la vàlvula d'escapament es tanca i la injecció s'obre perquè tot el procés es torni a iniciar.

El cigonyal completa dues voltes (720 graus) per cada cicle de quatre temps. Així, el motor de quatre temps necessita dues voltes completes del cigonyal per completar el seu cicle termodinàmic.

Molts dels comportaments del motor es poden descriure mitjançant els conceptes de les lleis dels gasos. Per exemple, segons la llei de Boyle, quan augmenta el volum de la cambra de combustió durant l'aspiració, la pressió disminueix i permet que l'aire entri al cilindre. Durant la compressió, el gas s'escalfa i augmenta la pressió. L'expansió dels gasos calents, descrita per la llei de Charles, és el mecanisme pel qual es captura l'energia de la combustió i es converteix en energia mecànica per impulsar el vehicle[3].

0.1.2 Fases del Cicle Otto ideal

Els processos termodinàmics que es donen en el cicle Otto es poden resumir en[4]:

1. 0-1 Aspiració (procés isocòric): La vàlvula d'admissió s'obre i s'aspira una càrrega d'aire i combustible a una pressió teòricament igual a l'atmosfèrica, provocant el descens del pistó. La vàlvula d'escapament roman tancada. L'injector de fuel genera un aerosol de combustible, en forma d'una fina boira de gotes minúscules, que es barreja amb l'aire aspirat.
2. 1-2 Compressió (procés adiabàtic): No existeix intercanvi de calor entre el gas i les parets del cilindre. La vàlvula d'admissió i la d'escapament estan tancades i el pistó comença a pujar, comprimint la mescla que es vaporitza.
3. 2-3 Combustió (procés isocòric): Ambdues vàlvules romanen tancades. Quan el pistó arriba a la part superior del seu recorregut, el gas comprimit s'inflama per l'espurna de la bugia. La combustió de tota la massa gasosa és instantània, per la qual cosa el volum no variarà i la pressió augmentarà ràpidament. Això és degut a que la reacció genera molts més mols de gas que els inicials, i la temperatura augmenta enormement degut a la reacció química.
4. 3-4 Expansió (procés adiabàtic): El gas inflammat empeny el pistó. Durant l'expansió, no hi ha intercanvi de calor i, en augmentar el volum, la pressió també augmenta.
5. 4-1 Escapament (procés isocòric) Quan el pistó es troba en l'extrem inferior del seu recorregut, la vàlvula d'admissió roman tancada i s'obre la d'escapament, disminuint ràpidament la pressió sense variar el volum interior. Després, mantenint la pressió igual a l'atmosfèrica, el volum disminueix.

0.1.3 Cicle Otto Real

El procés Otto real (Figura 2) s'allunya lleugerament (però de forma significativa) de l'ideal.

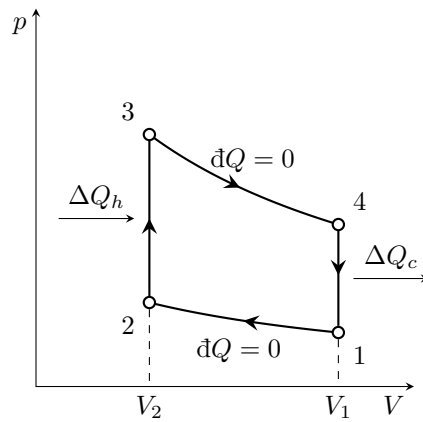


Figura 1: La termodinàmica del cicle d'Otto. Els processos d'expansió i compressió són adiabàtics, mentre que els de combustió i escapament són isocòrics.

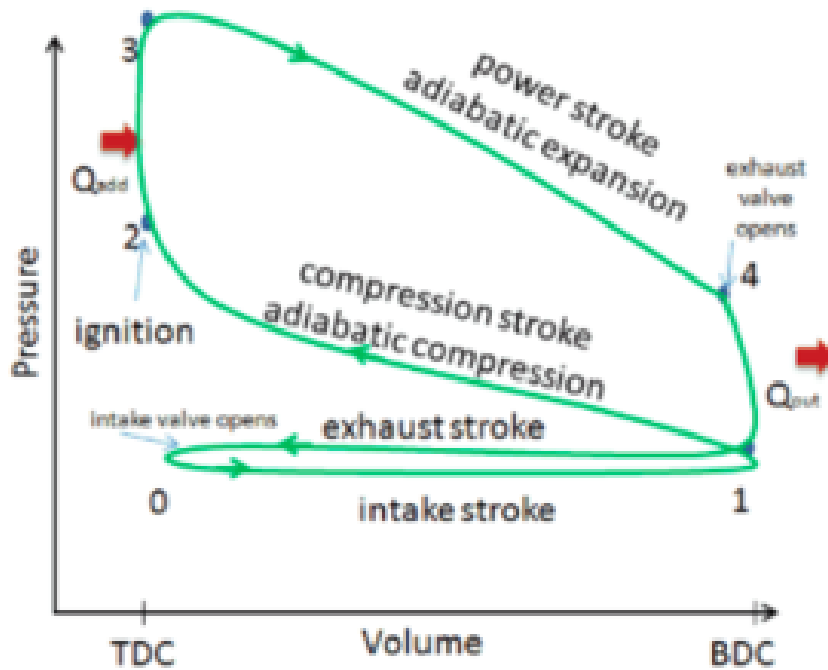


Figura 2: Cicle termodinàmic del procés 'Otto' real.

1. 0-1 Aspiració: La pressió del gas durant l'aspiració és inferior a la pressió atmosfèrica, per tant, el tancament de la vàlvula d'admissió es produeix després que el pistó arriba a l'extrem inferior de la seva carrera. Això prolonga el període d'admissió i permet l'entrada de la màxima quantitat de mescla d'aire i combustible al cilindre.
2. 1-2 Compensió: El gas cedeix calor al cilindre, cosa que fa que es refredi i adquireixi menys pressió.
3. 2-3 Combustió: La combustió no és instantània i el volum de la mescla varia mentre es propaga la inflamació. Per obtenir un màxim treball, és essencial triar el moment adequat per a l'encesa. La xispa ha de saltar abans que el pistó hagi finalitzat la carrera de compressió, cosa que augmenta considerablement la pressió assolida després de la combustió i, per tant, el treball guanyat.
4. 3-4 Expansió: L'augment de temperatura dins del cilindre durant la combustió fa que, durant l'expansió, els gasos cedeixin calor al cilindre i es refredin, resultant en una pressió menor. Per tant, es tracta d'un procés no adiabàtic.
5. 4-1 Escapament: En realitat, l'escapament no es produeix instantàniament. Els gasos encara tenen una pressió superior a l'atmosfèrica en aquest període. Per això, la vàlvula d'escapament s'obre abans que el pistó arribi a l'extrem inferior del seu recorregut, permetent que la pressió del gas disminueixi a mesura que el pistó acaba la seva carrera descendent. Quan el pistó realitza la seva carrera ascendent, troba davant seu gasos ja gairebé totalment expandits. A més, la vàlvula d'admissió s'obre abans que el pistó arribi a l'extrem superior del seu recorregut, generant una certa depressió en el cilindre que afavoreix una aspiració més enèrgica.

0.1.4 Cicle Diesel

El motor Diesel és un motor de combustió interna basat en el cicle Otto, però amb la diferència que el combustible s'injecta després de la compressió de l'aire.

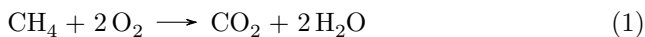
Durant l'aspiració, entra només aire en el cilindre. En la compressió, l'aire s'escalfa i, quan el pistó arriba al punt mort superior, s'injecta el dièsel. Un motor diesel presenta uns factors de compressió molt més elevats que un motor Otto, i per tant, la temperatura de l'aire comprimit és molt més alta. Això permet que el dièsel s'encengui per la pressió i la temperatura de l'aire comprimit, sense necessitat d'una espurna. Finalment, l'escapament funciona de manera similar al motor d'encesa per espurna.

Aquest motor permet una major eficiència tèrmica i té avantatges econòmics en diverses aplicacions. Tot i això, presenta dificultats tècniques en sistemes d'injecció i combustió. Per garantir una combustió neta i eficient, el procés es realitza en mil·lisegons. Els motors Diesel usen ratios combustible/aire molt més baixos, amb la qual cosa la combustió és més completa.

0.2 Reaccions de combustió

Per definició, una reacció de combustió és qualsevol reacció entre un material i un oxidant [típicament $O_2(g)$] que allibera energia en forma de calor. Les reaccions químiques alteren els tipus d'enllaços i les posicions relatives dels àtoms dins de les molècules. Els materials inicials s'anomenen reactius, i els materials finals després de la reordenació s'anomenen productes. En una reacció de combustió, el material inicial no oxidant s'anomena combustible i pot ser una varietat de compostos químics[3].

Normalment, la combustió es presenta en química general i orgànica com la reacció dels combustibles hidrocarbonats amb l'oxigen per produir diòxid de carboni i aigua:



No obstant això, els combustibles orgànics contenen més elements que només carboni i hidrogen, i produeixen altres gasos a banda del diòxid de carboni i l'aigua. Els motors de combustió interna també generen combustibles hidrocarbonats no cremats i els anomenats NO_x tèrmics, gasos amb la fórmula NO_x que es formen quan el nitrogen atmosfèric es torna molt calent i reacciona amb l'oxigen atmosfèric. Aquests gasos contribueixen a les emissions dels motors i es redueixen mitjançant tecnologies d'emissions que es tractaran més endavant.

0.2.1 Destil·lació del petroli

La majoria de motors de combustió interna de gasolina i dièsel estan dissenyats per utilitzar fraccions específiques d'hidrocarburs obtingudes del petroli cru. El petroli és una barreja complexa de compostos orgànics provinents de la descomposició de microorganismes marins enterrats. Només els components més lleugers i volàtils són adequats com a combustible per a vehicles[3].

Aquests components se separen del petroli mitjançant destil·lació, un procés on el líquid s'escalfa fins a bullir, i els vapors es refreden i es condensen en un recipient. En la destil·lació industrial, això es fa en una torre de destil·lació, un cilindre metàl·lic on els diferents components del petroli es condensen a diferents alçades segons el seu punt d'ebullició. Els compostos més lleugers surten per la part superior com a vapor, mentre que els més pesats es condensen més avall (Figura 3).

El dièsel es destil·la entre $200^\circ C$ i $350^\circ C$ i conté hidrocarburs amb entre 8 i 21 àtoms de carboni. La gasolina, més volàtil, conté alcans lleus (parafines), alcans cíclics (naftalens) i alquens (olefines) de 4 a 12 carbonis i es destil·la a temperatures més baixes, pel fet de ser més volàtil. Tant la gasolina com el dièsel inclouen additius químics per millorar la seva estabilitat i resistència a la compressió. Aquests additius solen ser substàncies orgàniques contenir nitrogen, fòsfor i oxigen, i també compostos aromàtics (anells de carboni amb enllaços híbrids).

Per simplificar, l'anàlisi de la combustió es centrarà en la gasolina i un dels seus principals components, l'octà, tot i que el mateix principi s'aplica a altres combustibles.

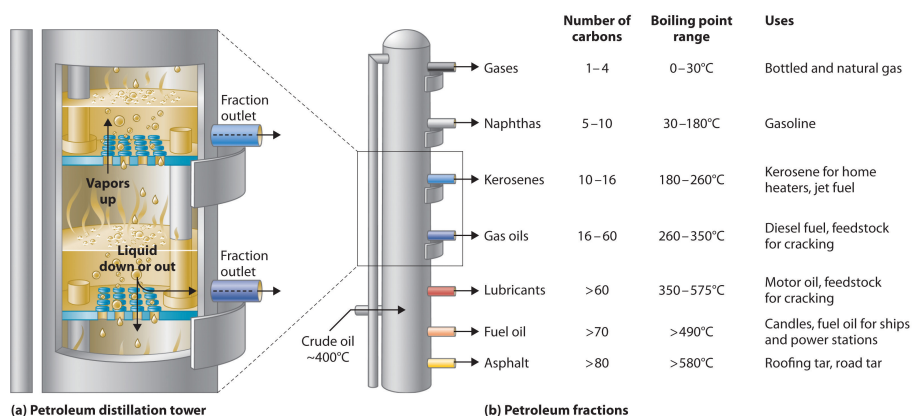


Figura 3: Destil·lació fraccionada del petroli[1].

0.2.2 L'índex d'octà

Què significa el número d'octà de la benzina o per què alguns cotxes necessiten gasolina premium? El número d'octà mesura la resistència del combustible a la ignició espontània quan es comprimeix.

L'octà, o n-octà, és un hidrocarbur de la família dels alquans amb fórmula molecular C_8H_{18} . És un líquid incolor, inodor i inflamable. És un component important de la gasolina, ja que té una estructura lineal que li permet tenir una alta resistència a la detonació. Això fa que sigui un combustible ideal per a motors d'alta compressió.

En un motor de combustió interna, el combustible ha de cremar quan s'encén la bugia. Si la compressió fa que es detoni abans d'hora es poden danyar components com vàlvules i pistons. Això es coneix com a picat de biela o preignició.

El número d'octà es determina en un laboratori, cremant el combustible en un motor amb ràtio de compressió variable fins que es detecta el picat. A partir d'això, es compara amb una barreja de isooctà i heptà amb la mateixa resistència a la detonació. El número d'octà indica el percentatge d'isooctà en aquesta barreja equivalent. Per exemple, un combustible amb un número d'octà de 90 té la mateixa resistència a la preignició que una barreja del 90% d'isooctà i 10% d'heptà (veure Taula 1).

És important saber que aquest número no indica la quantitat real d'octà en la benzina. Hi ha altres compostos amb més resistència a la detonació que poden donar valors superiors a 100. En resum, com més alta sigui la ràtio de compressió del motor, més alt ha de ser el número d'octà per evitar problemes de preignició.

Molts compostos actuals tenen un índex d'octà superior a 100, cosa que els fa millors combustibles que l'isooctà pur. A més, s'han desenvolupat agents anticlop, també anomenats potenciadors d'octà. Durant molts anys, un dels més utilitzats va ser el tetraetilplom ($(C_2H_5)_4Pb$), que a una concentració d'aproximi-

madament 11.36 g L^{-1} augmentava l'índex d'octà en 10-15 punts. No obstant això, des de 1975, els compostos de plom han estat progressivament eliminats com a additius de la gasolina a causa de la seva elevada toxicitat.

Per substituir-los, es van desenvolupar altres potenciadors com el metil terc-butil èter (MTBE), que té un índex d'octà elevat i causa poca corrosió al motor i al sistema de combustible. Tanmateix, les fuites de gasolina amb MTBE des de dipòsits subterranis han contaminat aigües subterrànies en algunes zones, fet que ha portat a restriccions o prohibicions del seu ús. Com a alternativa, s'està promovent l'ús d'etanol, que es pot obtenir de fonts renovables com el blat de moro, la canya de sucre o les gramínies.

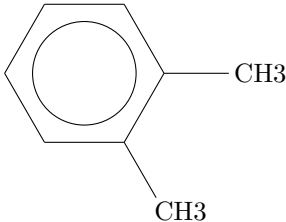
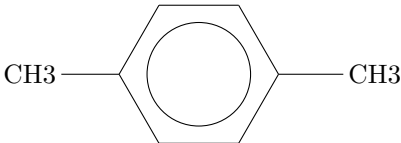
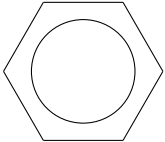
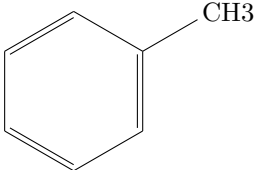
0.3 Exercicis

Exercici 1. Determina la reacció de combustió de l'octà en presència d'aire.

Exercici 2. Si 8,20 g de C_6H_6 (benzè) es combinen amb oxigen en una reacció de combustió, quants grams de H_2O es produiran?

Exercici 3. Després de la combustió amb excés d'oxigen, 12,501 g d'un compost petroquímic van produir 38,196 g de diòxid de carboni i 18,752 g d'aigua. Una anàlisi prèvia va determinar que el compost no conté oxigen. Estableix la seva fórmula empírica.

Exercici 4. Durant l'anàlisi per combustió d'un compost desconegut que conté només carboni, hidrogen i nitrogen, es van mesurar 12,923 g de diòxid de carboni (CO_2) i 6,608 g d'aigua (H_2O). El tractament del nitrogen amb gas H_2 va donar com a resultat 2,501 g d'amoniac (NH_3). La combustió completa de 11,014 g del compost va necessitar 10,573 g d'oxigen (O_2). Quina és la fórmula empírica del compost?

Nom	Fórmula	Índex	Nom	Fórmula	Índex
n-heptà	$\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_5-\text{CH}_3$	0	o-xilè		107
n-hexà	$\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_4-\text{CH}_3$	25	etanol	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$	108
n-pentà	$\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_3-\text{CH}_3$	62	t-butil alcohol	$(\text{CH}_3)_3\text{COH}$	113
isooctà	$(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	100	p-xilè		116
benzè		106	metil terc-butil èter	$\text{H}_3\text{COC}(\text{CH}_3)_3$	116
metanol	CH_3OH	107	toluè		118

Taula 1: Taula de compostos amb les seves fórmules condensades i índex d'octà (Adaptada de [1]).

Bibliografia

- [1] *3.8: Gasoline - A Deeper Look*. en. Maig de 2015. URL: [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Organic_Chemistry_\(Morsch_et_al.\)/03%3A_Organic_Compounds-_Alkanes_and_Their_Stereochemistry/3.08%3A_Gasoline_-_A_Deeper_Look](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Organic_Chemistry_(Morsch_et_al.)/03%3A_Organic_Compounds-_Alkanes_and_Their_Stereochemistry/3.08%3A_Gasoline_-_A_Deeper_Look) (cons. 16-02-2025).
- [2] Antonio Rovira de Antonio i Marta Muñoz Domínguez. *MOTORES DE COMBUSTION INTERNA*. es. Universidad Nacional de Educación a Distancia, 2015. ISBN: 978-84-362-7086-0.
- [3] Geoffrey M. Bowers i Ruth A. Bowers. *Understanding Chemistry through Cars*. en. CRC Press, nov. de 2014. ISBN: 978-1-4665-7184-6. DOI: 10.1201/b17581. URL: <https://www.taylorfrancis.com/books/9781466571846>.
- [4] Mercedes Yolanda Rafael Morales i Andrés Hernández Guzmán. “CARACTERIZACIÓN DE UN MOTOR DE COMBUSTIÓN INTERNA CON DOS TIPOS DE COMBUSTIBLE”. es. A: ().