



Universidad Simón Bolívar  
Departamento de Termodinámica y Fenómenos de Transferencia  
**De Ponte Moniz, Luis Gabriel**

PROBLEMAS DE REACCIONES DE COMBUSTIÓN

**PROBLEMA 1. Temperatura adiabática de llama.**

Calcule la temperatura teórica de llama cuando se quema etileno a 25°C con:

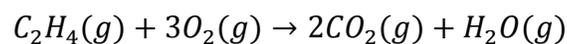
- La cantidad teórica de Oxígeno a 25°C
- La cantidad teórica de aire a 25°C
- 25°C de exceso de aire.
- Comente las diferencias.

**Tabla 1.** Calores estándar de reacción involucrados en la combustión de etileno

Componentes	$\Delta H_f^\circ(298K, 1bar)$	$C_p(298K)/R$
Etileno	52510	5,325
Oxígeno	0	3,535
$CO_2$	-393509	4,467
$H_2O$	-241818	4,038
$N_2$	0	3,502

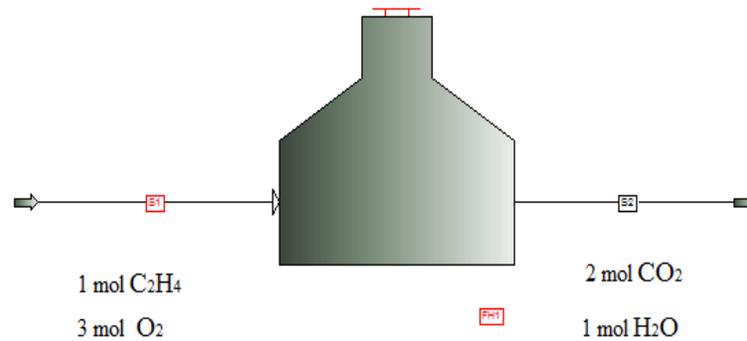
Solución a:

La reacción química viene dada por:



Nota: Para balancear las reacciones químicas de combustión, se balancean primero los carbonos, luego los hidrógenos y por último los oxígenos.

Para la cantidad de moles teóricas se tiene 1 mol de etileno y 3 moles de Oxígeno a la entrada del horno. Como las reacciones de combustión son muy exotérmicas y espontáneas toda la reacción se desplaza hacia los productos y a la salida del horno se tendrá 2 moles de CO<sub>2</sub> y 1 mol de H<sub>2</sub>O.



**Figura 1.** Entrada y salida del horno para la reacción de combustión de etileno

Realizando un balance de energía tomando como entrada y salida la entrada y salida del reactor.

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{sis} = \sum (n_i h_i)_s - \sum (n_i h_i)_e + \dot{Q} - \dot{W}$$

La temperatura adiabática de llama por definición es la temperatura a la cual salen los productos de combustión a la salida de un horno que opera de forma adiabática por lo cual en este caso tenemos que  $\dot{Q} = 0$ . Adicionalmente el horno es un equipo que no produce trabajo de flujo  $\dot{W} = 0$  y estamos en estado estacionario  $\left(\frac{dE}{dt}\right)_{sis} = 0$

$$\sum (n_i h_i)_s - \sum (n_i h_i)_e = 0$$

Como los productos de salida son distintos a los reactivos de la entrada, para agrupar términos a la entrada y a la salida del reactor, sumo y resto el término

$$\sum (n_i h_{f_i}^\circ)_s - \sum (n_i h_{f_i}^\circ)_e = n_{comb} \Delta h_{reac}(298K)$$

Para poder agrupar términos en el balance de energía.

$$\sum (n_i h_i)_s - \sum (n_i h_i)_e - \sum (n_i h_{f_i}^\circ)_s + \sum (n_i h_{f_i}^\circ)_e + n_{comb} \Delta h_{reac}(298K) = 0$$

$$\sum (n_i (h_i - h_{f_i}^\circ))_s - \sum (n_i (h_i - h_{f_i}^\circ))_e + n_{comb} \Delta h_{reac}(298K) = 0$$

Como la reacción ocurre en fase gas tenemos que:

$$\sum \left( n_i \int_{T^\circ}^T C_{p_i} dT \right)_s - \sum \left( n_i \int_{T^\circ}^T C_{p_i} dT \right)_e + n_{comb} \Delta h_{reac}(298K) = 0$$

A la entrada los reactantes están a 25°C por lo cual  $\sum \left( n_i \int_{T^\circ}^T C_{p_i} dT \right)_e = 0$

$$\sum \left( n_i \int_{T^\circ}^T C_{p_i} dT \right)_s + n_{comb} \Delta h_{reac}(298K) = 0$$

En este caso nos interesa el valor de T que corresponde a la temperatura adiabática de llama. En este caso particular  $C_{p_i}$  es constante así tenemos:

$$\sum \left( n_i C_{p_i} (T - T^\circ) \right)_s + n_{comb} \Delta h_{reac}(298K) = 0$$

$$n_{CO_2} C_{p_{C_2H_4}} (T - T^\circ) + n_{H_2O} C_{p_{H_2O}} (T - T^\circ) + n_{comb} \Delta h_{reac}(298K) = 0$$

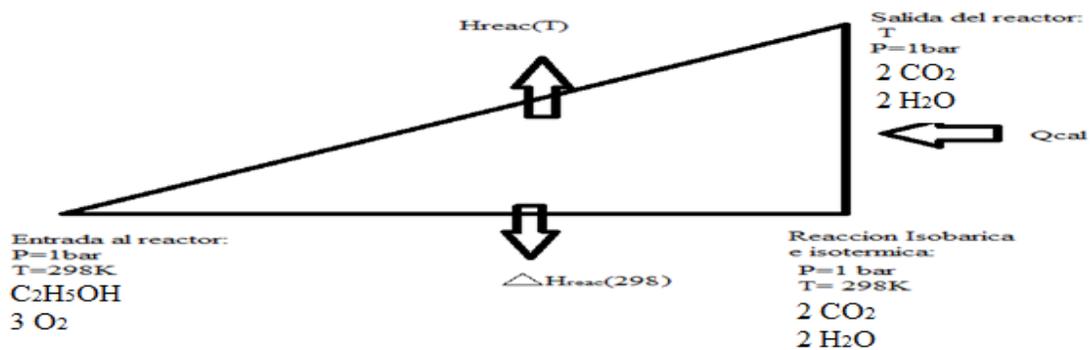
$$(n_{CO_2} C_{p_{C_2H_4}} + n_{H_2O} C_{p_{H_2O}}) T = (n_{CO_2} C_{p_{C_2H_4}} + n_{H_2O} C_{p_{H_2O}}) T^\circ - n_{comb} \Delta h_{reac}(298K)$$

$$T = T^\circ - \frac{n_{comb} \Delta h_{reac}(298K)}{(n_{CO_2} C_{p_{C_2H_4}} + n_{H_2O} C_{p_{H_2O}})}$$

Los moles  $n_{comb}$  son los moles de combustible que reaccionan estequiométricamente son  $n_{comb} = 1 \text{ mol}$ , por lo cual se cumple que  $\frac{n_{CO_2}}{n_{comb}} = \alpha_{CO_2}$  donde  $\alpha_i$  es el coeficiente estequiométrico del componente i por lo cual se cumple que:

$$T = T^\circ - \frac{\Delta h_{reac}(298K)}{(\alpha_{CO_2} C_{p_{C_2H_4}} + \alpha_{H_2O} C_{p_{H_2O}})} = T^\circ - \frac{\Delta h_{reac}(298K)}{R \left( \alpha_{CO_2} \frac{C_{p_{C_2H_4}}}{R} + \alpha_{H_2O} \frac{C_{p_{H_2O}}}{R} \right)}$$

Una forma más simple de deducir esta ecuación es considerar que el calor de la reacción de combustión se puede determinar a través de dos procesos: Un proceso en donde ocurre la reacción a 298K y 1 bar y otra en donde se calientan los productos a la temperatura de salida de los productos. En el siguiente triángulo de reacción se puede comprender de una forma sencilla la forma de deducir esta ecuación:



De esta forma se tiene que:

$$\Delta H_{reac}(T) = \Delta H_{reac}^{298K} + \sum \left( \alpha_i \int_{T^{\circ}}^T c_{p_i} dT \right)_s$$

Para el cálculo de la temperatura adiabática de llama se tiene que  $Q' = \Delta H_{reac}(T) = 0$  por lo cual se tiene:

$$-\Delta H_{reac}^{298K} = \sum \left( \alpha_i \int_{T^{\circ}}^T c_{p_i} dT \right)_s = \sum \left( \alpha_i c_{p_i} (T - T^{\circ}) \right)_s = 0$$

$$T = T^{\circ} - \frac{\Delta h_{reac}(298K)}{(\sum (\alpha_i c_{p_i})_s)}$$

Calculamos el calor de reacción a 298 K tenemos:

$$\Delta H_{reac}^{298K} = \sum \alpha_i \Delta h_{f_i}^{\circ} = 2 * \Delta H_{f_{CO_2}} + 2 * \Delta H_{f_{H_2O}} - 1 * \Delta H_{f_{C_2H_5OH}} - 3 * \Delta H_{f_{O_2}}$$

$$\Delta H_{reac}^{298K} = 2(-393509) + 2(-241818) - (52510) = -1323164 \text{ J/mol}$$

Sustituyendo determinamos la temperatura adiabática de llama:

$$T = 298 - \frac{-1323164}{8,314 * (2 * (4,467) + 2 * (4,038))} = 9654,35K$$

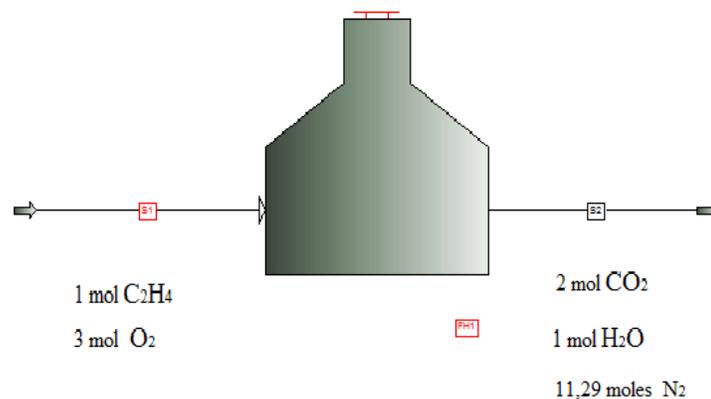
**Solución b:** En este caso se utiliza la cantidad teórica de Aire, es decir se obtienen los 3 moles de oxígeno a partir del Aire.

El Aire es una mezcla de 21% de oxígeno y 79% de nitrógeno por lo cual se tiene que:

$$n_{O_2} = 0,21 * n_{aire} = 3 \text{ moles} \rightarrow n_{aire} = 14,29 \text{ moles}$$

$$n_{N_2} = 0,79 * n_{aire} = 11,29 \text{ moles}$$

De esta forma el nitrógeno inerte sale del horno como un producto que es calentado hasta la temperatura adiabática de llama.



**Figura 2.** Entrada y salida del horno para la reacción de combustión de etileno con la cantidad teórica de Aire (presencia del N<sub>2</sub> como inerte)

De esta forma se obtiene que:

$$T = 298 - \frac{(-1323164)}{8,314(2 * (4,467) + 2 * (4,038) + 11,29(3,502))} = 3112,57K$$

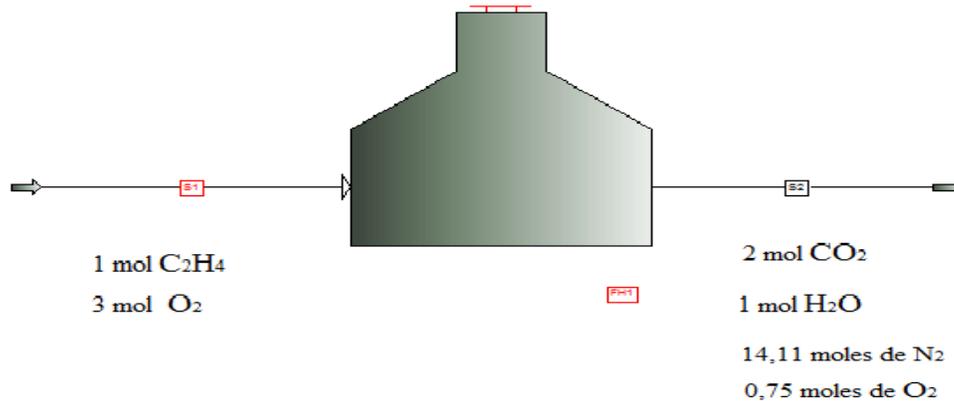
Solución c: En este caso se trabaja con un 25% de Aire de exceso, es decir se utilizaran 25% mas de aire de los 14,29 moles iniciales:

$$n_{aire} = 14,29 \text{ moles} + 0,25 * (14,29 \text{ moles}) = 17,86 \text{ moles}$$

$$n_{O_2} = 0,21 * (17,86 \text{ moles}) = 3,75 \text{ moles}$$

$$n_{N_2} = 0,79 * (17,86 \text{ moles}) = 14,11 \text{ moles}$$

Ahora a la salida del reactor tendremos los productos, los 14,11 moles de  $N_2$  inerte y 0,75 moles de  $O_2$  que no reaccionan.



**Figura 3.** Entrada y salida del horno para la reacción de combustión de etileno con la cantidad 25% de exceso de Aire (presencia del  $N_2$  como inerte y del  $O_2$  de exceso)

Solución c:

$$T = 298 - \frac{(-1323164)}{8,314(2 * (4,467) + 2 * (4,038) + 14,11 * (3,502) + 0,75(3,535))} = 2602,17 \text{ KK}$$

Solución d: Al comparar los tres resultados se puede concluir que la presencia de inertes y de compuestos en exceso en la reacción de combustión del etileno disminuyen la temperatura adiabática de llama.