



1 GAIA: ERREKUNTZAREN OINARRI KIMIKOAK

IKASMATERIALAK

Maite de Blas Martín
Blanca M^a Caballero Iglesias

Bilboko Ingeniaritza Eskola
Ingeniaritza Kimikoa eta Ingurumenaren Ingeniaritza

ERREKUNTZAREN OINARRI KIMIKOAK

1.1. Sarrera

1.2. Errekuntzaren elementuak

1.2.1. Erregaiak

1.2.2. Errekaria

1.3. Errekuntza-erreakzioen estekiometria

1.4. Errekuntza-erreakzio motak

1.4.1. Errekuntza teorikoa / neutroa

1.4.2. Errekuntza oxidatzailea / osatua

1.4.3. Errekuntza osatugabea / erreduzitzailea

1.4.4. Errekuntza ez-perfektua / mistoa

SARRERA

ENERGIA → lana egiteko ahalmena

ENERGIA → baliabide naturala, hura erauzteko, eraldatzeko eta erabilera industrialara zein ekonomikoara emateko teknologia barne,

ENERGIA TERMIKOA → bero moduan askaturiko energia, energia elektriko zein mekaniko eraldatu daitekeena

1.1. Taula. Ohiko energia-unitateak

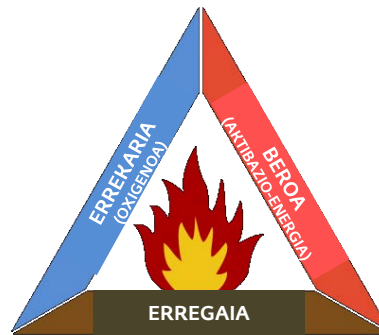
Unitatea	Sinboloa	Konbertsio-faktorea (J)
Kilojoule	kJ	10^3
Megajoule	MJ	10^6
Kaloria	cal	4,184
Kilokaloria	kcal	4184
Megakaloria	Mcal	$4184 \cdot 10^3$
Kilowatt-ordu	kWh	$3,6 \cdot 10^6$

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREGAIA → erre daitekeen substantzia, oxidatzen dena eta prozesuan askatutako beroa nagusiki **BERO** moduan askatzen duena

ERREKARIA → erregaia oxidatzen den ingurunea (*oro har airearen O_2 -a*)

ERREKUNTZA → erregaiaren (funtsean C, H edo hauen konbinazioa) eta errekarriaren oxigenoaren (oro har airea) arteko oxidazio-erreakzioa



1.1. Irudia. Errekuntza-prozesua. Egileek moldaturikoa lizentzia publikoan Wikimedien argitaraturiko Gustavb-ren iruditik [1]

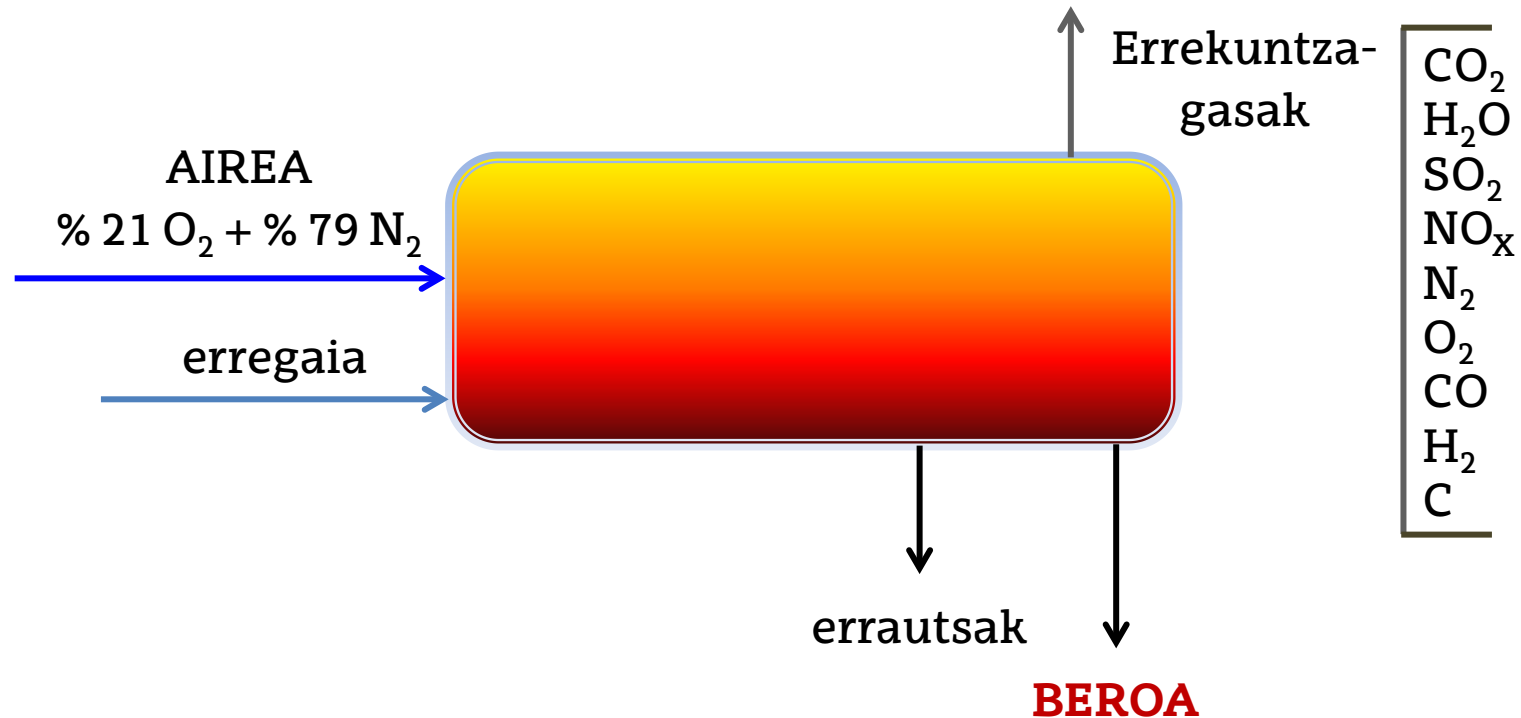
PRODUKTUAK

ERREKUNTZA-GASAK → errekuntza-prozesuaren ondoriozko produktu gaseosoak

ERRAUTSAK → erregaiak ez diren elementu solidoak (inorganikoak), errekuntza-ganberan irauten dutenak errekuntzaren ostean eta energiarik sortarazten ez dutenak.

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

erregaia + O₂ (airea) errekontza-gasak + errautsak + **BEROA**



ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREGAIAK.- SAILKAPENA

✓ JATORRIA

- **Fosilak** → landareen eta animalien hondakinen fermentaziotik eratorriak: ikatza, petrolioaren deribatuak, gas naturala...
- **Fosilak ez direnak** → gainerako erregaiak: biomasa, eolikoa...



1.2. Irudia. Erregai fosila: ikatza. Egileek egindako argazkia



1.3. Irudia. Fosila ez den erregai: biomasa. Egileek egindako argazkia

✓ PRESTAKUNTZA-MAILA

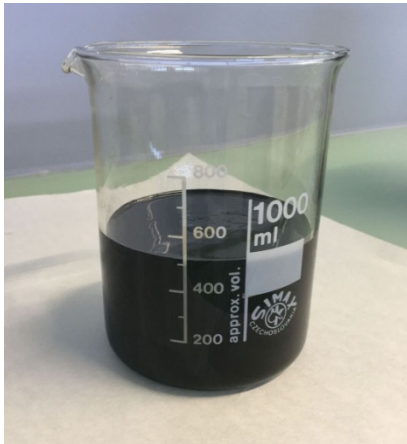
- **Naturalak** → jatorrian dauden bezala erabiltzen dira (aldez aurretik mekanikoki edo fisikoki tratatu daitezke): ikatza, petrolio, gas naturala...
- **Prestatutakoak (manufakturuak)** → erabili aurretik eraldaketa prozesuak jasaten dituzte: gasogeno-gasa, kokea...

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREGAIK.- SAILKAPENA

✓ AGREGAZIO-EGOERA

- **Solidoak** → halako egoeran daude naturan edo eraldatu ondoren: egurra, ikatza...
- **Likidoak** → erregai modura erabili daitezkeen erregaiak, isuri eta ponpatu daitezkeenak: fuel-olioa, gasolina...
- **Gaseosoak** → halako egoeran daude: gas naturala, labe garaiko gasa, hiri-gasa...



1.4. Irudia. Petrolioaren fuel-olioa. Egileek egindako argazkia



1.5. Irudia. Gas naturala. Jumanik egindako argazkia, Flickr webgunean lizentzia publikoan argitaraturikoa [2]

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREGAIAK.- KONPOSIZIOA

- Funtsean **C + H** konposatuz, osatuta, era librean edo konbinatuan hidrokarburoetan (C_nH_m)
- **S** ehuneko txikietan
- **O** karbono- edo hidrogeno-atomoei atxikita edo egoera librean (aire-propano nahasteak)
- Inerteak: **hezetasuna, errautsak, CO_2** eta **N_2**

H • Gainazaleko hezetasuna (librea edo inhibiziokoa): erregaiaren **E** gainazalean atxikitako hezetasuna (*erregaiak galtzen duen hezetasuna, Z giro-tenperaturan edo laborategian lehortzen denean*); baldintza **E** atmosferikoen araberakoa da.

T • Berezko hezetasuna (higroskopikoa edo espezifikoa): erregaiaren **A** poroetan atxikitako hezetasuna, giro-hezetasunarekin orekan dagoena **S** (*erregaiak duen hezetasuna behin oreka lortuta, tenperatura $30\text{ }^\circ\text{C}$ denean eta U hezetasun erlatiboa % 96-97*); erregai jakin batentzat balio finkoa du.

N • Hezetasun totala: hezetasun librea / gainazalekoa + berezko hezetasuna **A** / higroskopikoa

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREGAIK.- KONPOSIZIOA

Erregai solidoak. Ikatza

→ “erregai den arroka sedimentarioa”

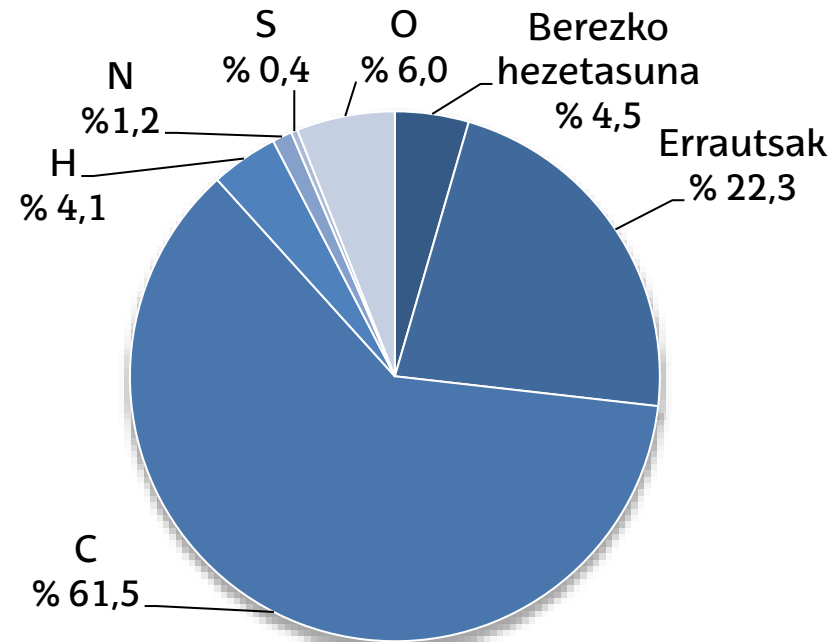
KONPOSIZIOA:

Nagusiki materia organikoz eratuta,
aldakorra eboluzio-mailaren eta
jatorriaren arabera

+

materia mineralak

C, H, S, N, O, hezetasun eta errauts-
kantitateak ehunekoan,
erreferentzia moduan 1 kg erregai
hartuta → % *PISUAN* (MASA)



**1.6. Irudia. Encasur (Ciudad Real)
harrikatzaren konposizioa (% pisan).
Egileek egindako analisisien
emaitzetatik prestatutako irudia**

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREGAIK.- KONPOSIZIOA

Erregai likidoak. Petrolioaren eratorriak (gasolina, gasolioa, fuel-olioa)

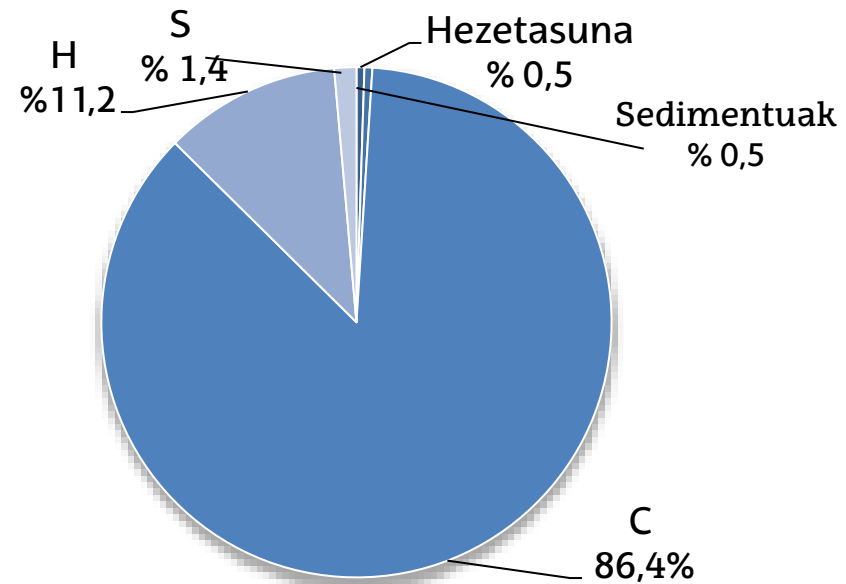
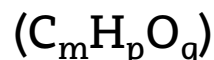
→ "funtsean C eta H konposatuak dituzten molekulen arteko nahastea"

KONPOSIZIOA:

C, H, S (proportzio txikietan) + O (proportzio txikietan) + N (proportzio txikietan) + V, Na, Ni ... (ppm-mailan) + hezetasuna (kanpoko jatorria duena)

C, H, S, N, O, hezetasun eta erraustekantitateak ehunekoan, erreferentzia moduan 1 kg edo 1 m³ erregai hartuta → % PISUAN (MASA)

Formula molekularren bidez



1.7. Fuel-olio baten konposizioa (% pisuan). Egileek egindako analisien emaitzetatik prestatutako irudia

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREGAIK.- KONPOSIZIOA

Erregai gaseosoak. Gas naturala, gas manufaturatuak

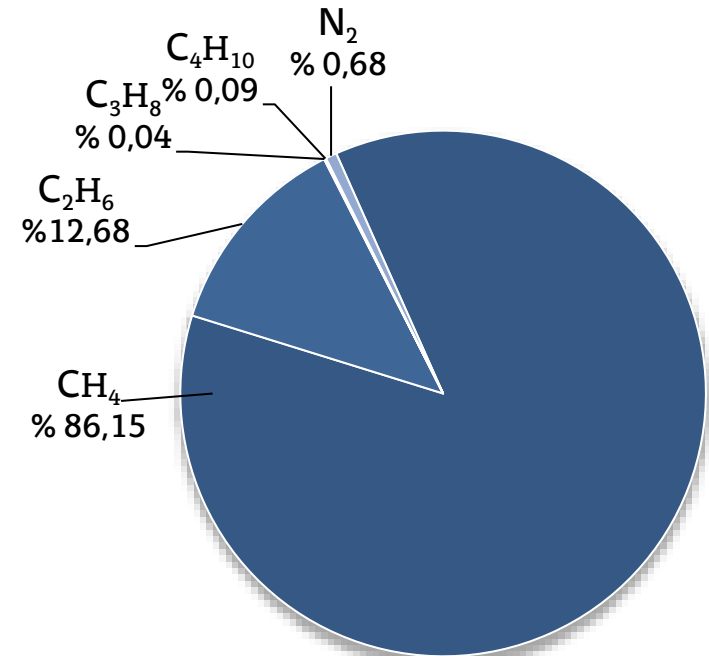
KONPOSIZIOA:

$H_2 + CO +$ hidrokarburo aseak (CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 , C_4H_{10}) + hidrokarburo asegabeak (C_2H_4 , C_3H_6 , C_4H_8) + bestelako hidrokarburoak (C_nH_m) + O (batzuetan, proportzio txikietan) + CO_2 , N_2 (batzuetan, proportzio txikietan)

Osagai bakoitzaren ehunekoak
bolumenean, erreferentzia moduan
1 $m^3 N$ erregai hartuta
→ % **BOLUMENEAN**

Formula molekularren bidez (C_nH_m)

1 $m^3 N$: m^3 baldintza normaletan
(b.n.: $0^\circ C$, 1 atm)



**1.8. Irudia. Gas naturalaren
konposizioa (% bolumenean).
Egileek egindako irudia ENAGAS
erakundeko datuetan oinarrituz
(Pulgar Díaz A. eta Olay Lorenzo,
M.R., 2008)**

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREGAIK- ERREGAIEN EZAUGARRIAK

BERO-AHALMENA → erregai baten masa- edo bolumen- unitatea erretzean (errekuntza osoa kontuan hartuz) askatzen den beroa (kcal/kg, kcal/m³, kcal/mol, kcal/L, kJ/kg, kJ/m³, kJ/mol, kJ/L eta eratorritako unitateetan neurtzen da).

Goiko Bero-Ahalmena (GBA): erregai baten masa- edo bolumen-unitate baten errekuntza osoan askatzen den beroa, errekuntzan askatzen den uraren kondentsazio-beroa kontuan hartzen denean.

Beheko Bero-Ahalmena (BBA): erregai baten masa- edo bolumen-unitate baten errekuntza osoan askatzen den beroa, errekuntzan askatzen den ur-lurruna kondentsatzen ez denean.

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREGAIK- ERREGAIEN EZAUGARRIAK

INFLAMAZIO-TENPERATURA (PUNTUA) (*flash point*) → erregai jakin baten errekontza gar osagarri baten laguntzaz iraunaraztea posiblea den temperatura, erregaiak lurrun erregai nahikoak askatzen baititu / Erregai jakin baten errekontza-erreakzioari hasiera emateko beharrezkoa den temperatura minimoa.

IGNIZIO-TENPERATURA (PUNTUA) → erregai jakin baten temperatura, inflamazio-tenperatura baino altuagoa, zeinean askatutako lurrun erregaien errekontza gertatzen den, gutxienez 5 segundotan, gar batekin kontaktuan jartzean / Erregai jakin baten errekontza-erreakzioan sortarazitako garra iraunkorra izateko beharrezkoa den temperatura, erregaia dagoen bitartean.

* **Errekuntza** gertatzeko **ignizio-tenperatura** lortzea beharrezkoa da
($T_{\text{ignizio}} \geq T_{\text{inflamazio}} + 20-60 \text{ } ^\circ\text{C}$)

ERREKUNTZAREN ELEMENTUAK

ERREKARIA (aireko oxigenoa)

1.2 Taula.- Aire lehorraren datuak (NASA webgunetik moldatua [4])

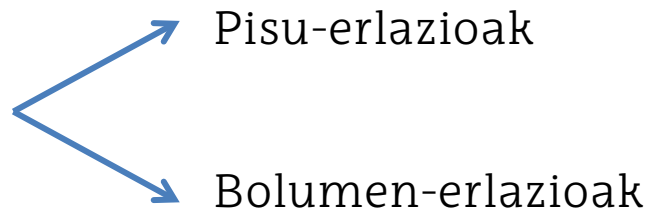
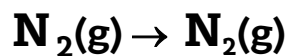
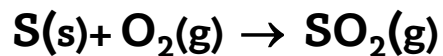
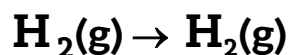
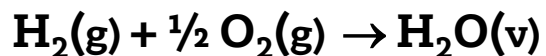
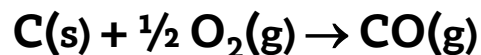
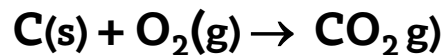
Osagaia	% bolumenean		% pisuan	
	Erreala	Erabilitakoa	Erreala	Erabilitakoa
N ₂	78,08	79,0	75,51	77,0
O ₂	20,95	21,0	23,14	23,0
Ar	0,93	0	1,28	0
CO ₂	0,04	0	0,06	0
Bestelakoak	aztarnak	0	aztarnak	0

$$79/21=3,76 \text{ (1 bol O}_2\text{; 3,76 bol N}_2\text{)}$$

$$\text{Pisu molekularra} = \frac{79 \text{ m}^3 \text{ N}_2}{100 \text{ m}^3 \text{ aire}} \cdot \frac{28 \text{ kg N}_2}{1 \text{ kmol N}_2} + \frac{21 \text{ m}^3 \text{ N O}_2}{100 \text{ m}^3 \text{ aire}} \cdot \frac{32 \text{ kg O}_2}{1 \text{ kmol O}_2} = 28,84 \frac{\text{kg aire}}{\text{kmol aire}}$$

$$1 \text{ kmol aire b.n. (0 }^\circ\text{C eta 1 atm): 22,4 m}^3\text{N} \quad \text{Dentsitatea} = \frac{28,84 \text{ kg/kmol}}{22,4 \text{ m}^3\text{N/kmol}} = 1,29 \text{ kg/m}^3\text{N}$$

ERREKUNTZA-ERREAKZIOEN ESTEKIOMETRIA



* Erabilitako pisu atomikoak

H-1

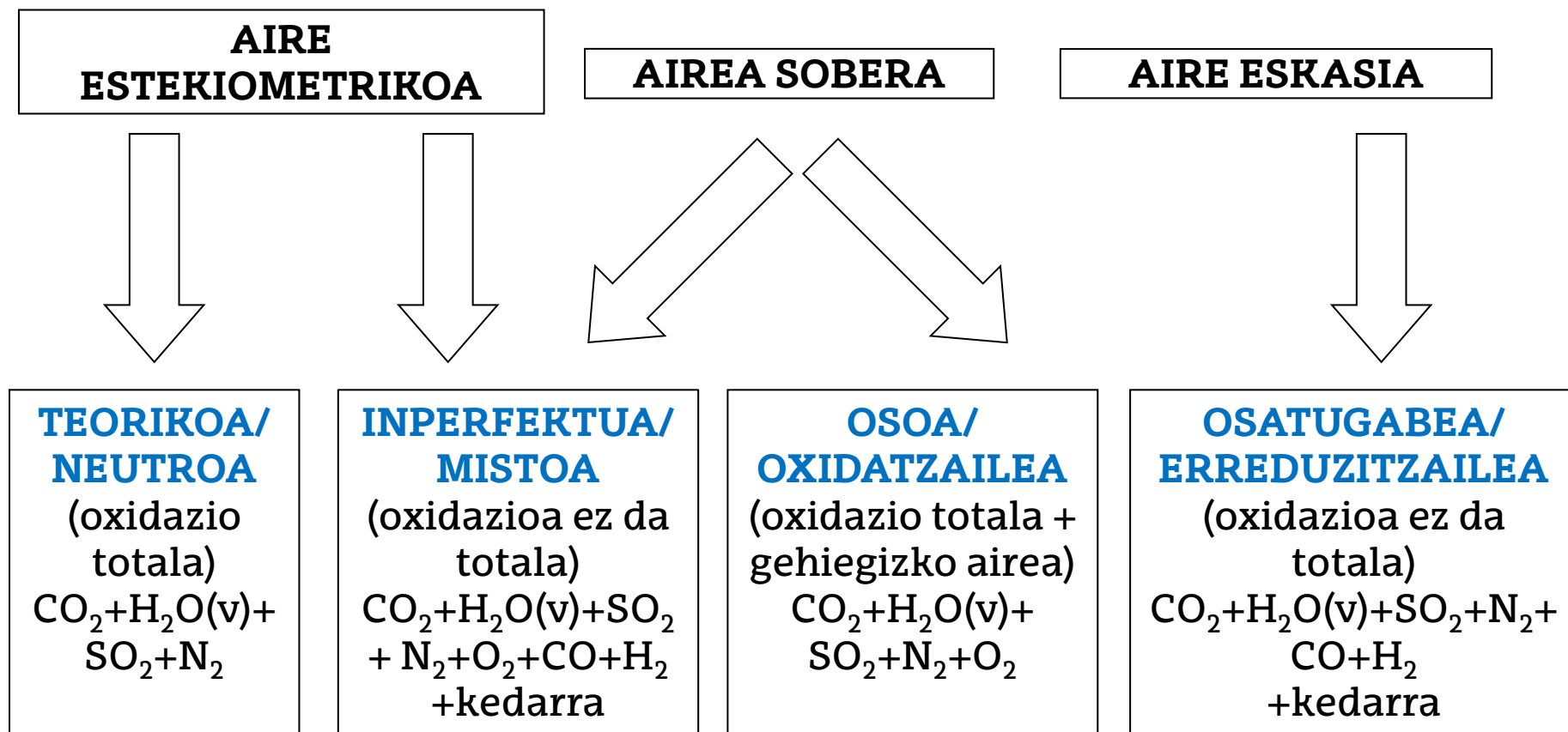
C-12

N-14

O-16

S-32

ERREKUNTZA-ERREAKZIO MOTAK



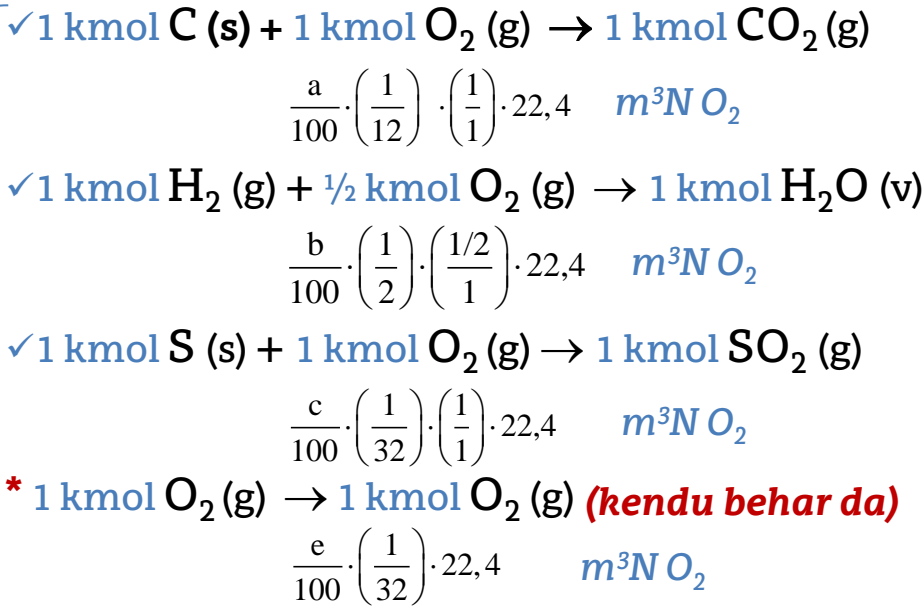
ERREKUNTZA-ERREAKZIO MOTAK

ERREKUNTZA TEORIKOA

ERREGAIAK (% pisuan) ⇒ AIRE TEORIKOA (bolumena- A_T) eta (pisua- A_P) lehorra eta b.n.

- C.....a%
- H.....b%
- S.....c%
- N.....d%
- O.....e%
- Hezetasuna..w%
- Errautsak.....z%

$\sum m^3 N O_2$ Oxigeno teorikoa (O_T)



$$A_T = O_T m^3 N O_2 \cdot \frac{100 m^3 N \text{ aire}}{21 m^3 N O_2}$$

$$(A_T) = \frac{22,4}{21} \left(\frac{a}{12} + \frac{b}{4} + \frac{c}{32} - \frac{e}{32} \right) m^3 N \text{ aire /kg erregai}$$

← O_2 (erregaia)

$$(A_P) = 1,29 \text{ kg/m}^3 N \cdot A_T m^3 N \text{ aire /kg erregai (kg aire / kg erregai)}$$



ERREKUNTZA-ERREAKZIO MOTAK

ERREKUNTZA TEORIKOA

ERREGAIAK (% pisuan) \Rightarrow ERREKUNTZA-GASAK (bolumena- V_T) eta (pisua- G_T) lehorrak eta b.n.

C.....a%	✓ 1 kmol C (s) + 1 kmol O ₂ (g) \rightarrow 1 kmol CO ₂ (g) $\frac{a}{100} \cdot \left(\frac{1}{12}\right) \cdot \left(\frac{1}{1}\right) \cdot 22,4 \text{ m}^3\text{N CO}_2$
H.....b%	
S.....c%	✓ 1 kmol S (s) + 1 kmol O ₂ (g) \rightarrow 1 kmol SO ₂ (g) $\frac{c}{100} \cdot \left(\frac{1}{32}\right) \cdot \left(\frac{1}{1}\right) \cdot 22,4 \text{ m}^3\text{N SO}_2$
N.....d%	
O.....e%	
Hezetasuna..w%	✓ 1 kmol N ₂ (g) \rightarrow 1 kmol N ₂ (g) $\frac{d}{100} \cdot \left(\frac{1}{28}\right) \cdot 22,4 \text{ m}^3\text{N N}_2$ (erregaia)
Errautsak.....z%	

$$V_{T(\text{LEHORRAK})} = \text{m}^3\text{N CO}_2 + \text{m}^3\text{N SO}_2 + \text{m}^3\text{N N}_2$$

$$V_T(\text{lehorrak}) = \frac{22,4}{100} \left(\frac{a}{12} + \frac{c}{32} + \frac{d}{28} \right) + \frac{79}{100} \cdot A_T \text{ m}^3\text{N errekontza-gasak} / \text{kg erregai}$$

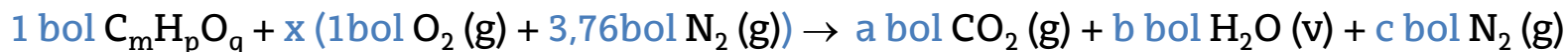
← N₂ (airea)

$$G_T(\text{lehorrak}) = \left(1 - \frac{z}{100} \right) + A_p - \frac{1}{100} (9b + w) \text{ kg errekontza-gasak} / \text{kg erregai}$$

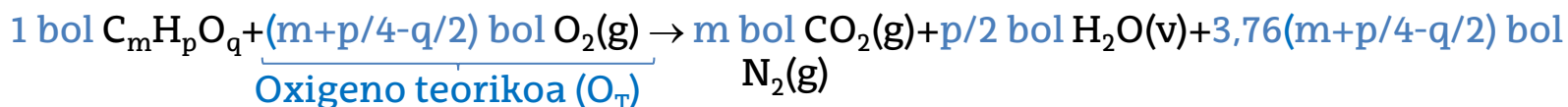
ERREKUNTZA-ERREAKZIO MOTAK

ERREKUNTZA TEORIKOA

ERREGAIK (formula molekularra) \Rightarrow AIRE TEORIKOA (bolumena- V_T) eta (pisua- G_T) lehorrak eta b.n.



$$\text{Masa-balantzea} \left\{ \begin{array}{l} \text{(C) } m=a; \text{ (H) } p=2b \rightarrow b=\frac{p}{2}; \text{ (N) } 3,76x=c \\ \text{(O) } q+2x=2a+b \rightarrow 2x=2a+b-q \rightarrow x=a\frac{b}{2} - \frac{q}{2} \rightarrow x=m+\frac{p}{4} - \frac{q}{2} \end{array} \right.$$



$$A_T = O_T \text{ m}^3 \text{N } O_2 \cdot \frac{100 \text{ m}^3 \text{N aire}}{21 \text{ m}^3 \text{N } O_2}$$

$$A_T = \frac{100}{21} \left[m + \left(\frac{p}{4} - \frac{q}{2} \right) \right] \text{ m}^3 \text{N aire/m}^3 \text{N erregai}$$

$$V_T (\text{LEHORRAK}) = m^3 \text{N } CO_2 + m^3 \text{N } N_2$$

\Rightarrow **ERREKUNTZA-GASAK (bolumena- V_T) eta (pisua- G_T) lehorrak eta b.n.**

$$V_{T(\text{LEHORRAK})} = m + 3,76 \left[m + \left(\frac{p}{4} - \frac{q}{2} \right) \right] \text{ m}^3 \text{N errekontza-gasak/m}^3 \text{N erregai}$$

ERREKUNTZA-ERREAKZIO MOTAK

ERREKUNTZA TEORIKOA

ERREGAIAK (% bolumenean) \Rightarrow AIRE TEORIKOA (bolumena- V_T) eta (pisua- G_T) lehorrak eta b.n.

CO.....a%

CO₂.....b%

H₂.....c%

CH₄.....d%

C_nH_m.....e%

N₂.....f%

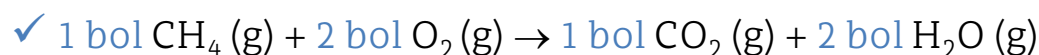
*O₂, bestelakoak....



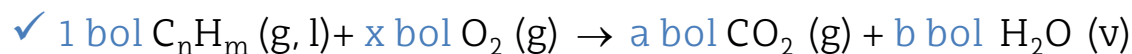
$$\frac{a}{100} \cdot \left(\frac{1/2}{1} \right) m^3 \text{N O}_2$$



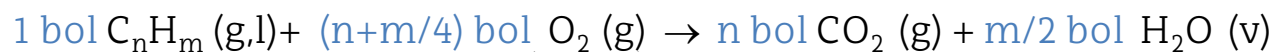
$$\frac{c}{100} \cdot \left(\frac{1/2}{1} \right) m^3 \text{N O}_2$$



$$\frac{d}{100} \cdot \left(\frac{2}{1} \right) m^3 \text{N O}_2$$



$$\left. \begin{array}{l} \text{Masa-} \\ \text{balantzea} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{(C) } n=a; \text{ (H) } m=2b \rightarrow b=\frac{m}{2}; \text{ (O) } 2x=2a+b \rightarrow 2x=2n+\frac{m}{2} \rightarrow x=n+\frac{m}{4} \end{array}$$



$$\frac{e}{100} \cdot \left(\frac{n+m/4}{1} \right) m^3 \text{N O}_2$$

$$\sum m^3 \text{N O}_2 = \text{Oxigeno teorikoa (O}_T\text{)}$$

$$A_T = O_T m^3 \text{N O}_2 \cdot \frac{100 m^3 \text{N aire}}{21 m^3 \text{N O}_2}$$

ERREKUNTZA-ERREAKZIO MOTAK

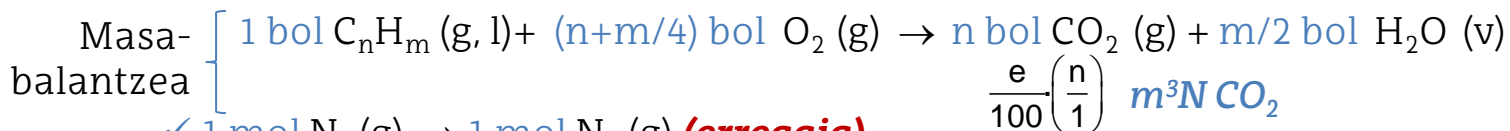
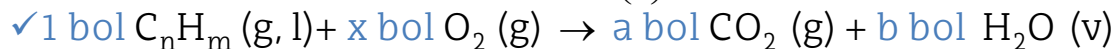
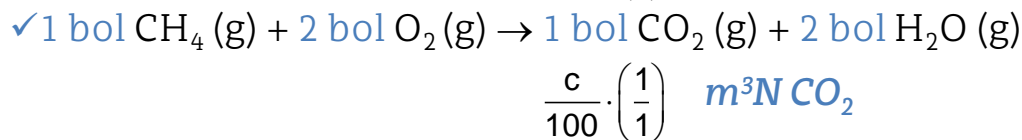
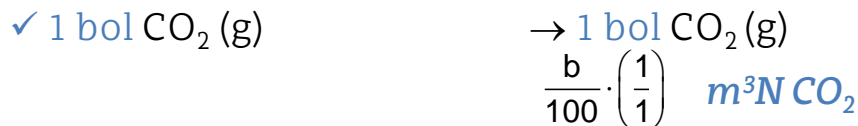
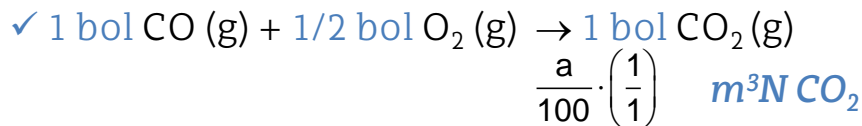
ERREKUNTZA TEORIKOA

ERREGAIAK (% bolumenean) \Rightarrow AIRE TEORIKOA (bolumena- V_T) eta (pisua- G_T) lehorrak eta b.n.

$$A_T = \frac{1}{21} \left[\frac{a}{2} + \frac{c}{2} + 2d + \left(n + \frac{m}{4} \right) e \right] \text{ m}^3\text{N aire/m}^3\text{N erregai}$$

$$A_p = 1,29 \text{ kg/m}^3\text{N} \cdot A_T \text{ m}^3\text{N aire/m}^3\text{N erregai (kg aire/m}^3\text{N erregai)}$$

\Rightarrow **ERREKUNTZA-GASAK (bolumena- V_T) ETA (pisua- G_T)** lehorrak eta b.n.



$$\frac{f}{100} \cdot \left(\frac{1}{1} \right) \text{ m}^3\text{N N}_2$$

ERREKUNTZA-ERREAKZIO MOTAK

ERREKUNTZA TEORIKOA

ERREGAIAK (% bolumenean) \Rightarrow AIRE TEORIKOA (bolumena- V_T) eta (pisua- G_T) lehorrak eta b.n.

$$V_{T(\text{LEHORRAK})} = m^3\text{N CO}_2 + m^3\text{N N}_2$$

$$V_{T(\text{LEHORRAK})} = \frac{a + b + d + n \cdot e + f + 79 \cdot A_T}{100} \quad \begin{array}{l} m^3\text{N errekontza-gasak} / m^3\text{N erregai} \\ \leftarrow \text{N}_2 \text{ (airea)} \end{array}$$

$$G_{T(\text{LEHORRAK})} = \frac{44(a + b + d + n \cdot e) + 28(f + 79 \cdot A_T)}{22,4 \cdot 100} \quad \begin{array}{l} \text{kg errekontza-gasak} / m^3\text{N erregai} \\ \leftarrow \text{N}_2 \text{ (airea)} \end{array}$$

ERREKUNTZA-ERREAKZIO MOTAK

ERREKUNTZA OXIDATZAILEA

AIREAREN GEHIEGIZKO KOEFIZIENTEA (GEHIEGIZKO AIREA) "n"

$$"n" = \frac{A_o}{A_T} = \frac{\text{Erabilitako airea}}{\text{Aire teorikoa}} \rightarrow "n" > 1$$

GASAK \rightarrow CO₂, H₂O, SO₂, N₂, O₂ (gehiegizko airea)

$$A_o = n \cdot A_T \text{ (bolumenean)}$$

$$A_o = n \cdot A_p \text{ (pisuan)}$$

$$V_{o(\text{lehorrak})} = V_T + (n-1) \cdot A_T \text{ (bolumenean)}$$

$$G_{o(\text{lehorrak})} = G_T + (n-1) \cdot A_p \text{ (pisuan)}$$

1.3 Taula.- Airearen gehiegizko koefizientearentzat (n) gomendaturiko balioak

Erregai	"n"
Solida	1,4-2,5
Likido	1,2-1,6
Gasa	1,1-1,4

ERREKUNTZA-ERREAKZIO MOTAK

ERREKUNTZA OSATUGABEA. ERREKUNTZA INPERFEKTUA

⇒ Aire eskasia: **ERREKUNTZA OSATUGABEA / ERREDUZITZAILEA** ($n < 1$)

GASAK → CO₂, H₂O, SO₂, N₂, CO, H₂ + kedarra / partikulak

⇒ Prozesu industrialaren mugak: **ERREKUNTZA INPERFEKTUA / MISTOA**

GASAK → CO₂, H₂O, SO₂, N₂, CO, H₂, O₂ (aire soberakina) + kedarra / partikulak