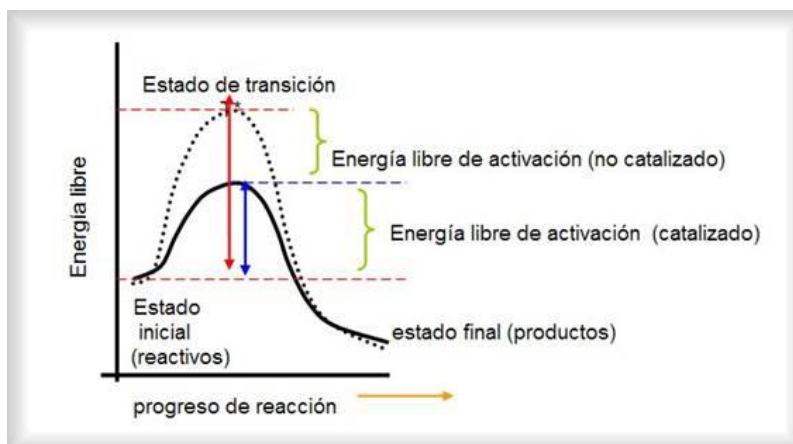


11 TERMOQUÍMICA



11.1 SISTEMA



Figura 1: El sistema

Sistema es una parte pequeña del universo que se aísla para someterla a estudio.

El resto se denomina ENTORNO.

Pueden ser:

- Abiertos (intercambia materia y energía con el entorno).
- Cerrados (no intercambia materia y sí energía).
- Aislados (no intercambia ni materia ni energía).

En las reacciones químicas:

SISTEMAS = Conjunto de Sustancias químicas (reactivos y productos)

11.2 DEFINICIÓN DE TERMOQUÍMICA

Es la parte de la Química que se encarga del estudio del intercambio energético de un sistema químico con el exterior.

Hay sistemas químicos que evolucionan de reactivos a productos desprendiendo energía. Son las reacciones exotérmicas.

Otros sistemas químicos evolucionan de reactivos a productos absorbiendo energía. Son las reacciones endotérmicas.

VIDEO

[Termoquímica](#)

11.3 VARIABLES DE ESTADO

Son magnitudes que pueden variar a lo largo de un proceso (por ejemplo, en el transcurso de una reacción química)

Ejemplos:

- Presión.
- Temperatura.
- Volumen.
- Concentración.

11.4 FUNCIONES DE ESTADO

Son variables de estado que tienen un valor único para cada estado del sistema.
Su variación sólo depende del estado inicial y final y no del camino desarrollado.
Son funciones de estado: Presión, temperatura, energía interna, entalpía.
NO lo son: calor, trabajo.

11.5 CAPACIDAD CALORÍFICA

Es la cantidad de energía necesaria para aumentar 1K la temperatura de una sustancia.
La Capacidad Calorífica © de una sustancia es una magnitud que indica la mayor o menor dificultad que presenta dicha sustancia para experimentar cambios de temperatura bajo el suministro de calor. Puede interpretarse como un efecto de Inercia Térmica.
Está dada por la ecuación:

$$C = Q/T \text{ [J/K]}$$

Donde C es la capacidad calorífica, Q es el calor y T la variación de temperatura.
Se mide en joules por kelvin (unidades del SI).
La capacidad calorífica © va variando según la sustancia.
Su relación con el calor específico es:

$$C = c * m$$

En donde c es el calor específico, y m la masa de la sustancia considerada.
Igualando ambas ecuaciones, procedamos a analizar:

$$Q/T = c * m$$

De aquí es fácil inferir que aumentando la masa de una sustancia, aumentamos su capacidad calorífica, y con ello aumenta la dificultad de la sustancia para variar su temperatura. Un ejemplo de esto se puede apreciar en las ciudades costeras donde el mar actúa como un gran termostato regulando las variaciones de temperatura.

VIDEO

[Capacidad calorífica del agua](#)

PRÁCTICA

[Ejercicios de calor. Cantidad de calor](#)

11.6 CALOR ESPECÍFICO

El calor específico o capacidad calorífica específica, c, de una sustancia es la cantidad de calor necesaria para aumentar su temperatura en una unidad por unidad de masa, sin cambio de estado:

En donde c es el calor específico, Q es la cantidad de calor, m la masa y ΔT la diferencia entre las temperaturas inicial y final.

Su unidad en el sistema SI es el julio por kilogramo y kelvin, cuya notación es J/(kg•K). También se usa bastante la unidad del sistema técnico, la kilocaloría por kilogramo y grado Celsius y su notación es: kcal/kg°C.

También existe la capacidad calorífica molar que se relaciona con el calor específico como: De ahí se deduce una fórmula para el calor intercambiado dependiente del número de moles (n) en vez de la masa (m).

Las unidades de calor específico en SI es el joule por mol y kelvin, cuya notación es J/(mol•K)

VIDEO

[Calor Específico](#)

PRÁCTICA

[Ejercicios de calor específico](#)

[Ejercicios de temperatura y cantidad de calor](#)

Cálculo de cambios de la Energía

Energía en el laboratorio es más fácil de medir en forma de calor. Como se puede ver en la manifestación en relación con el calor y la temperatura, la cantidad de calor transferido se puede determinar fácilmente por los cambios en la temperatura del entorno. Cuando una sustancia sufre un cambio de temperatura sin fase, químico o nuclear que ocurra el cambio, tres factores que determinan la cantidad de calor (Q) una sustancia absorbe. Los tres factores son:

- 1) la masa de la sustancia (m).
- 2) Capacidad de calor específico de la sustancia (una medida de cuánta energía absorbe la sustancia para cambiar la temperatura 1 ° C).
- 3) los cambios de temperatura que sufre el fondo (Δ T).

Fórmula de cálculo de calor

Los factores antes mencionados tienen una relación directa con la cantidad de calor transferido. Por lo tanto la siguiente fórmula puede ser desarrollada para el *cálculo de calor cuando se produce un cambio de temperatura* (sin fase, químicas o nucleares cambian sucede).

$$Q = m * c * \Delta T$$

El calor (Q): se mide en Joules.

Masa (m): medido en gramos

Suministro de energía (c): se medirá en J / g * ° C

Cambio de temperatura (Δ T): mide en ° C

Ejemplos de cálculo de calor (sin fase, cambio químico o nuclear)

Ejemplo: ¿Cuánto calor, en joules es absorbida por 300 gramos de agua, si el cambio de temperatura que sufre el agua es de 15 ° C? (El calor específico del agua es de 4,19 J / g * ° C.)

Respuesta:

1) Registrar la información dada:

masa de agua = 300 gramos

cambio de temperatura en el agua = 15 ° C

calor específico = 4,19 J / g * ° C

2) Determinar la información requerida:

Cantidad de calor en joules

3) Analizar el problema, hacer un plan

Para resolver el calor se multiplica la masa en gramos con el cambio de temperatura en ° C y la capacidad de calor específico.

4) Aplicar la fórmula y resolver cuestiones.

$$Q = (300 \text{ g}) * (4.19 \text{ J / g * } ^\circ \text{ C}) * (15 ^\circ \text{ C})$$

$$Q = 18.855 \text{ J o } 19 \text{ kJ}$$

5) la respuesta del Estado

El calor absorbido fue de 19 kJ

11.7 CALOR LATENTE

Se denomina calor latente de cambio de estado a la energía que hay que comunicar a 1 kg de una sustancia para que cambie de estado. Esta energía no se emplea en aumentar la

velocidad de las partículas del cuerpo, sino en modificar las fuerzas de atracción entre sus partículas que son diferentes en un estado y en otro.

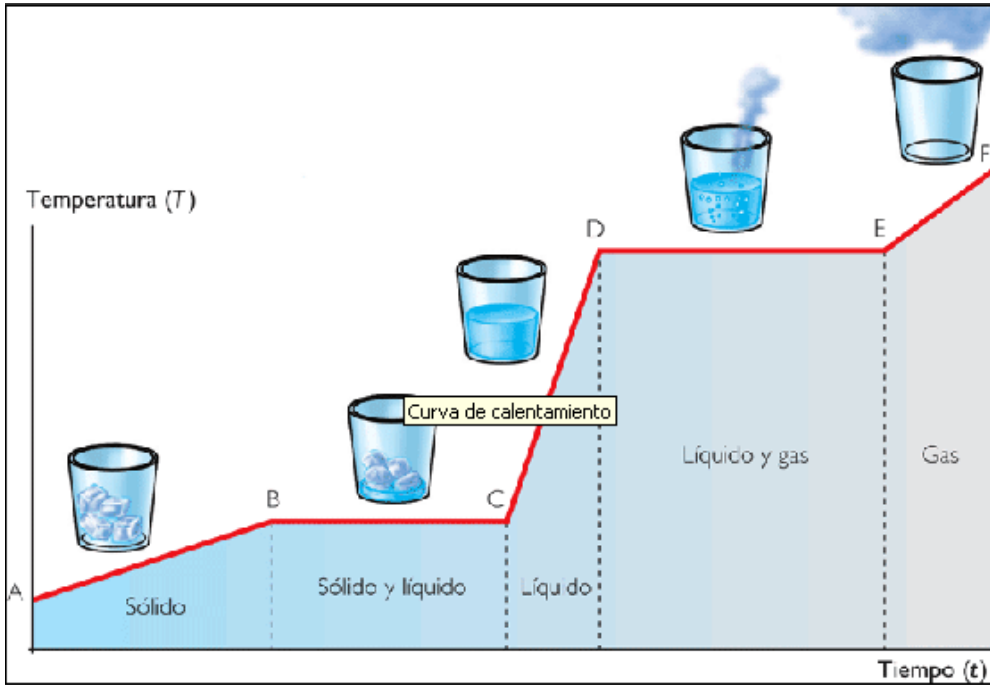


Figura 2: Curva de calentamiento de una sustancia

Ejemplo: 5) ¿Cuántas calorías requiere un bloque de hielo de 40 kg a -20°C para pasar, a presión atmosférica normal, al estado:

- líquido a 40°C .
- vapor a 100°C .
- vapor a 182°C

(Considere $H_f = 80 \text{ cal/g}$; $H_v = 540 \text{ cal/g}$ y $c_{\text{hielo}} = 0,5 \text{ cal/g}^{\circ}\text{C}$, $c_{\text{agua líquida}} = 1 \text{ cal/g}^{\circ}\text{C}$, $c_{\text{vapor}} = 0,48 \text{ cal/g}^{\circ}\text{C}$)

$q_1 =$ calentamiento del hielo desde -20°C a 0°C

$$q_1 = m \cdot c \cdot \Delta t = 40.000 \text{ g} \cdot 0,5 \frac{\text{cal}}{\text{g}^{\circ}\text{C}} \cdot (0 - (-20)^{\circ}\text{C}) = 400.000 \text{ cal}$$

$q_2 =$ fusión del agua a 0°C

$$q_2 = 40.000 \text{ g} \cdot 80 \text{ cal/g} = 3.200.000 \text{ cal}$$

$q_3 =$ calentamiento del agua desde líquido a 0°C a 40°C

$$q_3 = 40.000 \text{ g} \cdot 1 \frac{\text{cal}}{\text{g}^{\circ}\text{C}} \cdot (40 - 0^{\circ}\text{C}) = 1.600.000 \text{ cal}$$

a). Total de energía de calentamiento del agua desde -20°C a 40°C = $q_1 + q_2 + q_3 = 5.200.000 \text{ cal}$

$q_4 =$ calentamiento desde agua líquida 0°C a líquida a 100°C

$$q_4 = 40.000 \text{ g} \cdot 1 \frac{\text{cal}}{\text{g}^{\circ}\text{C}} \cdot (100 - 0^{\circ}\text{C}) = 4.000.000 \text{ cal}$$

$q_5 =$ evaporación del agua a 100°C

$$q_5 = 40.000 \text{ g} \cdot 540 \text{ cal/g} = 21.600.000 \text{ cal}$$

b). Total de energía desde hielo a -20°C a vapor a 100°C = $q_1+q_2+q_4+q_5= 29.200.000 \text{ cal}$

$q_6=$ calentamiento desde vapor a 10°C a vapor a 182°C

$$q_6 = 40.000 \text{ g} * 0.48 \frac{\text{cal}}{\text{g}^{\circ}\text{C}} * 82^{\circ}\text{C} = 1.574.400 \text{ cal}$$

c). Total de energía dese hielo a -20°C a vapor a 182°C = $q_1+q_2+q_4+q_5+q_6= 30.774.400\text{cal}$

VIDEO

[Calor específico de fusión y vaporización del agua](#)

PRÁCTICA

[Ejercicios de calor latente](#)

[Ejercicios calor latente 1](#)

11.8 LEY DE HESS

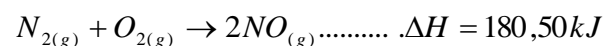
Para medir el calor absorbido por un sistema durante un proceso a presión constante se utiliza la entalpía (H). Lo que en realidad medimos es el cambio de entalpía (ΔH), que se define como la diferencia entre la entalpía de los reactivos y la entalpía de los productos $\Delta H = H(\text{productos}) - H(\text{reactivos})$.

Hay dos métodos para calcular el cambio de entalpía de una reacción; uno es directo y el otro es indirecto, también conocido como Ley de Hess. Método directo Se utiliza para calcular la entalpía de una reacción tipo $aA + bB \rightarrow cC + dD$. Se puede calcular si se conocen los valores de entalpía estándar de formación de todos los reactivos y de todos los productos, utilizando la fórmula: $\Delta H_r = [c \Delta H_f(C) + d \Delta H_f(D)] - [a \Delta H_f(A) + b \Delta H_f(B)]$. Ejemplo: Método indirecto o Ley de Hess Se utiliza cuando los compuestos no se pueden sintetizar directamente a partir de sus elementos.

La ley de Hess dice lo siguiente: " Cuando los reactivos se convierten en productos, el cambio de entalpía es el mismo independientemente de que la reacción se realice en un paso o en una serie de pasos " El método es el siguiente: 1. Utilizar una reacción a la vez 2. Multiplicar o dividir para que el compuesto de la reacción auxiliar sea igual al de la reacción problema 3. Sumar y simplificar.

Cálculo ΔH , utilizando la Ley de Hess

$1 \Delta H$ es una propiedad extensiva. Considere la variación de entalpía de formación de $\text{NO}(\text{g})$ a partir de los elementos a 25°C .

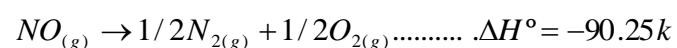


Para expresar la variación de entalpía referida a un mol de $\text{NO}(\text{g})$, se dividen todos los coeficientes y el valor de ΔH por dos.

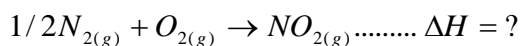


La variación de entalpía es directamente proporcional a la cantidad de sustancias de un sistema.

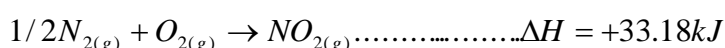
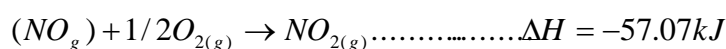
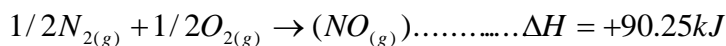
$2\Delta H$ cambia de signo cuando se invierte un proceso. Si invertimos un proceso la variación de una función de estado cambia sus signo. Así ΔH de la descomposición de un mol de $\text{NO}(\text{g})$ es $-\Delta H$ de la formación de un mol de $\text{NO}(\text{g})$.



3 Ley de Hess de la suma de calores constantes. Para describir la variación de entalpía de la formación de $NO_{2(g)}$ a partir de $N_{2(g)}$ y $O_{2(g)}$.



Se puede considerar la reacción como si tuviere lugar en dos etapas: primero la formación de NO(g) a partir de $N_{2(g)}$ y $O_{2(g)}$ y después la formación de $NO_{2(g)}$ a partir de NO(g) y $O_{2(g)}$. Cuando sumamos las ecuaciones de estas dos etapas, junto con los valores individuales y característicos de ΔH , obtenemos el valor neto de ΔH que estamos buscando.



Si un proceso transcurre en varias etapas, la variación de entalpía del proceso global (neto) es la suma de las variaciones de entalpía de las etapas individuales.

Procedimiento:

Cálculo de los calores de reacción utilizando la ley de Hess

- 1) Escribe la ecuación global para la reacción
- 2) Manipular las ecuaciones dadas para que se sumen a la ecuación general.
- 3) Suma las ecuaciones de cancelación de las sustancias comunes en reactivos y productos.
- 4) Suma los calores de los pasos = calor de reacción global.

VIDEO

[Ley de Hess](#)

PRÁCTICA

[Ejercicios ley de Hess](#)

[Ejercicios ley de Hess 1](#)

11.9 ENTALPÍA DE COMBUSTIÓN

Entalpía de combustión (H_c) de un compuesto es el calor desprendido en la reacción de combustión completa de un mol de compuesto con oxígeno molecular.

Cálculo de los cambios calor.

Para calcular el calor absorbido o liberado, podemos utilizar la siguiente fórmula.

$$Q = n * \Delta H \text{ sustancia}$$

El calor liberado o absorbido durante la reacción = Q

Número de moles = n

Entalpía molar (cambio de entalpía por mol) de la sustancia en la reacción = ΔH sustancia

La entalpía molar de muchas sustancias en ciertas reacciones han sido determinados por los químicos y registrado en las tablas como la siguiente. (Estas tablas se pueden encontrar en muchos manuales o libros de texto)

Por ejemplo:

1) La vaporización (cambio de fase de líquido a gas) de la sustancia o

2) Fusión (cambio de fase de sólido a líquido) de la sustancia.

Sustancia	Fórmula	$\Delta_{\text{vap}} H$ (kJ / mol)	$\Delta_{\text{fus}} H$ (kJ / mol)
Amoníaco	NH ₃	+ 23.3	+ 5.66
Etanol	C ₂ H ₅ OH	+ 38.6	+ 4.94
El metanol	CH ₃ OH	+ 35.2	+ 3.22
Agua	H ₂ O	+ 40.7	+ 6.01

3) La combustión (quema de sustancia presente en el oxígeno para producir dióxido de carbono y agua) de la sustancia.

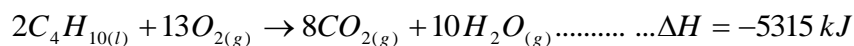
Sustancia	Fórmula	$\Delta_{\text{c}} H_{\text{c}} = \text{kJ/molg}$
De carbono (grafito)	C	- 394
Etanol	C ₂ H ₅ OH	- 1367
Glucosa	C ₆ H ₁₂ O ₆	- 2800
Hidrógeno	H ₂	- 286
Metano	CH ₄	- 891
El metanol	CH ₃ OH	- 726
Propano	C ₃ H ₈	- 2219

4) Para las demás materias en las reacciones donde entalpias molares no se registran podemos utilizar el siguiente procedimiento para calcularlos.

Para determinar el $\Delta_{\text{c}} H_{\text{c}}$ (kJ / mol) cuando se les da una ecuación sólo tenemos que dividir el ΔH dada por la ecuación por el equilibrio de la sustancia.

Pregunta:

¿Cuál es la entalpía molar de CO₂ (g) en la reacción de la combustión de butano de abajo?



Respuesta:

La entalpía molar es el cambio de entalpía en la ecuación dividido por el equilibrio de CO₂ (g)

La entalpía molar es $\Delta H = 5315 \text{ kJ}_{\text{sustancia}} \div 8 \text{ mol} = 664 \text{ kJ / mol}$.

Procedimiento

Para resolver los cálculos de entalpía utilizando el método de la ecuación que tenemos que hacer lo siguiente:

- 1) Determinar la información dada.
- 2) Calcular el fondo de moles # y la entalpía molar de la ecuación, o la tome de una tabla

de valores, si es necesario.

3) Incluya valores en la ecuación y calcular el valor faltante

Pregunta:

¿Cuánto calor se otorgará si 65 gramos de butano se quema en un mechero de acuerdo a la ecuación en el ejemplo anterior.

Respuesta:

1) Teniendo en cuenta

65 gramos de butano

$\Delta_{\text{reacción}} H = 5315 \text{ kJ}$

2) Calcular el número de moles de butano

masa de butano \div (peso molecular del butano)

65 gramos \div 58,14 g / mol = 1,12 moles

b) entalpía molar

5315 kJ mol \div 2 C₄H₁₀ = 2657,5 kJ / mol

3) Utilizar los valores en la ecuación.

$Q = n * \Delta H \text{ sustancia}$

$Q = 1,12 \text{ mol} * 2657,5 \text{ kJ / mol} = 2976,4 \text{ kJ}$

Teniendo en cuenta las cifras significativas = 3,0 MJ

VIDEO

[Entalpía de combustión](#)

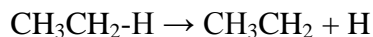
PRÁCTICA

[Ejercicios de calorimetría](#)

[Ejercicios entalpías de combustión](#)

11.10 ENERGÍA DE DISOCIACIÓN DE ENLACE

En química, la energía de disociación de enlace, D_0 , es una medida de la fuerza de enlace en un enlace químico. Se define como el cambio de entalpía estándar cuando se rompe un enlace por homólisis, con los reactivos y productos de la reacción de homólisis a 0K (cero absoluto). Así, la energía de disociación de enlace de uno de los enlaces C-H en el etano (C₂H₆) está definido por el proceso:



$$D_0 = \Delta H = 101,1 \text{ kcal/mol} (423.0 \text{ kJ/mol})$$

La energía de disociación de enlace también se conoce como entalpía de disociación de enlace (o entalpía de enlace), pero estos términos no son estrictamente correctos, puesto que se refieren a la entalpía de la reacción anterior en condiciones estándar, y pueden diferir de D_0 en más de 3 kcal/mol (12 kJ/mol).

La energía de disociación de enlace suele ser diferente a la energía de enlace, que es calculada a partir de la suma de las energías de disociación de enlace de todos los enlaces en una molécula.

Por ejemplo, un enlace O-H de la molécula de agua (H-O-H) tiene una energía de disociación de enlace de 493,4 kJ/mol, y se necesita 424,4 kJ/mol para romper el enlace O-H restante. La energía de enlace de los enlaces O-H en el agua es 458,9 kJ/mol, que es la media de los valores.

En la misma forma, la remoción sucesiva de los átomos de hidrógeno del metano tiene energías de disociación de enlace que son: 104 kcal/mol (435 kJ/mol) para D(CH₃-H), 106 kcal/mol (444 kJ/mol) para D(CH₂-H), 106 kcal/mol (444 kJ/mol) para D(CH-H) y finalmente 81 kcal/mol (339 kJ/mol) para D(C-H). En consecuencia, la energía de enlace es 99 kcal/mol o 414 kJ/mol (la media de las energías de disociación de enlace).

Obsérvese que si después de la disociación se forman nuevos enlaces a menor entalpía, habrá una pérdida neta de energía, y el proceso global será exotérmico.

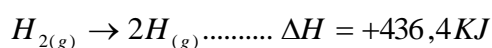
La energía de disociación heterolítica de enlace está involucrada en la ruptura de enlaces químicos por heterólisis.

Tabla 3: Energías promedio disociación Energías de enlace

Enlace	Energía (kJ / molg)	Enlace	Energía (kJ / molg)
H - H	436	N - N	160
C - H	413	N = O	631
N - H	393	N triples N	941
P - H	297	N - O	201
C - C	347	N - P	297
C - O	358	O - H	464
C - N	305	O - S	265
C - Cl	397	O - Cl	269
C = C	607	O - O	204
C = O	805	C - F	552
O = O	498	C - S	259

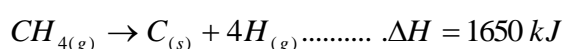
Por ejemplo:

a) La disociación de hidrógeno (gas de hidrógeno cada 2 átomos de hidrógeno por separado).



La disociación de enlace de H – enlace H es 436,2 kJ.

b) La energía de enlace de un enlace C – H se determina mediante el examen de muchas reacciones en las que los hidrocarburos como el gas metano se dividen en átomos de carbono e hidrógeno



Cuatro enlaces C – H tiene que ser rotos, la energía promedio de cada carbono es + 412.5 kJ. *Se trata de valores medios, excepto para los gases diatómicos como el hidrógeno.*

Aplicación de la energía de disociación de enlace a la ley de Hess

La Ley de Hess utilizando la fórmula energías de enlace

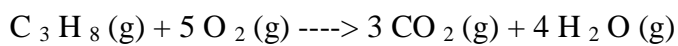
$$\Delta H = \sum \text{energía.enlaces.rotos} - \sum \text{energía.enlaces..formados}$$

$$\Delta H = \sum \text{energía.enlace.reactivos} - \sum \text{enenrgía.enlace..productos}$$

$$\Delta H = \sum \text{energía..proporcionada} - \sum \text{energía.liberada}$$

Cálculo ΔH , utilizando las energías de enlace.

Ejemplo: Calcular la energía de la reacción a la quema de metano con oxígeno para formar dióxido de carbono gaseoso y agua gaseosa, con los calores de formación. La ecuación balanceada es la siguiente. Utilice la siguiente lista de energías de enlace



Los pasos 1 y 2

- 1) Determinar el número y tipos de enlaces rotos y formados.
- 2) Determinar la variación de energía

Enlaces rotos (reactivos)			
Tipo	#	Bond Energía	Energía
C - C	2	347 kJ / mol	+ 694 kJ
C - H	8	413 kJ / mol	+3320 kJ
O = O	5	498 kJ / mol	+2490 kJ
Total			6488 kJ
Enlaces formados (los productos)			
O - H	8	464	- 3.712 kJ
C = O	6	805	- 4.830 kJ
Total			- 8.542 kJ

Paso 3)

$\Delta H = \text{Energía de los Bonos Roto} - \text{Energía de los Bonos formado}$

$$\Delta H = 6.488 \text{ kJ} - 8542 \text{ kJ}$$

$$\Delta H = - 2.054 \text{ kJ}$$

Los cálculos utilizando Calorimetría

- a) Fórmula para el cálculo de la entalpía molar ($\Delta H_{\text{sustancia}}$).

$$\Delta H = \frac{m * c * \Delta t}{n}$$

En los cálculos de entalpía molar, utilizando la técnica de calorimetría que el experimentador tiene que determinar lo siguiente:

- 1) la masa de la sustancia (m) en los alrededores (calorímetro).
- 2) Capacidad de calor específico de la sustancia (c) que rodea el sistema.
- 3) los cambios de temperatura en los alrededores (Δt).
- 4) moles de sustancia (n) en el sistema (la reacción que se produce).

Cálculo del entalpía molar

Ejemplo: Calcular la entalpía molar de la reacción si al 0,25 moles de una sustancia se hace reaccionar el calor produce un aumento de la temperatura $^{\circ}\text{C}$ 4,5 en 325 ml de agua en un calorímetro taza de café.

1) *Registrar la información dada.*

- a) de la sustancia moles = 0,25 moles
- b) masa de la sustancia en un entorno = 325 ml = 325 g
- c) los cambios de temperatura = 4,5 C
- d) La capacidad de calor específico del agua es 4,19 J / g $^{\circ}\text{C}$

2) *Determinar la información requerida.*

Entalpía molar

3) *Analizar del problema y hacer un plan para resolver la entalpía molar.*

$$\Delta H = \frac{m * c * \Delta t}{n}$$

4) Aplicar la fórmula y resolver el problema

$$\Delta H = \frac{325 \text{ g} * 4,19 \text{ g} / \text{J} * 4,5^\circ \text{C}}{0,25 \text{ mol}}$$

$$\Delta_{\text{sustancia}} H = 24.511,5 \text{ J} / \text{mol}$$

5) respuesta del Estado.

La entalpía molar de la sustancia es de 24,5 kJ / mol

Otros métodos de cálculo de los calores de reacción utilizando la ley de Hess.

a) Con los calores de formación

El cálculo de los ΔH , utilizando la ley de Hess y ecuaciones lleva mucho tiempo y es algo difícil. Hay otra manera de encontrar el ΔH de una reacción, mediante lo que se llama calores de formación. Examine el diagrama de un cambio de energía en el transcurso de una reacción que se muestra a continuación.

Cálculo ΔH con los calores de formación

El ΔH de la reacción es la diferencia entre el calor total de los productos y la de los reactivos.

$$\Delta H = \text{Calor de Productos} - \text{Calor de Reactivos}$$

Los químicos se puede calcular el calor total de reactivos y productos que utilizan lo que se denominan Los calores de formaciones. El calor de formación de un compuesto es la cantidad de calor necesaria para formar el compuesto a partir de sus elementos.

Para calcular el calor del reactivo o producto de las sustancias en una ecuación se *multiplican los moles de cada sustancia (en la ecuación química) por el calor de formación de dicha sustancia*

Los calores de formaciones de diversas sustancias se encuentran en una tabla de calores de formación, a los calores de formación se les da el símbolo ΔH_f .

Nota: Los calores de formación de los elementos son cero y que no aparecen a menudo en estas tablas.

b) Formula la ley de Hess con los calores de formación.

El calor de la reacción global es la suma de los calores de los productos menos la suma de los calores de los reactivos.

$$\Delta H = \sum H_f(\text{productos}) - \sum \Delta H_f(\text{reactivos})$$

Ejemplo: Calcular el ΔH , de la siguiente reacción con los calores de formaciones

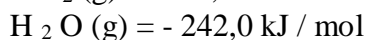
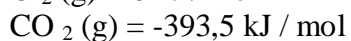
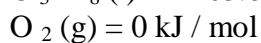
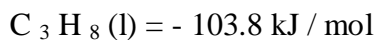


Respuesta:

Paso 1: Balancear la ecuación



Paso 2: Localizar los calores de formación utilizando una tabla de calores de formación.



Paso 3: Registre los valores en la fórmula y calcular respuesta.

$$\Delta H = \sum H_f(\text{productos}) - \sum \Delta H_f(\text{reactivos})$$

$$\Delta H = [(3 * -393,5 \text{ kJ/mol}) + (4 * -242,0 \text{ kJ/mol})] - [(1 * -103,8 \text{ kJ/mol}) + (5 * 0 \text{ kJ/mol})]$$

$$\Delta H = -2044,7 \text{ kJ}$$

Tabla 4: Calores de formación en kJ/mol

Compuestos inorgánicos	ΔH_f^0	Compuestos orgánicos	ΔH_f^0
H ₂ O(g)	-242,0	Metano	-74,9
H ₂ O(l)	-285,8	Etano	-84,7
HF(g)	-268,6	Atileno	+52,3
HCl(g)	-92,3	Etino	+226,8
NaCl(s)	-411,0	Propano	-103,8
CaO(s)	-635,1	n-Butano	-124,7
CaCO ₃ (s)	-1206,9	n-Hexano	-167,2
CO(g)	-110,5	Benceno	+49,0
CO ₂ (g)	-393,5	Metanol	-238,6
NO(g)	+90,4	Etanol	-277,6
NH ₃ (g)	-46,2	Ac. fórmico	-409,2
SO ₂ (g)	-296,1	Ac. acético	-487,0
SO ₃ (g)	-395,2	Cloroformo	-131,8

VIDEO

[Calorimetría](#)

[Calorimetría 2](#)

PRÁCTICA

[Ejercicios calores de formación](#)

11.11 EXPONTANEIDAD DE UNA REACCIÓN

a) Reacciones químicas.

Las reacciones químicas se producen debido a dos tendencias o impulsos.

a) La tendencia hacia menos energía.

b) La tendencia hacia una mayor aleatoriedad o entropía.

Hemos estudiado el impulso hacia la menos energía, veamos ahora en la variación de entropía que puede acompañar a una reacción.

b) aumento de entropía (aleatoriedad)

La entropía aumenta cuando alguno de los siguientes eventos ocurre en una reacción.

- 1) Cambio en el estado de sólido a líquido.
- 2) Cambio en el estado de líquido a gas.
- 3) Cambio en el estado de sólido a gas.
- 4) Formación de una mezcla.
- 5) Aumento del volumen de un sistema de gases. (Aumento del número de partículas de gas de reactivo al producto).

Ejemplo: La evaporación del agua

Examine la siguiente reacción, por la evaporación del agua. ¿Por qué este proceso se producen de forma espontánea?



Respuesta: La evaporación del agua requiere energía, pero el movimiento de un líquido a un estado de gas provoca un aumento de la entropía. Esto es por qué el agua se evapora de forma espontánea

c) El cálculo de variación de entropía:

La cantidad exacta del cambio de entropía (ΔS) se puede calcular de una manera muy similar a los cálculos de cambios de entalpia

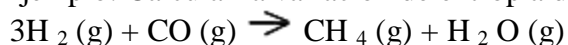
$$\Delta S = \sum \text{entropía. productos} - \sum \text{entropía. reactivos}$$

La entropía de cada sustancia en una reacción es el producto de la entropía estándar (tomado de una tabla) y el número de moles de sustancia en la ecuación balanceada. ($S^0 \times \text{Balance}$) entropía estándar.

Tabla 5: Entropías estándar

Tabla 3. Entropías a 25 °C y 1 atm Comp.	S^0 J/(mol·K)	Comp.	S^0 J/(mol·K)
H (g)	114,6	HF (g)	173,8
H ₂ (g)	130,7	HCl (g)	186,9
O ₂ (g)	205,0	HBr (g)	198,7
O ₃ (g)	237,6	HI (g)	206,6
Cl ₂ (g)	222,9	H ₂ S (g)	205,8
Br ₂ (g)	245,2	NO (g)	210,8
Br ₂ (l)	152,3	NO ₂ (g)	240,1
I ₂ (g)	260,6	CaO (s)	39,7
I ₂ (s)	116,7	CaCO ₃ (s)	92,9
N ₂ (g)	191,5	CH ₄ (g)	186,3
H ₂ O (g)	188,8	C ₂ H ₂ (g)	200,9
H ₂ O (l)	69,9	C ₂ H ₄ (g)	219,4
H ₂ O ₂ (l)	109,6	C ₂ H ₆ (g)	229,2
CO (g)	197,9	C ₃ H ₈ (g)	270,3
CO ₂ (g)	213,6	C ₆ H ₆ (g)	269,2
NH ₃ (g)	192,5	C ₆ H ₆ (l)	173,4

Ejemplo: Calcular la variación de entropía de la siguiente reacción:



Respuesta:

- 1) Obtener los valores de la entropía de una tabla de entropías.
- 2) Calcular la entropía de cada sustancia multiplicando el saldo por la entropía estándar.
- 3) Registrar los valores en la fórmula y calcular el cambio total de entropía.

$$\Delta S = \sum \text{entropía. productos} - \sum \text{entropía. reactivos}$$

$$\Delta S = (S\text{CH}_{4(\text{g})} + S\text{H}_2\text{O}_{(\text{g})}) - (3S\text{H}_{2(\text{g})} + S\text{CO}_{(\text{g})})$$

$$\Delta S = (186,3 + 188,8)\text{Jmol}^{-1}\text{K}^{-1} - (3 * 130,7 + 197,9)\text{Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$$

$$\Delta S = -214,9\text{Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$$

VIDEO

[Espontaneidad de una reacción](#)

PRÁCTICA

[Ejercicios entropía](#)

[Ejercicios de entropía 1](#)

[Ejercicios de termoquímica](#)

[Ejercicios de termoquímica 2](#)

LABORATORIO

[Curva de calentamiento del agua](#)

[Práctica 5: Determinación de calores de reacción](#)

[Lab 16: Calor específico de un sólido](#)

[Equivalente en agua de un calorímetro](#)

[Práctica calor específico](#)

BIBLIOGRAFÍA

<http://www.angelfire.com/emo2/quim/entalpia.html>

http://translate.google.com.co/translate?hl=es&langpair=en%7Ces&u=http://www.sakschools.ca/curr_content/chem30/modules/module3/lesson5/hessbonde.htm

<http://thales.cica.es/rd/Recursos/rd99/ed99-0276-02/energia4.htm>

http://www.vaxasoftware.com/doc_edu/qui/dtermoq.pdf