## Termoquímica

## • Ley de Hess

1. a) Teniendo en cuenta la ley de Hess, calcula la entalpía en condiciones estándar de la siguiente reacción, indicando si la reacción es exotérmica o endotérmica:  $C_2H_4(g) + H_2O(l) \rightarrow C_2H_5OH(l)$  b) Calcula la cantidad de energía, en forma de calor, que es absorbida o cedida en la obtención de 75 g de etanol según la reacción anterior, a partir de las cantidades adecuadas de eteno y agua. Datos:  $\Delta H^o$ (combustión) $C_2H_4(g) = -1411 \text{ kJ·mol}^{-1}$ ;  $\Delta H^o$ (combustión) $C_2H_5OH(l) = -764 \text{ kJ·mol}^{-1}$ 

(P.A.U. jun. 16)

**Rta.:** a)  $\Delta H = -647 \text{ kJ/mol}$ ; b)  $Q = 1,05 \cdot 10^3 \text{ kJ}$ .

Datos Cifras significativas: 3

$$\begin{split} &C_2H_4(g) + 3 \ O_2(g) \longrightarrow 2 \ CO_2(g) + 2 \ H_2O(l) \\ &C_2H_5OH(l) + 3 \ O_2(g) \longrightarrow 2 \ CO_2(g) + 3 \ H_2O(l) \end{split} \qquad \qquad \Delta H_{c2}^{\circ}(C_2H_5OH) = -764 \ kJ/mol \end{split}$$

Masa de etanol  $m = 75.0 \text{ g C}_2\text{H}_5\text{OH}$ 

Masa molar del etanol  $M(C_2H_5OH) = 46.1 \text{ g/mol}$ 

Incógnitas

Entalpía de la reacción:  $C_2H_4(g) + H_2O(I) \rightarrow C_2H_5OH(I)$   $\Delta H$ Energía en la obtención de 75 g de etanol Q

Otros símbolos

Cantidad de sustancia (número de moles) n

**Ecuaciones** 

Ley de Hess  $\Delta H^{\circ} = \Delta H^{\circ}(\text{prod.}) - \Delta H^{\circ}(\text{react.})$ 

#### Solución:

a) Como la entalpía es una función de estado, es independiente del camino.

La ecuación de la reacción se puede obtener por combinación lineal de las ecuaciones de combustión:

$$C_2H_4(g) + 3 O_2(g) \rightarrow 2 CO_2(g) + 2 H_2O(l)$$
  $\Delta H_{c1}^{\circ} = -1411 \text{ kJ/mol}$   $C_2H_5OH(l) + 3 O_2(g) \rightarrow 2 CO_2(g) + 3 H_2O(l)$   $\Delta H_{c2}^{\circ} = -764 \text{ kJ/mol}$ 

Se deja la primera ecuación como está, se multiplica la segunda por -1 y se suman:

$$\begin{array}{lll} C_2H_4(g) + 3 \ O_2(g) = 2 \ CO_2(g) + 2 \ H_2O(l) & \Delta H_{c\,1}^{\,\circ} = & -1411 \ kJ \\ 2 \ CO_2(g) + 3 \ H_2O(l) = C_2H_5OH(l) + 3 \ O_2(g) & -\Delta H_{c\,2}^{\,\circ} = & 764 \ kJ \\ \hline C_2H_4(g) + H_2O(l) = C_2H_5OH(l) & \Delta H = & -647 \ kJ \\ \end{array}$$

La reacción es exotérmica, desprende energía.

b) Se calcula la energía producida al obtener 75 g de C₂H₅OH:

$$Q=75.0 \text{ g C}_2\text{H}_5\text{OH} \frac{1 \text{ mol C}_2\text{H}_5\text{OH}}{46.1 \text{ g C}_2\text{H}_5\text{OH}} \frac{647 \text{ kJ}}{1 \text{ mol C}_6\text{H}_6} = 1.05 \cdot 10^3 \text{ kJ} = 1.05 \text{ MJ}$$

La mayor parte de las respuestas puede calcularse con la hoja de cálculo Química (es)

Cuando esté en el índice, mantenga pulsada la tecla « 🌣 » (mayúsculas) mientras hace clic en la celda:

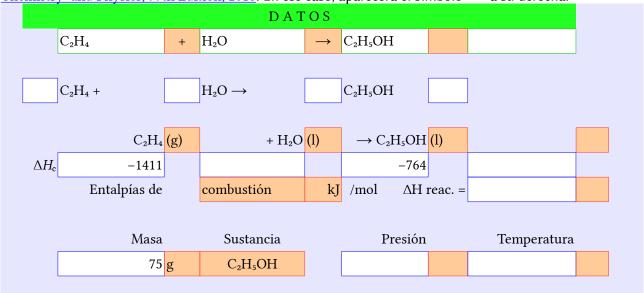
Ley de Hess

del capítulo:

Termoquímica Hess Ley de Hess

Escriba las fórmulas químicas en las celdas blancas con borde verde, los datos en las celdas blancas con borde azul, y pulse en las celdas de color salmón para elegir entre las opciones que se presentan.

Puede dejar en blanco alguno de los valores de las entalpías de combustión y la hoja de cálculo mostrará, en algunos casos, el valor encontrado en una pequeña tabla de datos que ha copiado de <u>CRC Handbook of Chemistry and Physics, 97th Edition, 2016</u>. En ese caso, aparecerá el símbolo «a» a su derecha.



Las respuestas aparecen en RESULTADOS:



- 2. Considera que la gasolina está compuesta principalmente por octano ( $C_8H_{18}$ ) y que en el bioetanol el compuesto principal es el etanol ( $CH_3CH_2OH$ ). Con los siguientes datos:  $\Delta H_f^{\circ}(CO_2(g)) = -393,5$  kJ/mol;  $\Delta H_f^{\circ}(H_2O(I)) = -285,8$  kJ/mol;  $\Delta H_c^{\circ}(C_8H_{18}(I)) = -5445,3$  kJ/mol;  $\Delta H_c^{\circ}(CH_3CH_2OH(I)) = -1369,0$  kJ/mol; densidad a 298 K del etanol  $\rho_e = 0,79$  g/cm³ y del octano  $\rho_o = 0,70$  g/cm³.
  - a) Escribe la ecuación de la reacción de combustión del etanol y calcula la entalpía estándar de formación del etanol a 25 °C.
  - b) ¿Cuántos litros de bioetanol se necesitan para producir la misma energía que produce 1 dm³ de gasolina?

(P.A.U. sep. 14)

**Rta.:** a)  $\Delta H_f^{\circ}(C_2H_6O) = -275.4 \text{ kJ/mol}$ ; b)  $V = 1.43 \text{ dm}^3 \text{ CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ .

#### Datos Cifras significativas: 3 $C(grafito) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ $\Delta H_f^{\circ}(CO_2) = -393.5 \text{ kJ/mol}$ $H_2(g) + \frac{1}{2} O_2(g) \longrightarrow H_2O(l)$ $\Delta H_f^{\circ}(H_2O) = -285.8 \text{ kJ/mol}$ $C_8H_{18}(l) + 25/2 O_2(g) \rightarrow 8 CO_2(g) + 9 H_2O(g)$ $\Delta H_c^{\circ}(C_8H_{18}) = -5445,3 \text{ kJ/mol}$ $CH_3CH_2OH(l) + 3 O_2(g) \rightarrow 2 CO_2(g) + 3 H_2O(l)$ $\Delta H_c^{\circ}(C_2H_6O) = -1369,0 \text{ kJ/mol}$ Densidad del etanol C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> $\rho_{\rm e} = 0.790 \ {\rm g/cm^3}$ $\rho_{\rm o} = 0.700 \text{ g/cm}^3$ Densidad del octano C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> Volumen de gasolina $V_{\rm o} = 1,00 \; {\rm dm^3}$ $T = 25 \,^{\circ}\text{C} = 298 \,^{\circ}\text{K}$ Temperatura Masa molar: Octano $M(C_8H_{18}) = 114 \text{ g/mol}$

Datos Cifras significativas: 3

Etanol  $M(C_2H_6O) = 46.1 \text{ g/mol}$ 

Incógnitas

Entalpía de formación del etanol  $\Delta H_f^{\circ}(C_2H_6O)$ 

Volumen de bioetanol que libera la misma energía que 1 dm³ de gasolina V

Otros símbolos

Cantidad de sustancia (número de moles) n

**Ecuaciones** 

Ley de Hess  $\Delta H^{\circ} = \Delta H^{\circ}(\text{prod.}) - \Delta H^{\circ}(\text{react.})$ 

#### Solución:

a) Se escribe la ecuación de combustión del etanol y se ajusta:

$$CH_3CH_2OH(1) + 3 O_2(g) \rightarrow 2 CO_2(g) + 3 H_2O(1)$$
  $\Delta H_c^{\circ}$ 

La entalpía de formación de los elementos en estado normal es nula, por definición. Como la entalpía es una función de estado, es independiente del camino. Se aplica la ley de Hess:

$$\Delta H_c^{\circ}(C_2H_6O) = 2 \Delta H_f^{\circ}(CO_2) + 3 \Delta H_f^{\circ}(H_2O) - (\Delta H_f^{\circ}(C_8H_{18}) + \Delta H_f^{\circ}(O_2))$$

$$-1369,0 \text{ [kJ]} = (2 \text{ [mol CO}_2] (-393,5 \text{ [kJ/mol CO}_2] + 3 \text{ [mol H}_2\text{O}] (-285,8 \text{ [kJ/mol H}_2\text{O}])) \\ - (1 \text{ [mol C}_2\text{H}_6\text{O}] \cdot \Delta H_f^{\circ}(\text{C}_2\text{H}_6\text{O}) + 3 \text{ [mol O}_2] \cdot 0)$$

Se despeja la entalpía de formación del etanol:

$$\Delta H_f^{\circ}(C_2H_6O(1)) = -787.0 - 857.4 + 1369.0 = -275.4 \text{ kJ/mol}$$

b) Se calcula la cantidad de gasolina que hay en 1 litro:

$$n(C_8H_{18})=1,00 \text{ dm}^3 \text{ gasolina} \quad \frac{10^3 \text{ cm}^3}{1 \text{ dm}^3} \quad \frac{0,700 \text{ g gasolina}}{1 \text{ cm}^3 \text{ gasolina}} \quad \frac{1 \text{ mol } C_8H_{18}}{114 \text{ g gasolina}}=6,13 \text{ mol } C_8H_{18}$$

Se calcula la energía producida al quemarse:

$$Q=6,13 \text{ mol } C_8H_{18} \frac{5445,3 \text{ kJ}}{1 \text{ mol } C_8H_{18}} = 3,34 \cdot 10^4 \text{ kJ}$$

Se calcula la cantidad de bioetanol que produciría esa energía:

$$n(C_2H_5OH)=3,34\cdot10^4 \text{ kJ} \frac{1 \text{ mol } C_2H_5OH}{1369.0 \text{ kJ}}=24,4 \text{ mol } C_2H_5OH$$

Se calcula la masa de bioetanol:

$$m(C_2H_5OH) = 24.4 \text{ mol } C_2H_5OH \frac{46.1 \text{ g } C_2H_5OH}{1 \text{ mol } C_2H_5OH} = 1.12 \cdot 10^3 \text{ g } C_2H_5OH$$

Se calcula el volumen que ocuparía, usando el dato de la densidad:

$$V(C_2H_5OH)=1,12\cdot10^3 \text{ g } C_2H_5OH \frac{1 \text{ cm}^3 C_2H_5OH}{0,790 \text{ g } C_2H_5OH}=1,43\cdot10^3 \text{ cm}^3=1,43 \text{ dm}^3 C_2H_5OH$$

La mayor parte de las respuestas puede calcularse con la hoja de cálculo <u>Química (es)</u> Cuando esté en el índice, mantenga pulsada la tecla «♠» (mayúsculas) mientras hace clic en la celda:

Lev de Hess

del capítulo:

Termoquímica Hess Ley de Hess

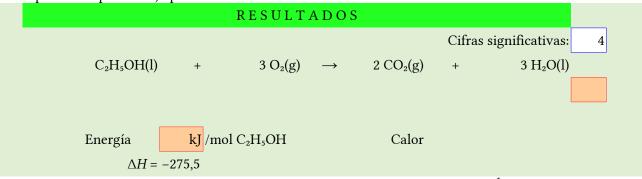
Escriba las fórmulas químicas en las celdas blancas con borde verde, los datos en las celdas blancas con borde azul, y pulse en las celdas de color salmón para elegir entre las opciones que se presentan.

Puede dejar en blanco alguno de los valores de las entalpías de formación y la hoja de cálculo mostrará, en algunos casos, el valor encontrado en una pequeña tabla de datos que ha copiado de <u>CRC Handbook of Chemistry and Physics</u>, 97th Edition, 2016. En ese caso, aparecerá el símbolo «a» a su derecha.

Note que **tiene que poner el símbolo «?»** bajo la fórmula «C₂H₅OH» y **escribir el valor de la entalpía** de combustión (−1369) a la derecha de «∆H reac. =».

ie combustion (-1569) a la defecha de «Mi feac. =».									
	С2Н5ОН	+	O2	$\rightarrow$	CO2	+	H2O		
$C_2H_5OH + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 3H_2O$									
	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	(1)	+ 3 O <sub>2</sub>	(g)	$\rightarrow$ 2 CO <sub>2</sub>	(g)	+ 3 H <sub>2</sub> O	(1)	
$\Delta H_{ m f}$	?				-393,5		-285,8		
	Entalpías de		formación	kJ	/mol ∆H reac. =		-1369	kJ	
			·						

La respuesta al apartado a) aparece en RESULTADOS:



Para hacer los cálculos del apartado b) habrá que escribir en el apartado: OTROS CÁLCULOS, las fórmulas para calcular los pasos intermedios:

{Tiernas gasolina}:  $n(C_8H_{18}) = m(C_8H_{18}) / Mmol(C_8H_{18}) = V(C_8H_{18}) \cdot \rho(C_8H_{18}) / Mmol(C_8H_{18}) = 1000 \text{ [cm}^3] \cdot 0.7 \text{ [g/cm}^3] / MASAMOL("C8H18")$ 

{Calor gasolina} =  $Q(C_8H_{18}) = n(C_8H_{18}) \cdot \Delta H_c^{\circ}(C_8H_{18}) = \{\text{Tiernas gasolina}\} \cdot 5445,3 \text{ [kJ/mol]} \}$ {Moles bioetanol} =  $n(C_2H_5OH) = Q(C_8H_{18}) / \{\Delta H \text{ reac. } (C_2H_5OH)\} = \{\text{Calor gasolina}\} / 1369$ 

 $\{V(\text{cm}^3) \text{ bioetanol}\} = V(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) = m(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) / \rho(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) = n(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) \cdot \text{Mmol}(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) / \rho(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) = \text{MASAMOL}(G2) / 0.79 \text{ [g/cm}^3]$ 

	{Woles bloctation: WASAWOL(G2) / 0,79 [g/clii								
OTROS CÁLCULOS									
	Etiq.	: Tiernas gasolina		Calor gasolina		Moles bioetanol		V(cm³) bioetanol	
	Fórm.	: =1000*0,7/MA- SAMOL("C8H18")		=G25*5445,3		=I25/1369		=K25*MA- SAMOL(G2)/0,79	
Y verá los resultados:									
		6,128	3	33 368		24,37		1421	

## Energías de enlace

1. a) A partir de los datos de la tabla, calcula la entalpía estándar de combustión del metano.

Enlace	С – Н	O – H	O = O	C = O
Entalpía de enlace en condiciones estándar (kJ/mol)	413	482	498	715

b) Calcula el volumen de dióxido de carbono medido a 25  $^{\circ}$ C y 1 atm (101,3 kPa) que se generará en la combustión completa de 100 g de metano.

Dato:  $R = 0.082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} = 8.31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ 

(P.A.U. sep. 15)

**Rta.:** a)  $\Delta H_c(CH_4) = -710 \text{ kJ/mol}$ ; b)  $V = 153 \text{ dm}^3$ .

Datos		Cifras significativas: 3	
Entalpía de enlace:	C – H	$\Delta H(\text{C-H}) = 413 \text{ kJ/mol}$	
	O – H	$\Delta H(\text{O-H}) = 482 \text{ kJ/mol}$	
	O = O	$\Delta H(O=O) = 498 \text{ kJ/mol}$	
	C = O	$\Delta H(C=O) = 715 \text{ kJ/mol}$	
Presión		$p = 101,3 \text{ kPa} = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Pa}$	
Temperatura		T = 25 °C= 298 K	
Masa de metano		$m(CH_4) = 100 \text{ g CH}_4$	
Masa molar del metan	0	$M(CH_4) = 16.0 \text{ g/mol}$	
Constante de los gases	ideales	$R = 8.31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$	
Incógnitas			
Entalpía estándar de c	ombustión del metano	$\Delta H_{\rm c}^{\circ}({ m CH_4})$	
Volumen de dióxido d	e carbono	V	

# Otros símbolos

Cantidad de sustancia

#### **Ecuaciones**

Ley de Hess  $\Delta H^{\circ} = \Delta H^{\circ}(\text{prod.}) - \Delta H^{\circ}(\text{react.})$  Ecuación de estado de los gases ideales  $p \cdot V = n \cdot R \cdot T$ 

#### Solución:

a) Se escribe la ecuación de combustión del metano y se ajusta:

$$CH_4(g) + 2 O_2(g) \rightarrow CO_2(g) + 2 H_2O(g)$$
  $\Delta H_c^{\circ}$ 

Se puede imaginar un hipotético camino de rotura y formación de enlaces:

Como la entalpía es una función de estado, es independiente del camino.

La entalpía de combustión del metano puede expresarse como combinación lineal de las ecuaciones de rotura y formación de enlaces:

$$\begin{split} \Delta H_c(\text{CH}_4) &= 4 \cdot \Delta H(\text{C-H}) + 2 \cdot \Delta H(\text{O=O}) - 2 \cdot \Delta H(\text{C=O}) - 4 \cdot \Delta H(\text{O-H}) = \\ 4 \cdot 413 \text{ [kJ/mol]} + 2 \cdot 498 \text{ [kJ/mol]} - 2 \cdot 715 \text{ [kJ/mol]} - 4 \cdot 482 \text{ [kJ/mol]} \\ \Delta H_c^\circ(\text{CH}_4) &= -710 \text{ kJ/mol} \end{split}$$

b) Se calcula la cantidad de metano que hay en 100 g:

$$n(CH_4)=100 \text{ g CH}_4 \cdot \frac{1 \text{ mol CH}_4}{16.0 \text{ g CH}_4}=6,25 \text{ mol CH}_4$$

Se calcula la cantidad de CO<sub>2</sub> a partir de la ecuación de combustión ajustada:

$$n(CO_2) = n(CH_4) = 6.13 \text{ mol } CO_2$$

Se calcula el volumen que ocupará a 25 °C y 1 atm, a partir de la ecuación de estado de los gases ideales, suponiendo comportamiento ideal del  $CO_2$ :

$$V = \frac{n \cdot R \cdot T}{p} = \frac{6,25 \text{ mol} \cdot 8,31 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 298 \text{ K}}{101,3 \cdot 10^{3} \text{ Pa}} = 0,153 \text{ m}^{3} = 153 \text{ dm}^{3}$$

### Calorimetría

1. Explica detalladamente como se puede determinar en el laboratorio el calor de disolución de KOH(s) en agua. Efectúa el cálculo (a la presión y temperatura de laboratorio) suponiendo una masa de hidróxido de potasio de 4,5 g que se disuelven en 450 cm³ en un calorímetro que tiene un equivalente en agua de 15 g. El incremento de la temperatura es de 2,5 °C.

Datos: Calor específico del agua:  $4,18 \text{ J/(g} \cdot \text{°C})$  y densidad del agua:  $1 \text{ g/cm}^3$ .

(P.A.U. sep. 05)

**Rta.:**  $\Delta H_d^{\circ}(KOH) = -61 \text{ kJ/mol}.$ 

#### Solución:

#### Procedimiento:

En una probeta de 500 cm³, se miden 450 cm³ de agua y se vierten en un calorímetro. Se dejan pasar unos minutos y se mide la temperatura con un termómetro.

Se pesa un vidrio de reloj en una balanza y se echa el KOH con una varilla hasta que su masa aumente 4,5 g.

Rápidamente (para evitar la hidratación y carbonatación del KOH) se echa el hidróxido de potasio en el calorímetro y se agita con una varilla, comprobando la temperatura. Se anota el valor máximo y se resta del valor inicial de la temperatura del agua.

Cálculos: (Supondré que los datos tienen al menos dos cifras significativas).

masa de agua = 
$$450 \text{ dm}^3 \cdot 1,0 \text{ g/cm}^3 = 450 \text{ g agua}$$

Al ser el calorímetro un sistema aislado, el proceso es adiabático, no se intercambia calor con el entorno.

Q(cedido en la disolución) +  $Q_d$ (ganado por la disolución) +  $Q_c$ (ganado por el calorímetro) = 0

El calor ganado por la disolución es aproximadamente igual al calor ganado por el agua.

$$Q_{\rm d} = m({\rm agua}) \cdot c_{\rm e}({\rm agua}) \cdot \Delta t = 450 \text{ g} \cdot 4.18 \text{ J/(g} \cdot \text{°C}) \cdot 2.5 \text{ °C} = 4.7 \cdot 10^3 \text{ J}$$

El calor ganado por el calorímetro se calcula de forma análoga, usando el equivalente en agua del calorímetro.

$$Q_{c} = m(\text{equivalente en agua}) \cdot c_{e}(\text{agua}) \cdot \Delta t = 15 \text{ g} \cdot 4,18 \text{ J/(g} \cdot \text{°C}) \cdot 2,5 \text{ °C} = 1,6 \cdot 10^{2} \text{ J}$$

$$Q(\text{cedido en la disolución}) = -(4,7 \cdot 10^{3} + 1,6 \cdot 10^{2}) \text{ J} = -4,9 \cdot 10^{3} \text{ J}$$

$$\Delta H_{d}^{\circ} = \frac{-4,9 \cdot 10^{3} \text{ J}}{4,5 \text{ g} \text{ KOH}} \frac{1 \text{ kJ}}{10^{3} \text{ J}} \frac{56 \text{ g} \text{ KOH}}{1 \text{ mol KOH}} = -61 \text{ kJ/mol KOH}$$

La mayor parte de las respuestas puede calcularse con la hoja de cálculo <u>Química (es)</u> Cuando esté en el índice, mantenga pulsada la tecla «♠» (mayúsculas) mientras hace clic en la celda:

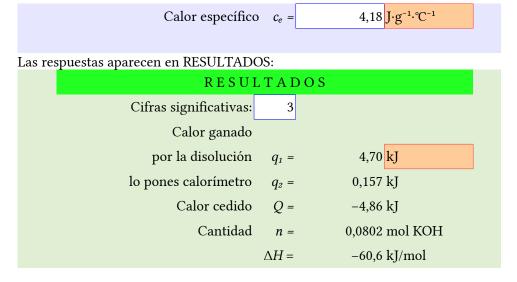
Calorimetría

del capítulo:

Termoquímica Calorim Calorimetría

Escriba las fórmulas químicas en las celdas blancas con borde verde, los datos en las celdas blancas con borde azul, y pulse en las celdas de color salmón para elegir entre las opciones que se presentan.

DATOS							
	Soluto		КОН				
КОН	Masa	<i>m</i> =	4,5	g			
$H_2O$	Volumen	V =	450	cm³			
Eq	Equivalente en agua			g			
Increment	$\Delta t =$	2,5	$^{\circ}$ C				
Disolución	Densidad	ρ =	1	g/cm³			



Cuestiones y problemas de las <u>Pruebas de evaluación de Bachillerato para el acceso a la Universidad</u> (A.B.A.U. y P.A.U.) en Galicia.

Respuestas y composición de Alfonso J. Barbadillo Marán.

Algunos cálculos se hicieron con una hoja de cálculo de LibreOffice del mismo autor.

Algunas ecuaciones y las fórmulas orgánicas se construyeron con la extensión <a href="CLC09">CLC09</a> de Charles Lalanne-Cassou.

La traducción al/desde el gallego se realizó con la ayuda de <u>traducindote</u>, de Óscar Hermida López.

Se procuró seguir las recomendaciones del Centro Español de Metrología (CEM).

Se consultó al Copilot de Microsoft Edge y se tuvieron en cuenta algunas de sus respuestas en las cuestiones.

Actualizado: 12/03/24

## Sumario

TERMOQUÍMICA	
Ley de Hess	i
Energías de enlace	
<u>Calorimetría</u>	