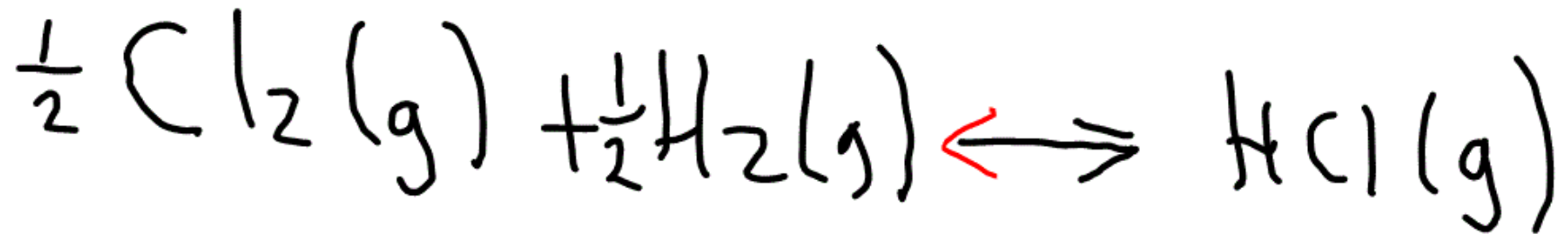


Clase 39 22 abril 2022

Título de la nota

22/04/2022



$$-91.67 \text{ kJ/mol}$$

Simulador para energía de enlace y obtención de entalpía de reacción

Instrucción: insertar en las celdas de color amarillo los valores correspondientes, también puede editar la reacción



Enlaces rotos				Enlaces formados					
Enlace	Número	Energía	Total	Enlace	Número	Energía	Total		
Br-Br	0	192.55	0.00	Br-Br	0	192.55	0.00	Energía para disociar enlaces	678.98 kJ
C=C	0	611.15	0.00	C=C	0	611.15	0.00	Energía para formar enlaces	-862.32 kJ
C=N	0	615.34	0.00	C=N	0	615.34	0.00		EXOTÉRMICO
C=O (CO ₂)	0	803.71	0.00	C=O (CO ₂)	0	803.71	0.00	Cambio de entalpía o entalpía de reacción	-183.34 kJ
C=O ácido	0	741.00	0.00	C=O ácido	0	741.00	0.00		RX EXOTÉRMICA
C=O aldehído	0	740.92	0.00	C=O aldehído	0	740.92	0.00	Ejemplo de combustión	
C=O amida	0	749.30	0.00	C=O amida	0	749.30	0.00	1 Cl ₂ + 1 H ₂ 2HCl	
C=O cetona	0	745.10	0.00	C=O cetona	0	745.10	0.00		
C=O éster	0	749.30	0.00	C=O éster	0	749.30	0.00		
C=O haluro	0	740.92	0.00	C=O haluro	0	740.92	0.00	Enlaces Rotos	Enlaces Formados
C=S disulfuro	0	577.67	0.00	C=S disulfuro	0	577.67	0.00	1 enlaces Cl-Cl	2 enlaces H-Cl
C≡C	0	837.20	0.00	C≡C	0	837.20	0.00	1 enlaces H-H	
C≡N	0	891.62	0.00	C≡N	0	891.62	0.00		
C≡O	0	1079.98	0.00	C≡O	0	1079.98	0.00		
C-B	0	376.74	0.00	C-B	0	376.74	0.00		

Efecto de T

Datos

Simulador termoquímico, efecto de la temperatura V2								
Instrucción: Insertar los datos correspondientes en las celdas de color amarillo, el coeficiente es negativo para reactivos y positivo para productos								
Estado	Coeficiente Estequiométrico	Nombre	$\Delta H_{F,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	$\Delta G_{F,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	Constantes de C_p como función de T en J/molK			
					a	bT	cT ²	dT ³
gas	-1.00	Cloro	0	0	26.9300	3.384e-002	-3.869e-005	1.547e-008
gas	-1.00	Hidrógeno	0	0	27.1400	9.274e-003	-1.381e-005	7.645e-009
gas	2.00	Cloruro de Hidrógeno	-92.4	-53.45	30.6700	-7.201e-003	1.246e-005	-3.898e-009

 ΔC_p

Δa	ΔbT	ΔcT^2	ΔdT^3	Δn_g	0.00	
7.27	-5.752e-2	7.742e-5	-3.091e-8	T (K) referencia	298.15	
R (kJ/molK)	0.008314			T (K) a evaluar	500.00	
ΔH_{298}° (kJ)	-184.8000			ΔH_T° (kJ)	-185.8457	Exotérmico
ΔG_{298}° (kJ)	-106.0000			ΔG_T° (kJ)	-54.1611	Espontáneo
ΔS_{298}° (kJ/K)	-0.2613			ΔS_T° (kJ/K)	-0.2639	Arreglo molecular
ΔU_{298}° (kJ)	-184.8000			ΔU_T° (kJ)	-185.8457	

MODELOS

$$\Delta H_T^{\circ} = \Delta H_{298.15}^{\circ} + \int_{298.15}^T \Delta C_p dT$$

$$\Delta S_T^{\circ} = \Delta S_{298.15}^{\circ} + \int_{298.15}^T \frac{\Delta C_p}{T} dT$$

$$\frac{\Delta G_T^{\circ}}{T} = \frac{\Delta G_{298.15}^{\circ}}{298.15K} + \Delta H_{298.15}^{\circ} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298.15} \right)$$



Efecto de T Datos

Simulador termoquímico, efecto de la temperatura V2								
Instrucción: Insertar los datos correspondientes en las celdas de color amarillo, el coeficiente es negativo para reactivos y positivo para productos								
Estado	Coeficiente Estequimétrico	Nombre	$\Delta H^{\circ}_{F,298}$ (kJ/mol)	$\Delta G^{\circ}_{F,298}$ (kJ/mol)	Constantes de C_p como función de T en J/molK			
					a	bT	cT ²	dT ³
gas	-0.50	Cloro	0	0	26.9300	3.384e-002	-3.869e-005	1.547e-008
gas	-0.50	Hidrógeno	0	0	27.1400	9.274e-003	-1.381e-005	7.645e-009
gas	1.00	Cloruro de Hidrógeno	-92.4	-53.45	30.6700	-7.201e-003	1.246e-005	-3.898e-009

 ΔC_p

Δa	ΔbT	ΔcT^2	ΔdT^3	Δn_g	0.00	
3.635	-2.876e-2	3.871e-5	-1.546e-8	T (K) referencia	298.15	
R (kJ/molK)	0.008314			T (K) a evaluar	500.00	
ΔH°_{298} (kJ)	-92.4000	Exotérmico		ΔH°_T (kJ)	-92.9229	Exotérmico
ΔG°_{298} (kJ)	-53.4500	Espontáneo		ΔG°_T (kJ)	-27.0805	Espontáneo
ΔS°_{298} (kJ/K)	-0.1306	Arreglo molecular		ΔS°_T (kJ/K)	-0.1320	Arreglo molecular
ΔU°_{298} (kJ)	-92.4000	No hay cambio en moles gaseosas		ΔU°_T (kJ)	-92.9229	

MODELOS

$$\Delta H^{\circ}_T = \Delta H^{\circ}_{298.15} + \int_{298.15}^T \Delta C_p dT$$

$$\Delta S^{\circ}_T = \Delta S^{\circ}_{298.15} + \int_{298.15}^T \frac{\Delta C_p}{T} dT$$

$$\frac{\Delta G^{\circ}_T}{T} = \frac{\Delta G^{\circ}_{298.15}}{298.15K} + \Delta H^{\circ}_{298.15} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{298.15} \right)$$



$$\Delta H = n C_p dT$$
$$= n \int_{T_1}^{T_2} C_p dT$$

$$C_p = f(T)$$

$$= a + bT + cT^2 + dT^3$$

102 CLORO
 100 H2
 0.000 0.000 26.9300 3.384e-002 -3.869e-005 1.547e-008
 0.000 0.000 27.1400 9.274e-003 -1.381e-005 7.645e-009
 1.000 0.000 30.6700 -7.201e-003 1.246e-005 -3.898e-009

Simulador termoquímico, efecto de la temperatura V2								
Instrucción: Insertar los datos correspondientes en las celdas de color amarillo, el coeficiente es negativo para reactivos y positivo para productos								
Estado	Coeficiente Estequimétrico	Nombre	$\Delta H_{F,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	$\Delta G_{F,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	Constantes de C_p como función de T en J/molK			
					a	bT	cT ²	dT ³
gas	-0.50	Cloro	0	0	26.9300	3.384e-002	-3.869e-005	1.547e-008
gas	-0.50	Hidrógeno	0	0	27.1400	9.274e-003	-1.381e-005	7.645e-009
gas	1.00	Cloruro de Hidrógeno	-92.4	-53.45	30.6700	-7.201e-003	1.246e-005	-3.898e-009

Simulador termoquímico, efecto de la temperatura					
Instrucción: Insertar los datos correspondientes en las celdas de color amarillo, el coeficiente es negativo					
Estado	Coefficiente	Nombre	$\Delta H^\circ_{F,298}$ (kJ/mol)	$\Delta G^\circ_{F,298}$ (kJ/mol)	Constante
	Estequiométrico				a
gas	-0.50	Cloro	0	0	26.9300
gas	-0.50	Hidrógeno	0	0	27.1400
gas	1.00	Cloruro de Hidrógeno	-92.4	-53.45	30.6700

$$\Delta a = -0.5(26.93) - 0.5(27.14) + 1(30.67)$$

$$= 3.635$$

Δa
3.635

Simulador termoquímico, efecto de la temperatura V2						
Instrucción: Insertar los datos correspondientes en las celdas de color amarillo, el coeficiente es negativo para reactivos y positivo para productos						
Estado	Coeficiente Estequiométrico	Nombre	$\Delta H_{F,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	$\Delta G_{F,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	Constantes de C_p como función de la temperatura	
					a	bT
gas	-0.50	Cloro	0	0	26.9300	3.384e-002
gas	-0.50	Hidrógeno	0	0	27.1400	9.274e-003
gas	1.00	Cloruro de Hidrógeno	-92.4	-53.45	30.6700	-7.201e-003

$$\Delta bT = -0.5(3.38 \times 10^{-2}) - 0.5(9.27 \times 10^{-3}) + 1(-7.2 \times 10^{-3})$$

$$= -2.876 \times 10^{-2}$$

ΔbT
-2.876e-2

$$\bar{C}_p = \text{J/mol K}$$

$$\bar{C}_p(T) = a + bT + cT^2 + dT^3$$

$$a = \text{J/mol K}$$

$$b = \text{J/mol K}^2$$

$$c = \text{J/mol K}^3$$

$$d = \text{J/mol K}^4$$

$$\Delta H^\circ_T = \Delta H^\circ_{298.15} + \int_{298.15}^T \Delta C_p dT$$

Δa	Δb	Δc	Δd
3.635	-2.876e-2	3.871e-5	-1.546e-8

$$\Delta H^\circ_{300} = \Delta H^\circ_{298.15} + 3.635 \int_{298.15}^{300} dT$$

$$\begin{aligned}
 \Delta H_{300}^{\circ} &= \Delta H_{298.15}^{\circ} + 3.635 \int_{298.15}^{300} dT \\
 &\quad - 2.87 \times 10^{-2} \int_{298.15}^{300} T dT \\
 &\quad + 3.871 \times 10^{-5} \int_{298.15}^{300} T^2 dT \\
 &\quad - 1.54 \times 10^{-8} \int_{298.15}^{300} T^3 dT
 \end{aligned}$$

$$\Delta H_T = \Delta H_{298}^{\circ} + a(T_2 - T_1)$$

$$+ \frac{b}{2}(T_2^2 - T_1^2) + \frac{c}{3}(T_2^3 - T_1^3)$$

$$+ \frac{d}{4}(T_2^4 - T_1^4)$$

$$\Delta S^{\circ}_T = \Delta S^{\circ}_{298.15} + \Delta C_p \frac{dT}{T}$$

$$\Delta c_p = \Delta a + \Delta b T + \Delta c T^2 + \Delta d T^3$$

$$\Delta S_T = \Delta S^{\circ}_{298.15} + \Delta a \frac{dT}{T} + \frac{\Delta b T}{T} dT + \frac{\Delta c T^2}{T} dT + \frac{\Delta d T^3}{T} dT$$

$$\begin{aligned}
 \Delta S_T = & \Delta S^0_{298,15} + \Delta a \int_{T_1}^{T_2} \frac{dT}{T} \\
 & + \Delta b \int_{T_1}^{T_2} \frac{T}{T} dT + \Delta c \int_{T_1}^{T_2} \frac{T^2}{T} dT \\
 & + \Delta c \int_{T_1}^{T_2} \frac{T^3}{T} dT
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta S_T^0 &= \Delta S_{298.15}^0 + \Delta a \int_{T_1}^{T_2} \frac{dT}{T} \\
 &+ \Delta b \int_{T_1}^{T_2} dT + \Delta c \int_{T_1}^{T_2} T dT \\
 &+ \Delta d \int_{T_1}^{T_2} T^2 dT
 \end{aligned}$$

$$\Delta S_{\text{total}}^{\circ} = \Delta S_{298,15}^{\circ} + \Delta a \ln \frac{T_2}{T_1}$$

$$+ \Delta b (T_2 - T_1) + \frac{\Delta c}{2} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$+ \frac{\Delta d}{3} \left(\frac{1}{T_2^3} - \frac{1}{T_1^3} \right)$$