

Conceptos Teóricos

Entropía

Antes de comenzar recordemos que las definiciones de energía siempre estarán asociadas a energías cuantizadas, y que las definiciones termodinámicas siempre están asociadas a los alrededores de los sistemas y no precisamente al sistema en sí mismo. Es importante que recuerde esto pues las definiciones que se indicarán a continuación se basan en estos conceptos.

Actualmente la entropía desde el punto de vista molecular se define como una función de estado que es una medida de cuánta energía poseen los átomos y las moléculas, la entropía se simboliza con la letra "S" escrita en mayúscula. La definición de la entropía es aplicable a los procesos de un sistema, independientemente que sean espontáneos o no, la entropía es la probabilidad que un proceso ocurra en una determinada dirección.

Lo que es posible medir es el cambio de la entropía, que se simboliza como " ΔS ", y se lee "delta ese". Conceptualmente ΔS es la resta de la entropía final (S_f) y la entropía inicial (S_i). De forma que $\Delta S = S_f - S_i$

Existen dos formas experimentales de medir el ΔS , una es en términos de los cambios de energía que poseen las moléculas al pasar de un estado a otro. Recordemos que la energía no es absoluta, sino que es el resultado de la probabilidad estadística en términos de energía que posee cada partícula dentro del sistema. La segunda forma es medir el calor que libera a los alrededores una reacción y dividir este valor entre la temperatura a la cual ocurrió la misma. Estas dos medidas del ΔS son comparables con otras variables termodinámicas.

Para fines de aprendizaje, en este curso también utilizaremos la definición de entropía como el aumento del desorden de un sistema, con el objetivo de facilitarle la comprensión de los términos y los diversos procesos.

En los procesos químicos encontramos diversos tipos de energía involucrada, a saber, energía cinética, cambios de energía potencial asociados a cambios de fase y radiación. Esta energía puede usarse para producir trabajo, sin embargo, una parte siempre se disipa en forma de calor, ΔS puede medirse como este calor disipado dividido entre la temperatura a la cual ocurrió la reacción.

Para una reacción química la entropía se mide determinando el calor (que no produce trabajo) y dividiendo este valor entre la temperatura a la cual se realiza la reacción.

A continuación, le planeamos un pequeño problema relacionado con cálculos de entropía:

¿Cuál será el cambio de entropía que generará una reacción que libera 80 KJ a una temperatura de 298 K?

- Respuesta:

$$\text{El } \Delta S = 80 \text{ KJ} / 298 \text{ K} = 0,268 \text{ KJ/K}$$

Existen algunas tendencias cualitativas para determinar aproximadamente los cambios de entropía, por ejemplo, las entropías de los gases son mucho mayores que las entropías de los líquidos y a su vez de los sólidos. En el cuadro 1 se muestran algunos datos de entropías asociadas a sustancias en diferentes estados.

Cuadro 1. Entropías asociadas a diferentes sustancias

Sustancia	Entropía (J) a 25 °C
F2(g)	202.7
Br(l)	152.23
NaF(s)	51.46
CH4(g)	186.15
C3H8(g)	269.9
C4H10(g)	310

Como usted puede ver en el cuadro, la tendencia del valor de entropía para los cambios de fase será $S(\text{gas}) > S(\text{líquido}) > S(\text{sólido})$

También entre más grandes y complicadas sean las moléculas, éstas poseerán una mayor entropía, esto lo puede observar en el cuadro 1. En este caso $S(\text{C}_4\text{H}_{10}) > S(\text{C}_3\text{H}_8) > S(\text{CH}_4)$, esto ocurre pues la molécula del Butano (C_4H_{10}) es más grande y compleja que las otras.

Finalmente, la segunda ley de la termodinámica indica que, durante un proceso espontáneo, el cambio de entropía total del sistema y de los alrededores siempre será positivo

$$\Delta S_{\text{universo}} = (\Delta S_{\text{sistema}} + \Delta S_{\text{alrededores)}) \geq 0$$

En términos generales para que ocurra una transformación macroscópica siempre aumentará la energía del universo, y cualquier sistema que alcance el equilibrio siempre la suma de todas las entropías involucradas será positivas, aunque la entropía de un sistema en particular pueda disminuir, la suma de todos los procesos siempre irá en aumento.

Referencias

1. I. N. Levine, Physical Chemistry, 6th ed. 2009, p. 101, toward the end of "What Is Entropy?"
2. Chang, Raymond. Physical Chemistry for the Biosciences. Sausalito, California: University Science Books, 2005.

Créditos

Vicerrectoría de Docencia

CEDA - TEC Digital

Proyecto de Virtualización 2016

Química Básica II

Dra. Silvia Soto Córdoba (profesora)

Daniela Jiménez Escudé (estudiante - asistente)

Licda. Isaura Ramírez Brenes (coordinadora de diseño)