

CÁLCULO DE PODER
CALORÍFICO
Sustancias químicas puras



Alfredo Basalo
2006

Prólogo

Un problema recurrente en industrias químicas o depósitos de sustancias químicas, es la determinación de carga de fuego con poca información sobre el poder calorífico de dichas sustancias.

La falta de información es debida a que una gran cantidad de estos materiales son inflamables pero no se usan como fuentes de calor.

Las Hojas de Seguridad de producto generalmente no informan poder calorífico, limitándose a indicar punto de inflamación, autoignición y límites de explosividad.

Es por ello que debemos recurrir a tablas de poderes caloríficos de los materiales más diversos, que de hecho suelen estar disponibles, aunque a veces ignoramos la confiabilidad de los datos o sufrimos ambigüedades, tales como no tener aclarado si la información es un poder calorífico superior o inferior, o cuál es la condición de referencia para dichos datos.

Un recurso usado con frecuencia es tomar el valor más alto disponible, alegando que un error en exceso debe ser considerado como un “grossing up” apuntado hacia una mayor protección, en línea con la orientación prevencionista de nuestras decisiones.

Desde ese punto de vista, esta forma de proceder puede considerarse válida, pero podría llegar a invalidar una pericia por falta de precisión.

Además, una exageración en el cálculo puede redundar en el encarecimiento inútil de algún proyecto de construcción.

El presente trabajo está orientado hacia el profesional de Seguridad e Higiene en el Trabajo con el objetivo de ofrecer soluciones a través de un conjunto ordenado de definiciones, métodos de cálculo, y ejemplos sencillos que permiten obtener valores que no se consiguen fácilmente (on line free) o confirmar información dudosa.

Comienza con una introducción a los conceptos básicos de termoquímica aplicables a este tema, para ir adentrándose en las distintas alternativas del cálculo.

Finalmente se enumerarán algunos websites donde acceder a bases de datos de sustancias químicas que contienen la información necesaria.

Alfredo Basalo

Ing. Seguridad Ambiental
Lic. Seguridad e Higiene en el Trabajo

INTRODUCCIÓN A LA TERMOQUÍMICA

Definiciones

- ❖ **Química física** es una ciencia que estudia los principios que rigen las propiedades y el comportamiento de los sistemas químicos.
- ❖ **Termodinámica** es un área de la química física, que estudia las relaciones entre las diferentes propiedades de equilibrio de un sistema (calor, trabajo, energía) y los cambios que ellos producen en los estados de los sistemas.
- ❖ **Termoquímica** es la parte de la termodinámica que estudia los cambios de energía (calor) en las reacciones o procesos químicos.
- ❖ **Sistema** es una parte específica del universo de interés para nosotros.
 - **Sistemas abiertos** pueden intercambiar masa y energía (por lo general en forma de calor) con su entorno. Por ejemplo, agua contenida en un recipiente abierto.
 - **Sistemas cerrados** permiten la transferencia de energía (calor) pero no de masa. Por ejemplo, agua contenida en un recipiente cerrado.
 - **Sistemas aislados** no permiten la transferencia ni de masa ni de energía. Por ejemplo, agua contenida en un recipiente cerrado totalmente aislado.
- ❖ **Entorno** es el resto del universo externo al sistema. Por ejemplo, cuando realizamos una reacción química en el laboratorio, las sustancias químicas generalmente constituyen el sistema.
- ❖ **Calor (Q)** es la cantidad de energía necesaria para elevar la temperatura de cualquier cantidad de masa a otra temperatura dada. Se expresa habitualmente en **joules (J)** o **kilocalorías (kcal)**.
- ❖ **Temperatura** es una propiedad que determina si dos sistemas están en equilibrio térmico o no. Dos sistemas en **equilibrio térmico** entre sí tienen la misma temperatura, pero ésta será distinta si no existe ese equilibrio.
- ❖ **Trabajo (w)** que se efectúa al mover objetos contra una fuerza es igual al producto de la fuerza (F), por la distancia (d) que recorre el objeto y se expresa en **J** o **kcal**:

$$w = F \times d$$

- ❖ **Energía (E)** es la capacidad para realizar trabajo o para transferir calor y se expresa en **J** (Joule) o **cal** (calorías).

La energía no se puede ver, tocar, oler o pesar.

- **Energía térmica** es la energía asociada con el movimiento aleatorio de los átomos y las moléculas. En general, la energía térmica se puede calcular a partir de mediciones de temperatura.
- **Energía química** es una forma de energía almacenada entre las unidades estructurales de las sustancias; está determinada por el tipo y organización de los átomos de cada sustancia. Cuando las sustancias participan en una reacción química, la energía química se libera, se almacena o se convierte en otras formas de energía.
- **Energía potencial** es una energía que se encuentra almacenada y es el resultado de las atracciones y repulsiones que un objeto experimenta en relación a otros objetos. Por ejemplo, una piedra situada en la cima de una montaña tiene una mayor energía potencial y puede provocar un golpe mayor sobre el agua ubicada en el valle, que una piedra situada en la parte de abajo.
- **Energía cinética** es la energía debida al movimiento de un objeto. La energía cinética de un objeto en movimiento depende tanto de la masa como de la velocidad del mismo.
- ❖ **Funciones de estado** son propiedades de un sistema que están determinadas por los **estados inicial y final del sistema** y no por el camino recorrido para alcanzar el estado final; su valor es fijo cuando se especifican temperatura, presión, composición y forma física. Por ejemplo, la **presión**, el **volumen**, la **temperatura**, la **energía** y la **entalpía**, son funciones de estado.

PRIMERA LEY DE LA TERMODINÁMICA

❖ **Ley de la conservación de la energía o primera ley de la termodinámica** establece que todas las formas de energía pueden intercambiarse, pero no se pueden destruir ni crear, por lo cual la energía total del universo permanece constante. Cualquier energía que un sistema pierda deberá ser ganada por el entorno y viceversa.

- **Energía interna** o energía total de un sistema es una función de estado que se define como la suma de todas las energías cinéticas y potenciales de sus partes componentes.
- **Cambio o variación de energía interna (ΔU)** es la diferencia entre la energía interna del sistema al término de un proceso y la que tenía al principio. En una reacción química el **estado inicial** se refiere a los **reactivos** y el estado final a los **productos**.

$$\Delta U = U_{\text{final}} - U_{\text{inicial}} \text{ o } \Delta U = U_{\text{productos}} - U_{\text{reactivos}}$$

- Cuando $U_{\text{final}} > U_{\text{inicial}}$, el valor de ΔU es **positivo**, indicando que el sistema ganó energía de su entorno.
- Cuando $U_{\text{final}} < U_{\text{inicial}}$, el valor de ΔU es **negativo**, lo que indica que el sistema cedió energía a su entorno.
- Cuando un sistema sufre un cambio físico o químico, cambia su energía interna. Este cambio está determinado por el calor (Q) agregado o liberado del sistema, más el trabajo (w) realizado sobre o por el sistema:

$$\Delta U = Q + w$$

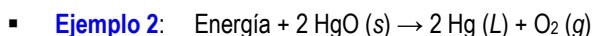
Tabla 1 - Convenciones de signos y la relación entre Q , w y ΔU .

Convención de signo para Q	Signo de $\Delta U = q + w$
$Q > 0$: se transfiere calor del entorno al sistema	$Q > 0$ y $w > 0$: $\Delta U > 0$
$Q < 0$: se transfiere calor del sistema al entorno	
Convención de signo para w	$Q > 0$ y $w < 0$: el signo de ΔU depende de las magnitudes de Q y w
$w > 0$: el entorno efectúa trabajo sobre el sistema	$Q < 0$ y $w > 0$: el signo de ΔU depende de las magnitudes de Q y w
$w < 0$: el sistema efectúa trabajo sobre el entorno	$Q < 0$ y $w < 0$: $\Delta U < 0$

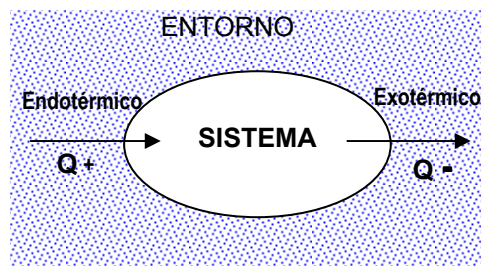
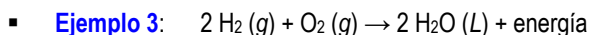
- **Ejemplo 1.** Calcular el cambio de energía interna del sistema en un proceso en el que el sistema absorbe 140 J y efectúa 85 J de trabajo sobre el entorno.

- $\Delta U = + 140 \text{ J} - 85 \text{ J} = + 55 \text{ J}$

- **Proceso endotérmico** es aquel en el que el sistema absorbe calor del entorno.



- **Proceso exotérmico** es aquel en el que el sistema libera calor al entorno.



ENTALPÍA

❖ **Entalpía (H)** de un sistema es una función de estado que expresa el calor liberado o absorbido durante un proceso, a presión constante.

❖ **Entalpía de reacción o calor de reacción (ΔH o Q_p)** es la diferencia entre las entalpías de los productos y las entalpías de los reactivos, a presión constante y se expresa en joule **J** o **kcal**.

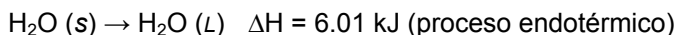
$$\Delta H = H_{\text{productos}} - H_{\text{reactivos}} = Q_p$$

La entalpía de reacción puede ser considerada como una medida de cuánto calor está almacenado en el sistema como energía potencial, o su "contenido de calor", por lo que puede tener un valor positivo o negativo.

➤ Para un **proceso endotérmico** ΔH es positivo.

➤ Para un **proceso exotérmico** ΔH es negativo.

- **Ejemplo 4:** Para que un mol de hielo pueda ser convertido en agua líquida, a presión constante, se requiere que el sistema (hielo) absorba 6.01 kilojoules (kJ) de energía, como se indica en la ecuación termoquímica siguiente:



donde:

$$\Delta H = H (\text{productos}) - H (\text{reactivos}) = H (\text{agua líquida}) - H (\text{hielo}) = 6.01 \text{ kJ}$$

- ❖ **Entalpía de cambio de estado, o calor latente** es la energía puesta en juego cuando un mol de sustancia que ya se encuentra a la temperatura adecuada, experimenta un cambio de estado de agregación a P y T constantes. (Calor latente de fusión. Calor latente de vaporización, etc).
- ❖ **Entalpía de disolución, ΔH_d** es la energía intercambiada cuando un mol de sustancia se disuelve por completo en una cantidad suficiente de disolvente, de forma que a posteriori no se produzca ningún cambio energético.

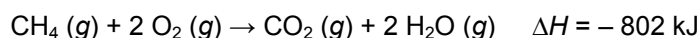
❖ **Entalpía de disociación, ΔH_d o energía de enlace** es la energía necesaria para romper un mol de enlaces de una sustancia en estado gaseoso, en su átomos correspondientes. (En solución serán iones).

❖ **ENTALPÍA DE COMBUSTIÓN, ΔH_c** es la energía térmica desprendida cuando un mol de una sustancia arde espontáneamente en O_2 a $P = 1 \text{ atm}$. (Para líquidos y sólidos se suele determinar en una bomba calorimétrica a volumen constante, para gases a presión constante). La mayoría de las reacciones químicas ocurren a presión constante y los incendios también, por lo tanto, el dato que más nos interesa es la **variación de entalpía a presión constante**)

❖ **Ecuaciones termoquímicas** son ecuaciones químicas balanceadas que indican el cambio de entalpía correspondiente. A continuación se proporciona una guía para utilizar este tipo de ecuaciones:

➤ **La entalpía es una propiedad extensiva.** La magnitud de ΔH es directamente proporcional a la cantidad de un reactivo consumido en el proceso.

- **Ejemplo 5:** Cuando se quema 1 mol de metano (CH_4), a presión constante, se producen 802 kJ de calor:



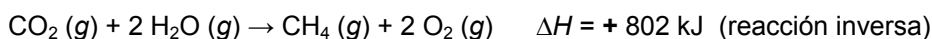
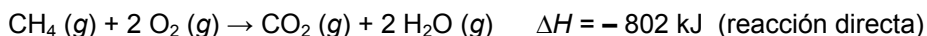
Por lo tanto, la combustión de dos moles de CH_4 con 4 moles de O_2 , liberará el doble de calor, es decir, 1 604 kJ.

- **Ejemplo 6:** Calcular cuánto calor se libera cuando 4.5 g de metano gaseoso se queman en un sistema a presión constante, considerando que la combustión de 1 mol de este gas produce 802 kJ. (*A calcular por el lector*).

PRIMERA LEY DE LA TERMOQUÍMICA o Ley de Lavoisier-Laplace (Conservación de la energía)

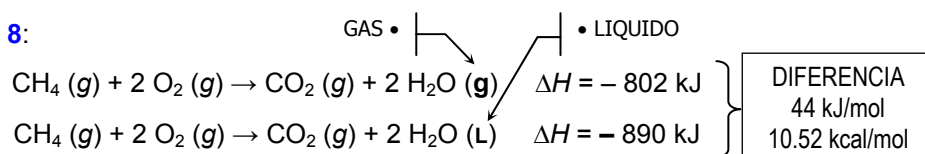
➤ **La variación de entalpía para una reacción tiene la misma magnitud pero signo opuesto para la reacción inversa.**

- **Ejemplo 7:**



- **El cambio de entalpía para una reacción depende del estado físico de los reactivos y de los productos.**

- **Ejemplo 8:**



La diferencia en los valores de ΔH de las ecuaciones termoquímicas anteriores se debe a que se requieren energías diferentes para obtener H_2O líquida y H_2O gaseosa. (Calor latente de vaporización).

- **El cambio de entalpía de una reacción depende de la temperatura.** Los cambios de entalpía generalmente se expresan a una **temperatura de referencia de 25 °C**.
- **El cambio de entalpía de una reacción depende del grado de avance de la reacción.** Ver en **ejemplo 19**, segundo ítem, la reacción de detonación del nitrometano es una combustión incompleta. (En general consideraremos combustiones completas).

CALORIMETRÍA

- ❖ La **calorimetría** se refiere a la medición de flujo de calor en un sistema. Los cambios calor se miden en un **calorímetro**. A volumen constante o a presión constante.
 - A volumen constante, entregan ΔU .
 - A presión constante, entregan ΔH .
 - Se determine uno u otro, siempre puede conocerse ΔH porque: $\Delta H = \Delta U + \Delta(pV)$. Si se trata de sólidos o líquidos, el cambio de volumen es despreciable. En el caso de gases el cambio es significativo y es importante tener en cuenta el número de moles a ambos lados de la ecuación.
- ❖ **Capacidad calorífica (C)** de una sustancia es la cantidad de calor requerido para elevar en un grado Celsius la temperatura de una cantidad dada de la sustancia. Se expresa en **J/°C** ó **kcal/°C**.
 - **Capacidad calorífica molar** de una sust. es la cantidad de calor requerido para elevar en un grado Celsius la temperatura de un mol de la dada sustancia. Se expresa en **J/mol °C** ó **kcal/mol °C**
 - **Calor específico (c)** de una sustancia es la cantidad de calor que se requiere para elevar un grado Celsius la temperatura de un gramo de la sustancia y se expresa en **J/g K** ó **J/g °C**. También en **kcal/g K** ó **kcal/g °C**
 - La relación entre la capacidad calorífica y el calor específico es la siguiente:

$$C = m c$$

donde: **C** = capacidad calorífica (J/°C); **m** = masa de la sustancia (g); **c** = calor específico (J/g °C)

- **Ejemplo 9:** Calcular la capacidad calorífica de 60 g de agua si su calor específico es 4.184 J/g °C $C = 60 \text{ g} \times 4.184 \text{ J/g } ^\circ\text{C} = 251 \text{ J/}^\circ\text{C}$

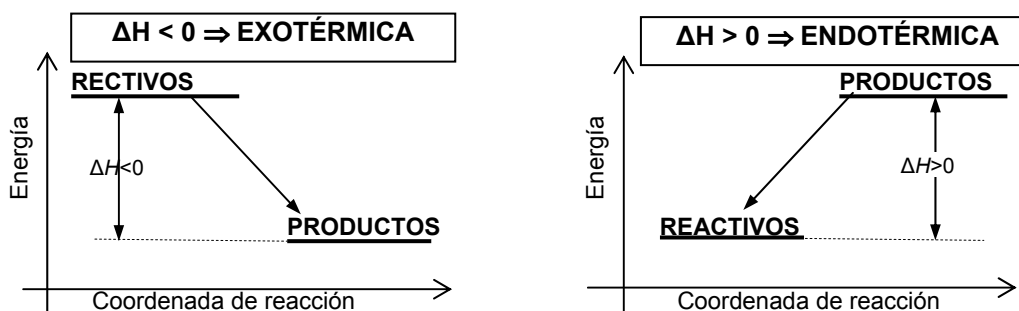
Si se conocen el calor específico (c) y la cantidad de sustancia (m), entonces el **cambio en la temperatura (Δt)** de la muestra, indicará la cantidad de calor (q) que se absorbe en un proceso:

$$q = m c \Delta t = C \Delta t$$

donde: $\Delta t = t_{\text{final}} - t_{\text{inicial}}$

ENTALPÍA ESTÁNDAR DE FORMACIÓN Y DE REACCIÓN

- ❖ **Entalpía estándar de formación (ΔH_f°)** o **calor de formación** de un compuesto en estado estándar es el cambio de calor que resulta de la formación de **un mol** de un compuesto a partir de sus elementos en sus **estados estándar** y se expresa en J/mol o en kcal/mol.

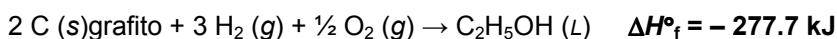


- **Estado estándar**, indicado con el superíndice (°), se refiere a la condición de **1 atm de presión**. Si un elemento existe en más de una forma alotrópica en condiciones estándar, se utiliza la forma más estable del elemento para la reacción de formación, debiendo especificarse la temperatura de referencia, **298 K (25 °C)** y si se trata una solución, será **1 molar**. (También se lo denomina **estado normal** según autores).

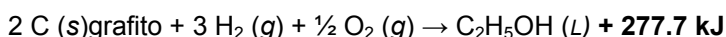
- **Ejemplo 10:** Ecuación termoquímica:

Entalpía estándar de formación para el etanol, C₂H₅OH.

Nomenclatura: (s)=sólido; (g)=gas; (L)=líquido. En algunos casos se usa (c)= cristalino; (v)= vapor.



También se suele escribir así:



- **La entalpía estándar de formación de la forma más estable de cualquier elemento se establece como 0 (cero) así como los gases biatómicos.** (Ej. N₂).

- **Ejemplo 11:**

$\Delta H^\circ_f \text{ C (grafito)} = 0 \text{ kJ/mol}$, porque el grafito es una forma alotrópica del carbono más estable que el diamante a 1 atm y 25 °C.

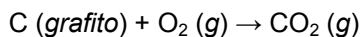
$\Delta H^\circ_f \text{ O}_2 \text{ (g)} = 0 \text{ kJ/mol}$, porque el oxígeno molecular (O₂) es una forma alotrópica más estable que el ozono (O₃) a 1 atm y 25 °C.

- **Entalpía estándar de reacción (ΔH°_r)** es el cambio de entalpía cuando todos los reactivos y productos están en su estado estándar:

$$\Delta H^\circ_r = \sum n \Delta H^\circ_{f(\text{productos})} - \sum m \Delta H^\circ_{f(\text{reactivos})}$$

donde: *n* y *m* = coeficientes estequiométricos de los reactivos y productos.

- **Ejemplo 12:** Calcular el ΔH°_r para la siguiente reacción:



A partir de datos registrados en Tablas:

$$\Delta H^\circ_f \text{ C (grafito)} = 0 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H^\circ_f \text{ O}_2 \text{ (g)} = 0 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H^\circ_f \text{ CO}_2 \text{ (g)} = -393.5 \text{ kJ/mol}$$

Por lo tanto:

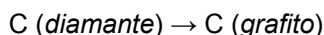
$$\Delta H^\circ_r = (-393.5 \text{ kJ/mol}) - (0 \text{ kJ/mol} + 0 \text{ kJ/mol}) = -393.5 \text{ kJ}$$

Este es el calor que se libera cuando reacciona una mol de C con un mol de O₂.

SEGUNDA LEY DE LA TERMOQUÍMICA o **Ley de Hess** (Conservación de la energía)

- ❖ Si una reacción se efectúa en varias etapas, la entalpía estándar de reacción (ΔH°_r) es igual a la suma de los cambios de entalpía para las etapas individuales. (Función de estado).

- **Ejemplo 13:** Calcular la entalpía estándar de reacción para el siguiente proceso:



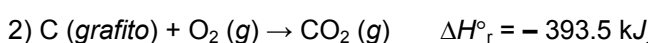
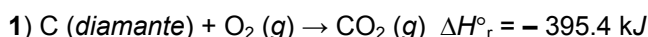
Por definición:

$$\Delta H^\circ_f C \text{ (grafito)} = 0 \text{ kJ/mol}$$

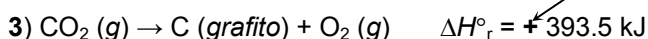
$$\Delta H^\circ_f C \text{ (diamante)} = ?$$

La reacción de conversión de diamante a grafito es muy lenta (puede tomar millones de años para consumirse), por lo que no se puede colocar el diamante en un calorímetro para medir el cambio de calor experimentalmente.

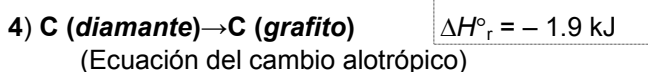
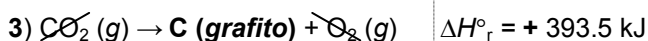
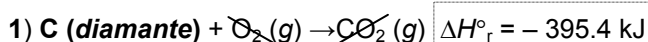
Por lo tanto, para determinar ΔH°_r en este proceso se lleva a cabo un **procedimiento indirecto**, ya que se pueden medir los cambios de entalpía para las siguientes dos reacciones:



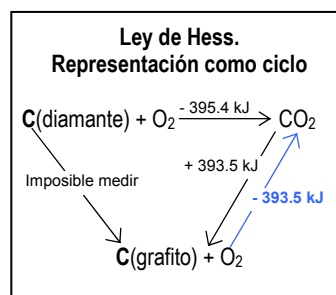
Invirtiendo 2)



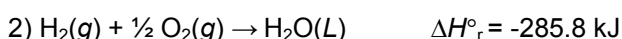
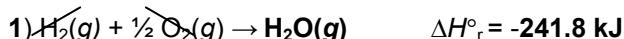
Sumando (1+3)



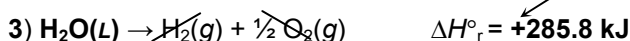
Cambio de signo por Ley de Lavoisier-Lapalce



- **Ejemplo 14:** Calcular la entalpía de vaporización del agua en condiciones estándar.



Invirtiendo 2)



Sumando (1+3)



Cambio de signo por Ley de Lavoisier-Lapalce

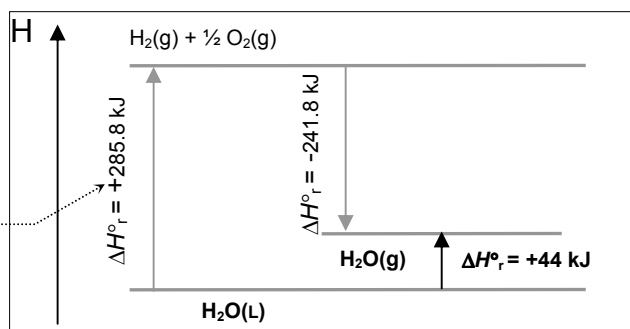
Ver Ejemplo 8

ESQUEMA DE LA LEY DE HESS

Para el último ejemplo:



Inversión por Ley de Lavoisier - Lapalce



LEY DE HESS

RESUMEN DE REGLAS PARA SU APLICACIÓN

Recordar que ΔH es función de estado, por lo tanto depende del estado inicial y final, siendo independiente del camino recorrido.

- 1- UNA REACCIÓN SE PUEDE OBTENER POR COMBINACIÓN DE OTRAS MEDIANTE SUMAS, RESTAS, MULTIPLICACIONES, ETC.**
- 2- LA ENTALPÍA DE ESA REACCIÓN SE OBTIENE MEDIANTE OPERACIONES MATEMÁTICAS SIMILARES, CON LAS ENTALPÍAS DE LAS REACCIONES CORRESPONDIENTES.**
- 3- REACCIONES INVERSAS TIENEN ENTALPÍAS IGUALES EN VALOR ABSOLUTO PERO CON SIGNO CONTRARIO. (Lavoisier-Lapalce)**

CARGA DE FUEGO

La Ley N° 19587 / 72, en su Decreto Reglamentario N° 351 / 79, Anexo VII, Capítulo 18, titulado Protección contra incendios, establece las definiciones relacionadas con el presente trabajo, que se transcriben textualmente a continuación.

- 1.2 “**Carga de fuego: Peso en madera por unidad de superficie (kg/m^2) capaz de desarrollar una cantidad de calor equivalente a la de los materiales contenidos en el sector de incendio. Como patrón de referencia se considerará madera con poder calorífico inferior de 18,41 MJ / kg”. Fin de la cita.**

Nota: 18,41 MJ/kg = 4399 kcal/kg \cong 4,40 Mcal/kg.

- ❖ **PODER CALORÍFICO** es la entalpía de la reacción de combustión con signo contrario. (No confundir con capacidad calorífica, ver definición en pág. 4)

Sinónimo: **CALOR DE COMBUSTIÓN**

En general la literatura específica dice que el cambio de signo es por comodidad sin aclarar más. Lo que ocurre es que las combustiones son reacciones de oxidación, exotérmicas y por lo tanto ΔH tiene signo negativo debido a que el **sistema** formado por los reactivos mas los productos de reacción ceden calor al **entorno**. Pero como el objetivo es que dicho calor sea transferido a otro sistema (ej. caldera), ingresará con signo positivo. De la misma forma, desde el punto de vista de un incendio, nos interesa como afectará su ingreso a otro sistema (ej. estructura edilicia).

- **Poder calorífico inferior (PCI)** es el calor entregado al entorno a presión constante cuando una unidad de combustible se quema completamente en estado de régimen permanente, de tal manera que los productos salen también en condiciones de referencia y **la totalidad del agua producida por la combustión del hidrógeno está en estado de vapor.**
- **Poder calorífico superior (PCS)** se define de la misma forma pero teniendo en cuenta que en este caso **la totalidad del agua producida por la combustión del hidrógeno está en estado líquido.** Es decir que el agua ha entregado su calor latente de vaporización.
- ❖ El Dto. 351 transcrito más arriba dice que la condición de referencia establece para el equivalente en madera, el poder calorífico inferior, por lo tanto la comparativa se hará con los poderes caloríficos inferiores de las sustancias en estudio. Lo cual tiene sentido porque el calor latente de vaporización del agua se entregará a una temperatura menor que la del incendio y lejos del mismo.
 - En consecuencia nuestro objetivo es **obtener poderes caloríficos inferiores** o en su defecto calcularlos.
 - Una precaución elemental es verificar la confiabilidad de nuestras fuentes de información y mencionarlas en el informe. En algunas tablas podemos encontrar poderes caloríficos a 10 °C, 15 °C ó 20 °C. Se pueden usar como si fueran a 25 °C porque el error en que se incurre es similar al que cometeríamos en una determinación calorimétrica.

CÁLCULO DE PODER CALORÍFICO

SUSTANCIAS QUÍMICAS PURAS

AUTOR: ING. ALFREDO BASALO

Una fuente muy confiable aunque con pocas sustancias es el Manual del Ingeniero Químico de Perry & Chilton. Veamos como presenta los datos. Mostraremos el encabezado (muy útil) y una sustancia.

Tabla 2

Compuesto	Fórmula	Estado	Calor de combustión, $-\Delta H^{\circ}_c$, a 25 °C y presión constante	
			H ₂ O (líq) y CO ₂ (gas)	H ₂ O (gas) y CO ₂ (gas)
			kcal / mol	kcal / mol
Hidrógeno	H ₂	Gas	68.3174	57.7979
Carbono	C	Sól. grafito	94.0518	
Carbono, monóxido	CO	Gas	67.6361	

Parafinas

n-Hexano	C ₆ H ₁₄	Gas	1002.57	928.93
n-Hexano	C ₆ H ₁₄	Líqu.	995.01	921.37

El poder calorífico inferior es el indicado en gris porque la sustancia, n-hexano, a 25 °C se encuentra en estado líquido y el dato elegido es el que corresponde a H₂O(g) = **921.37 kcal / mol**.

Con una tabla como esta tenemos todos los problemas resueltos pero observamos que hay cuatro poderes calorífico distintos para una misma sustancia.

Son poderes caloríficos inferior y superior para dos condiciones iniciales distintas, sustancia en estado gas y sustancia en estado líquido.

Si estamos frente a alguno de los otros tres datos debemos corregir para obtener el PCI buscado.

Cuando encontramos un valor de poder calorífico sin ninguna aclaración, debemos suponer que es la entalpía de reacción estándar, cambiada de signo. Pero como la condición de referencia respecto a la temperatura es 25 °C (estado inicial y final), tenemos que a esta temperatura final, el agua ya entregó su calor latente de vaporización y en consecuencia estamos frente a un poder calorífico superior. No es el objetivo buscado y debemos corregir.

Para manejar estas conversiones, debemos disponer de alguna información:

- ❖ Tener bien en claro la reacción involucrada.
 - n-Hexano: $C_6H_{14}(L) + 9\frac{1}{2}O_2(g) \rightarrow 6CO_2(g) + 7H_2O(g)$ [7 moles de agua por mol de hexano].
- ❖ Estado físico de la sustancia a 25°C y 1 Atm.
 - n-Hexano: Líquido (L).
- ❖ Peso molecular de la sustancia.
 - n-Hexano: PM = **86.17 g / mol**.
- ❖ Calor latente de vaporización de la sustancia.
 - n-Hexano: $\Delta H_v = 87.5 \text{ cal / g}$.

Como vamos a trabajar en moles, $\Delta H_v \times PM = 87,5 \text{ cal / g} \times 86.17 \text{ g / mol} = 7539.9 \text{ cal / mol}$

$\Rightarrow \Delta H_v(\text{hexano}) = 7.54 \text{ kcal / mol}$.

- ❖ Calor latente de vaporización del agua. (Ya calculados, ver ejemplos 8 y 14).

➤ $\Delta H_v(\text{agua}) = 10.52 \text{ kcal / mol}$ ó 44 kJ / mol.

- **Ejemplo 15.**

PCS(hexano)(L) = 995.01 kcal / mol

Calcular PCI (hexano)

- En PCS (hexano)(L) el agua está líquida porque entregó el calor latente de vaporización de los moles de agua formados (7 moles). \Rightarrow debemos restar dicho valor

- $Pci = 995.01 \text{ kcal / mol} - 7 \times 10.52 \text{ kcal / mol} = \boxed{921.37 \text{ kcal / mol}}$

▪ **Ejemplo 16**

PCI (hexano)(g) = 928.93 kcal / mol Calcular PCI (hexano)

En PCI (hexano)(g) el agua está gaseosa pero el hexano debe entregar su calor latente de vaporización. ⇒ Restar el calor latente de vaporización del mol de hexano reaccionado.

• PCI = 928.93 kcal / mol – 1x 7.54 kcal / mol = **921.39 kcal / mol**

▪ **Ejemplo 17**

PCS (hexano)(g) = 1002.57 kcal / mol Calcular PCI (hexano)

▪ En PCS (hexano)(g) el agua está líquida porque entregó el calor latente de vaporización pero el hexano gaseoso debe entregar su calor latente de vaporización. ⇒ Restar el calor latente de vaporización del mol de hexano reaccionado y de los 7 moles de agua formados.

• Suma de calores vaporización: 7x10.52 kcal / mol + 1x 7.54 kcal / mol = 81.18 kcal/mol

• PCI = 1002.57 kcal / mol – 81.18 kcal / mol = **921.39 kcal / mol**

MÉTODO DE LA ENERGÍA DE FORMACIÓN

Hasta aquí hemos visto cómo obtener el PCI a partir de otras expresiones del poder calorífico.

❖ Se nos puede plantear la situación en la que no tengamos ninguna información de poder calorífico de la sustancia en estudio. Pero cuando definimos entalpía estándar de reacción establecimos que: $\Delta H^{\circ}_r = \sum n \Delta H^{\circ}_{f(\text{productos})} - \sum m \Delta H^{\circ}_{f(\text{reactivos})}$

donde: *n* y *m* = coeficientes estequiométricos de los reactivos y productos

En el ejemplo 12 vimos que la combustión del grafito nos permitía determinar $\Delta H^{\circ}_r(\text{CO}_2) = \Delta H^{\circ}_f(\text{CO}_2)$ muy fácilmente debido a que $H^{\circ}_f \text{ grafito} = 0$ y $H^{\circ}_f \text{ O}_2 = 0$ por definición.

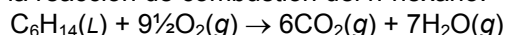
Aquí se nos complica el cálculo porque necesitamos la entalpía de formación del n-hexano. Afortunadamente hay abundante información disponible sobre entalpías de formación (que también incluyen sustancias no hidrocarburos).

Otra vez recurrimos al Manual del Ingeniero Químico de Perry & Chilton. Veamos como presenta los datos. Mostraremos el encabezado y la sustancia que estamos usando como ejemplo (n-hexano).

Tabla 3 **Calores y energías libres de formación de compuestos orgánicos e inorgánicos**

Compuesto	Estado	Calor de formación. ΔH (formación) a 25 °C kcal / mol	Energía libre de formación. ΔF (formación) a 25 °C kcal / mol
n-hexano	Gas	- 39.96	0.05
n-hexano	Líqu.	- 47.52	-0.91

➤ Veamos nuevamente la reacción de combustión del n-hexano.



➤ **Ejemplo 18**

Calcular la entalpía de reacción (combustión) del n-hexano con los datos disponibles hasta el momento.

- $H^{\circ}_f \text{ O}_2 = 0$ por definición.
- $H^{\circ}_f \text{ CO}_2(\text{g}) = H^{\circ}_c(\text{C, grafito}) = -94.0518$ kcal / mol (Perry tabla, PCI con signo invertido).
- $H^{\circ}_f \text{ H}_2\text{O}(\text{g}) = H^{\circ}_c(\text{H}_2, \text{gas}) = -57.7979$ kcal / mol (Perry tabla, PCI con signo invertido).
- $H^{\circ}_f \text{ C}_6\text{H}_{14}(\text{L}) = -47.52$ kcal / mol Tabla 3 (Perry energía de formación. Obsérvese que tomamos el valor grisado que corresponde al estado líquido por ser el estado normal a 1atm. y 25 °C.

$$\bullet \quad \Delta H^{\circ}_r = \Delta H^{\circ}_c = (6 \times H^{\circ}_f \text{ CO}_2(g) + 7 \times H^{\circ}_f \text{ H}_2\text{O}(g)) - (H^{\circ}_f \text{ O}_2 + H^{\circ}_f \text{ C}_6\text{H}_{14}(L))$$

$$\text{Reemplazando} = \underbrace{[6(-94.0518) + 7(-57.7979)]}_{\text{Entalpías de productos de la reacción}} - \underbrace{[9.5(0) + 1(-47.52)]}_{\text{Entalpías de reactivos}}$$

$$\Rightarrow \Delta H^{\circ}_r = \Delta H^{\circ}_c = -968.9 + 47.52 = -921.38 \text{ kcal/mol.}$$

$$\bullet \quad \text{Como PCI} = -\Delta H^{\circ}_c, \text{ invertimos el signo} \Rightarrow \text{PCI} = \boxed{+921.38 \text{ kcal/mol}}$$

Nota: Las claves para este método son:

- 1) Disponer de la entalpía de formación del combustible.
- 2) Conocer claramente la reacción involucrada y su estequiometría.

➤ **Ejemplo 19** (Reacciones de combustión)

- Reacción de combustión de metilamina.
 $\text{CH}_3\text{NH}_2(g) + 2\frac{1}{2} \text{ O}_2(g) \rightarrow \text{CO}_2(g) + 2\frac{1}{2} \text{ H}_2\text{O}(g) + \frac{1}{2} \text{ N}_2(g)$
- Reacción de detonación de nitrometano (calorímetro 1ml)
 $\text{CH}_3\text{NO}_2(L) \rightarrow \frac{1}{2} \text{ H}_2\text{O}(L) + \frac{1}{4} \text{ CO}_2(g) + \frac{1}{2} \text{ N}_2(g) + \frac{3}{4} \text{ C}(s)$

MÉTODO DE LA ENTALPÍA DE ENLACE

En ocasiones no encontramos el valor buscado o no disponemos de la información necesaria para calcularlo.

Anteriormente definimos la entalpía de enlace como: la energía necesaria para romper un mol de enlaces de una sustancia en **estado gaseoso**, en sus átomos correspondientes.

Esta energía acumulada en los enlaces tiene una contribución importante en el total de la entalpía de la molécula y puede obtenerse una aproximación a la variación de entalpía de reacción en una combustión, a partir del balance energético entre los reactivos y los productos de la combustión.

❖ La tabla adjunta es una recopilación de valores de energías medias de enlace publicadas por varios autores donde se observan algunas discrepancias según la fuente del dato.

➤ **SON VALORES MEDIOS.**

Para moléculas diatómicas con un solo enlace, se corresponde con la energía necesaria para romper un mol de dicha sustancia en los átomos que la constituyen.

Para moléculas poliatómicas se toma como el valor medio necesario para romper cada uno de los enlaces iguales

▪ **Ejemplo 20**

- Para romper el primer enlace H-O en el H₂O se necesitan 495 kJ / mol.
- Para romper el segundo enlace H-O en el H₂O se necesitan 425 kJ / mol.
- Por lo tanto se suele tomar 460 - 463 kJ / mol como valor medio para el enlace H-O

➤ Aplicando la ley de Hess se pueden obtener la energía de una reacción si se sabe qué enlaces se tienen que romper y cuáles se tienen que formar.

▪ **Expresión general: $\Delta H^{\circ}_r = \sum n_i \times E(\text{enlaces rotos}) - \sum n_i (\text{enlaces formados})$**

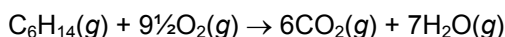
Donde n_i representa el número de enlaces rotos y formados de cada tipo.

Tabla 4

Enlace	ΔH_e	
	kJ/mol	kcal/mol
Br - Br	193	46
C = C	612	146
C = C	682	163
C = O	711	171
C ≡ C	837	200
C ≡ C	962	230
C ≡ N	891	213
C - C	348	83
C - Cl	243	58
C - H	417	98
Cl - Cl	242	58
C - N	305	73
C - O	360	86
F - F	158	38
H - Br	366	87
H - Cl	431	103
H - F	565	135
H - H	436	104
H - I	299	71
I - I	151	36
N = N	409	98
N = O	600	143
N ≡ N	944	226
N - H	388	93
N - H	391	93
N - N	163	39
N - O	200	48
O = O	496	119
O - H	463	111
O - O	157	38

- **Ejemplo 21.** Cálculo de poder calorífico.

Aplicamos el método a la misma sustancia que estamos estudiando, n-hexano.



- Cálculo de la variación de entalpía (balance energético)

Tabla 5

ROMPER	ΔH kJ	Nro. enlaces	Total kJ	FORMAR	ΔH kJ	Nro. enlaces	Total kJ
C-H	412	14	5838	C=O	743	12	8916
C-C	348	5	1740	O-H	463	14	6482
O=O	496	9.5	4712				
Total romper 12290				Total formar 15398			

- ♦ Balance:

$$\Delta H_r = \text{Enlaces rotos} - \text{enlaces formados}$$

$$= 12200 \text{ kJ} - 15398 \text{ kJ} = -3198 \text{ kJ} = -746.9 \text{ kcal}$$

Calculamos sobre un mol de hexano, entonces será $\Delta H_r = \Delta H_c = -746.9 \text{ kcal/mol}$. Para expresarlo como poder calorífico invertimos el signo.

$$\Rightarrow PCI(g) = +747 \text{ kcal/mol}$$

Estamos en estado gaseoso y partimos de estado gaseoso. En el cálculo, el agua debe permanecer en este estado pero si queremos expresar $PCI(L)$ la condición inicial debió haber sido a una temperatura de $25^\circ C$, en la cual el hexano se encuentra líquido. Por lo tanto el hexano deberá ceder su calor latente de vaporización para llegar al $PCI(L)$. Deberíamos hacer el cálculo.

Pero a los efectos de verificación, si observamos la Tabla 1, vemos que el PCI para el estado **gas – gas** es de **928.93 kcal/mol** mostrando una significativa diferencia con el valor calculado para una condición equivalente. (Error por defecto de 20 %).

- **CONCLUSIÓN:** El método de balance energético de las **energías medias de enlace** sólo sirve para obtener valores aproximados. Deberá ser usado como orientativo cuando no se dispone de mejor información.

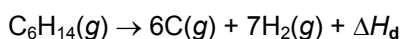
- El error es debido principalmente a que se utilizan **valores medios** de energía de enlace para todos los términos de la ecuación de reacción.

¿Cómo podemos minimizar el error?

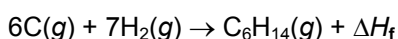
- 1 – Dentro de las reacciones, estamos estudiando el caso particular de **COMBUSTIÓN**.
- 2 – Los productos de la combustión son conocidos y sus entalpías de formación también.
- 3 – Sólo nos falta saber la entalpía de formación del combustible y luego aplicar la definición de entalpía estándar de reacción, siguiendo la metodología del **ejemplo 18**.
- Si aplicamos el método de energías medias de enlace al **calor de formación** del combustible, tendremos sólo un término de la ecuación con error. El resto son precisos por ser conocidos.
- **Ejemplo 22.** Cálculo de la entalpía de **formación** ΔH_f° .

Aplicamos el método a la misma sustancia que estamos estudiando, n-hexano.

Para ello utilizaremos la reacción de disociación del n-hexano



Por Lavoisier Laplace podemos invertir la ecuación.



- Cálculo de la variación de entalpía de formación (balance energético).

Tabla 6

ROMPER	ΔH kJ	Nro. enlaces	Total kJ	FORMAR	ΔH kJ	Nro. enlaces	Total kJ
H-H	436	7	3052	C-H	417	14	5838
C(s) \rightarrow C(g) Cambio est. físico	716.7	6	4300	C-C	348	5	1740
Total romper			7352	Total formar			7578

- ◆ Balance:

$$\Delta H_r = \text{Enlaces rotos} - \text{enlaces formados}$$

$$= 7352 \text{ kJ} - 7578 \text{ kJ} = -226 \text{ kJ} = -56 \text{ kcal}$$

Calculamos sobre un mol de hexano, entonces será $\Delta H_f = -56 \text{ kcal/mol}$.

$$\Rightarrow \Delta H_f \text{ hexano(g)} = -56 \text{ kcal/mol}$$

Estamos en estado gaseoso pero la condición estándar es a 25 °C donde el estado físico del n-hexano es líquido. Por lo tanto el hexano deberá ceder su calor latente de vaporización. ΔH_v (hexano) = 7.54 kcal/mol

$$\Rightarrow \Delta H_f^{\circ} \text{ hexano(L)} = -56 \text{ kcal/mol} + 7.54 \text{ cal/mol} = \boxed{-48.46 \text{ kcal/mol}}$$

- Aplicación del **ejemplo 18**

$$\bullet \Delta H_r^{\circ} = \Delta H_c^{\circ} = (6 \times H_f^{\circ} \text{ CO}_2(\text{g}) + 7 \times H_f^{\circ} \text{ H}_2\text{O}(\text{g})) - (H_f^{\circ} \text{ O}_2 + H_f^{\circ} \text{ C}_6\text{H}_{14}(\text{L}))$$

$$\text{Reemplazando} = \underbrace{[6(-94.0518) + 7(-57.7979)]}_{\text{Entalpías de productos de la reacción}} - \underbrace{[9.5(0) + 1(-48.46 \text{ kcal/mol})]}_{\text{Entalpías de reactivos}}$$

$$\Rightarrow \Delta H_r^{\circ} = \Delta H_c^{\circ} = -968.9 + 48.46 = -920.44 \text{ kcal/mol}$$

- Como PCI = $-\Delta H_c^{\circ}$, invertimos el signo $\Rightarrow \text{PCI} = \boxed{+920.44 \text{ kcal/mol}}$

- Valor calculado en el **ejemplo 18** + **921.38 kcal / mol**

- Verificación **Tabla 2** (Manual Ing. Químico – Perry)... + **921.37 kcal / mol**

- Diferencia entre valor calculado y Tabla 2 - 0.93 kcal / mol

- Error porcentual + 0.1 %

Evidentemente, el error cometido en el cálculo del calor de formación (ver **Tabla 3**) tiene una incidencia prácticamente despreciable en el cálculo de PCI.

MÉTODO DE ENERGÍA DE GRUPOS DE ENLACE (MÉTODO BENSON)

- ❖ Para obtener mayor precisión, Benson demostró estadísticamente con buena aproximación, que es posible calcular la entalpía de formación de las sustancias, en fase gas, a partir de la sumatoria de las energías de diferentes grupos de enlaces interátomos.

Por lo tanto, una vez calculada la entalpía de formación, podemos calcular la entalpía de reacción de combustión aplicando el método del ejemplo 18. El error estimado en la entalpía de formación es del orden de $\pm 3 \%$. La mayor precisión se obtiene cuando los enlaces son covalentes.

➤ Limitaciones del método.

- Los errores más significativos aparecen en los siguientes casos:
 - Estructuras muy ramificadas.
 - Estructuras que contienen elementos muy electronegativos (halógenos).
 - En algunos casos, la energía de enlace de grupos inestables es desconocida.
 - Cuando son sólidos o líquidos hay que aplicar correcciones.
(ver **ejemplo 22** n-hexano corregido por calor latente de vaporización).
 - ◆ Pero el calor latente es difícil de medir en sustancias inestables.
- El inconveniente que más limita la aplicación de este método es que en la bibliografía publicada, el listado de energías de grupos es muy incompleta.

▪ **Ejemplo 23**

Entalpía de formación de n-hexano (gas).

$$\begin{aligned} \Delta H_f^\circ (\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3) &= \\ &= 2[\text{C} - (\text{C}) (\text{H})_3] + 4[\text{C} - (\text{C})_2 (\text{H})_2] = \\ &= -2 \times 10.20 - 4 \times 4.93 = \mathbf{-40.12 \text{ kcal/mol}} \end{aligned}$$

- Verificación: **Tabla 3**: -39.96 kcal/mol
- Diferencia - 0.16
- Error 0.4 % en exceso

▪ **Cálculo del PCI**

- Como el hexano se encuentra en estado gas, y debemos partir de hexano líquido, se deberá corregir por el calor latente de vaporización -7.56 kcal/kg.

$$\Rightarrow \Delta H_f^\circ \text{Hexano (L)} = -40.12 - 7.56 = \mathbf{-47.68 \text{ kcal/kg}}$$

- A partir de aquí calculamos el PCI siguiendo los pasos del **ejemplo 18** que se transcriben a continuación.

$$\Delta H_r^\circ = \Delta H_c^\circ = (6 \times H_f^\circ \text{CO}_2(g) + 7 \times H_f^\circ \text{H}_2\text{O}(g)) - (H_f^\circ \text{O}_2 + H_f^\circ \text{C}_6\text{H}_{14}(L))$$

$$\text{Reemplazando} = \underbrace{[6(-94.0518) + 7(-57.7979)]}_{\text{Entalpías de productos de la reacción}} - \underbrace{[9.5(0) + 1(-47.68)]}_{\text{Entalpías de reactivos}}$$

$$\Rightarrow \Delta H_r^\circ = \Delta H_c^\circ = -968.9 + 47.68 = -921.22 \text{ kcal / mol}$$

- Como PCI = -ΔH_c^o, invertimos el signo ⇒ PCI = **+ 921.22 kcal / mol**
- Valor calculado en el **ejemplo 18** + **921.38 kcal / mol**
- Verificación **Tabla 2** (Manual Ing. Químico – Perry)... + **921.37 kcal / mol**
- Diferencia entre valor calculado y Tabla 2 + 0.15 kcal / mol
- Error porcentual + 0.02 %

(El error cometido en el cálculo del calor de formación queda prácticamente eliminado en el cálculo de PCI)

▪ **Ejemplo 24**

Los ejemplos 24 y 25 se presentan para ilustrar la aplicación del método a sustancias que no son hidrocarburos. (El error es mas significativo).

Entalpía de formación de nitrato de metilo (gas).

$$\begin{aligned} \Delta H_f^\circ (\text{CH}_3\text{-O-NO}_2) &= [\text{C} - (\text{O}) (\text{H})_3] + [\text{O} - (\text{C}) (\text{NO}_2)] = \\ &= [-10.08 \text{ kcal}] + [-19.4 \text{ kcal}] = \\ &= \mathbf{-30.26 \text{ kcal / mol}} \end{aligned}$$

$$\Delta H_f^\circ (\text{experimental}) = \mathbf{-26.81 \text{ kcal / mol}} \text{ (Diferencia } -3.45 \text{ kcal/mol: error } +12.9 \%)$$

▪ **Ejemplo 25**

Entalpía de formación de tetrahydro furano (gas).

$$\Delta H_f^\circ (\text{tetrahydro furano}) = 2[\text{C} - (\text{C})_2 (\text{H})_2] + 2[\text{C} - (\text{C}) (\text{H})_2(\text{O})] + [\text{O} - (\text{C})_2] + 5.90 \text{ Corrección ciclo no plano} =$$

$$\begin{array}{c} \text{H}_2 - \text{C} - \text{C} - \text{H}_2 \\ | \quad | \\ \text{H}_2 - \text{C} \quad \text{C} - \text{H}_2 \\ \quad \quad \backslash \quad / \\ \quad \quad \quad \text{O} \end{array} = 2(-4.93) + 2(-8.10) -23.20 + 5.90 =$$

$$= \mathbf{-43.36 \text{ kcal / mol}}$$

$$\mathbf{-44.02 \text{ kcal / mol}} \text{ } (\Delta H_f^\circ \text{ experimental})$$

$$\text{(Diferencia } -0.66 \text{ kcal/mol: error } -1.5 \%)$$

Tabla 6 – Entalpía de formación de algunos grupos de enlaces

Grupos de enlaces	ΔH _f ^o (kcal/mol)	ΔH _f ^o (kJ/mol)
C - (C) (H) ₃	-10.20	-42.71
C - (C) ₂ (H) ₂	-4.93	-20.64
C - (C) ₃ H	-1.90	-7.96
C - (C) ₄	+0.50	+2.09
O - (NO ₂)	-3.00	-12.56
C - (O)(H ₃)	-10.08	-42.21
O - (C) (NO ₂)	-19.40	-81.23
O - (C) ₂	-23.20	-97.14
C - (C) (H) ₂ (O)	-8.1	-33.92
Corrección ciclo no plano	+5.90	+24.7

Sitios Web de donde bajar poder calorífico o entalpía de combustión

- ❖ <http://www.toxnet.nlm.nih.gov> – Accede a un sistema multibase.
 - En Selcet Database seleccionar HSDB (Hazardous Substances Data Base)
 - En Search HSDB ingresar (en inglés) el nombre de la sustancia o sinónimo o Nro. de CAS.
 - Activar el botón Yes.
 - Seleccionar la sustancia dentro de los hallazgos desplegados.
 - En el panel CONTENTS, seleccionar Chemical/Physical Properties.
 - Buscar hacia abajo Heat of Combustión. También se encuentra Heat of Vaporisation.
 - AMBOS NO ESTÁN DISPONIBLES PARA TODAS LAS SUSTANCIAS.

- ❖ <http://Webbook.nist.gov/chemistry/> - Accede al Libro de Web de Química del NIST.
 - Bajar a Opciones de búsqueda
 - Elegir la opción. Ej. nombre.
 - Muestra casilla para introducir el nombre (en inglés).
 - Ingresar el nombre.
 - Seleccionar las unidades deseadas para los datos termodinámicos. Ej. kcal.
 - Seleccionar Datos Termodinámicos. Ej. Fase condensada.
 - Buscar.
 - Muestra el resultado de la búsqueda.
 - Bajar a Condensed phase thermochemistry data.
 - Muestra una tabla con los datos termoquímicos disponibles, método usado, quién hizo el cálculo o determinación y cuando.
 - Ej. $\Delta_f H^{\circ}_{liquid}$: Significa entalpía de formación, estado físico líquido.
 - Ej. $\Delta_c H^{\circ}_{liquid}$: Significa entalpía de combustión, estado físico líquido.

NOTA 1: La nomenclatura es algo distinta a la utilizada en el presente trabajo.
NOTA 2: Si la sustancia es líquida a 25 °C y 1 atm. y contiene hidrógeno, el dato es una entalpía de combustión **superior**. Se deberá corregir con el calor latente de vaporización del agua, de los moles de agua formados, para pasarlos a agua gas.

- ❖ **España: R.D. 2667/2004**
- ❖ http://www.mtas.es/Insht/legislation/RD/inc_indus.htm – Accede a Aprobación del Reglamento de Seguridad contra incendios en establecimientos industriales.
 - Seleccionar R.D. 2667 Reglamento de Seguridad contra incendios en establecimientos industriales.
 - Bajar a Capítulo V.
 - Bajar a Artículo 16. Guía técnica.
 - Bajar a Anexo I - Caracterización de los establecimientos industriales en relación con la seguridad contra incendio.
 - Bajar hasta Tabla 1.4.
 - Establece los valores de poder calorífico de diversas sustancias a utilizar en el cálculo de la carga de fuego. Para aplicarlos en Argentina habría que observar lo siguiente:
 - Las unidades en la que se expresan son MJ/kg o Mcal/kg
 - Los valores están redondeados sin decimales. (Menos precisos).
 - Cuando se los compara con algunos valores conocidos para las sustancias que contienen hidrógeno, se observa que son intermedios entre PCS y PCI. (Ver **tabla 7**).

Tabla 7

Ej. 26: n-hexano

		MJ/kg	Mcal/kg	kcal/kg
Manual Ing. Químico - Perry	PCS			11 564
R.D. 2667/2004 Anexo I Tabla 1.4	PC	46	11	11 000
Manual Ing. Químico - Perry	PCI			10 692

En negrita valores publicados