

TEMA 7. Reactividad Química.

Conceptos de Cinética Química y

Termodinámica Química

Petrucci, “Química General”. Cinética: Capítulo 15 ; Termodinámica: Capítulo 7 y 20

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cinética Química

La **Cinética Química** es la rama de ciencia que estudia las velocidades de las reacciones químicas.

Ejemplos en la vida:

- Rapidez con la que actúa un medicamento
- Formación y agotamiento del ozono en las capas altas de la atmósfera y su equilibrio
- Descubrimiento de catalizadores para sintetizar nuevos materiales

Factores que afectan a la velocidad de una reacción

- **Estado físico de los reactivos**
- **Concentración de los reactivos**
- **Temperatura**

Catalizadores

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

MANUAL DE UNA REACCIÓN QUÍMICA

Factores que afectan a la velocidad de una reacción

1. Estado físico de los reactivos

Las moléculas de los reactivos tienen que chocar para reaccionar:

Mayor facilidad de choque = mayor rapidez.

Reacciones homogéneas (disolución) son más rápidas que reacciones heterogéneas (ej.: gas-sólido).

Reacciones entre sólidos: lentas. Solución: aumento del área superficial del sólido

<https://www.youtube.com/watch?v=xbwNJhJwnSs>



2. Concentración de los reactivos

Casi todas las reacciones químicas dependen de la concentración de uno o varios reactivos.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

aire y (O_2) en oxígeno puro

3. Temperatura

La velocidad de las reacciones químicas aumenta con la temperatura: incrementa la energía cinética de las moléculas. Moléculas más rápidas chocan con más frecuencia y con mayor energía.



Ej.: Descomposición de dicromato amónico: $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7 \rightarrow \text{Cr}_2\text{O}_3 + \text{N}_2 + 4\text{H}_2\text{O}$

4. Catalizadores

Son agentes que aumentan las velocidades de reacción sin transformarse, influyendo en el mecanismo de reacción (tipo de colisiones). Desempeñan un papel fundamental en la vida.

Enzimas actúan como catalizadores incrementando la velocidad de reacciones bioquímicas



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

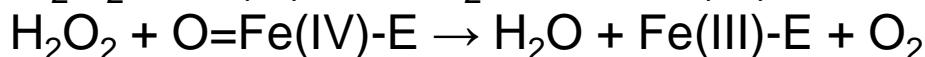
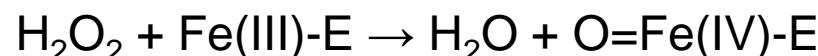
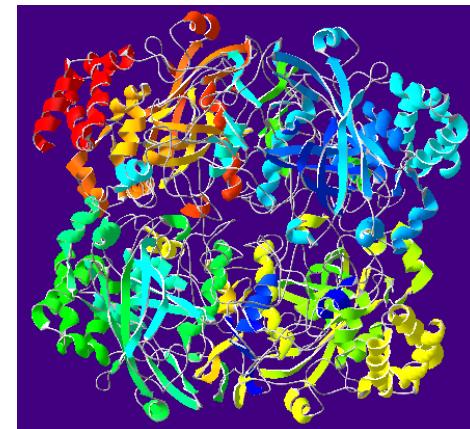
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

C E S I D E S E S → C + P

Funciones catalíticas en procesos redox

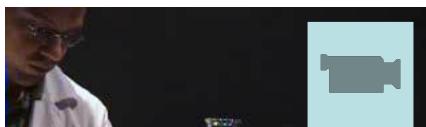
Ejemplo: Catalasa

Cataliza la descomposición de H_2O_2 (residuo del metabolismo celular) en H_2O y O_2



1 molécula de catalasa convierte 5 millones de molecules de peróxido de hidrógeno!!

En el laboratorio: catalizador óxido de manganeso(IV)



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

La velocidad de una reacción química

La velocidad de una reacción es el cambio de concentración de los reactivos o productos de ésta por unidad de tiempo.

1. Reacción sencilla $A \rightarrow B$

La velocidad de esta reacción se puede expresar como vel. de desaparición del reactivo A o vel. de aparición del producto B:

$$v(B) = \frac{[B]_{t_2} - [B]_{t_1}}{t_2 - t_1} = \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = -\frac{\Delta[A]}{\Delta t}$$

2. Reacción general $a A + b B \rightarrow c C + d D$

La velocidad de reacción general es:

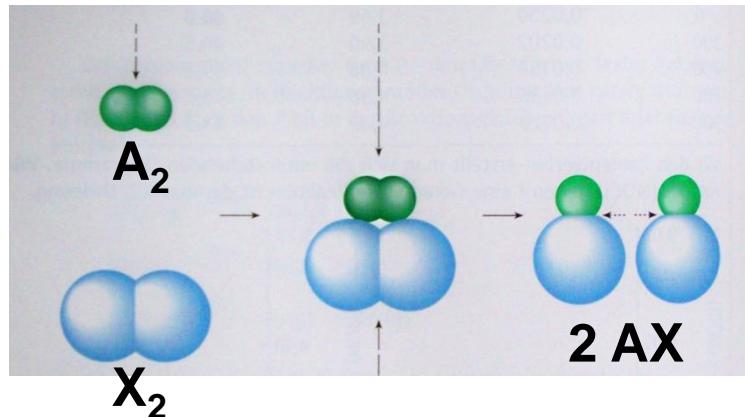
$$1 \Delta[A] \quad 1 \Delta[B] \quad 1 \Delta[C] \quad 1 \Delta[D]$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

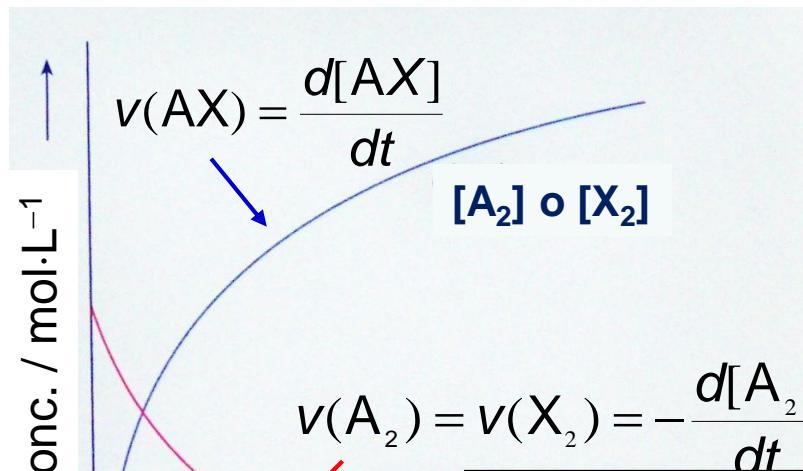
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Ejemplo: colisión de una molécula A_2 con una molécula X_2 con formación de dos moléculas AX



$$v(AX) = -2v(A_2) = -2v(X_2)$$



$$v = \frac{1}{2} \frac{d[AX]}{dt} = -\frac{d[A_2]}{dt} = -\frac{d[X_2]}{dt}$$

$$v(A_2) = v(X_2) = -\frac{d[A_2]}{dt} = -\frac{d[X_2]}{dt}$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

tiempo

Ecuación de Velocidad: ecuación matemática que relaciona la velocidad de reacción con la concentración de reactivos



$$v = \frac{d[C]}{dt} = -\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = k \cdot [A]^x [B]^y$$

k ... cte. de velocidad

x,y ... números enteros y pequeños (0,1,2,...). **Por lo general no coinciden con los coeficientes estequiométricos.**

Orden de la reacción: suma de los exponentes ($x+y+\dots$)

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

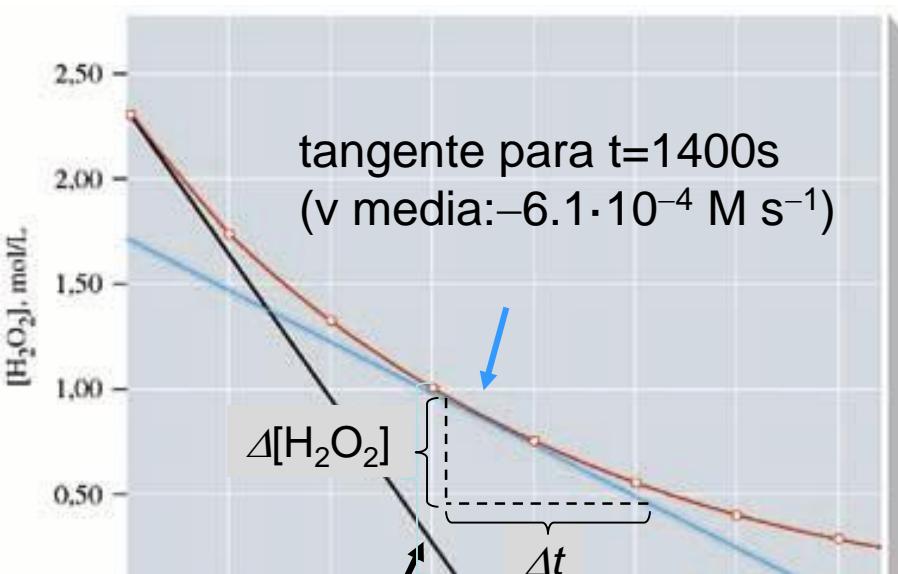
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Determinación de la ecuación de velocidad

No es posible predecir la ec. de velocidad sólo con la ecuación química - debe determinarse experimentalmente.

Se usa el método de variación de las concentraciones iniciales con tiempo.

Ejemplo: descomposición de H_2O_2



t / s	$[\text{H}_2\text{O}_2] \text{ M}$	$\Delta t / \text{s}$	$\Delta[\text{H}_2\text{O}_2] \text{ M}$	$v = -\Delta[\text{H}_2\text{O}_2]/\Delta t \text{ M}\cdot\text{s}^{-1}$
0	2,32	-	-	-
200	2,01	200	-0,31	$1,55 \cdot 10^{-3}$
400	1,72	400	-0,60	$1,5 \cdot 10^{-3}$
1360	0 (tang.)	1360	-2,32	$1,71 \cdot 10^{-3}$

Usando la **pendiente de la recta tangente** se obtiene:

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

$t=1300\text{s}$, $[\text{H}_2\text{O}_2]=0$

Determinación del orden de reacción usando velocidades iniciales



Nº experimento	[A] / M	[B] / M	Velocidad inicial / M s ⁻¹
1	0.100	0.100	$4.0 \cdot 10^{-5}$
2	0.100	0.200	$4.0 \cdot 10^{-5}$
3	0.200	0.100	$16.0 \cdot 10^{-5}$

- a) Determinar la ec. de velocidad
- b) Calcular la constante de velocidad k
- c) Calcular la velocidad inicial para [A] = 0.05 M y [B] = 0.100 M

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

a) Determinar el orden de reacción.

- Comparar exp. 1 con exp. 2

$$\frac{v_2}{v_1} = \frac{k [0.100M]^x [0.200M]^y}{k [0.100M]^x [0.100M]^y} = 2^y = \frac{4.0 \cdot 10^{-5}}{4.0 \cdot 10^{-5}} = 1 \quad \rightarrow \quad y = 0$$

orden zero respecto de [B]

- Comparar exp. 1 con exp. 3

$$\frac{v_3}{v_1} = \frac{k [0.200M]^x [0.100M]^y}{k [0.100M]^x [0.100M]^y} = 2^x = \frac{16.0 \cdot 10^{-5}}{4.0 \cdot 10^{-5}} = 4 \quad \rightarrow \quad x = 2$$

orden dos respecto de [A]

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

b) Determinar la constante de velocidad

Usar los datos del experimento 1

$$k = \frac{v}{[A]^2} = \frac{4.0 \cdot 10^{-5} \text{ } M \cdot s^{-1}}{(0.100 \text{ } M)^2} = 4.0 \cdot 10^{-3} \text{ } M^{-1} \cdot s^{-1}$$

c) Calcular velocidad inicial

$$v = k \cdot [A]^2 = 4.0 \cdot 10^{-3} \text{ } M^{-1} \cdot s^{-1} \cdot (0.050 \text{ } M)^2$$

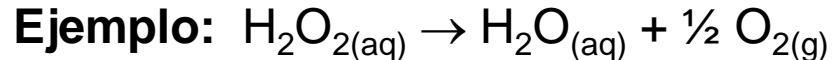
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Reacciones de primer orden A → B

Suma de exponentes x+y+...= 1



$$v(A) = -\frac{d[A]}{dt} = k_1 \cdot [A] = \frac{d[B]}{dt} \rightarrow \frac{d[A]}{[A]} = -k_1 dt$$

Unidades de k_1 : s^{-1}

$$\int_{[A]_0}^{[A]_t} \frac{d[A]}{[A]} = - \int_0^t k_1 \cdot dt$$

Ecuación integrada de velocidad :

$$\ln[A]_t - \ln[A]_0 = -k_1 \cdot (t - 0)$$

$$\ln[A]_t = -k_1 \cdot t + \ln[A]_0$$

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -k_1 \cdot t$$

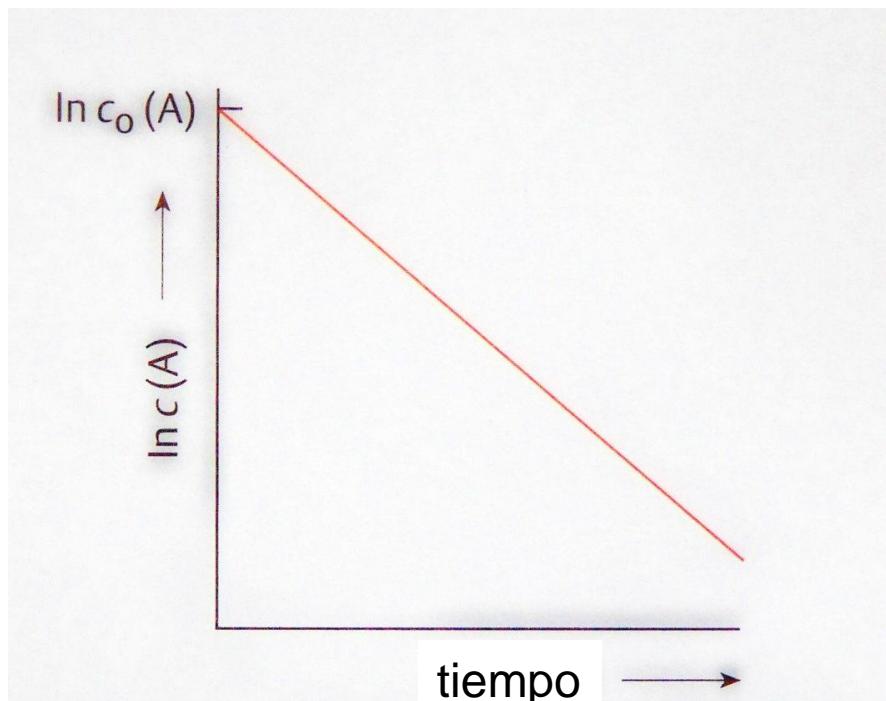
$$\frac{[A]_t}{[A]_0} = e^{-k_1 \cdot t}$$

Cartagena99

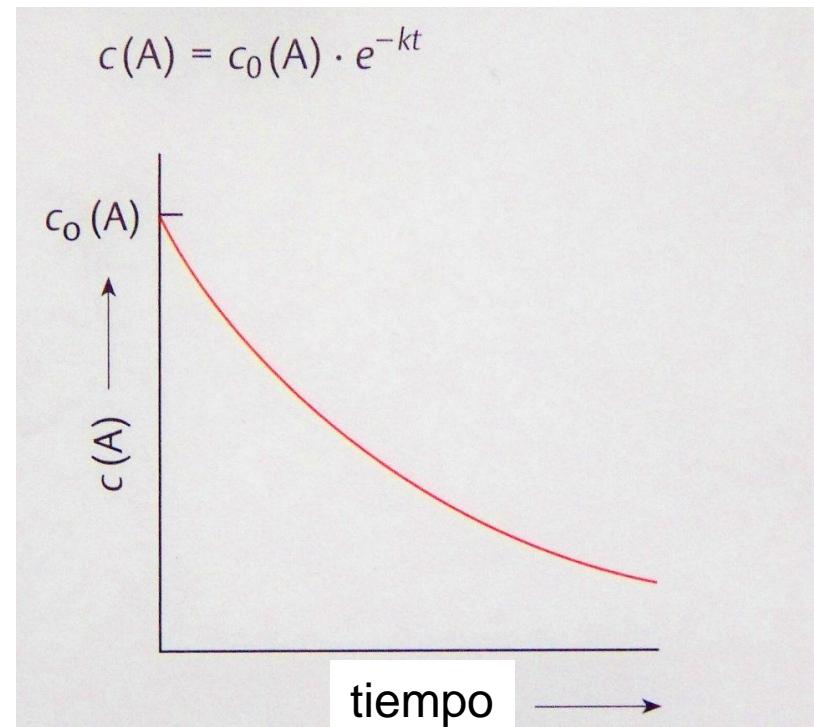
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Representación de $\ln[A]$ vs. t :
línea recta con pendiente negativa



Representación de $[A]$ vs. t



Cartagena99

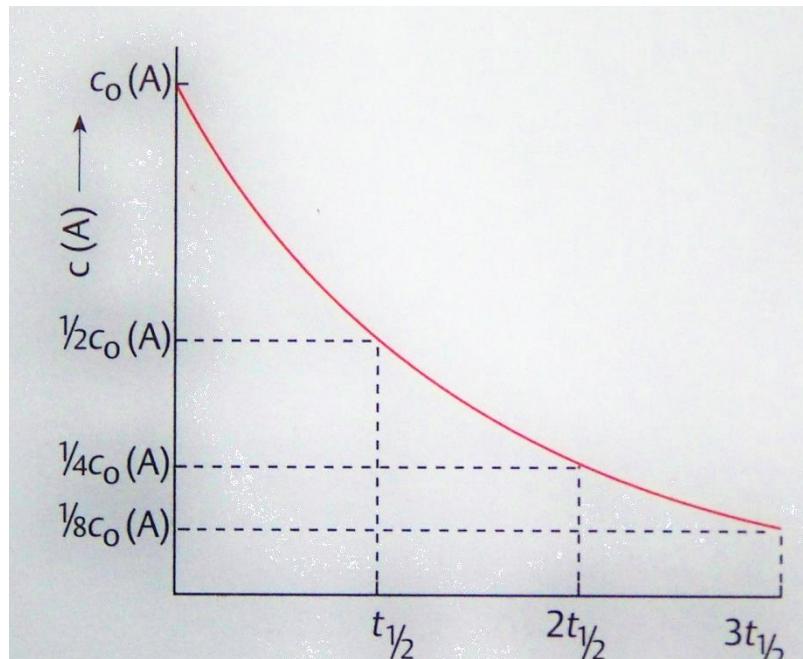
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Vida media

La vida media de una reacción es el tiempo necesario para consumir la mitad de un reactivo.

$$[A] = \frac{1}{2} [A]_0 \text{ para } t = t_{\frac{1}{2}}$$



$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = \ln \frac{\frac{1}{2}[A]_0}{[A]_0} = -k_1 \cdot t_{\frac{1}{2}}$$

$$-\frac{1}{k_1} \cdot \ln \frac{\frac{1}{2}[A]_0}{[A]_0} = t_{\frac{1}{2}}$$

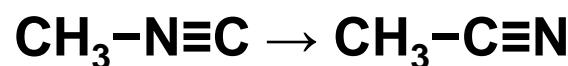
$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{k_1} \cdot \ln 2 = \frac{0.693}{k}$$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Ejemplo: Reacción de transposición de metil isonitrilo en acetonitrilo

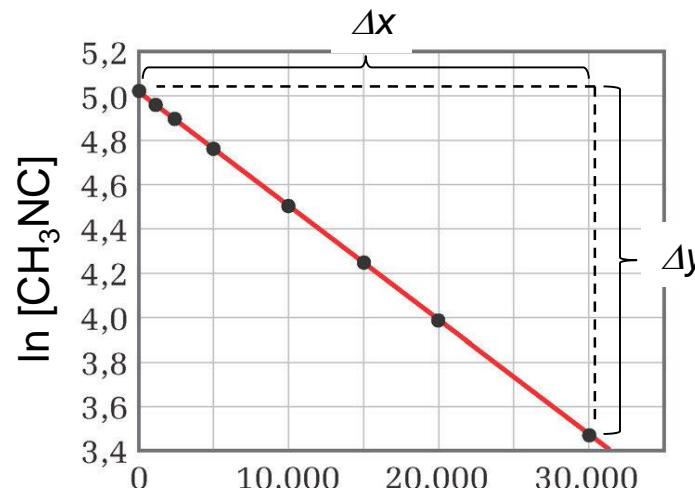
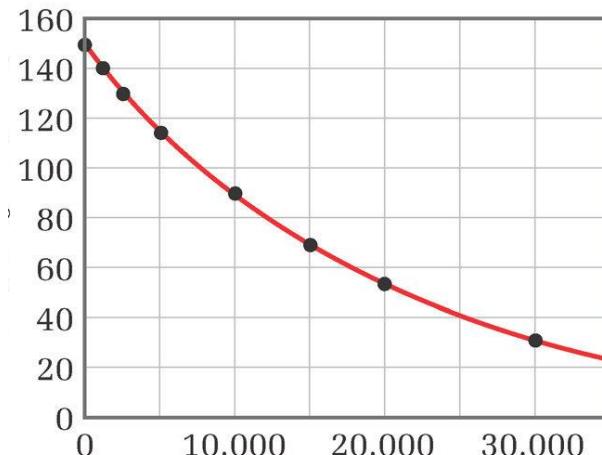


Ecuación de velocidad:

$$-\frac{d[\text{CH}_3\text{NC}]}{dt} = k \cdot [\text{CH}_3\text{NC}]$$

$$\ln [\text{CH}_3\text{NC}] = -k \cdot t + \ln [\text{CH}_3\text{NC}]_0$$

Reacción de primer orden
 k y $t^{1/2}$??



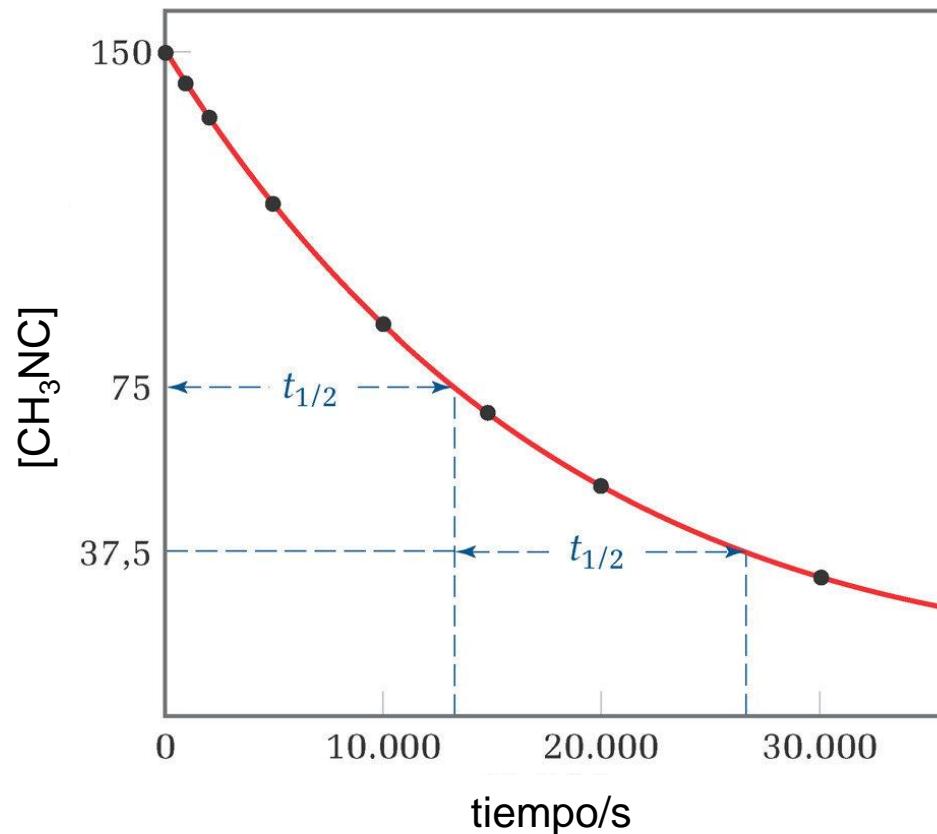
Pendiente = $-k$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

30000 s⁻¹



Cartagena99

0.693 0.693
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

TABLA 15.4 Procesos de primer orden

Procesos	Vida media, $t_{1/2}$	Constante de velocidad k , s^{-1}
Desintegración radiactiva de $^{238}_{92}\text{U}$	$4,51 \times 10^9$ años	$4,87 \times 10^{-18}$
Desintegración radiactiva de $^{14}_{6}\text{C}$	$5,73 \times 10^3$ años	$3,83 \times 10^{-12}$
Desintegración radiactiva de $^{32}_{15}\text{P}$	14,3 días	$5,61 \times 10^{-7}$
$\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \xrightarrow{15\text{ }^\circ\text{C}} \text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{aq}) + \text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6(\text{aq})$ sacarosa glucosa fructosa	8,4 h	$2,3 \times 10^{-5}$
$(\text{CH}_2)_2\text{O}(\text{g}) \xrightarrow{415\text{ }^\circ\text{C}} \text{CH}_4(\text{g}) + \text{CO}(\text{g})$ óxido de etileno	56,3 min	$2,05 \times 10^{-4}$
$2 \text{N}_2\text{O}_5 \xrightarrow[45\text{ }^\circ\text{C}]{\text{en CCl}_4} 2 \text{N}_2\text{O}_4 + \text{O}_2(\text{g})$	18,6 min	$6,21 \times 10^{-4}$
$\text{HC}_2\text{H}_3\text{O}_2(\text{aq}) \longrightarrow \text{H}^+(\text{aq}) + \text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-(\text{aq})$	$8,9 \times 10^{-7}$ s	$7,8 \times 10^5$

Acético en agua!

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Relaciones características

Reacciones de orden 0, 1 y 2

Orden	Ec. de velocidad (unidades de k)	Ec. de velocidad integrada	Relación lineal	Vida media
0.	$-\frac{dc(A)}{dt} = k$ $(\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}\cdot\text{s}^{-1} = \text{M}\cdot\text{s}^{-1})$	$c(A) = -k \cdot t + c_0(A)$	$c(A)$ vs. t	$\frac{c_0(A)}{2k} = t_{1/2}$
1.	$-\frac{dc(A)}{dt} = k \cdot c(A)$ (s^{-1})	$\ln \frac{c(A)}{c_0(A)} = -k \cdot t$	$\ln c(A)$ vs. t	$t_{1/2} = \frac{0.693}{k}$
2.	$-\frac{dc(A)}{dt} = k \cdot c^2(A)$ $(\text{mol}^{-1}\cdot\text{l}\cdot\text{s}^{-1} = \text{M}^{-1}\cdot\text{s}^{-1})$	$\frac{1}{c(A)} = k \cdot t + \frac{1}{c_0(A)}$	$1/c(A)$ vs. t	$\frac{1}{k \cdot c_0(A)} = t_{1/2}$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

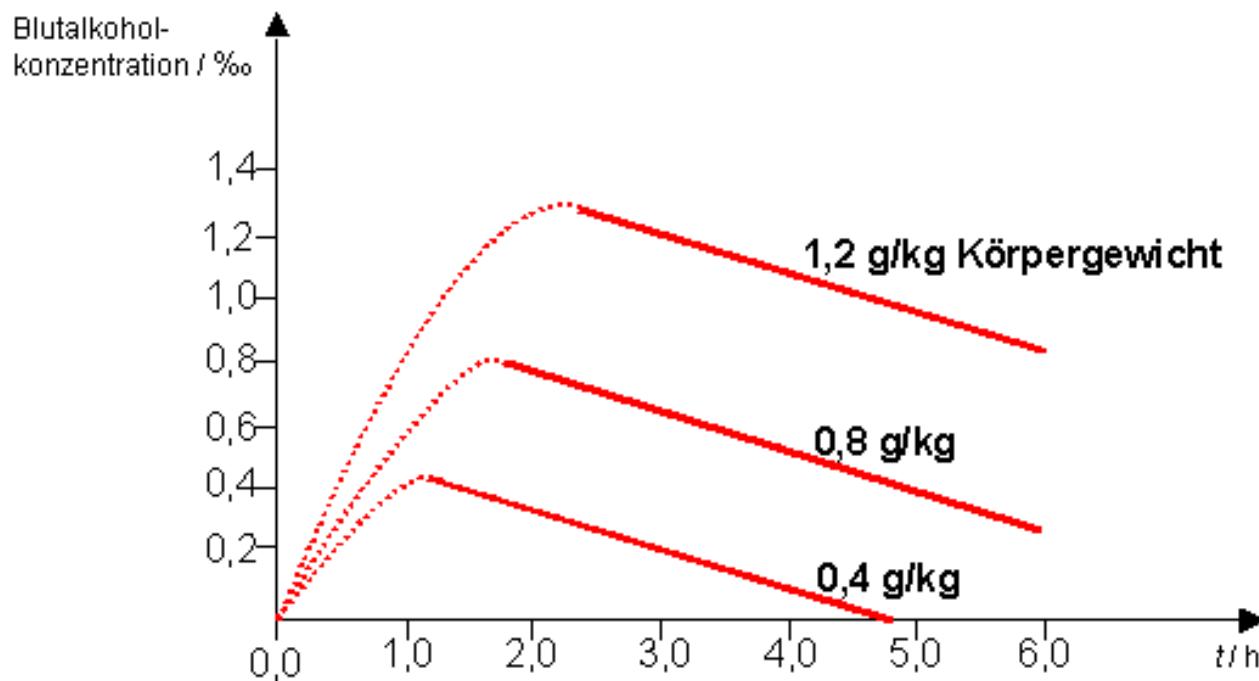


Abb.1 | Alkoholabbau: Reaktion 0. Ordnung

Enzymatischer Abbau von Alkohol nach einmaliger Einnahme verschiedener Mengen

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Temperatura y velocidad

Teoría o modelo de colisiones

Idea central: las moléculas tienen que chocar para reaccionar.

Teoría cinética molecular: explica como influyen la concentración de reactivos y la temperatura en la velocidad de una reacción.

Se calculan frecuencias de colisión: nº de colisiones por unidad de tiempo

Si [reactivo] \uparrow el nº colisiones $\uparrow \Rightarrow v$ reacción \uparrow

Si T \uparrow energía molécula \uparrow frecuencia colisiones $\uparrow \Rightarrow v$ reacción \uparrow

Sólo una fracción de las colisiones entre moléculas da lugar a la reacción química.

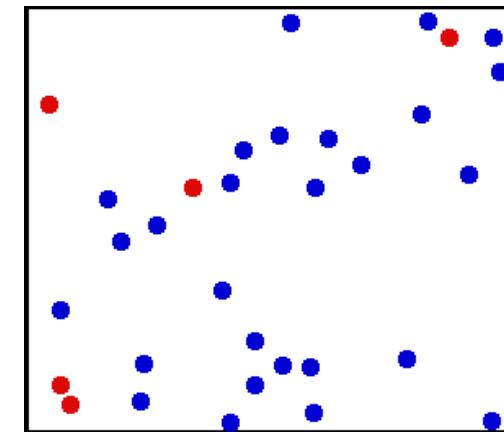
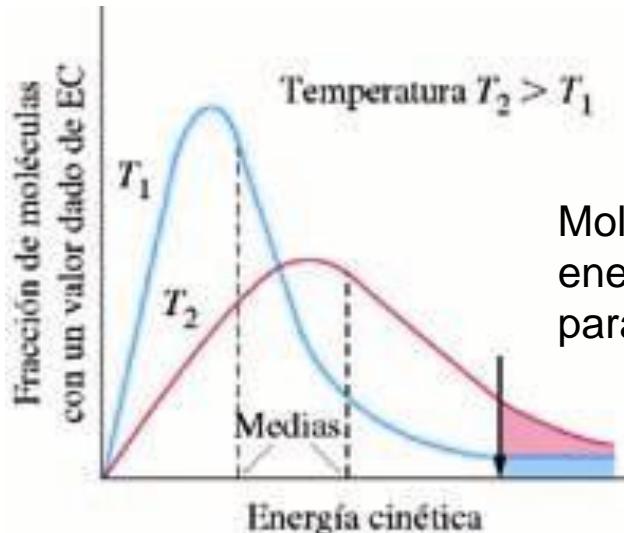
Por ejemplo en $H_2 + I_2 \cdot 10^{10}$ colisiones/s, pero solo reaccionan 1 de cada 10^{13}

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Teoría cinética de los gases: Fracción de moléculas (de una mezcla) que poseen determinadas energía cinéticas:



La velocidad de una reacción depende del producto de la probabilidad de choques (= la frecuencia de colisión) entre moléculas con energía cinética suficiente.

Energía de activación, E_a

La energía de activación, E_a , de una reacción es la energía mínima,

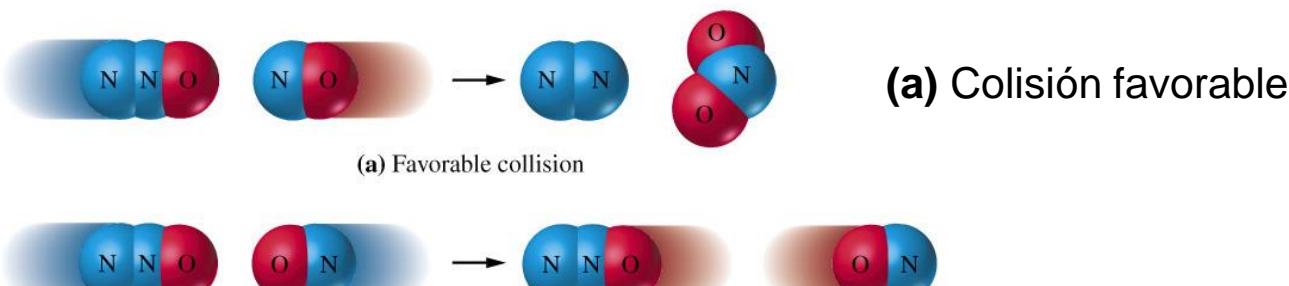
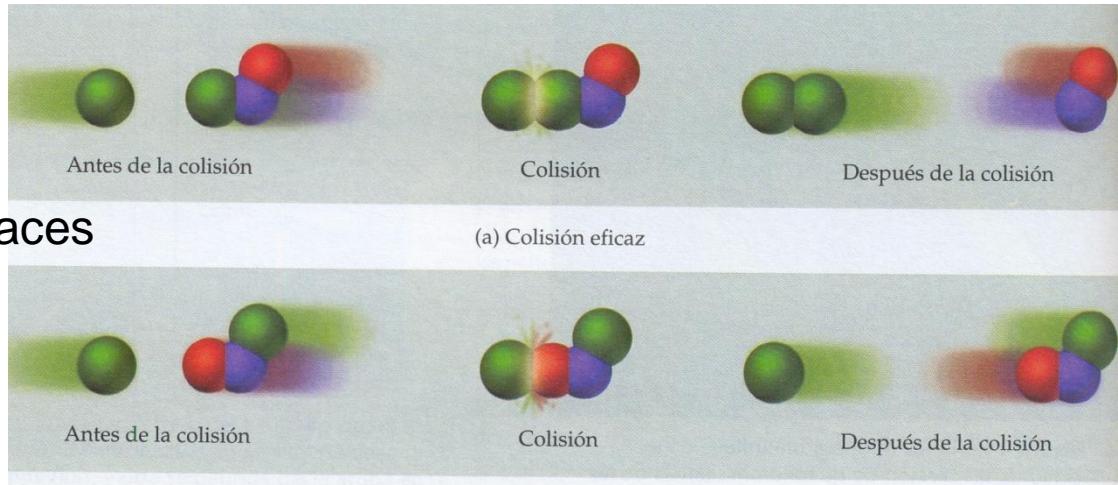
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Orientación de las moléculas

Las orientaciones relativas de las moléculas durante sus colisiones determinan si los átomos tienen las posiciones idóneas para formar enlaces nuevos.



Cartagena99

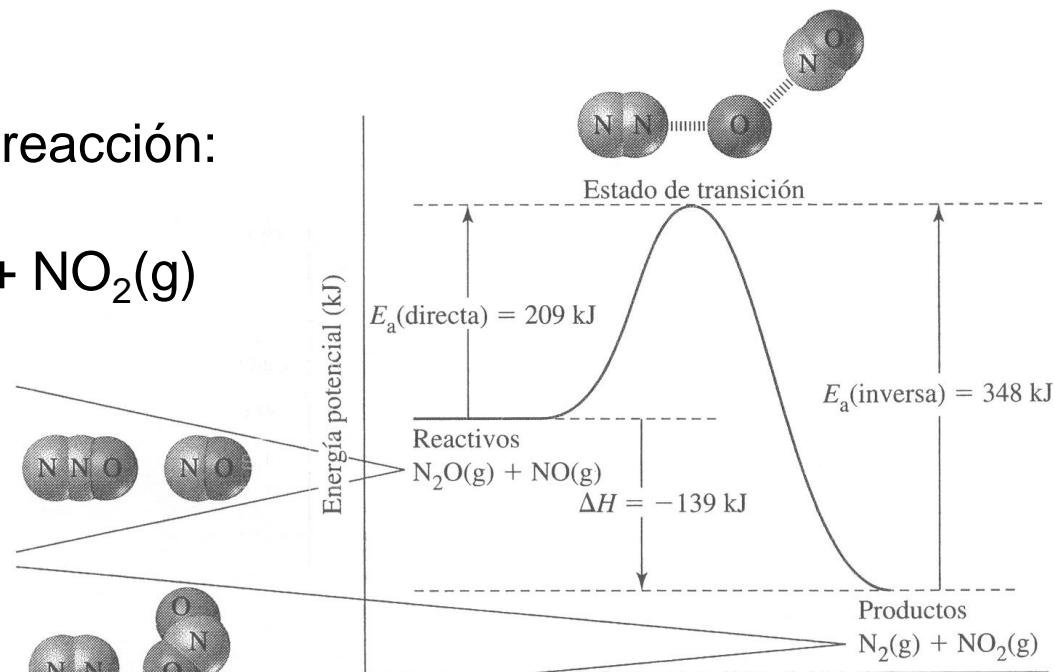
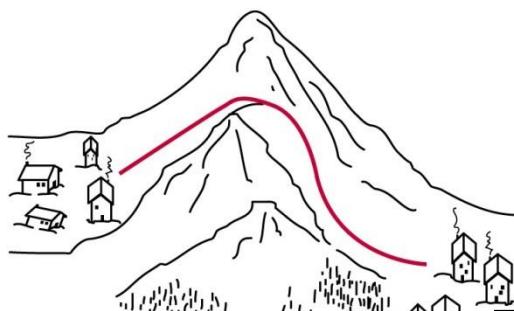
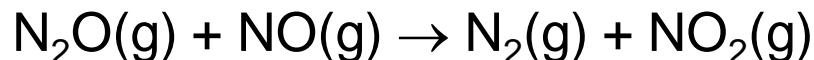
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Teoría del estado de transición

Existe un estado intermedio transitorio entre el estado de los reactivos y el de los productos se llama **estado de transición**. La especie hipotética existente en el estado de transición es el **complejo activado**.

Perfil de reacción para la reacción:

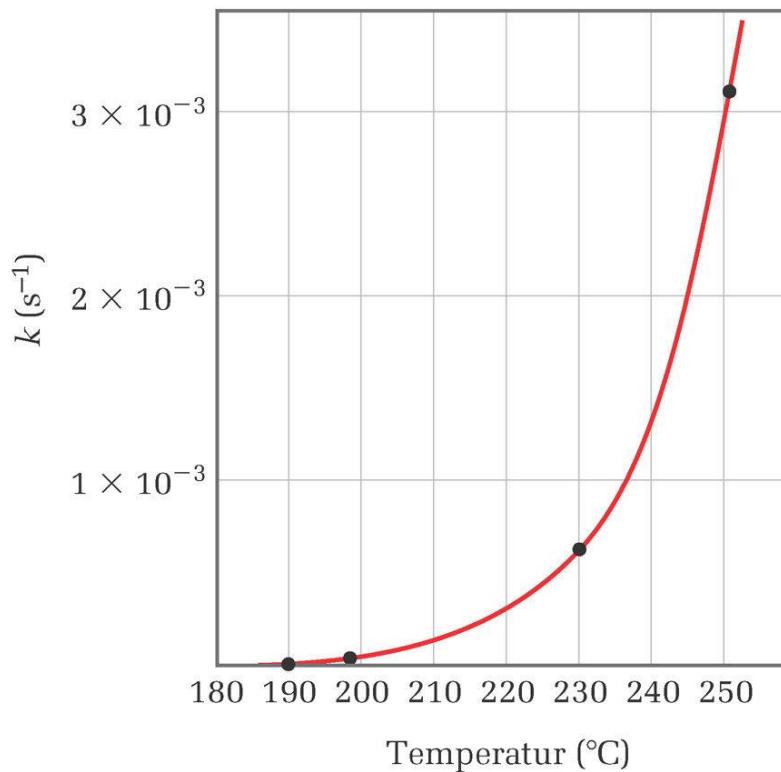


Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Dependencia de la constante de velocidad k con la temperatura



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Ecuación de Arrhenius (1889)

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

A...factor preexponencial
 E_a ...energía de activación
R...cte. universal de gases
T...temperatura

Forma logarítmica:

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$

$$y = b + m \cdot x$$

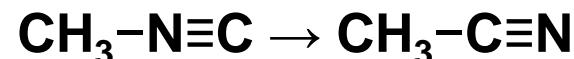
La representación de **In k** frente a **1/T** es una **línea recta**.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

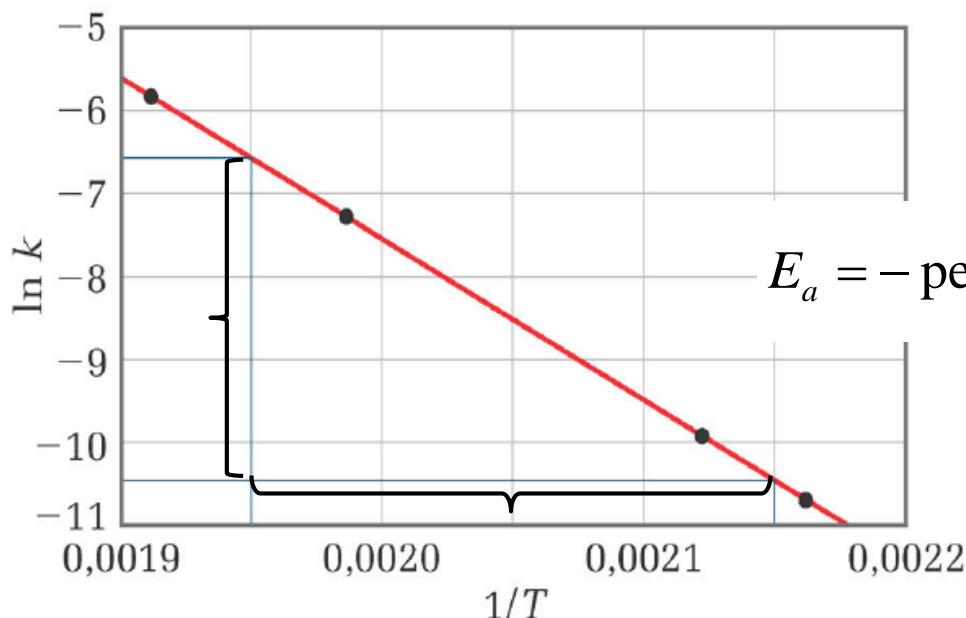
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Ejemplo: Reacción de transposición de metil isonitrilo en acetonitrilo



$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T}$$

$$\text{pendiente} = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{-6.6 - (-10.4)}{0.00195\text{K}^{-1} - 0.00215\text{K}^{-1}}$$



$$\text{pendiente} = -\frac{E_a}{R} = -1.9 \cdot 10^4 \text{ K}$$

$$E_a = -\text{pendiente} \cdot R = -(-1.9 \cdot 10^4 \text{ K}) \cdot 8.314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$E_a \sim 160 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cálculo de la energía de activación E_a con dos constantes de velocidad k_1 y k_2 a dos temperaturas T_1 y T_2 :

$$\ln k_1 = \ln A - \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T_1} \quad \ln k_2 = \ln A - \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T_2}$$

$$\ln k_2 - \ln k_1 = \ln A - \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T_2} - \left(\ln A - \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T_1} \right)$$

$$\ln k_2 - \ln k_1 = \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T_1} - \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T_2} = \frac{E_a}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$$E_a = R \cdot \frac{\ln \frac{k_2}{k_1}}{\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)}$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

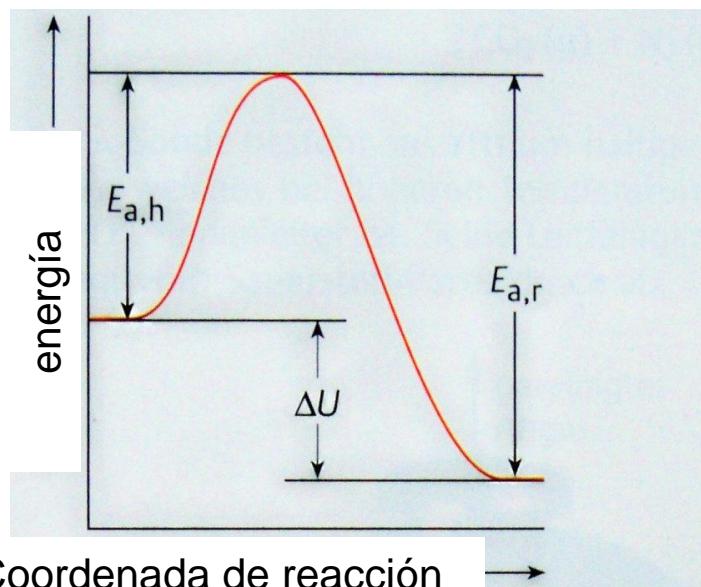
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y del Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002.

Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Catálisis

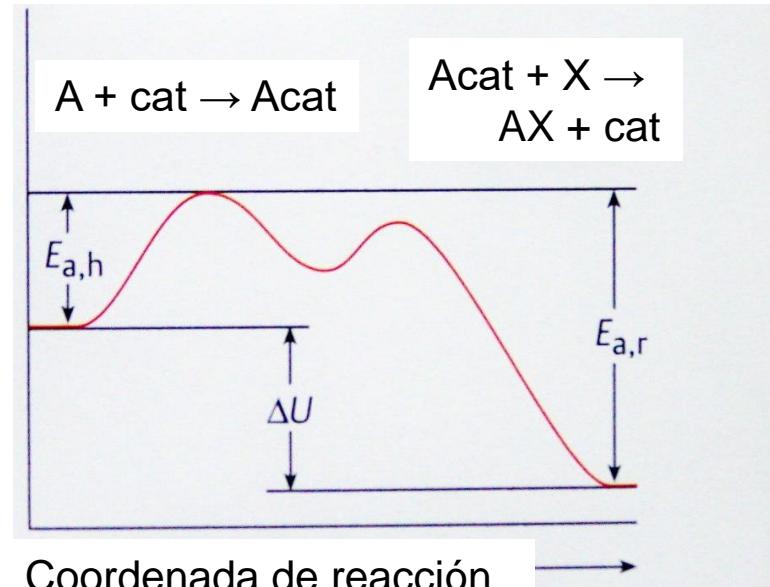
Catalizador: sustancia que modifica la rapidez de una reacción química sin sufrir un cambio químico permanente en el proceso.
 Reduce la energía de activación global de una reacción química.

Reacción no catalizada



Coordenada de reacción →

Reacción catalizada



Coordenada de reacción →

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

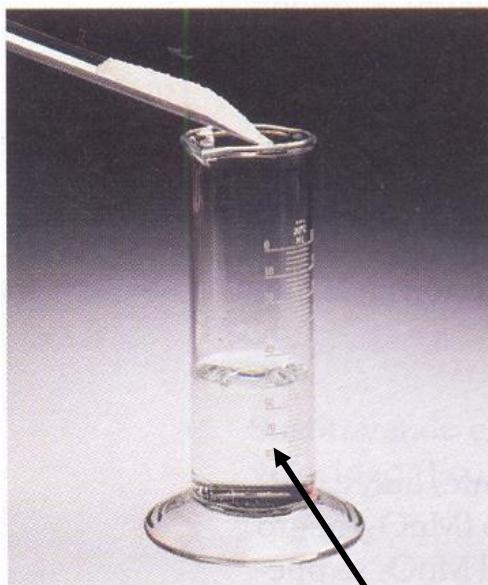
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



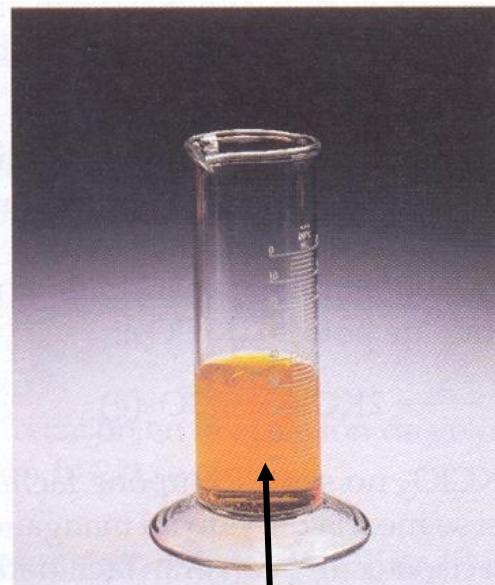
CEU

Universidad
San Pablo

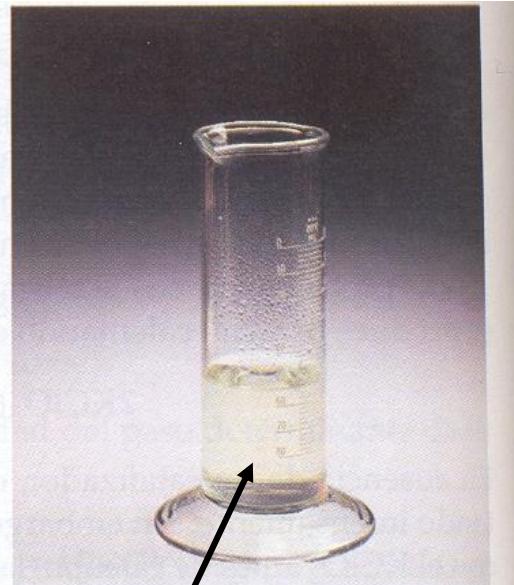
Catálisis homogénea



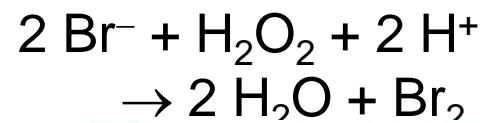
(a)



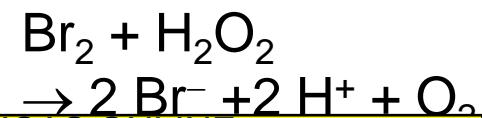
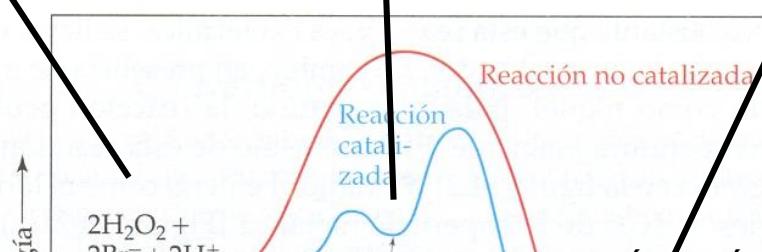
(b)



(c)



Cartagena99



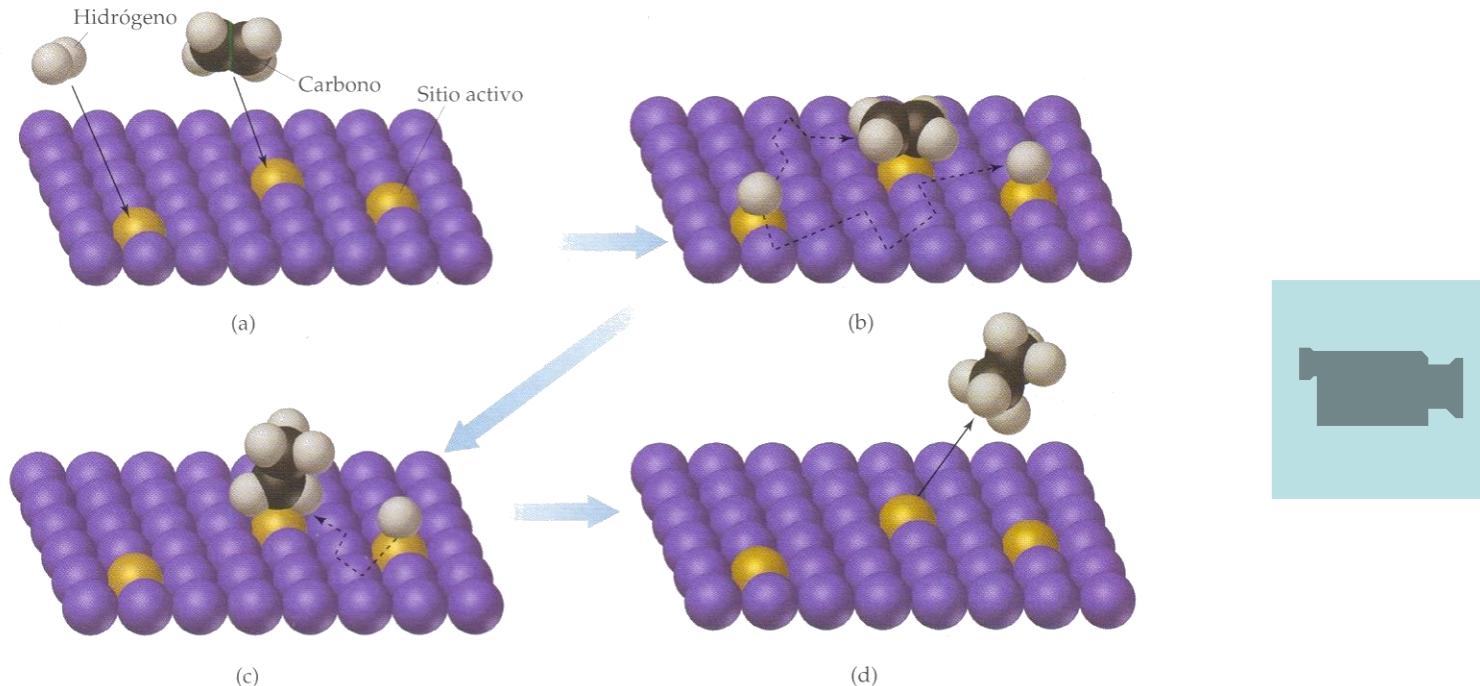
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Trayectoria de reacción

Catálisis heterogénea

Hidrogenación de olefinas (ejemplo: etileno→etano)



▲ Figura 14.21 Mecanismo de la reacción del etileno con hidrógeno sobre una superficie catalítica. (a) El hidrógeno y el etileno se adsorben en la superficie metálica.

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

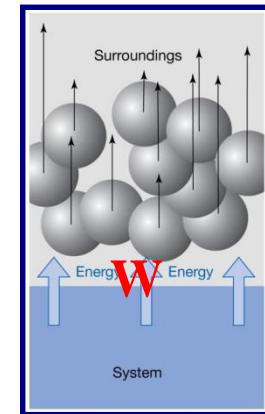
Cartagena99

Termodinámica Química

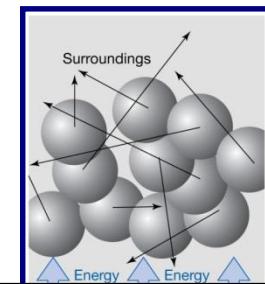
Termoquímica

Recordar:

- **Energía** = capacidad de realizar trabajo
- **Trabajo** = producto de fuerza F y distancia s .
- **Energía térmica** = forma de energía en la que se almacena el movimiento desordenado de átomos y moléculas.
- **Calor** = transferencia de energía térmica entre dos cuerpos en contacto, si la temperatura de ambos cuerpos es diferente.



Trabajo



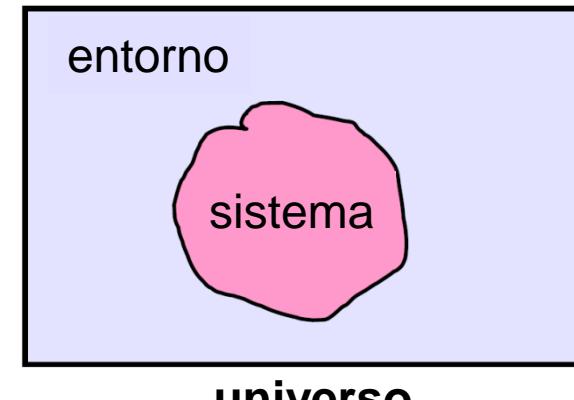
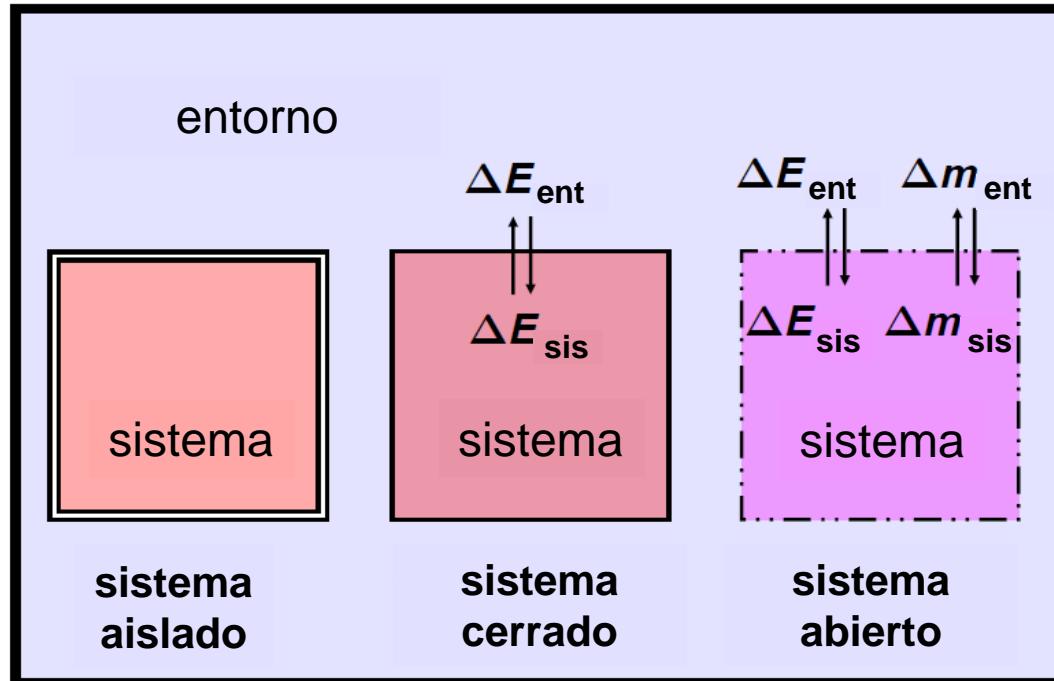
Calor

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Sistemas y entorno



universo



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

energía

materia

Química General . USP-CEU

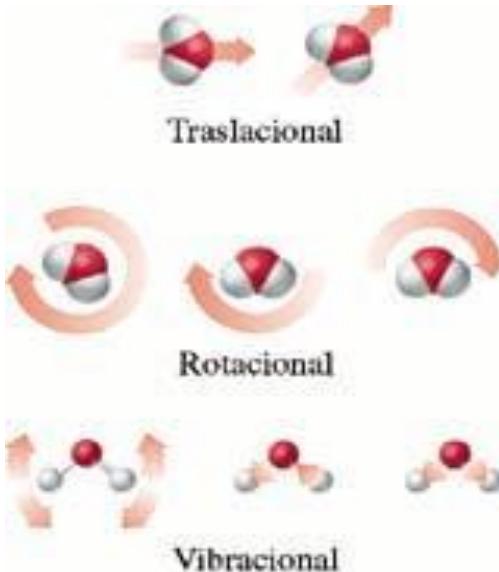
Energía interna U

Energía total (suma de todas las energías) de un sistema (cinética y potencial).

No es posible calcularla.

No se pueden indicar valores absolutos de U.

Se pueden medir diferencias de U (ΔU).



- Energía cinética translacional.
- Rotación molecular.
- Energía vibracional.
- Atracciones intermoleculares.
- Enlaces químicos.
- Electrónicos

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

(Atracciones intermoleculares)

Primera ley de la Termodinámica

“La energía no se crea ni se destruye”

Cualquier energía perdida por el sistema deberá ser ganada por el entorno

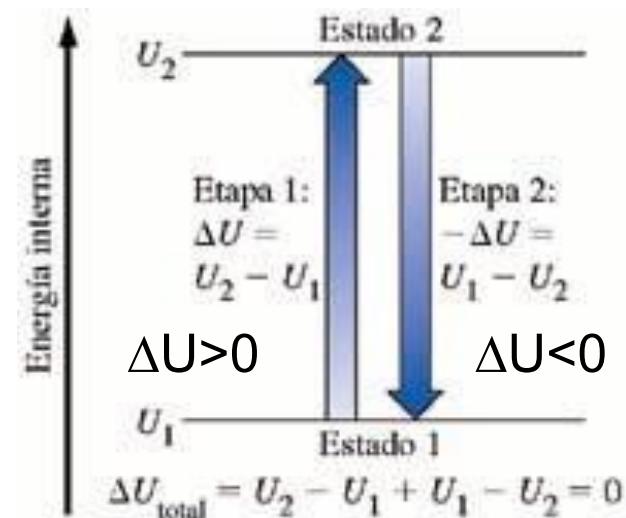


Energía interna, U

U es una función de estado con propiedades extensivas. No se puede medir.

ΔU tiene un valor único entre dos estados. Se mide con facilidad.

$$\Delta U = Q + W$$



El 1er principio establece la equivalencia entre todas las formas de la energía

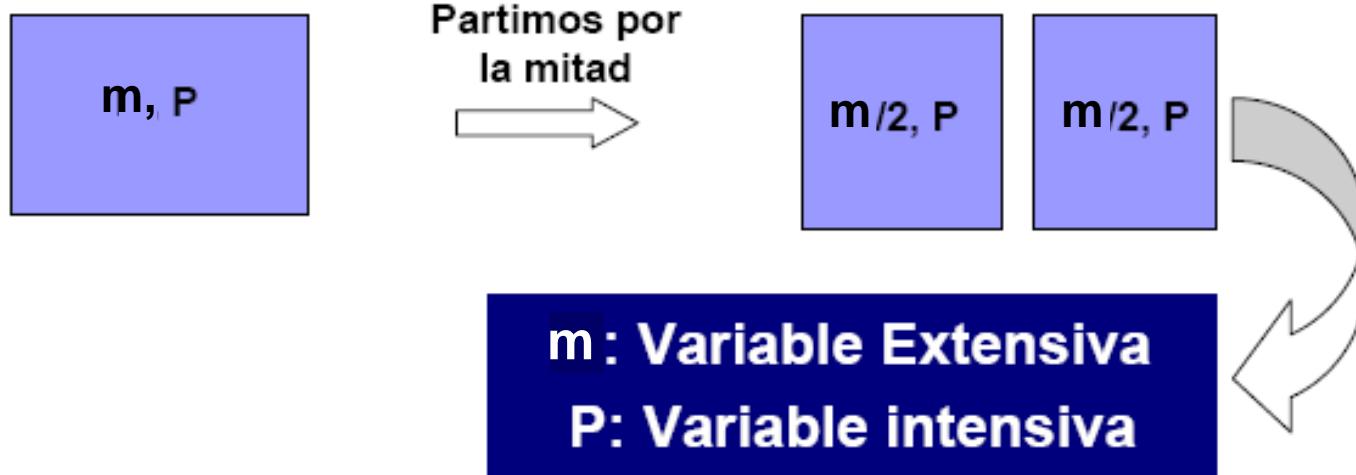
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Variables termodinámicas

Variable = Propiedad Termodinámica



- Intensivas** No dependen de la cantidad de materia del sistema.
 No son aditivas. Ej: T, p, ρ

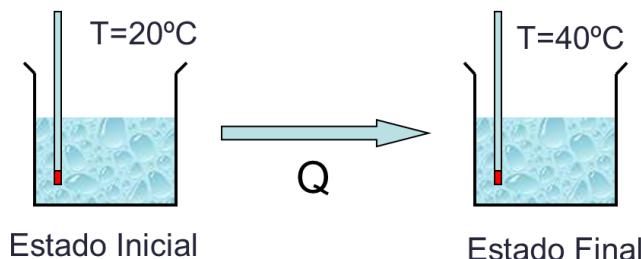
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Formulaciones de la 1^a ley de la Termodinámica

- La energía del universo es constante.
- La energía de un sistema aislado es constante.
- La variación de energía interna de un sistema = suma de trabajo efectuado sobre el sistema y calor intercambiado con el entorno.
- Calor y trabajo son formas equivalentes de variar la energía de un sistema (Joule).
- No existe móvil perpétuo de primera especie.*



<http://www.wimp.com/hypotheticalmachines/>

<https://www.youtube.com/watch?v=OS1KXMsE2qk>

Cartagena99

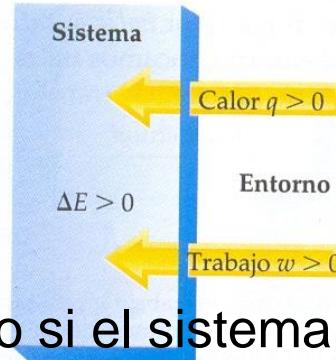
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

funcionando sin detenerse."

Convenciones de signos

W es positivo si se realiza trabajo sobre el sistema



W es negativo si el sistema realiza trabajo

$W > 0$

$W < 0$

SISTEMA

$Q > 0$

$Q < 0$

Q es positivo si el sistema absorbe calor

Q es negativo si el sistema cede calor

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Entalpía H

La función termodinámica llamada entalpía representa el cambio de calor en reacciones químicas que se efectúan a presión constante:

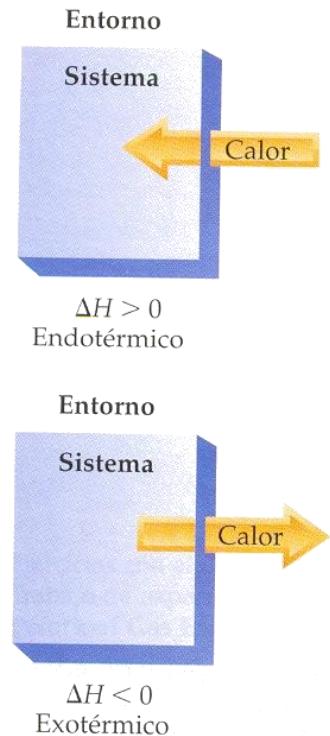
$$H = U + PV$$

energía interna trabajo presión-volumen.

Cambio a presión constante: $\Delta H = \Delta(U + PV) = \Delta U + P\Delta V$
 Con $U=Q+W$

El trabajo de expansión de un gas es $W = -P\Delta V$

$$\Delta H = Q_p + W - W = Q_p$$



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

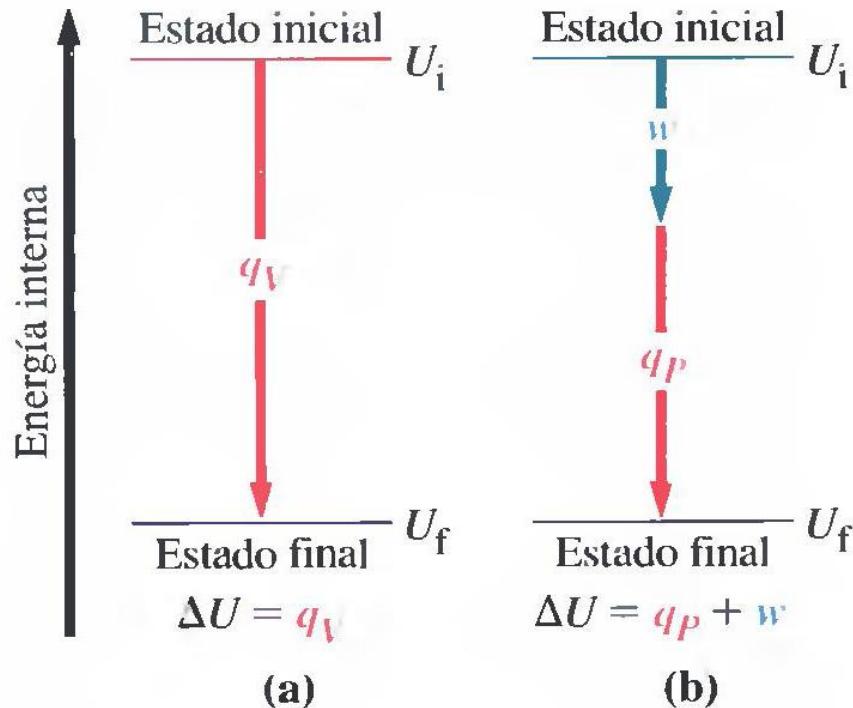
calor, ΔH es negativo ($\Delta H < 0$).

$$\Delta U = Q_V = Q_p + W$$

$$W = -P\Delta V$$

$$\Delta U = Q_p - P\Delta V$$

$$\Delta H = Q_p = \Delta U + P\Delta V$$

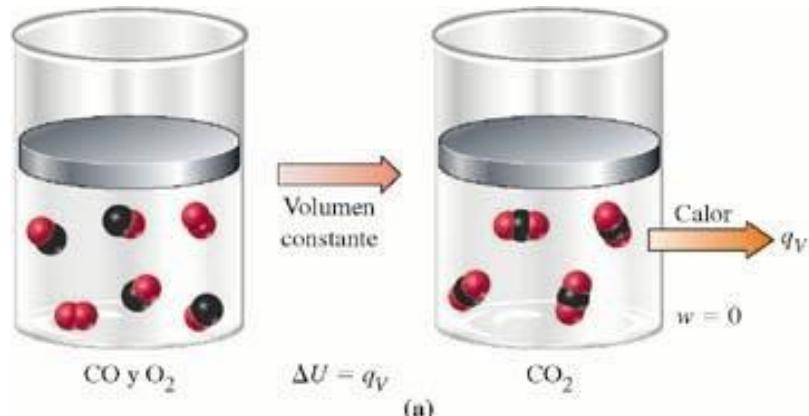


Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Ejemplo: $2 \text{CO(g)} + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2 \text{CO}_2(\text{g})$ T=298 K



1) Q_P medido = $-566 \text{ kJ/mol} = \Delta H$

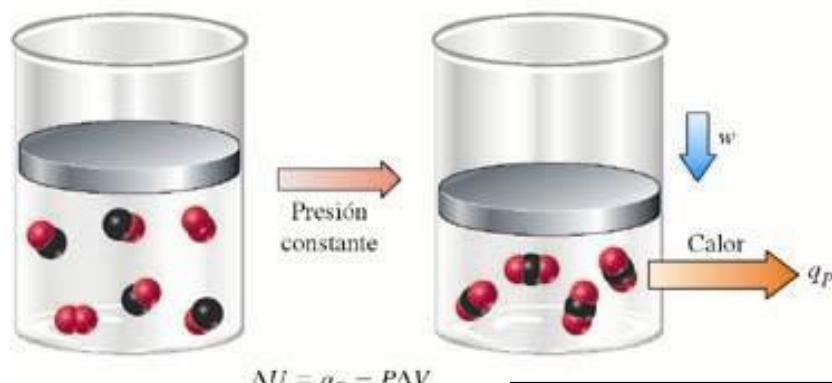
2) Trabajo presión-volumen

$$PV=nRT \rightarrow P\Delta V=\Delta nRT$$

$$\Delta P\Delta V = P(V_f - V_i) = RT(n_f - n_i)$$

$$n_f=2 \text{ (2 moles CO}_2\text{)}$$

$$n_i=3 \text{ (2 moles CO + 1 mol O}_2\text{)}$$



$$\Delta P\Delta V = 8,3145 \cdot 298 \cdot [2-(2+1)]$$

Unidades: J mol⁻¹ K⁻¹ K = J mol⁻¹

$\Delta P\Delta V = -2,5 \text{ kJ}$

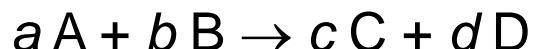
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

p

Enthalpías de reacción ΔH°_r



$$\Delta H^\circ_r = H_C + H_D - (H_A + H_B)$$

$$\Delta H^\circ_r = \Delta H^\circ_{\text{productos}} - \Delta H_{\text{reactivos}}$$

Problema: no se conocen valores absolutos de H

Definición de entalpías de formación estándar de sustancias elementales = 0 J como referencia.

$$\Delta H_f^\circ(\text{elemento, estado de referencia}) = 0 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

De forma general, el estado de referencia es referente $T = 298 \text{ K}$ en 1 bar.

Cartagena99

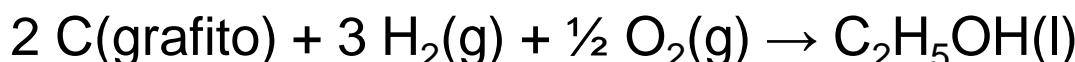
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

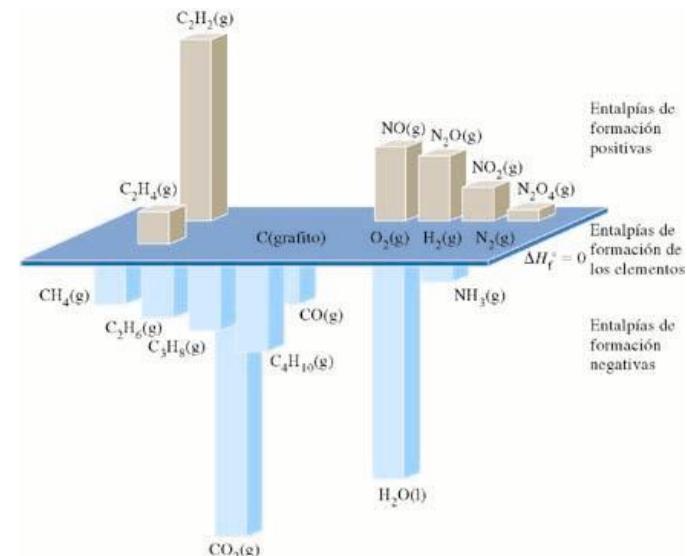
Entalpías de formación estándar, ΔH_f°

- La entalpía de formación estándar de una sustancia es la variación de entalpía correspondiente a la formación de 1 mol de la sustancia en el estado estándar a partir de sus elementos en los estados estándar de sus formas de referencia.

Ejemplo: ΔH_f° para etanol



$$\Delta H_f^\circ = -277 \text{ kJ}$$



- La entalpía de formación estándar de un

elemento puro en su estado de referencia es 0. La formación de un elemento puro en su estado de referencia es exergónica.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ÓNLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

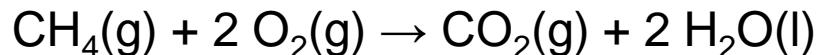
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Las sustancias con entalpías

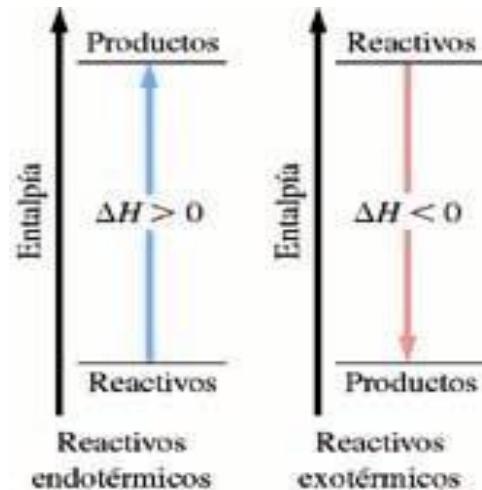
Cartagena99

Entalpías de reacción

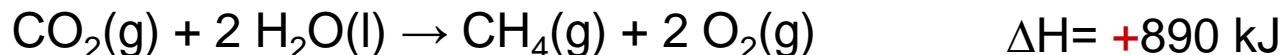
1. La entalpía es una propiedad extensiva



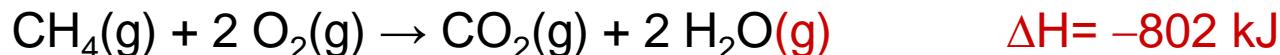
1 mol CH₄: ΔH = -890 kJ ; 2 moles CH₄: ΔH = -1780 kJ



2. El cambio de entalpía para una reacción tiene la misma magnitud, pero signo opuesto al cambio para la reacción inversa.



3. El cambio de entalpía depende del estado de los reactivos y productos.



La entalpía de vaporización del agua es endotérmica:
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Ley de Hess



Henry Hess
(1840)

“Si una reacción se efectúa en una serie de pasos, ΔH para la reacción será igual a la suma de los cambios de entalpía para los pasos individuales.”

La ley de Hess puede considerarse un caso especial del principio general de la conservación de la energía (1^a ley de la Termodinámica).

Se busca: **C (s) (grafito) + ½ O₂(g) → CO (g) $\Delta H^\circ_r = ?$**

Se conoce: (1) C(s) + O₂(g) → CO₂(g) $\Delta H^\circ_1 = -393,75 \text{ kJ/mol}$

(2) CO(g) + ½ O₂(g) → CO₂(g) $\Delta H^\circ_2 = -282,98 \text{ kJ/mol}$

Invertimos (2): (1) C(s) + O₂(g) → CO₂(g) $\Delta H^\circ_1 = -393,75 \text{ kJ/mol}$
 (-2) CO₂(g) → CO(g) + ½ O₂(g) $\Delta H^\circ_{-2} = +282,98 \text{ kJ/mol}$

Sumamos: C(s) + O₂(g) + CO₂(g) → CO₂(g) + CO(g) + ½ O₂(g)

(1) + (-2)

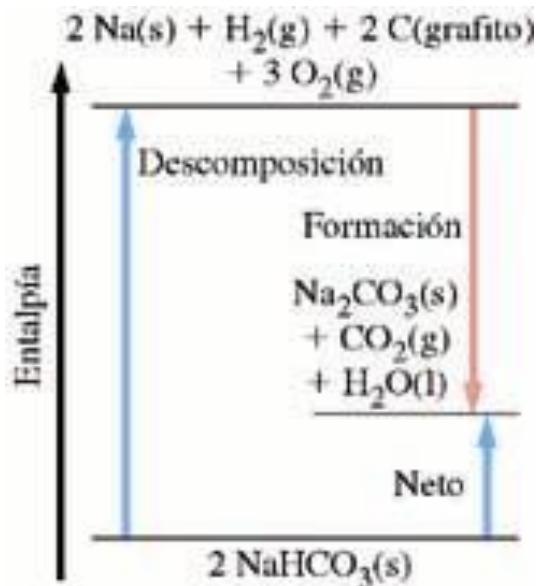
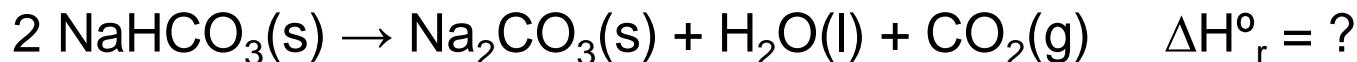
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Entalpías de reacción estándar, ΔH_r°

Las ΔH_f° se utilizan para calcular variaciones de entalpías estándar de las reacciones químicas: entalpías de reacción estándar ΔH_r°



- a) $2 \text{ NaHCO}_3(\text{s}) \rightarrow 2 \text{ Na}(\text{s}) + \text{H}_2(\text{g}) + 2 \text{ C(grafito)} + 3 \text{ O}_2(\text{g})$
- b) $2 \text{ Na}(\text{s}) + \text{C(grafito)} + \frac{3}{2} \text{ O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{Na}_2\text{CO}_3(\text{s})$
- c) $\text{H}_2(\text{g}) + \frac{1}{2} \text{ O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l})$
- d) $\text{C(grafito)} + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g})$



Cartagena99

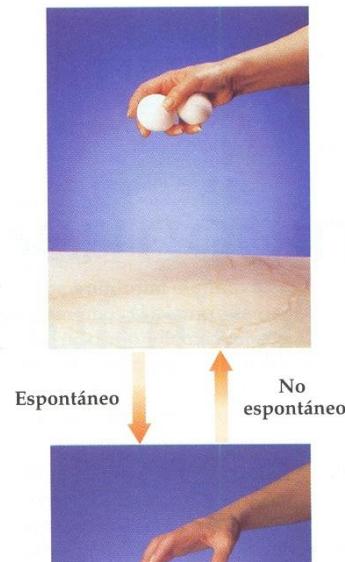
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Espontaneidad

La primera ley de la Termodinámica hace balance del calor Q intercambiado y trabajo W realizado: $\Delta U = Q + W$

Pero: la energía se conserva → el cambio de energía no se puede tomar como criterio de si un proceso es favorable o no.



Ciertos procesos ocurren siempre, pese a que la energía del universo se conserva!!



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

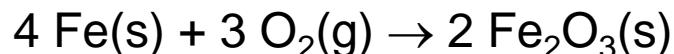
Oxidación de un clavo de hierro expuesto al aire húmedo:

Un **proceso espontáneo** en un sistema se deja que evolucione por sí mismo; una vez comenzado no es necesaria ninguna acción desde fuera del sistema (acción externa)

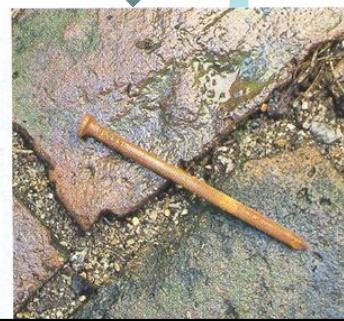


Un **proceso no espontáneo** no se produce a menos que se aplique de forma continua alguna acción externa.

↓ Espontáneo



↑ No espontáneo



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

➤ Solo los procesos espontáneos se producirán sin intervención humana.

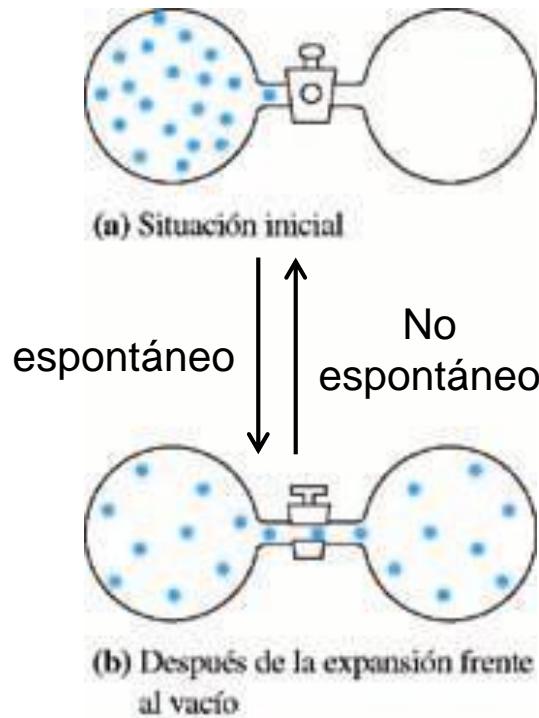
www.cartagena99.com no se hace responsable de la información contenida en el presente documento en virtud al

Artículo 17.1 de la Ley de Servicios de la Sociedad de la Información y de Comercio Electrónico, de 11 de julio de 2002,

Si la información contenida en el documento es ilícita o lesiona bienes o derechos de un tercero háganoslo saber y será retirada.

Concepto de entropía

Expansión espontánea de un gas



Gas ideal: $\Delta U = 0 \rightarrow \Delta H = 0$

La expansión no está causada por la caída a un estado de energía más baja.

Para la misma energía total, en el volumen expandido se encuentran disponibles un mayor número de niveles de energía en los que pueden distribuirse las moléculas del gas:

Es la tendencia del sistema a que la energía se disperse en un mayor número de niveles de energía: mayor desorden.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Entropía S

- Es la propiedad termodinámica relacionada con la forma en que la energía de un sistema se distribuye entre niveles microscópicos de energía disponibles.

Cuanto mayor es el número de configuraciones de las partículas microscópicas (átomos, iones, moléculas) entre los niveles de energía en un estado particular de un sistema, mayor es la entropía de este sistema.

- Es una propiedad termodinámica extensiva
- Cambio de entropía, $\Delta S = S_{\text{final}} - S_{\text{initial}}$ depende sólo de los estados inicial y final del sistema.

Expansión de un gas: $\Delta S > 0 \rightarrow$ espontáneo
más desordenado

Reacciones químicas: $\Delta S^\circ = \Sigma S^\circ(\text{productos}) - \Sigma S^\circ(\text{reactivos})$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

2^a Ley de la Termodinámica (o de la Entropía)

Regula la dirección en la que deben llevarse a cabo los procesos termodinámicos y, por lo tanto, la imposibilidad de que ocurran en el sentido contrario.

El cambio total de entropía (= cambio de entropía del universo):

$$\Delta S_{\text{total}} = \Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sistema}} + \Delta S_{\text{entorno}}$$

- a) Proceso reversible: $\Delta S_{\text{univ}} = 0$
- b) Proceso irreversible: $\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sys}} + \Delta S_{\text{ent}} > 0$; espontáneo



Criterio para el cambio espontáneo

La entropía no se conserva; S_{univ} aumenta continuamente.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

De nuevo: Oxidación de un clavo de hierro expuesto al aire húmedo:



$$\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sistema}} + \Delta S_{\text{entorno}}$$



$$\Delta S_{\text{sistema}} < 0$$

$$\Delta H < 0 : \Delta S_{\text{entorno}} = \frac{-q_{\text{sis}}}{T} = \frac{-\Delta H}{T} > 0$$



$$\Delta S_{\text{entorno}} > 0$$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Entropía y (des)orden

La S del universo está en aumento y va asociada con el caos molecular.

Ejemplo:

1. Fusión del hielo a p=cte., proceso **reversible** a T=273.15K

$$\Delta S_{\text{fusión}} = \frac{Q_{\text{rev}}}{T_{\text{fus}}} = \frac{\Delta H_{\text{fusión}}}{T_{\text{fus}}} = +22 \text{ J/K} \quad \Delta H^0_{\text{fus}} = 6.01 \text{ kJ/mol}$$

El paso de hielo a agua líquida aumenta el desorden: $\Delta S > 0$

2. Evaporación del agua a p=cte., proceso **reversible** a T=373.15K

$$\Delta S_{\text{vap}} = \frac{Q_{\text{rev}}}{T_e} = \frac{\Delta H_{\text{vap}}}{T_e} = +109 \text{ J/K} \quad \Delta H^0_{\text{vap}} = 40.8 \text{ kJ/mol}$$

Hay mayor desorden en el estado gaseoso

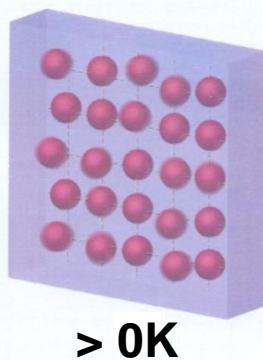
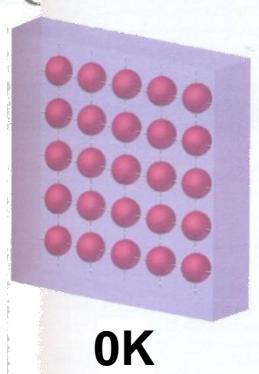
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99



CEU

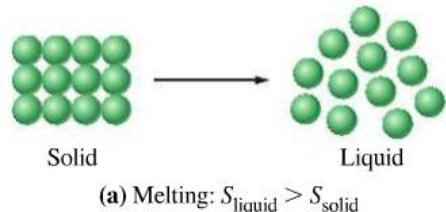


3^a Ley de la Termodinámica

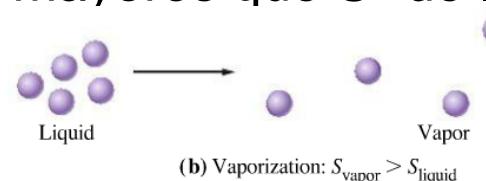
La entropía de un cristal puro y perfecto a 0K es cero: $S_{0K} = 0$.

- Las entropías molares estándar de los elementos a la temperatura de referencia (298K) **no son cero.**

➤ S° de los gases son mayores que S° de los líquidos y sólidos.

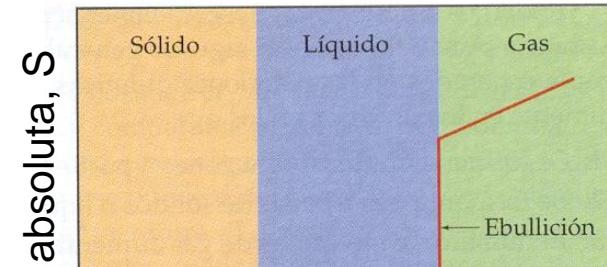


(a) Melting: $S_{\text{liquid}} > S_{\text{solid}}$



(b) Vaporization: $S_{\text{vapor}} > S_{\text{liquid}}$

➤ S° aumenta por lo general con la masa molecular y con el número de átomos de la fórmula de una sustancia.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cambios de entropía en reacciones químicas

1. Calcular ΔS° de la síntesis de amoníaco a 298 K:



$$S^\circ(NH_3) = 192.5 \text{ J/molK}$$

$$S^\circ(H_2) = 130.7 \text{ J/molK}$$

$$S^\circ(N_2) = 191.6 \text{ J/molK}$$

$$\Delta S^\circ = 2S^\circ(NH_3) - [S^\circ(N_2) + 3 S^\circ(H_2)] = -198.4 \text{ J/molK} < 0$$

2. Calcular la entropía del entorno:

$$\Delta S_{\text{entorno}} = \frac{-q_{\text{sis}}}{T}$$

$$q_{\text{sis}} = \Delta H_r ; p = \text{constante} \quad \Delta H_f^\circ(NH_3) = -46.19 \text{ kJ}$$

$$\Delta H_r^\circ = 2 \cdot (-46.19 \text{ kJ}) - 3 \cdot 0 \text{ kJ} - 1 \cdot 0 \text{ kJ} = -92.38 \text{ kJ}$$

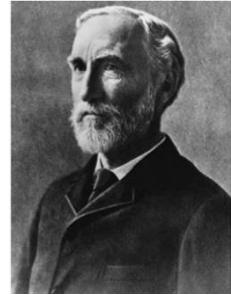
$$\Delta S_{\text{entorno}} = \frac{92.38 \text{ kJ}}{298 \text{ K}} = 0.310 \text{ kJ/K} = 310 \text{ J/K}$$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Energía (libre) de Gibbs G



Nueva función de estado G de un estado se define como: $G = H - TS$

Se puede demostrar que $-T\Delta S_{univ} = \Delta H_{sys} - T\Delta S_{sys} = \Delta G_{sys}$

J. Willard Gibbs
1839-1903

Cambio de energía libre de un proceso del sistema:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Como $\Delta S_{univ} > 0$, se tiene el siguiente criterio para el cambio espontáneo:

- Si $\Delta G < 0$, la reacción es espontánea. (proceso exergónico)
- Si $\Delta G = 0$, la reacción está en equilibrio
- Si $\Delta G > 0$, la reacción no es espontánea. Es necesario aportar

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TECNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

Energía Gibbs estándar de formación, ΔG_f°

Variación de energía Gibbs para una reacción en la que se forma una sustancia en su estado estándar a partir de sus elementos en su forma física de referencia y en el estado estándar.

Energía Gibbs estándar de reacción, ΔG_r°

$$\Delta G^\circ = [\sum v_p \Delta G_f^\circ(\text{productos}) - \sum v_r \Delta G_f^\circ(\text{reactivos})]$$

TABLA 20.1 Criterio de espontaneidad: $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$

Caso	ΔH	ΔS	ΔG	Resultado	Ejemplo
1	—	+	—	espontáneo a cualquier temperatura	$2 \text{ N}_2\text{O(g)} \longrightarrow 2 \text{ N}_2\text{(g)} + \text{ O}_2\text{(g)}$
2	—	—	{ — + + } —	espontáneo a temperaturas bajas no espontáneo a temperaturas altas no espontáneo a temperaturas bajas	$\text{H}_2\text{O(l)} \longrightarrow \text{H}_2\text{O(s)}$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Entalpía libre de Gibbs, entalpía de reacción y variación de la entropía

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

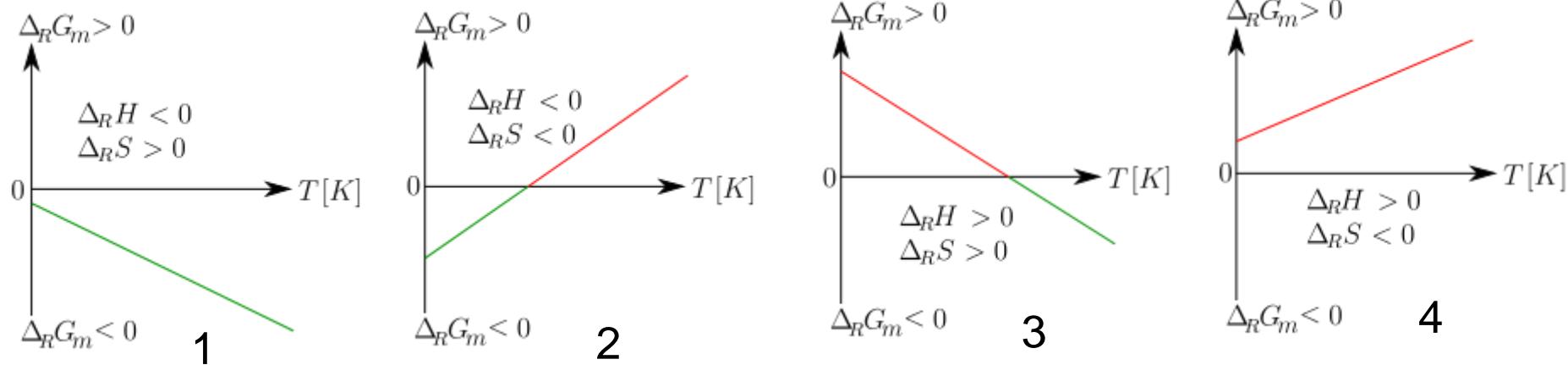


TABLA 20.1 Criterio de espontaneidad: $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$

Caso	ΔH	ΔS	ΔG	Resultado
1	-	+	-	espontáneo a cualquier temperatura
-			-	espontáneo a temperaturas bajas]

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Energía libre de Gibbs y constante de equilibrio K_{eq}

Para una reacción en equilibrio podemos escribir: $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln K_{eq} = 0$

Energía libre estándar

Constante de equilibrio

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K_{eq}$$

Si se conoce ΔG° a una temperatura dada, podemos calcular K_{eq} (y viceversa).

TABLE 19.2 Significance of the Magnitude of ΔG° (at 298 K)

ΔG°	K	Significance
+200 kJ/mol	9.1×10^{-36}	Equilibrium favors reactants
+100	3.0×10^{-18}	
+50	1.7×10^{-9}	
+10	1.8×10^{-2}	
+1.0	6.7×10^{-1}	
0	1.0	Equilibrium calculation is

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

-200 1.1×10^{32} products