



Termoquímica

Tema 3

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

Termoquímica: definiciones y conceptos básicos

- **Estudia los cambios de calor que se producen en las reacciones químicas**
- **Calor:** Transferencia de **energía térmica** entre dos cuerpos que están a distinta 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

Naturaleza y tipos de energía

► ¿Qué es la **energía**?

Capacidad de realizar un trabajo ($w = F \times d$)

► Tipos de energía:

- **Energía radiante:** energía solar (calor, fotosíntesis)
- **Energía térmica:** asociada al movimiento aleatorio de los átomos o moléculas
- **Energía química:** energía almacenada en los enlaces químicos de las sustancias
- **Energía cinética:** energía que posee un cuerpo en movimiento
- **Energía potencial:** energía que posee un objeto en función de su posición

Pueden convertirse unos en otros (ATP en energía cinética; energía radiante

en energía química)

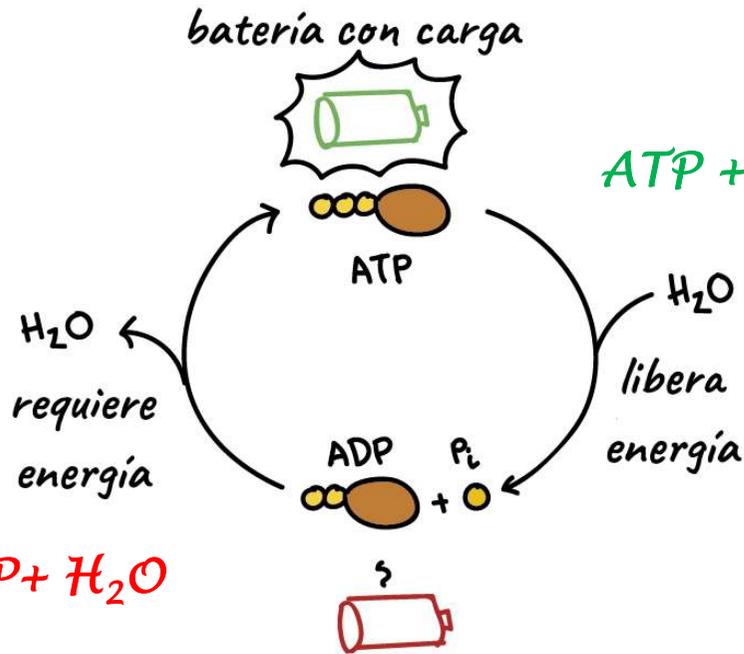
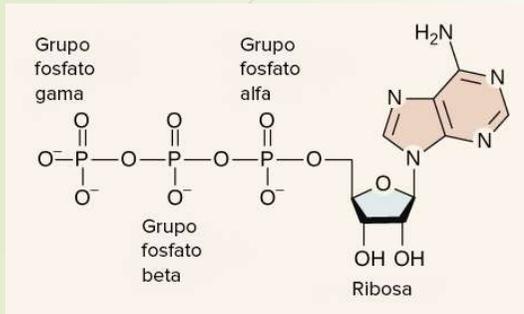
Cartagena99

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

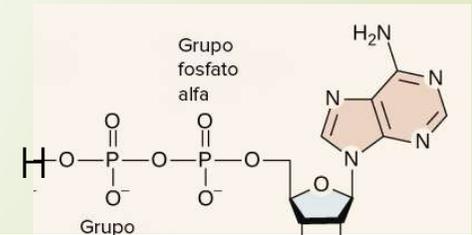
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Naturaleza y tipos de energía

trifosfato de adenosina,



Adenosin-difosfato



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

Cambios de energía

- ▶ ¿Cómo estudiamos los cambios de energía en una reacción química?
Definir el **sistema** que estudiamos (parte del universo que nos interesa) y los **alrededores** (resto del universo que rodea al sistema)
- ▶ Tipos de sistemas:
 - ▶ **Sistema abierto:** intercambia materia y energía con los alrededores
 - ▶ **Sistema cerrado:** intercambia energía pero no materia con los alrededores
 - ▶ **Sistema aislado:** no intercambia ni materia ni energía con los alrededores



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

Cambios de energía

- El **estado de un sistema** viene definido por el valor de sus propiedades macroscópicas más importantes, como: *composición, energía, temperatura, presión o volumen*.
- P , V , T y E son **funciones de estado**: dependen **únicamente del estado del sistema**, y no de cómo se ha alcanzado éste.



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 energía

- Así como P, V y T pueden medirse con cierta facilidad, es más complicado conocer la **energía total** de un sistema, que denominamos **Energía interna** (E o U) y que engloba todas las formas de energía que contiene ese sistema (química, térmica...)
- Ley de conservación de la energía:** la **energía total** del universo permanece **constante**, la energía que pierde el sistema la ganan los alrededores y viceversa.

$$\Delta E \text{ sistema} + \Delta E \text{ alrededores} = 0$$



Reacción **exotérmica** (sistema transfiere energía a los alrededores)



Reacción **endotérmica** (sistema

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

Calor y trabajo

- ▶ Son los **medios** más frecuentes de que un sistema **intercambie energía** con su entorno (alrededores), y existen solamente **durante** una **transformación**
- ▶ Si nuestro sistema cambia de un estado inicial a un estado final, la variación de energía interna sería:

$$\Delta E = E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}} \quad (E \text{ es función de estado})$$

- ▶ El ΔE se realizaría en forma de calor y trabajo: **$\Delta E = q + w$**

- ▶ Calor ganado por el sistema: +
- ▶ Calor cedido por el sistema: -
- ▶ Trabajo realizado por el sistema: -
- ▶ Trabajo recibido por el sistema: +

q = transferencia de E térmica

$w = F \times d = P \times V$ (expansión de gas)

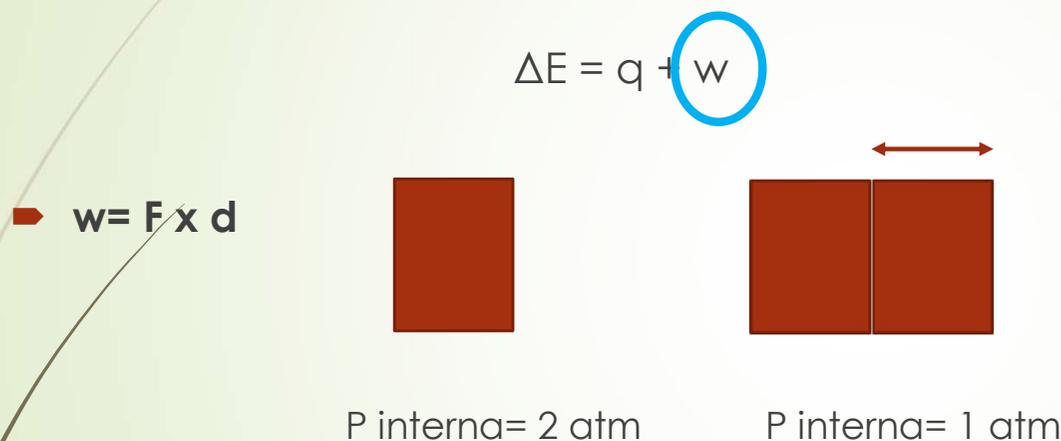
Cartagena99

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 de reacción: Entalpía

Reacción química: Reactivos (estado 1 sistema) → Productos (estado 2 del sistema)



P externa (cte)=P

$P = F/S$ $F = P \times S$

$W = P \times S \times d = P \cdot V$

$W = PV_2 - PV_1 = P \Delta V$

Teniendo en cuenta el criterio de signos:

Trabajo de expansión: realizado por el sistema, luego: signo -

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 de reacción: Entalpía

Reacción química: Reactivos (estado 1 sistema) → Productos (estado 2 del sistema)

$$\Delta E = q + w = q - P (V_2 - V_1) = q - P \Delta V$$

► **A volumen constante:** $w = 0$ $\Delta E = q + 0$ **$\Delta E = q$ (calor de reacción a V cte)**
(Calorímetro)

► **A presión constante:** la mayor parte de las reacciones transcurren a P atmosférica
Entalpía: $H = E + PV$ $\Delta H = \Delta E + P \Delta V$ (función de estado)

$$\Delta E = q + w = q - P \Delta V$$

$$\Delta E = \Delta H - P \Delta V$$

$$\Delta H - P \Delta V = q - P \Delta V$$
 $\Delta H = q$ (calor de reacción a P cte)

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: propiedades

- Para una reacción química (P cte):



$\Delta H > 0$ q ganado por el sistema: **R. endotérmica**

$\Delta H < 0$ q cedido por el sistema: **R. exotérmica**

- Es una **función de estado**
- Es una **propiedad extensiva** (cal/mol o julios/mol)
- ΔH de una reacción es igual, pero de signo contrario, a la de su reacción inversa
($\Delta H R \rightarrow P = - \Delta H P \rightarrow R$)
- El cambio de entalpía en una reacción **depende del estado físico** de R y P. Si no se especifica, R y P en su forma más estable a 25° 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

Entalpía: Ley de Hess

- Para una reacción química (P cte):



¿Cómo medimos H para P y R?

- Definir un “punto de referencia” para H, medir ΔH :

ΔH_f^0 = entalpía estándar de formación

- Es la entalpía de formación de un mol de un elemento o compuesto en condiciones estándar (1 atmósfera) y a 25° C (por ser la T más frecuente a la que se determina)
- **$\Delta H_f^0 = 0$** para cualquier elemento en su forma más estable (a 1 atm y 25° C)
- **$\Delta H^0 \text{ reacción} = \sum n \Delta H_f^0 \text{ productos} - \sum m \Delta H_f^0 \text{ reactivos}$**

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

TABLA D.2 Propiedades termodinámicas de las sustancias a 298,15 K*. Las sustancias están a 1 bar de presión. Los solutos de disoluciones acuosas tienen actividad unidad (aproximadamente concentración 1 M). Los datos de iones en disolución acuosa son relativos a valores cero para ΔH_f° , ΔG_f° y S° del H^+ .

Sustancias inorgánicas

	ΔH_f° , kJ mol ⁻¹	ΔG_f° , kJ mol ⁻¹	S° , J mol ⁻¹ K ⁻¹
Aluminio			
Al(s)	0	0	28,33
Al ³⁺ (aq)	-531	-485	-321,7
AlCl ₃ (s)	-704,2	-628,8	110,7
Al ₂ Cl ₆ (g)	-1291	-1220	490
AlF ₃ (s)	-1504	-1425	66,44
Al ₂ O ₃ (sólido α)	-1676	-1582	50,92
Al(OH) ₃ (s)	-1276	—	—
Al ₂ (SO ₄) ₃ (s)	-3441	-3100	239
Azufre			
S(g)	278,8	238,3	167,8
S(rómbico)	0	0	31,80
S ₈ (g)	102,3	49,63	431,0

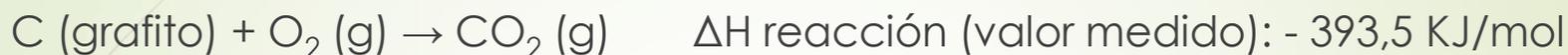
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

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

Cartagena99

Entalpía: Ley de Hess

► Para obtener ΔH_f^0 :

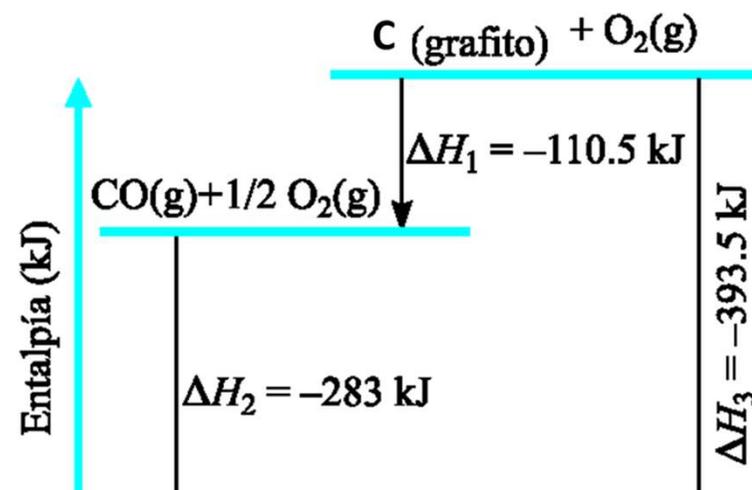


$$\Delta H \text{ reacción} = \Delta H_f^0 \text{ CO}_2(\text{g}) - \Delta H_f^0 \text{ C(graf)} - \Delta H_f^0 \text{ O}_2(\text{gas})$$

$$-393,5 = \Delta H_f^0 \text{ CO}_2(\text{g}) - 0 - 0 \quad \Delta H_f^0 \text{ CO}_2(\text{g}) = -393,5 \text{ kJ/mol}$$

► **Ley de Hess:** El cambio de entalpía de una reacción es el mismo independientemente de si ésta transcurre en una o varias etapas

$$\Delta H \text{ reacción} = \Delta H_1 + \Delta H_2$$



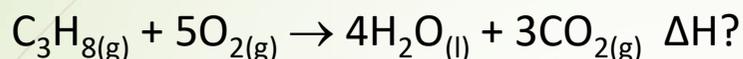
Cartagena99

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

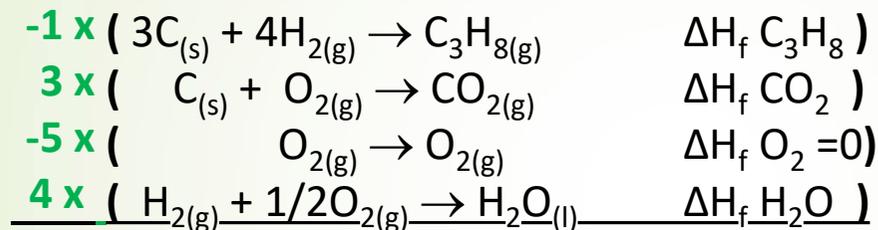
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Ejemplo aplicación Ley de Hess

Calcular la ΔH para la combustión del propano:



A partir de los calores de formación de reactivos y productos:



$$\Delta H = 3x\Delta H_f \text{CO}_2 + 4x\Delta H_f \text{H}_2\text{O} - \Delta H_f \text{C}_3\text{H}_8 - 5x\Delta H_f \text{O}_2$$

$$\Delta H = 3(-395,5) + 4(-285,8) - (-103,8) - 5(0) = -2219 \text{ kJ}$$

Cartagena99

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

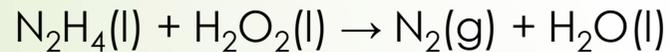
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Problemas

3.1 b) Calcula ΔH° para cada reacción a partir de los respectivos ΔH°_f , según la ley de Hess:



3.4. Determina la variación de entalpía estándar de la reacción (no ajustada):



a partir de los siguientes datos: $\text{N}_2\text{H}_4(\text{l}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{N}_2(\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l})$, $\Delta H^\circ = -622,2 \text{ kJ}$ y los calores de formación del agua y del agua oxigenada.

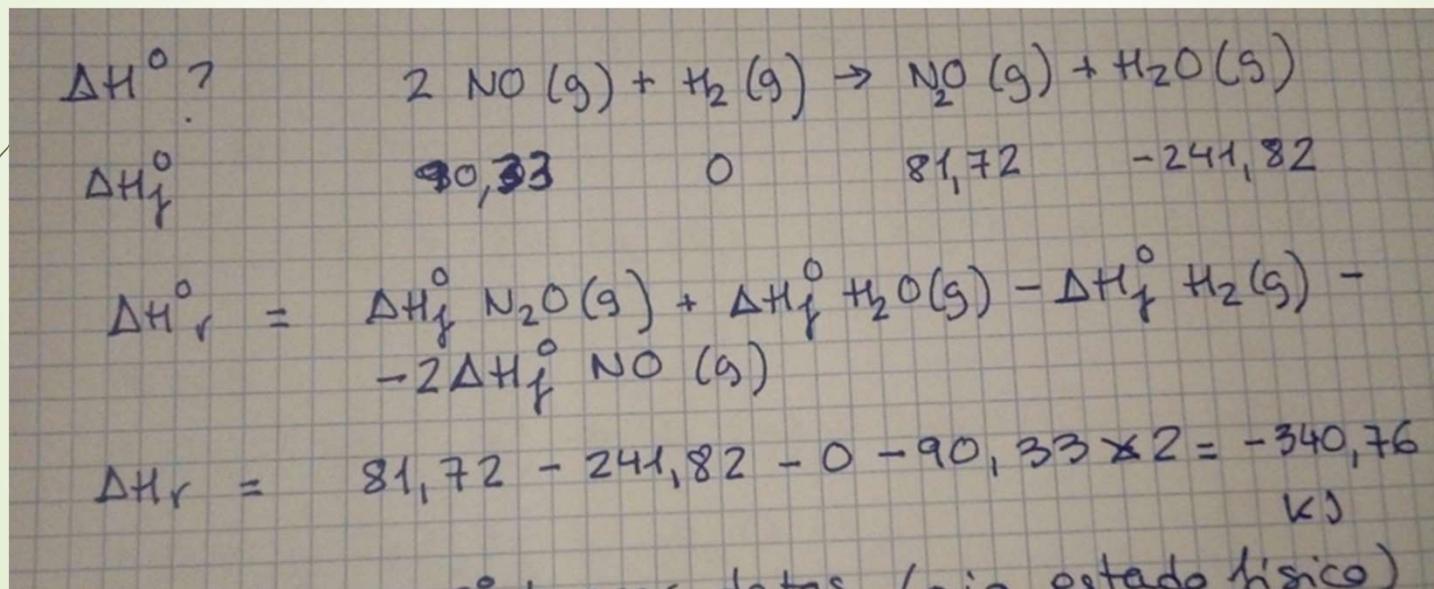
Cartagena99

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

Problemas

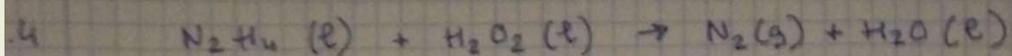
3.1 b) Calcula ΔH° para cada reacción a partir de los respectivos ΔH_f° , según la ley de Hess:



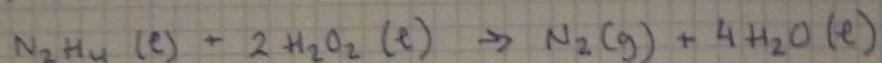
Cartagena99

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

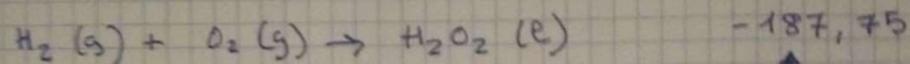
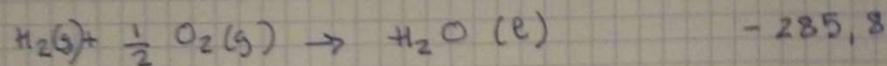
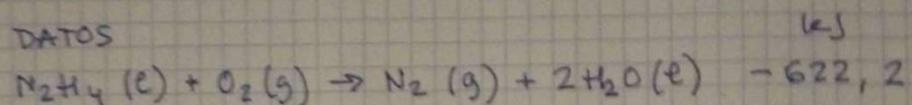
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



1º ajustar reacción

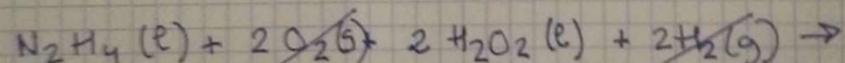
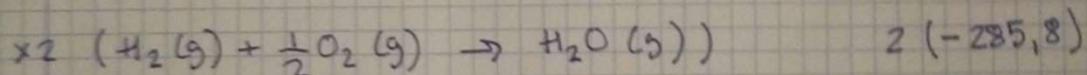
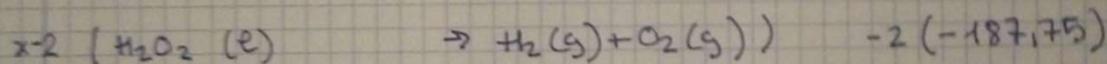
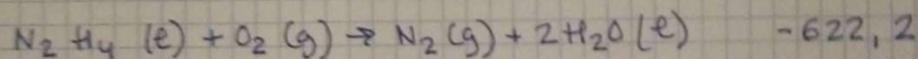


2º DATOS



↳ Buscar en tablas

3º Combinar las ecuaciones



Respuesta
correcta: -818,3 KJ

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

Esponaneidad. Entropía.

- **Proceso espontáneo:** es aquel que ocurre por si solo en unas determinadas condiciones, sin necesidad de una acción externa
- **Proceso no espontáneo:** aquél que no se da sin que se realice una acción externa



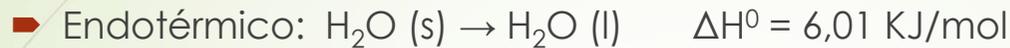
Cartagena99

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

Esponaneidad. Entropía.

► Proceso espontáneo:



¿Cómo predecimos la espontaneidad de un proceso?

- **Entropía (S):** Medida del grado de dispersión de la energía en un sistema entre las diferentes posibilidades en que el sistema puede contener la energía (desorden)

$$S = k \ln W \quad (\text{Boltzman, 1868})$$

W: nº de microestados (diferentes posibilidades de “organización” del sistema), a mayor W mayor desorden

S es una función de estado.



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. Entropía.

- **Segunda ley de la Termodinámica:** La entropía del universo aumenta en un proceso espontáneo y se mantiene constante en un proceso en equilibrio.

Para un proceso espontáneo, por tanto: $\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sist}} + \Delta S_{\text{alr}} > 0$

- ¿Cómo calculamos ΔS reacción?

$$\Delta S^{\circ} \text{ reacción} = \sum n S^{\circ} \text{ productos} - \sum m S^{\circ} \text{ reactivos}$$

- **Tercera ley de la Termodinámica:** La entropía de una sustancia cristalina perfecta en el cero absoluto (0 K) es cero. ($S = k \ln W$, $W=1$, $S=0$)
- Esto establece un punto de referencia en la escala de entropía, lo que nos permite calcular los valores de entropía (Tablas)

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. Entropía. Energía libre de Gibbs

Para un proceso espontáneo, por tanto: $\Delta S_{\text{univ}} = \Delta S_{\text{sist}} + \Delta S_{\text{alr}} > 0$

ΔS_{sist} : calculamos a partir de los valores tabulados

► ¿Cómo calculamos $\Delta S_{\text{alrededores}}$?

R. exotérmica: Q transferido a los alrededores \uparrow movimiento molecular, \uparrow desorden

¿cuánto? $\Delta S_{\text{alr}} = \text{cte } 1 * (-\Delta H_{\text{reacción}})$

pero también depende de la T de los alrededores: $\Delta S_{\text{alr}} = -\frac{\Delta H}{T}$

► **Energía libre de Gibbs: $G = H - T S$**

► G es también una función de estado, reúne los términos H y S del sistema y

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. Entropía. Energía libre de Gibbs

- **Energía libre de Gibbs: $G = H - T S$**
- G es también una función de estado, reúne los términos H y S del sistema y permite predecir la espontaneidad de la reacción
- $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$
 - $\Delta G < 0$ El sistema libera energía, reacción espontánea
 - $\Delta G > 0$ El sistema recibe energía, reacción no espontánea
 - $\Delta G = 0$ El sistema está en equilibrio
- **$\Delta G^0 \text{ reacción} = \sum n \Delta G_f^0 \text{ productos} - \sum m \Delta G_f^0 \text{ reactivos}$**
- **$\Delta G_f^0 = 0$** para los elementos en su forma alotrópica más estable a 1 atmósfera y 25° 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

Efecto de la temperatura sobre la espontaneidad de las reacciones.

ΔH	ΔS	$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$	Espontaneidad
-	+	Siempre -	Espontánea a cualquier T
+	-	Siempre +	No espontánea a ninguna T
+	+	+ (T < T eq)	No espontánea
		- (T > T eq)	Espontánea
-	-	- (T < T eq)	Espontánea
		+ (T > T eq)	No espontánea

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

Problemas

3.11 a) Determina a qué temperatura es espontánea la reacción:



Handwritten solution on grid paper for problem 3.11 a). The reaction is $2\text{HgO}(s) \rightarrow 2\text{Hg}(l) + \text{O}_2(g)$. The standard enthalpy of formation (ΔH_f°) and standard entropy (S°) values are listed for each species. The standard enthalpy of reaction (ΔH_r°) is calculated as $0 \cdot 2 + 0 - 2(-90,77) = 181,54 \text{ kJ}$. The standard entropy of reaction (ΔS_r°) is calculated as $205,05 + 2 \cdot 76,48 - 2 \cdot 70,85 = 216,31 \text{ J/k}$. The standard Gibbs free energy of reaction (ΔG_r°) is set to zero to find the temperature: $181,54 - T(216,31 \times 10^{-3}) = 0$, resulting in $T = 839,26 \text{ k}$.

	$2\text{HgO}(s)$	$2\text{Hg}(l)$	$\text{O}_2(g)$
ΔH_f°	-90,77	0	0
S°	70,85	76,48	205,05

$$\Delta H_r^\circ = 0 \cdot 2 + 0 - 2(-90,77) = 181,54 \text{ kJ}$$
$$\Delta S_r^\circ = 205,05 + 2 \cdot 76,48 - 2 \cdot 70,85 = 216,31 \text{ J/k}$$
$$\Delta G_r^\circ = 181,54 - T(216,31 \times 10^{-3}) = 0$$
$$T = 839,26 \text{ k}$$

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