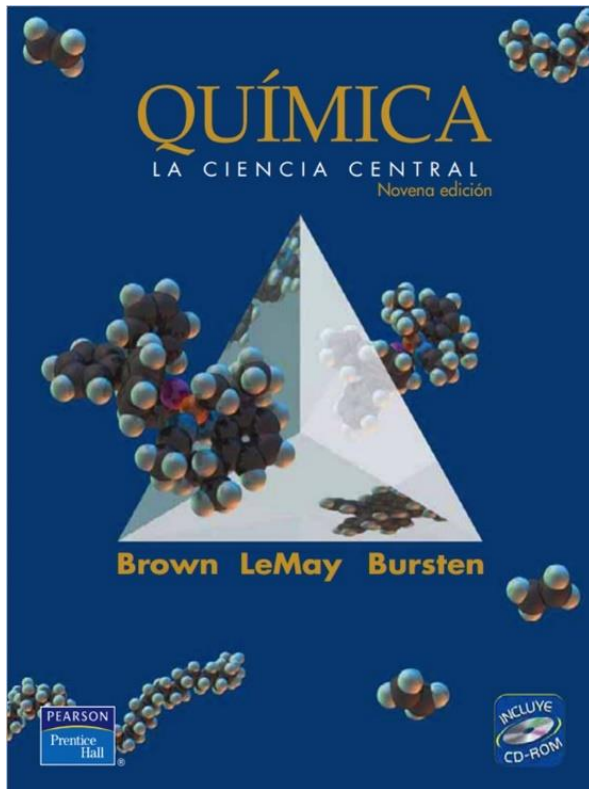


UNIDAD V

ASPECTOS FISICOQUÍMICOS DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

- 5.1 [Primera ley de la termodinámica: energía interna y entalpía.](#)
- 5.2 Termoquímica. Cambio de entalpía en reacciones químicas.
Reacciones exotérmicas y endotérmicas.
- 5.3 Segunda ley de la termodinámica: entropía y energía libre de Gibbs.
- 5.4 Cambio de la energía libre de Gibbs en reacciones químicas.
Energía libre y la constante de equilibrio.
- 5.5 Cinética química: concepto de velocidad y orden de reacción.
- 5.6 Efecto de la temperatura sobre la velocidad de reacción. Ecuación de Arrhenius.
- 5.7 Teorías de velocidad de reacción.

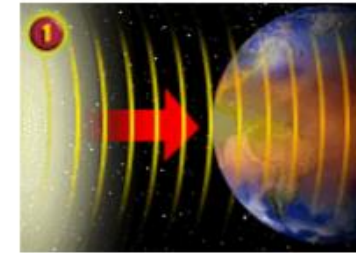


Capítulo 19

Termodinámica química

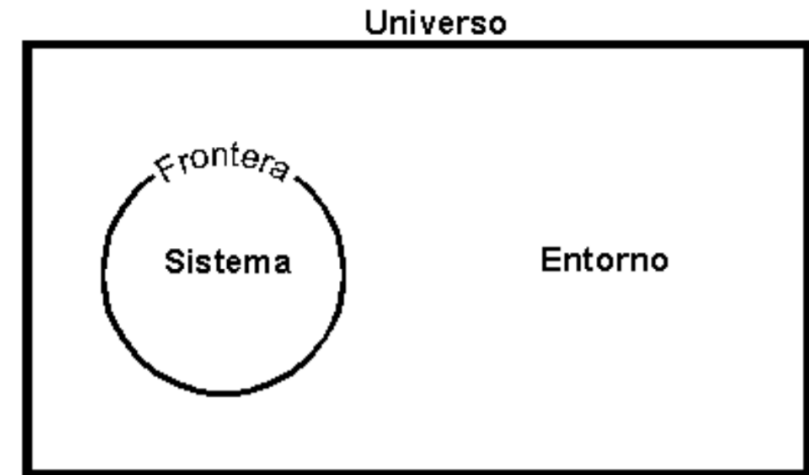
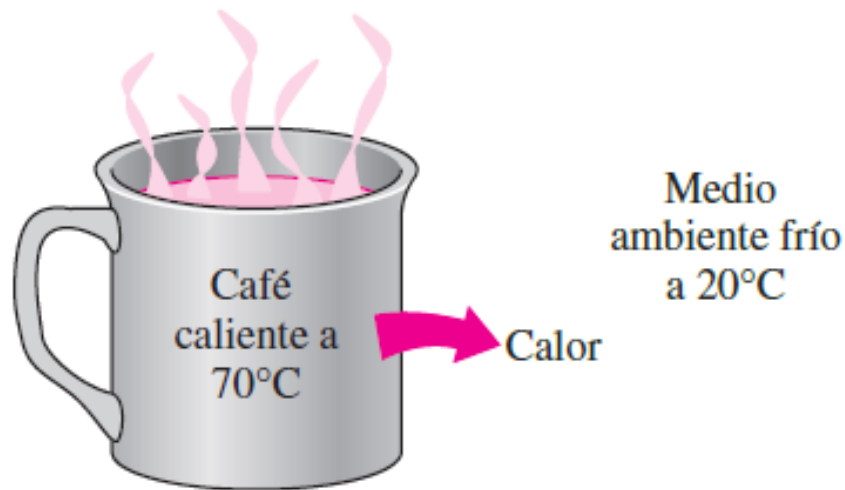
Energía: Capacidad para efectuar un trabajo

- **E. Radiante**: ondas electromagnéticas: luz visible, ondas de radio, rayos ultravioletas, rayos infrarrojos,...
- **E. Térmica**: movimiento aleatorio de átomos y las moléculas.
- **E. Química**: almacenada en las unidades estructurales de las sustancias (enlaces químicos).
- **E. Potencial**: asociada a la posición de un objeto.
- **E. Cinética**: asociada al movimiento de un objeto.



Conceptos

- **Sistema Termodinámico:** Está constituido por alguna porción del universo físico que nosotros consideramos para su estudio.
- **Fronteras:** El mecanismo que lo separa del resto del universo.
- **Alrededores:** La interacción entre el sistema y sus alrededores estará caracterizada por los intercambios mutuos de energía, en sus diversas formas. El grado de interacción con sus alrededores dependerá obviamente de la naturaleza de sus fronteras.



Sistema aislado



No hay transferencia de materia ni energía



Sistema cerrado



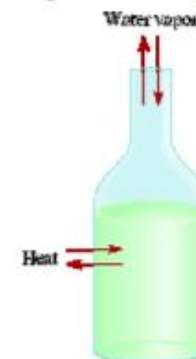
No hay transferencia de materia pero sí de energía



Sistema abierto



Hay transferencia de materia y energía



Los sistemas experimentan procesos

Endotérmico

El sistema **gana** energía en forma de calor

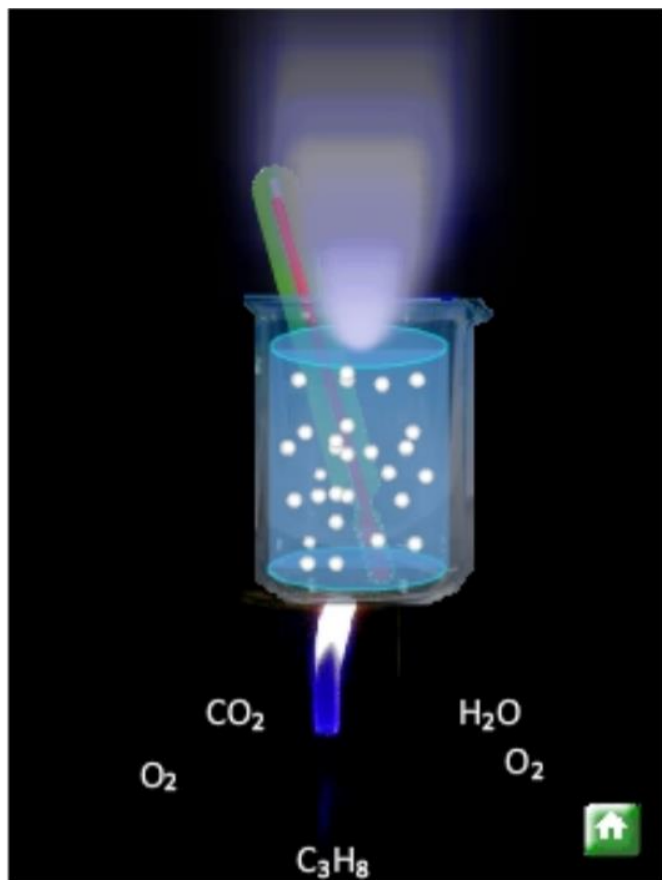


Exotérmico

El sistema **pierde** energía en forma de calor



Conceptos



- El propano está formado por moléculas constituidas por átomos de carbono y de hidrógeno.
- Como sabemos, la combustión completa de un hidrocarburo produce dióxido de carbono y agua. Pero se produce algo más: calor.
- Llamamos calor a la transferencia de energía entre los sistemas que se encuentran a diferentes temperaturas.
- Los sistemas pueden intercambiar energía realizando trabajo (W) o mediante la transferencia de energía térmica (calor, Q).
- Los sistemas no tienen calor (del mismo modo que no tienen trabajo), los sistemas poseen energía que puede ser transferida en forma de calor o de trabajo.

Primer Principio de la Termodinámica. Energía interna

- La 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.
- La energía total de un sistema o [energía interna](#) es una función de estado que se define como la suma de todas las energías cinéticas y potenciales de sus partes componentes. Es imposible medirla de manera absoluta pero si se puede determinar su variación o cambio de energía interna.

Primer Principio de la Termodinámica. Energía interna

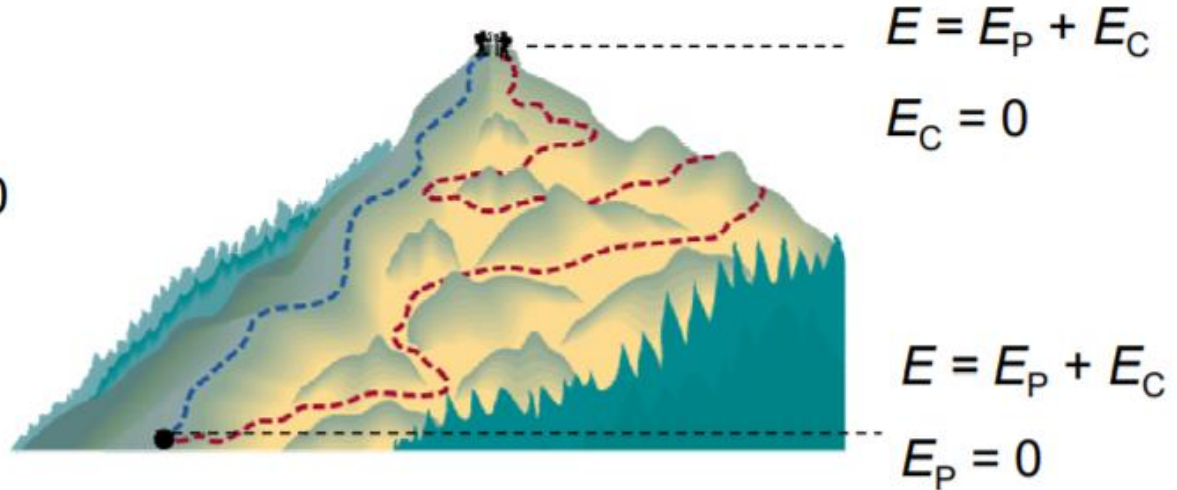
La energía ni se crea ni se destruye, sólo se transforma.

$$\Delta E_{\text{Universo}} = 0$$

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

$$\Delta E_{\text{sistema}} = -\Delta E_{\text{alrededores}}$$

$$\Delta E_{\text{sistema}} = E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}}$$



Energía interna de un sistema, U

- **Energía cinética:** movimiento de las moléculas y e^-
- **Energía potencial:** atracción y repulsión entre: e^- y núcleos moléculas
- **Energía enlaces protones y neutrones**

¿Cómo se calcula U ?

$$U = \sum E_C + E_P + E_N$$



Muy difícil de cuantificar para un sistema.

Las variaciones de Energía Interna sí son medibles

q = calor

w = trabajo

} intercambios de energía
entre el sistema y los
alrededores

De acuerdo con la **1ª Ley de la Termodinámica:**

$$\Delta U_{SIST} + \Delta U_{ENT} = 0$$

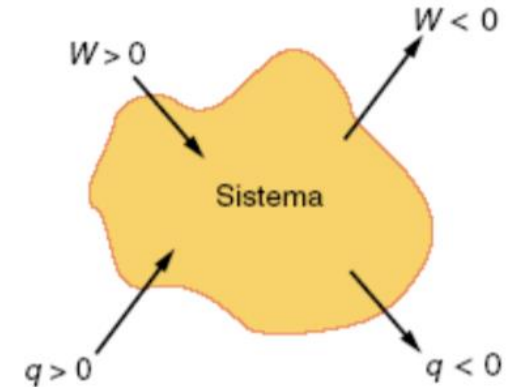
$$\Delta U_{SIST} = - \Delta U_{ENT}$$

$$\Delta U_{SIST} = q + w$$

La variación de Energía interna (U) de un sistema es la suma del intercambio de calor (q) entre el sistema y entorno y el trabajo (w) realizado por o sobre el sistema.

$$\Delta U = q + w \left\{ \begin{array}{ll} \Delta U > 0 & \text{El sistema gana energía} \\ \Delta U = 0 & \text{La energía del sistema no varía} \\ \Delta U < 0 & \text{El sistema pierde energía} \end{array} \right.$$

$$\text{Si el Sistema} \left\{ \begin{array}{ll} \checkmark \text{ Recibe calor} & q > 0 \\ \checkmark \text{ Emite calor} & q < 0 \\ \checkmark \text{ Recibe trabajo} & w > 0 \\ \checkmark \text{ Realiza trabajo} & w < 0 \end{array} \right.$$



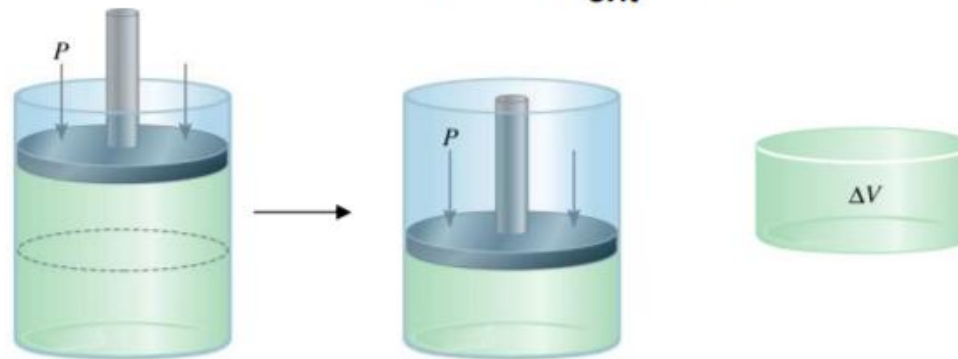
- **U , es una función de estado**, y sólo depende del estado inicial y final sin importar cómo se ha alcanzado dicho estado.
- **q y w no son funciones de estado**, se manifiestan durante un proceso (cambio) y dependen de la trayectoria que siga el proceso.

Trabajo

$$w = F \cdot d$$



$$w = -P_{\text{ext}} \cdot \Delta V$$



Si $\Delta V > 0$

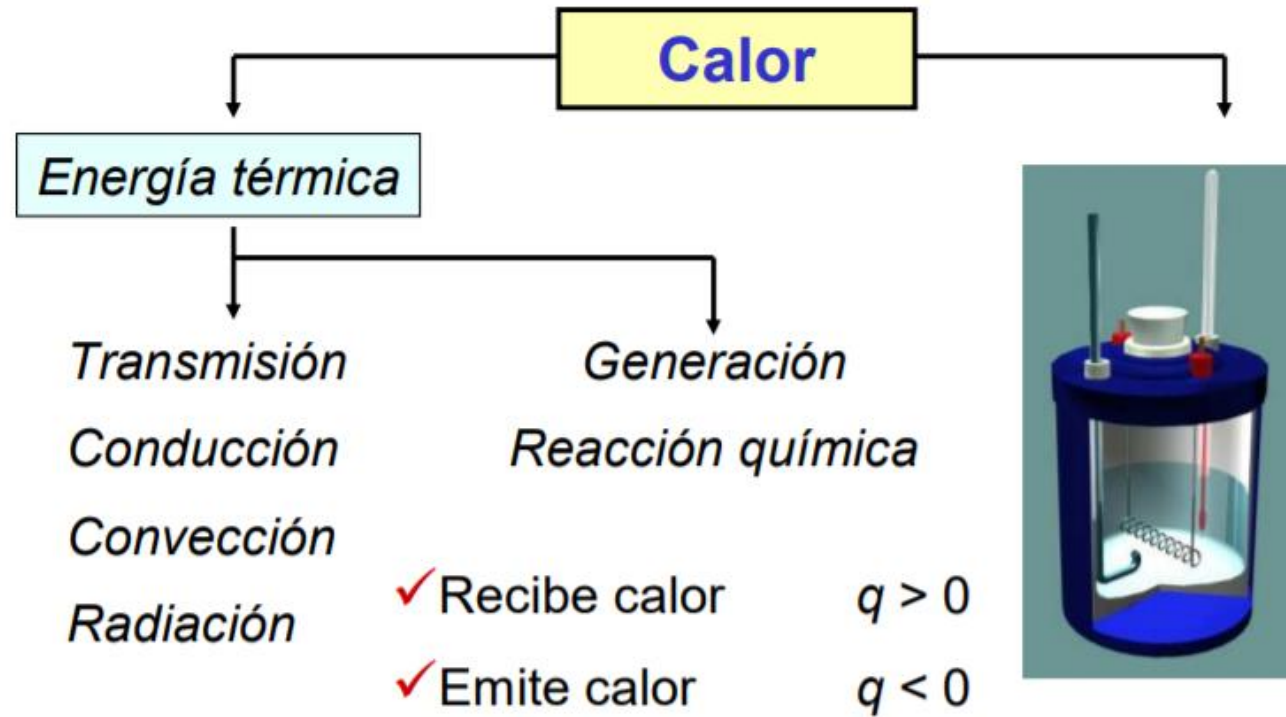
La expansión del
gas realiza trabajo

$$w < 0$$

Si $\Delta V < 0$

La compresión del gas
recibe trabajo

$$w > 0$$



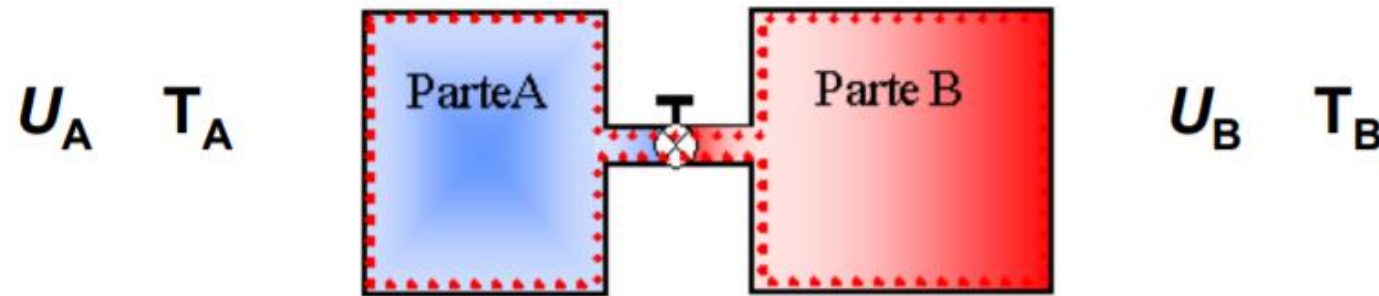
Caloría (cal): La cantidad de calor necesaria para variar un grado Celsius la temperatura de un gramo de agua

Julio (J): Es la unidad de energía básica en el sistema internacional

$$1 \text{ cal} = 4,18 \text{ J}$$

Ecuación calorimétrica

Calor: Energía que se intercambia entre un sistema y sus alrededores como resultado de una diferencia de temperaturas.



¿Cuánto calor se transferirá de B a A?



Caso 1: Calor intercambiado sin cambio de estado físico

$$\text{Cantidad de calor (} q \text{)} = \text{masa (} m \text{)} \cdot \text{calor específico (} c \text{)} \cdot \Delta T$$

Capacidad Calorífica

Si $\Delta T > 0$, $q > 0$ sistema gana temperatura, recibe calor, gana U

Si $\Delta T < 0$, $q < 0$ sistema pierde temperatura, emite calor, pierde U

1ª Ley de la Termodinámica

$$q_{\text{sistema}} + q_{\text{entorno}} = 0$$

$$q_{\text{sistema}} = - q_{\text{entorno}}$$

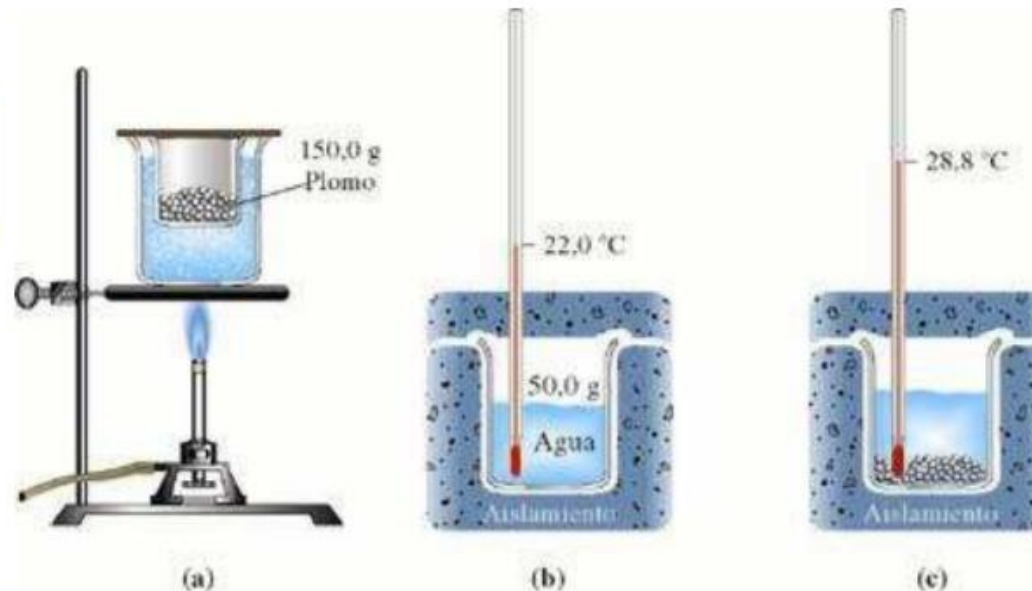
Ejemplo: Calculad cuánta energía hace falta para elevar la temperatura de 1,000 kg de agua de 20,0 °C a 100,0 °C (a una presión de 1 atm).

Dato: El calor específico del agua en ese rango vale $1 \text{ cal g}^{-1} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1} = 4,184 \text{ J g}^{-1} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$

Solución: El calor necesario para conseguir este cambio de temperatura será:

$$\begin{aligned} q &= m \cdot c_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \Delta T = 1000 \text{ g} \cdot 4,184 \frac{\text{J}}{\text{g }^{\circ}\text{C}} \cdot (100,0 - 20,0) ^{\circ}\text{C} \\ &= +335 \text{ kJ} = +80,0 \text{ kcal} = +80,0 \text{ Cal} \end{aligned}$$

¿Cómo se calcula un calor específico?



$$q_{\text{plomo}} = -q_{\text{agua}}$$

$$q_{\text{agua}} = m \cdot c \cdot \Delta T = (50,0 \text{ g}) \cdot (4,184 \text{ J/g } ^\circ\text{C}) \cdot (28,8 - 22,0)^\circ\text{C}$$

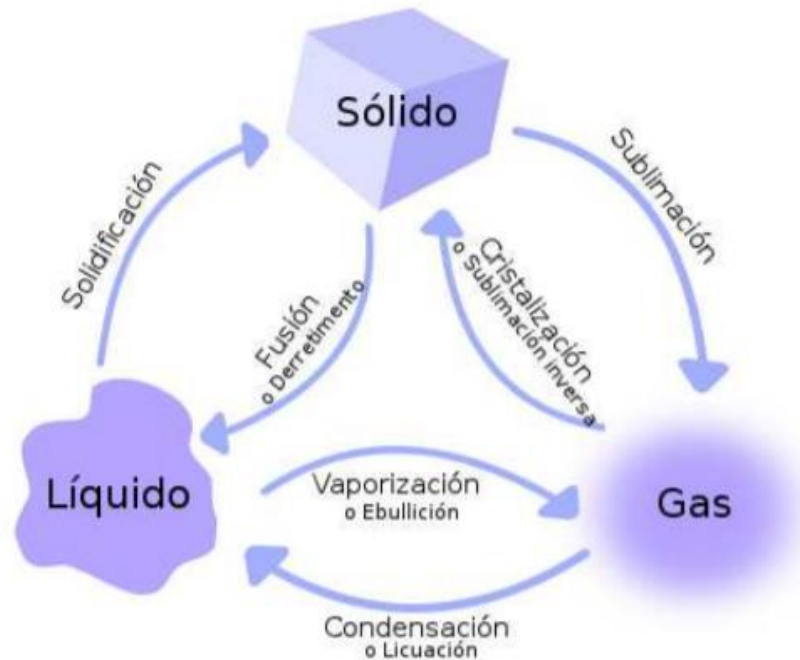
$$q_{\text{agua}} = 1,4 \cdot 10^3 \text{ J}$$

$$q_{\text{plomo}} = -1,4 \cdot 10^3 \text{ J} = m \cdot c \cdot \Delta T = (150,0 \text{ g}) \cdot (c) \cdot (28,8 - 100,0)^\circ\text{C}$$

$$c_{\text{plomo}} = 0,13 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}$$

Caso 2: Calor intercambiado con cambio de estado físico

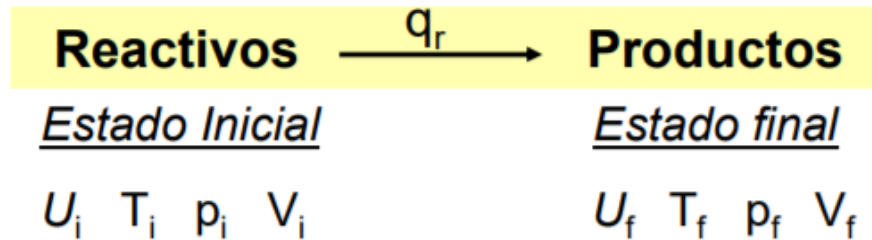
Cantidad de calor (q) = masa (m) · calor específico de cambio de fase (c)



Aumento del orden, $q < 0$

Aumento del desorden, $q > 0$

Transformaciones a P y V constantes. Entalpía.



$$\Delta U = U_f - U_i = q_r + w \quad (1^a \text{ Ley Termodinámica})$$

Si la reacción tiene lugar en un recipiente aislado de volumen constante:

$$\Delta U = U_f - U_i = q_r + w = q_r - p \cdot \Delta V = q_r - 0 = q_r$$

$$\Delta U = q_r = q_v$$



El calor de reacción para una reacción que transcurre a volumen constante (q_v) es igual a la variación de U que experimenta.



Transformaciones a P y V constantes. Entalpía.

Si la reacción tiene lugar en un recipiente a presión constante

$$\Delta U = U_F - U_I = q_p + w = q_p - P \cdot \Delta V$$

$$q_p = \Delta U + P \cdot \Delta V$$

Como U, P y V son funciones de estado debe ser posible obtener la expresión $\Delta U + P \cdot \Delta V$ a partir de otra función de estado.



Heike Kamerlingh Onnes

La suma de la variación de energía interna y el producto de la presión por el volumen es la variación de Entalpía, ΔH .

Transformaciones a P y V constantes. Entalpía.

Si el proceso tiene lugar a **Presión Constante**

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

- El calor de reacción a presión constante (q_p) es igual a la variación de la entalpía.
- El calor de reacción a volumen constante (q_v) es igual a la variación de la energía interna.

$$\Delta H = q_p$$

$$\Delta U = q_v$$

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

Entalpía de reacción

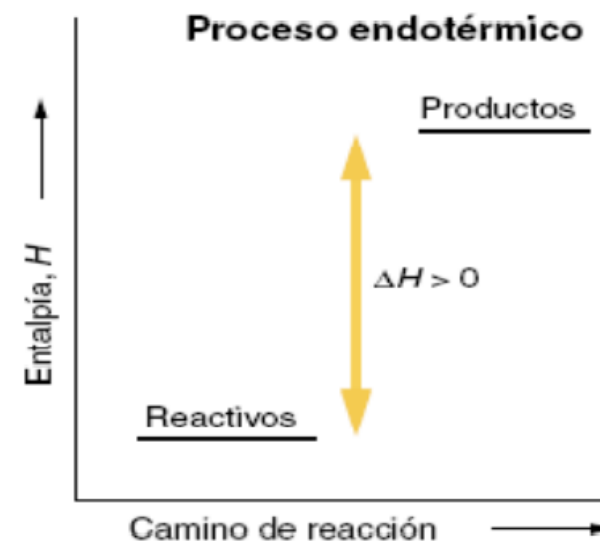
- diferencia entre las entalpías de los productos y de los reactivos:

$$\Delta H_r = H(\text{productos}) - H(\text{reactivos})$$

Ya que casi siempre las reacciones transcurren en condiciones a presión constante

Si $\Delta H_r > 0$ Endotérmica

Si $\Delta H_r < 0$ Exotérmica

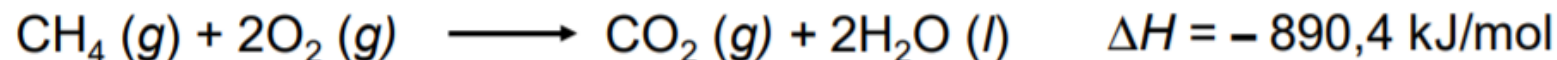


Entalpía de reacción

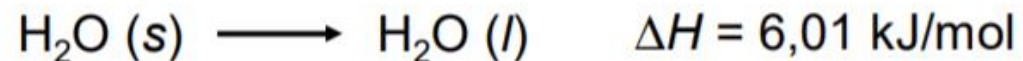
- diferencia entre las entalpías de los productos y de los reactivos:

$$\Delta H_r = H(\text{productos}) - H(\text{reactivos})$$

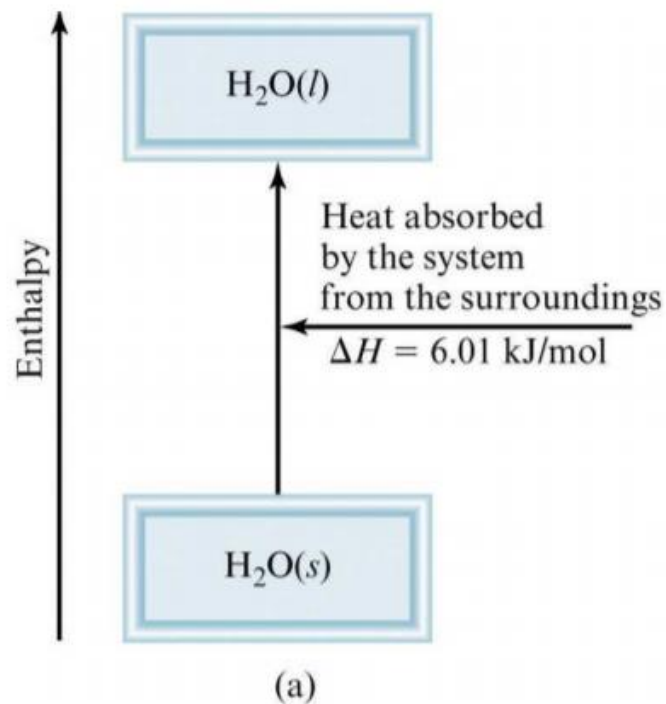
$\Delta H < 0$ reacción exotérmica, $q_r < 0$



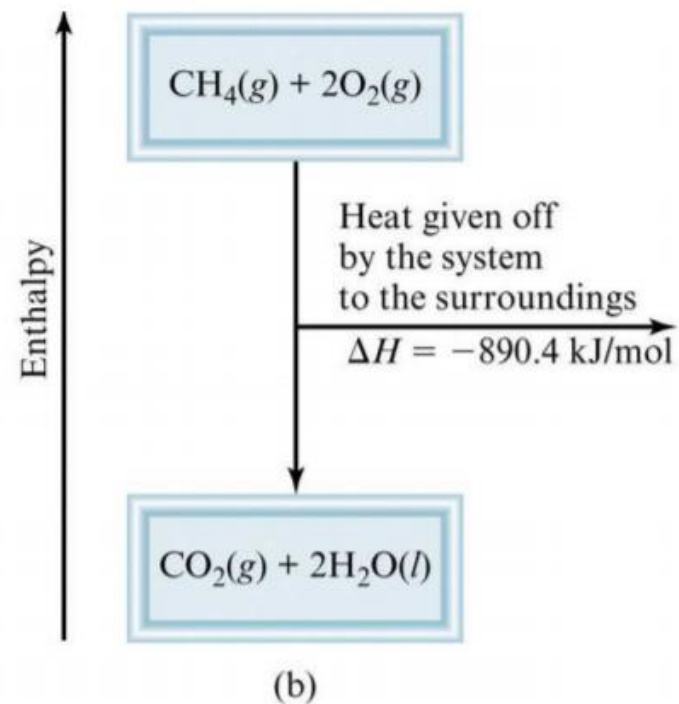
$\Delta H > 0$ reacción endotérmica, $q_r > 0$



Diagramas de Entalpía

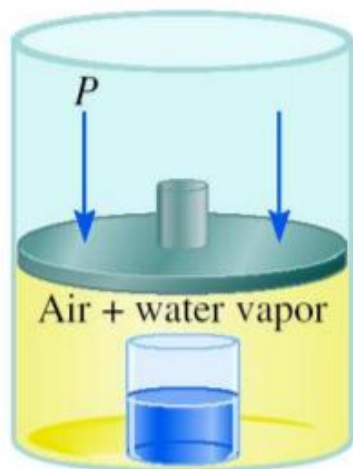
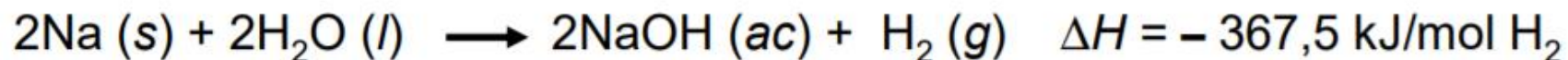


$$\Delta H > 0$$



$$\Delta H < 0$$

Ejemplo 1. Comparación entre ΔU y ΔH



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

$$P\Delta V = (n_f - n_i) \cdot R \cdot T$$

$$P\Delta V = (1-0) \cdot 0,082 \cdot 298$$

$$P\Delta V = 24,5 \text{ L} \cdot \text{atm} = 2,5 \text{ kJ}$$

$$\Delta U = -367,5 \text{ kJ} - 2,5 \text{ kJ}$$

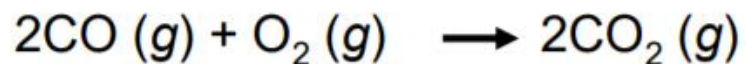
$$\Delta U = -370,0 \text{ kJ/mol}$$



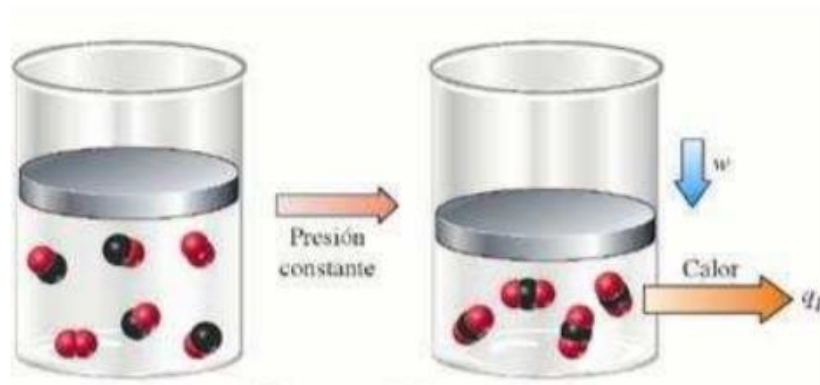
Parte de la energía interna liberada se usa para realizar el trabajo de expansión de los productos gaseosos.

Si no hay productos gaseosos en la reacción $\Delta V \approx 0$ $\Delta U = \Delta H$

Ejemplo 2. Comparación entre ΔU y ΔH



$$\Delta H = - 566,0 \text{ kJ/mol}$$



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

$$P\Delta V = (n_f - n_i) \cdot R \cdot T$$

$$P\Delta V = (2 - 3) \cdot 0,082 \cdot 298$$

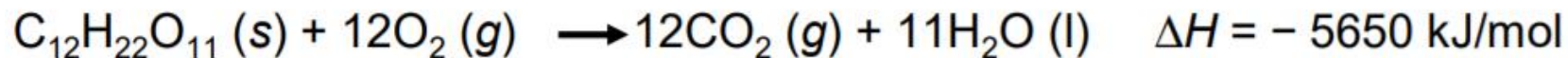
$$P\Delta V = - 24,5 \text{ L} \cdot \text{atm} = - 2,5 \text{ kJ}$$

$$\Delta U = - 566,0 \text{ kJ} - (- 2,5 \text{ kJ})$$

$$\Delta U = - 563,5 \text{ kJ}$$

Además de la entalpía liberada, el sistema recibe el trabajo de compresión del entorno, debido a la disminución del número de moles en la reacción.

Ejemplo 3. Comparación entre ΔU y ΔH



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

$$P\Delta V = (n_f - n_i) \cdot R \cdot T$$

$$P\Delta V = (12 - 12) \cdot 0,082 \cdot 298$$

$$P\Delta V = 0 \text{ L} \cdot \text{atm} = - 0 \text{ kJ}$$

$$\Delta U = - 5650 \text{ kJ} - 0 \text{ kJ}$$

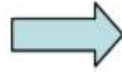
$$\Delta U = - 5650 \text{ kJ} = \Delta H$$

Cuando no hay variación de volumen, $\Delta n=0$, el calor de reacción a V cte (ΔU) es igual al calor de reacción a p cte, (ΔH).

Lo mismo ocurre cuando no hay productos gaseosos en la reacción.

Recapitulando:

La entalpía es una función de estado



La ΔH de una reacción depende del estado inicial de los reactivos y del estado final de los productos.

Es necesario determinar unas condiciones estándares para los reactivos y productos.

Condiciones Estándar



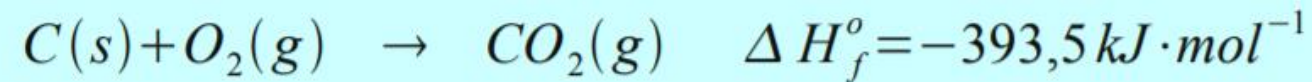
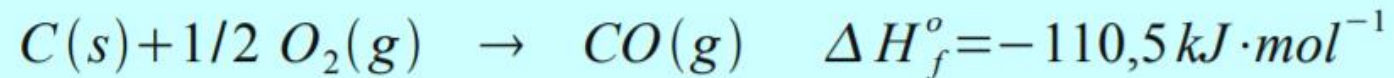
25 °C y 1 atmósfera de presión

Entalpía estándar de formación (ΔH_f°): Es el calor que acompaña a la formación de 1 mol de un compuesto a partir de sus elementos en su estado más estable a 1 atm y a 25 °C.

ΔH_f° de cualquier elemento en su forma más estable (alotrópica) es 0

Entalpía de formación de una sustancia

- se define como la entalpía de la reacción en que se forma un mol de dicha sustancia a partir de sus elementos.



Substance	$\Delta H_f^\circ(\text{kJ/mol})$	Substance	$\Delta H_f^\circ(\text{kJ/mol})$
Ag(s)	0	H ₂ O ₂ (l)	-187.6
AgCl(s)	-127.0	Hg(l)	0
Al(s)	0	I ₂ (s)	0
Al ₂ O ₃ (s)	-1669.8	HI(g)	25.9
Br ₂ (l)	0	Mg(s)	0
HBr(g)	-36.2	MgO(s)	-601.8
C(graphite)	0	MgCO ₃ (s)	-1112.9
C(diamond)	1.90	N ₂ (g)	0
CO(g)	-110.5	NH ₃ (g)	-46.3
CO ₂ (g)	-393.5	NO(g)	90.4
Ca(s)	0	NO ₂ (g)	33.85
CaO(s)	-635.6	N ₂ O(g)	81.56
CaCO ₃ (s)	-1206.9	N ₂ O ₄ (g)	9.66
Cl ₂ (g)	0	O(g)	249.4
HCl(g)	-92.3	O ₂ (g)	0
Cu(s)	0	O ₃ (g)	142.2
CuO(s)	-155.2	S(rhombic)	0
F ₂ (g)	0	S(monoclinic)	0.30
HF(g)	-271.6	SO ₂ (g)	-296.1
H(g)	218.2	SO ₃ (g)	-395.2
H ₂ (g)	0	H ₂ S(g)	-20.15
H ₂ O(g)	-241.8	Zn(s)	0
H ₂ O(l)	-285.8	ZnO(s)	-348.0

25°C
1 atm

Concepto de repaso: Calores de reacción a presión constante (ΔH) y a volumen constante (ΔU)

1. Para la siguiente reacción: $\text{C}_4\text{H}_{10} (\text{g}) + \frac{13}{2} \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow 4 \text{CO}_2 (\text{g}) + 5 \text{H}_2\text{O} (\text{l})$ $\Delta H = -2875,8 \text{ kJ}$

Calcula la cantidad de energía desprendida a 25°C al emplearse 50 g de O_2 en esa reacción:

a) Cuando el proceso se realiza a presión constante.

b) Cuando el proceso se realiza a volumen constante.

Datos: $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$; Masas atómicas: $\text{O} = 16$

- a) La energía desprendida a **presión constante**, hace referencia al concepto de **entalpía** (ΔH). Sabemos que la reacción desprende 2875 kJ a presión constante para $13/2 \text{ mol}$ de O_2 , así que debemos calcular la energía desprendida para 50 g de O_2 :

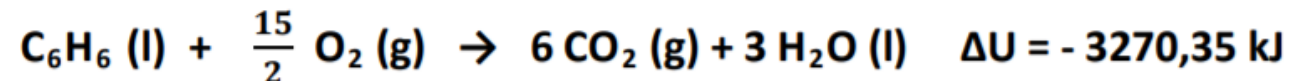
$$50 \text{ g O}_2 \cdot \frac{1 \text{ mol O}_2}{32 \text{ g O}_2} \cdot \boxed{\frac{-2875,8 \text{ kJ}}{\frac{13}{2} \text{ mol O}_2}} = -691,3 \text{ kJ}$$

- b) La energía desprendida a volumen constante, hace referencia al concepto de energía interna (ΔU). Aplicamos la fórmula que relaciona ambos calores (ΔU y ΔH):

$$\Delta H = \Delta U + \Delta n \cdot R \cdot T \rightarrow \Delta U = \Delta H - \Delta n \cdot R \cdot T$$

$$\Delta U = -691,3 \text{ kJ} - (-3,5 \text{ mol} \cdot 0,00831 \text{ kJ} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 298 \text{ K}) = -682,63 \text{ kJ}$$

2. Calcula los gramos de oxígeno necesarios para desprender 1000 kJ a presión constante y a 25° C, teniendo en cuenta la siguiente reacción y su energía interna (ΔU) correspondiente:



Datos: $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$; Masas atómicas: $\text{O} = 16$

Aplicamos la fórmula que relaciona ambos calores (ΔH y ΔU): $\Delta H = \Delta U + \Delta n \cdot R \cdot T$

$$\Delta H = -3270,35 \text{ kJ} + (-1,5 \text{ mol} \cdot 0,00831 \text{ kJ} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 298 \text{ K}) = -3274,06 \text{ kJ}$$

Sabemos que la reacción desprende 3274,06 kJ a presión constante para 15/2 mol de O_2 , así que debemos calcular los gramos de O_2 para desprender 1000 kJ:

$$-1000 \text{ kJ} \cdot \boxed{\frac{\frac{15}{2} \text{ mol } \text{O}_2}{-3274,06 \text{ KJ}}} \cdot \frac{32 \text{ g } \text{O}_2}{1 \text{ mol } \text{O}_2} = 73,30 \text{ g } \text{O}_2$$

La Ley de Hess y los calores de reacción

La Entalpía Estándar de reacción (ΔH_r°) es la entalpía de una reacción que se efectúa a 1 atm y 25°C.



$$\Delta H_r^\circ = [c\Delta H_f^\circ (C) + d\Delta H_f^\circ (D)] - [a\Delta H_f^\circ (A) + b\Delta H_f^\circ (B)]$$

$$\Delta H_r^\circ = \sum n\Delta H_f^\circ (\text{productos}) - \sum m\Delta H_f^\circ (\text{reactivos})$$

¿Cómo calcular la entalpía de una reacción?

Concepto de repaso: Cálculo de la entalpía de una reacción a partir de entalpías de formación (I)

3. Dada la reacción $\text{Fe (s)} + \text{H}_2\text{O (g)} \rightarrow \text{FeO (s)} + \text{H}_2 \text{(g)}$

a) **Calcula la variación de entalpía estándar de la reacción.**

b) **Calcula los gramos de Fe necesarios para desprender 4,508 kJ en la reacción anterior.**

Datos: ΔH_f° (kJ/mol): $\text{H}_2\text{O (g)} = -241,8$; $\text{FeO (s)} = -267$. Masas atómica: Fe = 55,9;



a) $\Delta H = \sum n \cdot \Delta H_f^\circ (\text{productos}) - \sum n \cdot \Delta H_f^\circ (\text{reactivos})$

$$\Delta H = 1\text{mol} \cdot \Delta H_f \text{FeO} - 1\text{mol} \cdot \Delta H_f \text{H}_2\text{O}$$

$$\Delta H = 1\text{mol} \cdot (-267 \text{ kJ/mol}) - 1\text{mol} \cdot (-241,8\text{kJ/mol}) = \mathbf{-25,2 \text{ kJ}}$$

b) Puesto que 1 mol de Fe desprende 25,2 kJ, para desprender 4,508 kJ necesitaremos:

$$-4,508 \text{ kJ} \cdot \boxed{\frac{1 \text{ mol Fe}}{-25,2 \text{ kJ}}} \cdot \frac{55,9 \text{ g Fe}}{1 \text{ mol Fe}} = \mathbf{10 \text{ g Fe}}$$

Concepto de repaso: Cálculo de la entalpía de una reacción a partir de entalpías de formación (II)

4. La tostación de la pirita se produce según: $4 \text{ FeS}_2 (\text{s}) + 11 \text{ O}_2 (\text{g}) \rightarrow 2 \text{ Fe}_2\text{O}_3 (\text{s}) + 8 \text{ SO}_2 (\text{g})$

a) **Calcula la entalpía de reacción estándar.**

b) **Calcula la cantidad de calor, a presión constante, desprendida en la combustión de 25 g de pirita del 90 % de riqueza en peso.**

Datos: ΔH_f° (kJ/mol): $\text{FeS}_2(\text{s}) = -177'5$; $\Delta H_f^\circ \text{ Fe}_2\text{O}_3(\text{s}) = -822'2$; $\Delta H_f^\circ \text{ SO}_2(\text{g}) = -296'8$

Masas atómicas: Fe = 55'8; S = 32.



a) $\Delta H = \sum n \cdot \Delta H_f^\circ (\text{productos}) - \sum n \cdot \Delta H_f^\circ (\text{reactivos})$

$$\Delta H = 2 \text{ mol} \cdot \Delta H_f \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 8 \text{ mol} \cdot \Delta H_f \text{ SO}_2 - 4 \text{ mol} \cdot \Delta H_f \text{ FeS}_2$$

$$\Delta H = 2 \text{ mol} \cdot (-822'2 \text{ kJ/mol}) + 8 \text{ mol} \cdot (-296'8 \text{ kJ/mol}) - 4 \text{ mol} \cdot (-177'5 \text{ kJ/mol}) = \mathbf{-3308,8 \text{ kJ}}$$

b) Puesto que 4 mol de FeS₂ desprenden 3308,8 kJ, 25 g de pirita (90% FeS₂) desprenderán:

$$25 \text{ g pirita} \cdot \frac{90 \text{ g FeS}_2}{100 \text{ g pirita}} \cdot \frac{1 \text{ mol FeS}_2}{119,8 \text{ g FeS}_2} \cdot \boxed{\frac{-3308,8 \text{ kJ}}{4 \text{ mol FeS}_2}} = \mathbf{-155,36 \text{ kJ}}$$

El benceno (C_6H_6) arde en presencia de aire para producir dióxido de carbono y agua en estado líquido.

¿Cuanto calor se libera por mol de benceno quemado?

La entalpía de formación estándar del benceno es 49.04 kJ/mol.



$$\Delta H_{\text{rxn}}^0 = \Sigma n\Delta H_f^0 (\text{productos}) - \Sigma m\Delta H_f^0 (\text{reactivos})$$

$$\Delta H_{\text{rxn}}^0 = [12\Delta H_f^0 (\text{CO}_2) + 6\Delta H_f^0 (\text{H}_2\text{O})] - [2\Delta H_f^0 (\text{C}_6\text{H}_6)]$$

$$\Delta H_{\text{rxn}}^0 = [12 \times -393.5 + 6 \times -187.6] - [2 \times 49.04] = -5946 \text{ kJ}$$

$$\frac{-5946 \text{ kJ}}{2 \text{ mol}} = -2973 \text{ kJ/mol C}_6\text{H}_6$$

Hay 2 métodos posibles para determinar ΔH_f° :

Método Directo

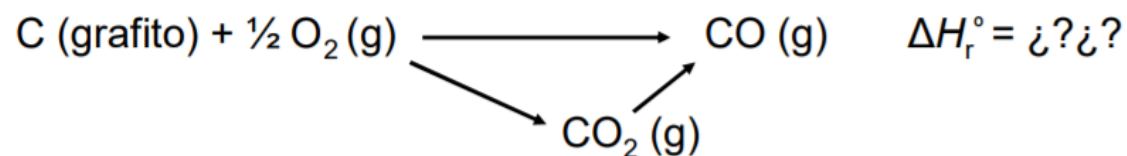


$$\Delta H_r^\circ = \Delta H_f^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) - [\Delta H_f^\circ(\text{C, grafito}) + \Delta H_f^\circ(\text{O}_2, \text{g})]$$

$$\Delta H_r^\circ = -393,5 - (0 + 0)$$

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

Método Indirecto



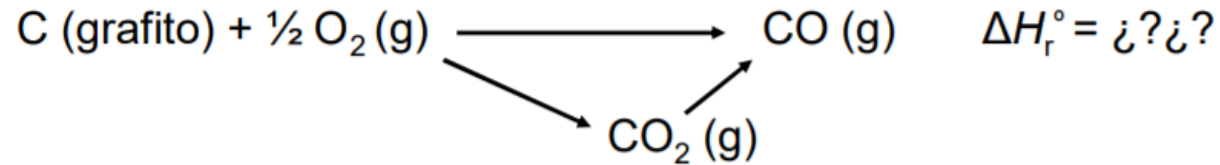
Ley de Hess



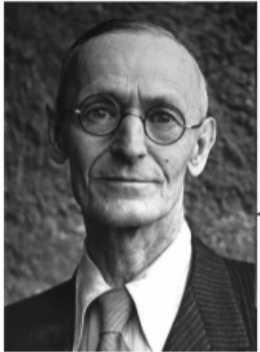
En una reacción química, el ΔH es el mismo independientemente de que se efectúe la reacción en un paso o en una serie de pasos, ya que ΔH al ser una función de estado, sólo depende del **estado final** e **inicial**.

$$\Delta H_r^\circ \text{ desconocida} = \sum \Delta H_r^\circ \text{ conocidas}$$

Método Indirecto



Ley de Hess

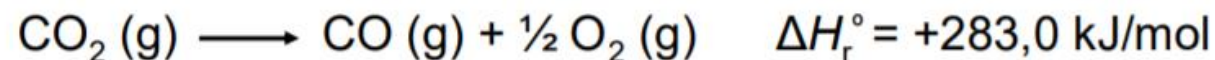
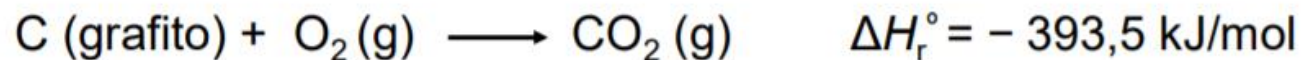
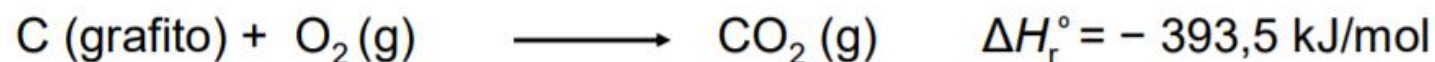
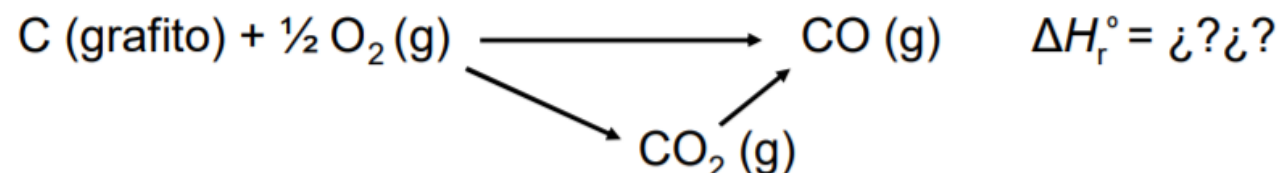


En una reacción química, el ΔH es el mismo independientemente de que se efectúe la reacción en un paso o en una serie de pasos, ya que ΔH al ser una función de estado, sólo depende del **estado final** e **inicial**.

$$\Delta H_r^\circ \text{ desconocida} = \sum \Delta H_r^\circ \text{ conocidas}$$

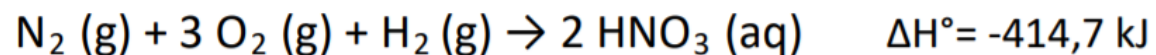
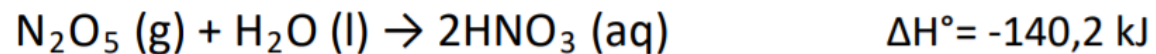
“Cuando una reacción química puede expresarse como suma algebraica de otras, su entalpía de reacción es igual a la suma algebraica de las entalpías de las reacciones parciales”

Método Indirecto



Concepto de repaso: Ley de Hess (I)

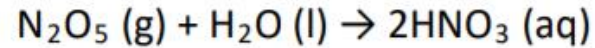
11. a) Determina la entalpía de la reacción en la que se forma 1 mol N_2O_5 (g) a partir de los elementos que lo integran utilizando los siguientes datos:



b) ¿Qué energía se desprende cuando se forman 10 g de HNO_3 a partir de sus elementos?

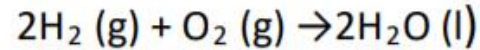
Datos: Masas atómicas: H= 1; N= 14; O=16

a) Realizamos cambios sobre las reacciones que nos ofrece el ejercicio (y sus entalpías) con el objetivo de obtener la reacción que nos piden $\rightarrow \text{N}_2 (\text{g}) + 5/2 \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow \text{N}_2\text{O}_5 (\text{g})$ ¿ ΔH ?



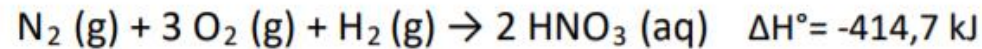
$$\Delta H^\circ = -140,2 \text{ kJ}$$

Multiplicamos $\cdot (-1)$



$$\Delta H^\circ = -571,7 \text{ kJ}$$

Multiplicamos $\cdot (-1/2)$

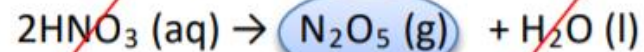


$$\Delta H^\circ = -414,7 \text{ kJ}$$

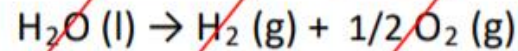
Se mantiene igual



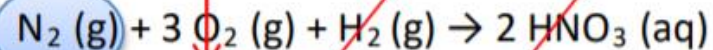
Aplicamos los cambios y sumamos las ecuaciones y sus entalpías



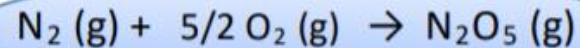
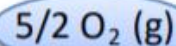
$$\Delta H^\circ = +140,2 \text{ kJ}$$



$$\Delta H^\circ = +285,85 \text{ kJ}$$



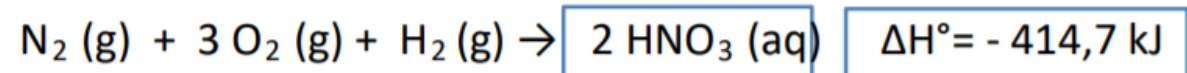
$$\Delta H^\circ = -414,7 \text{ kJ}$$



$$\Delta H^\circ = +11,35 \text{ kJ}$$

La entalpía de formación para 1 mol $\text{N}_2\text{O}_5 (\text{g})$ a partir de sus elementos es + 11,35 kJ/mol

b) El enunciado hace referencia a la reacción de formación del HNO_3 a partir de sus elementos:



$$10 \text{ g HNO}_3 \cdot \frac{1 \text{ mol HNO}_3}{63 \text{ g HNO}_3} \cdot \frac{-414,7 \text{ kJ}}{2 \text{ mol HNO}_3} = -32,91 \text{ kJ}$$

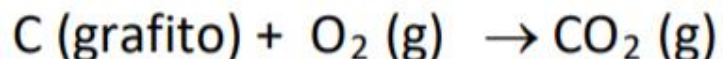
12. Las entalpías estándar de combustión a 25 °C del C (grafito), y del CO gaseoso son respectivamente -393 kJ/mol y -283 kJ/mol .

a) Calcula la entalpía estándar, a 25 °C, de formación del CO gaseoso.

b) Si se hace reaccionar a presión constante 140 g de CO con exceso de O_2 para formar CO_2 gaseoso ¿Qué cantidad de calor se desprenderá en esa reacción?

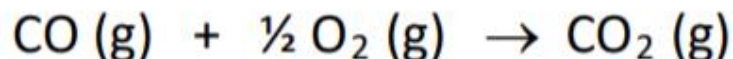
Masas atómicas: C=12; O=16.

a) Desarrollamos las reacciones de combustión para 1 mol de C (grafito) y de CO gaseoso y realizamos los cambios sobre dichas reacciones (y sus entalpías) con el objetivo de obtener la reacción que nos piden $\rightarrow \text{C (grafito)} + \frac{1}{2} \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow \text{CO (g)}$ ¿ ΔH° ?



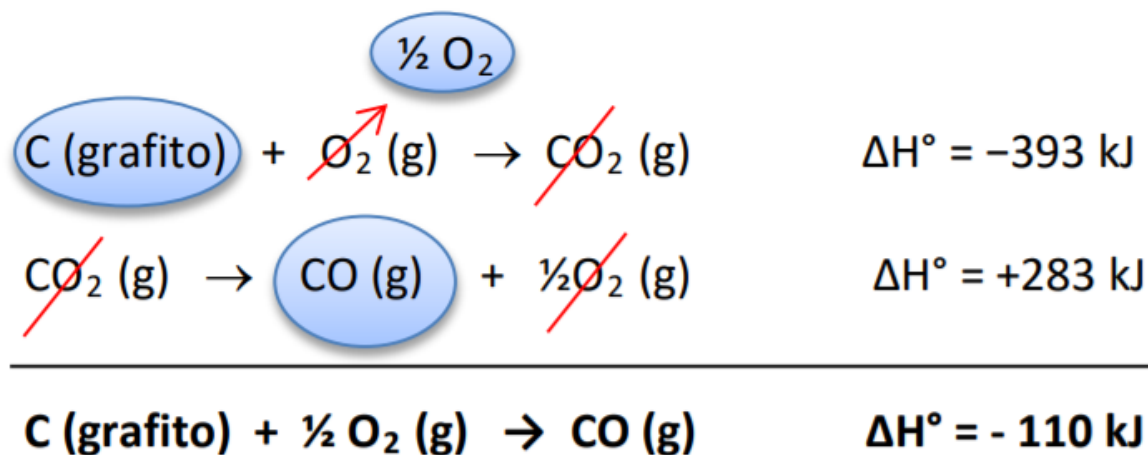
$$\Delta H^\circ = -393 \text{ kJ}$$

Se mantiene igual



$$\Delta H^\circ = -283 \text{ kJ}$$

Multiplicamos $\cdot (-1)$

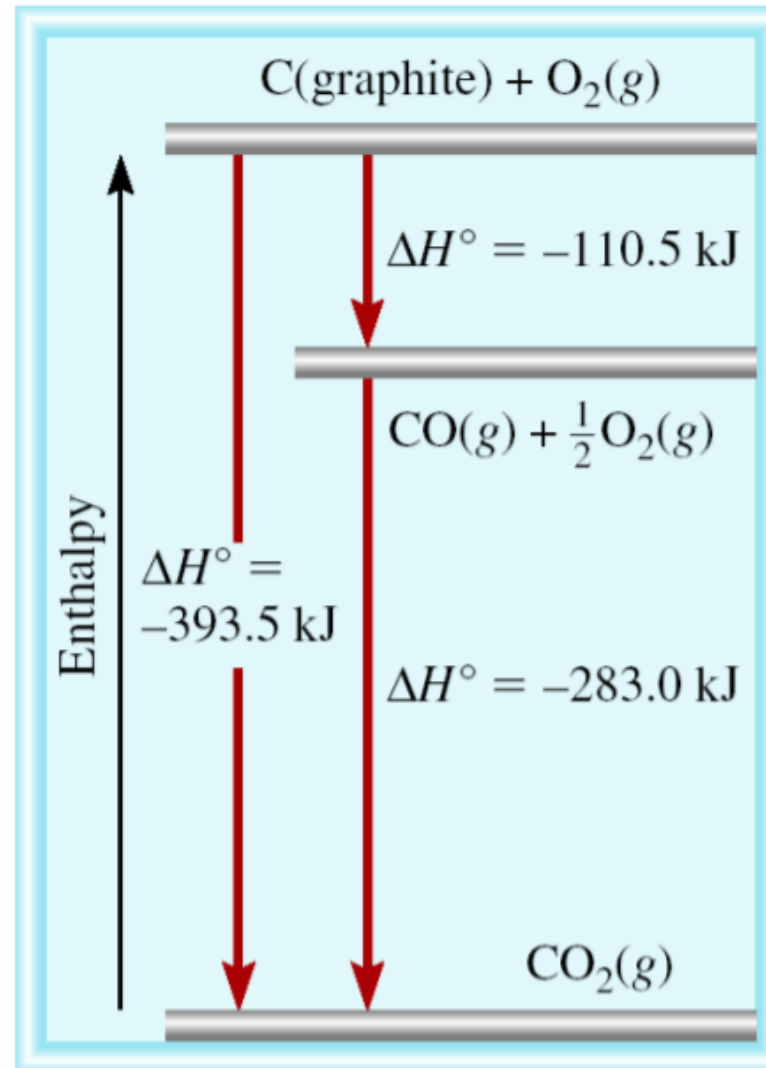


La entalpía de formación para 1 mol de CO (g) a partir de sus elementos es -110 kJ/mol.

b) El enunciado hace referencia a la reacción de combustión del CO:

$$\begin{array}{l}
 \boxed{\text{CO (g)}} + \frac{1}{2}\text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2 (\text{g}) \quad \boxed{\Delta H^\circ = -283 \text{ kJ}} \\
 \\
 140 \text{ g CO} \cdot \frac{1 \text{ mol CO}}{28 \text{ g CO}} \cdot \boxed{\frac{-283 \text{ kJ}}{1 \text{ mol CO}}} = -1.415 \text{ kJ}
 \end{array}$$

**Método
Indirecto**



C (grafito)

CO (g)

CO₂ (g)

Reacciones de Combustión

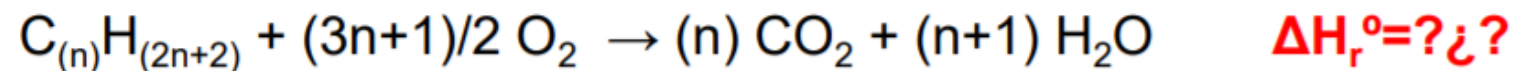
Se pueden trasladar a las Reacciones de Combustión, de gran interés, los conceptos estudiados en Termoquímica.

Interesa: 1) La valoración de un material como fuente de energía.
2) La cantidad de energía liberada por un combustible tras su combustión.

La Combustión es un Proceso Químico por el que un **combustible** se combina rápidamente con un **oxidante/comburente** liberando la **energía** almacenada en forma de energía térmica y luz.



Combustión:



Calor de
Combustión



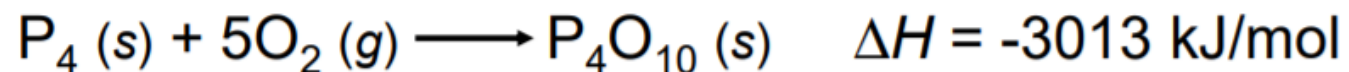
$$\Delta H_r^\circ = \sum \Delta H_f^\circ \text{ productos} - \sum \Delta H_f^\circ \text{ reactivos}$$

$$\Delta H_r^\circ = (n) \Delta H_f^\circ \text{CO}_2 + (n+1) \Delta H_f^\circ \text{H}_2\text{O} - \Delta H_f^\circ \text{C}_{(n)}\text{H}_{(2n+2)} - (3n+1)/2 \Delta H_f^\circ \text{O}_2$$

$$\downarrow$$
$$\Delta H_f^\circ \text{O}_2 = 0$$

$$\Delta H_r^\circ = (n) \Delta H_f^\circ \text{CO}_2 + (n+1) \Delta H_f^\circ \text{H}_2\text{O} - \Delta H_f^\circ \text{C}_{(n)}\text{H}_{(2n+2)}$$

¿Cuanto calor se libera cuando 266 g de fósforo blanco (P_4) se quema en presencia de aire?



$$266 \text{ g } P_4 \times \frac{1 \text{ mol } P_4}{123.9 \text{ g } P_4} \times \frac{3013 \text{ kJ}}{1 \text{ mol } P_4} = 6470 \text{ kJ}$$