

QUÍMICA APLICADA



TERMOQUÍMICA

Qué es?

Es el estudio de los cambios energéticos que tienen lugar durante una reacción química.



TERMOQUÍMICA

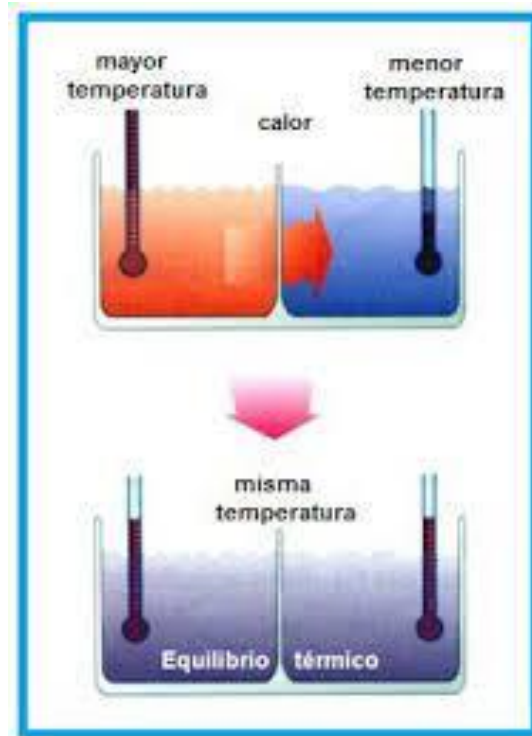
Conceptos en termoquímica

Calor absorbido – Calor desprendido

El **calor** se define como la transferencia de energía entre dos cuerpos a distintas temperaturas.

El que tiene menor temperatura absorbe el calor del que está a mayor temperatura.

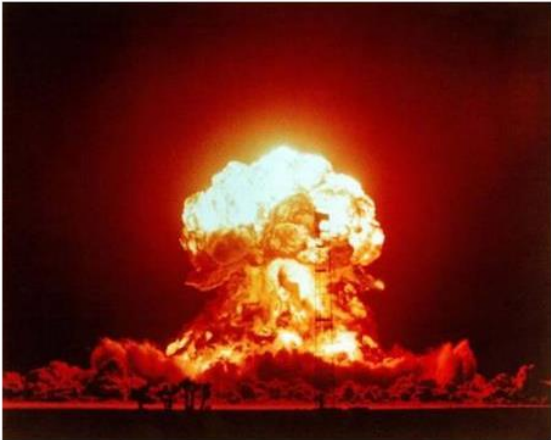
Cuando esto sucede, aumenta la energía térmica de la sustancia que absorbe calor, y las partículas que la componen vibran con más rapidez, elevando su energía cinética.



TERMOQUÍMICA

Reacciones exotérmicas:

Una reacción exotérmica es aquella que cuando ocurre libera energía en forma de calor o luz al ambiente. Cuando este tipo de reacción ocurre, los productos obtenidos tienen menor energía que los reactivos iniciales.



TERMOQUÍMICA

Reacción endotérmica

Las reacciones endotérmicas son reacciones químicas que necesitan el suministro de energía calórica para que ocurran. Para que los reactivos se transformen en productos, estas reacciones absorben calor, lo que hace que los productos obtenidos queden con mayores niveles de energía que los reactivos iniciales.



TERMOQUÍMICA

Hay tres tipos de sistemas en la termodinámica: abierto, cerrado y aislado:

Un sistema abierto puede intercambiar energía y materia con su entorno.

Un sistema cerrado, por el contrario, solo puede intercambiar energía con sus alrededores, no materia.

Un sistema aislado es que no puede intercambiar ni materia ni energía con su entorno.



TERMOQUÍMICA

Entalpía ΔH

Es una propiedad extensiva, es decir, depende de la cantidad de materia.

Es una medida de la energía de un sistema; consiste en la suma de su energía interna.

La entalpía tiene las unidades J mol^{-1} o kJ mol^{-1} .

No podemos medir la entalpía directamente, sí podemos medir el cambio de entalpía.

En una reacción endotérmica (cuando se absorbe energía), su entalpía total aumenta. Se trata de un cambio de entalpía positivo (la temperatura del entorno disminuye).

En una reacción exotérmica (cuando se libera energía), su entalpía total disminuye. Se trata de un cambio de entalpía negativo (la temperatura del entorno aumenta).

TERMOQUÍMICA

Entalpía ΔH

$$\Delta H_r^o = \sum n_p \cdot \Delta H_{f,p}^o - \sum n_R \cdot \Delta H_{f,R}^o$$

n_p = *coeficiente estequiométrico de los productos en la reacción ajustada*

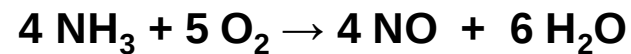
n_R = *coeficiente estequiométrico de los reactivos en la reacción ajustada*

$\Delta H_{f,p}^o$ = *entalpías de formación de los productos*

$\Delta H_{f,R}^o$ = *entalpías de formación de los reactivos*

TERMOQUÍMICA

- Calcule el calor de reacción y el según la siguiente ecuación:



ΔH_f son:

$$\text{NH}_3 = -45,9 \text{ (KJ/mol)} \quad \text{O}_2 = 0 \text{ (KJ/mol)} \quad \text{NO} = 90,3 \text{ (KJ/mol)} \quad \text{H}_2\text{O} = -241,8 \text{ (KJ/mol)}$$

$$\Delta H_R = [(4 \times \Delta H_f \text{ NO} + 6 \times \Delta H_f \text{ H}_2\text{O}) - (4 \times \Delta H_f \text{ NH}_3 + 5 \times \Delta H_f \text{ O}_2)]$$

$$\Delta H_R = [(4 \text{ mol} \times 90,3 \text{ (KJ/mol)} + 6 \text{ mol} \times -241,8 \text{ (KJ/mol)}) - (4 \text{ mol} \times -45,9 \text{ (KJ/mol)} + 5 \text{ mol} \times 0 \text{ (KJ/mol)})]$$

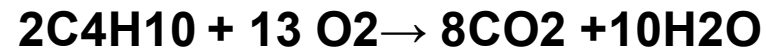
$$\Delta H_R = [(361,2 \text{ (KJ)} + - 1450,8 \text{ (KJ)}) - (- 183,6 \text{ (KJ)} + 0 \text{ (KJ)})]$$

$$\Delta H_R = - 906 \text{ (KJ)} \text{ es exotérmica, libera calor.}$$

TERMOQUÍMICA

- Calcule la variación de entalpía de la reacción de combustión de butano e indique si es una reacción endotérmica o exotérmica, sabiendo que la entalpía de formación estándar de las especies son las siguientes:

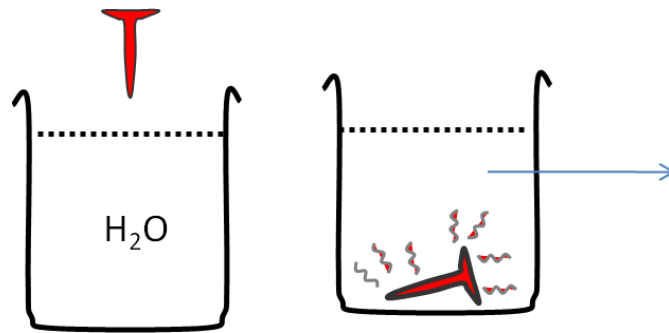
$\Delta H^\circ_f \text{CO}_2(\text{g}) = -393,0 \text{ kJ/mol}$; $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) = -242,0 \text{ kJ/mol}$; $\text{C}_4\text{H}_{10} = -125,0 \text{ kJ/mol}$.



TERMOQUÍMICA

Calorimetría

El estudio de la Calorimetría, comprende la medición de los cambios de calor, producido en los procesos físicos y químicos. El equipo que se emplea en un laboratorio para realizar estas mediciones se llama calorímetro.

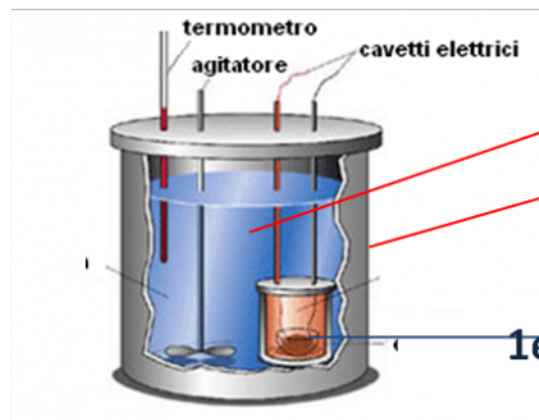


$$-q \text{ liberado} = q \text{ absorbido}$$

TERMOQUÍMICA

El calor de una reacción se mide en un calorímetro, recipiente adiabático en donde se determina el calor absorbido o desprendido durante la reacción. Hay dos clases de calorímetros, cada uno de ellos emplea un proceso diferente y han sido diseñados para situaciones diferentes también.

Calorimetría a Volumen Constante



El calor liberado por la muestra al quemarse **es absorbido por el calorímetro y por el agua**

$$q_{\text{absorbido}} = q_{\text{bomba}} + q_{\text{agua}}$$

La muestra, se quema en el interior de la bomba, **libera calor**. Por lo tanto tendrá signo negativo.

$$-q_{\text{liberado}} = q_{\text{reacción}}$$

Como la bomba calorimétrica es un sistema adiabático el $q=0$
Por lo tanto:

$$q_{\text{liberado}} + q_{\text{absorbido}} = 0$$

Reemplazando tendremos:

$$-q_{\text{liberado}} + (q_{\text{bomba}} + q_{\text{agua}}) = 0$$

TERMOQUÍMICA

$$q_{\text{H}_2\text{O}} = m_{\text{H}_2\text{O}} c_{\text{H}_2\text{O}} \Delta T$$

$m_{\text{H}_2\text{O}}$: masa del agua que rodea la bomba.

$c_{\text{H}_2\text{O}}$: calor específico del agua.

ΔT : variación de la temperatura por efecto de la liberación de calor.

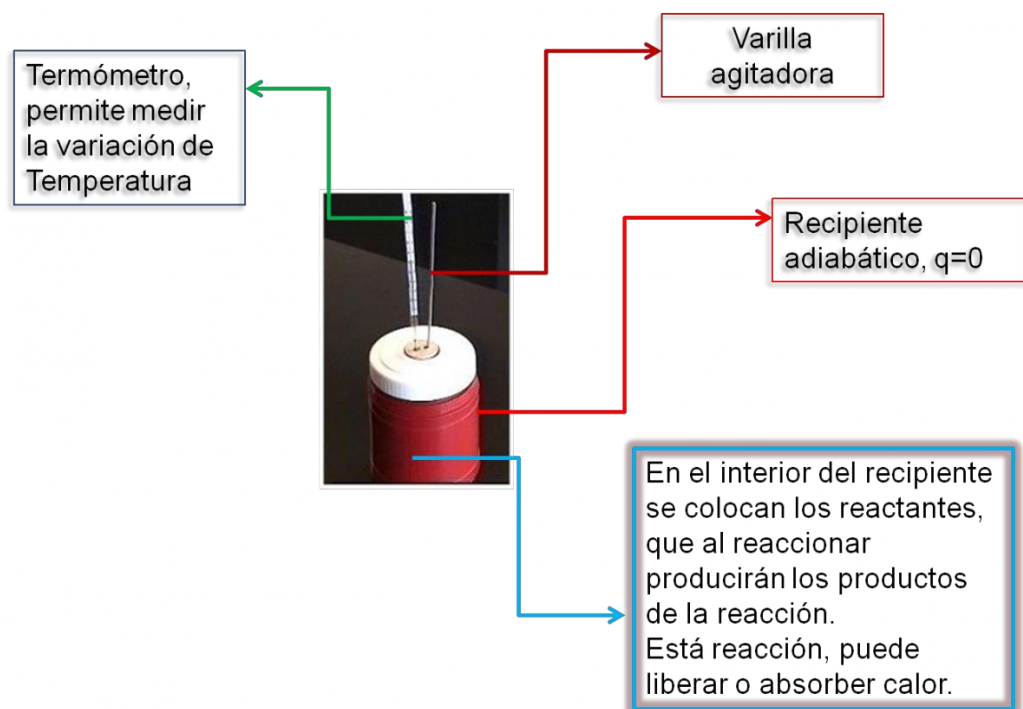
$$q_{\text{bomba}} = C_{\text{bomba}} \Delta T$$

C_{bomba} : calor específico del material de la bomba calorimétrica.

ΔT : variación de la temperatura.

TERMOQUÍMICA

Calorimetría a Presión Constante



El sistema lo constituye la reacción química. El entorno estará constituido por la solución acuosa (que contiene a los reactantes) y el calorímetro mismo.

Si la reacción es exotérmica:

el calor liberado por la reacción será absorbido por el entorno.

la temperatura final será mayor que la temperatura inicial.

Si la reacción es endotérmica:

el calor absorbido por la reacción, será cedido por el entorno.

la temperatura final será menor que la temperatura inicial.

Cuando determinamos el calor de reacción en un calorímetro a presión constante, medimos directamente la variación de la entalpía

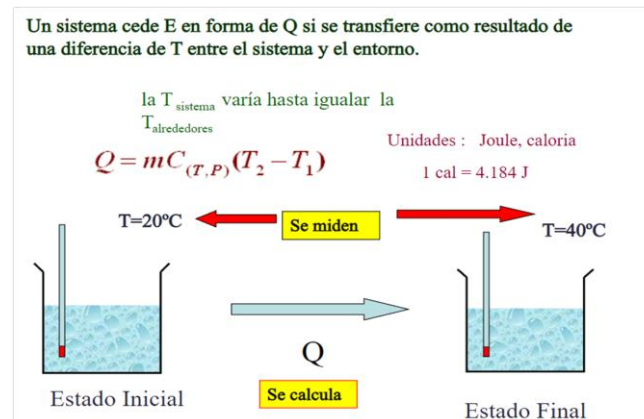
TERMOQUÍMICA

Calorimetría

La **calorimetría** se encarga de medir el calor en una reacción química o un cambio físico.

Calor específico (s) de una sustancia: es la cantidad de calor que se requiere para elevar un grado Celcius la temperatura de un gramo de sustancia.

Capacidad calorífica (C) de una sustancia es la cantidad de calor que se requiere para elevar un grado Celcius la temperatura de una determinada cantidad de sustancia.



$$q = \text{masa} \times s \times \Delta t$$

$$q = C \times \Delta t$$

TERMOQUÍMICA

Caloría

Es la cantidad de energía necesaria para elevar la temperatura de 1 kilogramo de agua en 1 grado Celsius de 15° a 16° a una atmósfera de presión.

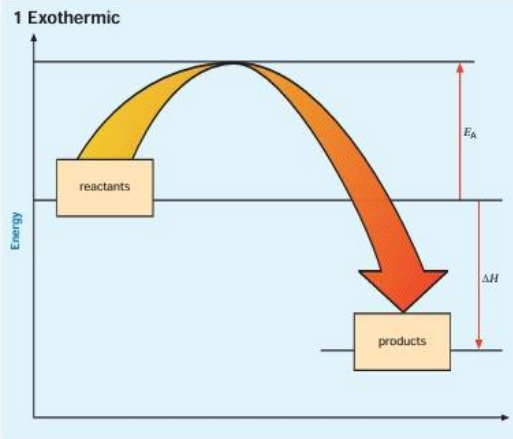
Una kilocaloría es igual a 1000 calorías.

$$q = \textit{masa} \times s \times \Delta t$$

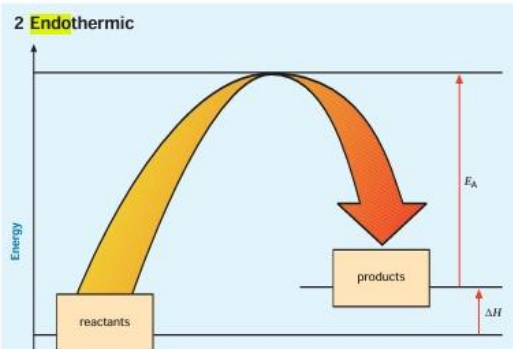
$$q = C \times \Delta t$$

TERMOQUÍMICA

Exothermic and endothermic reactions



E_A = activation energy ΔH = heat of reaction



CHEMICAL REACTIONS

Key words

endothermic
enthalpy
exothermic
product
reactant

1 Exothermic

- In an exothermic reaction, energy is given out, and the temperature of the reaction mixture increases as the reaction proceeds. The products are at a lower energy than the reactants.
- The energy released is due to a decrease in the enthalpy, ΔH , of the system. Enthalpy is a measure of the stored heat energy of a substance. Therefore, ΔH is negative for an exothermic reaction.
- The following equation represents the combustion of methane in a good supply of air:
$$\text{CH}_4(\text{g}) + 2\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{g})$$
$$\Delta H = -890 \text{ kJ mol}^{-1}$$
This is an exothermic reaction. 890 kJ of energy are released per mole of methane combusted.

2 Endothermic

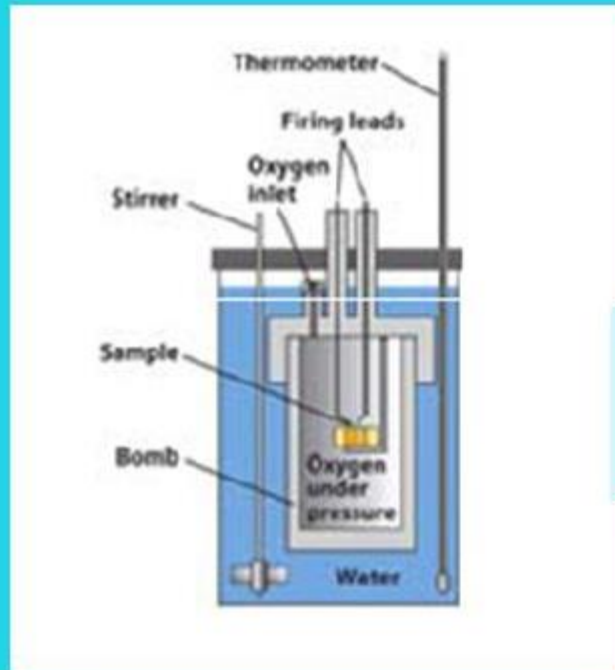
- In an endothermic reaction, energy is taken in, and the temperature of the reaction mixture decreases as the reaction proceeds. The products are at a higher energy than the reactants.
- The energy taken in is due to an increase in the enthalpy, ΔH , of the system. Therefore, ΔH is positive for an endothermic reaction.
- The following equation represents the steam reforming of methane:
$$\text{CH}_4(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \rightarrow 3\text{H}_2(\text{g}) + \text{CO}(\text{g})$$
$$\Delta H = +206 \text{ kJ mol}^{-1}$$
This reaction is an endothermic reaction. 206 kJ of energy are taken in per mole of methane reformed.

Information Ltd.

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

TERMOQUIMICA

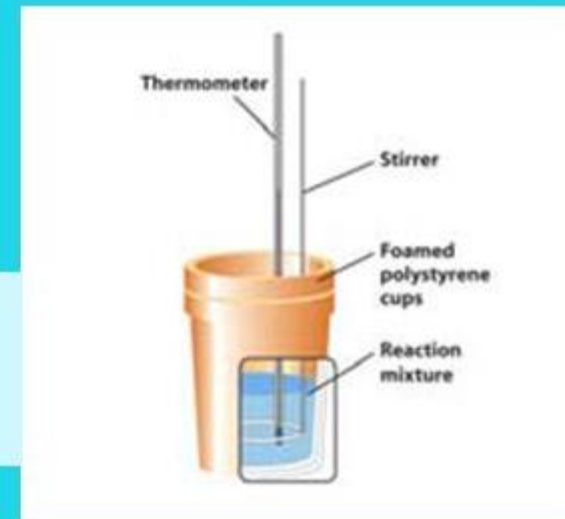
Calorimetría a Volumen Constante.



Usado para encontrar Δu_{com} .

- No se intercambia materia.
- No se intercambia calor.

Calorimetría a Presión Constante



Usado para encontrar ΔH .

- No se intercambia calor.

Analizar con esta ecuación:
$$\Delta U = Q - W$$

TERMOQUIMICA

Calorimetría a presión constante

En el caso de reacciones que ocurren en SOLUCIÓN puede medirse la ENTALPÍA considerando que el calor se libera o absorbe a PRESIÓN CONSTANTE.

Es decir $\Delta H : q_p$

Un calorímetro de vasos de café es un dispositivo donde se mide el calor transferido en una reacción a P constante (P atmosférica).

Considerando que el calorímetro impide la ganancia o pérdida de calor, se considera que EL CALOR DE LA SOLUCIÓN debe producirse a partir del calor de la REACCIÓN.

$$\begin{aligned} -q_R &= +q_{SLN} & -q_R &= \text{calor emitido por la reacción} \\ & & +q_{SLN} &= \text{calor absorbido por la solución} \end{aligned}$$

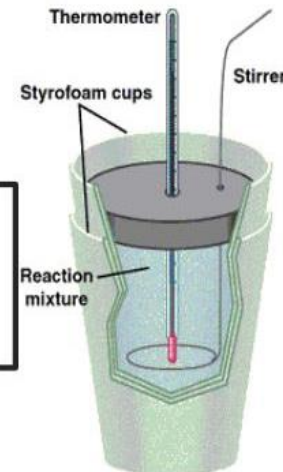
$$q_{SLN} = C_{SLN} m_{SLN} \Delta T$$

$$q_R = -C_{SLN} m_{SLN} \Delta T$$

C_s = calor específico de la solución

m_s = masa de la solución

ΔT = diferencial de temperatura



TERMOQUÍMICA

— Calor específico del agua: $4.184 \frac{\text{J}}{\text{g} \times ^\circ\text{C}}$

Calor específico (en cal/g °C) se refiere al calor que hay que entregarle a un gramo de sustancia para que aumente su temperatura en 1°C mientras.

Calor latente (en cal/g) es el calor que hay que entregarle o quitarle a un gramo de sustancia para que cambie de estado, porque la temperatura es constante en dicha transformación.

TERMOQUÍMICA

¿Cuál es la temperatura a que llega una masa de hierro de 0,18 kg que está a 15 °C y absorbe 1,8 kcal?

Dato: C_e hierro = 0,113 cal/g °C

$$Q = c_e \times m \times \Delta T$$

$$1800 \text{ cal} = 0,113 \text{ cal/g } ^\circ\text{C} \times 180 \text{ g} \times (T_f - 15 ^\circ\text{C})$$

$$1800 \text{ cal} = 20,34 \text{ cal/}^\circ\text{C} \times T_f - 305,1 \text{ cal}$$

$$(1800 \text{ cal} + 305,1 \text{ cal}) / 20,34 \text{ cal/}^\circ\text{C} = T_f$$

$$T_f = 103,49 ^\circ\text{C}$$