

# Termoquímica

# Objetivos de la clase

Conocer aspectos generales de la termoquímica

Realizar ejercicios de cálculo de entalpías de reacción

Conocer la ley de Hess y aplicarla a diversos casos experimentales.

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## ¿Qué es la termoquímica?

La termoquímica es el estudio de los cambios de energía térmica (calor) en las reacciones químicas.



Las reacciones químicas responden a dos leyes fundamentales:  
La ley de Conservación de la Masa y la Ley de Conservación de la Energía.

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

¿Cómo podemos reconocer los cambios energéticos en una reacción química?

Se realiza mediante la entalpía (H), la cual es una **propiedad extensiva**, es decir, **depende de la cantidad de materia**. Es imposible determinar la entalpía de una sustancia, por ello se mide la variación de entalpía ( $\Delta H$ ).

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

$n_P$  = *coeficiente estequiométrico de los productos en la reacción ajustada*

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

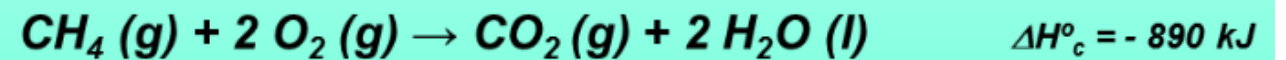
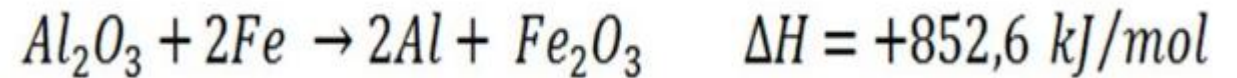
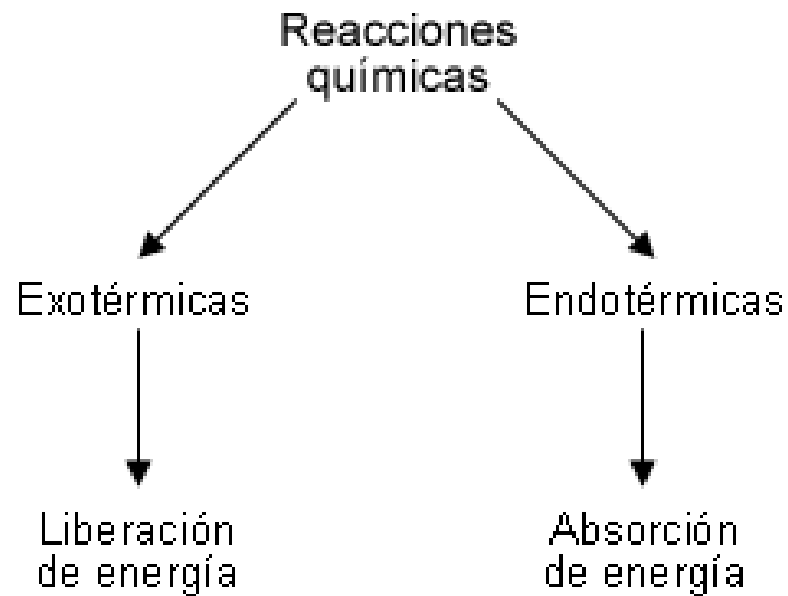
$\Delta H_{f,P}^o$  = *entalpías de formación de los productos*

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

En otras palabras, la  $\Delta H$  representa la energía absorbida o liberada producto de una reacción química.

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

¿Cómo podemos reconocer los cambios energéticos en una reacción química?



# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Algunos ejemplos

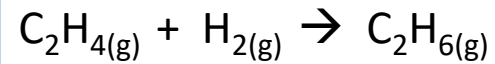
Calcule la variación de entalpía de la reacción de combustión de butano e indique si es una reacción endotérmica o exotérmica, sabiendo que la entalpía de formación estándar de las especies son las siguientes:  $\Delta H^\circ_f \text{CO}_{2(g)} = -393,0 \text{ kJ/mol}$ ;  $\text{H}_2\text{O}_{(l)} = -242,0 \text{ kJ/mol}$ ;  $\text{C}_4\text{H}_{10} = -125,0 \text{ kJ/mol}$ .



# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Algunos ejemplos

Para la reacción de hidrogenación del eteno:



Calcule la variación de entalpía de la reacción a partir de los siguientes datos:  $\Delta H^\circ_f \text{C}_2\text{H}_4 = -1389,09$  kJ/mol;  $\Delta H^\circ_f \text{C}_2\text{H}_6 = -1539,9$  kJ/mol.

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Algunos ejemplos

El etanol se combustiona en los motores de automóviles según la siguiente reacción:



Calcule el  $\Delta H^\circ$  de la reacción a partir de los siguientes datos de  $\Delta H^\circ_f$ .

$$\Delta H^\circ_f \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}_{(l)} = -277,7 \text{ kJ / mol}$$

$$\Delta H^\circ_f \text{O}_{2(g)} = 0 \text{ kJ / mol}$$

$$\Delta H^\circ_f \text{CO}_{2(g)} = -393,5 \text{ kJ / mol}$$

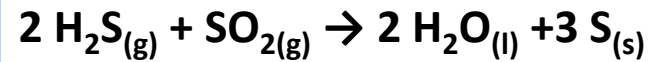
$$\Delta H^\circ_f \text{H}_2\text{O}_{(l)} = -285,8 \text{ kJ / mol}$$

Considerando que usted hace reaccionar 500 g de etanol, ¿cuántos gramos de dióxido de carbono y mL de agua se producen? (Masa atómica: C = 12 g/mol, H = 1 g/mol, O = 16 g/mol).

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Algunos ejemplos

Calcule la variación de la entalpía de reacción del siguiente proceso:

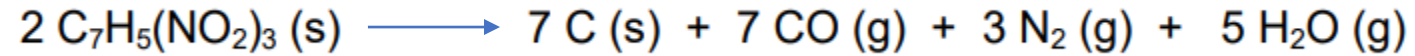


Sabiendo que las entalpías de formación del  $\text{SO}_{2(\text{g})}$ ,  $\text{H}_2\text{S}_{(\text{g})}$  y del  $\text{H}_2\text{O}_{(\text{l})}$  son: -70920, -133940 y -94052 cal/mol, respectivamente.

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## ¿Qué ocurre con los explosivos?

El trinitrotolueno (TNT) es uno de los explosivos mas empleados a nivel militar e industrial, su reacción de descomposición se detalla a continuación:



Calcule la entalpía de la reacción, sabiendo que:  $\Delta H^\circ_f \text{ TNT} = -364,1 \text{ kJ/mol}$ ;  $\Delta H^\circ_f \text{ CO} = -110,3 \text{ kJ/mol}$ ;  $\Delta H^\circ_f \text{ H}_2\text{O} = -241,6 \text{ kJ/mol}$ .

No obstante, para comparar la potencia de cada explosivo se utiliza la “Potencia Calorífica”, la cual se mide en kJ/kg, kJ/g, etc.

$$\text{Potencia Calorífica} = \frac{\Delta H^\circ_r}{\text{masa}}$$

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Potencia Calorífica

Calcule la potencia calorífica de TNT considerando la utilización de una masa de 1000 y luego de 50000 gramos, expresándolo en kJ/kg.

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Calorimetría

Es la medición de los cambios de calor y depende de la comprensión de los conceptos de **calor específico** y **capacidad calorífica**.

**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**.

$$q = masa \times s \times \Delta t$$

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

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Calorimetría: ejemplo

Una muestra de 466 g de agua se calienta desde 8,5°C hasta 74,6°C. Calcule la cantidad de calor absorbido por el agua, sabiendo que el calor específico del agua es 4,184 J/g x °C.

$$q = masa \times s \times \Delta t$$

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Calorimetría: ejemplo

Una barra de hierro cuya masa es de 869 g se enfría de 94 a 5 °C. Calcule la cantidad de calor liberado o absorbido por el sistema, sabiendo que el calor específico del hierro es 0,444 J/g x °C.

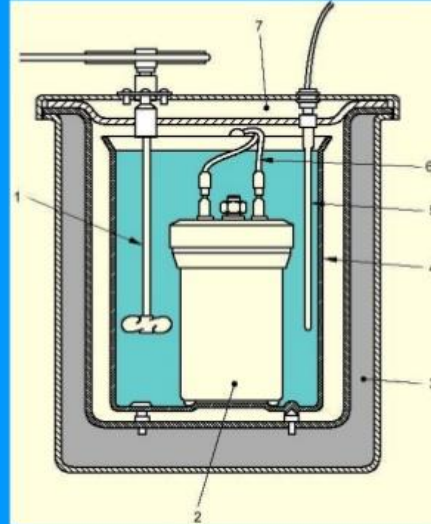
$$q = masa \times s \times \Delta t$$

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Calorimetría a Volumen Constante

El calor de combustión generalmente se mide colocando una masa conocida de un compuesto en un recipiente de acero, llamado bomba calorimétrica a volumen constante.

### Estructura

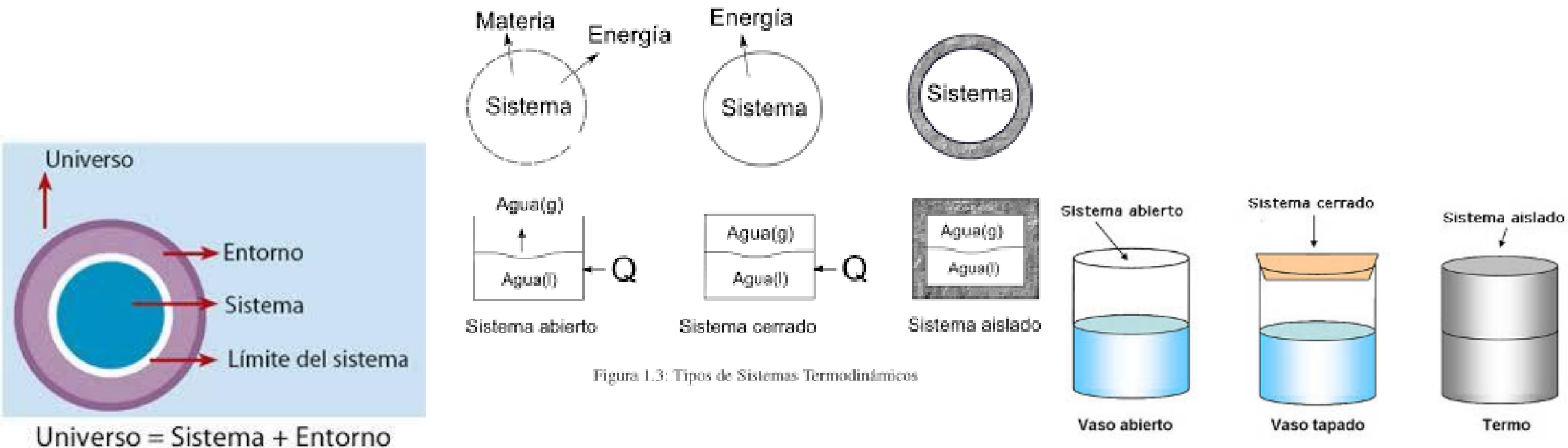


1. Agitador eléctrico
2. Bomba calorimétrica (cámara de reacción)
3. Camisa aislante
4. Recipiente para el agua
5. Sonda de temperatura (termómetro)
6. Cable de ignición
7. Tapa

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Calorimetría a Volumen Constante

La bomba se sumerge en una **cantidad conocida de agua** y la muestra se enciende eléctricamente y el calor producido por la reacción de combustión se calcula registrando la **variación de temperatura**. El calor liberado por la muestra es absorbido por el agua y por el calorímetro. El diseño de la bomba calorimétrica permite suponer que **no hay pérdida de calor o masa hacia los alrededores**, por ello, se dice que la bomba calorimétrica y el agua constituyen un **sistema asilado**.



# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Calorimetría a Volumen Constante

Debido a que no hay variación de calor entre el sistema y el ambiente, entonces se tiene que:

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

$$q_{\text{sistema}} = q_{\text{agua}} + q_{\text{bomba}} + q_{\text{reacción}}$$

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

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

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

$$q_{\text{agua}} = \text{masa}_{\text{agua}} \times s_{\text{agua}} \times \Delta t$$

$$q_{\text{agua}} = \text{masa}_{\text{agua}} \times 4,184 \frac{\text{J}}{\text{g} \times ^\circ\text{C}} \times \Delta t$$

$$C_{\text{bomba}} = m_{\text{bomba}} \times s_{\text{bomba}}$$

Pero, la masa de la bomba y el calor específico son constantes....por lo tanto:

$$q_{\text{bomba}} = C_{\text{bomba}} \times \Delta t$$

# Relaciones de energía en las reacciones químicas

## Calorimetría a Volumen Constante: Ejemplo

Una muestra de 1,435 g de naftaleno ( $C_{10}H_8$ ), una sustancia de olor penetrante que se utiliza en los repelentes contra polillas, se quema en una bomba calorimétrica a volumen constante. Como consecuencia, la temperatura del agua se eleva de 20,17 a 25,84°C. Si la masa de agua que rodea al calorímetro es exactamente 2000 g y la capacidad calorífica (C) de la bomba calorimétrica es 1,8 kJ/°C, calcule el calor de combustión del naftaleno.

$$q_{reacción} = -(q_{agua} + q_{bomba})$$

$$q_{bomba} = C_{bomba} \times \Delta t$$

$$q_{agua} = masa_{agua} \times 4,184 \frac{J}{g \times ^\circ C} \times \Delta t$$

## Ejercicios

El etanol se combustiona en los motores de automóviles según la siguiente reacción:



**Calcule el  $\Delta H^\circ$  de la reacción a partir de los siguientes datos de  $\Delta H^\circ_f$ .**

$\Delta H^\circ_f \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}_{(l)} = -277,7 \text{ kJ / mol}$ ;  $\Delta H^\circ_f \text{O}_{2(g)} = 0 \text{ kJ / mol}$ ;  $\Delta H^\circ_f \text{CO}_{2(g)} = -393,5 \text{ kJ / mol}$ ;  $\Delta H^\circ_f \text{H}_2\text{O}_{(l)} = -285,8 \text{ kJ / mol}$

Considerando que usted hace reaccionar 300 g de etanol, ¿cuántos gramos de dióxido de carbono y mL de agua se producen? (Masa atómica: C = 12 g/mol, H = 1 g/mol, O = 16 g/mol). **¿Cuánta energía (en Joules) liberan 300 g de etanol?**

Todos los metales alcalinos reaccionan con agua para formar hidrógeno gaseoso y el hidróxido del metal alcalino correspondiente. Una reacción común es la que ocurre entre el litio y el agua:



¿cuántos moles de hidrógeno se formarán al completarse la reacción de 6,23 moles de Li? ¿Cuántos gramos de hidrógeno se formarán al completarse la reacción de 80,57 g de Li? ¿Cuántos moles de hidróxido de litio se formarán a partir de 20 mL de agua? (d = 1 g/ml). ¿Cuántos gramos de litio se requieren para formar 4000 moles de hidrógeno?

Una muestra de metanol se quemó en una bomba calorimétrica a volumen constante. Como consecuencia, la temperatura del agua se elevó 4,20 °C. Si la cantidad de agua que rodea al calorímetro es exactamente 2000 g y la capacidad calorífica del calorímetro es 2,02 kJ / °C, calcule el calor molar de combustión del metanol.