

INTRODUCCIÓN A LA TERMOQUÍMICA

AUTOR: GUSTAVO TRIGUEROS FALLAS

MAYO: 2021



San Marcos

Contenido

Introducción.....	2
Concepto de entalpía de reacción estándar:.....	3
condiciones termoquímicas estándar:	3
Ecuaciones termoquímicas	3
Reacciones endotérmicas y reacciones exotérmicas	4
Distintos tipos de entalpías de reacción: entalpías de combustión y entalpías de formación.	5
Diagramas entálpicos	6
Conclusiones y recomendaciones	10
Referencias bibliográficas.....	11



Introducción

En esta lectura entenderemos la termodinámica como el estudio de las relaciones energéticas de todo tipo, la cual es fundamental y se aplica prácticamente en toda la ciencia.

El área de estudio de la termodinámica química son las reacciones de ciertas clases de energías en los sistemas químicos, la termoquímica abarca la medición e interpretación de los cambios caloríficos que acompañan a los procesos químicos. La mayor parte de estas mediciones se hacen con un calorímetro en el cual se determina con precisión el calor liberado o absorbido, en una reacción química la variación de calor en términos de cantidades molares de la reactantes y productos se representa por medio de la ecuación termoquímica de la reacción.

Se considera que cualquier sustancia tiene cierta entalpía o contenido de calor en condiciones específicas el cambio de entalpía es decir Delta H de cualquier reacción es la variación calorífica de

dicha reacción a presión constante, el símbolo Delta H, ΔH^0 indica si la reacción es exotérmica o endotérmica es decir si libera energía o más bien consume energía.

La entalpía es una función de estado su valor para una sustancia dada depende solamente el estado de las sustancias y no da el proceso mediante el cual se llegó a dicho estado, este hecho es la base de la ley de Hess que permite calcular muchos de los cambios de entalpía.

Concepto de entalpía de reacción estándar:

condiciones termoquímicas estándar:

Vamos a profundizar en esta lectura de un concepto fundamental en termoquímica, el concepto de entalpía de reacción, ΔH_r . Definimos la entalpía de una reacción química como el calor absorbido o desprendido en dicha reacción química cuando ésta transcurre a presión constante, es decir:

$$\Delta H = QP$$

ΔH : entalpía de la reacción

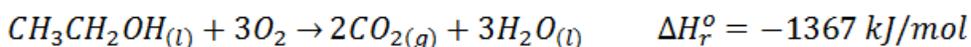
QP : calor transferido a presión constante

El valor de entalpía es distinto según a qué presión y a qué temperatura se lleve a cabo la reacción. Por este motivo se definen unas condiciones estándar. Las condiciones estándar termoquímicas son 25°C (o 298 K) y 1atm de presión ($1,013 \cdot 10^5$ Pa). Cuando la reacción se lleva a cabo en dichas condiciones estándar, su variación de entalpía (ΔH) recibe el nombre de entalpía estándar de reacción o también entalpía normal de reacción, y se representa como ΔH_{or} .

Las unidades de la entalpía estándar de reacción son kJ o kJ/mol, siendo esta última la forma más habitual de hallar los valores de entalpías en las distintas tablas.

Ecuaciones termoquímicas

La forma más habitual de indicar la entalpía estándar de una reacción química es en las llamadas ecuaciones termoquímicas, que consisten en escribir la reacción, correctamente ajustada y con los estados de agregación de todos los compuestos que intervienen, y añadir, a la derecha, el valor de la entalpía estándar. Por ejemplo, a continuación vemos la ecuación termoquímica para la reacción de combustión del etanol y para la reacción de combustión del monóxido de carbono:



El motivo de que en la ecuación termoquímica se deban indicar los estados de agregación de productos y reactivos, es decir, si son gases, líquidos o sólidos, y también la forma alotrópica (por ejemplo, carbono grafito o carbono diamante), es porque de ello también depende el valor de la entalpía de la reacción.

Además, puesto que la entalpía es una variable extensiva, es decir, depende de la cantidad total de materia, si la ecuación termoquímica se ajusta de un modo distinto, cambiará su valor, siempre y cuando el valor venga dado en kJ (y no en kJ/mol). Por ejemplo:



Esta ecuación termoquímica nos indica que cuando 2 moles de monóxido de carbono reaccionan con un mol de O₂, se desprenden 566 kJ de calor, mientras que, tal y como hemos visto previamente en la misma reacción pero ajustada para 1 mol, se desprenden la mitad, 283 kJ de energía calorífica.

Reacciones endotérmicas y reacciones exotérmicas

En las ecuaciones termoquímicas indicadas previamente aparecen los correspondientes valores de entalpía estándar de reacción para diversas reacciones, y todas ellas tienen signo negativo. ¿Qué significa el signo de la entalpía? Según el criterio establecido por la IUPAC, que hemos explicado al hablar de la transferencia de energía en forma de calor, es negativo el calor desprendido por el sistema, y positivo el calor absorbido por el sistema. Así, si la entalpía de reacción es negativa, significa que durante el transcurso de la reacción, el sistema pierde o libera calor hacia el entorno, mientras que si la

entalpía de reacción es positiva significa que durante el transcurso de la reacción, el sistema absorbe calor del entorno. En función del signo de la entalpía, las reacciones se clasifican como endotérmicas y exotérmicas:

- Una reacción exotérmica es aquella cuyo valor de entalpía es negativo, es decir, el sistema desprende o libera calor al entorno ($\Delta H < 0$).
- Una reacción endotérmica es aquella cuyo valor de entalpía es positivo, es decir, el sistema absorbe calor del entorno ($\Delta H > 0$).

Por ejemplo, la reacción que hemos considerado previamente, de oxidación del monóxido de carbono para dar dióxido de carbono, tiene variación de entalpía negativa:



Esto significa que se desprende calor en el transcurso de la misma y es, por tanto, una reacción exotérmica, mientras que si consideramos la misma reacción pero en sentido contrario, el valor absoluto de la entalpía se mantiene, pero el signo cambia, siendo en este caso la entalpía positiva y, por tanto, una reacción endotérmica:



Distintos tipos de entalpías de reacción: entalpías de combustión y entalpías de formación.

Aunque cualquier entalpía es, por definición, una entalpía de reacción (variación de calor a presión constante asociada a una reacción química) es frecuente especificar un poco más y, en lugar de llamarla entalpía de reacción, indicamos el tipo de reacción a que se refiere, por ejemplo, en el caso del CO y el oxígeno, se trata de una reacción de combustión, por lo que a su entalpía de reacción se la puede llamar entalpía de combustión, ΔH_{oc}

Del mismo modo sucede, por ejemplo, con las entalpías de las reacciones de formación



de un compuesto, que reciben el nombre de entalpías de formación, y que veremos con detenimiento en el apartado próximo por su gran utilidad y la frecuencia de su uso.

Diagramas entálpicos

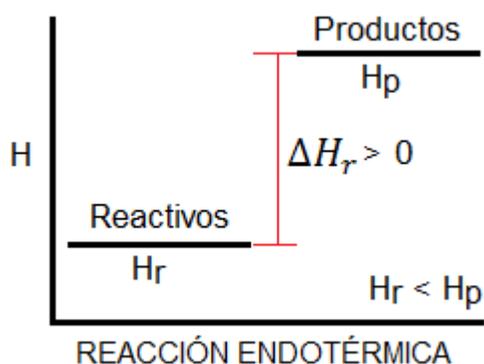
Un diagrama de entalpía es un gráfico que permite mostrar de un modo visual la variación de entalpía de una reacción química. Si nosotros tenemos una reacción:



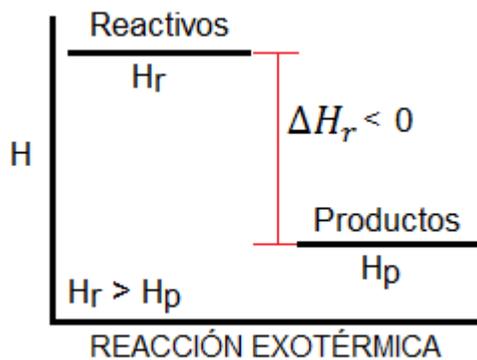
$$\Delta H_r^\circ = H_p^\circ - H_r^\circ$$

Como el valor absoluto de entalpía no se conoce, el origen de la escala de entalpías es arbitrario. Por ello, lo que se hace es representar reactivos y productos, siendo la diferencia entre ellos el valor de entalpía de la reacción.

Si la reacción es endotérmica, es decir, absorbe calor, el diagrama de entalpía tendrá la forma siguiente:

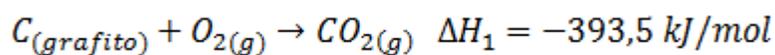


Si la reacción es exotérmica, es decir, desprende calor, el diagrama de entalpía tendrá la forma siguiente:

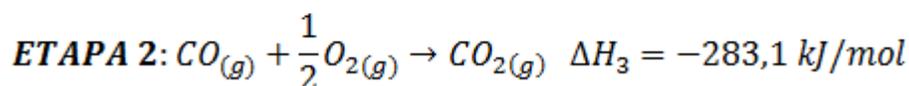
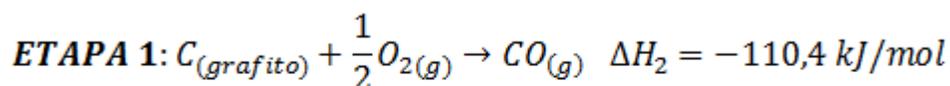


En esta lectura vamos a calcular la entalpía de una reacción química, mediante la aplicación directa de la **Ley de Hess**, ley anunciada en 1840 por el químico suizo German Henry Hess. Esta Ley también puede llamarse **Ley de aditividad de las entalpías de reacción**. Se trata de un método útil cuando no es posible calcular las entalpías de reacción a partir de las entalpías de formación, o en reacciones en las que la entalpía de reacción no se puede determinar experimentalmente por ser ésta muy lenta o muy explosiva.

Para llegar al fundamento de la **Ley de Hess**, vamos a considerar un ejemplo antes de enunciarla. Se trata de la reacción de formación de $\text{CO}_2(\text{g})$:



Esta reacción se puede producir tal y como la hemos escrito, en una sola etapa, o también puede darse en dos etapas. En una primera etapa se formaría monóxido de carbono, CO , y después, una vez formado el monóxido de carbono, éste vuelve a reaccionar con oxígeno para dar CO_2 . Las etapas son:

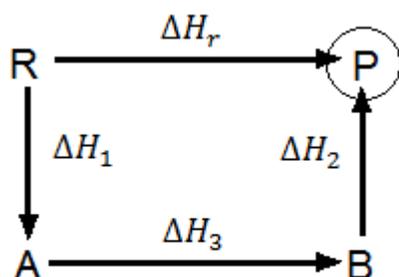


La energía total desprendida en la formación de 1 mol de CO₂ es la misma tanto si se da en una etapa como en dos, ya que para determinar la energía total desprendida cuando se da en dos etapas basta sumar las variaciones de entalpía de las etapas en las que transcurre.

$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3$$

$$-393,5 = -110,4 + (-283,1)$$

Esta es la base de la **Ley de Hess**, que la variación de entalpía asociada a una reacción química efectuada a presión constante, es la misma si se verifica directamente en una sola etapa o en varias. De forma general:



$$\Delta H_r = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$$

Otra forma de enunciar la **Ley de Hess** es:

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

La **Ley de Hess** permite tratar las ecuaciones termoquímicas como ecuaciones algebraicas, y pueden sumarse, restarse o multiplicarse por un número, igual que las entalpías de reacción, para hallar la ecuación termoquímica deseada.

En el vídeo veremos, asimismo, un ejemplo sencillo de aplicación de la **Ley de Hess** para el cálculo de la entalpía de una reacción química.

Para ampliar más en estos detalles, se presenta la lectura del libro González Muradás, R. M. y Montagut Bosque, P. (2015). Química. Grupo Editorial Patria, páginas 99 a la 124.

Conclusiones y recomendaciones

Comprender las reacciones termoquímicas, es decir los cambios de energía entre los reactantes y los productos, se hace indispensable para saber si una reacción libera calor o más bien requiere calor, es decir si es endotérmica o exotérmica.

Los balances de energía en un mundo cada vez tecnológico permite utilizar diferentes fuentes de energía, lo cual nos hace cada vez más autónomos, por lo anterior y para el ingeniero es indispensable conocer los aspectos fundamentales de la termoquímica.

Referencias bibliográficas

Ramírez Regalado, V. M. (2016). Química 1. Grupo Editorial Patria.
<http://elibro.net.uh.remotexs.xyz/es/lc/bibliouh/titulos/40435>

González Muradás, R. M. y Montagut Bosque, P. (2015). Química. Grupo Editorial Patria.
<http://elibro.net.uh.remotexs.xyz/es/lc/bibliouh/titulos/39463>





www.usanmarcos.ac.cr

San José, Costa Rica