

Química Unidad 3

¿Qué transformaciones químicas producen energía en la vida cotidiana?: Cambio y energía en la Química

Prof. Daniel Muñoz
daniel.munoz3@mail_udp

15 de mayo de 2025

Introducción

- La termoquímica es la rama de la química que estudia los cambios de energía, especialmente en forma de calor, que acompañan a los cambios en la materia.

The diagram illustrates the mathematical relationship between four common potentials in thermodynamics:

$$H = U + pV - TS$$

The terms are defined as follows:

U	F
Internal Energy	Helmholtz free energy
H	G
Enthalpy	Gibbs free energy

A vertical arrow points downwards from the left side of the equation towards the H and pV terms, indicating their sum. A horizontal arrow points to the right above the table, indicating the sum of U and $-TS$.

Figura: Cuatro potenciales comunes: $H = U + PV$

Introducción

- La termoquímica es la rama de la química que estudia los cambios de energía, especialmente en forma de calor, que acompañan a los cambios en la materia.
- Este desarrollo está imbuido de un fuerte sistema matemático interpretativo el cual, revisaremos de forma extremadamente superficial.

U	F
Internal Energy	Helmholtz free energy
H	G
Enthalpy	Gibbs free energy

Figura: Cuatro potenciales comunes: $H = U + PV$

Historia: Los inicios de una rama

- Ingeniero francés, considerado el padre de la termodinámica.

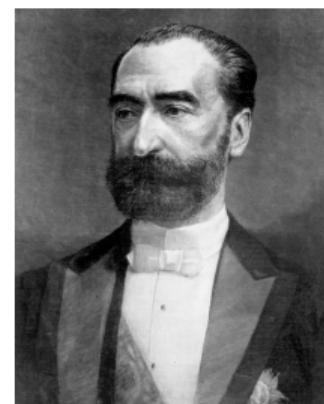


Figura: Sadi Carnot (1796 - 1832)

Historia: Los inicios de una rama

- Ingeniero francés, considerado el padre de la termodinámica.
- En 1824 publicó “Reflexiones sobre la potencia motriz del fuego”.

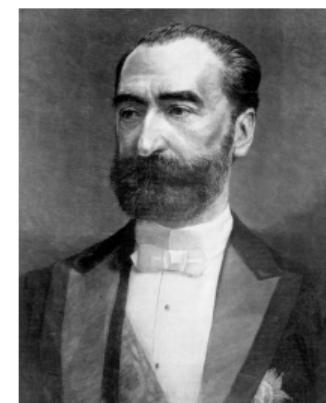


Figura: Sadi Carnot (1796 - 1832)

Historia: Los inicios de una rama

- Ingeniero francés, considerado el padre de la termodinámica.
- En 1824 publicó “Reflexiones sobre la potencia motriz del fuego”.
- Introdujo el concepto, conocido actualmente como ciclo de Carnot, mostrando que la eficiencia máxima de una máquina térmica depende únicamente de las temperaturas entre las que opera, no del tipo de fluido o mecanismo.

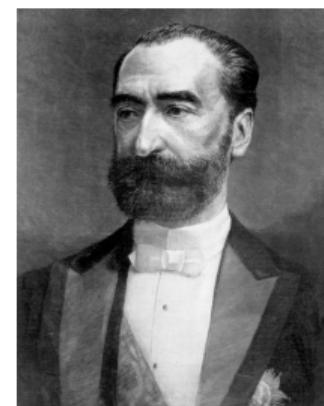


Figura: Sadi Carnot (1796 - 1832)

Historia: Inició el desorden.

- Físico alemán.

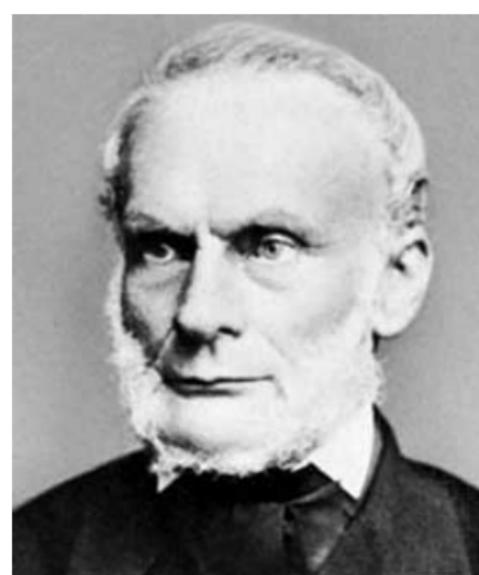


Figura: Rudolf Clasius (1822 - 1888)

Historia: Inició el desorden.

- Físico alemán.
- Introdujo el concepto de energía interna (U) como propiedad del sistema.

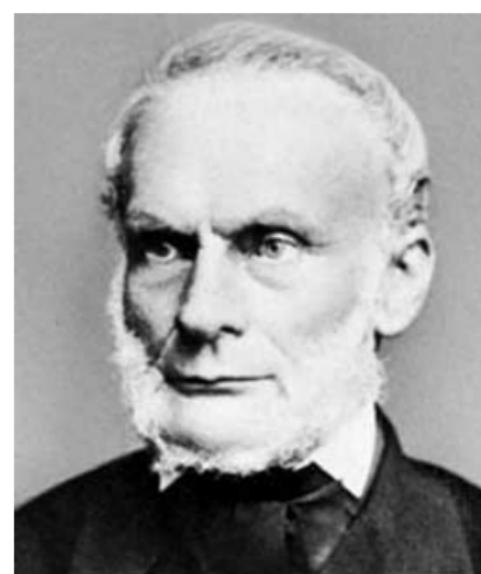


Figura: Rudolf Clasius (1822 - 1888)

Historia: Inició el desorden.

- Físico alemán.
- Introdujo el concepto de energía interna (U) como propiedad del sistema.
- Enunció formalmente el Segundo Principio de la Termodinámica y definió la entropía (S).

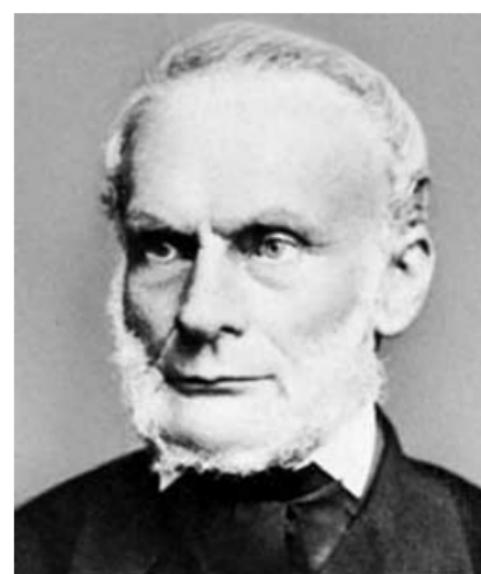


Figura: Rudolf Clasius (1822 - 1888)

Historia: Inició el desorden.

- Físico alemán.
- Introdujo el concepto de energía interna (U) como propiedad del sistema.
- Enunció formalmente el Segundo Principio de la Termodinámica y definió la entropía (S).
- Descubrió que esta U dependía de la temperatura, la presión y el volumen.

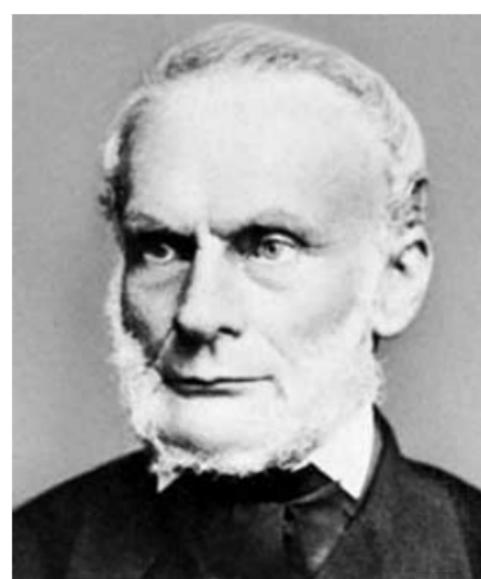


Figura: Rudolf Clasius (1822 - 1888)

Historia: El signo de los tiempos

- Científico inglés que profundizó los alcances de la *termodinámica*

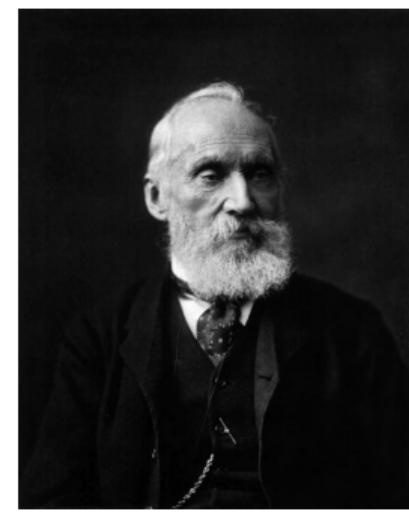


Figura: William Thomson (Lord Kelvin)
(1824–1907)

Historia: El signo de los tiempos

- Científico inglés que profundizó los alcances de la *termodinámica*
- Creó la escala de temperatura absoluta (cuyas unidades llevan su nombre)

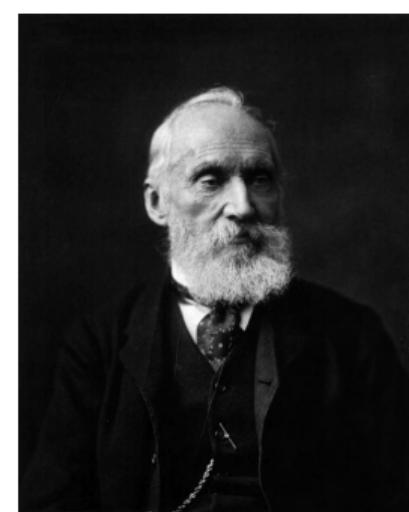


Figura: William Thomson (Lord Kelvin)
(1824–1907)

Historia: El signo de los tiempos

- Científico inglés que profundizó los alcances de la *termodinámica*
- Creó la escala de temperatura absoluta (cuyas unidades llevan su nombre)
- Logró esclarecer la relación entre **trabajo, calor y energía.**

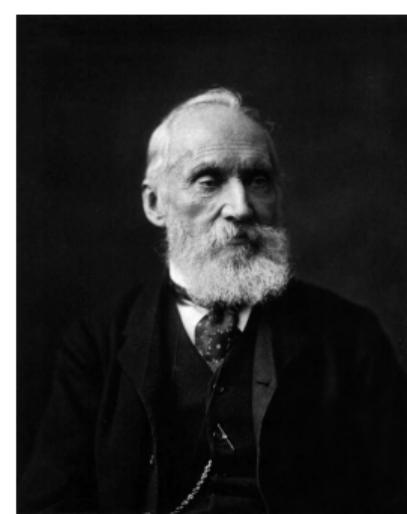


Figura: William Thomson (Lord Kelvin)
(1824–1907)

Historia: El signo de los tiempos

- Científico inglés que profundizó los alcances de la *termodinámica*
- Creó la escala de temperatura absoluta (cuyas unidades llevan su nombre)
- Logró esclarecer la relación entre **trabajo, calor y energía.**
- “La ciencia ya lo ha descubierto todo.”

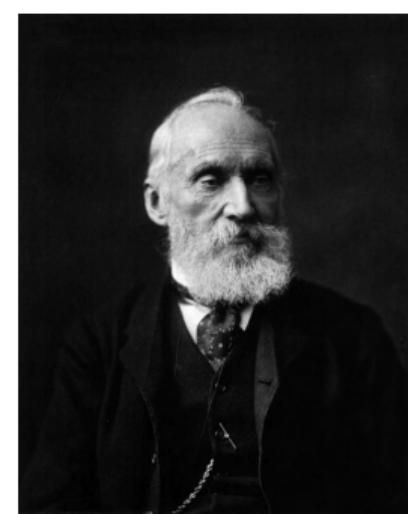


Figura: William Thomson (Lord Kelvin)
(1824–1907)

Historia: Definición moderna de Entalpía

- Físico neerlandés, galardonado con el nobel de física en 1913.



Figura: Heike Kamerlingh Onnes (1853–1926) ↗ ↘ ↙

Historia: Definición moderna de Entalpía

- Físico neerlandés, galardonado con el nobel de física en 1913.
- Descubrió la superconductividad y lo-gró licuar helio.



Figura: Heike Kamerlingh Onnes (1853–1926) ↗ ↘ ↙

Historia: Definición moderna de Entalpía

- Físico neerlandés, galardonado con el nobel de física en 1913.
- Descubrió la superconductividad y logró licuar helio.
- Fue el primero en usar el término “entalpía”, H (del griego “agregar calor”).



Figura: Heike Kamerlingh Onnes (1853–1926) ↗ ↘ ↙ ↚

Historia: Definición moderna de Entalpía

- Físico neerlandés, galardonado con el nobel de física en 1913.
- Descubrió la superconductividad y logró licuar helio.
- Fue el primero en usar el término “entalpía”, H (del griego “agregar calor”).
- Formalizó el concepto con la fórmula $H = U + PV$.



Figura: Heike Kamerlingh Onnes (1853–1926) ↗ ↘ ↙ ↘

Concepto de entalpía

- La entalpía de un sistema se define cómo: $H = U + PV$

Concepto de entalpía

- La entalpía de un sistema se define como: $H = U + PV$
- Dónde U es:

Concepto de entalpía

- La entalpía de un sistema se define como: $H = U + PV$
- Dónde U es:
 - La energía cinética microscópica (vibraciones, rotaciones, traslaciones, etc.)

Concepto de entalpía

- La entalpía de un sistema se define como: $H = U + PV$
- Dónde U es:
 - La energía cinética microscópica (vibraciones, rotaciones, traslaciones, etc.)
 - La energía potencial microscópica (ff intermoleculares, enlaces, etc.)

Concepto de entalpía

- La entalpía de un sistema se define como: $H = U + PV$
- Dónde U es:
 - La energía cinética microscópica (vibraciones, rotaciones, traslaciones, etc.)
 - La energía potencial microscópica (ff intermoleculares, enlaces, etc.)
- P es la presión del sistema (generalmente cte.)

Concepto de entalpía

- La entalpía de un sistema se define como: $H = U + PV$
- Dónde U es:
 - La energía cinética microscópica (vibraciones, rotaciones, traslaciones, etc.)
 - La energía potencial microscópica (ff intermoleculares, enlaces, etc.)
- P es la presión del sistema (generalmente cte.)
- V es el volumen del sistema.

Concepto de entalpía

- La entalpía de un sistema se define como: $H = U + PV$
- Dónde U es:
 - La energía cinética microscópica (vibraciones, rotaciones, traslaciones, etc.)
 - La energía potencial microscópica (ff intermoleculares, enlaces, etc.)
- P es la presión del sistema (generalmente cte.)
- V es el volumen del sistema.

Pero como generalmente solamente se puede ver el cambio, entonces se prefiere la siguiente fórmula:

Concepto de entalpía

- La entalpía de un sistema se define como: $H = U + PV$
- Dónde U es:
 - La energía cinética microscópica (vibraciones, rotaciones, traslaciones, etc.)
 - La energía potencial microscópica (ff intermoleculares, enlaces, etc.)
- P es la presión del sistema (generalmente cte.)
- V es el volumen del sistema.

Pero como generalmente solamente se puede ver el cambio, entonces se prefiere la siguiente fórmula:

$$H_{final} - H_{initial} = \Delta H = \Delta U + P\Delta V$$

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión de dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión se dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión se dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$
- $\Delta V = 3,0 \text{ L} - 2,0 \text{ L} = 1,0 \text{ L}$

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión se dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$
- $\Delta V = 3,0 \text{ L} - 2,0 \text{ L} = 1,0 \text{ L}$
- Reemplazamos en: $\Delta H = \Delta U + P\Delta V$

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión de dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$
- $\Delta V = 3,0 \text{ L} - 2,0 \text{ L} = 1,0 \text{ L}$
- Reemplazamos en: $\Delta H = \Delta U + P\Delta V$

- Primero calcularemos $P\Delta V$ en J.

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión de dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$
- $\Delta V = 3,0 \text{ L} - 2,0 \text{ L} = 1,0 \text{ L}$
- Reemplazamos en: $\Delta H = \Delta U + P\Delta V$

- Primero calcularemos $P\Delta V$ en J.
- $P\Delta V = (1,0 \text{ atm})(1,0 \text{ L}) = 1,0 \text{ L atm}$

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión de dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$
- $\Delta V = 3,0 \text{ L} - 2,0 \text{ L} = 1,0 \text{ L}$
- Reemplazamos en: $\Delta H = \Delta U + P\Delta V$

- Primero calcularemos $P\Delta V$ en J.
- $P\Delta V = (1,0 \text{ atm})(1,0 \text{ L}) = 1,0 \text{ L atm}$
- $1,0 \text{ L atm} = 101,325 \text{ J}$

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión de dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$
- $\Delta V = 3,0 \text{ L} - 2,0 \text{ L} = 1,0 \text{ L}$
- Reemplazamos en: $\Delta H = \Delta U + P\Delta V$

- Primero calcularemos $P\Delta V$ en J.
- $P\Delta V = (1,0 \text{ atm})(1,0 \text{ L}) = 1,0 \text{ L atm}$
- $1,0 \text{ L atm} = 101,325 \text{ J}$
- Calculamos ΔH :

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión de dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$
- $\Delta V = 3,0 \text{ L} - 2,0 \text{ L} = 1,0 \text{ L}$
- Reemplazamos en: $\Delta H = \Delta U + P\Delta V$

- Primero calcularemos $P\Delta V$ en J.
- $P\Delta V = (1,0 \text{ atm})(1,0 \text{ L}) = 1,0 \text{ L atm}$
- $1,0 \text{ L atm} = 101,325 \text{ J}$
- Calculamos ΔH :
- $\Delta H = 400 \text{ J} + 101,725 \text{ J}$

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión de dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$
- $\Delta V = 3,0 \text{ L} - 2,0 \text{ L} = 1,0 \text{ L}$
- Reemplazamos en: $\Delta H = \Delta U + P\Delta V$

- Primero calcularemos $P\Delta V$ en J.
- $P\Delta V = (1,0 \text{ atm})(1,0 \text{ L}) = 1,0 \text{ L atm}$
- $1,0 \text{ L atm} = 101,325 \text{ J}$
- Calculamos ΔH :
- $\Delta H = 400 \text{ J} + 101,725 \text{ J}$
- $\Delta H = 101,725 \text{ J}$

Ejemplo

Un gas se expande a presión constante de 2,0 L a 3,0 L, la expansión de dio a una presión atmosférica constante de 1,0 atm. Durante el proceso la energía interna del gas aumentó en 400 J. Recuerde que 1 L atm = 101,325 J

Respuesta

- $\Delta U = 400 \text{ J}$
- $P = 1 \text{ atm}$
- $\Delta V = 3,0 \text{ L} - 2,0 \text{ L} = 1,0 \text{ L}$
- Reemplazamos en: $\Delta H = \Delta U + P\Delta V$

- Primero calcularemos $P\Delta V$ en J.
- $P\Delta V = (1,0 \text{ atm})(1,0 \text{ L}) = 1,0 \text{ L atm}$
- $1,0 \text{ L atm} = 101,325 \text{ J}$
- Calculamos ΔH :
- $\Delta H = 400 \text{ J} + 101,725 \text{ J}$
- $\Delta H = 101,725 \text{ J}$
- Como vemos el valor es positivo esto significa que el sistema perdió energía (se enfrió en el proceso)

Expansión de un gas.



Figura: Expansión de un gas foto 1



Figura: Expansión de un gas foto 2

Introducción a la Termodinámica Química

¡Hola a todos! En esta clase, exploraremos los fundamentos de la termodinámica química, centrándonos en la entalpía (ΔH) y la entropía (ΔS). Estos conceptos son esenciales para comprender los cambios de energía en las reacciones químicas y predecir su espontaneidad.

Entalpía ΔH : El calor de Reacción

La entalpía (H) es una medida del contenido de calor de un sistema a presión constante. El cambio de entalpía (ΔH) es el calor absorbido o liberado durante una reacción química:

- Reacción Exotérmica: $\Delta H < 0$. La reacción libera calor al entorno.
- Ejemplo: Combustión de un combustible.
- Reacción Endotérmica: $\Delta H > 0$. La reacción absorbe calor del entorno.
- Ejemplo: Fusión de hielo.

Importancia: ΔH nos permite cuantificar el calor involucrado en las reacciones, lo cual es crucial para el diseño de reactores químicos y la comprensión de procesos industriales.

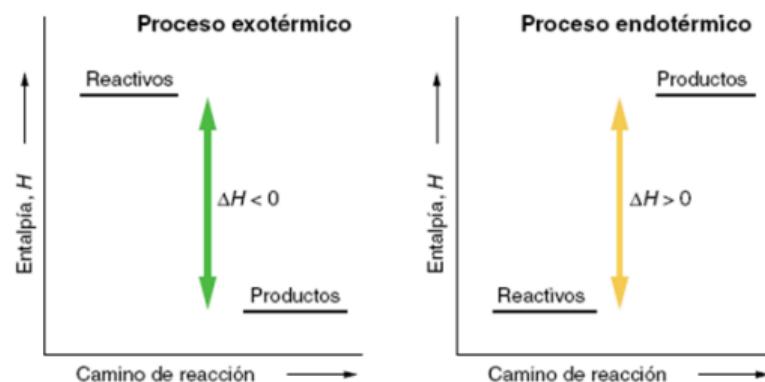


Figura: Proceso exotérmico y endotérmico

Germain Henri Hess 1802 - 1850

- Químico y médico suizo formuló uno de los primeros principios en termoquímica



Figura: 1802 - 1850 (48 años)

Germain Henri Hess 1802 - 1850

- Químico y médico suizo formuló uno de los primeros principios en termoquímica
- Nació en Ginebra, pero se mudó a Rusia con su familia.



Figura: 1802 - 1850 (48 años)

Germain Henri Hess 1802 - 1850

- Químico y médico suizo formuló uno de los primeros principios en termoquímica
- Nació en Ginebra, pero se mudó a Rusia con su familia.
- Estudió en la universidad de Tartu graduándose como médico en 1825.



Figura: 1802 - 1850 (48 años)

Germain Henri Hess 1802 - 1850

- Químico y médico suizo formuló uno de los primeros principios en termoquímica
- Nació en Ginebra, pero se mudó a Rusia con su familia.
- Estudió en la universidad de Tartu graduándose como médico en 1825.
- Se interesó en la química después de conocer y trabajar con *Berzelius*.



Figura: 1802 - 1850 (48 años)

Germain Henri Hess 1802 - 1850

- Químico y médico suizo formuló uno de los primeros principios en termoquímica
- Nació en Ginebra, pero se mudó a Rusia con su familia.
- Estudió en la universidad de Tartu graduándose como médico en 1825.
- Se interesó en la química después de conocer y trabajar con *Berzelius*.
- 1830 presenta su trabajo “Ley de suma constante del calor” (hoy conocida como Ley de Hess).



Figura: 1802 - 1850 (48 años)

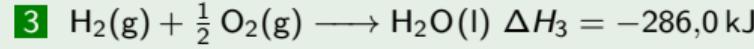
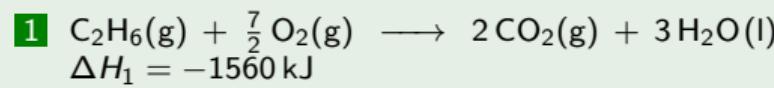
Cálculo de ΔH : Ley de Hess

La Ley de Hess establece que el cambio de entalpía para una reacción es independiente del número de pasos en que se produce la reacción. Esto nos permite calcular ΔH para reacciones que no se pueden medir directamente.

Los elementos ej: Cl_2 , O_2 , Na , etc. tiene $\Delta H_f = 0$

Ejemplo

Calcular la entalpía de formación del etano C_2H_6 y determine si libera o absorbe calor:



Aplicaciones de la Entalpía

- 1890: La industria del salitre desde finales del siglo XIX y principios del XX generaron enormes ingresos para Chile, los cuales correspondieron hasta un 70 % de los ingresos fiscales.
- 1910: Carl Bosch desarrolla el proceso de *Haber-Bosh*
- 1914-1918: Estalla la primera guerra mundial, y Alemania sufre el bloqueo de compra de salitre por Inglaterra, en ese período Alemania prescinde el salitre, principalmente Chileno, al desarrollar el propio de forma sintética.
- 1929: La gran crisis económica y las bajas rentabilidades de la extracción del salitre provocan el fin de la industria salitrera en Chile.

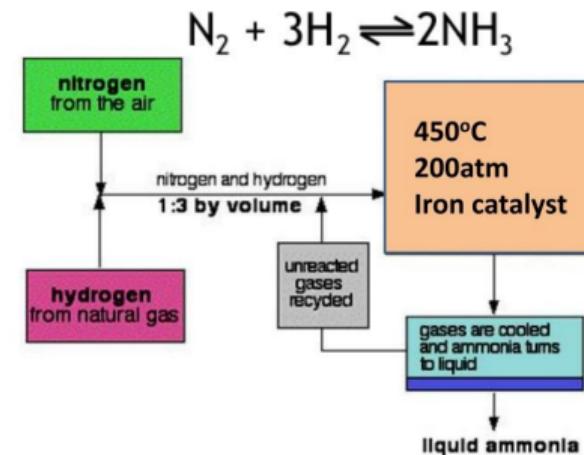


Figura: Proceso de síntesis de amoníaco

Entropía ΔS : El desorden molecular

La entropía (S) es una medida del desorden o aleatoriedad de un sistema. El cambio de entropía (ΔS) nos indica si el desorden del sistema aumenta o disminuye durante un proceso.

- $\Delta S > 0$: Aumento del desorden.
- Ejemplos: Fusión, evaporación, aumento del número de moles de gas.
- $\Delta S < 0$: Disminución del desorden.
- Ejemplos: Condensación, congelación.

¿Quién definió la entropía? Si bien varios científicos contribuyeron, *Ludwig Boltzmann* hizo contribuciones significativas al conectar la entropía con la probabilidad y el número de microestados de un sistema.

Importancia: La entropía es un factor clave que determina la espontaneidad de las reacciones.

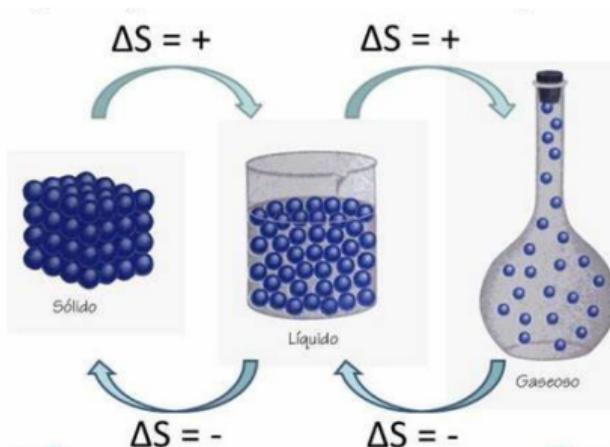


Figura: Cambio de entropía/desorden

Ludwing Boltzman: 1844 - 1906

- Físico Austriaco padre de la mecánica estadística.
- Desarrollo el concepto actualmente usado de entropía.
- Logró vincular propiedades macroscópicas con microscópicas mediante tratamientos estadísticos.
- Sus trabajos fueron continuados posteriormente por Einstein y defendidos por Planck.
- En 1906 se suicida, según mencionan, por falta de reconocimiento.



Figura: Tumba de Boltzman en Viena

Predicción del cambio de entropía ΔS

La entropía aumenta (ΔS) cuando en un cambio:

- El cambio de fase es: S \longrightarrow L \longrightarrow G.
- Aumenta del número de moles gas.

Por tanto disminuirá ($\Delta S < 0$) cuando es lo opuesto.

Ejemplo

Determine el cambio de entropía para los siguientes procesos:

- I₂(s) \longrightarrow I₂(g)
- 4 Fe(s) + 3 O₂(g) \longrightarrow 2 Fe₂O₃(s)

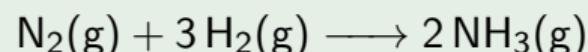
Cálculo de ΔS

El cambio de entropía estándar de una reacción ($\Delta S_{reacción}$) se puede calcular a partir de las entropías estándar de los productos y los reactivos:

$$\Delta S_{reacción} = \sum S^0(\text{productos}) - \sum S^0(\text{reactivos})$$

Ejemplo

Determine la entropía de la siguiente reacción:



Sabiendo que las entropías son:

- $\text{N}_2(\text{g})$: 191,50 J/mol K
- $\text{H}_2(\text{g})$: 130,575 J/mol K
- $\text{NH}_3(\text{g})$: 192,34 J/mol K

Energía Libre de Gibbs (ΔG): Espontaneidad

La energía libre de Gibbs (G), desarrollada por *Josiah Willard Gibbs*, combina entalpía (H) y entropía (S) para predecir la espontaneidad de una reacción:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

- $\Delta G < 0$: Reacción espontánea
- $\Delta G > 0$: Reacción no espontánea
- $\Delta G = 0$: Reacción en equilibrio (esta ocurriendo en ambos sentidos a la vez.)



Figura: Tiziano 1548. Sísifo

Josiah Williard Gibbs

- físico estadounidense que contribuyó al desarrollo de la termodinámica.
- 1837 realizó una representación geométrica de las funciones de estado, trabajo bien recibido por el galardonado físico británico *James Maxwell*.
- Hizo contribuciones en óptica, física matemática y crea la noción de potencial químico.
- En palabras de Einstein “El mayor espíritu en la historia de América”

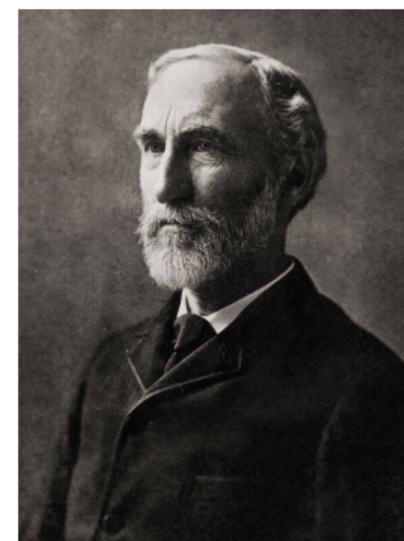
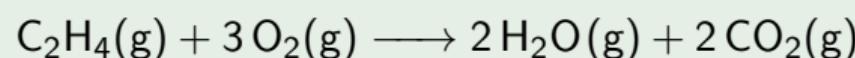


Figura: 1839 - 1903

Cálculo de ΔG

Ejemplo

Determine la energía libre de gibbs a 25 °C para la reacción:



	H (kJ/mol)	S (J/mol K)
C ₂ H ₄	52,3	209
O ₂	0	205,029
H ₂ O	-241,818	188,716
CO ₂	-393,509	213,63

Factores que afectan la espontaneidad

- $\Delta H < 0$ y $\Delta S > 0$, la reacción es espontánea a todas las temperaturas
- $\Delta H > 0$ y $\Delta S < 0$, la reacción no es espontánea a ninguna temperatura.
- ΔH y ΔS tienen el mismo signo, la espontaneidad depende de la temperatura.

	Desorden	Orden
Exotérmica	(-)	$\uparrow T \Rightarrow (+)$
		$\downarrow T \Rightarrow (-)$
Endotérmica	$\uparrow T \Rightarrow (-)$	(+)
	$\downarrow T \Rightarrow (+)$	

Ejemplos de Espontaneidad y ΔG

Ejemplo

Determine a qué temperatura la siguiente reacción está en equilibrio, será espontánea y no espontánea:



	ΔH (kJ/mol)	ΔS (J/mol K)
NaHCO ₃ (s)	-947,67	102,09
Na ₂ CO ₃ (s)	-1130,9	135,98
CO ₂ (g)	-393,50	213,68
H ₂ O(g)	-241,82	188,72