Apunte 5: Termodinámica química y equilibrio químico

Termodinámica química:

Se estudiarán los cambios energéticos que acompañan a las reacciones químicas.

La **Energía** generalmente se define como la capacidad para efectuar un trabajo.

Casi todas las reacciones químicas absorben o liberan energía, por lo general en forma de calor. La **energía térmica** es la energía asociada con el movimiento aleatorio de los átomos y las moléculas, y en general se calcula a partir de mediciones de temperatura.

- A los cambios en los que el sistema emite o cede energía térmica se los llama **exotérmicos**.

- A los cambios que suministran energía térmica al sistema tomándola de los alrededores se los llama **endotérmicos**.

- **Calor**: Transferencia de energía térmica entre dos cuerpos que están a diferente temperatura. La transferencia neta de energía térmica siempre se lleva a cabo de un objeto caliente a uno frío.

- **Ley de conservación de la energía**: La energía no se crea ni se destruye (1º Ley Term.)

- Unidad de energía: Joule (J) $1\text{J} = 1\text{ kg}\cdot\text{m}^2/\text{s}^2$

1 cal=4,184 J

- Cambio de energía térmica= $m \cdot C \cdot \Delta T$

(C=calor específico; (m · C)=capacidad calorífica; $\Delta T=T_f - T_i$)

Cambios exotérmicos (el sistema pierde energía) $\rightarrow -$

Cambios endotérmicos (el sistema gana energía) $\rightarrow +$

Calor específico (C) (J/g °C): Cantidad de calor que se requiere para elevar un grado Celsius la temperatura de un gramo de la sustancia.

Capacidad calorífica (m · C) (J/°C): Cantidad de calor que se requiere para elevar un grado Celsius la temperatura de una determinada cantidad de la sustancia.

La mayoría de los cambios físicos y químicos, incluyendo los que tienen lugar en los sistemas vivos, ocurren en condiciones de presión constante de la atmósfera. Para medir el calor absorbido o liberado por un sistema durante un proceso a presión constante, se utiliza una propiedad llamada **entalpía (H)**.

- **Cambio de entalpía (ΔH)**: Energía térmica ganada o perdida cuando se lleva a cabo un cambio a presión constante. $\Delta H = H_{\text{final}} - H_{\text{inicial}}$

ΔH_{reac} = cambio de entalpía que acompaña a una reacción química (debe interpretarse en término de moles).

- **Ley de Hess**: La energía térmica emitida o absorbida en un cambio dado es igual, aunque éste ocurra en uno o en varios pasos.

- **Reacciones de formación**: Reacciones en las que se forman los compuestos a partir de elementos.

Ej: $\text{Ca(s)} + \text{O}_2\text{(g)} + \text{H}_2\text{(g)} \rightarrow \text{Ca(OH)}_2\text{(s)}$ $\Delta H_{\text{reac}} = -980,09\text{ kJ}$

- **Estado estándar**: En un sólido o líquido es el sólido puro o el líquido puro a presión normal (~ 1 atm). En un gas es el gas ideal a una presión parcial de aprox. 1 atm. Si todos los reactivos están en su estado estándar, el cambio de entalpía que acompaña a una reacción se llama cambio estándar de entalpía de la reacción, ΔH^0 .

Por lo tanto: ΔH^0 (cambio estándar de formación de una sustancia)=Cambio de entalpía que resulta cuando se forma un mol de la sustancia a partir de sus elementos, estando todas las sustancias en sus estados estándar.

Las entalpías estándar de formación de los elementos en sus estados estándar son cero.

Ej: $O_2(g) \rightarrow O_2(g) \quad \Delta H^0=0$

Las entalpías de formación se expresan para la formación de un mol de compuesto.

$$\Delta H^0_{\text{reac}} = \sum n_p \cdot \Delta H^0_f(\text{productos}) - \sum n_r \cdot \Delta H^0_f(\text{reactivos})$$

- Entalpía estándar de combustión (ΔH^0_{reac}): Energía térmica producida cuando se quema un mol de sustancia en exceso de oxígeno, estando todos los reactivos y los productos en sus estados estándar.

Equilibrio Químico

- El equilibrio químico se alcanza cuando las velocidades de las reacciones directa e inversa se igualan y las concentraciones netas de reactivos y productos permanecen constantes. El equilibrio químico es un proceso dinámico.

Al inicio de un proceso reversible, la reacción procede hacia la formación de productos, tan pronto como se forman algunas moléculas de producto comienza el proceso inverso, estas moléculas reaccionan y forman moléculas de reactivo.

Para la reacción reversible:

$aA + bB \leftrightarrow cC + dD$ (no puedo hacer la doble flecha en word, por eso pongo esta)

donde a, b, c, y d son coeficientes estequiométricos de las especies reactivas A, B, C y D.

Para la reacción a una temperatura dada:

$$K = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b} \quad K = \text{cte. de equilibrio (siempre y cuando la reacción esté en$$

equilibrio y T no cambie)

La magnitud de K indica si una reacción en equilibrio es favorable a los productos o a los reactivos:

$K \gg 1 \rightarrow$ el equilibrio favorecerá a los productos

$K \ll 1 \rightarrow$ el equilibrio favorecerá a los reactivos

- Equilibrio homogéneo: Todas las especies reactivas se encuentran en la misma fase.

$K_c \rightarrow$ concentraciones están expresadas en molaridad (moles por litro)