



Termoquímica

Entalpía (H)

Entalpía (H) [kJ/mol]: "Calor a presión de constante".

Si lleva un (°) encima (ΔH°) significa que está medido en **condiciones estándar**:

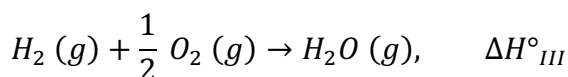
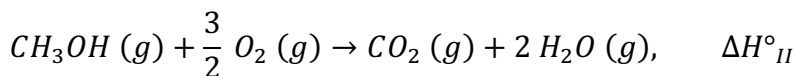
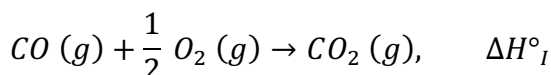
- $P = 1 \text{ atm}$
- $T = 25^\circ\text{C} (298 \text{ K})$

Variación de entalpía ΔH_r : $\begin{cases} \Delta H_r > 0: \text{absorbe calor} \rightarrow \text{reacción endotérmica} \\ \Delta H_r < 0: \text{desprende calor} \rightarrow \text{reacción exotérmica} \end{cases}$

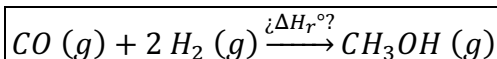
Cálculo de la variación de entalpía por ley de Hess

Calculamos la entalpía de una reacción a partir de las entalpías de reacción de otras reacciones. Ejemplo:

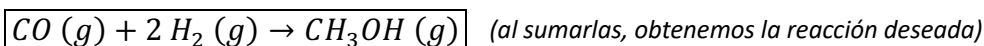
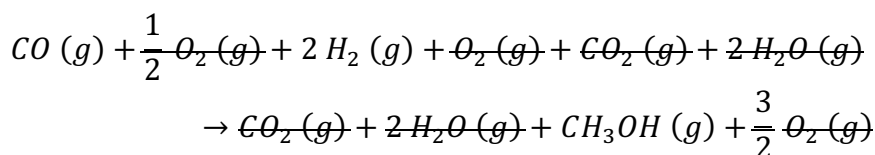
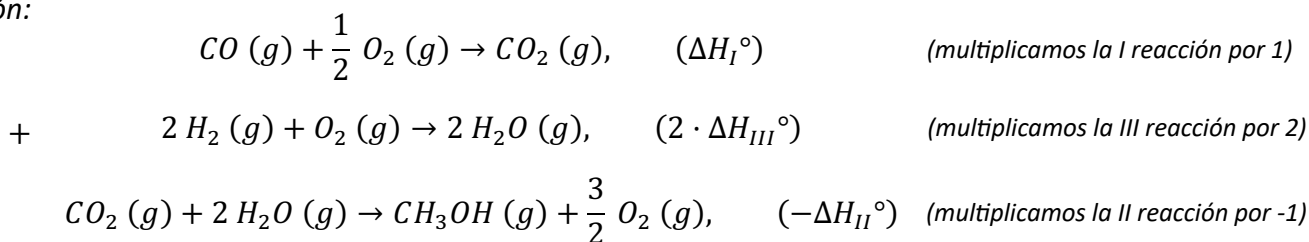
Conocemos estos datos:



Y queremos conocer:



Resolución:



$$\Delta H_r^\circ = \Delta H^\circ_I + 2\Delta H^\circ_{III} - \Delta H^\circ_{II} = -283 + 2(-764,4) - (-285,8) = \boxed{-1526 \text{ kJ/mol}}$$



Significa que se desprenden (signo -) 1526 kJ:

- Por cada 1 mol de CO que se consume.
- Por cada 2 moles de H₂ que se consumen.
- Por cada 1 mol de CH₃OH que se produce.



Cálculo de la variación de entalpía a partir de entalpías de formación

Calculamos la entalpía de una reacción a partir de las entalpías de formación de los reactivos y productos.

Nota: una reacción de formación consiste en formar el compuesto a partir de los elementos que lo componen tal y como se encuentren en condiciones estándar (si tenemos el dato, no es necesario utilizar la definición).

Por ejemplo, para el CO_2 la reacción de formación sería: $\text{C}(s) + \text{H}_2(g) \xrightarrow{\Delta H_f^\circ} \text{CO}_2(g)$

$$\Delta H_r^\circ = \sum n \cdot \Delta H_f^\circ(\text{productos}) - \sum n \cdot \Delta H_f^\circ(\text{reactivos})$$

Ejemplo:

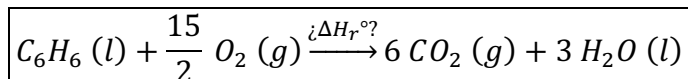
Conocemos estos datos:

$$\Delta H_f^\circ(\text{C}_6\text{H}_6) = 49 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{CO}_2) = -394 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}) = -286 \text{ kJ/mol}$$

Y queremos conocer:



Para compuestos monoelementales, vale cero.

Resolución:

$$\Delta H_r^\circ = 6 \cdot \Delta H_f^\circ(\text{CO}_2) + 3 \cdot \Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{O}) - \Delta H_f^\circ(\text{C}_6\text{H}_6) - \frac{15}{2} \cdot \underbrace{\Delta H_f^\circ(\text{O}_2)}_0$$

$$\Delta H_r^\circ = 6 \cdot (-394) + 3 \cdot (-286) - 49 = \boxed{-3271 \text{ kJ/mol}}$$

Cálculo de la variación de entalpía a partir de entalpías de enlace

Calculamos la entalpía de una reacción a partir de las entalpías de enlace de los reactivos y productos.

$$\Delta H_r^\circ = \sum n \cdot \Delta H^\circ(\underbrace{\text{enlaces rotos}}_{\text{reactivos}}) - \sum n \cdot \Delta H^\circ(\underbrace{\text{enlaces formados}}_{\text{productos}})$$

Ejemplo:

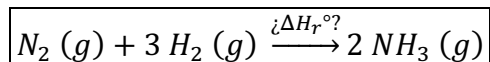
Conocemos estos datos:

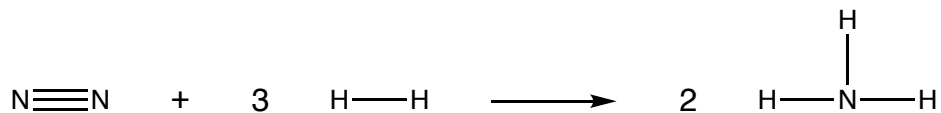
$$\Delta H^\circ(\text{H} - \text{H}) = 436 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H^\circ(\text{N} - \text{H}) = 390 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H^\circ(\text{N} \equiv \text{N}) = 946 \text{ kJ/mol}$$

Y queremos conocer:





$$\begin{aligned} \Delta H_r^\circ &= \Delta H^\circ(\text{N} \equiv \text{N}) + 3 \cdot \Delta H^\circ(\text{H} - \text{H}) - 2 \cdot 3 \cdot \Delta H^\circ(\text{N} - \text{H}) \\ &= 946 + 3 \cdot 436 - 2 \cdot 3 \cdot 390 = \boxed{-86 \text{ kJ/mol}} \end{aligned}$$

Entropía (S)

Entropía (S) [J/mol K]: “Mide el grado de desorden”.

Variación de entropía ΔS_r : $\begin{cases} \Delta S_r > 0: \text{aumenta el desorden. Sólido} \rightarrow \text{Líquido} \rightarrow \text{Gas} \\ \Delta S_r < 0: \text{disminuye el desorden. Gas} \rightarrow \text{Líquido} \rightarrow \text{Sólido} \end{cases}$

Cálculo de la variación de entropía a partir de las entropías de los reactivos y productos

Calculamos la entalpía de una reacción a partir de las entalpías molares de los reactivos y productos (no llevan ni °, ni Δ, ni f en el subíndice).

$$\Delta S_r^\circ = \sum n \cdot S^\circ(\text{productos}) - \sum n \cdot S^\circ(\text{reactivos})$$

Ejemplo:

Conocemos estos datos:

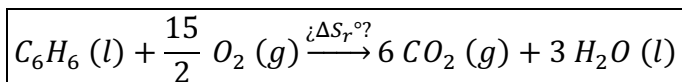
$$S^\circ(\text{C}_6\text{H}_6) = 173,3 \text{ kJ/mol}$$

$$S^\circ(\text{CO}_2) = 213,7 \text{ kJ/mol}$$

$$S^\circ(\text{H}_2\text{O}) = 70 \text{ kJ/mol}$$

$$S^\circ(\text{O}_2) = 205,14 \text{ kJ/mol}$$

Y queremos conocer:



Para compuestos monoelementales, aquí no vale cero.

Resolución:

$$\Delta S_r^\circ = 6 \cdot S^\circ(\text{CO}_2) + 3 \cdot S^\circ(\text{H}_2\text{O}) - S^\circ(\text{C}_6\text{H}_6) - \frac{15}{2} \cdot S^\circ(\text{O}_2)$$

$$\Delta H_r^\circ = 6 \cdot 213,7 + 3 \cdot 70 - 173,3 - \frac{15}{2} \cdot 205,14 = \boxed{-219,65 \text{ kJ/mol}}$$



Energía libre de Gibbs (G)

Energía libre de Gibbs (G) [kJ/mol]: “Mide la espontaneidad”.

Variación de entropía ΔG_r : $\begin{cases} \Delta G_r > 0: \text{la reacción no es espontánea} \\ \Delta G_r < 0: \text{la reacción es espontánea} \end{cases}$

Cálculo de la variación de entropía a partir de las energías libres de Gibbs de formación

Calculamos la entalpía de una reacción a partir de las entalpías de formación de los reactivos y productos.

$$\Delta G_r^\circ = \sum n \cdot \Delta G_f^\circ(\text{productos}) - \sum n \cdot \Delta G_f^\circ(\text{reactivos})$$

Ejemplo:

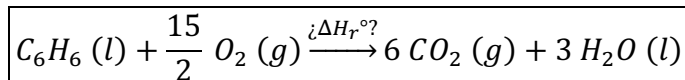
Conocemos estos datos:

$$\Delta G_f^\circ(C_6H_6) = 124,4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G_f^\circ(CO_2) = -394,4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G_f^\circ(H_2O) = -237,1 \text{ kJ/mol}$$

Y queremos conocer:



Para compuestos monoelementales, vale cero.

Resolución:

$$\Delta G_r^\circ = 6 \cdot \Delta G_f^\circ(CO_2) + 3 \cdot \Delta G_f^\circ(H_2O) - \Delta G_f^\circ(C_6H_6) - \frac{15}{2} \cdot \underbrace{\Delta G_f^\circ(O_2)}_0$$

$$\Delta H_r^\circ = 6 \cdot (-394,4) + 3 \cdot (-237,1) - 124,4 = \boxed{-3202,1 \text{ kJ/mol}}$$

Cálculo de la variación de entropía a partir de las variaciones de entalpía y entropía

Calculamos la entalpía de una reacción a partir de las variaciones de entalpía y entropía de reacción.

$$\Delta G_r^\circ = \Delta H_r^\circ - T\Delta S_r^\circ$$

Ejemplo:

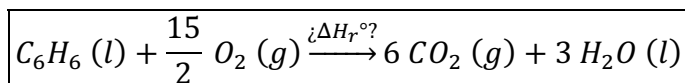
Conocemos estos datos:

$$\Delta G_f^\circ(C_6H_6) = 124,4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G_f^\circ(CO_2) = -394,4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G_f^\circ(H_2O) = -237,1 \text{ kJ/mol}$$

Y queremos conocer:



$$\Delta G_r^\circ = -3271 - 298 \cdot (-219,65 \cdot 10^{-3}) = \boxed{-3205,54 \text{ kJ/mol}}$$