

Unidad 4: Energía, equilibrio y cinética química

Desarrollo del tema

4.1 Energía

La energía es la capacidad que tiene un cuerpo para realizar un trabajo.

Tipos de energía:

- Energía química
- Energía cinética
- Energía potencial
- Energía mecánica
- Energía eléctrica
- Energía nuclear
- Energía solar
- Energía eólica
- Energía geotérmica

Formas de energía que tenemos:

La exotérmica: Es cuando se libera energía en un proceso.

La endotérmica: Es cuando se requiere energía para el proceso.



4.2 Termodinámica

Termodinámica: se enfoca a una porción (sistema) y lo que existe alrededor (medio que rodea al sistema). Si la temperatura de los alrededores es menor por lo tanto entra calor al sistema y se identifica con signo positivo, si la temperatura de los alrededores es mayor por lo tanto sale calor y se identifica con signo negativo.

Termoquímica: Estudia el calor que entra a un sistema debido a la ocurrencia de una reacción química.

4.2.1 Primera ley de la termodinámica

“Ley de la conservación de la energía”. La energía no se crea ni se destruye sólo se transforma.

$$\Delta E = q - w$$

4.3 Entalpía (ΔH)

Es la cantidad termodinámica que expresa el calor involucrado en una reacción química a presión constante.

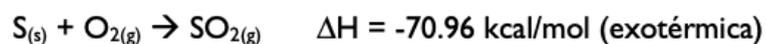
- Cuando ΔH es negativa, el proceso libera calor, se le llama exotérmico
- Cuando ΔH es positiva, el proceso requiere calor para realizarse, se le llama endotérmico.

4.3.1 Ley de Hess

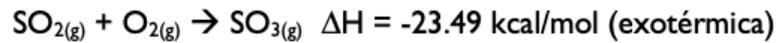
“El cambio de entalpía en una reacción puede obtenerse mediante la suma de los cambios de la entalpía de cada paso en que se pueda dividir finalmente la reacción.

Ejemplo:

Al considerar las reacciones del azufre para obtener trióxido de azufre o anhídrido sulfúrico, se obtiene:



1.- La primera reacción para crear el trióxido de azufre es la suma del azufre (S) que es un sólido (s) más el oxígeno (O₂) que es un gas (g): el dióxido de azufre (SO₂) que es un gas (g) y su entalpía es igual a -70.96 kcal/mol siendo exotérmica ya que la entalpía es negativa.

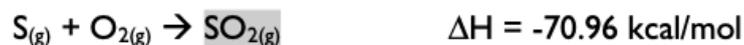


2.- La segunda reacción es la suma del dióxido de azufre (SO₂) que es un gas (g) más oxígeno (O₂) que es un gas (g) dando como resultado el trióxido de azufre (SO₃) que es un gas (g) y su entalpía es igual a -23.49 kcal/mol siendo exotérmica ya que la entalpía es negativa.



3.- Ahora hay que ajustar las reacciones para convertirlas en una ecuación química. Donde en la primera reacción no hay nada que modificar ya que sus valores son iguales, mientras que en la segunda reacción como tiene en la suma cuatro oxígenos (O₂) y en el resultado tiene tres oxígenos (O₂) se ajusta multiplicando por un medio el segundo oxígeno (O₂) para que tenga el valor de un oxígeno (O).

4.- Realiza la suma y simplifica de las ecuaciones y suma los valores de las entalpías.



5.- Una vez que sumemos las ecuaciones y las entalpías, llegarás a la ecuación objetivo (resultado).



4.3.2 Calor de reacción y calor de formación

Es el calor que se absorbe o se desprende al realizar una reacción química.

$$\Delta H_R = \sum H_f^\circ \text{ productos} - \sum H_f^\circ \text{ reactivos}$$

Ejemplo:

Determine el calor de la siguiente reacción:



Sustancia	H ^o _f (kcal/mol)
PCl _{5(g)}	-95.4
POCl _{3(g)}	-141.5
H ₂ O _(g)	-57.8
HCl _(g)	-22.1

1.- Así quedaría la fórmula: el calor es igual a los productos menos los reactivos.

$$\Delta H_R = (\text{POCl}_{3(g)} + 2 \text{HCl}_{(g)}) - (\text{PCl}_{5(g)} + \text{H}_2\text{O}_{(g)})$$

2.- Sustituye los valores hasta llegar al resultado.

$$\Delta H_R = (-141.5 + 2(-22.1)) - (-95.4 - 57.8)$$

$$\Delta H_R = (-141.5 - 44.2) - (-153.2)$$

$$\Delta H_R = -185.7 + 153.2$$

$$\Delta H_R = -32.5 \text{ kcal/mol}$$

4.3.3 Segunda ley de la termodinámica

La segunda ley de la termodinámica se basa en dos principios que llevan el nombre de los científicos que la postularon:

1. Clausius: Todo proceso cíclico cuyo único efecto final sobre los alrededores sea transferir el calor de un cuerpo frío a un cuerpo caliente es imposible.
2. Kelvin-Plank: Todo proceso cíclico cuyo único efecto final sobre los alrededores sea absorber calor de un cuerpo y convertirlo íntegramente en trabajo, es imposible.

4.4 Entropía (ΔS)

Es la medida del grado de dispersión de la energía.

$$\Delta S = \Delta Q / T$$

4.5 Energía libre y espontaneidad

4.5.1 Energía libre de Gibbs (ΔG) “espontaneidad”

Es la energía útil disponible para realizar un trabajo.

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

Donde:

- ΔG = Variación de la energía libre de Gibbs
- ΔH = Variación de entalpía
- T = Temperatura
- ΔS = Variación de la entropía

Sí:

- $\Delta G = (-)$ Proceso espontáneo
- $\Delta G = (+)$ Proceso no espontáneo
- $\Delta G = (0)$ Proceso en equilibrio

Ejemplo:

Calcule la ΔG de un sistema con $\Delta H = -365.72$ kcal/mol, $\Delta S = -0.13922$ kcal/mol, a 25 °C, indique si la reacción se lleva a cabo.

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

$$\Delta G = (-365.72 \text{ kcal/mol}) - (298 \text{ K}) (-0.13922 \text{ kcal/mol})$$

1.- Así quedaría la fórmula con los valores asignados.

$$K = 273 + ^\circ\text{C}$$

$$K = 273 + 25$$

$$K = 298$$

1.1.- Los 25 °C se convierten a grados Kelvin.

$$\Delta G = -365.72 + 41.48$$

$$\Delta G = -324.24 \text{ kcal}$$

Al ser ΔH negativa, la reacción es exotérmica y el proceso es espontáneo ya que ΔG es negativa, así que la reacción si se lleva a cabo.

4.6 Equilibrio químico

Es el proceso dinámico donde las reacciones en ambas direcciones ocurren a la misma velocidad.

4.6.1 Constante de equilibrio químico

Es el producto de las concentraciones molares de los productos, dividido entre el producto de las concentraciones molares de los reactivos, cada sustancia elevada al número de moles correspondientes.



$$K_{eq} = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{N}_2] [\text{H}_2]^3}$$

4.6.2 Principio de Le Châtelier

“Cuando un sistema en equilibrio se sujeta a una acción externa, el equilibrio se desplaza en la dirección que tiende a disminuir o neutralizar esta acción”.

4.6.3 Factores que afectan el equilibrio químico

- La concentración: Cuando se aumenta la concentración de alguna de las sustancias, en un sistema en equilibrio, este se desplaza hacia la reacción que disminuye el aumento.
- La temperatura: Al aumentar la temperatura de un sistema en equilibrio, este se traslada en sentido de la reacción endotérmica. Cuando disminuye la temperatura ocurrirá lo contrario.
- La presión: Si a un sistema en equilibrio se le aumenta la presión, el equilibrio se desplaza según la reacción en que las sustancias formadas ocupan un volumen menor.

4.7 Velocidad de reacción

La concentración de productos que se adquieren por unidad de tiempo o la concentración de reactivos que se gastan por unidad de tiempo.

$$V = [\text{Productos}] / t$$

4.7.1 Cinética química

Estudia la velocidad a la que ocurre un cambio químico y cuáles son los factores que la afectan.

La velocidad de un cambio químico se cuantifica con la medición de la rapidez de aparición de un producto o la desaparición de un reactivo.

Umbral de energía de activación: Es el mínimo de energía que se requiere para romper los enlaces y empezar una reacción química.

4.7.2 Factores que afectan la velocidad de reacción

- **Concentración de los reactivos:** Cuando hay un mayor número de partículas en un determinado volumen aumenta la frecuencia de las colisiones, por tanto, aumenta la velocidad de reacción.
- **Naturaleza de los reactivos:** De acuerdo con las características de las sustancias (polares, no polares, iónicas, líquidas, sólidas, etc.), incrementará la velocidad de reacción.
- **Temperatura:** Al incrementar la temperatura, aumenta la energía cinética de las partículas y adquieren rápidamente la energía de activación. Por lo tanto, a mayor temperatura aumenta la velocidad de reacción.
- **Catalizadores:** Sustancias que incrementan la velocidad de una reacción, sin modificar la composición de los productos y disminuyen la energía de activación.
- **Superficie de contacto o tamaño de las partículas:** Cuando una o todas las sustancias que se combinan se hallan en estado sólido, la velocidad de reacción depende de la superficie expuesta en la reacción, ya que cuando los sólidos están molidos o en granos, aumenta la superficie de contacto y, por consiguiente, aumenta la posibilidad de choque y la reacción es más veloz.
- **Presión:** Influye principalmente sobre los sistemas en fase gaseosa, ya que cuando se aumenta la presión sobre una masa gaseosa, las moléculas se aproximan y disminuyen los espacios vacíos, lo que equivale a un aumento en la concentración y en forma directa aumenta la velocidad de reacción.