

Energía

Es la capacidad de producir trabajo

- La energía de un sistema químico es la suma de las energías cinética y potencial de las partículas del sistema.

Conceptos básicos:

- **Sistema termodinámico:** Cualquier cantidad de materia aislada del ambiente (entorno) por límites reales o imaginarios.
- **Tipos de sistemas:**
 - Abiertos
 - Cerrados
 - Aislados
- **Estado de un sistema:** Un sistema se encuentra en un estado definido cuando cada una de sus propiedades tiene un valor determinado.
Un sistema está en **equilibrio termodinámico** cuando no se observa ningún cambio en sus propiedades termodinámicas a lo largo del tiempo.
- **Variables de estado:** Magnitudes que determinan los valores de todas las propiedades y, por tanto, el estado del sistema. Pueden ser:
 - Intensivas
 - Extensivas.
- **Función de estado:** Variables que sólo dependen de los estados inicial y final del sistema y no del camino seguido.
Algunas: P, V, T, U, H, S, G.

Termodinámica

- **Termodinámica:** Ciencia que estudia las transformaciones de la energía de una forma a otra.
- **Termoquímica:** Parte de la termodinámica que estudia los cambios de energía asociados a las reacciones químicas

Calor y trabajo: Son formas de energía

- **Calor:** Intercambio de energía debido a la existencia de una diferencia de temperatura.
- **Trabajo:** Intercambio debido al desplazamiento de una parte del sistema.
- **Trabajo realizado a presión constante:**
$$W = p \cdot \Delta V$$
- **Ecuación termoquímica:** Ecuaciones químicas en las que se especifica el intercambio energético
- **Reacción exotérmica:** Va acompañada de desprendimiento de energía ($q < 0$)
- **Reacción endotérmica:** Transcurre con absorción de energía ($q > 0$)

- **Energía interna (U):** Suma de la energía cinética de las partículas del sistema, así como la energía potencial de los electrones del núcleo o de las partículas ligadas en el núcleo.

Es una función de estado.

- **Primer Principio de la Termodinámica:** Cualquier cambio de la energía interna de un sistema es la diferencia entre el calor comunicado al sistema y el trabajo realizado.
- **Calor de reacción a volumen constante:**
$$\Delta U = q_v$$

Transformaciones a presión constante

- **Entalpía (H):** Suma de la energía interna más el producto de la presión por el volumen:

$$H = U + p \cdot V$$

Es una función de estado

- **Calor de reacción a presión constante:**

$$\Delta H_r = q_p$$

- **Relación entre q_v y q_p en reacciones entre gases ideales:**

$$q_p = q_v + \Delta n \cdot R \cdot T$$

$$\Delta H = \Delta U + \Delta n \cdot R \cdot T$$

- **Entalpía de formación (ΔH_f) de un compuesto:** Calor intercambiado en la formación, a presión constante, de un mol de dicho compuesto a partir de los elementos que lo componen.
- **Entalpía de combustión (ΔH_c) de un compuesto:** Calor desprendido en la reacción de combustión completa de un mol de compuesto con oxígeno molecular.

Condiciones estándar: Para poder comparar entre sí los valores de distintas magnitudes es imprescindible precisar las condiciones en que se han realizado esas medidas. El estado estándar para toda sustancia pura es el estado

físico más estable en que se encuentra a la presión de una atmósfera y a la temperatura de 25°C.

El símbolo ΔH° significa la variación de entalpía en condiciones estándar.

Entalpías:

- **Entalpía de formación (ΔH_f)** de un compuesto es el calor intercambiado en la formación, a presión constante, de un mol de dicho compuesto a partir de los elementos que lo componen.
- **Entalpía de combustión (ΔH_c)** de un compuesto es el calor desprendido en la reacción de combustión completa de un mol de compuesto con oxígeno molecular.
- **Entalpía de enlace covalente** es la energía liberada como resultado de la formación de un enlace covalente estable entre dos átomos que reaccionan en estado.
- **Entalpía de disociación** es la energía intercambiada al descomponerse un mol de una sustancia en sus átomos constituyentes en estado gaseoso.
- **Entalpía de disolución** es la variación de energía que tiene lugar al disolverse un mol de un compuesto en una cantidad suficiente de disolvente.

Espontaneidad de las reacciones químicas:

Un proceso es espontáneo cuando se verifica en un determinado sentido sin ningún aporte de energía.

Todo proceso espontáneo es capaz de verificar un trabajo.

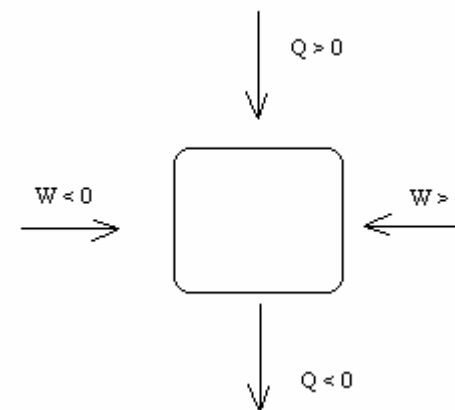
- **Segundo principio de la termodinámica:** Todos los sistemas aislados tienden espontáneamente al desorden.
- La **entropía (S)** es una magnitud termodinámica que mide el desorden de un sistema.
En todo proceso $\Delta S \geq 0$
- **Tercer principio de la termodinámica:** Cuando un sistema está perfectamente ordenado y sin energía de vibración, es decir, en el cero absoluto de temperaturas, su entropía es cero.
- **Trabajo útil:**
 - **Gibbs:** El criterio adecuado para predecir la espontaneidad de una reacción es su capacidad para producir trabajo útil (w_u).
 - Si $w_u > 0$: **reacción espontánea**, puede producir trabajo útil
 - Si $w_u < 0$: **reacción no espontánea**, debe suministrarse trabajo para que suceda
 - Si $w_u = 0$: **sistema en equilibrio**.
- **Energía libre(G):** Trabajo máximo que puede producir una reacción química excluido el trabajo de expansión: $\Delta G = -w_u$
 - Si $\Delta G < 0$ **reacción espontánea**
 - Si $\Delta G > 0$ **reacción no espontánea**
 - Si $\Delta G = 0$ **sistema en equilibrio**.

G: *Es una función de estado*

Ecuación de Gibbs-Helmholtz

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

La cantidad de energía inutilizable es igual al producto de la variación de entropía por la temperatura absoluta.



Criterio de signos de calor y trabajo

ΔH	ΔS	ΔG	Conclusión
-	+	Siempre < 0	Siempre espontánea
+	-	Siempre < 0	No espontánea para todo T
+	+	+ si T baja - si T alta	No espontánea a T baja
-	-	- si T baja + si T alta	Espontánea a T baja