



UCSF
Universidad Católica
de Santa Fe

Farmacia



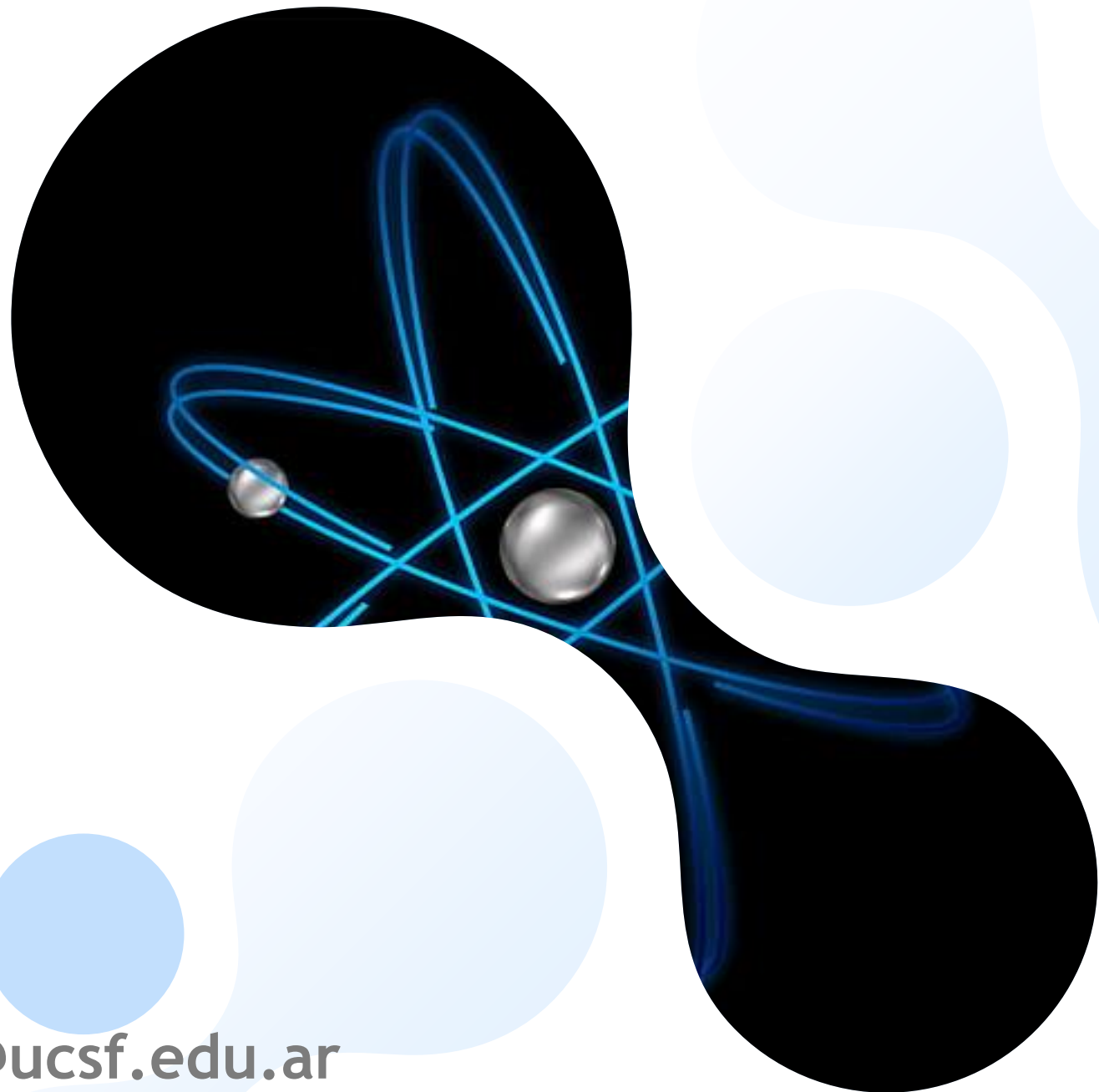
Facultad de Ciencias de la Salud

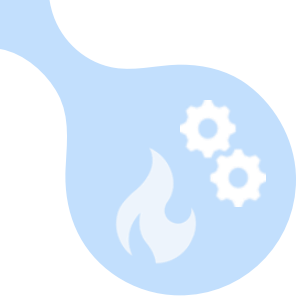
Química General

Cristhian Andrés
Fonseca B.



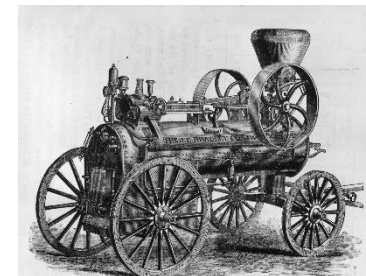
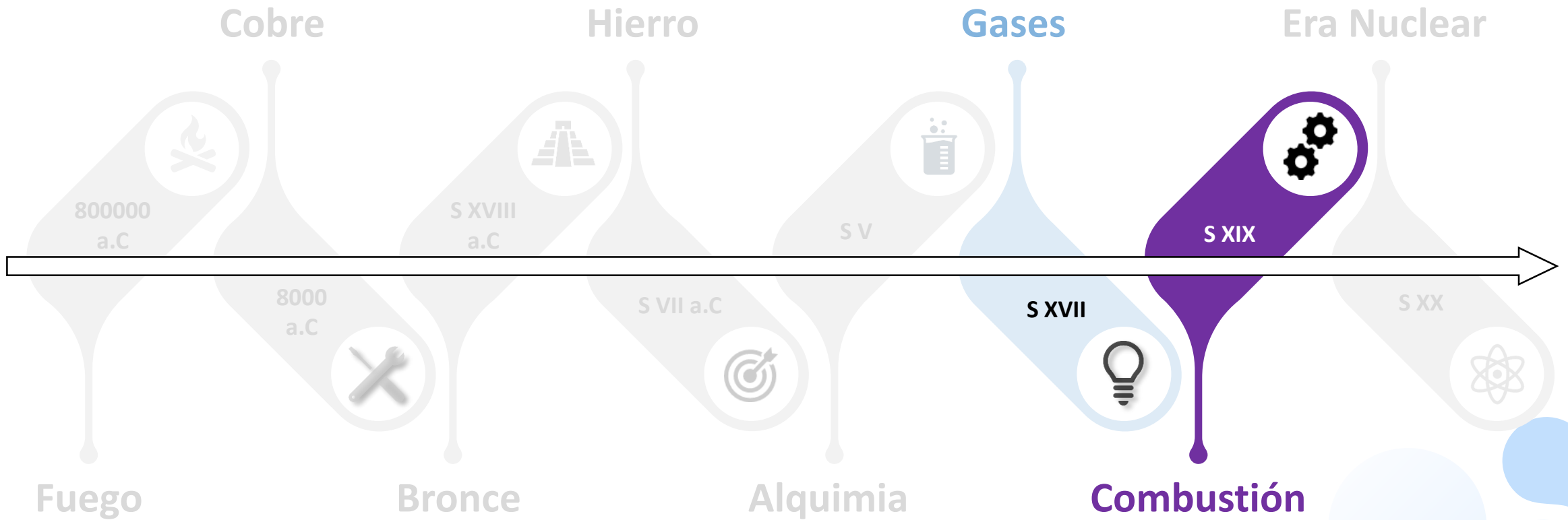
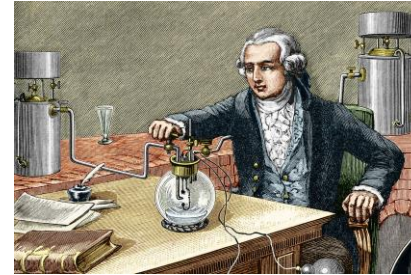
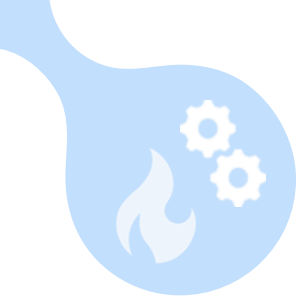
cristhian.fonsecabenitez@ucsf.edu.ar

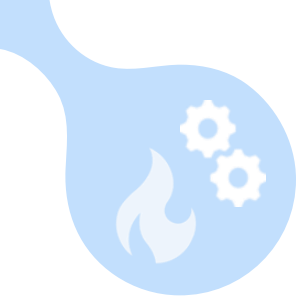




Termodinámica







Energía

Capacidad de transformar, producir cambios, **movimiento**, **trabajo** y transferir **calor**

Movimiento: Es la energía cinética empleada en el desplazamiento de un objeto de masa m a una cierta velocidad v

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2$$

Trabajo: Es la energía utilizada para mover un objeto una distancia d contra una fuerza F

$$w = F * d$$

Calor: Es la energía empleada para incrementar la temperatura de un objeto

Thérme: Calor; **dýnamis:** Fuerza que produce movimiento

Termodinámica: Es la ciencia que estudia la transferencia de energía de los objetos con su entorno.

$$m = kg; d = m$$

$$v = \frac{m}{s^2}$$

$$F = N = \frac{kg * m}{s^2}$$

$$w = N * m = J$$

Energía

Energía Potencial: Energía en reposo
Energía Cinética: Energía en movimiento

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2$$



Energía potencial elevada,
energía cinética cero

$$E_p = m * g * h$$



La energía potencial **disminuye**,
la energía cinética **aumenta**.

Energía

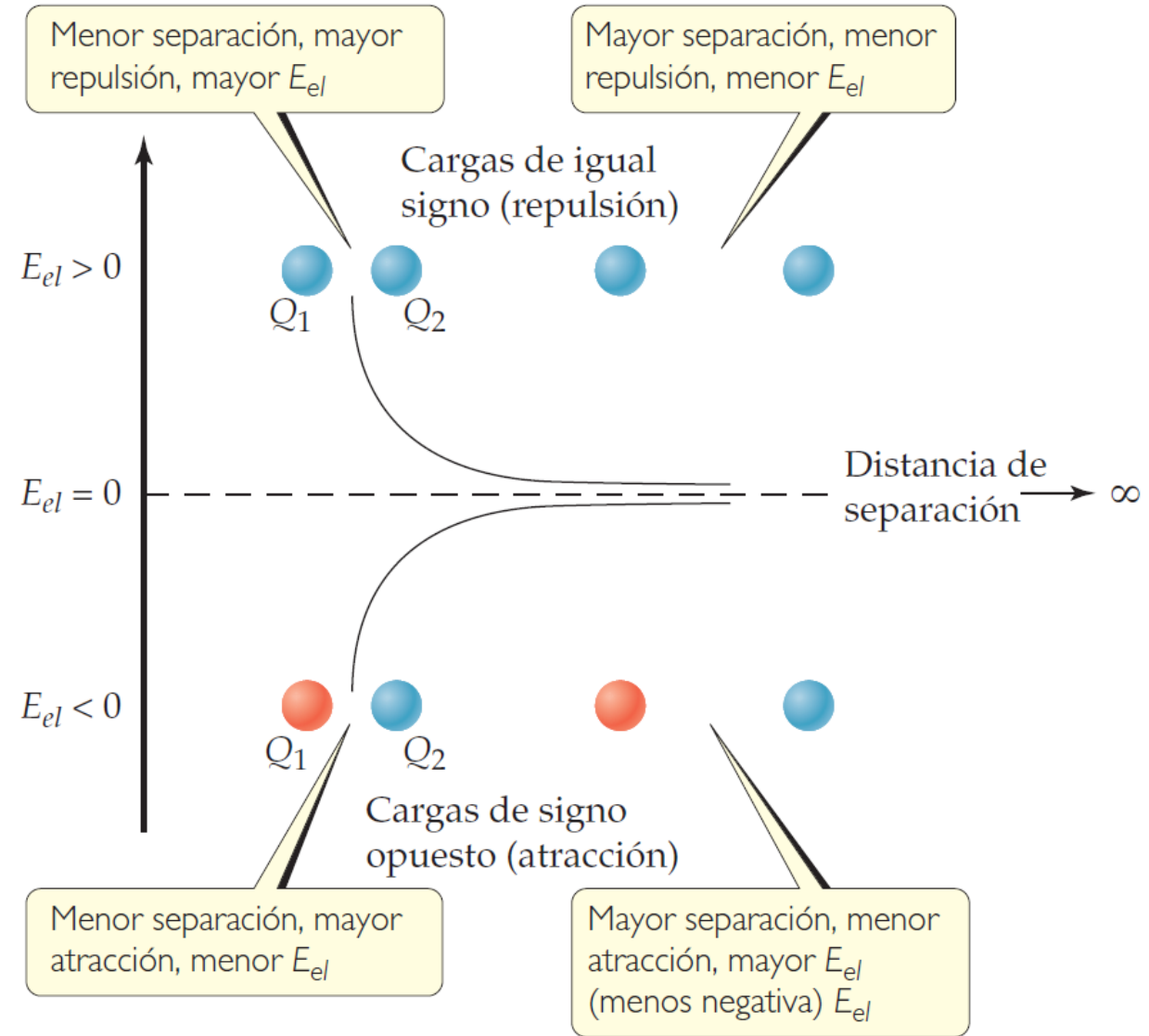
Energía Potencial Electroestática

Aplica para partículas con carga eléctrica. Esta energía es proporcional a las cargas eléctricas de los dos objetos que interactúan, Q_1 y Q_2 , y es inversamente proporcional a la distancia, d , que los separa.

$$k = 8.99 \times 10^9 \text{ J m/C}^2$$

$$Q = 1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$E_{el} = \frac{kQ_1Q_2}{d}$$

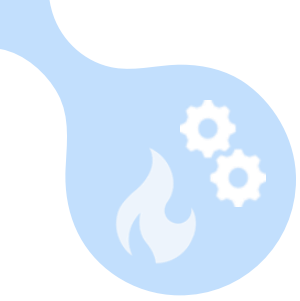


Sistema y Entorno

Cuando se analizan los **cambios de energía**, es necesario enfocar nuestra atención sobre una parte limitada y bien definida del Universo, para así dar seguimiento a los cambios de energía que ocurren.



La parte de estudio delimitada del **Universo** se denomina **Sistema**, que contiene al o los **Cuerpos u Objetos** de estudio. Todo lo demás constituye el **Entorno**.



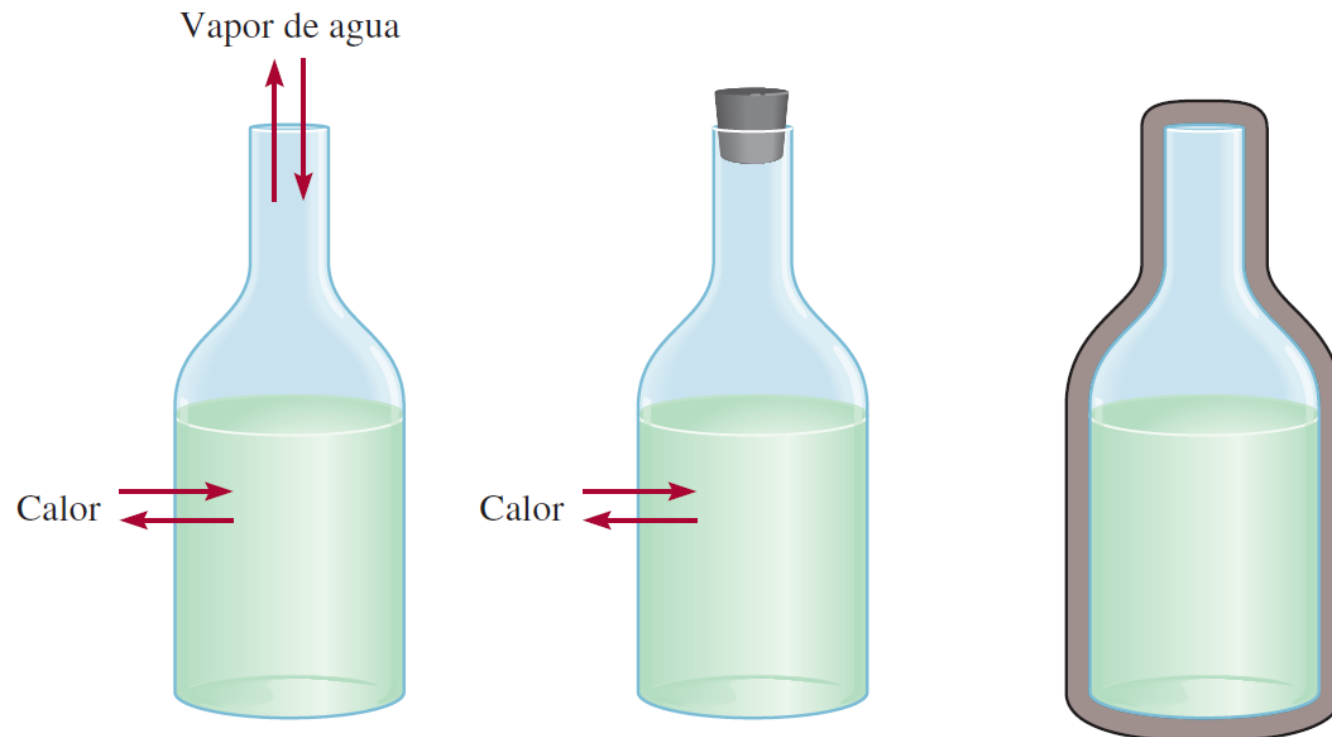
Sistema y Entorno

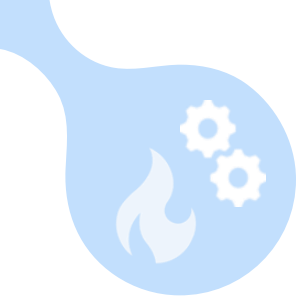
Existen tres tipos de sistemas:

Abiertos: Permiten el intercambio de materia y energía con el entorno.

Cerrados: Permiten el intercambio de calor con el entorno, pero no de materia.

Aislados: No permiten el intercambio de materia ni energía con el entorno.





Energía Interna

Calor: Es la energía empleada para incrementar la temperatura de un objeto

El calor siempre se transfiere de un cuerpo de mayor T a otro de menor T

ENERGÍA SUMINISTRADA

Generalmente por transferencia de calor

$$\text{Calor} = \text{Energía Interna} + \text{Trabajo}$$



ENERGÍA INTERNA

Energía absorbida, manifestada en forma de trabajo

ENERGÍA LIBRE

Energía no absorbida. Relacionada con la espontaneidad del proceso



Energía Interna

ΔU

ENERGÍA INTERNA

Energía absorbida, manifestada en forma de trabajo



Es una energía **parcial**, suma de la energía cinética y potencial de la partícula a nivel microscópico

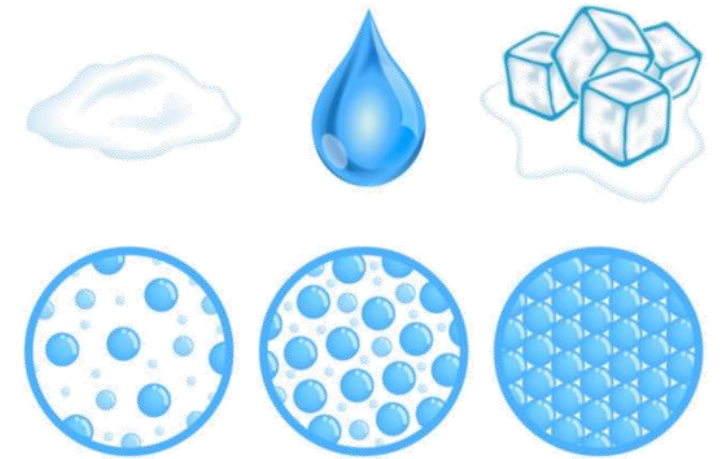


Energía Molecular

E potencial

E cinética molecular

- E vibracional
- E rotacional
- E Traslacional



! La Energía Interna es una **variable de estado**, que depende de las **condiciones inicial y final**, y no de la trayectoria del proceso.

$$\Delta U = U_f - U_i$$

ΔU
Representa cambios en la **temperatura**



Energía Interna

$$\Delta U = U_f - U_i$$

$$\Delta T = T_f - T_i$$

! La Energía Interna es una **variable de estado**, que depende de las **condiciones inicial y final**, y no de la trayectoria del proceso.

$$\Delta U > 0$$

$T_f > T_i$: Hubo absorción de calor

$$\Delta U < 0$$

$T_f < T_i$: Hubo liberación de calor

$$\Delta U = 0$$

$T_f = T_i$: No hubo cambios de temperatura en el proceso

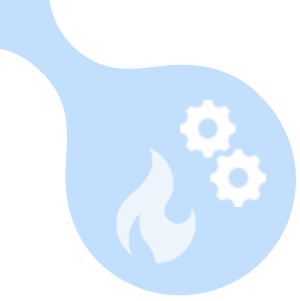
Caliente

Frío



$$\Delta U$$

Representa cambios en la temperatura



Primera Ley de la TD

$$\Delta U_{\text{sist}} = U_f - U_i$$

$$\Delta U_{\text{ent}} = U_f - U_i$$

$$\Delta E_{\text{sist}} + \Delta E_{\text{ent}} = 0$$

La energía que fluye de un sistema al entorno y viceversa no se puede crear ni destruir. La energía solamente se transforma.

La energía en el Universo es constante.

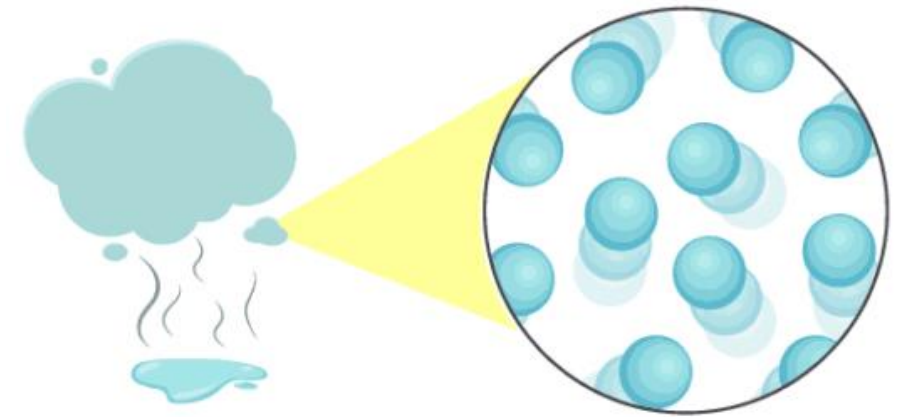


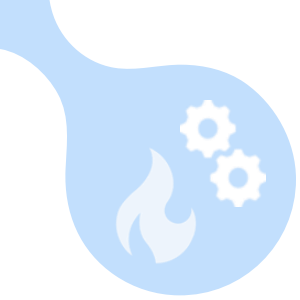
Teoría Cinética Molecular

La materia se encuentra fundamentalmente en tres estados de agregación: **sólido**, **líquido** y **gaseoso** y dependen, fundamentalmente, del nivel de **energía cinética** que tengan sus partículas constitutivas.

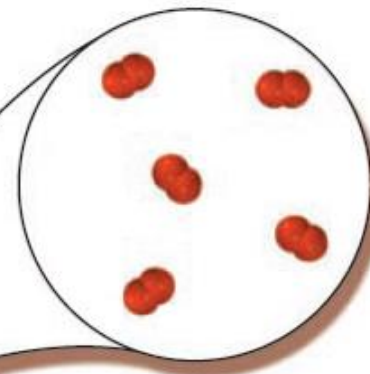
ESTADO GASEOSO:

- Las partículas poseen una energía cinética muy alta.
- No tienen forma ni volumen fijos.
- Experimentan gran variación de volumen al cambiar las condiciones de temperatura y presión.
- Adoptan el tamaño y la forma del lugar que ocupa, llenando todo el espacio del recipiente.
- Se pueden comprimir con facilidad, reduciendo su volumen.
- Se difunden y tienden a mezclarse con otras sustancias gaseosas, líquidas e, incluso, sólidas. También son denominados fluidos.
- Se dilatan y contraen como los sólidos y líquidos.

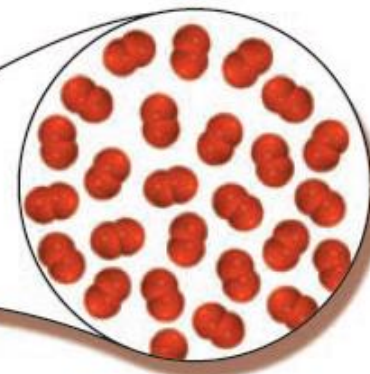




Teoría Cinética Molecular



Br_2 (gas)



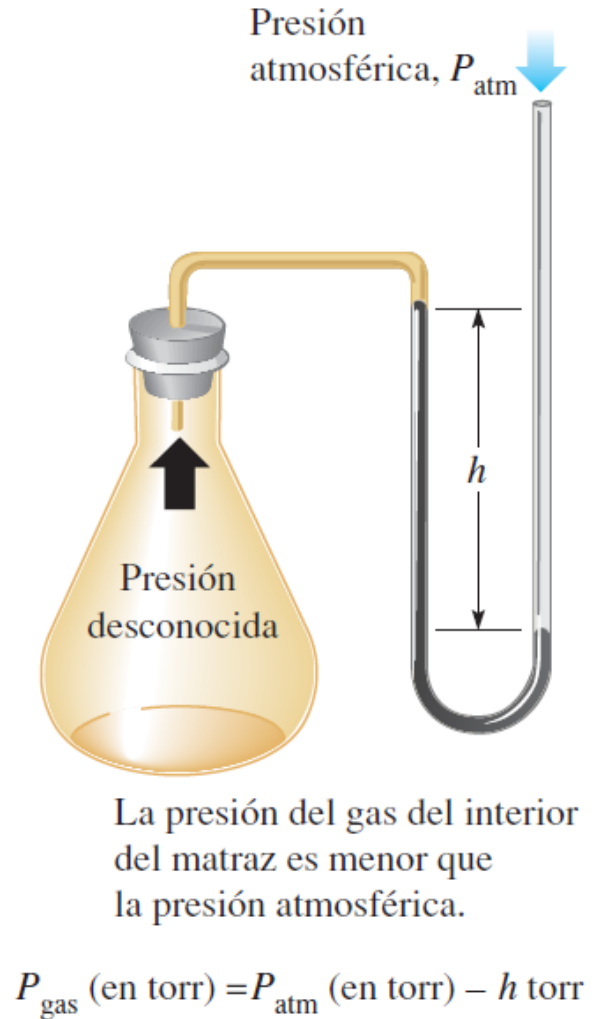
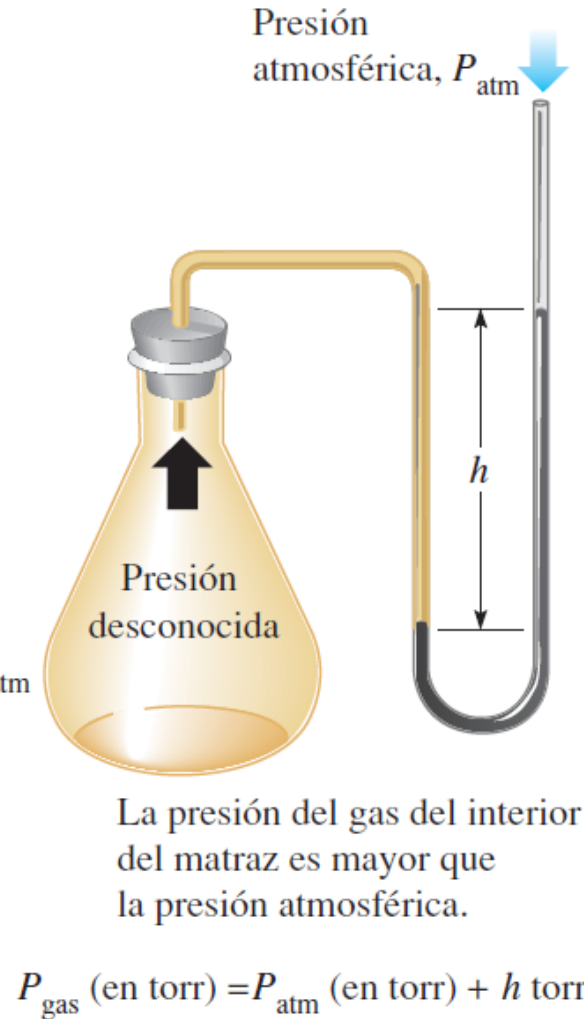
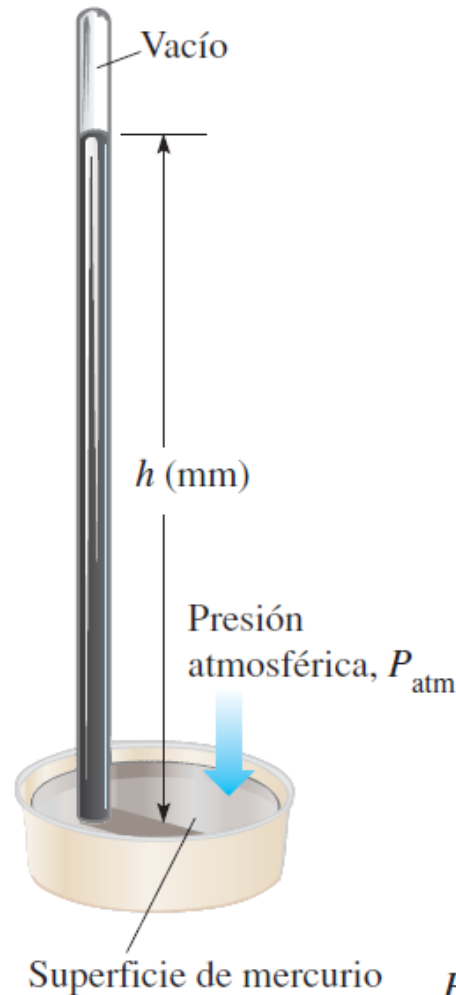
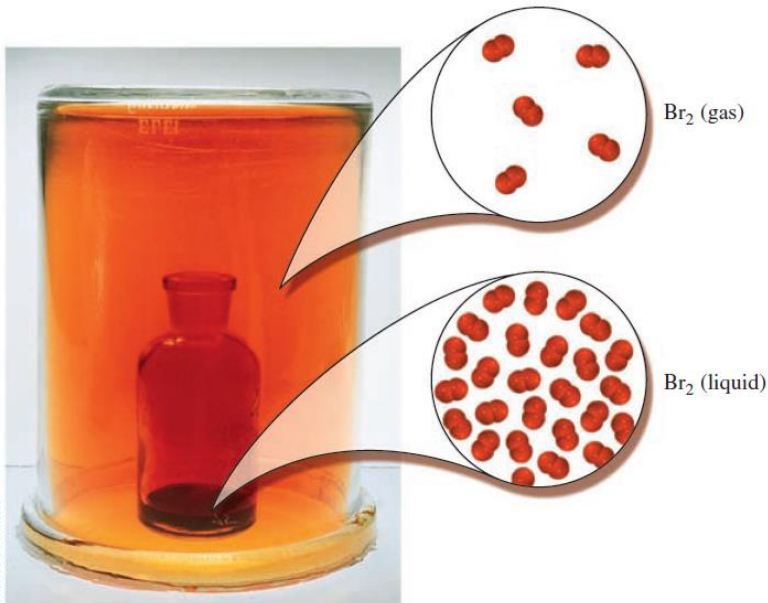
Br_2 (liquid)



Teoría Cinética Molecular

1 torr = 1 mm Hg
1 atm = 760 torr

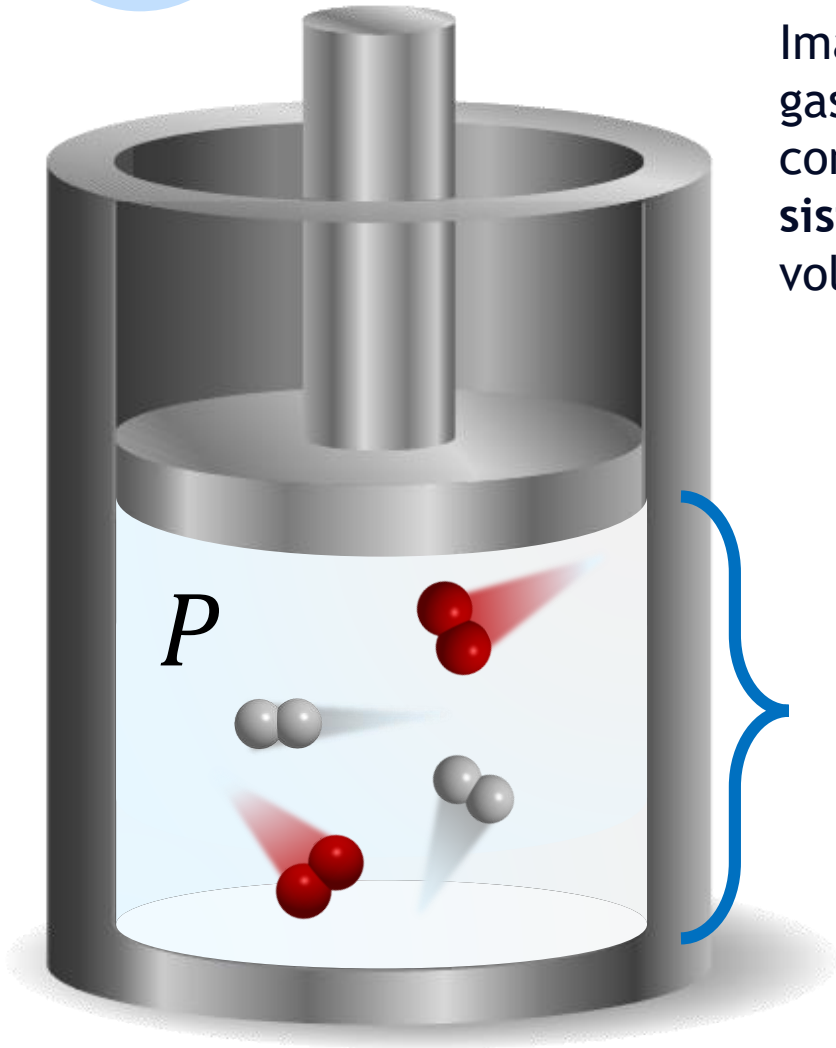
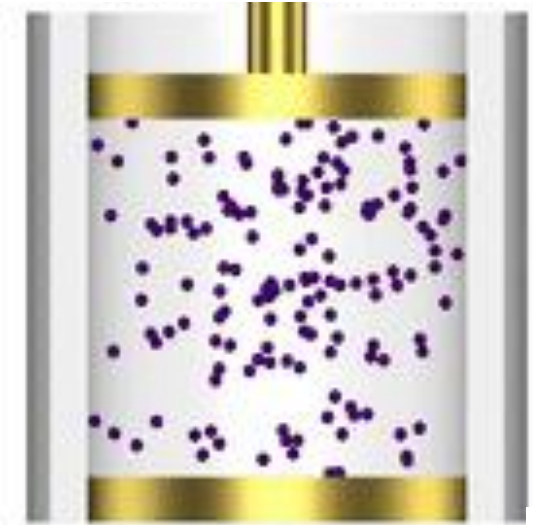
$$P = \frac{F}{A}$$





Teoría Cinética Molecular

Imaginemos que tenemos partículas de gas contenido en un cilindro que contiene una tapa móvil (embolo-pistón, sistema cerrado) y el gas ocupa un volumen V y ejerce una presión P .



V

Un émbolo-pistón es una pieza que se mueve alternativamente en el interior de un cuerpo de bomba o del cilindro de una máquina para comprimir un fluido o recibir de él movimiento.

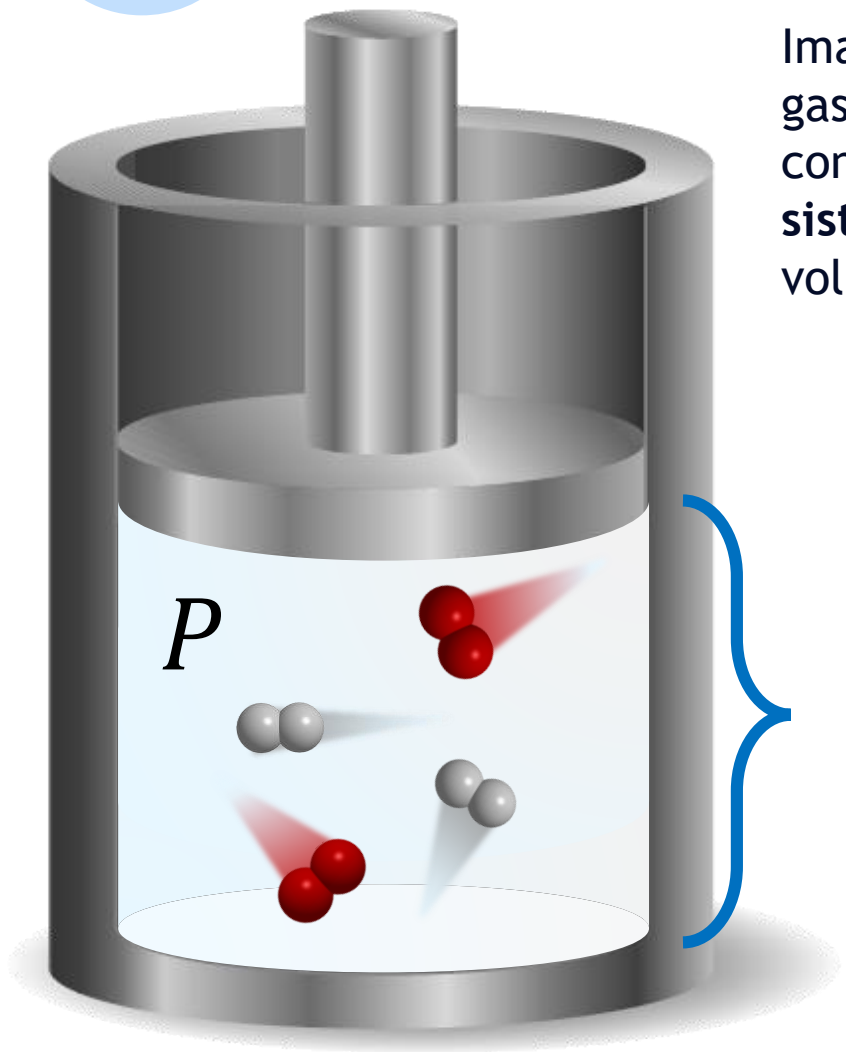
Sistema émbolo-pistón





Teoría Cinética Molecular

Imaginemos que tenemos partículas de gas contenido en un cilindro que contiene una tapa móvil (embolo-pistón, sistema cerrado) y el gas ocupa un volumen V y ejerce una presión P .



Sistema émbolo-pistón

$$w = F * d$$

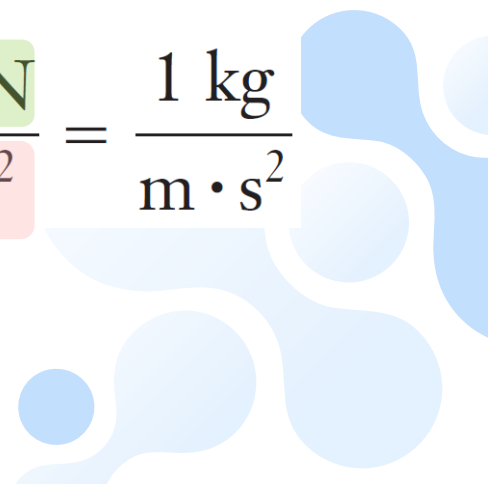
$$P = \frac{F}{A}$$

La unidad de presión en el SI es el Pascal (Pa).

$$1 \text{ atm} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$$
$$1 \text{ atm} = 101.325 \text{ kPa}$$

$$F \quad 1 \text{ N} = \frac{1 \text{ kg} \cdot \text{m}}{\text{s}^2}$$

$$1 \text{ Pa} = \frac{1 \text{ N}}{\text{m}^2} = \frac{1 \text{ kg}}{\text{m} \cdot \text{s}^2}$$





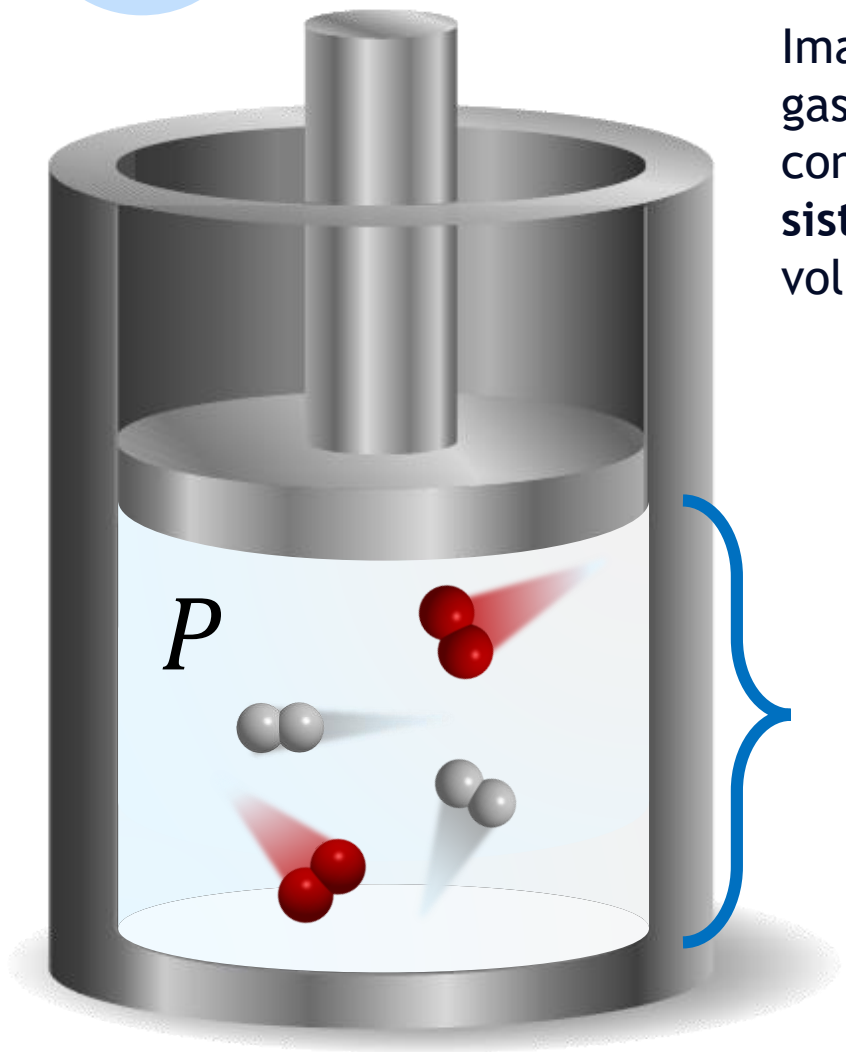
Teoría Cinética Molecular

Imaginemos que tenemos partículas de gas contenido en un cilindro que contiene una tapa móvil (embolo-pistón, sistema cerrado) y el gas ocupa un volumen V y ejerce una presión P .

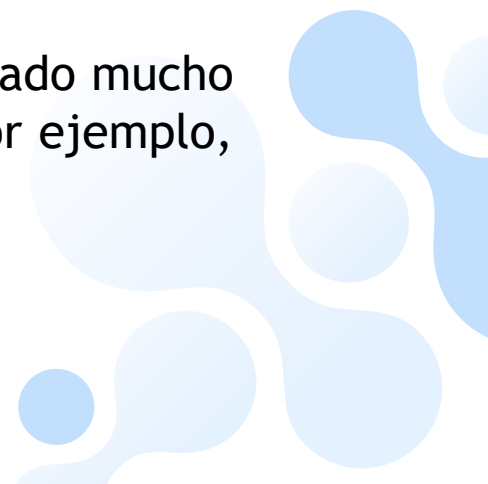
Ya hemos visto que el trabajo se define como una fuerza F multiplicada por una longitud d :

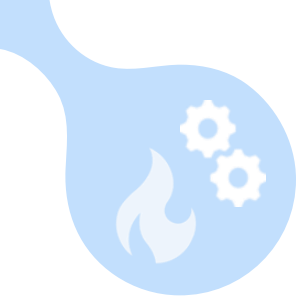
$$w = F * d$$

En termodinámica, el trabajo tiene un significado mucho más amplio que incluye **trabajo mecánico** (por ejemplo, una grúa que levanta una barra de acero).



Sistema émbolo-pistón





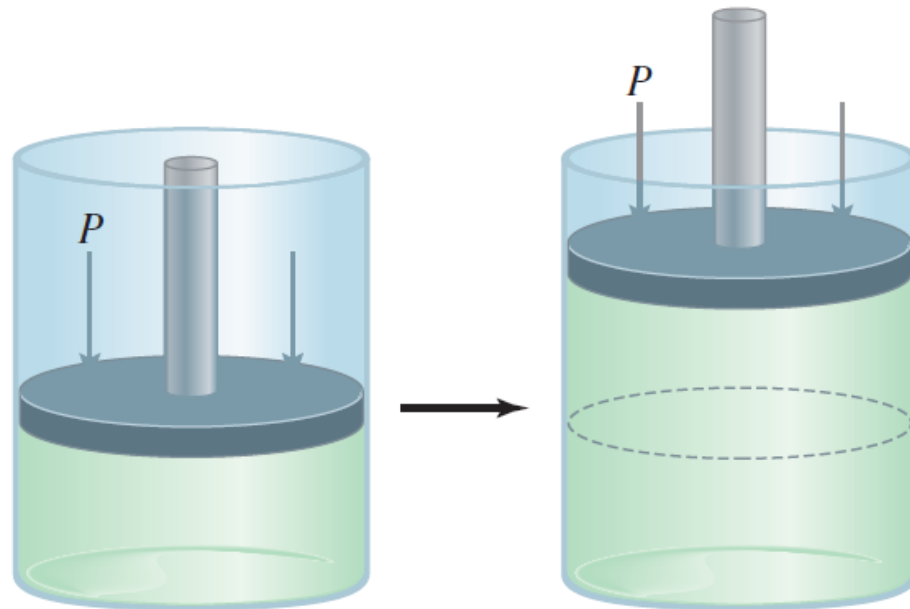
Teoría Cinética Molecular

Una manera de ejemplificar el trabajo mecánico se logra mediante el estudio de la **expansión o compresión de un gas**. Cuando se expande, el gas empuja el pistón hacia arriba en contra de la presión atmosférica externa P , que es constante, aumentando su volumen (ΔV).

$$w = -P\Delta V$$

$$P \times V = \frac{F}{d^2} \times d^3 = F \times d = w$$

presión volumen



Expansión: Aumenta el volumen

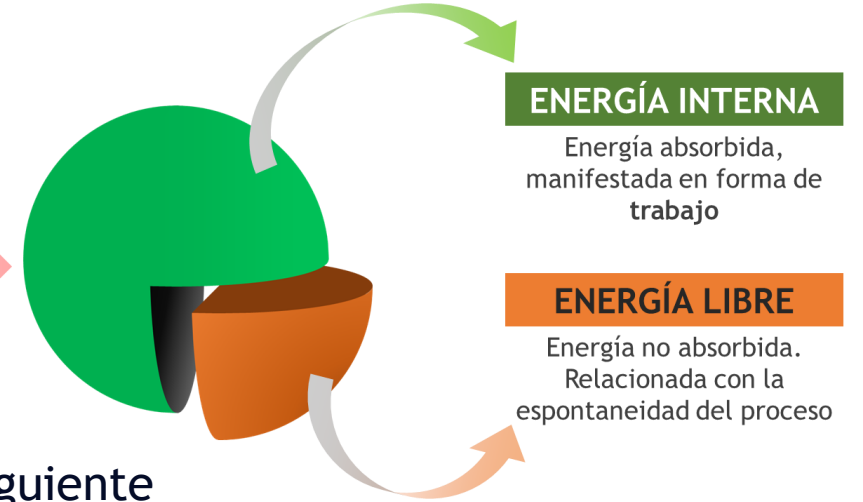
Compresión: Disminuye el volumen

$$\Delta V = V_f - V_i$$



Relación Calor y Trabajo

ENERGÍA SUMINISTRADA
Generalmente por transferencia de calor

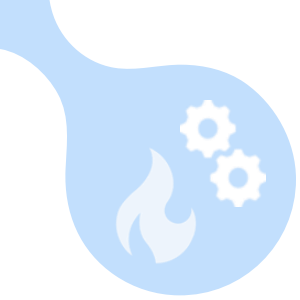


Por convención, se adoptan los valores de calor y de trabajo de la siguiente manera:

Proceso	Signo
Trabajo realizado por el sistema sobre los alrededores	-
Trabajo realizado sobre el sistema por los alrededores	+
Calor absorbido por el sistema de los alrededores (proceso endotérmico)	+
Calor absorbido por los alrededores del sistema (proceso exotérmico)	-

$$\text{Calor} = \text{Energía Interna} + \text{Trabajo} \quad {}_1Q_2 = \Delta U + {}_1W_2$$

Los subíndices 1 y 2 en Q y w indican que son variables de trayectoria.



Entalpía

ΔU

ENERGÍA INTERNA

Energía absorbida,
manifestada en forma de
trabajo



Es una energía **parcial**,
suma de la energía cinética
y potencial de la partícula
a nivel microscópico

ΔH

ENTALPÍA

Energía absorbida,
manifestada en forma de
trabajo



Es una energía **total**,
representa los cambios de
T, P y V que se presentan a
nivel molecular

Entalpía (gr. *enthalpein*: calentar)

ΔU

Representa cambios en
la temperatura

ΔH

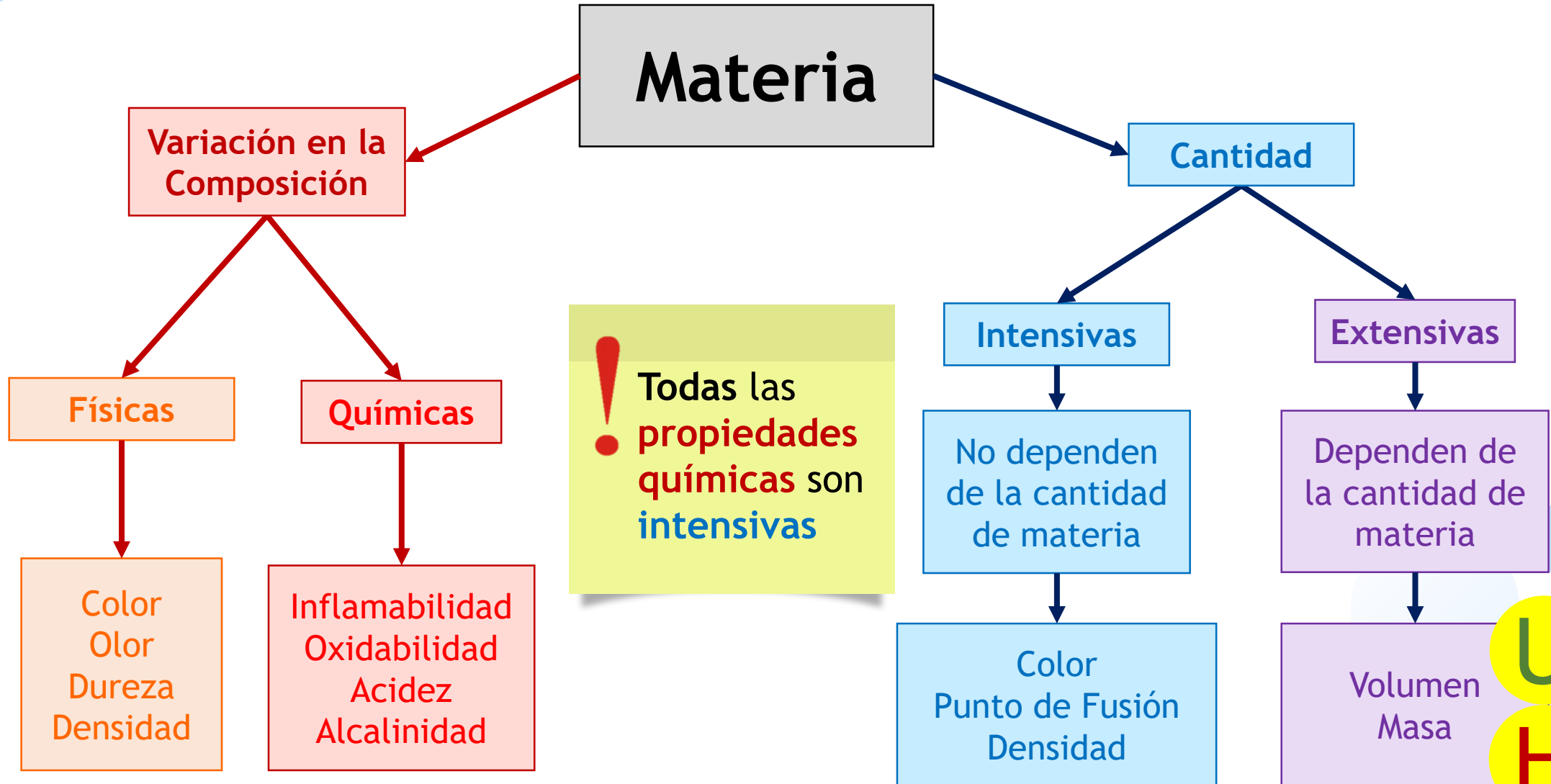
Representa cambios en
la temperatura, presión
y volumen

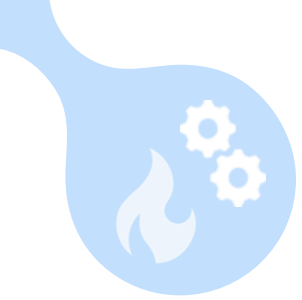
$$H = U + PV$$

$$H = U$$

Para sólidos y líquidos

Propiedades de la Materia





Energías

Calóricas
(Dependen de T)

ΔU ΔH Variables de estado

${}_1Q_2$ Variable de trayectoria

No Calóricas
(No dependen de T)

${}_1W_2$ Variable de trayectoria

Procesos

T \longrightarrow Isotérmicos (Temperatura constante)

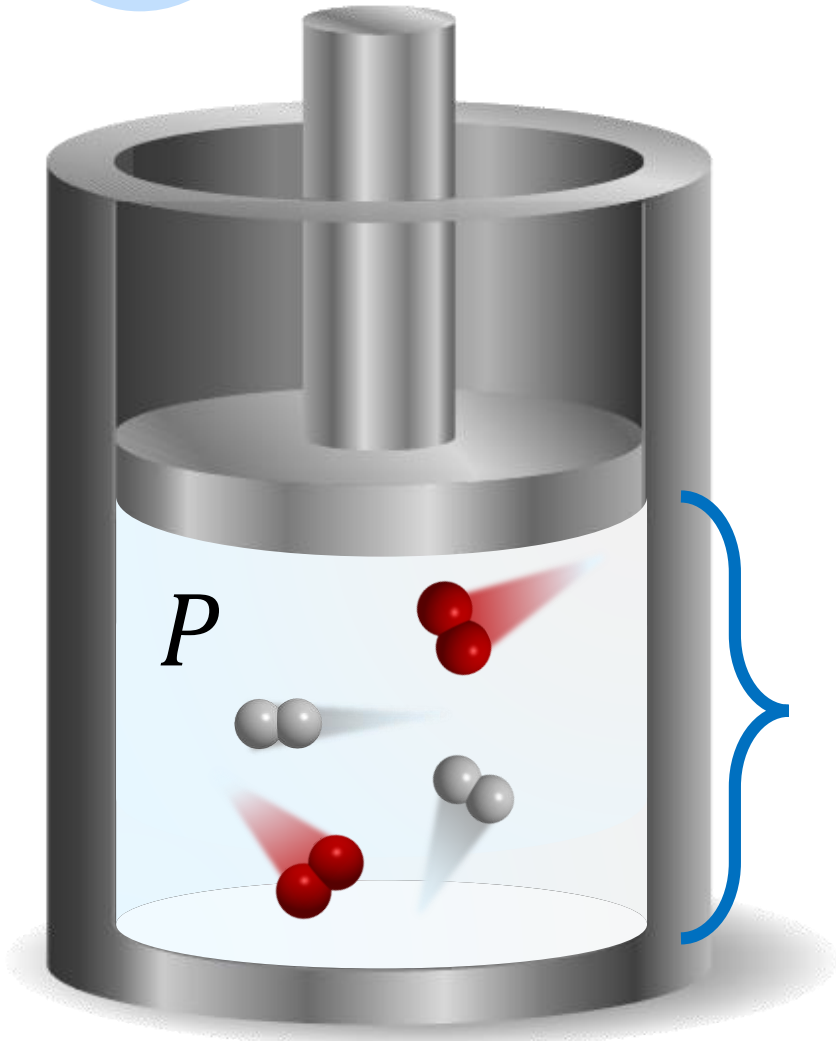
P \longrightarrow Isobáricos (Presión constante)

V \longrightarrow Isocóricos (Volumen constante)

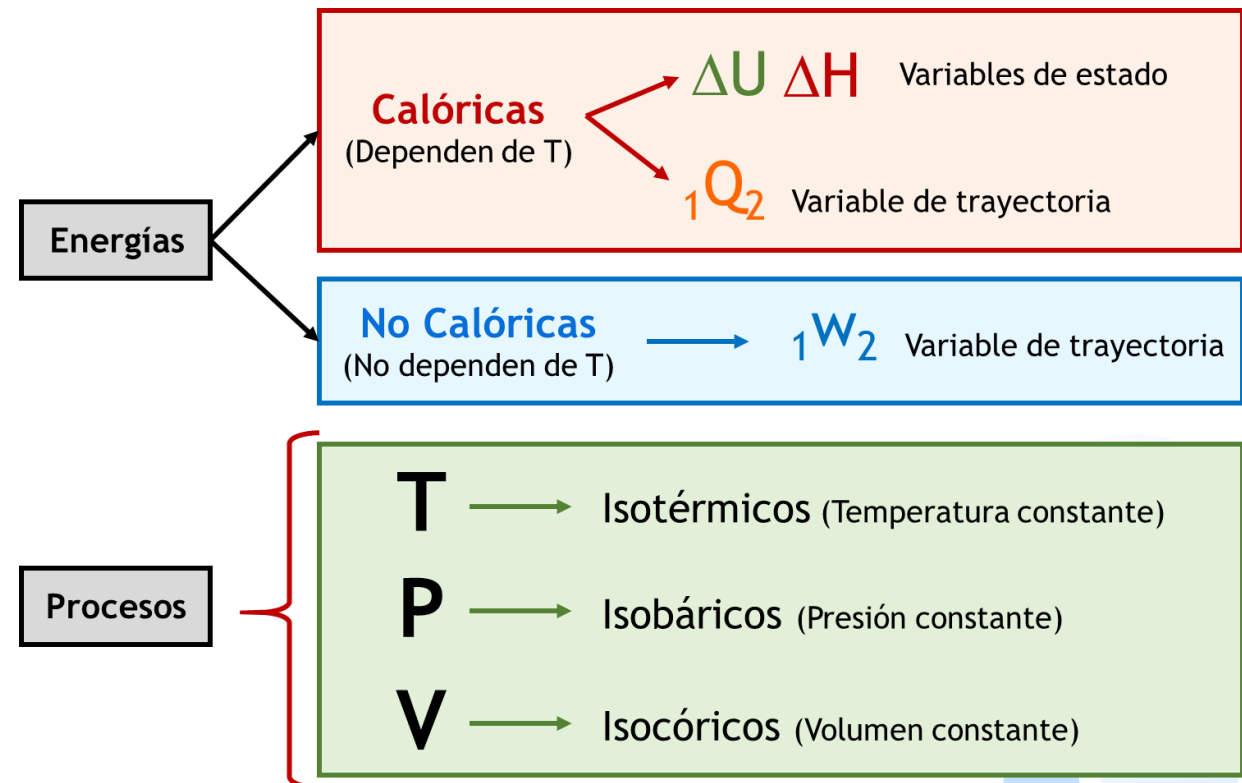


Teoría Cinética Molecular

Supongamos que en el sistema cerrado, tenemos un mol (**1 mol**) de un gas. Vamos a ver los distintos comportamientos de las **energías**, **T**, **P** y **V** cuando una de las variables de los procesos queda fija (o constante) y las otras dos varían.



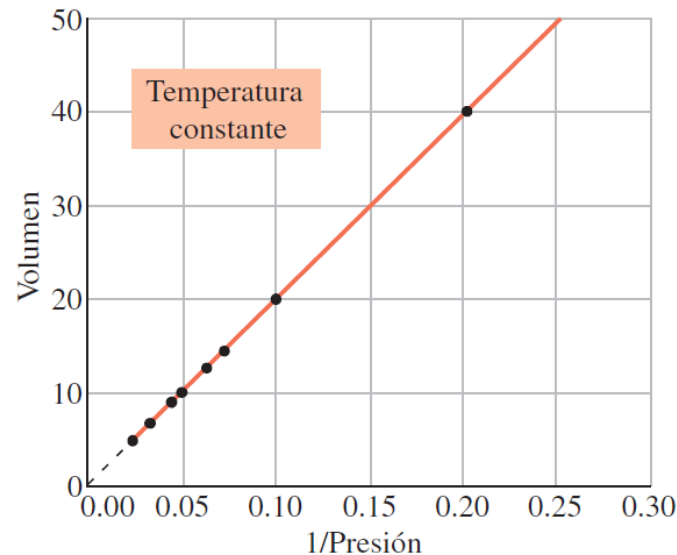
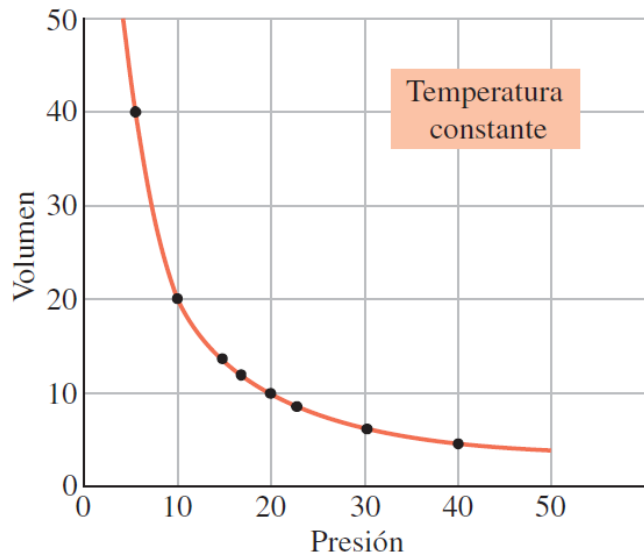
Sistema émbolo-pistón



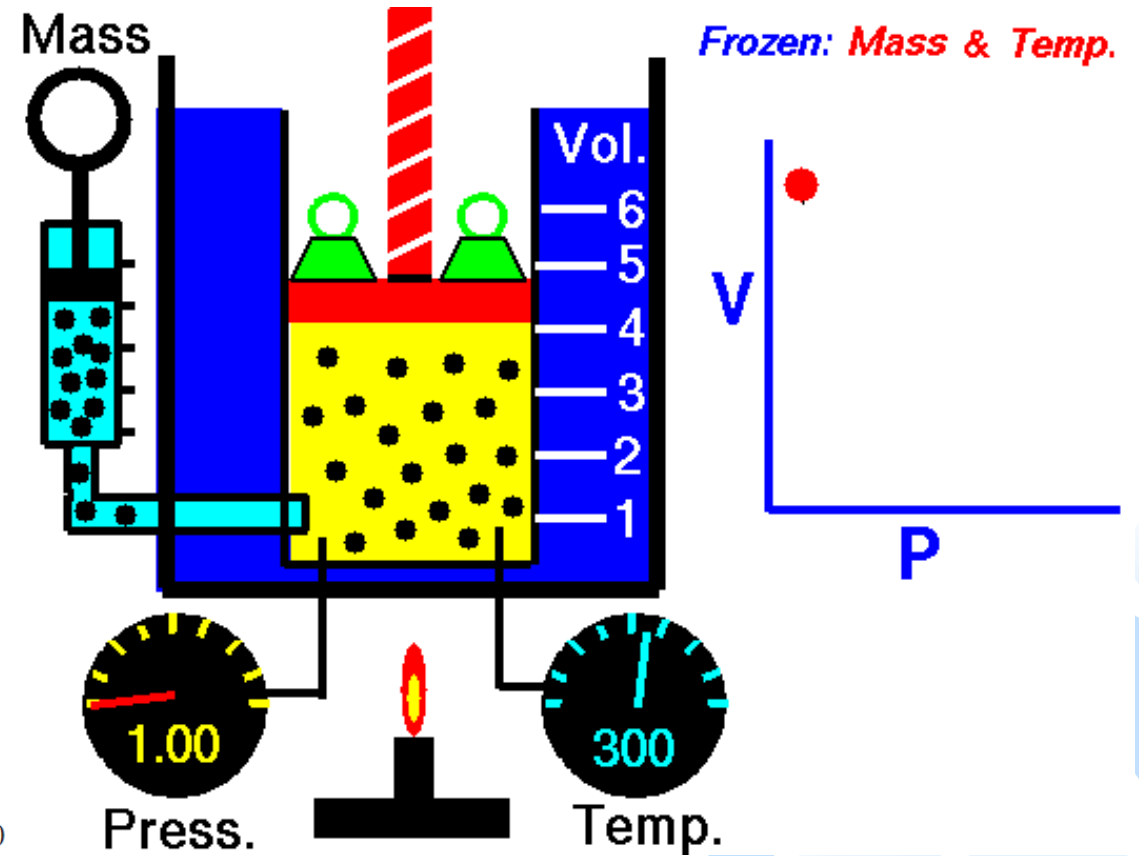
Proceso Isotérmico

En un proceso isotérmico (T constante), para un mol de gas contenido en un sistema cerrado, el volumen varía de manera inversa con los cambios en la presión.

$$V \propto \frac{1}{P} \quad V = k \left(\frac{1}{P} \right) \quad PV = k$$



Procesos	T	→ Isotérmicos (Temperatura constante)
	P	→ Varía
	V	→ Varía



Proceso Isotérmico

En un proceso isotérmico (T constante), para un mol de gas contenido en un sistema cerrado, el volumen varía de manera inversa con los cambios en la presión.

Consideremos una masa fija de gas a T constante, pero en dos condiciones diferentes de P y V.

Debido a que ambos términos son equivalentes, se pueden igualar en una sola ecuación.



Robert Boyle



Edme Mariotte

$$P_1 V_1 = k$$

$$P_2 V_2 = k$$

$$P_1 V_1 = P_2 V_2$$

Ley de Boyle -Mariotte

Proceso Isotérmico

En un proceso isotérmico (T constante), para un mol de gas contenido en un sistema cerrado, el volumen varía de manera inversa con los cambios en la presión.

Como T es constante, se tiene que:

Debido a que hay procesos de **compresión** y **expansión**, estarán involucrados el calor y el trabajo:

$$\Delta U = 0$$

$$\Delta H = 0$$

$${}_1Q_2 \neq 0$$

$${}_1W_2 \neq 0$$

$$P_1 V_1 = P_2 V_2$$

Ley de Boyle -Mariotte

! P en atm
• V en L

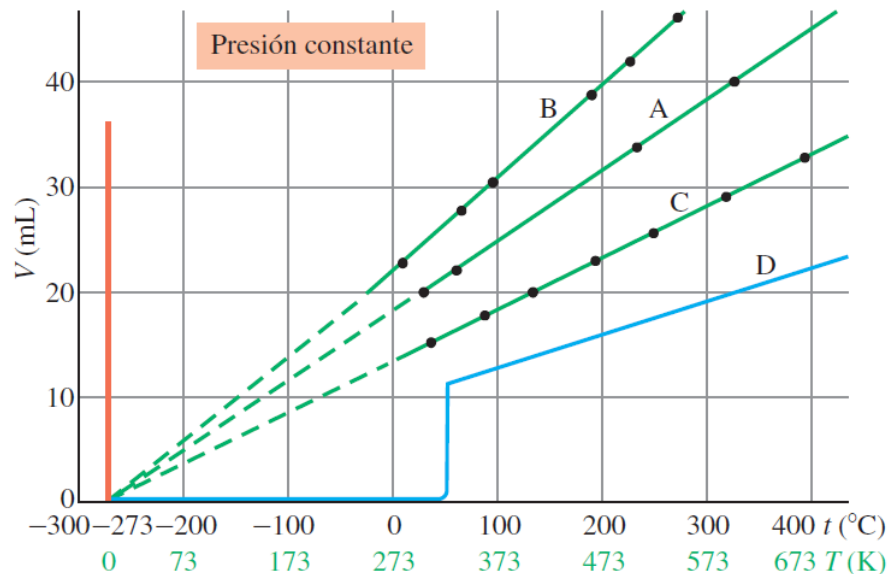
$${}_1Q_2 = {}_1W_2$$

Proceso Isobárico

En un proceso isobárico (P constante), para un mol de gas contenido en un sistema cerrado, el volumen varía de manera directamente proporcional con los cambios en la temperatura.

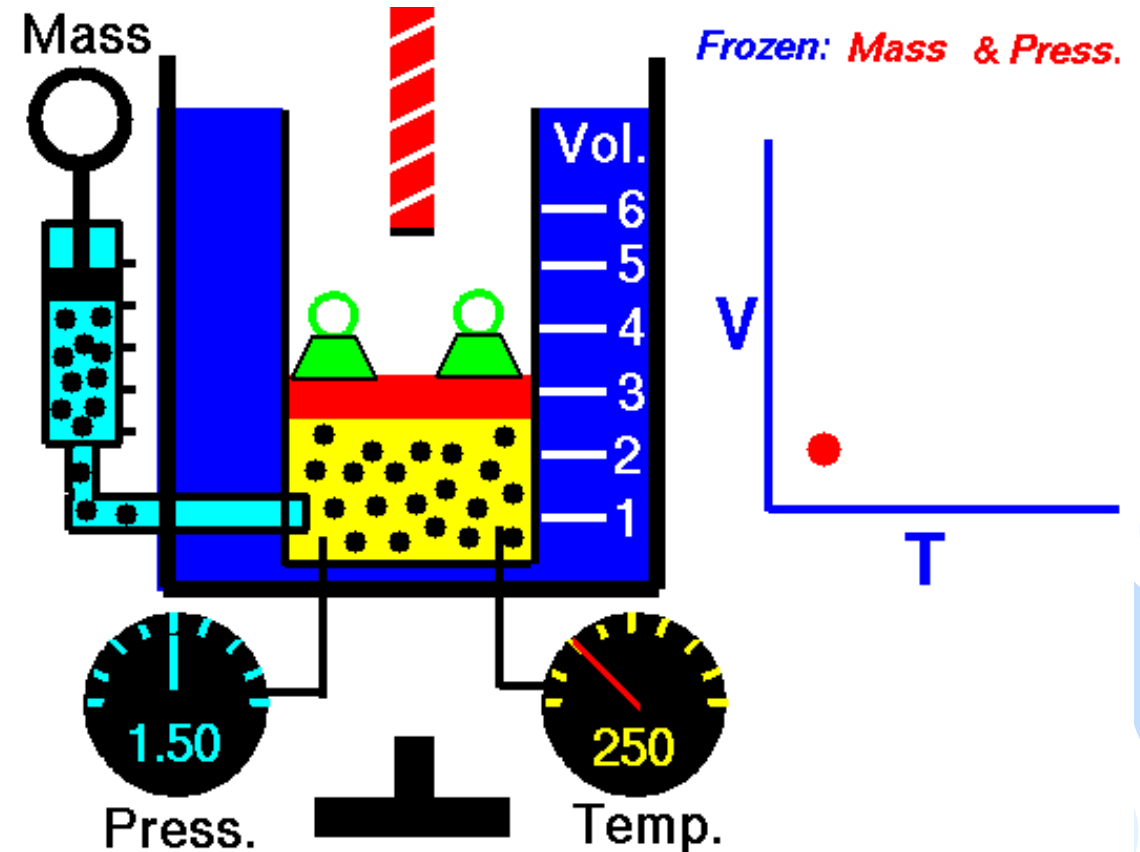
$$V \propto T \quad \frac{V}{T} = k \quad V = kT$$

$t (^{\circ}\text{C})$	$V (\text{mL})$	$T (\text{K})$
27	20.0	300
54	21.8	327
100	24.9	373
127	26.7	400
227	33.3	500
327	40.0	600
427	46.7	700



Procesos

- T → Varía
- P → Isobáricos (Presión constante)
- V → Varía



Proceso Isobárico

En un proceso isobárico (P constante), para un mol de gas contenido en un sistema cerrado, el volumen varía de manera directamente proporcional con los cambios en la temperatura.

Consideremos una masa fija de gas a P constante, pero en dos condiciones diferentes de T y V.

Debido a que ambos términos son equivalentes, se pueden igualar en una sola ecuación.



Jacques Charles

$$\frac{V_1}{T_1} = k \quad \frac{V_2}{T_2} = k$$

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$

Ley de Charles

Proceso Isobárico

En un proceso isotérmico (T constante), para un mol de gas contenido en un sistema cerrado, el volumen varía de manera inversa con los cambios en la presión.

Como T varía se tiene que:

Debido a que hay procesos de **compresión y expansión**, estarán involucrados el calor y el trabajo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta U \neq 0 \\ \Delta H \neq 0 \\ {}_1Q_2 \neq 0 \\ {}_1W_2 \neq 0 \end{array} \right.$$

$$\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$$

Ley de Charles

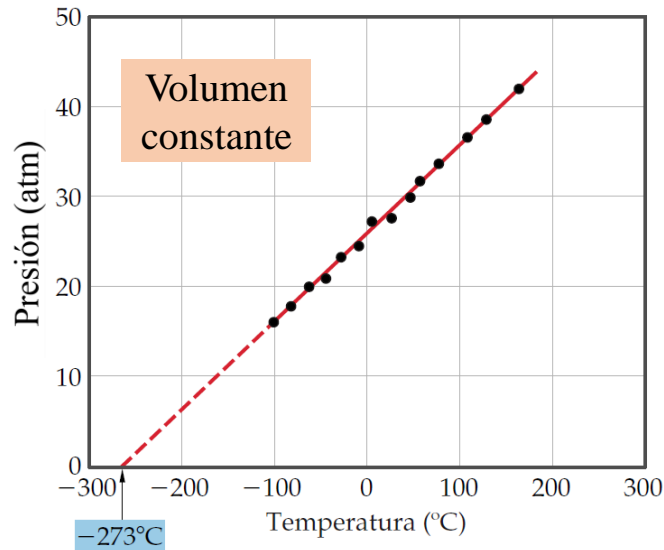
**! T en Kelvin
V en L**

$${}_1Q_2 = \Delta U + {}_1W_2$$

Proceso Isocórico

En un proceso isocórico (V constante), para un mol de gas contenido en un sistema cerrado, la **presión varía de manera directamente proporcional** con los cambios en la temperatura.

$$P \propto T \quad \frac{P}{T} = k \quad P = kT$$

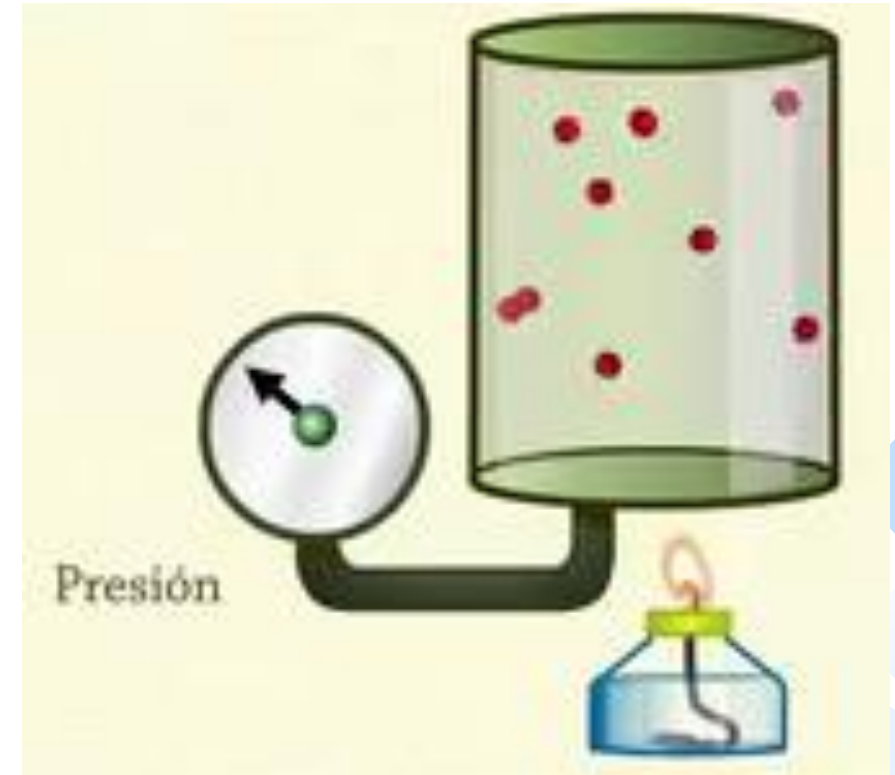


Procesos

T → Varía

P → Varía

V → Isocóricos (Volumen constante)



Proceso Isocórico

En un proceso isocórico (V constante), para un mol de gas contenido en un sistema cerrado, la presión varía de manera directamente proporcional con los cambios en la temperatura.

Consideremos una masa fija de gas a P constante, pero en dos condiciones diferentes de T y V.

Debido a que ambos términos son equivalentes, se pueden igualar en una sola ecuación.



Louis Joseph Gay-Lussac

$$\frac{P_1}{T_1} = k \quad \frac{P_2}{T_2} = k$$

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$$

Ley de Gay-Lussac

Proceso Isocórico

En un proceso isocórico (V constante), para un mol de gas contenido en un sistema cerrado, la presión varía de manera directamente proporcional con los cambios en la temperatura.

Como T varía se tiene que:

Debido a que hay variación de T , están involucrados procesos de **absorción o liberación de calor**, sin embargo, como el V es constante **no hay compresión ni expansión** y, por lo tanto, no habrá trabajo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta U \neq 0 \\ \Delta H \neq 0 \\ {}_1Q_2 \neq 0 \\ {}_1W_2 = 0 \end{array} \right.$$

$$\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$$

Ley de Gay-Lussac

! T en Kelvin
 P en atm

$${}_1Q_2 = \Delta U$$

Proceso Adiabático

En un proceso adiabático o aislado, para un mol de gas la relación entre las variables resulta en una combinación de las tres leyes anteriores.

Como T varía se tiene que:

Debido a que hay variación de T, P y V están involucrados procesos de **compresión y expansión**, por lo tanto, se realizará algún trabajo. No obstante, al ser un sistema aislado, **no hay transferencia de calor** con el entorno:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta U \neq 0 \\ \Delta H \neq 0 \\ {}_1Q_2 = 0 \\ {}_1W_2 \neq 0 \end{array} \right.$$

$$\frac{P_1 V_1}{T_1} = \frac{P_2 V_2}{T_2}$$

! T en Kelvin
• P en atm
V en L

$$\Delta U = -{}_1W_2$$



Calor específico

Cp y Cv están tabulados

$H = U + PV \longrightarrow$ Isobárico (Presión constante) $\longrightarrow C_p$ Calor Específico a Presión constante

$${}_1Q_2 = \Delta H$$

$$\Delta H = nC_p(T_2 - T_1)$$

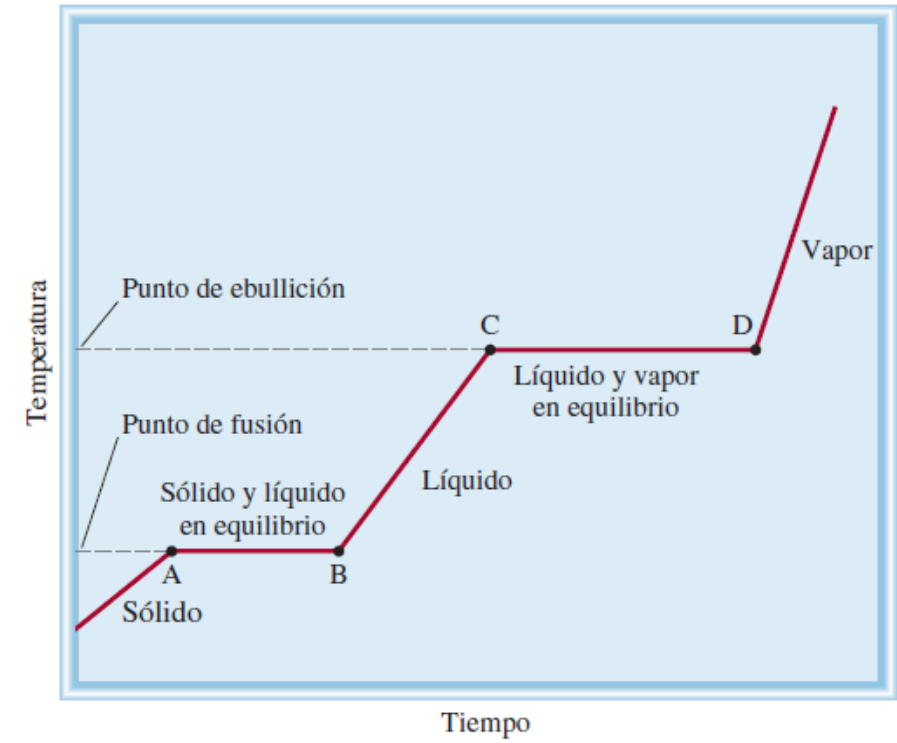
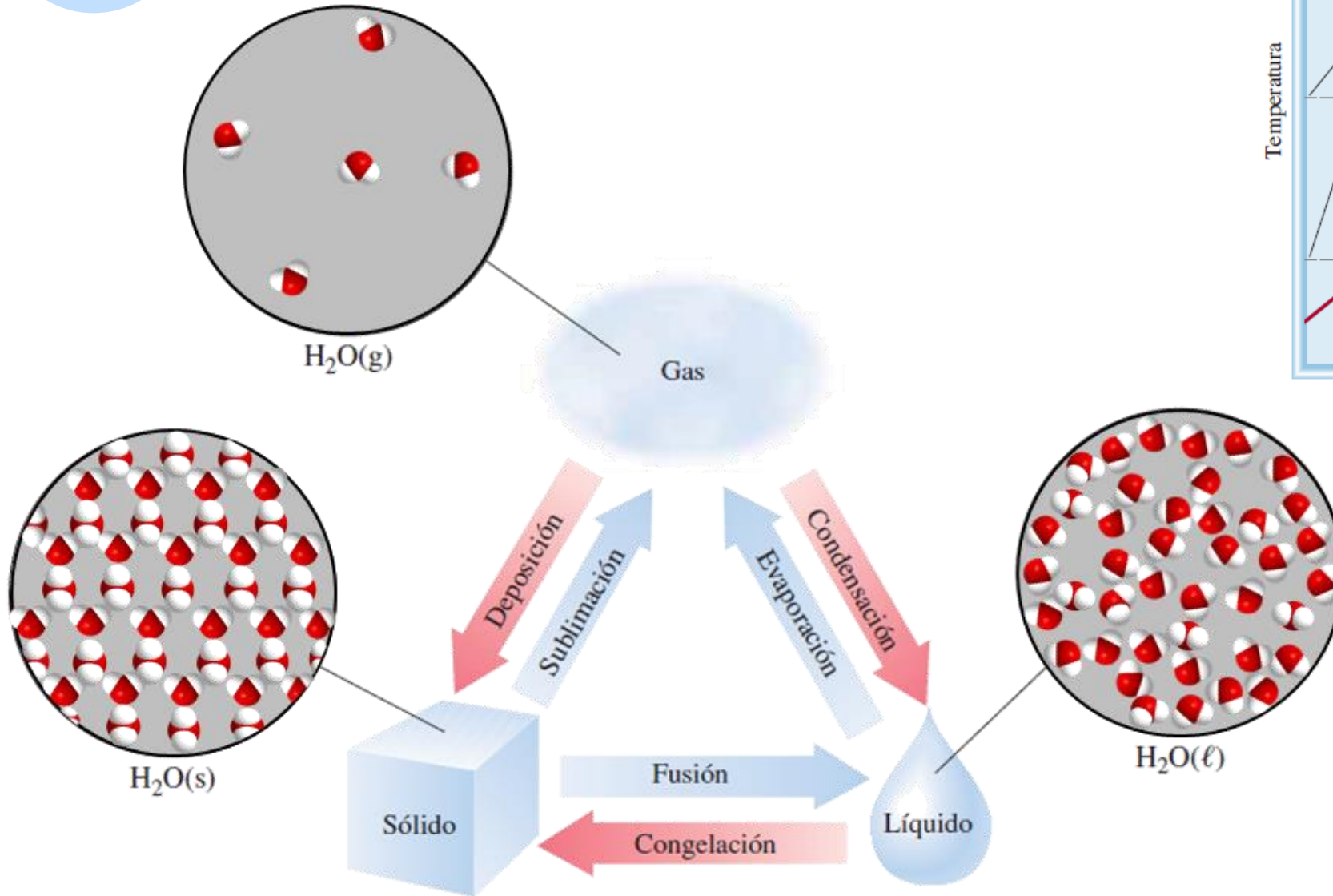
$H = U$
Para sólidos y líquidos \longrightarrow Isocórico (Volumen constante) $\longrightarrow C_v$ Calor Específico a Volumen constante

$${}_1Q_2 = \Delta U$$

Para S y L:
 $C_p \cong C_v$

$$\Delta U = nC_v(T_2 - T_1)$$

Cambios de estado





Cambios de estado

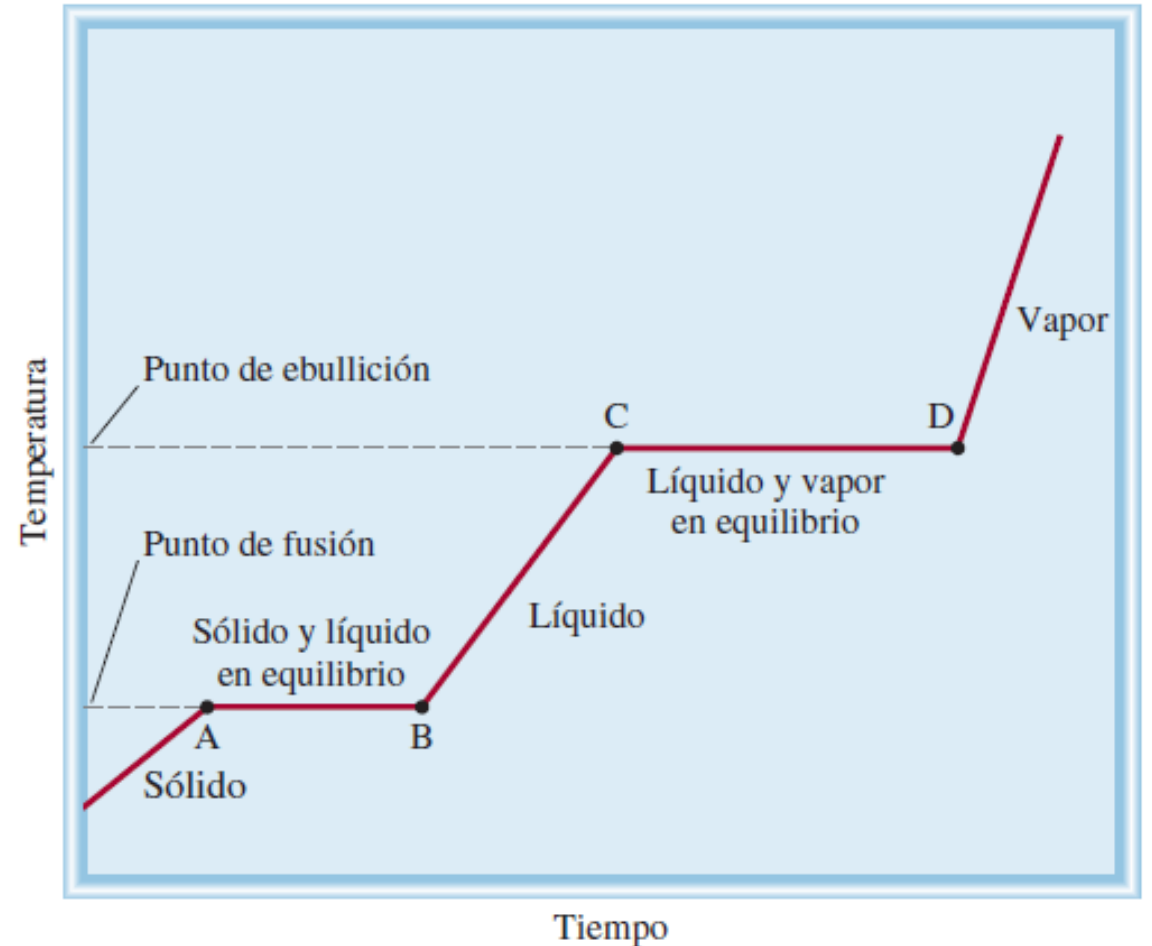
El sólido existe como tal a temperaturas por debajo del punto A.

En el tramo A-B existe un equilibrio Sólido-Líquido, a temperatura constante. Todo el sólido se convierte en líquido y se presenta el fenómeno de **Fusión**.

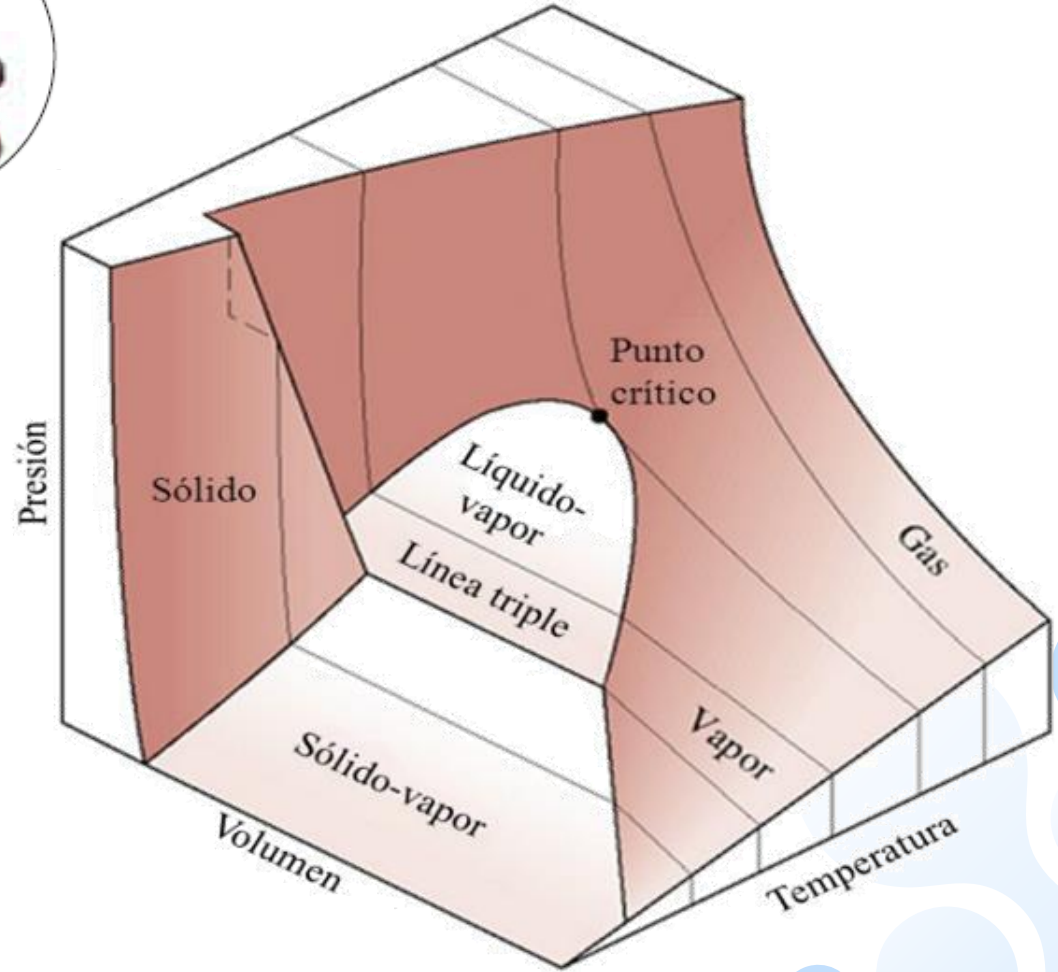
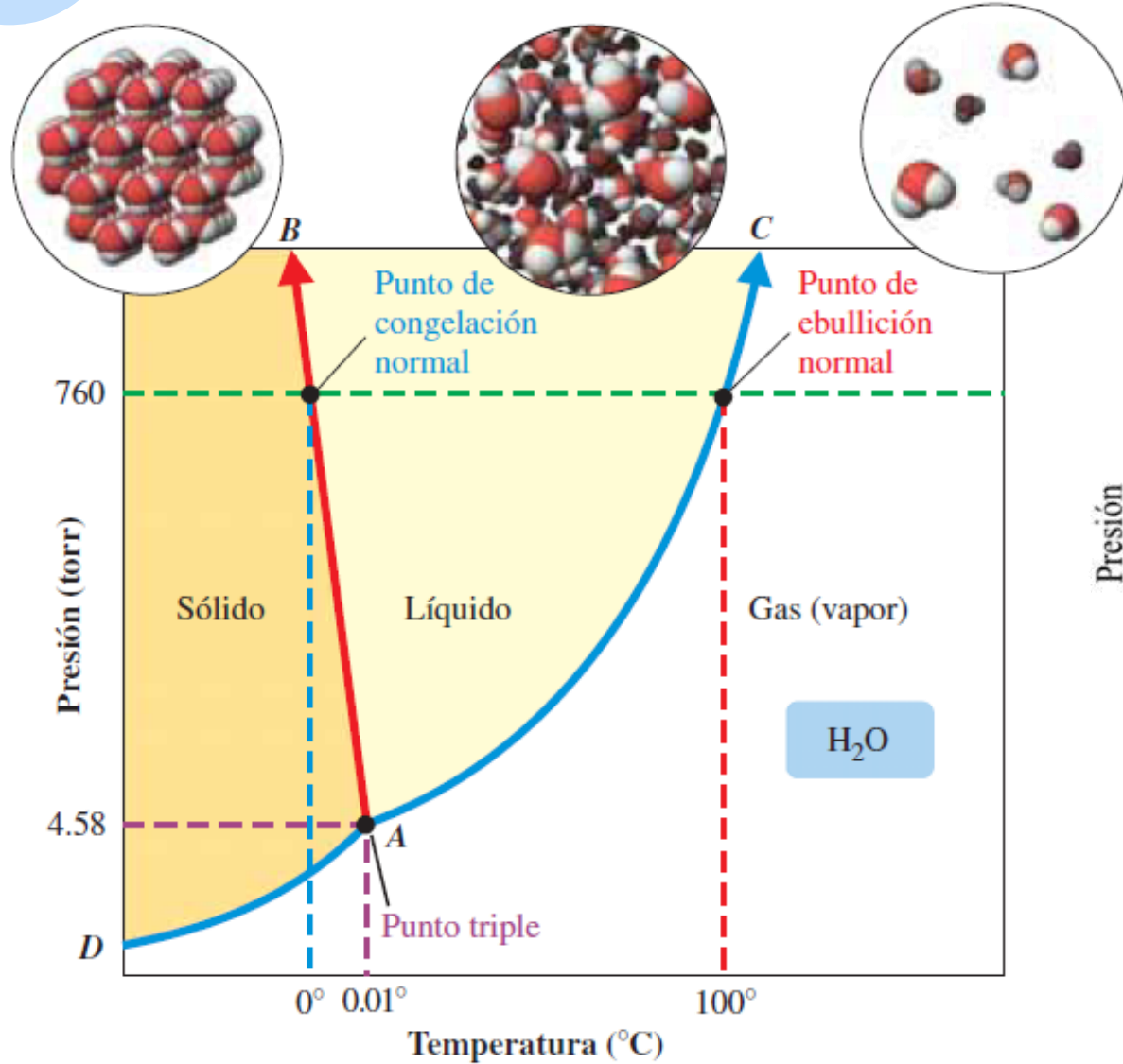
Al seguir calentando, el líquido aumenta su temperatura hasta el punto C.

En el tramo C-D existe un equilibrio Líquido-Vapor, a temperatura constante. Todo el líquido se convierte en vapor y se presenta el fenómeno de **Vaporización**.

Por encima del punto D, toda la sustancia se encuentra como vapor.

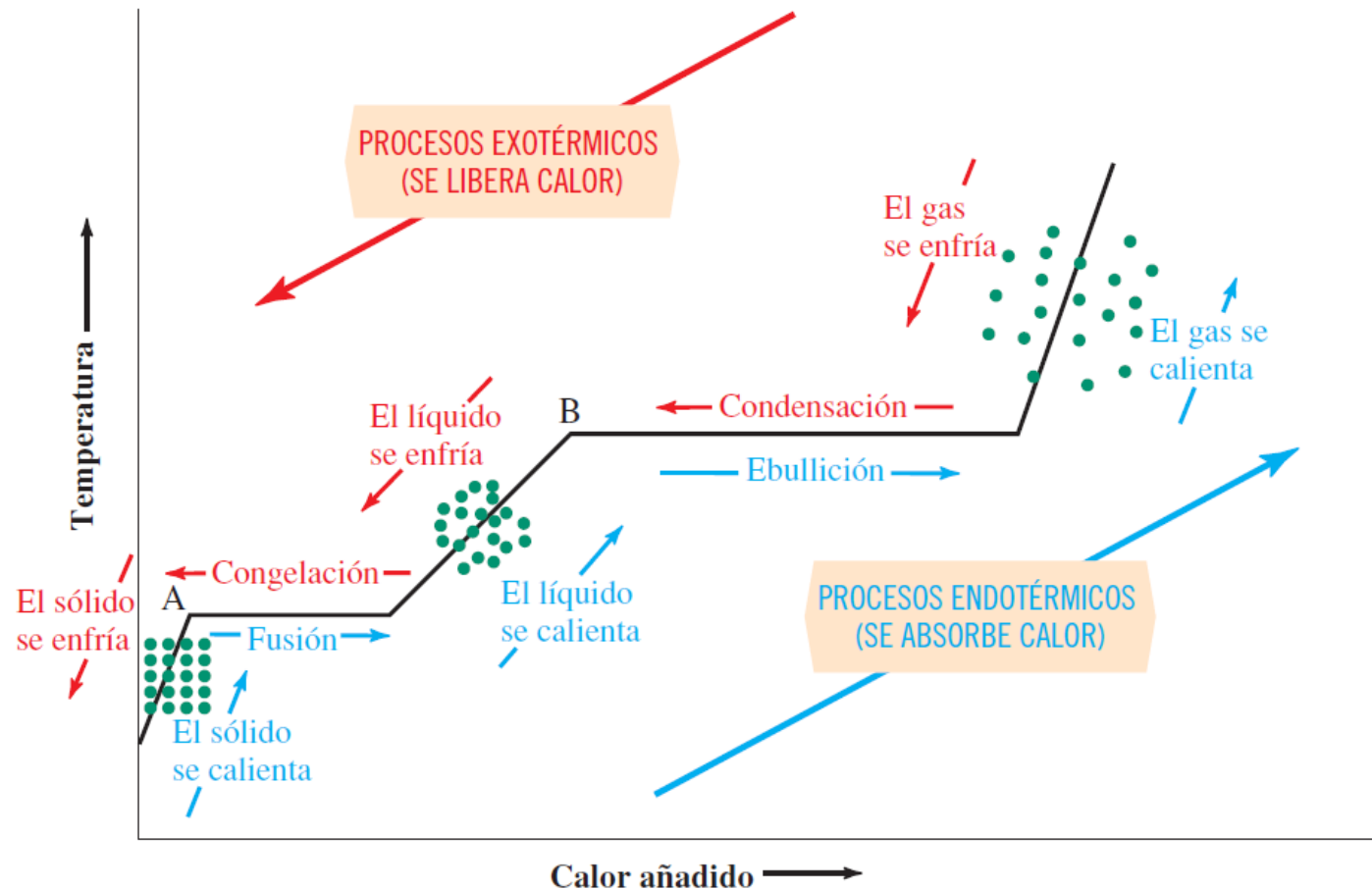


Cambios de estado

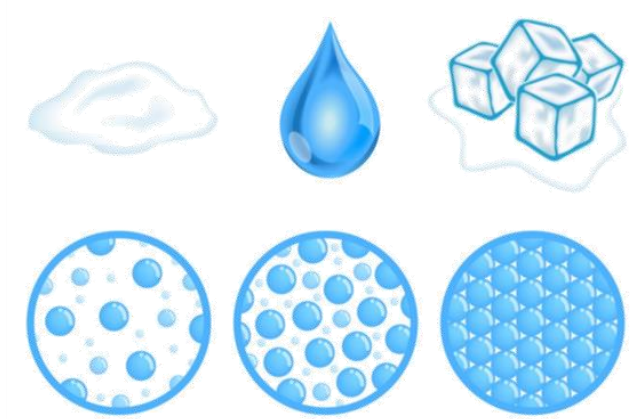


Calor sensible y Calor latente

Las entalpías explican los fenómenos físicos relacionados con los cambios de estado.

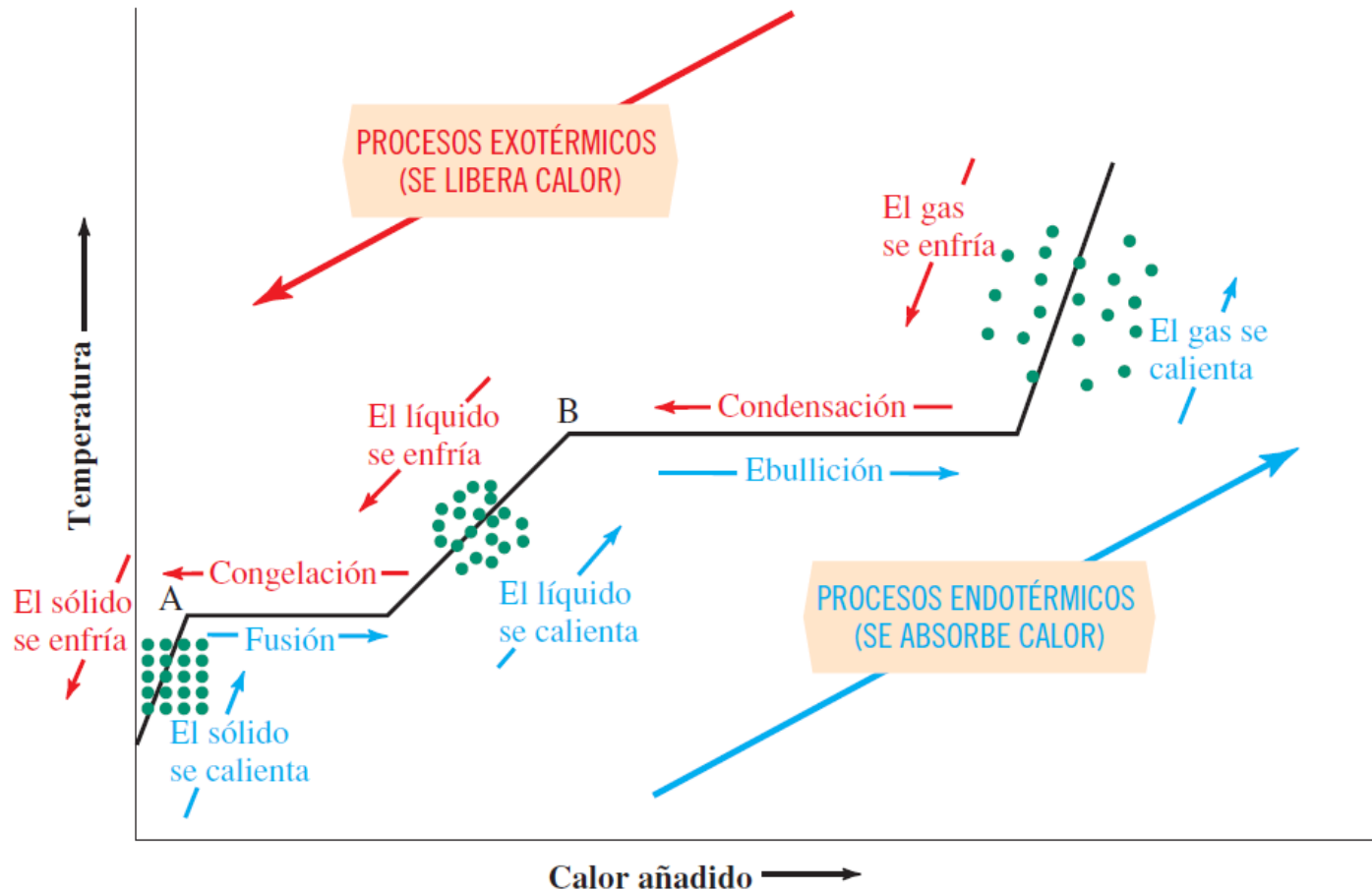


Caliente Frío

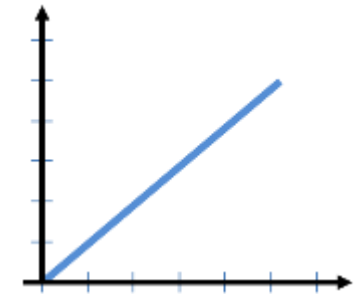


Calor sensible y Calor latente

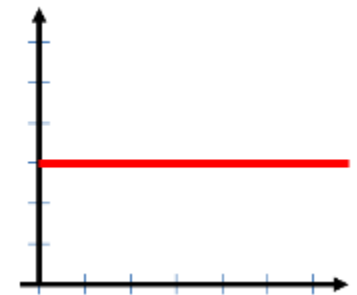
Las entalpías explican los fenómenos físicos relacionados con los cambios de estado.



Un **calor sensible** manifiesta únicamente cambios en la temperatura



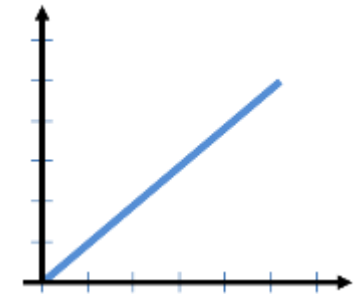
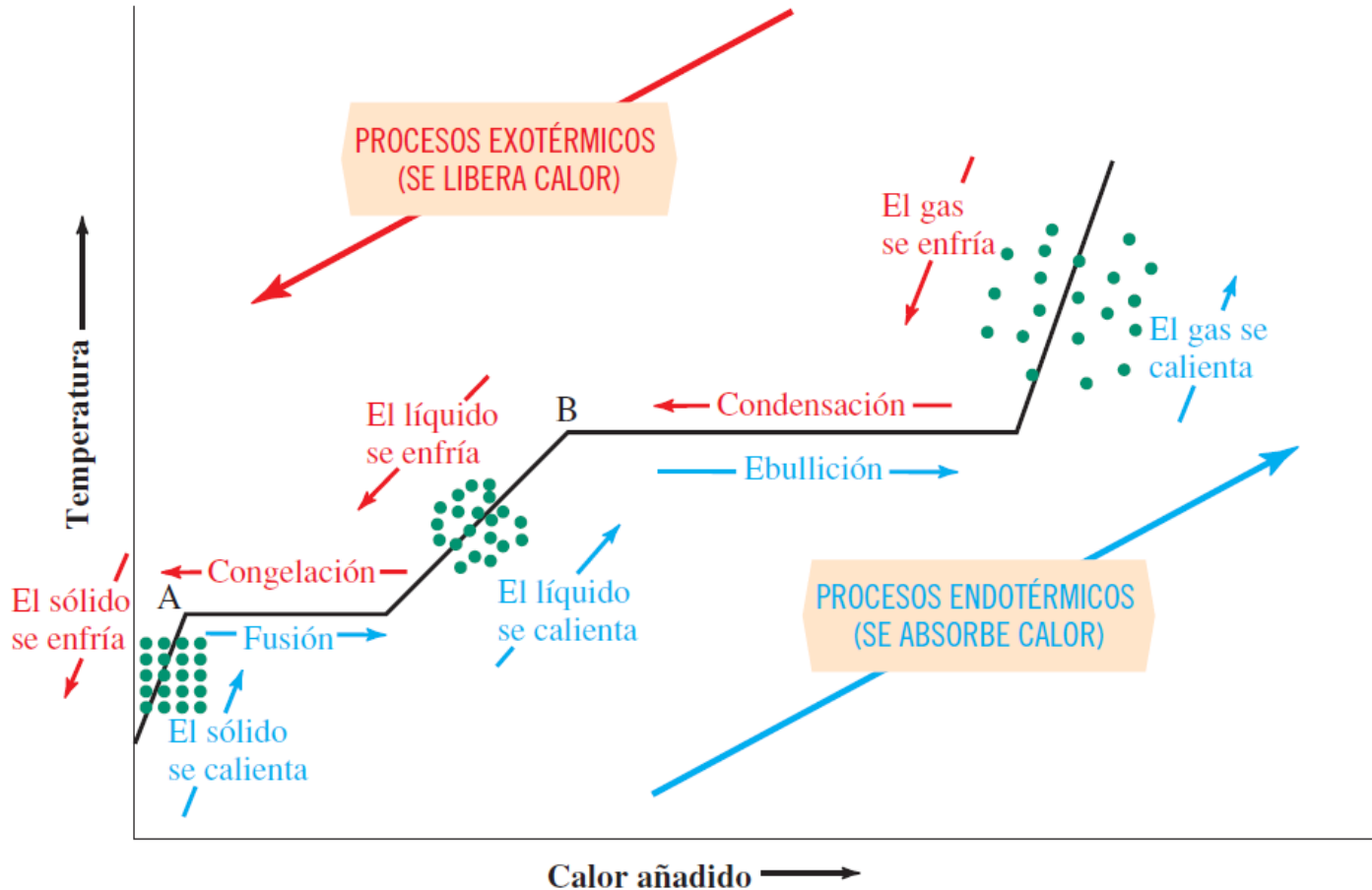
Un **calor latente** implica cambios de estado



Calor sensible y Calor latente

Las entalpías explican los fenómenos físicos relacionados con los cambios de estado.

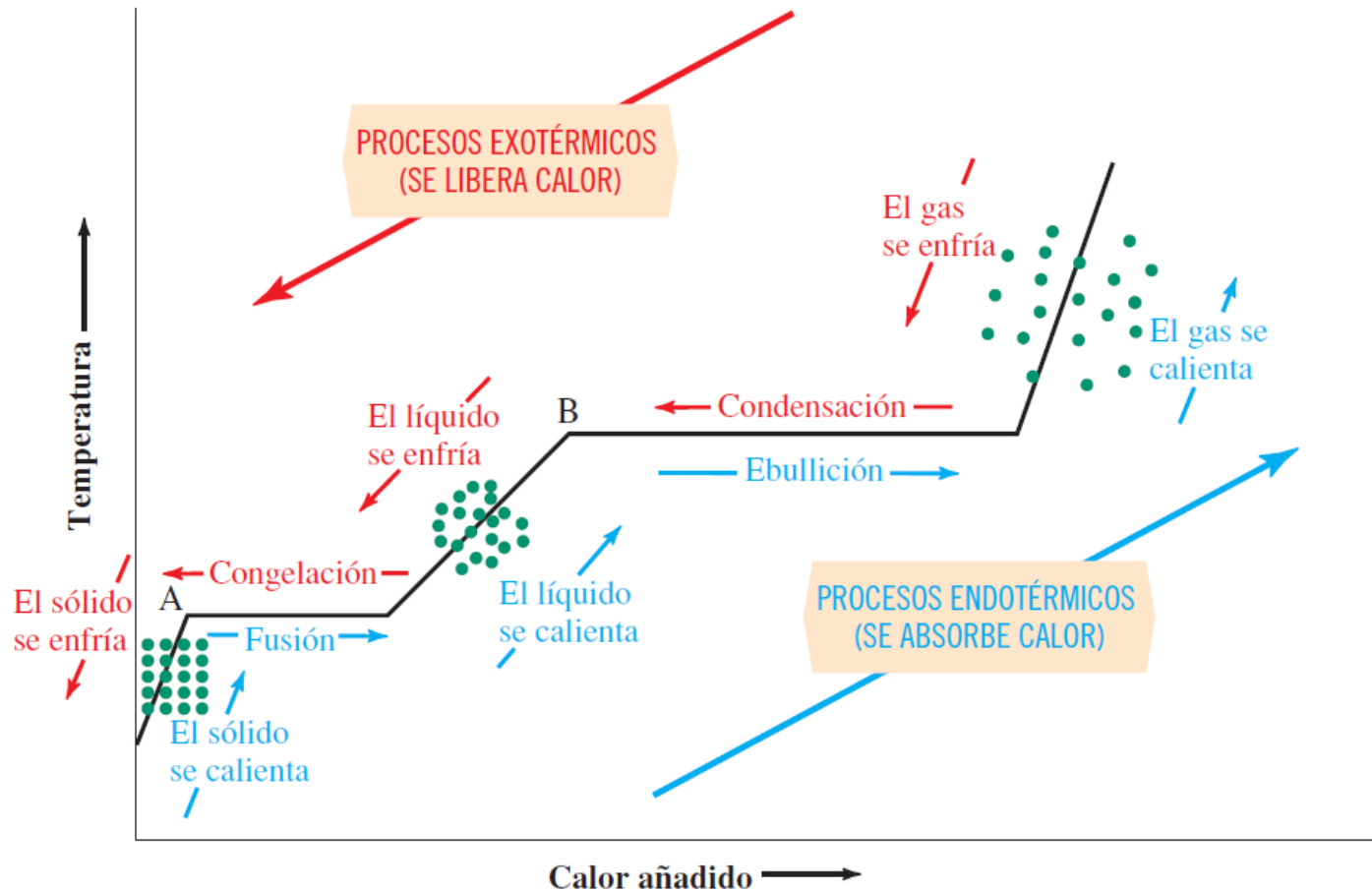
Un **calor sensible** manifiesta únicamente cambios en la temperatura



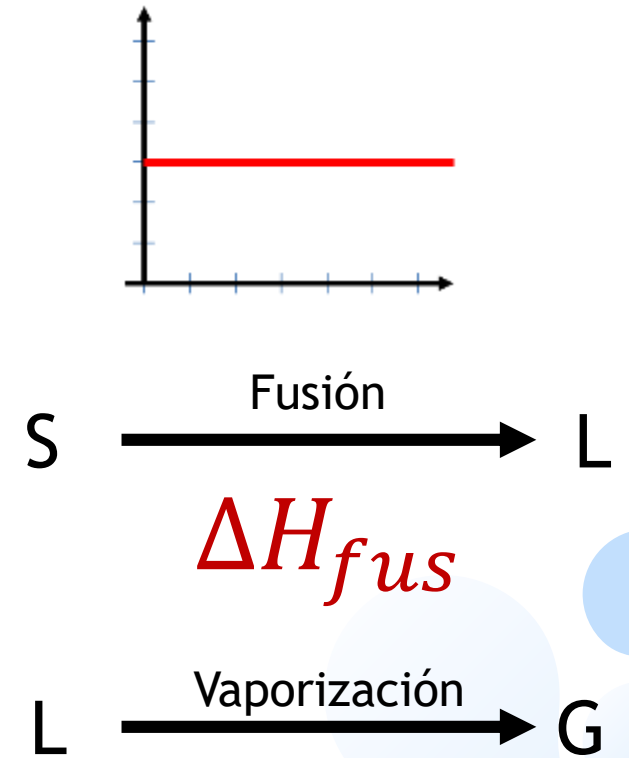
$$\Delta H = nC_p(T_2 - T_1)$$

Calor sensible y Calor latente

Las entalpías explican los fenómenos físicos relacionados con los cambios de estado.

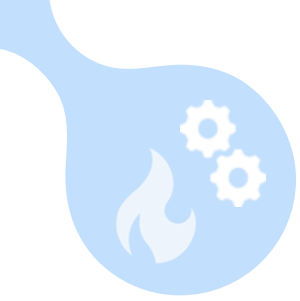


Un **calor latente** implica cambios de estado



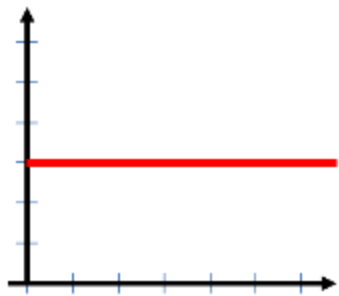
ΔH Están tabulados

$$\Delta H_{vap}$$



Calor sensible y Calor latente

Un **calor latente** implica cambios de estado



S $\xrightarrow{\text{Fusión}}$ L

$$\Delta H_{fus}$$

L $\xrightarrow{\text{Vaporización}}$ G

$$\Delta H_{vap}$$

- ✓ Los procesos de calentamiento implican un calor sensible.
- ✓ Los cambios de estado se llevan a cabo a T constante.
- ✓ **Vaporización:** Cambio de estado de L a G. Se lleva a cabo a la T ebullición
- ✓ **Evaporación:** Cambio de estado de L a G. Se lleva a cabo a T menores a la T de ebullición.



Unidades de ΔH y constante R

Existen valores de entalpías tabulados para procesos físicos y químicos (entalpías de reacción, de combustión, de dilución, de formación, de enlace, etc.). Las unidades más comunes de ΔH son:


$$\Delta H = \frac{\text{cal}}{\text{mol}} \quad \Delta H = \frac{\text{cal}}{\text{g}}$$

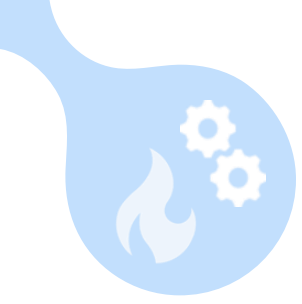
$$\Delta H = \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \quad \Delta H = \frac{\text{kJ}}{\text{g}}$$

Existe una constante termodinámica (R) establecida en relación con el volumen, la presión, la temperatura y la cantidad de sustancia, y tiene distintos valores de acuerdo con sus unidades:

$$R = 0,082 \left[\frac{\text{atm L}}{\text{mol K}} \right]$$

$$R = 1,987 \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol K}} \right]$$

$$R = 8,314 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol K}} \right]$$




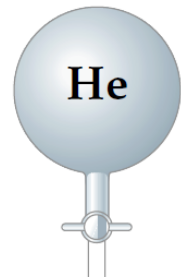
Gases



Volumen Molar Estándar

A las mismas temperatura y presión, volúmenes iguales de todos los gases tienen el mismo número de moléculas.

$$V \propto n \quad \frac{V}{n} = k \quad V = kn$$



Volumen	22.4 L	22.4 L	22.4 L
Presión	1 atm	1 atm	1 atm
Temperatura	0°C	0°C	0°C
Masa del gas	4.00 g	28.0 g	16.0 g
Número de moléculas del gas	6.02×10^{23}	6.02×10^{23}	6.02×10^{23}



Amadeo Avogadro

$$n = 6,022 \times 10^{23} \text{ moléculas}$$

A 0°C (273 K) y 1 atm (TPE: Temperatura y Presión Estándar) un mol de gas ocupa un volumen de 22,4 L



Ecuación de los Gases Ideales

Al combinar las ecuaciones anteriormente deducidas, se llega a la ecuación que relaciona las distintas variables y expresa el comportamiento de un gas en condiciones “ideales”.

Un gas ideal no pierde energía debido a las colisiones entre las moléculas y no cambia sus propiedades al disminuir o aumentar la temperatura. Más adelante se describirán los comportamientos de los gases reales.

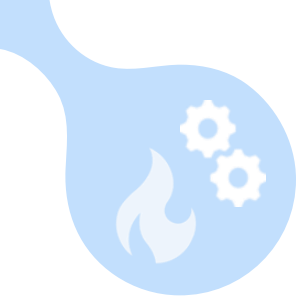
$$PV = nRT$$

! T en Kelvin

• P en atm

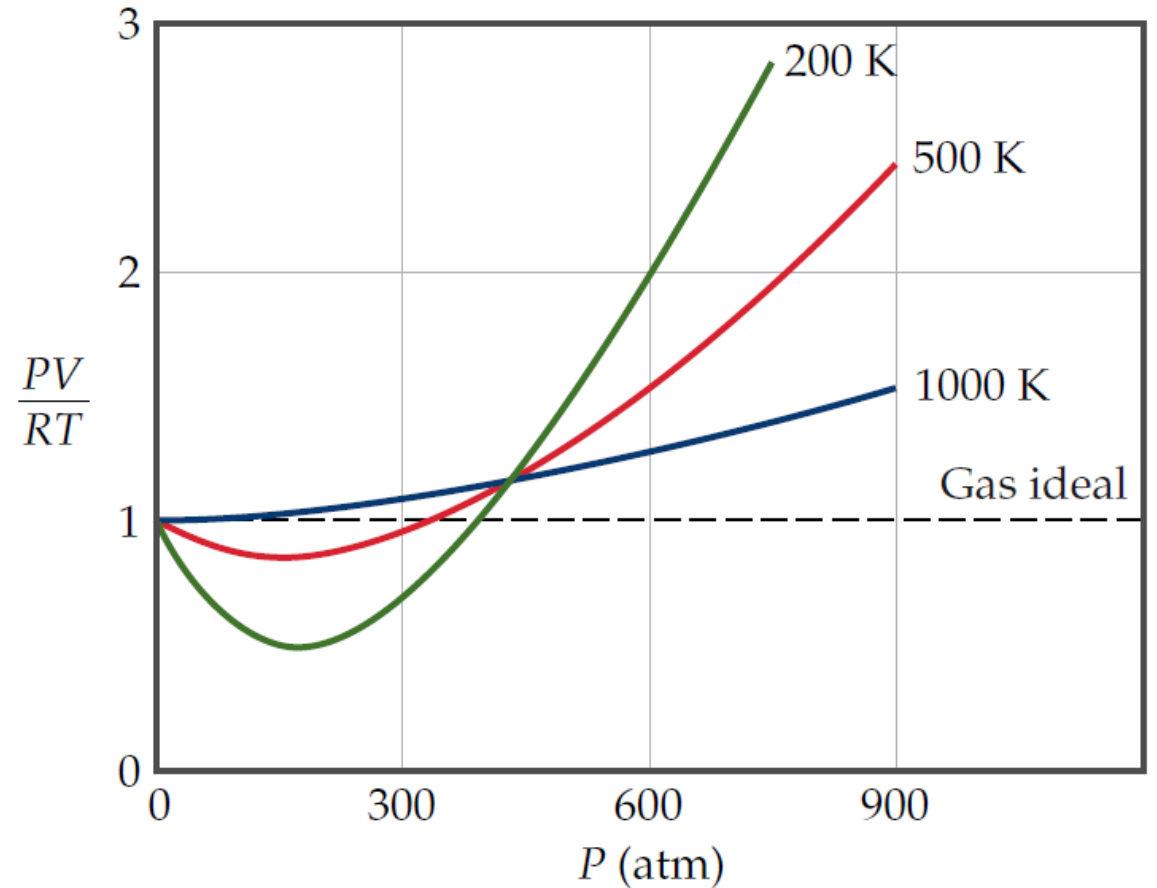
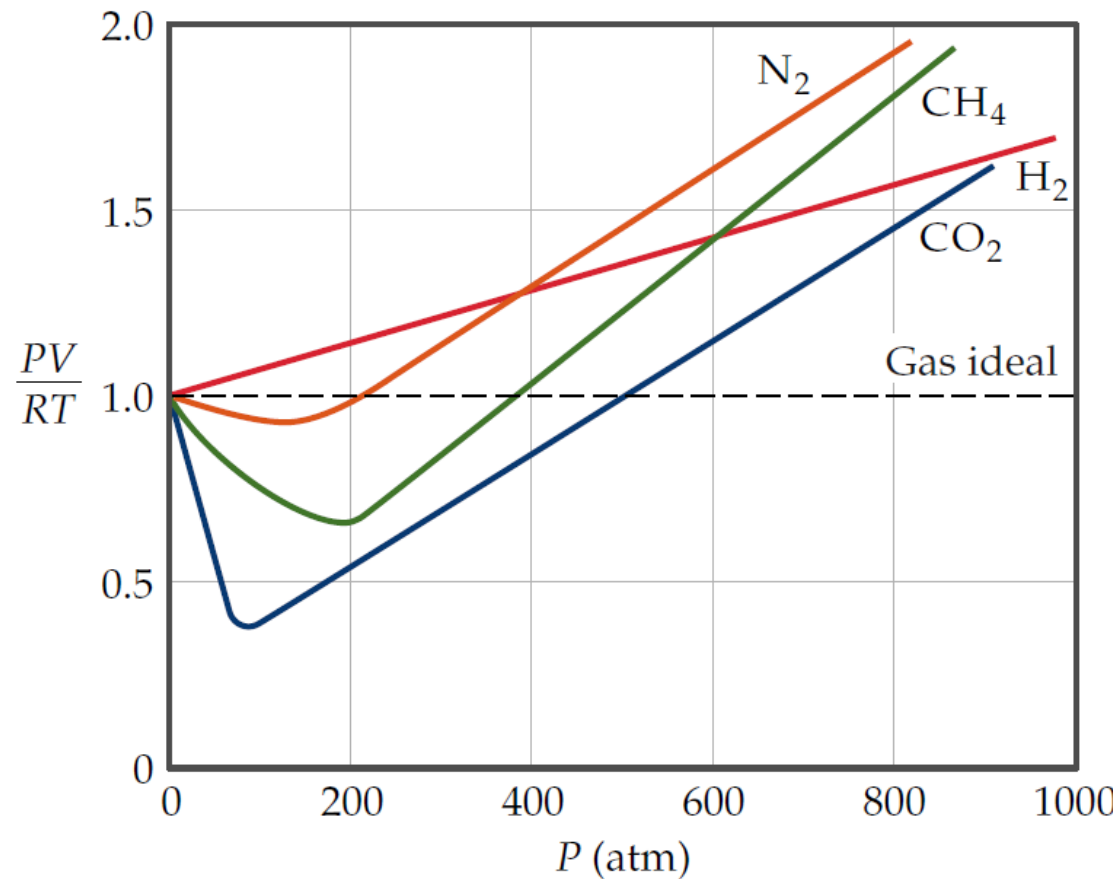
V en L

$$R = 0,082 \left[\frac{\text{atm L}}{\text{mol K}} \right]$$



Gases Reales

Los gases reales desvían su comportamiento de la idealidad, debido a que las colisiones entre las moléculas varían considerablemente con respecto a los cambios de la temperatura y la presión.



Ecuación de los Gases Reales

Una ecuación útil que se ha desarrollado para predecir el comportamiento de los gases reales fue propuesta por el científico holandés Johannes van der Waals (1837-1923).

Van der Waals se percató de que, en el caso de un gas real, esta expresión tendría que corregirse por los dos efectos que hemos mencionado: el volumen finito que ocupan las moléculas del gas y las fuerzas de atracción entre las moléculas del gas. Él introdujo dos constantes, a y b , para efectuar dichas correcciones (los valores de a y b están tabulados)

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

Corrección por las atracciones moleculares

Corrección por el volumen de las moléculas

! T en Kelvin
• P en atm
V en L

$$R = 0,082 \left[\frac{\text{atm L}}{\text{mol K}} \right]$$

