



Las reacciones químicas como sistemas térmicos: estrategia para la enseñanza de fisicoquímica

Chemical Reactions as Thermal Systems: A Strategy for Teaching Physical Chemistry

Juan David Pineda-Moya¹ 

Cómo citar este artículo:

Pineda Moya, J. D. (2024). Las reacciones químicas como sistemas térmicos: estrategia para la enseñanza de fisicoquímica. *Pre-Impresos Estudiantes*, (25), 40-54.

Resumen

La enseñanza de fisicoquímica a nivel universitario genera un interés constante, pero la falta de nuevas metodologías y la complejidad de los temas pueden dificultar a los estudiantes la adquisición de los conceptos de esta disciplina. En este documento se estudia cómo cambia el comportamiento de las moléculas que intervienen en una reacción química en relación con sus estados y cómo estas variaciones afectan las reacciones según las leyes termodinámicas, lo cual muestra las relaciones entre diferentes conceptos fisicoquímicos. Estos conceptos se explican y ejemplifican a partir de conceptos de cinética química y se presentan mediante fórmulas e ilustraciones sencillas, para mostrar sus relaciones. En este sentido, se espera que este texto sirva de referencia para estudiantes y profesores, con la intención de fomentar el interés por el campo de la fisicoquímica.

Palabras clave: enseñanza de la fisicoquímica; sistemas térmicos; leyes termodinámicas; cinética química

Abstract

The teaching of physical chemistry at the university level consistently generates interest; however, the lack of new methodologies and the complexity of the subject matter can make it difficult for students to grasp the concepts of this discipline. This paper examines how the behavior of molecules involved in a chemical reaction changes in relation to their states and how these variations affect reactions according to thermodynamic laws, thereby revealing the relationships among various physico-chemical concepts. These concepts are explained and illustrated using principles from chemical kinetics and are presented through simple formulas and diagrams to highlight their interconnections. In this sense, the text aims to serve as a reference for both students and educators, with the goal of fostering interest in the field of physical chemistry.

Keywords: physical chemistry education; thermal systems; thermodynamic laws; chemical kinetics

¹ Estudiante de Licenciatura en Química con certificaciones en *Creación y Desarrollo de Software* por la Universidad Tecnológica de Pereira (UTP, 2022), en *Análítica de Datos* por la Universidad Distrital Francisco José de Caldas (2024), en *Herramientas Computacionales para la Comprensión Territorial* (2022) y en *Síntesis de Nanocompuestos* (2023) por la Universidad Pedagógica Nacional (UPN). Participó en la Semana de la Investigación de la Facultad de Ciencia y Tecnología (FCT-UPN, 2023) con la ponencia "Experiencia en la Formación en Investigación a través de la Propuesta de Extracción de Antocianinas de Mora de Castilla (*Rubus Glaucus Benth*) mediante el Biorreactor Airlift". jd.pinedam@upn.edu.co

Introducción

El estímulo para escribir este documento surgió mientras cursaba materias que abordaban temas específicos de fisicoquímica. Tanto mis compañeros como yo identificamos que teníamos dificultades conceptuales con ciertos temas. Sentíamos que necesitábamos una base teórica más concisa que nos ayudara a establecer relaciones para estudiar y entender.

Tomando como punto de partida la pregunta ¿Cómo evidenciar transferencia calorífica en una reacción?, se desarrolla el cuerpo del trabajo. Se abordan temas relacionados con la fisicoquímica, con el objetivo de generar interés y proporcionar a los estudiantes una base sólida para su estudio que los capacite para la explicación de temas afines.

El artículo se basa en textos que muestran que los estudiantes atraviesan variados contratiempos, recalcando lo mencionado por Galindres y García (2009): “los estudiantes requieren de más tiempo para finiquitar sus trabajos, además se les debería ofrecer los apoyos y soportes que requieran en aquellos momentos que sean necesarios” (p. 2). Se destaca que una parte de los estudiantes de carreras afines a ciencia presentan contratiempos no solo de conceptualización, sino también con el tiempo que le pueden dedicar a estudiar estos temas.

Haciendo hincapié en las problemáticas de la enseñanza en la universidad, se trae a colación lo planteado por Orrego *et al.* (2019): “De continuar esta problemática, el ciudadano del mañana no contaría con las herramientas necesarias que le permitan comprender, interpretar y en consecuencia valorar en forma crítica, los avances de la ciencia y la técnica y su posible repercusión social” (p. 3). Es importante mencionar que cada vez menos personas se muestran motivadas por el aprendizaje de las ciencias, lo cual está generando un declive en la

formación de personas con educación superior. Imaginen que una universidad acepta a un grupo selecto de estudiantes para su formación en ciencias, si una parte de estos estudiantes no logra comprender los temas tratados en clase, se desencadenará una sucesión de malas notas en evaluaciones, por consiguiente, aumentará el número de personas que se retiren o pierdan calidad académica.

Con base en este problema se trabajó con artículos que evidencian que se requiere un cambio en las metodologías de enseñanza y, aunque no se menciona de forma directa, se necesita un texto guía para minimizar el tiempo de búsqueda de información y que presente algunos de los temas que se tratarán durante el trascurso de la asignatura. Por tal razón, se generó un esbozo sobre temas de fisicoquímica para dar a los lectores del documento una idea más concisa y centrada, además incentivar a los estudiantes al trabajo autónomo y, posiblemente, dar paso a una estrategia de enseñanza de los temas tratados en el documento con el uso del propio escrito.

Se abordará primero la relación entre la temperatura y la cinética, con las reacciones químicas. Luego, se presentarán ejemplos de la generación de entalpías y su representación teórica. Cabe destacar que, en algunos casos, los ejemplos utilizarán reactivos en bajas concentraciones. A partir del estudio de la entalpía, se mostrarán temas y ejemplos de la ley de Hess y sus respectivos deltas (Δ). Con un énfasis particular en las entalpías, se explicará en qué consisten las entalpías de enlace, para qué sirven y cómo se llevan a cabo sus cálculos, tanto teóricos como experimentales. Con esto se espera que sea más clara la relación entre la temperatura, la cinética y la termodinámica de las reacciones químicas.

Variación de temperatura y su efecto en la velocidad de reacción

Tanto los seres humanos como diversos animales, sin excluir ningún reino, poseen termorreceptores en el tejido epidérmico, los cuales ayudan a que puedan detectar los diversos cambios de temperatura de un entorno o un sistema; esto ayuda al instinto de supervivencia y a conocer momentos exactos para migrar o determinar peligros ambientales que presente el sistema.

La temperatura ambiente presenta variaciones propias del sistema que sea estudiado, todos los temas relacionados con temperatura se pueden desglosar en la determinada "termodinámica". Esta rama de la ciencia presenta varios conceptos tales como lo especifica Rojas (2020), quien explica que los conceptos que trabaja de manera teórica la termodinámica son: la concepción universal, disposicional y contrafactual.

Lo anterior permite deducir que esta rama de la física estudia los fenómenos que relacionan la temperatura, el calor y la energía. En este contexto, el estudio de los sistemas térmicos se centra en el cambio o traspaso de energía en un sistema. Un sistema puede ser, por ejemplo, un motor, un ladrillo, una mesa, un animal o un humano. Todo lo que no se considera sistema se llama "alrededor". El alrededor es aquello que rodea al sistema: por ejemplo, el aire que rodea al "sistema" mesa que se está estudiando. Es importante aclarar que se refiere al aire, no al ambiente.

Definido el sistema, su clasificación se basa en su capacidad para intercambiar materia y energía con el medio externo. Un sistema abierto es aquel que permite el intercambio de materia, calor o cambio de temperatura con otro sistema. Un sistema cerrado impide el intercambio de materia o calor; por ejemplo, un cilindro que contiene un gas tipo A es un sistema cerrado porque impide el ingreso de un

gas B. Por último, un sistema aislado es aquel en el que no hay posibilidad de intercambio de materia o energía térmica; por ejemplo, un tanque que contiene gas A tiene una probabilidad nula de un intercambio térmico o de gases. La idea de que el gas B ingrese al cilindro en un sistema aislado es una idea extraordinaria.

La termodinámica presenta tres axiomas, los cuales son definidos como leyes: la ley cero, la primera ley y la segunda ley. La ley cero introduce y define la propiedad de equilibrio térmico, la primera ley establece la energía interna de un sistema y la segunda ley se refiere a la entropía presente del sistema.

La ley cero establece que, cuando tres sistemas A, B y C entran en contacto, se producirá un intercambio de calor hasta que los tres alcancen la misma temperatura desde el punto de vista de un observador. Un ejemplo son los termómetros de mercurio. Si el sistema B (termómetro) se pone en contacto con el sistema A y luego con el sistema C, y no se observan cambios en la temperatura del termómetro, se deduce que el sistema A y C están en equilibrio térmico.

Se presentó la relación entre los sistemas sin cuantificadores. Para el concepto universalista se requieren cuantificadores universales, donde se debe llegar a la conclusión "estar en equilibrio térmico con". La ecuación definida para la ley cero de termodinámica es:

$$\text{Energía interna A} = \text{Energía interna B} = \text{Energía interna C}$$

A diferencia de la ley cero, la primera ley de termodinámica se especializa en los sistemas aislados. Esta ley establece que la energía interna de todo sistema aislado es constante, con la condición de que no genere trabajo. Si se realiza trabajo, la energía interna del sistema decrece; por esta razón, la primera ley da lugar a las llamadas metaleyas, como la ley de conservación de la energía.

$$\Delta Q = \Delta U + \Delta W$$

ΔQ = Es el calor que entra y sale en determinado momento

ΔU = Es la variación de la energía interna del sistema

ΔW = Es la diferencia de trabajo inicial y final

La segunda ley de la termodinámica establece que: "la entropía (S) del universo aumenta de manera constante en el transcurso de cualquier proceso de cambio instantáneo" (Rojas, 2020) se debe suponer un cambio de calor constante y gradual. Si se llegase a perturbar el paso de energía, el traspaso de calor sería reversible. A diferencia de la primera ley, la segunda ley de la termodinámica introduce el concepto de entropía, que establece que los cambios espontáneos son factibles si la entropía total del universo aumenta. Lo descrito anteriormente se representa mediante la siguiente ecuación:

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T}$$

Transferencia de energía calorífica entre dos sistemas

En la termodinámica se estudia la transferencia de energía en un sistema, denominada "calor". Desde la perspectiva científica se define como "la energía térmica transferida entre dos sistemas a diferentes temperaturas que entran en contacto", también conocidas como "gradientes". El calor es usado en la industria y la automatización de diversos procesos mediante la absorción o transferencia de energía. Existen diferentes formas de transferencia de calor: conducción, absorción y radiación. Tanto la conducción como la absorción requieren de un medio para su propagación, similar al sonido. En contraste, la radiación puede transmitirse en el vacío, como la radiación solar que se propaga en el espacio exterior. Según U-Tad (2023), el vacío no es la ausencia del aire, sino un cambio de presión en un sistema específico.

Siguiendo con los mecanismos de transmisión, la conducción es propia de los sólidos y líquidos en reposo. En el caso de los líquidos en movimiento, se usan cálculos más extensivos para referirse al paso de calor en el sistema. Similar a la conducción, la absorción requiere un medio para la transferencia de calor. Un ejemplo de absorción es: si usted deja una cuchara de metal tocando el borde de una olla del mismo material que está sobre una fuente de calor (la estufa), en un tiempo determinado, la cuchara se habrá calentado. Por último, la radiación térmica, que no requiere un medio, depende de la longitud de onda. El calor se genera en un rango de 0,1 a 100 nm.

Efecto de la energía cinética en la reacción para producir trabajo

De acuerdo con Brown *et al.* (2004), la energía es la capacidad para realizar un trabajo o transferir calor. Un experimento representativo consiste en poner una bola de arcilla en la cima de la torre Colpatria en Bogotá, que tiene una altura de 196 m, y dejarla caer por un tubo de igual longitud, permitiéndole una caída libre. Durante la caída, la fuerza de gravedad actúa sobre la bola de arcilla, transfiriéndole energía potencial a medida que desciende; esta energía potencial se convierte en energía cinética a medida que la bola gana velocidad y al momento de impactar contra el suelo, la bola se destruirá y generará calor.

Para entender el concepto "calor en una reacción" primero se deben conocer sus principios, iniciando con las leyes de la termodinámica. Según Levine (2004), la primera ley de la termodinámica define que la energía no se crea ni se destruye, con lo cual se concluye que la energía se conserva. Para una mayor comprensión se debe tener en cuenta la transformación de la materia y energía durante una reacción para generar sus productos en determinados tiempos, donde A + B produce C en una con-

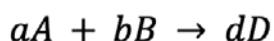
concentración específica normalmente expresada en molaridad (M). De acuerdo con lo anterior, la velocidad de una reacción depende de las concentraciones y potenciales que presente la reacción, supongamos una reacción donde $A+B$ produce C .



Se conoce como "rata de cambio" a la variación de concentración dependiendo del tiempo, la ecuación se puede expresar como:

$$-\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = k$$

Esta ecuación se puede derivar respecto a los productos y el balanceo estequiométrico de la reacción, donde se usa el negativo del recíproco (a) por la rata de cambio del reactivo (se puede usar la rata de cambio de los productos)



$$-\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}$$

$[A], [B], [D]$ = es la concentración

El tiempo (dt) se mide mayormente en segundos. El tiempo cero ($t=0$) marca el inicio de la reacción del compuesto. Sin embargo, este punto de referencia puede variar según el tipo de análisis o experimento realizado.

a, b, c = referente al coeficiente estequiométrico de la reacción química

Al despejar la ecuación del cambio de concentración en el tiempo, se deriva la ecuación de velocidad de reacción:

$$-\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = k$$

$$V_{rx} = k [A]^m \cdot [B]^n$$

La velocidad de reacción equivale a la constante de velocidad por la concentración de A elevado a un exponente m , identificado por medio de la experimentación, multiplicado por la concentración de B con un exponente n , definida por medios experimentales.

Un dato interesante sobre la ecuación de velocidad es que la constante de velocidad (k) es igual para la misma reacción en todos los casos, exceptuando cambios de presión y temperatura.

El orden ayuda a predecir cómo funcionará la concentración (órdenes de concentración) respecto al tiempo, existen los órdenes de reacción 0, 1, 2, 3 y de esta manera continúa, por lo general se usan los órdenes de reacción 0, 1 y 2, ya que los órdenes de reacción 3 en adelante son de ocurrencia poco probable.

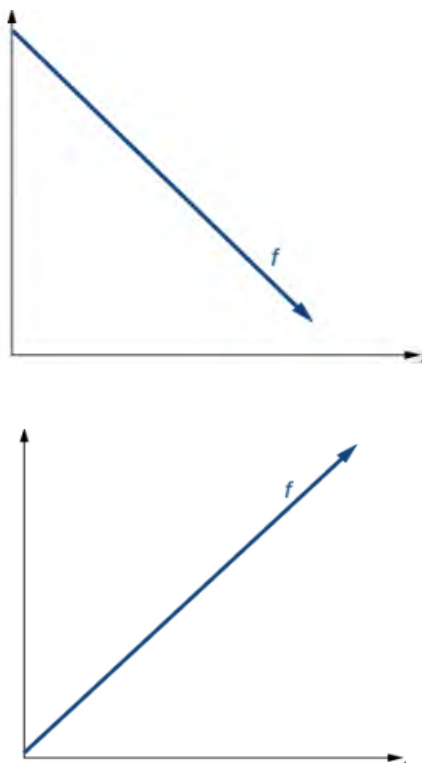
Las ecuaciones que permiten reconocer las concentraciones son las siguientes:

$$\text{Orden 0: } [A] = -a \cdot k \cdot t + [A]_0 \quad \text{Orden 1: } \ln(A) = -a \cdot k \cdot t + \ln(A)_0$$

$$\text{Orden 2: } \frac{1}{[A]} = a \cdot k \cdot t + \frac{1}{[A]_0} \quad \text{Orden 3: } \frac{1}{[A]^2} = 2a \cdot k \cdot t + \frac{1}{[A]_0^2}$$

Cada una de las órdenes presentadas anteriormente se pueden representar de manera similar a la ecuación de la recta, donde $Y = mx + b$. Así, los órdenes 0 y 1 corresponden a una recta decreciente, a diferencia de las ecuaciones de órdenes 2 y 3 (Véase figura 1).

Figura 1. Gráficas creciente lineal y decreciente lineal. Gráfica representativa de órdenes 0 y 1 y Gráfica representativa de órdenes 2 y 3



Fuente: OpenStax. (s.f.).

El orden se determina de varias maneras, una de estas es por medio del método de mínimos cuadrados, que genera la gráfica de cada una de las órdenes hasta que se genere una gráfica creciente o decreciente. Otro método consiste en observar el tiempo requerido para que los reactantes se consuman o se formen los productos (según se especifica en la pregunta problema). También se puede determinar el orden por medio de la sustitución de valores hasta obtener un resultado que coincida con la constante de velocidad.

Otro caso muy excepcional ocurre cuando se determina en el ejercicio el valor de la velocidad. De este modo, podemos determinar rápidamente los valores de m y n utilizando propiedades logarítmicas. Este método se conoce como método diferencial, donde se compara la

velocidad con la concentración del reactante o producto.

Con respecto a lo anterior, se deben determinar valores iguales para poder cancelar los valores de las constantes de velocidad y generar las operaciones logarítmicas respectivas para hallar k y determinar los exponentes m y n .

Como hemos comprobado, varios factores afectan la producción de un compuesto a partir de reactantes. El científico sueco Svante August Arrhenius planteó los enigmas relacionados con el funcionamiento de la constante de velocidad de la reacción y cómo esta se ve influenciada. Llegó a la conclusión de que *la constante de velocidad está definida por una constante (A) y un decrecimiento exponencial respecto a la temperatura medida en arado kelvin ($^{\circ}K$)*. La ecuación es:

$$k = A \cdot e^{\frac{-E.a.}{R \cdot T}}$$

Los valores de la ecuación se definen de la siguiente manera: K es la constante de velocidad de reacción; A es la energía que se requiere para que la reacción sea favorable de izquierda a derecha, e es la constante matemática de Euler, con un valor constante de 2,71828; $E. a.$ es la energía de activación requerida para iniciar la reacción; R es la constante de gases para cinética, con un valor de $8.314 \frac{J}{mol \cdot T}$; y, por último, T es la temperatura a la cual ocurre la reacción, medida en grados kelvin.

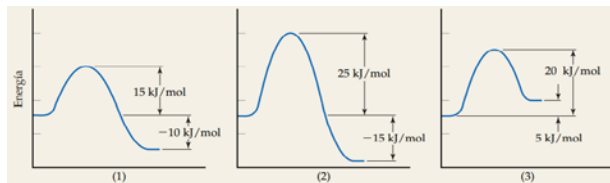
En una reacción química, es posible estudiar su comportamiento a dos temperaturas diferentes para comparar resultados. Además, la temperatura puede modificarse para revertir la reacción (hacerla inversa), siempre que las condiciones termodinámicas lo permitan. En tal caso, utilizando la ecuación de Arrhenius se pueden determinar las constantes de velocidad K_1 y K_2 . Ambas constantes se pueden determinar por medio de la multiplicación de la energía de activación por el recíproco de r

y esto multiplicado por la diferencia entre los inversos de las temperaturas.

$$\ln\left(\frac{k_1}{k_2}\right) = E.a. \cdot \frac{1}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

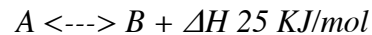
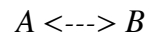
La energía de activación ($E.a.$) es la que generan las entidades fundamentales (iones, moléculas, elementos) para que se reaccione de manera correcta. Esta energía se representa con los perfiles de energía, la cual permite reconocer los complejos activados (punto más alto de la gráfica) y la energía calorífica que se desprende o se absorbe durante la reacción, como se ve en la figura 2.

Figura 2. Perfiles de energía.



Fuente: Brown et al. (2004)

La figura 2 representa los niveles de energía necesarios para que ocurra una reacción x . En el perfil de energía 1 se evidencia una energía de reacción o activación total de 15 KJ/mol, con una pérdida de 10 KJ durante la formación de un producto, lo que indica que la reacción es exotérmica. En el perfil de energía 3 se requieren 25 KJ/mol para que la reacción ocurra de manera correcta, debido a que el valor que está ubicado en la parte llana de la gráfica es un valor positivo. En la práctica, se puede determinar de manera hipotética que el recipiente fue sometido a una fuente externa de energía para alcanzar la energía interna adecuada para la reacción. Supongamos que A genera una reacción de doble sentido, considerando el perfil de energía 2 de la figura 2. Teóricamente esto se puede expresar como:



Más adelante en este documento se tratará el tema ΔH , pero definiéndola de manera sencilla, es la sumatoria del calor de los reactivos menos el calor de los reactantes.

$$\Delta H = H_p - H_r$$

O lo que es igual a la sumatoria de los moles del producto por el calor de los productos menos la sumatoria de las moles de reactantes por su respectivo calor:

$$\Delta H = \sum n_p \cdot H_p - \sum n_r \cdot H_r$$

De acuerdo con lo explicado en energía de activación, se define la energía interna como: "la sumatoria de energías cinéticas y potenciales en todas sus partes componentes" (Brown et al., 2004, p. 187). Se había mencionado previamente que la velocidad de reacción, la energía de activación y la constante de velocidad no presentan afectaciones directas en condiciones ambiente. En la figura 3, se evidencia cómo un émbolo ejerce presión hacia $O_{2(g)}$ y $H_{2(g)}$, tratando de explicar cómo la presión afecta las rotaciones y vibraciones internas e incluso el núcleo del átomo junto a sus respectivos electrones, así como al núcleo y sus respectivos electrones. La energía interna se simboliza como E , al variar esta energía interna se representa como ΔE , "el cambio de E que acompaña un cambio en el sistema" (Brown et al, 2004).

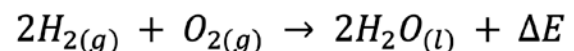


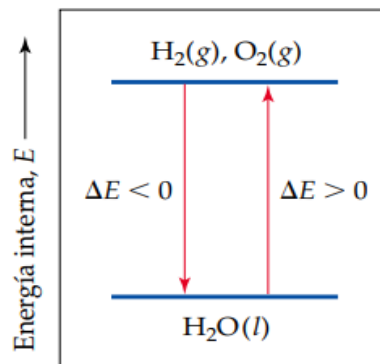
Figura 3. Generación de entalpía por un aumento de presión.



Fuente: Brown et al. (2004)

La primera ley de la termodinámica representa a ΔE como la diferencia entre la energía final (E_{final}) y la energía inicial (E_{inicial}). Para calcular ΔE es necesario conocer ambos valores. ΔE se divide en tres partes: un valor, una unidad (las cuales permiten reconocer la magnitud de cambio) y un signo (positivo y negativo). ΔE es positivo cuando: $E_{\text{final}} > E_{\text{inicial}}$ y negativo cuando $E_{\text{final}} < E_{\text{inicial}}$, lo que indica una pérdida de energía en el entorno. Con base en lo anterior y según la figura 4, ΔE del hidrógeno y oxígeno es mayor que ΔE del agua. "Cuando se efectúa un proceso en el que el sistema absorbe calor, decimos que el proceso es endotérmico y un proceso que libera calor se considera como exotérmico" (Brown et al., 2004, p. 161). Por lo tanto, los valores que tengan un signo negativo serán exotérmicos y aquellos con un valor positivo serán endotérmicos. Se debe entender que no solo los cambios en la presión generan efectos, sino también los cambios en el volumen, como se demuestra en la ecuación de Robert Boyle. La figura 4 lo demuestra por medio de la práctica (Metz, 1991).

Figura 4. Diferencias de entalpía en un sistema de H_2 , O_2 y H_2O .



Fuente: Brown et al. (2004)

Ecuación 1. Representación algebraica. Sobre entalpías en sistemas con variación de volumen, presión y temperatura

$$\Delta S (\text{sistema}) = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_v}{T} dT + \int_{V_1}^{V_2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v dV$$

$$\Delta S (\text{sistema}) = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT - \int_{p_1}^{p_2} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p dp$$

Fuente: Metz (1991)

En la ecuación 1 se muestran las diferenciales entre la temperatura y cómo esta afecta el volumen del recipiente. En la segunda representación se demuestra cómo presión y temperatura están relacionadas, y generan energía en forma de calor en las paredes de un cilindro u otro recipiente.

A partir del caso del cilindro con oxígeno e hidrógeno se explicará la relación entre ΔG , ΔE , S , calor y trabajo. Dado que cualquier sistema intercambia energía con su entorno, sea en forma de calor o trabajo, ΔE del sistema cambia

cuando se agrega o se extrae calor. En este orden de ideas, la anterior afirmación genera una expresión algebraica teniendo en cuenta que es un cambio fisicoquímico:

$$\Delta E = q + w$$

De acuerdo con Brown *et al.* (2004), la ecuación que describe la energía interna de un sistema (ΔE) se define como la suma del calor intercambiado con el entorno (q) y el trabajo realizado (w): $\Delta E = q + w$.

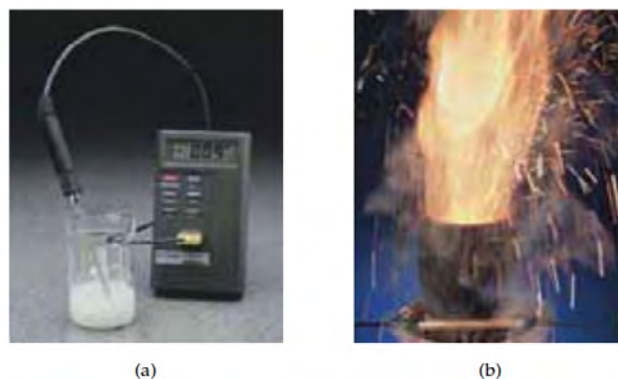
En reacciones iniciadas se genera la espontaneidad, sin la necesidad de un trámite de energía externa. Para conocer si la reacción será espontánea o no, se realizarán cálculos sobre la variación de energía de Gibbs; si el resultado de esta es un valor negativo ($\Delta G < 0$) será una reacción espontánea, si da un resultado positivo ($\Delta G > 0$) la reacción no será espontánea, determinada por la ecuación (una manera para recordar esta fórmula es usar la palabra AGHATAS):

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

Basándose en lo mencionado por Vitores (2018), ΔG (cambio de Gibbs) es igual a la entalpía menos la temperatura multiplicada por la entropía. La entalpía es el calor del reactivo y se representa en los perfiles de energía de la figura 2.

Como se estableció previamente, la manifestación del calor en una reacción se puede clasificar en dos categorías: los procesos endotérmicos, donde el sistema absorbe calor, y los exotérmicos, caracterizados por la liberación de energía (Metz, 1991). Un ejemplo de un proceso endotérmico es la producción de ozono (Acosta, 2020), que se genera gracias a la radiación en la atmósfera y cerca de tormentas eléctricas. Un ejemplo de un proceso exotérmico es la disolución de NaOH en medio acuoso, que genera un sistema de alta temperatura, tal como se observa en la figura 5.

Figura 5. Explicación reacción exotérmica y su peligrosidad.

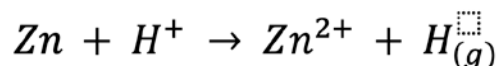


Fuente: Brown *et al.* (2004)

¿Qué es la entalpía y cómo se determina en una reacción?

La entalpía se denomina H , que es igual a la energía interna (E) más el producto de la ecuación de presión y el volumen de sistema: $H = E + PV$; la entalpía, al igual que la energía interna, la presión y el volumen, es una función de estado. Si se efectúa un cambio a presión constante, se representa del siguiente modo: $H = \Delta E + P * \Delta V$. Es decir, el cambio de entalpía está dado por el cambio de energía interna más el producto de la presión constante y el cambio de volumen. Cabe mencionar que la ecuación correspondiente al trabajo de expansión de un gas es: $w = -P \Delta V$.

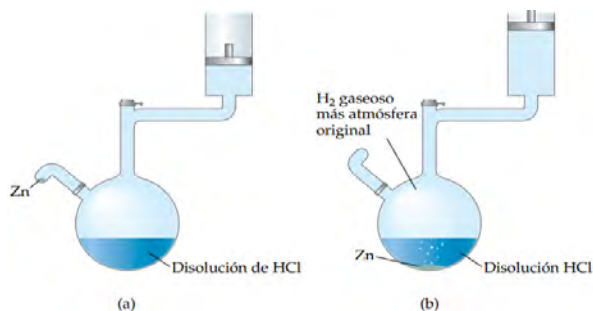
Para continuar con la relación entre temperatura y calor, reconozcamos que "en el caso de una reacción que se lleva a cabo a presión constante el cambio de entalpía es igual al calor que se transfiere en el sistema y su entorno" (Brown *et al.*, 2004, p. 735). Así, sin cambio circunstancial entre presión y volumen, explicamos que la energía interna de la entidad fundamental no depende únicamente de la energía calorífica. Generemos un experimento al respecto: realizamos una reacción REDOX en un recipiente cerrado con un pistón. Expresando los iones participantes, se genera la reacción iónica:



La reacción genera un desprendimiento de gas $H_2(g)$, que se expande contra la atmósfera existente, lo cual demuestra el aumento de presión y ejerce una fuerza contraria a la presión atmosférica. Este montaje se denomina "trabajo de presión-volumen" y se muestra en la figura 6, que representa el trabajo por la expansión de un gas por medio de la ecuación: $w = -P \Delta V$, donde ΔV es el cambio de volumen que generó el gas. Por consiguiente, mediante la siguiente fórmula se explica el trabajo de presión-volumen con una fórmula más detallada:

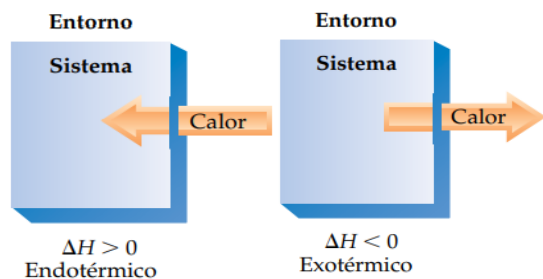
$$\Delta H = \Delta E + P \Delta V = qp, + w - w = q$$

Figura 6. Montaje para demostrar el aumento de presión por medio del pistón.



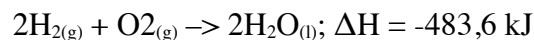
Fuente: Brown et al. (2004)

Figura 7. Representación gráfica entre valores de entalpía y su entorno.



Fuente: Brown et al. (2004)

El cambio de entalpía durante la reacción, también conocido como calor de reacción, suele escribirse como ΔH_r donde "r" es el símbolo de reacción. En la figura 4 se presenta la combustión del hidrógeno. Si controlamos la reacción de modo que 2 moles de $H_{2(g)}$ ardan con $O_{2(g)}$ para formar $H_2O_{(l)}$ a presión constante, el sistema liberará 483,6 kJ de calor. La reacción se puede representar de la siguiente forma:



El valor de ΔH representa un número negativo, lo que indica que es una reacción exotérmica. Se debe tener en cuenta que las reacciones que expresan el cambio de entalpía (ΔH) se denominan ecuaciones termoquímicas. Según Brown et al. (2004), los tres conceptos básicos de entalpía son:

1. La entalpía es una propiedad extensiva
2. El cambio de entalpía para una reacción tiene la misma magnitud, pero un signo opuesto al ΔH de la reacción inversa.
3. El cambio de entalpía para una reacción depende del estado de los reactivos y de los productos.

Con un cambio de entalpía se llega a los conceptos de capacidad calorífica y calor específico, que se reconocen como aquellos objetos que absorben o emiten calor, y generan un cambio de temperatura en el sistema. La capacidad de un objeto para absorber cierta cantidad de energía está determinada por su capacidad calorífica. Según Lower (2020), "la capacidad calorífica nos dice cuántos julios de energía se necesitan para cambiar la temperatura de un cuerpo en 1 °C" (p. 2). En el caso de una sustancia pura, las capacidades caloríficas están determinadas por la cantidad de la sustancia. Un caso es la capacidad calorífica específica, que es la capacidad calorífica de 1 g de una sustancia específica. El cambio de calor específico se determina mediante una fórmula, que según

Brown *et al.* (2004) se logra *midiendo cambio de temperatura* ΔT , que representa una masa conocida (m), de la sustancia que gana o pierde calor q , esto está expresado en la ecuación 2.

Cada sustancia tiene un calor específico único, en la tabla 1 se muestran algunos ejemplos. En determinados casos se genera una entalpía de calentamiento, donde el calor que contiene una sustancia puede cuantificarse. Esta cuantificación se realiza con la fórmula presentada en la ecuación 2.

Ecuación 2. Fórmula de calorimetría

$$\text{Calor específico} = \frac{\text{Cantidad de calor transferido}}{(\text{gramos de soluto})(\Delta \text{ de temperatura})} = \frac{q}{m \cdot \Delta T}$$

Fuente: Brown *et al.* (2004)

Tabla 1. Calores específicos de algunas sustancias a 298 °K

Elementos		Compuestos	
Sustancia	Calor específico (J/g·K)	Sustancia	Calor específico (J/g·K)
N ₂ (g)	1.04	H ₂ O(l)	4.18
Al(s)	0.90	CH ₄ (g)	2.20
Fe(s)	0.45	CO ₂ (g)	0.84
Hg(l)	0.14	CaCO ₃ (s)	0.82

Fuente: Brown *et al.* (2004)

Ecuación 3. Fórmula de calorimetría

$$\Delta H^{\circ} = \sum_i \int C_{P,i}^{\circ} \quad \sum_j \Delta_j H_T^{\circ}$$

Fuente: Levine (2004)

Se determina el calor por la sumatoria de las fases y la integral de las transiciones.

En muchos casos es posible calcular ΔH , otras veces ΔH ya está tabulado, si este el caso no es necesario medir la calorimetría de la reacción.

ΔH está asociado a un proceso químico y se refiere solo a la materia que experimenta un cambio. Representa tanto el estado inicial del reactivo como el estado final del producto. Con este concepto adquirido, se puede afirmar que durante una reacción ocurre un cambio de H. La ley de Hess especifica que: "si una reacción se efectúa en una serie de pasos, ΔH para la reacción será igual a la suma de los cambios de entalpía para los pasos individuales" (Brown *et al.*, 2004, p. 174).

La propiedad principal sobre la ley de Hess es calcular los cambios de energía, los cuales son difíciles de medir directamente; esta ley se representa por la ecuación 4. Según Brown *et al.* (2004), la pregunta es: ¿el valor final de ΔH para una reacción es dependiente del proceso que se use para usar la ley de Hess? La respuesta a la anterior pregunta es no, porque ΔH depende por completo de la reacción en sí misma, y estas reacciones son universales, sin importar cuántos procesos se encuentren presentes.

Ecuación 4. Fórmula para cálculo de cambios de energía

$$\Delta_r H_T = \sum v_i \Delta_t H_{T,i}^{\circ}$$

Fuente: Brown *et al.* (2004)

De manera continua, se pueden especificar las entalpías de formación calculando ΔH con la ley de Hess o utilizando entalpías ya tabuladas, como se presenta en la tabla 2, o especificadas en gráficas, como en la figura 8 . Esto permite calcular la entalpía de reacciones, teniendo en cuenta que la forma más estable de cualquier elemento es cero antes o después de reaccionar.

Muchos datos se escriben dependiendo del proceso al cual fue sometido el reactivo o producto. Existen entalpías de vaporización, fusión, combustión, entre otras. De acuerdo con Brown *et al.* (2004), "un proceso de especial importancia

que se emplea para tabular datos termoquímicos es la formación de un compuesto a partir de los elementos que lo constituyen, el proceso de entalpía asociado a este proceso se denomina entalpía de formación" (p. 177) o calor de formación, designado como ΔH_f donde "f" es el producto (formado), del mismo modo en las condiciones estándar, donde el único

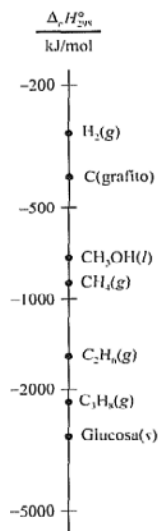
modo para cambiar los valores de la entalpía de formación es variar temperatura, presión y estado. Esta idea es respaldada por Metz (1991) quien especifica que la mayoría de compuestos y elementos se mantienen a una presión de 1 bar y una temperatura de 25 °C. Bajo estas condiciones se define la entalpía estándar.

Tabla 2. Entalpías de diversos compuestos químicos

Sustancia	Fórmula	ΔH_f° (kJ/mol)	Sustancia	Fórmula	ΔH_f° (kJ/mol)
Acetileno	$C_2H_2(g)$	226.7	Cloruro de hidrógeno	$HCl(g)$	-92.30
Amoniaco	$NH_3(g)$	-46.19	Fluoruro de hidrógeno	$HF(g)$	-268.6
Benceno	$C_6H_6(l)$	49.0	Yoduro de hidrógeno	$HI(g)$	25.9
Carbonato de calcio	$CaCO_3(s)$	-1207.1	Metano	$CH_4(g)$	-74.8
Óxido de calcio	$CaO(s)$	-635.5	Metanol	$CH_3OH(l)$	-238.6
Dióxido de carbono	$CO_2(g)$	-393.5	Propano	$C_3H_8(g)$	-103.85
Monóxido de carbono	$CO(g)$	-110.5	Cloruro de plata	$AgCl(s)$	-127.0
Diamante	$C(s)$	1.88	Bicarbonato de sodio	$NaHCO_3(s)$	-947.7
Etano	$C_2H_6(g)$	-84.68	Carbonato de sodio	$Na_2CO_3(s)$	-1130.9
Etanol	$C_2H_5OH(l)$	-277.7	Cloruro de sodio	$NaCl(s)$	-410.9
Etileno	$C_2H_4(g)$	52.30	Sacarosa	$C_{12}H_{22}O_{11}(s)$	-2221
Glucosa	$C_6H_{12}O_6(s)$	-1273	Agua	$H_2O(l)$	-285.8
Bromuro de hidrógeno	$HBr(g)$	-36.23	Vapor de agua	$H_2O(g)$	-241.8

Fuente: Brown et al. (2004)

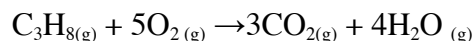
Figura 8. Escalas logarítmicas de ΔH° 25°C.



Fuente: Levine (2004)

Las tablas de ΔH_f° como en la tabla 2, tienen variados usos, como el empleo de entalpías de formación para calcular las entalpías de reacción, así como el uso de la ley de Hess para calcular el cambio de entalpía estándar en cualquier reacción, por lo tanto, si conocemos ΔH_f° de los productos, se podrá determinar la entalpía de reacción.

Como ejemplo, se usará la combustión del gas propano gaseoso con oxígeno para formar $CO_{2(g)}$ y $H_{2O(g)}$, en condiciones ambientales estándar.



Ahora, esta ecuación se expresa como la suma de tres reacciones que generan la formación de la molécula.



La ley de Hess expresa que se deben sumar los valores de las entalpías y multiplicarlas por el número de moles correspondientes a cada reactivo y producto.

$$\Delta H_r^\circ = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3$$

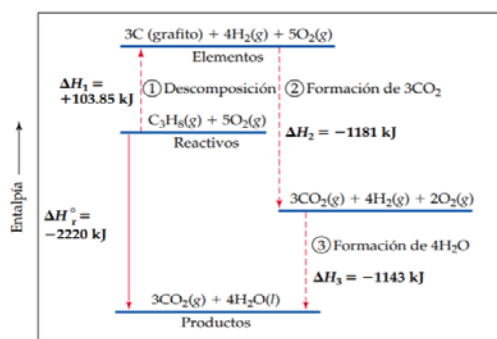
$$\Delta H_r^\circ = -\Delta H_f^\circ[\text{C}_3\text{H}_8] + 3 \Delta H_f^\circ[\text{CO}_2] + 4 \Delta H_f^\circ[\text{H}_2\text{O}]$$

$$\Delta H_r^\circ = -(-103.85 \text{ kJ}) + 3(-393.5 \text{ kJ}) + 4(285.8 \text{ kJ})$$

$$\Delta H_r^\circ = -2220$$

En la figura 9 se representa un diagrama de entalpía, que al descomponerse implica reacciones de formación.

Figura 9. Diagrama de entalpía para la combustión de 1 mol de propano gaseoso.



Fuente: Brown et al. (2004)

Para reconocer las entalpías de reacción por medio de entalpías de formación, es necesario descomponer a la entalpía de formación en sus componentes. Esto permite presentar el calor estándar de una reacción, que se calcula como la suma de calores presentes en ella, menos los calores estándares de formación de los reactivos y productos. Este cálculo se representa mediante la ecuación 5.

Ecuación 5. Ecuación general para calcular entalpías de reacción por medio de entalpías de formación.

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

Fuente: Brown et al. (2004)

Las variables n y m son los denominados valores estequiométricos de la reacción de primer orden, la cual está en un solo sentido como reacción favorable (número de entidad fundamental requerida para la reacción). El segundo término es la representación del inverso de una reacción que se convierte en una reacción de doble sentido, por tal motivo se les antepone el signo negativo a los valores de ΔH_f° .

Con la determinación de diferentes entalpías se llega a la entalpía de (disociación) enlace. Es usada para calcular una entalpía de reacción que se genera por la ruptura de un enlace en la sustancia o molécula para formar dos o más fragmentos gaseosos, este proceso es conocido como entalpía de (disociación) enlace. Según Metz (1991), la entalpía de disociación es usada primero, para la descomposición de los reactivos en fragmentos moleculares y, segundo, para la formación de los productos a partir de fragmentos, resultado de la ruptura de enlaces en los reactivos. Se puede expresar mediante una ecuación que permite conocer la entalpía de enlace. Esta relación se representa en la ecuación 6.

Ecuación 6. Fórmula de la entalpía de disociación de enlace

$$\Delta_r H_r^\circ = \sum_r n_i \cdot \left(\frac{\Sigma \Delta \text{enlace}}{\# \Delta \text{enlace}} \right)_i (\text{productos}) + \sum_j m \cdot \left(\frac{\Sigma \Delta \text{enlace}}{\# \Delta \text{enlace}} \right)_j (\text{reactivos})$$

Fuente: Metz (1991)

Por lo tanto, la ecuación seis se entendería como la sumatoria del promedio de entalpía de enlace por los coeficientes estequiométricos (n_i y n_j). Estos coeficientes estequiométricos representan también el número de moles en los enlaces involucrados durante la reacción.

Al momento de tratar sobre la entalpía de disociación, se piensa inmediatamente en gases, aunque la mayoría de estos cálculos se generan en reacciones condensadas, vaporización, sublimación, etc.

Como ya se ha mencionado, es posible determinar las entalpías de formación y de reacción, por lo tanto, para determinar los cambios de entalpía, es necesario que los elementos pasen de sus estados puros a sus estados normales de referencia. Este proceso implica considerar seis pasos, según indica Levine (2004).

1. Si alguno de los elementos implicados es un gas a $T = 25\text{ °C}$ y 1 bar, se calcula ΔH de la transformación hipotética desde el gas ideal a $T = 25\text{ °C}$ y 1 bar al gas real en las mismas condiciones.
2. Se mide ΔH al mezclar los elementos puros a $T = 25\text{ °C}$ y 1 bar.
3. Mediante $\Delta H \int_{T_1}^{T_2} C_p dT + \int_{T_1}^{T_2} (V - TV\alpha)$ se calcula ΔH para llevar la mezcla de $T = 25\text{ °C}$ y 1 bar a modificaciones del ambiente en condiciones predestinadas al producto de la sustancia generada.
4. Para medir ΔH se utiliza un calorímetro cuando el compuesto se forma a partir de la mezcla de diversos elementos.
5. Para calcular ΔH se utiliza la ecuación $\int_{T_1}^{T_2} C_p dT + \int_{T_1}^{T_2} (V - TV\alpha)$ correspondiente al cambio de estado del compuesto en las condiciones ambiente.
6. Si el nuevo compuesto es un gas, se calcula ΔH de la transformación hipotética desde el gas real al ideal a $T = 25\text{ °C}$ y 1 bar.

Conclusiones

- Usualmente, la relación entre fisicoquímica y cinética de una reacción se obvia, ya que se trata de dos temas diferentes que pueden interrelacionarse por medio del equilibrio ácido-base. Esto podría generar un vacío conceptual entre la termodinámica y el trabajo que ocurre en una reacción química, lo que afectaría la calidad de la enseñanza y la capacidad de los estudiantes para desarrollar una comprensión adecuada en temas de química. Por esto, se aborda el tema a partir de la transferencia de calor, la cual puede ser espontánea o no.

Esta condición se reconoce por los cálculos de la energía libre de Gibbs (ΔG) y los procesos de entropía (ΔS), que evidencian el desorden del sistema. Su total opuesto es la entalpía (ΔH), la cual se certifica por medio del tacto o diversos cálculos. Estas transferencias de calor se presentan de dos maneras, tal como se ilustra en la figura 2, y determinan que son endotérmicas (con un valor positivo en el perfil de energía) y exotérmicas (valor negativo en su respectivo perfil de energía). Por consiguiente, y debido a que las tablas 1 y 2 son estándares respectivos a temperatura, se considera importante agregarlas al documento para el acceso a sus datos sin mayor complicación.

- La reducción y certeza en los temas tratados permiten que el estudiante aumente su conocimiento sobre transferencia de calor y desarrolle la capacidad para enseñarlo, mediante el uso de fórmulas relacionadas con la velocidad de reacción. Estas fórmulas ofrecen una visión general de la cinética química y facilitan el paso hacia la fisicoquímica, lo que abre la posibilidad de conectar nuevos temas. En el documento se incluyó una explicación detallada sobre la entalpía, ya que esta establece una relación más directa para conceptualizar y explicar la cinética química. Además, se enfatizaron las ecuaciones de velocidad de reacción, los órdenes de reacción, la ecuación de Arrhenius y otros subtemas clave. Sin embargo, es importante señalar que la conexión entre fisicoquímica y reacciones químicas también puede comprenderse a través de la entropía. Por ello, se motiva a los lectores a consultar artículos científicos adicionales, con el fin de ampliar su perspectiva y profundizar en cómo los principios termodinámicos determinan el comportamiento y la dinámica de las reacciones químicas. De esta forma, se enriquece tanto la enseñanza como el aprendizaje de estos conceptos.
- Se debe mencionar que la creación del trabajo fue un reto investigativo y conceptual, porque varios de los temas trabajados fueron una confrontación entre conceptos previos y adquiridos. Durante su proceso, se quiso llegar

al corazón de las personas que estén deseosas de conocimiento y demostrarles que algunos temas que pueden tratarse por separado están íntimamente relacionados; por lo tanto, más que un trabajo para los estudiantes, se realizó un trabajo dedicado a personas con el interés de conocer más sobre esta rama y con deseos de entender de manera específica un tema sobre las reacciones químicas (cinética).

Referencias

- Acosta Niño, G. E. (2020). *Química. El estudio de los cambios*. Editorial Neogranadina. <https://doi.org/10.18359/9789585103078>
- Brown, T. L., LeMay Jr., H. E., Bursten, B. E. y Burdge, J. R. (2004). *Química la ciencia central*. Pearson.
- Galindres Jiménez, D. M. & García Castañeda, D. J. (2009). Diseño y elaboración de un entorno virtual como sistema de apoyo al proceso de enseñanza de la fisicoquímica en el proyecto curricular de licenciatura en química como un espacio alternativo al trabajo autónomo en la modalidad por créditos [Tesis de grado, Universidad Distrital Francisco José de Caldas]. Repositorio Institucional UDFJC. <https://repositorio.udistrital.edu.co/>
- LibreTexts. (2010). *Álgebra y trigonometría: Funciones lineales* [Gráficas creciente lineal y decreciente lineal]. Adaptado de *Álgebra y trigonometría: Funciones lineales*.
- Levine, I. N. (2004). *Funciones termodinámicas normales de reacción* (Vol. 1). McGraw Hill/ Interamericana.
- Lower, S. (29 de octubre de 2020). Chem1 (Inferior). Simon Fraser University. <https://espanol.libretexts.org/@go/page/70593>
- Martínez, I. (1992). Termodinámica. En I. Martínez, *Termodinámica básica y aplicada* (pp. 195-225). Dossat.
- Metz, C. R. (1991). *Fisicoquímica*. McGraw-Hill/Interamericana Colombia.
- OpenStax. (s.f.). *Álgebra y trigonometría: Funciones lineales* [Gráficas creciente lineal y decreciente lineal]. LibreTexts. [https://espanol.libretexts.org/Matematicas/Algebra/Libro%3A_Algebra_y_Trigonometria_\(OpenStax\)/04%3A_Funciones_lineales](https://espanol.libretexts.org/Matematicas/Algebra/Libro%3A_Algebra_y_Trigonometria_(OpenStax)/04%3A_Funciones_lineales)
- Orrego Riofrío, M. C., Castillo Villacrés, H., Machado Maliza, M., Cangas Oña, X. e Iglesias Quintana, J. X. (2019). Problemas actuales en la enseñanza de la Química a alumnos de bachillerato. *Dilemas Contemporáneos: Educación, Política y Valores*, 6(3), 1-14.
- Rojas Duran, E. E. (2020). ¿Se puede ser realista en torno a las leyes de la termodinámica? *Ideas y Valores*, 69(172), 103-124.
- U-Tad. (5 de mayo de 2023). ¿Qué es el vacío? <https://u-tad.com/que-es-vacio>
- Vitores, M. [Amigos de la Química]. (8 de febrero de 2018). *ESPONTANEIDAD. Energía libre de Gibbs. Entalpía, Entropía. 2º principio de la termodinámica* [Archivo de video]. Youtube. https://youtu.be/dd-t__GibyA?si=t24Pw05TdtmukzTd