



**Departamento de Ingenierías Química y Biomolecular
Universidad de Cantabria (SPAIN)**

Bloque Temático 1: La Ciencia Química en las tecnologías industriales

Fundamentos de Química

**1er Curso de los Grados en Ingeniería de los Recursos
Energéticos y de los Recursos Mineros**

Contenidos

1.1 Elementos químicos

1.2 Especies químicas, reacciones y cambios de energía

1.3 Productos químicos, aprovechamiento químico-industrial

Bibliografía

- ✓ Raymond Chang, Química, 2010, 10^a ed, McGraw Hill.
- ✓ Jerry Bell, Química: Un proyecto de la American Chemical Society, 2005, Reverté.
- ✓ Guillermo Calleja Pardo, Introducción a la Ingeniería Química, 1999, Síntesis.
- ✓ Angel Vian Ortuño, Introducción a la Química Industrial, 1994, Reverté. Impresión digital a partir de 2006.
- ✓ Theodore L. Brown, H. Eugene Lemay, et al., Química. La Ciencia Central, 2009, 11^a ed, Pearson.
- ✓ Peter Atkins, Loretta Jones, Principios de Química, 2006, 3^a ed, Panamericana.
- ✓ José Vale Parapar et al., Problemas resueltos de Química para Ingeniería, 1^a ed. 3^a reimpresión, 2009, ed. Thomson.

1.1. Los Elementos Químicos y la Tabla periódica

Elemento químico

- Los elementos químicos son sustancias que no puede subdividirse por procesos químicos o físicos.
- Los elementos químicos están formados por átomos
- Se conocen 113 elementos, de los cuales 83 se encuentran en forma natural en la Tierra.
- El nombre y símbolo de cada elemento químico se recoge en la tabla periódica de los elementos

Sistema Periódico de los Elementos

Las propiedades de los elementos son función periódica de sus números atómicos

en la Tabla
Periódica

Los elementos químicos están ordenados siguiendo un orden creciente de su número atómico

- Se corresponden en columnas los elementos que tienen propiedades análogas

Elemento químico: sistema periódico de los elementos químicos

Elemento químico: sistema periódico de los elementos químicos																						
1 1A																	18 8A					
1 H Hidrógeno 1.008																	2 He Helio 4.003					
2 2A																	13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	
3 Li Litio 6.941	4 Be Berilio 9.012											5 B Boro 10.81	6 C Carbono 12.01	7 N Nitrógeno 14.01	8 O Oxígeno 16.00	9 F Flúor 19.00	10 Ne Neón 20.18					
11 Na Sodio 22.99	12 Mg Magnesio 24.31	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	13 Al Aluminio 26.98	14 Si Silicio 28.09	15 P Fósforo 30.97	16 S Azufre 32.07	17 Cl Cloro 35.45	18 Ar Argón 39.95					
19 K Potasio 39.10	20 Ca Calcio 40.08	21 Sc Escandio 44.96	22 Ti Titanio 47.88	23 V Vanadio 50.94	24 Cr Cromo 52.00	25 Mn Manganeso 54.94	26 Fe Hierro 55.85	27 Co Cobalto 58.93	28 Ni Níquel 58.69	29 Cu Cobre 63.55	30 Zn Zinc 65.39	31 Ga Galio 69.72	32 Ge Germanio 72.59	33 As Arsénico 74.92	34 Se Selenio 78.96	35 Br Bromo 79.90	36 Kr Criptón 83.80					
37 Rb Rubidio 85.47	38 Sr Estroncio 87.62	39 Y Itrio 88.91	40 Zr Zirconio 91.22	41 Nb Niobio 92.91	42 Mo Molibdeno 95.94	43 Tc Tecnecio (98)	44 Ru Rutenio 101.1	45 Rh Rodio 102.9	46 Pd Paladio 106.4	47 Ag Plata 107.9	48 Cd Cadmio 112.4	49 In Indio 114.8	50 Sn Estadio 118.7	51 Sb Antimonio 121.8	52 Te Telurio 127.6	53 I Yodo 126.9	54 Xe Xenón 131.3					
55 Cs Cesio 132.9	56 Ba Bario 137.3	57 La Lantano 138.9	72 Hf Hafnio 178.5	73 Ta Tántalo 180.9	74 W Tungsteno 183.9	75 Re Renio 186.2	76 Os Osmio 190.2	77 Ir Iridio 192.2	78 Pt Platino 195.1	79 Au Oro 197.0	80 Hg Mercurio 200.6	81 Tl Talio 204.4	82 Pb Plomo 207.2	83 Bi Bismuto 209.0	84 Po Polonio (210)	85 At Astatio (210)	86 Rn Radón (222)					
87 Fr Francio (223)	88 Ra Radio (226)	89 Ac Actinio (227)	104 Rf Rutherfordio (257)	105 Db Dubnio (260)	106 Sg Seaborgio (263)	107 Bh Bohrio (262)	108 Hs Hassio (265)	109 Mt Meitnerio (266)	110 Ds Darmstadtio (269)	111 Rg Roentgenio (272)	112	113	114	115	116	(117)	118					

58 Ce Cerio 140.1	59 Pr Praseodimio 140.9	60 Nd Neodimio 144.2	61 Pm Promecio (147)	62 Sm Samario 150.4	63 Eu Europio 152.0	64 Gd Gadolinio 157.3	65 Tb Terbio 158.9	66 Dy Disproscio 162.5	67 Ho Holmio 164.9	68 Er Erbio 167.3	69 Tm Tulio 168.9	70 Yb Iterbio 173.0	71 Lu Lutecio 175.0
90 Th Torio 232.0	91 Pa Protactinio (231)	92 U Uranio 238.0	93 Np Neptunio (237)	94 Pu Plutonio (242)	95 Am Americio (243)	96 Cm Curio (247)	97 Bk Berkelio (247)	98 Cf Californio (249)	99 Es Einsteinio (254)	100 Fm Fermio (253)	101 Md Mendelevio (256)	102 No Nobelio (254)	103 Lr Laurencio (257)

Metales	
Metaloides	
No metales	

La designación del grupo 1-18 ha sido recomendada por la International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) pero aún no está en uso. En este texto se usa la notación estadounidense estándar para los grupos (1A-8A y 1B-8B). No se han asignado nombres para los elementos 112-116 y 118. El elemento 117 todavía no se ha sintetizado.

Figura procedente del libro "Química", Raymon Chang, McGraw Hill, 10ª ed., 2010

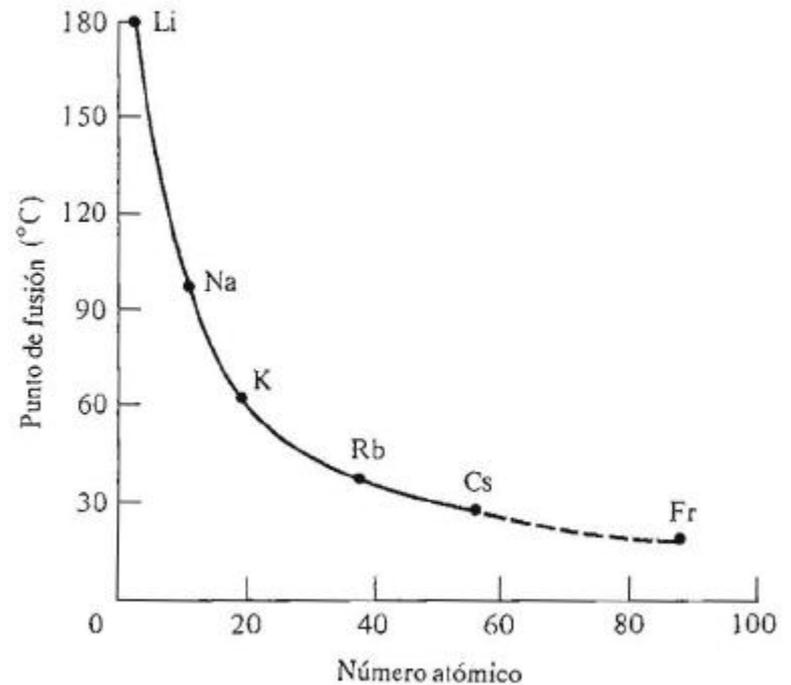
Ejemplo : VARIACION PERIÓDICA DE LAS PROPIEDADES FÍSICAS DE LOS METALES. PREDICCIÓN DE PROPIEDADES

✓ EN EL GRUPO

- ✓ Ejemplo, puntos de fusión de los metales alcalinos

✓ EN EL PERIODO

- ✓ Densidades de los metales de transición



1.2. Especies químicas, reacciones y cambios de energía

- ✓ Especies químicas
 - ✓ Fórmulas moleculares
 - ✓ Masa molecular, masa molar, mol
- ✓ Reacciones químicas
 - ✓ Ecuación química
 - ✓ Carácter cuantitativo
 - ✓ Rendimiento
 - ✓ Cambios de energía

Moléculas. Fórmulas

- Una molécula es un agregado de átomos con una configuración definida, mantenidos juntos por interacciones químicas (enlaces químicos).



Las moléculas se representan por fórmulas.

– La fórmula de una molécula o fórmula molecular indica la composición de la misma

▶ La fórmula del agua es H_2O

▶ La fórmula del etano es $\text{CH}_3 - \text{CH}_2\text{OH}$ $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$

– La fórmula empírica indica qué elementos están presentes y la relación mínima de números enteros entre sus átomos

▶ La fórmula del peróxido de hidrógeno es H_2O_2 . Su fórmula empírica: HO

Fórmula de los compuestos iónicos

– Los compuestos iónicos no forman moléculas discretas.

– Están formados por iones formando redes cristalinas; macroestructuras ordenadas en las que la proporción de cationes y aniones es tal que se compensan las cargas.

▶ La fórmula del cloruro de sodio es NaCl

Esta formado por iones Na^+ e iones Cl^- en la proporción 1/1

Masa Molecular. Masa Molar. Mol

Masa Molecular (uma) -masa atómica

La masa molecular es la suma de las masas atómicas de los átomos que forman la molécula. Se mide en uma.

► Masa atómica del agua:

$$2 \text{ Mat H} + \text{Mat O} = 2 \cdot (1 \text{ uma}) + 16 \text{ uma} = 18 \text{ uma}$$

Masa Molar (gramos)

La masa molar de un compuesto es la masa, en gramos, de 1 mol del compuesto

► Masa molar del agua es 18 g

Mol

Un mol de un compuesto tiene una masa igual a su masa atómica, expresada en gramos y contiene el número de Avogadro de átomos

	H ₂ O	H	O
Molar	1 mol H ₂ O	2 mol H	1 mol O
Masa	18 g H ₂ O	2 g H	16 g O
Partículas	N _A moléculas H ₂ O	2 N _A átomos H	N _A átomos O

¿Cómo relacionar masa, número de moles, número de átomos ó de moléculas?

a través de

[M	masa molar (<i>valor</i> , gramos/mol)	y
	N _A	número de Avogadro (= $6.022 \cdot 10^{23}$, átomos/mol)	

Ejemplos - *¿Cómo relacionar masa, número de moles, número de átomos ó de moléculas?*

1- El helio es un gas empleado en la industria, en investigaciones en las que se requiere baja temperatura, en los tanques para buceo profundo, y también se usa para inflar globos.

Si se dispone de 6,5 g de He, ¿Cuántos moles son ? , ¿Cuántos átomos son?

2- El zinc es un metal que se emplea para fabricar latón (con cobre) y para recubrir hierro con el objeto de prevenir la corrosión.

¿Cuántos gramos de Zn hay en 0,35 moles de Zn? , ¿Cuántos átomos son?

3- Se dispone de 16,5 g de ácido oxálico, $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$, ¿Cuántos moles hay en esos gramos de ácido oxálico? ¿Cuántas moléculas de ácido oxálico? ¿Cuántos átomos de carbono? ¿Cuál es la masa de una molécula de ácido oxálico?

4- El metano, CH_4 , es el componente mayoritario del gas natural.

¿Cuántos moles de CH_4 son 6 g ?

Ejemplos - *Determinación de las fórmulas empíricas y moleculares.*

1- Mediante análisis químico se ha obtenido la siguiente composición porcentual del isooctano, compuesto que se emplea como estándar para determinar el octanaje de un combustible: 84,12 % de C, 15,88 % de H. Su masa molecular es 114.2 g/mol. Determinar la fórmula molecular del isooctano.

2- Una muestra de un compuesto contiene 1,52 g de nitrógeno (como N) y 3,47 g de oxígeno (como O). Si se conoce que la masa molar de este compuesto está entre 90 y 95 g/mol, determinar la fórmula molecular y la masa molar exacta de este compuesto.

3- Determinar las fórmulas: empírica y molecular de un compuesto conociendo la siguiente información:

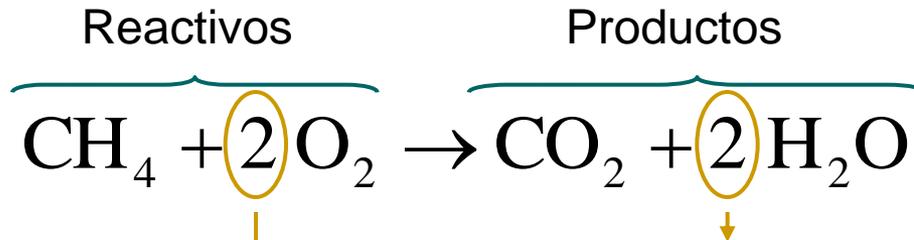
-- contiene C (41,39 %) + H (3,47 %) + O resto, siendo % en base masa.

-- 0,1293 moles de este compuesto suponen una masa de 15 gramos.

Reacciones Químicas. Ecuación Química.

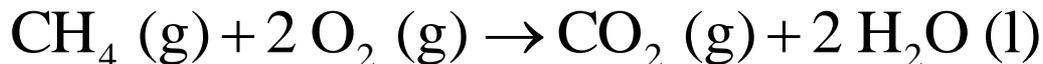
Un cambio químico o una reacción química es la transformación de unos compuestos en otros distintos

- Las reacciones químicas trae consigo un cambio energético
- Las reacciones químicas se representan mediante ecuaciones químicas



Coeficientes estequiométricos (Conservación de la masa)

En determinados casos es necesario especificar el estado físico: sólido (s), líquido (l), gas (g) o disolución acuosa (aq),



Si en la reacción intervienen iones, hay que igualar, además, electrónicamente, para que se cumpla la ley de conservación de la carga.



Carácter Cuantitativo de las Reacciones Químicas

Puesto que en una reacción química debe conservarse la masa y la carga



La ecuación química adquiere las características de una ecuación matemática

$2 \text{H}_2\text{O}$	\rightarrow	2H_2	+	O_2
2 moléculas H_2O		2 moléculas H_2		1 moléculas O_2
2 mol H_2O		2 mol H_2		1 mol O_2
$2 \cdot 18 = 36 \text{ g H}_2\text{O}$		$2 \cdot 2 = 4 \text{ g H}_2$		32 g O_2

Ejemplos - *Carácter Cuantitativo de las Reacciones Químicas*

1- Ajustar la estequiometría de las siguientes reacciones:



2 - La glucosa, $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$, reacciona con el oxígeno para dar dióxido de carbono y agua. ¿Qué masa de oxígeno (en gramos) se requiere para la reacción total de 25,0 g de glucosa? ¿Qué masa de dióxido de carbono y agua (en gramos) se formara?

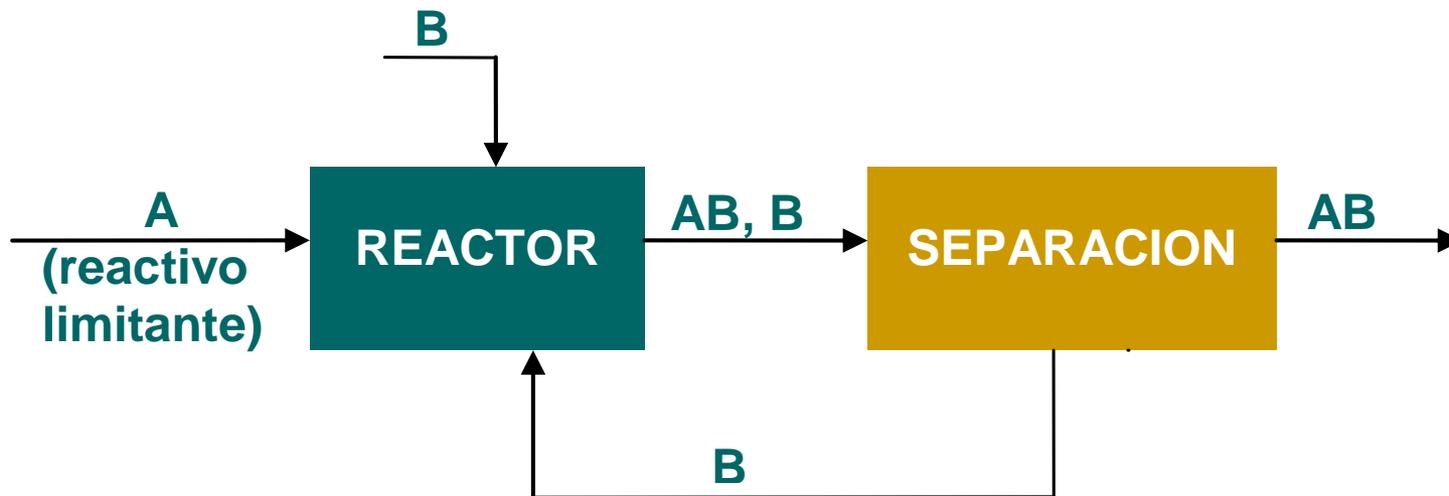
3 - Los metales alcalinos reaccionan con agua para formar hidrógeno gaseoso y el hidróxido del metal correspondiente. Por ejemplo, en la reacción entre el litio y el agua, ¿Cuántos gramos de litio se necesitan para producir 9,9 g de H_2 ?

4 - Un determinado compuesto está formado por carbono, hidrógeno y nitrógeno. Cuando 0,1156 gramos de este compuesto reaccionan con O_2 , se producen 0,1638 gramos de CO_2 y 0,1676 gramos de H_2O .

Asumiendo que todo el carbono presente en esta masa de compuesto se convierte a CO_2 y que todo el hidrógeno también presente lo hace a H_2O , calcular la composición en masa (%) de C, H y N del compuesto. Con la composición en masa obtenida, determinar la fórmula empírica del compuesto.

Reacción química con Reactivo limitante

- Es muy frecuente que el objetivo de una reacción sea producir la mayor cantidad posible de un compuesto a partir de una cantidad fija de material inicial (reactivo limitante). En estos casos, el o los reactivos no limitantes se añaden en exceso para favorecer el consumo del reactivo limitante.



Ejemplos - *Reacción con reactivo limitante*

1- El metanol, CH_3OH , puede fabricarse por la reacción del monóxido de carbono con hidrógeno.

Supongamos que se mezclan 356 g de CO con 65,0 g de H_2 . ¿Cuál es el reactivo limitante? ¿Qué masa de metanol se puede producir? ¿Qué masa del reactivo en exceso queda después de que se ha consumido del reactivo limitante?

2- El fósforo se puede encontrar en la naturaleza en forma de fluorapatita,

$\text{CaF}_2 \cdot 3\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$, es decir una parte de CaF_2 y tres partes de $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$.

En la preparación de fertilizantes, este mineral se hace reaccionar con H_2SO_4 y H_2O , siendo los productos de la reacción H_3PO_4 , HF , y $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Si se parte de 500 gramos de fluorapatita, y se hacen reaccionar con 50 gramos de H_2SO_4 y teniendo H_2O en gran exceso, calcular la cantidad de H_3PO_4 que se produce.

3- La reacción entre el aluminio y el óxido de hierro (III) puede producir temperaturas cercanas a los 3000°C , que se utiliza para soldar metales.

En un proceso se hicieron reaccionar 124 g de Al con 601 g de Fe_2O_3 , ¿qué masa, en gramos, de Al_2O_3 se formó?, ¿qué cantidad de reactivo en exceso se podría recuperar al completarse la reacción?

Rendimiento Porcentual de una Reacción Química

La cantidad máxima de un producto que se puede obtener a partir de una reacción química es el rendimiento teórico.

En la obtención de un producto se producen pérdidas debido a:

- la separación y purificación del producto
- porque en el proceso se produzcan reacciones secundarias que originan diferentes productos; ó porque la reacción es reversible

El rendimiento real es inferior al rendimiento teórico

$$RP = \frac{RR}{RT} \cdot 100$$

RP: el rendimiento porcentual de la reacción

RR: el rendimiento real, en masa obtenida de producto

RT: el rendimiento teórico, en masa que se puede obtener del producto según la estequiometría de la reacción química

Ejemplos - Rendimiento de una Reacción Química

1 - El titanio es un metal fuerte, ligero y resistente a la corrosión, que se emplea en la construcción de naves espaciales, aviones, motores para aviones, estructura de bicicletas, etc. Este metal, se obtiene por la reacción de TiCl_4 y Mg a altas temperaturas (950- 1150 °C), que da lugar a Ti y MgCl_2 .

Si para su obtención en una determinada planta industrial, se hacen reaccionar 35.4 ton de TiCl_4 con 11.3 ton de Mg , determinar:

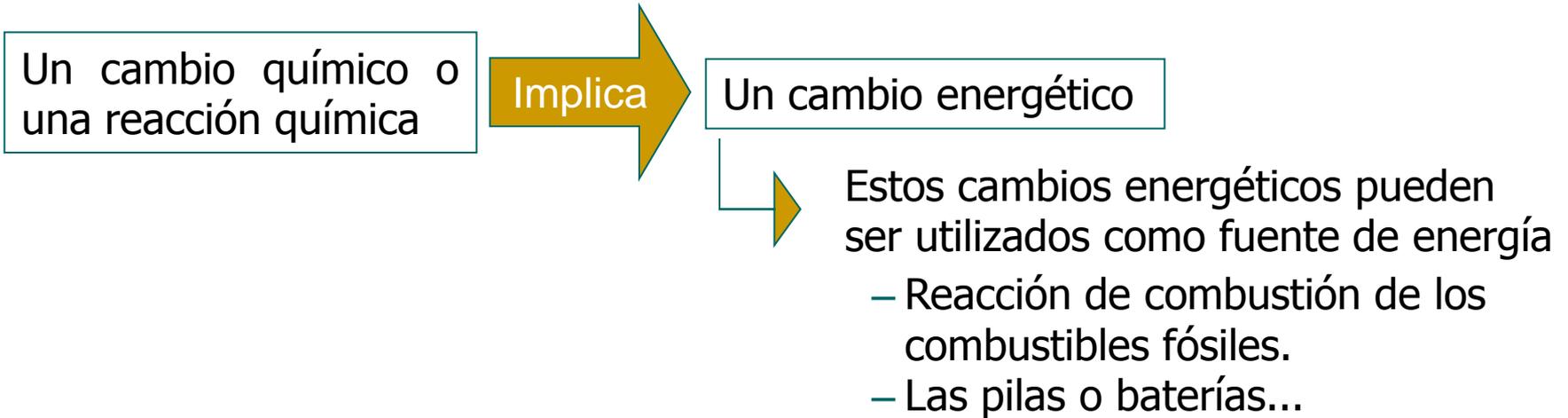
- (a) Cuál es el reactivo limitante, indicando porqué.
- (b) Qué cantidad teórica de Ti se puede obtener.
- (c) Cuál es el rendimiento real de la operación si se obtienen 7.91 ton de Ti .

2 – En la industria, el vanadio metálico, que se emplea en aleaciones de acero, se puede obtener por la reacción entre el óxido de vanadio (V), V_2O_5 , con calcio a temperaturas elevadas.

En un proceso industrial en el que se hacen reaccionar 1,54 ton de V_2O_5 con 1,96 ton de Ca , calcular :

- (a) El rendimiento teórico de V
- (b) El porcentaje de rendimiento si se obtienen 0,8 ton de V .

Los Cambios de Energía en los Procesos Químicos.



-
- ▶ La forma más común de energía que observamos en los procesos químicos es el calor.
 - ▶ La ciencia que estudia el calor, el trabajo y sus transformaciones es la termodinámica.
 - ▶ Los principios de la termodinámica se utilizan para explicar la energía y sus transformaciones.

Entalpía de Reacción

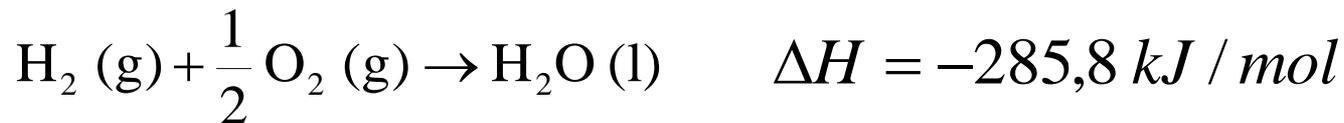
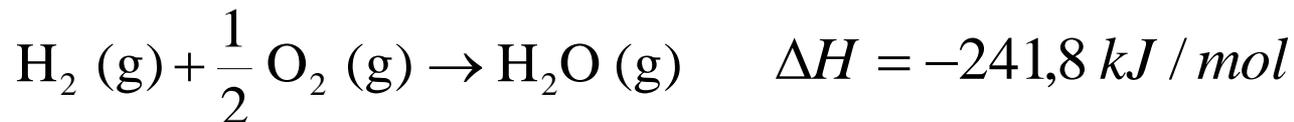
► La entalpía de una reacción química es el calor transferido en la reacción a presión constante.

Depende de:

- Los reactivos y los productos y las cantidades en que están presentes.
- Son importante también los estados de los reactivos y productos.

La entalpía de una reacción química se suele expresar en cantidad de energía transferida por mol de compuesto (reactivo o producto de la reacción).

► Ejemplo: Entalpía de formación del agua



¿Qué indica el signo negativo de ΔH ?

Ejemplos - Entalpía de reacción.

1 - La sacarosa (azúcar, $C_{12}H_{22}O_{11}(s)$) se oxida a $CO_2(g)$ y $H_2O(l)$.

El cambio de entalpía para esta reacción es de -5646 kJ/mol de sacarosa.

(a) ¿Cuál es la variación de entalpía para la oxidación de $5,0 \text{ g}$ de azúcar?

(b) ¿Qué cantidad de CO_2 y de H_2O se genera por la oxidación de $5,0 \text{ g}$ de azúcar?

2 - Disponiendo del valor de la entalpía de combustión del metano (CH_4) :

$\Delta H_c = -802 \text{ kJ / mol}$ de metano, para reactivos y productos en estado gaseoso

(a) Calcular la energía producida por la combustión de $4,5 \text{ g}$ de metano (CH_4)

(b) Calcular la cantidad de CO_2 generada por cada mol de metano, y por la masa de $4,5 \text{ g}$ de metano.

(c) Si planteamos que el producto de la reacción H_2O está en forma líquida, ¿cambia el valor de la entalpía de combustión del metano?

Ley de Hess

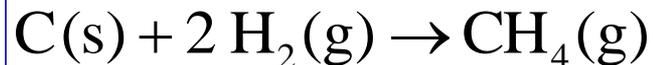
La entalpía es una función de estado y su variación sólo depende de los estados iniciales y finales, pero no de los intermedios por los que pueda trascurrir la reacción.



El calor de una reacción a presión constante es siempre el mismo y no depende del camino seguido o etapas intermedias.

↳ Cuando una reacción química se puede expresar como sumas algebraicas de dos o más reacciones, el calor de reacción de la primera es igual a la suma algebraica de los calores de reacción parciales.

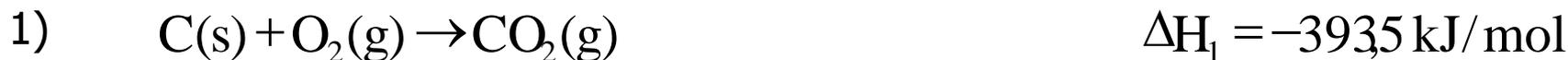
Ejemplo. Calcular el calor de formación del metano:
a partir de los siguientes datos:



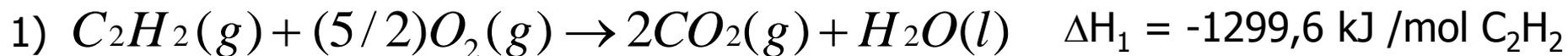
- 1) $\text{C(s)} + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g})$ $\Delta H_1 = -393,5 \text{ kJ / mol}$
- 2) $\text{H}_2(\text{g}) + \frac{1}{2} \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O(l)}$ $\Delta H_2 = -285,8 \text{ kJ / mol}$
- 3) $\text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{O(l)}$ $\Delta H_3 = -890,4 \text{ kJ / mol}$

Ejemplos -Ley de Hess

1- Calcular el calor de combustión de C a CO :
a partir de los siguientes datos:



2- Calcular AH para la siguiente reacción :
a partir de los siguientes datos:



Entalpías Estándar de Formación

La **entalpía normal o estándar de formación** es la variación de entalpía que se necesita para obtener un mol de una sustancia en su estado normal (25° C y 1 atm), a partir de los correspondientes elementos en su estado normal de referencia.

Se representa por: ΔH_f^0

Se dispone de los valores de las entalpías de formación de un gran número de compuestos, a 25° C y 1 atm, recogidos en forma de tablas en los capítulos de termoquímica de los libros de texto, en los *Handbook* y en bases de datos.

Las entalpías de formación de los elementos en su forma más estable, a 25° C y 1 atm, son cero.

Aplicando la ley de Hess se deduce que la entalpía de una reacción en condiciones normales puede calcularse:

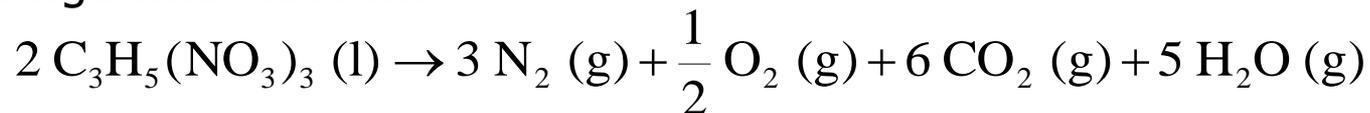
$$\Delta H_R^0 = \sum n_{(productos)} \cdot \Delta H_{f(productos)}^0 - \sum n_{(reactivos)} \cdot \Delta H_{f(reactivos)}^0$$

Ejemplos - Entalpías Estándar de Formación

1- Recordando un ejemplo anterior, acerca de oxidación de la sacarosa ($C_{12}H_{22}O_{11}(s)$) a $CO_2(g)$ y $H_2O(l)$, en el que se ha dado como dato el valor de ΔH para esta reacción de oxidación = -5646 kJ/mol de sacarosa, Chequear si este valor es correcto conociendo los valores de las entalpías estándar de formación :

$C_{12}H_{22}O_{11}(s)$	- 2221 kJ/mol
$CO_2(g)$	- 393,5 kJ/mol
$H_2O(l)$	- 285,8 kJ/mol

2 - La nitroglicerina, $C_3H_5(NO_3)_3$, es un poderoso explosivo que al detonarse se produce la siguiente reacción:



Calcular el cambio de entalpía al detonar 10 g de nitroglicerina en condiciones normales, conocidos los valores de las entalpías estándar de formación:

Nitroglicerina (l): -364 kJ/mol, $CO_2(g)$: - 393,5 kJ/mol, $H_2O (g)$: - 241,8 kJ/mol.

Ejemplos – Cálculos de reacciones de combustión a partir de datos ΔH°_f

Un determinado combustible gaseoso tiene la siguiente composición molar:

<u>Comp.</u>	<u>% molar</u>
H ₂	24
CH ₄	30
C ₂ H ₆	11
C ₂ H ₄	4,5
C ₄ H ₈	2,5
CO	6
CO ₂	8
O ₂	2
N ₂	12

1. ¿Qué reacciones químicas tienen lugar en la combustión de este combustible ?

2. ¿ Qué cantidad de aire (en moles y en volumen) es necesaria para la combustión por cada mol de combustible ?

3. ¿ Qué cantidad de CO₂ se genera (en moles y en volumen) en la combustión por cada mol de combustible ?

4. ¿ Cómo se puede calcular el poder calorífico de este combustible ?

Se dispone de datos de las entalpías estándar de formación de los compuestos.

Ejemplos – Cálculos de reacciones de combustión a partir de datos ΔH°_f
Comparación de combustibles

LOS CALCULOS Y COMPARACION DEL PODER CALORIFICO ENTRE DIFERENTES COMBUSTIBLES GASEOSOS, LIQUIDOS Y SÓLIDOS (CARBONES), CANTIDADES DE CO₂ Y SO₂ GENERADOS, SE REALIZARAN EN LAS PRACTICAS DE AULA

UN CASO DE ESTUDIO: HIDROGENO PRACTICAS DE AULA

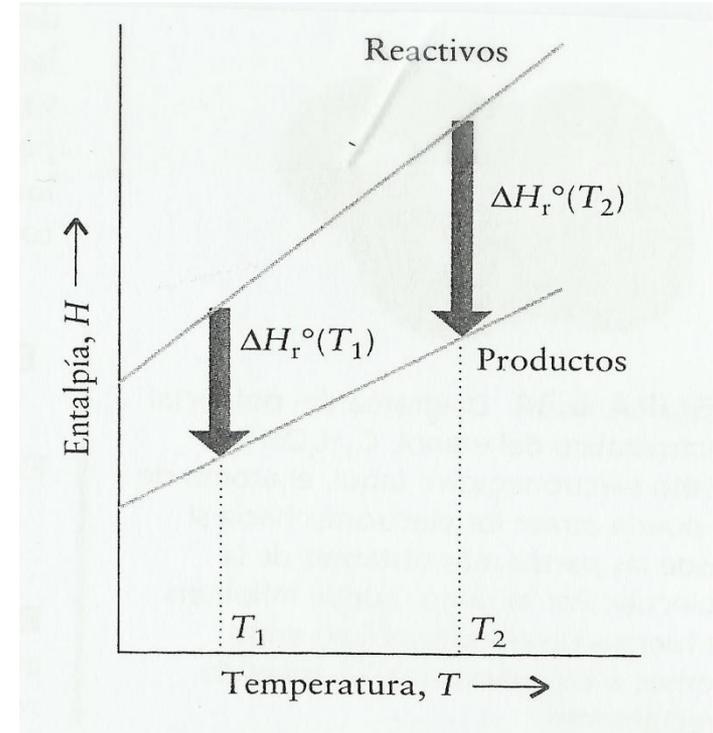
Variación de la entalpía de reacción con la temperatura

Supongamos que se conoce la entalpía de reacción para una temperatura dada pero la requerimos para otra temperatura

Las entalpías de reacción de los reactivos y de los productos aumentan con la temperatura, Figura ejemplo (Atkins y Jones, "Principios de Química):

Si la capacidad calorífica de los reactivos es mayor que la de los productos, la entalpía de los reactivos aumentará en forma más abrupta a medida que aumenta la temperatura; si la reacción es exotérmica, como en la figura, la entalpía de reacción tendrá mayor valor negativo; si la reacción es endotérmica, la entalpía de reacción será menos positiva e incluso puede ser negativa.

El aumento de la entalpía de una sustancia cuando la temperatura se eleva depende de su capacidad calorífica a presión constante, C_p , y se calcula por la Ley de Kirchhoff



$$\Delta H_R^0(T_2) = \Delta H_R^0(T_1) + (T_2 - T_1)\Delta C_p$$

$$\Delta C_p = \sum n_{(productos)} C_{p(productos)} - \sum n_{(reactivos)} C_{p(reactivos)}$$

Capacidad calorífica

Los cambios de temperatura que experimenta un cuerpo cuando absorbe cierta cantidad de calor se determinan por su capacidad calorífica, la energía necesaria para elevar la temperatura del cuerpo 1°C.

La capacidad calorífica de una sustancia puede expresarse por medio de la relación $(q / \Delta T)$, en esta relación q es el flujo total de calor desde o hacia la sustancia, y ΔT es el cambio de temperatura producida por el flujo de calor.

La capacidad calorífica molar se define como la cantidad de calor que se necesita para producir un cambio de 1°C en un mol de sustancia. Entonces, siendo n los moles de sustancia,

$$q = n C_p \Delta T$$

El término calor específico se refiere al calor necesario para producir un cambio de temperatura de 1°C en 1 gramo de una sustancia.

Ejemplos en la tabla.

Compuesto	Temperatura (°C)	Calor específico (J°/C-g)
H ₂ O(<i>l</i>)	15	4.184
H ₂ O(<i>s</i>)	-11	2.03
Al(<i>s</i>)	20	0.89
C(<i>s</i>)	20	0.71
Fe(<i>s</i>)	20	0.45
Hg(<i>l</i>)	20	0.14
CaCO ₃ (<i>s</i>)	0	0.85
MgO(<i>s</i>)	0	0.87
HgS(<i>s</i>)	0	0.21

Ejemplos – Capacidad calorífica y predicción de la entalpía de reacción a una temperatura diferente

1.- La entalpía estándar de la reacción $\text{N}_{2(g)} + 3 \text{H}_{2(g)} \rightarrow 2 \text{NH}_{3(g)}$ es -92,22 kJ /mol a 298 K.

Teniendo en cuenta que la síntesis industrial tiene lugar a 450°C, ¿cuál es el valor de la entalpía de reacción a esta última temperatura? .

2.- La capacidad calorífica molar del óxido de hierro (III), Fe_2O_3 , es 120 kJ/mol.

(a) ¿Cuál es su calor específico?,

(b) ¿cuál es la cantidad de calor que se necesita para aumentar la temperatura de un bloque de 2 kg de Fe_2O_3 de 120 °C a 380°C?

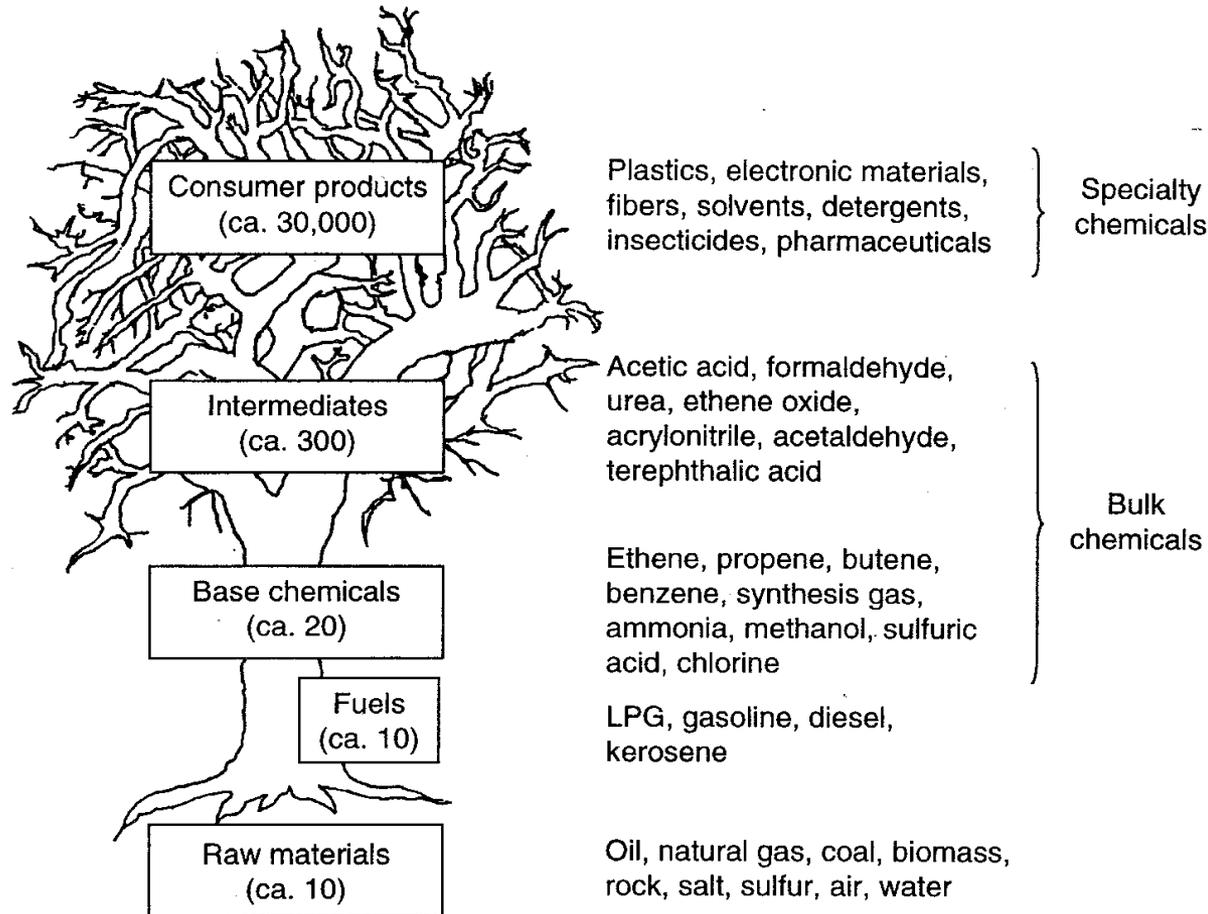


1.3. Los productos químicos, aprovechamiento químico-industrial

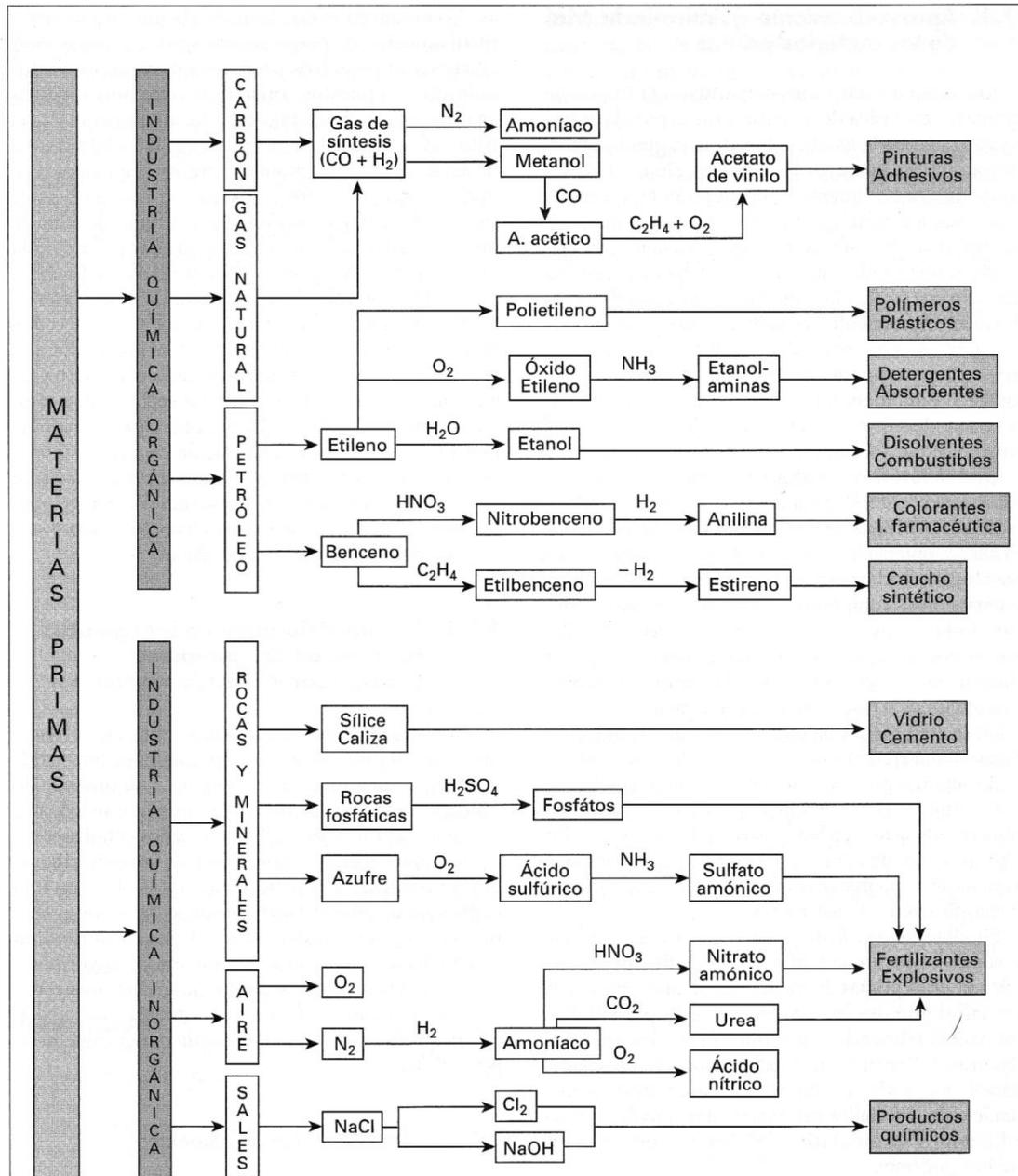
- ✓ **Clasificación**
- ✓ **Aprovechamiento químico-industrial de las materias primas**

Clasificación de los productos químicos

En base a esta estructura de la industria química en forma de árbol se muestran los tipos de productos químicos: de base, los intermedios y los productos finales de usos industriales y domésticos. Todos ellos obtenidos por un gran número de reacciones y procesos químicos a partir de los elementos y especies químicas.



Aprovechamiento químico-industrial de las materias primas



La industria química se sirve de, relativamente, pocas materias primas, que se convierten por sucesivos procesos químicos en varios de miles de productos químicos con aplicaciones muy diversas.

La fabricación de ácido sulfúrico y amoníaco, por las cantidades producidas, son dos de los casos más representativos de las síntesis inorgánicas.

La producción de nitrobenceno es un ejemplo de relación entre los sectores inorgánicos (producción de HNO_3) y orgánico (producción de benceno).

La obtención del gas de síntesis (CO y H_2) a partir del carbón, remarca la posición que como materia prima tiene, en competencia o sustitución del gas natural y el petróleo.