

**MEMORIA DE ACTIVIDADES:
CONVOCATORIA DE AYUDAS DE LA UNIVERSIDAD DE
SALAMANCA A PROYECTOS DE INNOVACIÓN Y MEJORA
DOCENTE.**

CURSO 2020-2021

PROYECTO ID2020/107

TÍTULO DEL PROYECTO:

LABORATORIO VIRTUAL DE QUÍMICA FÍSICA

REFERENCIA:

ID2020/107

PROFESOR/A COORDINADOR/A:

M^a del Mar Canedo Alonso NIF: 10065738H E-mail: mcanedo@usal.es

RELACIÓN DE MIEMBROS DEL EQUIPO:

M^a del Mar Canedo Alonso NIF: 10065738H E-mail: mcanedo@usal.es

M^a Dolores Merchán Moreno NIF: 07858922Y E-mail: mdm@usal.es

José Luis Usero García NIF: 07803610A E-mail: usero@usal.es

INTRODUCCIÓN

El proyecto de innovación docente “Laboratorio virtual de Química Física” pretende ser un complemento a la docencia práctica en los laboratorios del área de Química Física.

Además, en el caso de suspensión de la docencia presencial por una situación de emergencia, las experiencias virtuales pueden sustituir de manera temporal las prácticas en el laboratorio,

Los miembros del equipo han intervenido en diferentes proyectos de innovación docente dirigidos a la mejora de las prácticas de laboratorio, bien en proyectos estaban dirigidos a la adquisición de material docente, o bien en otros en los que proponen la introducción de nuevas metodologías docentes como la docencia virtual, el modelo de clase invertida o bien la aplicación de la metodología educativa aprendizaje/servicio.

El grupo de trabajo ha considerado interesante introducir experiencias virtuales en los laboratorios y aulas donde se imparten contenidos de Química Física para mejorar la docencia y reforzar los contenidos de las diferentes asignaturas. El laboratorio virtual podrá sustituir al presencial temporalmente en caso de necesidad.

OBJETIVO

El objetivo de este Proyecto de Innovación y Mejora Docente es el diseño de un laboratorio virtual que contenga una serie de experiencias virtuales que se ajusten a los contenidos del área de Química Física incluidos en las signaturas: *Experimentación en Química Física* del Grado en Química, *Química Física* y *Termodinámica Aplicada* del Grado en Ingeniería Química.

Las experiencias virtuales servirán para complementar el trabajo experimental del laboratorio, proporcionando a los estudiantes una herramienta para que puedan visualizar las experiencias previamente a la realización del trabajo experimental en el laboratorio y analizar los procesos bajo diferentes condiciones.

También pueden ser utilizadas en el aula, siendo de gran ayuda en las explicaciones teóricas puesto que se podrán visualizar simultáneamente los conceptos que se están impartiendo.

Las experiencias virtuales pueden ser muy importantes en una situación en la que no fuese posible la realización presencial de las prácticas en el laboratorio, en el caso de suspensión de la docencia presencial por una situación de emergencia.

3. ACTIVIDADES REALIZADAS

El proyecto de innovación docente *Laboratorio virtual de Química Física* a una serie de asignaturas a las que va dirigido este proyecto pertenecen al área de Química Física y sus contenidos se encuentran en los campos de la termodinámica, cinética química, espectroscopía, adsorción, etc, En concreto va dirigido a la asignatura Experimentación en Química Física del Grado en Química y las asignaturas Química Física y Termodinámica Aplicada del grado en Ingeniería Química. . Los profesores participantes en este proyecto han diseñado una serie de experiencias virtuales dirigidas a los alumnos que cursan estas asignaturas pero pueden ser utilizadas en cualquier otra asignatura del área de Química Física cuyos contenidos se ajusten a los conceptos teóricos en los que se fundamentan las experiencias.

Actividades realizadas:

1. Se analizaron los contenidos de las asignaturas a las que va dirigido el proyecto y seleccionaron aquellos que son adecuados para la realización de experiencias virtuales y que se encuentren disponibles online en páginas de libre acceso.
2. A través de la plataforma docente *studium* se proporciona a los estudiantes una relación bibliográfica a la que pueden acudir para su consulta y los enlaces correspondientes a un conjunto de bases de datos que pueden ser útiles durante el desarrollo de las experiencias virtuales.

Bibliografía:

- Chang, R., “*Química*”, 10ª ed. McGraw-Hill, 2000.
- Petrucci, R.H. y col. “*Química general. Principios y aplicaciones modernas*”. Pearson Ed. 2003 (reimpr. 2008).
- Atkins, P. y Jones, L. “*Principios de Química*”, 5ª ed. Editorial Panamericana, 2012.
- Atkins, P. “*Química General*”, 3ª ed. Editorial Omega, 1998.
- Ebbing, D.D. “*Química General*”. Ed. McGraw-Hill Interamericana, 1997.
- Atkins, P.W. *Fisicoquímica*, Panamericana, Madrid (2008).
- Levine, I.R. *Fisicoquímica (Vol. I)*, McGraw-Hill, México (2004).

Levine, I.R. *Fisicoquímica (Vol. II)*, McGraw-Hill, México (2004).

Castellan, G.W., *Fisicoquímica*. Fondo educativo Interamericano México 1981

Bases de datos:

- Constantes físicas fundamentales (<http://physics.nist.gov/cuu/Constants/>)
- Sistema Internacional de Unidades (<http://physics.nist.gov/cuu/Units/index.html>)
- NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>)
- IUPAC (<http://www.iupac.org/>)
- IUPAC Gold Book (Gold Book, Version 2.3.2, 2012-08-19).

3. Se seleccionan una serie de experiencias virtuales cuyos conceptos teóricos se ajusten a los contenidos de las asignaturas a las que va dirigido el Proyecto de Innovación y mejora docente y que se encuentren disponibles online en páginas web de libre acceso.

4. Para cada una de las experiencias virtuales se elabora un documento *pdf* en el que se incluye:

- Una breve introducción teórica en la que se exponen los contenidos teóricos básicos de la experiencia que se va a realizar.
- Los enlaces a través de los que se puede acceder a las experiencias virtuales.
- Esquema del procedimiento a seguir en cada uno de los enlaces propuestos.
- Cuestiones y ejercicios propuestos sobre la experiencia.

5. Los documentos *pdf* se ponen a disposición de los alumnos en la plataforma docente *studium* antes de la realización de las experiencias virtuales.

6. Los estudiantes realizan las experiencias virtuales, en el laboratorio, en el aula o en su propio domicilio, según las circunstancias del momento.

7. Una vez que han realizado la experiencia, los estudiantes analizan los resultados, obtienen las correspondientes conclusiones y elaboran un informe de la experiencia realizada.

4. JUSTIFICACIÓN ECONÓMICA

El Proyecto de Innovación docente ha recibido una valoración positiva pero no se ha solicitado financiación por lo que se han utilizado recursos de libre acceso disponibles en distintas páginas web.

5. RESULTADOS

A lo largo del curso 2020-2021 se han elaborado una serie de experiencias virtuales para realizarse en las asignaturas Química Física, 1^{er} Curso del Grado en Ingeniería Química, Termodinámica Aplicada, 2^o Curso del Grado en Ingeniería Química y Experimentación en Química Física, 3^{er} Curso del Grado en Química. En sucesivos cursos se elaborarán otras experiencias virtuales.

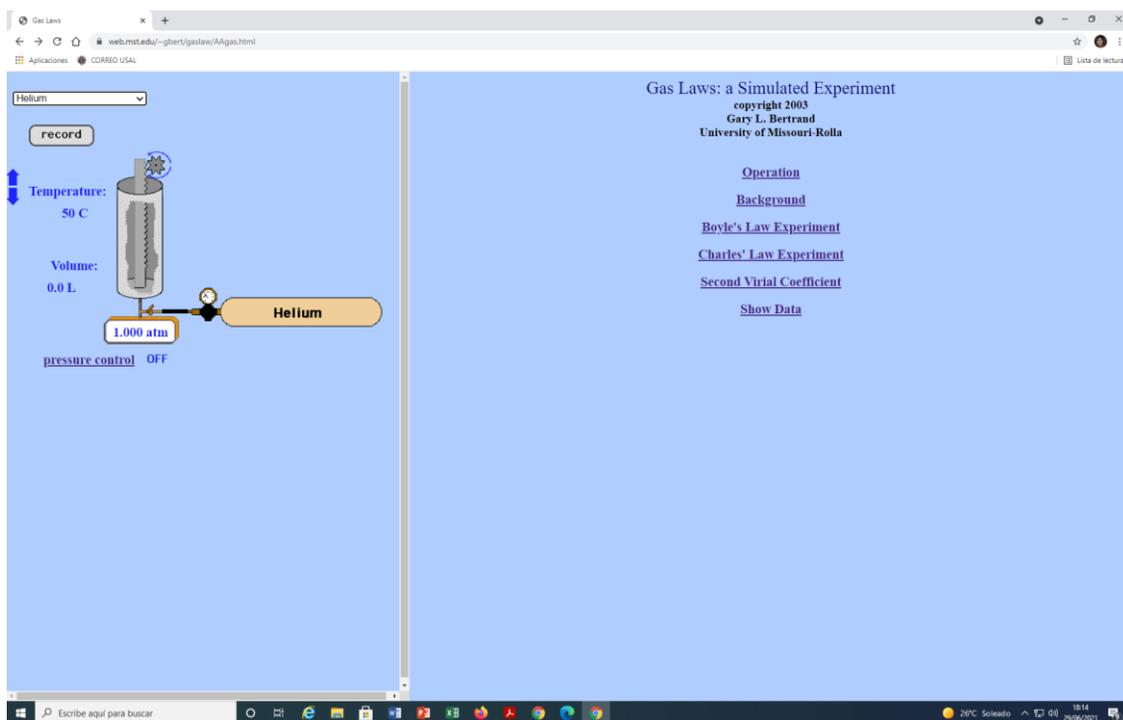
Las diferentes experiencias desarrolladas para el laboratorio virtual de Química Física se detallan a continuación.

LABORATORIO VIRTUAL DE QUÍMICA FÍSICA

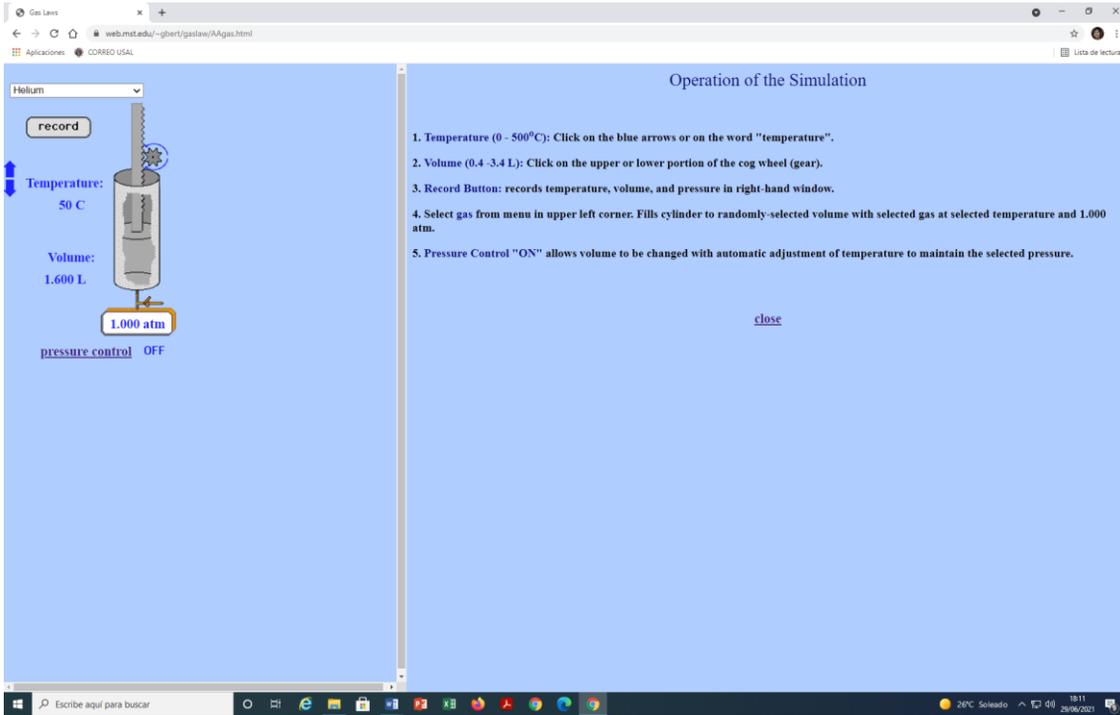
EXPERIENCIAS VIRTUALES

I.- LEYES EMPÍRICAS DE LOS GASES

<https://web.mst.edu/~gbert/gaslaw/AAgas.html>



The screenshot shows a web browser window displaying a virtual chemistry laboratory simulation. The browser's address bar shows the URL <https://web.mst.edu/~gbert/gaslaw/AAgas.html>. The simulation interface is split into two main panels. The left panel features a 3D model of a gas cylinder with a piston. A vertical double-headed arrow next to the cylinder indicates temperature control, with the current temperature set to 50 C. Below the cylinder, the volume is displayed as 0.0 L. A pressure gauge on the cylinder shows a reading of 1.000 atm. A 'record' button is located at the top left of the simulation area. A 'pressure control' toggle is set to 'OFF'. A 'Helium' gas source is connected to the cylinder. The right panel contains the title 'Gas Laws: a Simulated Experiment' with a copyright notice for 2003 by Gary L. Bertrand at the University of Missouri-Rolla. Below the title are several menu items: 'Operation', 'Background', 'Boyle's Law Experiment', 'Charles' Law Experiment', 'Second Virial Coefficient', and 'Show Data'. The Windows taskbar at the bottom of the screen shows the system tray with a temperature of 20°C, the date 12/01, and the time 18:14 on 25/06/2021.

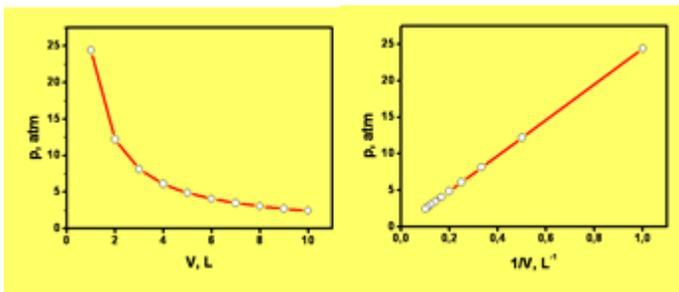


1.- LEY DE BOYLE-MARIOTTE.

Respuesta de un gas a la variación de presión

Boyle (1662) \rightarrow A $T = \text{cte}$ el volumen de una cantidad fija de gas es inversamente proporcional a la presión.

$$V \propto \frac{1}{P} \Rightarrow PV = \text{cte}$$



(a)

(b)

a) $PV = k_1$

b) $P = k_1 x \frac{1}{V} \rightarrow \text{RECTA } y = mx + b \text{ (} b=0\text{)}$

Para un gas dado a T y n = cte

$$P_1V_1 = cte = k_1$$

Para otras condiciones distintas P_2 y V_2 :

$$P_2V_2 = cte = k_1$$

$$P_1V_1 = k_1 = P_2V_2$$

$$P_1V_1 = P_2V_2$$

Ley universal que no depende de las características del gas.

Resumiendo:

- A temperatura constante, el producto entre la presión y el volumen de una cierta cantidad de gas es constante:

$$P V = k_1 \text{ (n, T constantes)}$$

- A temperatura constante, el volumen ocupado por una cierta cantidad de gas es inversamente proporcional a la presión aplicada:

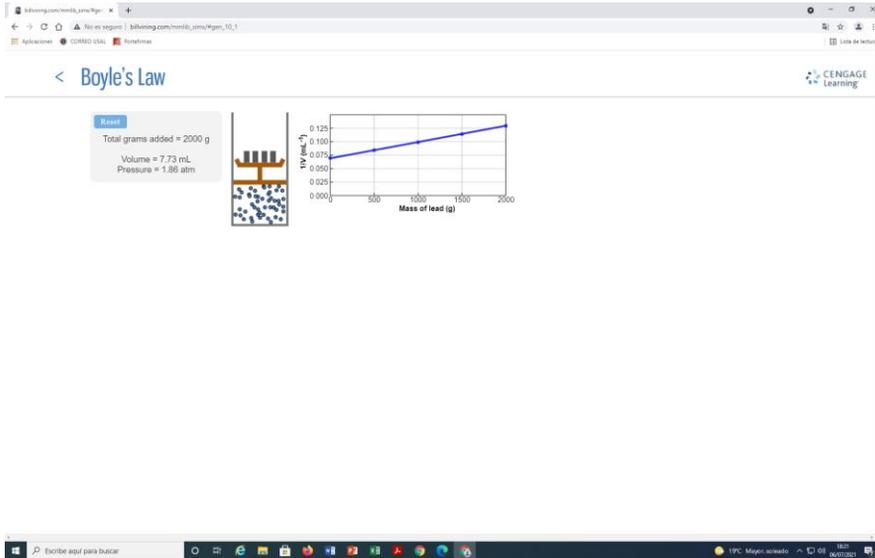
$$V \propto 1/P \text{ ó } V = k_1(1/P) \text{ (n, T constantes)}$$

- Para una cierta cantidad de gas a temperatura constante y dos estados distintos (P_1, V_1) y (P_2, V_2), se cumple

$$P_1V_1 = P_2V_2 \text{ (n, T constantes)}$$

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10_1



<https://web.mst.edu/~gbert/gaslaw/AAgas.html>

Boyle's Law

Helium, Argon, and Nitrogen below 100°C are the best gases for this simulated experiment.

1. Select a temperature and a gas. Click on Show Data .
2. Move the piston to its highest position. Click on Record .
3. Lower the piston in small increments (perhaps 0.2 ml), recording data for volumes down to the smallest value (0.4 ml).
4. Change the temperature OR load another gas OR re-load the same gas. Record data as in 2-3 above.
5. Click on select graph type .
6. Select PV vs P (constant T) . Click on graph It .
7. Note that the values of PV are essentially constant for the ideal gases (very small slopes).
8. If non-ideal gases Ethane or Carbon Dioxide have been studied, note that PV does not change appreciably at these pressures.
9. Record the information about the lines you have generated. Calculate the number of moles: ($n = \text{intercept} / RT$) for each set of data.

Discuss your observations.

[close](#)

Simulation Parameters:
 Gas: Helium
 Temperature: 50 C
 Volume: 1.600 L
 Pressure: 1.000 atm
 Pressure Control: OFF

2.- LEY DE CHARLES Y GAY-LUSSAC.

Respuesta de un gas a la variación de Temperatura

$P = \text{cte} \rightarrow$ El volumen de una cantidad fija de gas es proporcional a la temperatura independientemente de la naturaleza del gas

$$V \propto T \quad (P=\text{cte})$$

$$V = k_2 T$$

$$\frac{V}{T} = k_2$$

Al doblar la T (absoluta) se dobla el volumen, es decir V es una función lineal de T .

Otra forma de enunciar la ley:

$V = \text{cte} \rightarrow$ P de una cantidad fija de un gas es proporcional a su temperatura independientemente de la naturaleza del gas.

$$P \propto T \quad (V=\text{cte})$$

$$P = k_3 T$$

$$\frac{P}{T} = k_3$$

Relación V y T para un gas en condiciones distintas P dada:

$$\frac{V_1}{T_1} = \text{cte} = k_2$$

$$\frac{V_2}{T_2} = \text{cte} = k_2$$

$$\frac{V_1}{T_1} = k_2 = \frac{V_2}{T_2}$$

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

V vs T para gases diferentes ($V \propto T$ ($P=\text{cte}$))

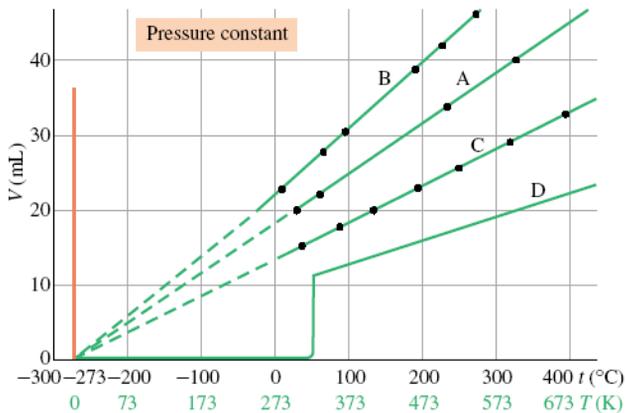


Figura:

- Dependencia lineal del V con T para gases diferentes.
- Las líneas tienen en común la intersección con el eje de T. Todos los V de los gases alcanzan un valor cero a una misma T.
- La T a la que el V de un gas hipotético se hace cero es el CERO ABSOLUTO de T
Escala Celsius = -273.15°C

Escala absoluta o Kelvin = 0 K

$$T(\text{K}) = t(^{\circ}\text{C}) + 273.15$$

Resumiendo:

A presión constante, el volumen ocupado por una cierta muestra de gas es proporcional a su temperatura absoluta:

$$V \propto T \text{ ó } V = k_2 T (n, P \text{ constante})$$

La ley de Charles es válida sólo si se utilizan temperatura absolutas (K).

Una cierta cantidad de gas a presión constante y dos estados distintos (T_1, V_1) y (T_2, V_2) , se cumple:

$$V_1/T_1 = V_2/T_2 \text{ (n, P constantes)}$$

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10_5



VNIVERSIDAD
D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

Temperature: 27 °C
Plot Data Clear

Volume (mL)
Temperature (°C)

22.0 mL

<https://web.mst.edu/~gbert/gaslaw/AAgas.html>

Helium
record

Temperature: 50 °C
Volume: 1.600 L
1.000 atm
pressure control OFF

Charles' Law

Helium, Argon, and Nitrogen are the best gases for this simulated experiment.

1. Select a temperature and a gas. Click on Show Data .
2. Click on pressure control to show ON.
3. Move the piston up or down until you reach a limiting value. Click on Record.
4. Change the volume in small increments (0.2 ml). Record data as in 2-3 above.
5. Turn pressure control to OFF. Set the temperature to 0 °C. Move the piston to 1.6 L or less (do NOT click Record) so that the pressure is different from the previous experiment.
6. Repeat steps 2-4 above.
7. Select a different gas and repeat steps 2-6 above.
8. Click on select graph type. Select V vs t (constant P) .
9. Note that all of the lines are converging at a low temperature.
10. Record the information about the lines you have generated. Calculate the temperature for $V = 0$:
{ $V_{=0} = - \text{intercept} / \text{slope}$ } for each set of data.

Discuss your observations.

close

3.- LEY DE AVOGADRO.

Relación cantidad-volumen

T y P ctes → Volúmenes iguales de diferentes gases contienen el mismo número de moléculas.

- El mismo número de moléculas ocupan un volumen total idéntico en las mismas condiciones de presión y temperatura, independientemente de la naturaleza del gas.

Ley de Avogadro: A una T y P dadas, el V de un gas es directamente proporcional a la cantidad del gas.

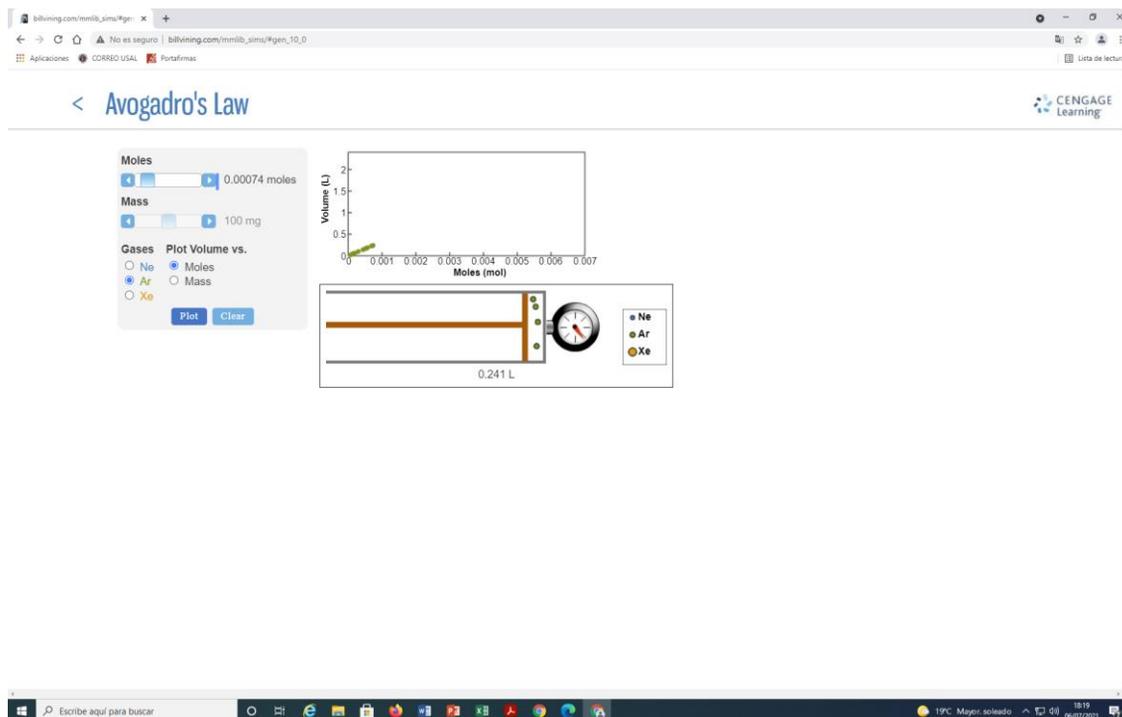
El volumen de una muestra de gas a una temperatura y presión dadas es proporcional al número n de moles de átomos o moléculas presentes en la muestra:

$$V \propto n \quad (T, P \text{ constantes})$$

$$V = k_4 n$$

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10_0



The screenshot displays the 'Avogadro's Law' simulation interface. On the left, there is a control panel with the following settings:

- Moles:** 0.00074 moles
- Mass:** 100 mg
- Gases:** Radio buttons for Ne, Ar, and Xe.
- Plot Volume vs.:** Radio buttons for Moles and Mass.
- Buttons:** 'Plot' and 'Clear'.

The main area features a graph with 'Volume (L)' on the vertical axis (ranging from 0 to 2) and 'Moles (mol)' on the horizontal axis (ranging from 0 to 0.007). A single data point is plotted at approximately (0.00074, 0.241). Below the graph, a horizontal bar represents the volume of the gas, labeled '0.241 L'. To the right of the bar is a pressure gauge. A legend on the far right identifies the gas symbols: Ne (blue), Ar (orange), and Xe (yellow).

4.- COMBINACIÓN DE LAS LEYES DE LOS GASES: ECUACIÓN DE LOS GASES IDEALES Y ECUACIÓN GENERAL DE LOS GASES.

Ley de Boyle (efecto de la presión) (n, T constantes)

$$P V = k_1$$
$$V = k_1 x \frac{1}{P}$$

Ley de Charles (efecto de T) (n, P constante)

$$V = k_2 T$$
$$\frac{V}{T} = k_2$$

Ley de Avogadro (efecto de la cantidad del gas) (T, P constantes)

$$V = k_4 n$$

Combinando las tres ecuaciones:

$$V \propto \frac{nT}{P} \quad V = \frac{RnT}{P}$$

R = Constante de proporcionalidad = Constante de los gases

$$PV = nRT$$

Ecuación de los gases ideales para un solo componente en condiciones (P,V,n,T).

Un gas que obedezca a esta ecuación → **Gas ideal**

R = Constante de los gases, su valor depende de las unidades utilizadas para expresar P y V.

$$R = 0.08206 \text{ atm L / K mol}$$

$$R = 8.314 \text{ J / K mol}$$

$$R = 1.987 \text{ cal / K mol}$$

$$R = 62.37 \text{ Torr L / K mol}$$

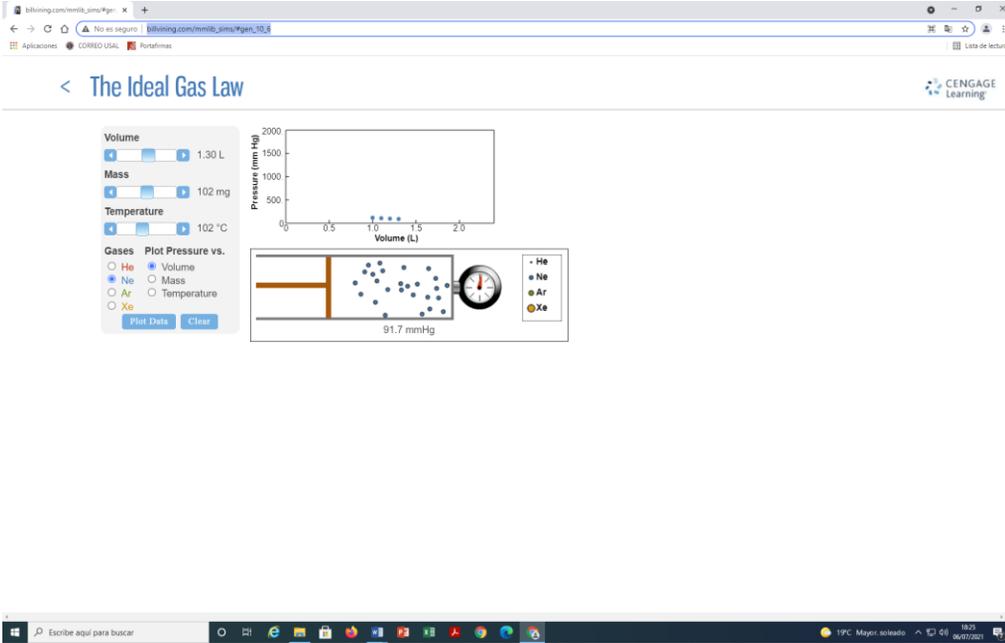
$$PV = nRT$$

Ecuación de los gases ideales en condiciones (P,V,n,T) → **Ecuación de estado**

Expresión matemática que relaciona la presión, el volumen y la temperatura de una sustancia y la cantidad presente. Permite calcular cualquier propiedad conocidas las restantes.

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10_6



Dependencia del volumen con respecto a las condiciones

- Condiciones iniciales (P_i, V_i, T_i).

$$P_i V_i = nRT_i$$

$$nR = \frac{P_i V_i}{T_i}$$

- Condiciones finales (P_f, V_f, T_f).

$$P_f V_f = nRT_f$$

$$nR = \frac{P_f V_f}{T_f}$$

$$\frac{P_i V_i}{T_i} = \frac{P_f V_f}{T_f}$$

Ecuación general de los gases

5.- APLICACIONES DE LA ECUACIÓN DE LOS GASES IDEALES

a) Determinación de la masa molar

Conocido el V ocupado a una T y una P, podemos determinar la masa molar:

$$PV = nRT$$

$$PV = \frac{m}{M}RT$$

$$M = \frac{m}{PV}RT$$

M = masa molar del gas y m = masa del gas.

b) Densidades de los gases

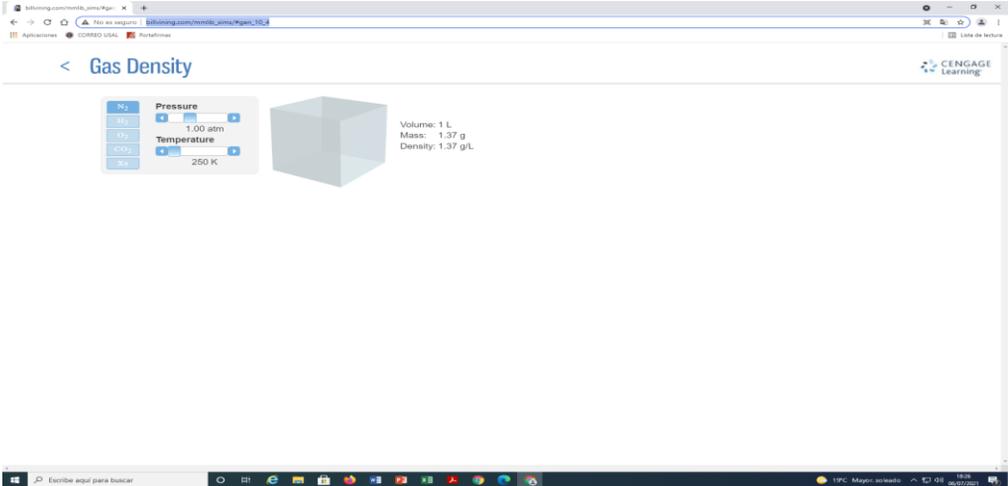
$$d = \frac{m}{V} \rightarrow n = \frac{m}{M} \rightarrow m = nM \Rightarrow d = \frac{nM}{V}$$

$$PV = nRT \rightarrow \frac{n}{V} = \frac{P}{RT}$$

$$d = \frac{n}{V}M = \frac{PM}{RT}$$

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_10_4



Gas Density

Pressure: 1.00 atm

Temperature: 250 K

Volume: 1 L
Mass: 1.37 g
Density: 1.37 g/L

CENGAGE Learning

II.- VAPORIZACION DE LÍQUIDOS. PRESIÓN DE VAPOR

Cambio de fase o estado

Transformación de un estado de agregación a otro que va acompañado por un cambio de Energía.



Las transformaciones de fase se producen cuando se agrega o se quita energía al sistema.

Vaporización (evaporación) paso de moléculas desde la superficie de un líquido al estado gaseoso o vapor.

Se produce más fácilmente cuando:

- Aumenta la temperatura (hay más moléculas con suficiente E_c para superar las fuerzas intermoleculares de atracción en el líquido).
- Aumenta el área superficial del líquido (hay una mayor proporción de moléculas del líquido en la superficie).
- Disminuyen las fuerzas intermoleculares (la energía cinética necesaria para superar las fuerzas intermoleculares de atracción es menor y hay más moléculas con E suficiente para escapar).

Entalpía de vaporización

Las moléculas que se pierden al evaporarse son más energéticas que la media, la E_c media de las moléculas que quedan disminuye \rightarrow La temperatura del líquido que se evapora disminuye.

Entalpía de vaporización: cantidad de calor que debe ser absorbida para que una cierta cantidad de líquido se vaporice a temperatura constante.

$$\Delta H_{vap} = H_{vapor} - H_{liquido}$$

Proceso endotérmico

$$\Delta H_{vap} > 0 \quad \Delta_{vap}H_m \text{ (kJ/mol)}$$

Condensación: conversión de un gas o vapor en líquido.

$$\Delta H_{con} = H_{vapor} - H_{liquido} = -\Delta H_{vap}$$

Presión de vapor

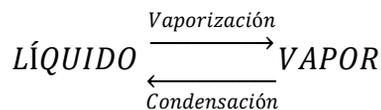
Presión de vapor → Medida de la volatilidad de las sustancias

H₂O en un recipiente abierto → después de un tiempo se evapora por completo.

H₂O en un recipiente cerrado:

1. Inicialmente sólo se produce evaporación → Las moléculas de H₂O (vapor) llenan el espacio y aumenta la presión.
2. Parte del vapor comienza a condensar, la velocidad con la que se evaporan las moléculas es mayor que la velocidad de condensación.
3. Cuando la velocidad de condensación es igual a la de evaporación → El número de moléculas de vapor permanece constante y por tanto la presión que éste ejerce.

Para que la presión no dependa de la cantidad de H₂O que hay en el recipiente es necesario que siempre haya H₂O líquida lo que garantiza un **equilibrio dinámico**



$$v_{vap} = v_{cond}$$

Equilibrio dinámico → Dos procesos opuestos están ocurriendo de forma simultánea, no hay cambio neto con el tiempo una vez que se ha alcanzado el equilibrio.

Mientras haya agua presente a una T, su vapor ejerce la misma presión.

Presión de vapor: Presión ejercida por un vapor en equilibrio dinámico con su líquido a una T.

- Líquidos con presiones de vapor altas a T ambiente → **Volátiles**
 - Líquidos con presiones de vapor muy bajas → **No volátiles.**
 - La volatilidad de un líquido depende de las fuerzas intermoleculares → Cuanto más débiles son estas fuerzas, más volátil es el líquido y su presión de vapor es mayor.
 - Éter dietílico, 25°C $P_v = 534$ mmHg → Volátil
 - Agua, 25°C $P_v = 23.8$ mmHg → Moderadamente Volátil
 - Mercurio, 25°C $P_v = 0.0018$ mmHg → Prácticamente no Volátil
-
- La P_v depende de la naturaleza del líquido (\approx F. Intermoleculares).
 - Las moléculas que forman enlaces de hidrógeno son menos volátiles que las que no lo forman.
 - La P_v no depende de la cantidad del líquido o vapor, siempre que haya una cantidad de cada una de las fases en equilibrio.
 - La P_v no depende del volumen de vapor.
 - La P_v depende de la Temperatura, aumenta al aumentar T porque la velocidad de evaporación es más alta a medida que la temperatura aumenta

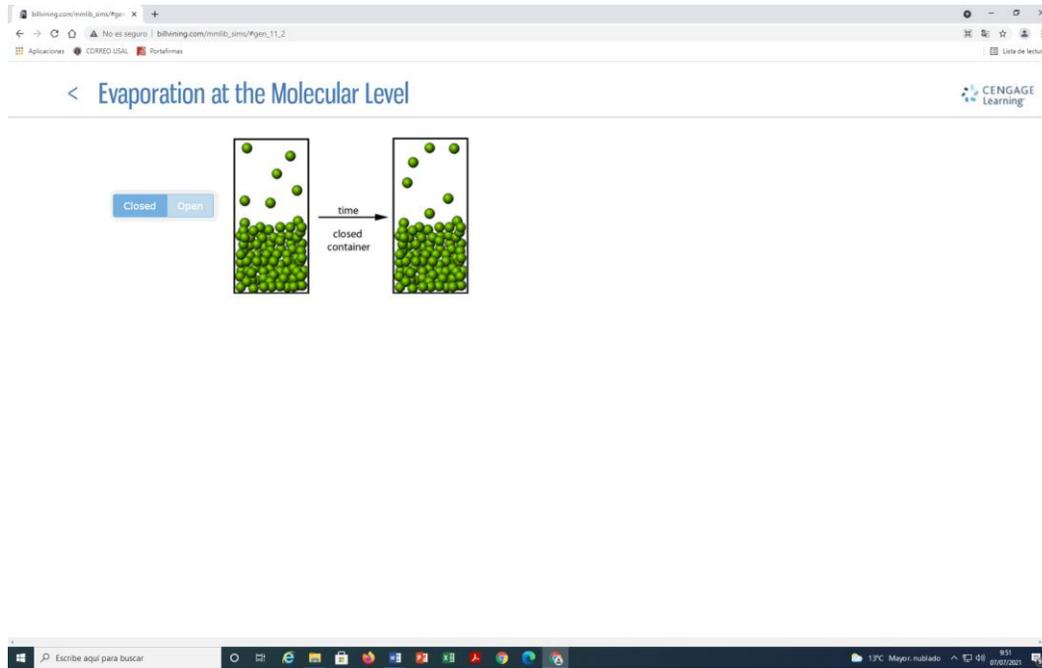
Ebullición y punto de ebullición

- Prácticamente toda la evaporación tiene lugar en la superficie del líquido, las moléculas están menos fuertemente unidas que en el interior del líquido.
- Cuando un líquido se calienta en un recipiente abierto a la atmósfera, hay una determinada temperatura la que se produce la vaporización en todo el líquido y no solo en la superficie.
- En el interior del líquido se producen burbujas que suben a la superficie y escapan.
- La presión que ejercen las moléculas que escapan se iguala a la presión atmosférica → Durante la ebullición
 - La energía absorbida como calor se utiliza para pasar moléculas de líquido a vapor.
 - La T permanece constante hasta que todo el líquido se evapora.
 - La temperatura a la cual la presión de vapor de un líquido es igual a la presión atmosférica estándar (1 atm = 760 mmHg) → **Temperatura de ebullición.**
 - La T de ebullición aumenta con la P barométrica.

ENLACES

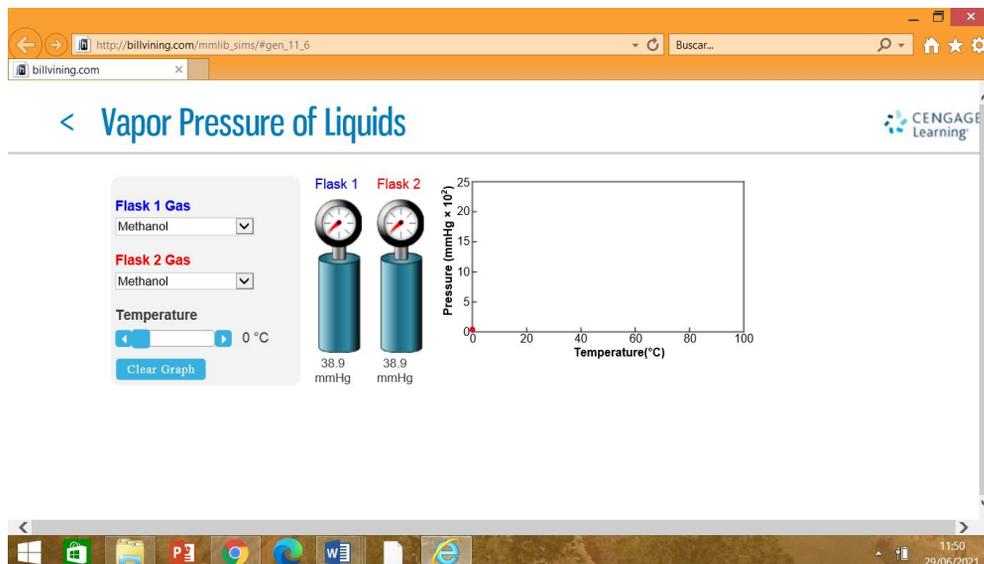
a) EVAPORACIÓN

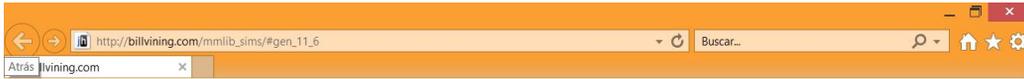
http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_11_2



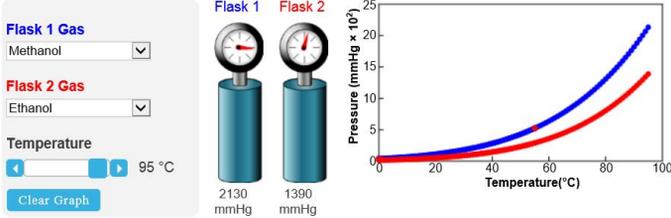
b) PRESIÓN DE VAPOR

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_11_6

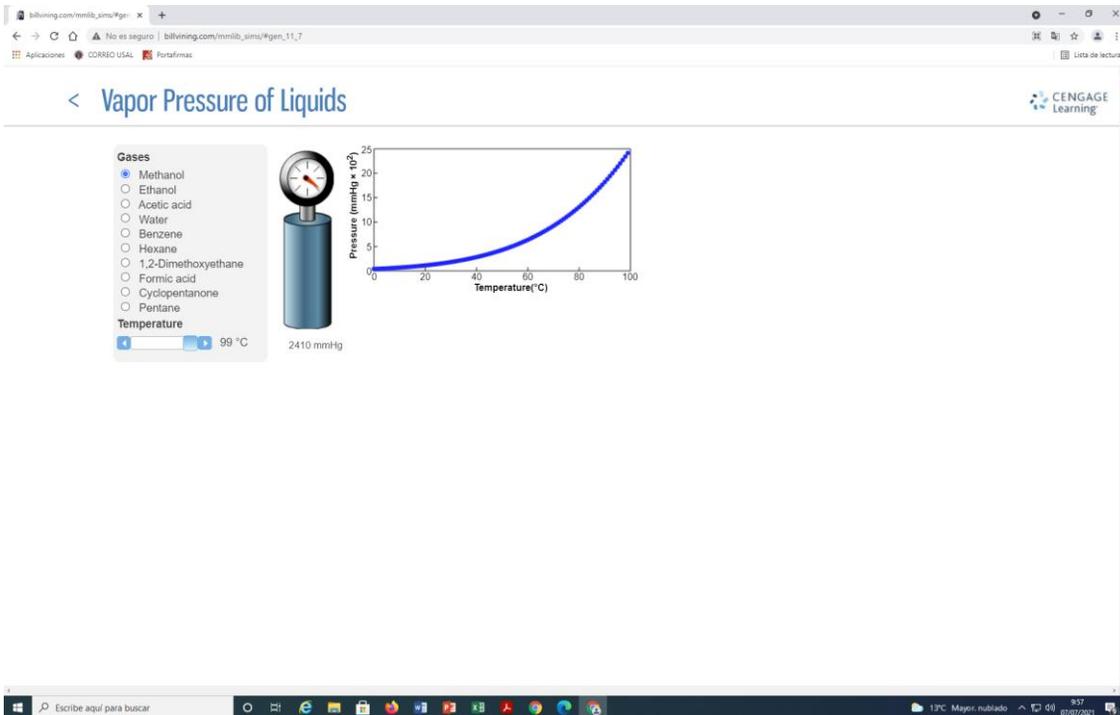




< Vapor Pressure of Liquids



http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_11_7



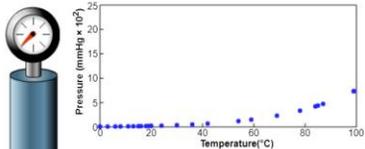
biliving.com/rmlib_alimu/#gen...
 No es seguro biliving.com/rmlib_alimu/#gen_11_7
 Aplicaciones CORREG USAL Portafirmas Lista de lecturas

Vapor Pressure of Liquids

CENGAGE Learning

Gases
 Methanol
 Ethanol
 Acetic acid
 Water
 Benzene
 Hexane
 1,2-Dimethoxyethane
 Formic acid
 Cyclopentanone
 Pentane

Temperature: °C
 6.21 mmHg



<https://web.mst.edu/~gbert/pvap/APvap.html>

<https://web.mst.edu/~gbert/pvap/APvap.html>

Vapor Pressure of Liquids Isotenscope Method

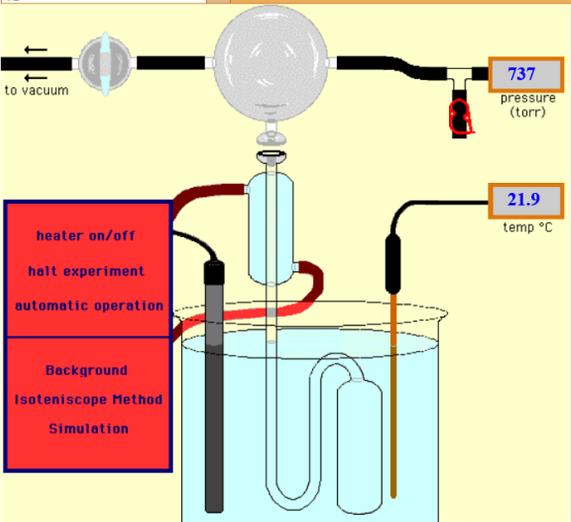
Gary L. Bertrand
University of Missouri-Rolla

LIQUIDS:

room temperature = 21.9 °C
atm. pressure = 737 torr

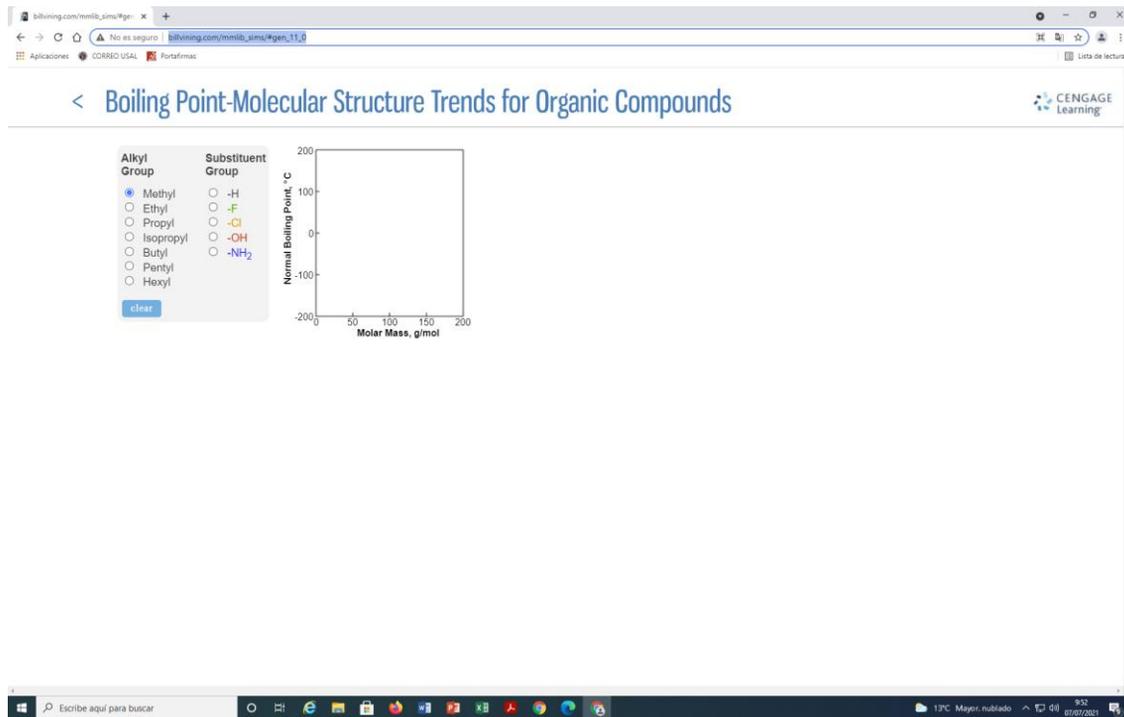
1. Select a liquid from the menu.
2. Click on **heater on/off**.
3. Read the message that appears and press the **return/enter** key.

In Netscape/Windows you may need to click the mouse on the bath to activate the keyboard operation.



c) Punto de ebullición

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_11_0



billvining.com/mmlib_sims/#gen_11_0

No es seguro | billvining.com/mmlib_sims/#gen_11_0

Aplicaciones CORREO USAL Portafirmas Lista de lecturas

< Boiling Point-Molecular Structure Trends for Organic Compounds

CENGAGE Learning

Alkyl Group	Substituent Group
<input checked="" type="radio"/> Methyl	<input type="radio"/> -H
<input type="radio"/> Ethyl	<input type="radio"/> -F
<input type="radio"/> Propyl	<input type="radio"/> -Cl
<input type="radio"/> Isopropyl	<input type="radio"/> -OH
<input type="radio"/> Butyl	<input type="radio"/> -NH ₂
<input type="radio"/> Pentyl	
<input type="radio"/> Hexyl	

clear

Normal Boiling Point, °C

Molar Mass, g/mol

13°C Mayor, nublado 9:52 07/07/2021

III.- ECUACIÓN DE CLAPEYRON

ECUACIÓN DIFERENCIAL DE CLAPEYRON

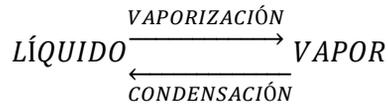
$$\frac{dP}{dT} = \frac{\overline{\Delta S}}{\overline{\Delta V}}$$

Ecuación aplicable a cualquier equilibrio de fase de una sustancia pura.

Ley termodinámica válida para todos los equilibrios entre fases de un sistema de 1 componente.

$$\overline{\Delta S}_{proceso} = \frac{\overline{\Delta H}_{proceso}}{T}$$

a) EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR



Ecuación Clausius-Clapeyron

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\overline{\Delta H}_{vap}}{T\overline{\Delta V}_{vap}}$$

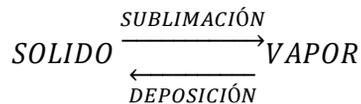
a) Integración indefinida

$$\ln P \approx -\frac{\overline{\Delta H}_{vap}}{R} \frac{1}{T} + cte$$

a) Integración definida entre el punto 1 y 2, (P₁, T₁) y (P₂, T₂)

$$\ln \left(\frac{P_2}{P_1} \right) \approx \frac{\overline{\Delta H}_{vap}}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

b) EQUILIBRIO SÓLIDO-VAPOR



Ecuación Clausius-Clapeyron

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\overline{\Delta H}_{sub}}{T\overline{\Delta V}_{sub}}$$

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\overline{\Delta H}_{sub}P}{RT^2}$$

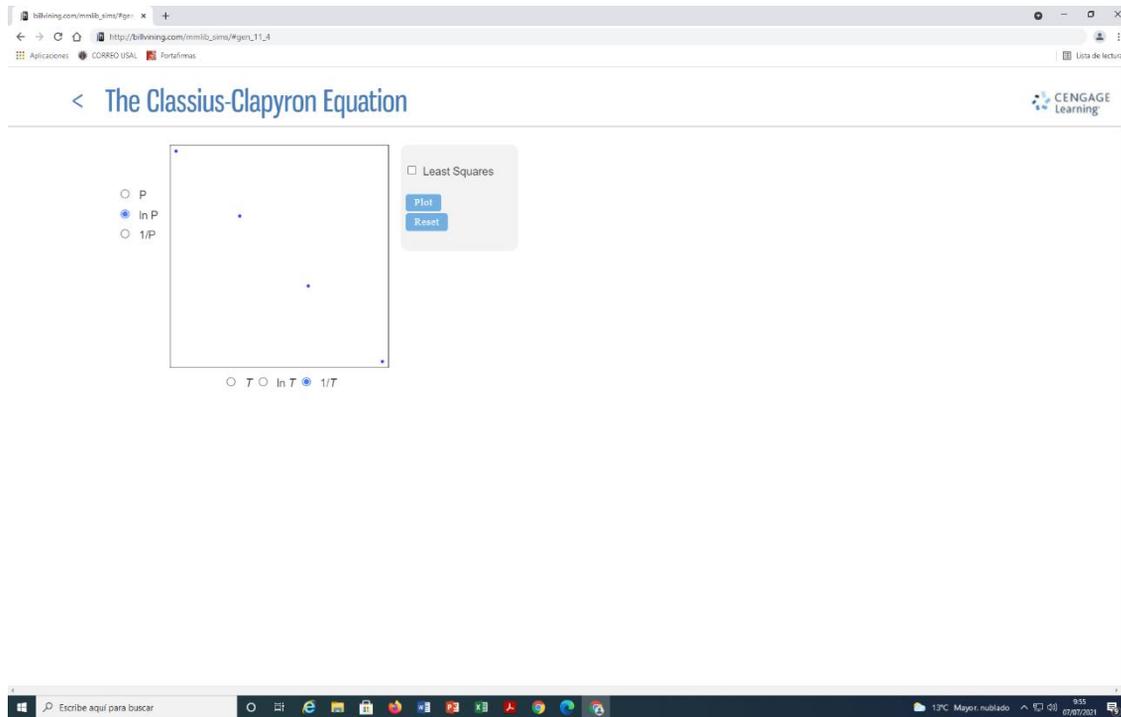
a) Integración indefinida

$$\ln P \approx -\frac{\overline{\Delta H}_{sub}}{R} \frac{1}{T} + cte$$

b) Integración definida entre el punto 1 y 2, (P_1, T_1) y (P_2, T_2)

$$\ln \left(\frac{P_2}{P_1} \right) \approx \frac{\overline{\Delta H}_{sub}}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_11_4

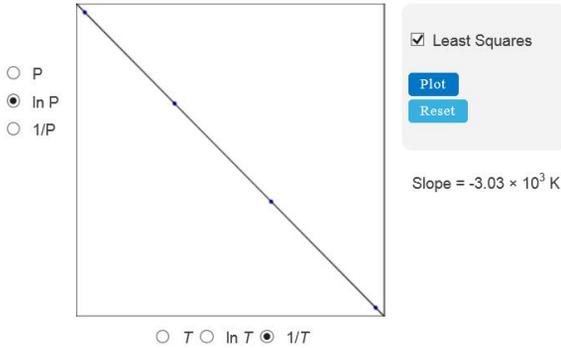


Determinación de $\overline{\Delta H}_{vap}$

$$\ln P \approx -\frac{\overline{\Delta H}_{vap}}{R} \frac{1}{T} + cte$$



< The Clausius-Clapeyron Equation



$$m = -\frac{\overline{\Delta H}_{vap}}{R}$$

c) EQUILIBRIO SÓLIDO- LÍQUIDO



Ecuación Clausius-Clapeyron

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\overline{\Delta H}_f}{T\overline{\Delta V}_f}$$

$$(P_2 - P_1) = \frac{\overline{\Delta H}_f}{\overline{\Delta V}_f} \ln \frac{T_2}{T_1}$$



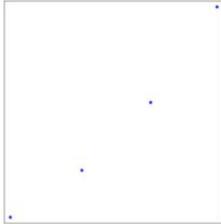
VNIVERSIDAD
D SALAMANCA

CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

< The Clausius-Clapyron Equation



- P
- ln P
- 1/P



- T
- ln T
- 1/T

Least Squares

Plot

Reset

IV.- ESPECTROFOTOMETRÍA: COMPROBACIÓN DE LA LEY DE LAMBERT-BEER VIRTUALMENTE

OBJETIVOS

- Preparación de disoluciones
- Estudio del espectro de absorción.
- Estudiar la variación de la absorbancia en función de la concentración: Comprobar que se cumple la ley de Lambert-Beer.
- Determinar el coeficiente de absorción molar de diferentes especies a determinadas longitudes de onda.
- Determinar la concentración de diferentes sustancias a partir de la medida de la absorbancia.

LEY DE LAMBERT-BEER

Ley empírica de Lambert-Beer:

$$A = \epsilon_{\lambda} l [C]$$

A = Absorbancia

l = Longitud del paso óptico (cm), ancho de la cubeta que contiene la muestra.

[C] = Concentración molar (mol/L) de la especie que absorbe.

ϵ_{λ} = Coeficiente de absorción molar ($\text{Lmol}^{-1}\text{cm}^{-1}$) característico de cada especie a cada λ

En los siguientes enlaces se puede comprobar la ley de Lambert-Beer mediante una serie de experiencias virtuales.

a) PHET COLORADO <https://phet.colorado.edu/es/simulation>

Enlace de la experiencia virtual: <https://phet.colorado.edu/es/simulation/beers-law-lab>

ESQUEMA DE FUNCIONAMIENTO PARA PROFESORES

PHET

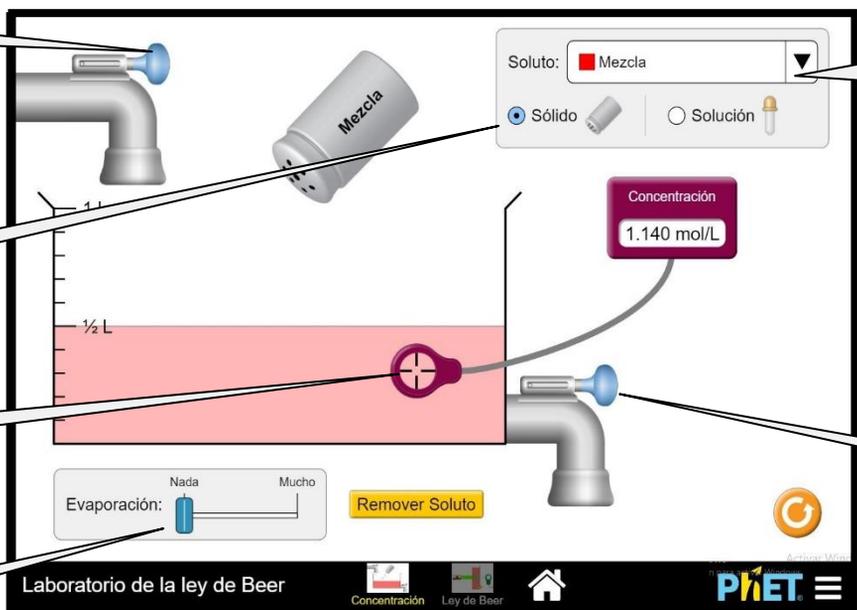
Tips

para

Laboratorio de la Ley de

Ventana de Concentración

En esta ventana, los estudiantes exploran cómo se cambia la concentración de una solución al variar la cantidad de soluto, disolvente o cantidad total de disolución.



The screenshot shows the PhET Concentration Lab interface. A central beaker contains a pink liquid with a concentration of 1.140 mol/L. The interface includes a faucet on the left for adding water, a container labeled 'Mezcla' for adding solute, a dropdown menu for selecting the solute, and a 'Remover Solute' button. An evaporation slider is at the bottom left, and a 'Drenar' (drain) faucet is on the right. A legend on the right lists various solutes.

AGREGA agua (Add water)

AGREGA soluto como un (Add solute as a)

MIDE la concentración (Measure the concentration)

RETIRA el agua (Remove the water)

ELIGE el (Choose the)

DRENA la (Drain the)

Concentración: 1.140 mol/L

Soluto: Mezcla

Sólido Solución

Evaporación: Nada Mucho

Remover Solute

Laboratorio de la ley de Beer

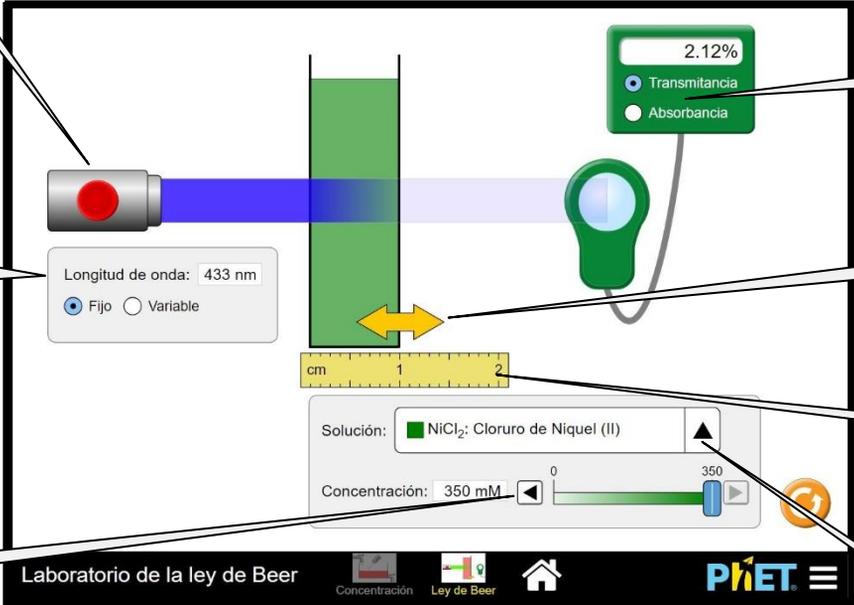
Concentración Ley de Beer

PHET

- Mezcla
- Nitrato de Cobalto (II)
- Cloruro de Cobalto
- Dicromato de Potasio
- Cromato de Potasio
- Cloruro de Niquel (II)
- Sulfato de Cobre
- Permanganato de Potasio
- Cloruro de Sodio

Ventana de Ley de Lambert-Beer

Los estudiantes investigan cómo la intensidad de la luz absorbida o transmitida por una disolución de color cambia con el tipo de disolución, la concentración de la disolución, el ancho del recipiente (longitud del camino) o la fuente de luz.



The simulation interface includes the following elements:

- Light Source:** A red dot with a label 'Longitud de onda: 618 nm' and a 'Fijo' (Fixed) radio button.
- Wavelength Selection:** A color spectrum bar with a slider and a 'Variable' radio button.
- Wavelength Control:** A label 'Longitud de onda: 433 nm' with 'Fijo' and 'Variable' radio buttons.
- Container:** A green rectangular cuvette with a yellow ruler below it showing a path length of 2 cm.
- Solution Selection:** A dropdown menu showing 'NiCl₂: Cloruro de Niquel (II)'.
- Concentration Control:** A slider labeled 'Concentración: 350 mM' with a range from 0 to 350.
- Measurement:** A green box displaying '2.12%' with radio buttons for 'Transmitancia' (selected) and 'Absorbancia'.
- UI Elements:** A 'Laboratorio de la ley de Beer' title bar, navigation icons for 'Concentración', 'Ley de Beer', and 'Home', and the 'PhET' logo.

Instructional callouts are provided in the following boxes:

- ENCIENDE/ APAGA la:** Points to the light source.
- SELECCIONA la longitud de onda de la fuente de luz:** Points to the wavelength selection bar.
- VARÍA la concentración:** Points to the concentration slider.
- MIDE transmitancia o absorbancia de la luz:** Points to the measurement display.
- CAMBIA el tamaño del recipiente:** Points to the cuvette.
- SELECCIONA la:** Points to the solution dropdown menu.

Simplificaciones del modelo

- La cantidad máxima de soluto que se puede agregar es de 7 moles. El volumen máximo del recipiente es de 1 L.
- La concentración se calcula como la cantidad de soluto dividida entre el volumen de *agua*. El volumen de soluto disuelto tiene solo un pequeño efecto sobre el volumen, y los diferentes cambios de volumen para cada soluto podrían ser confusos para los estudiantes.
- Los valores utilizados para calcular la solubilidad de cada soluto se tomaron *del CRC Handbook of Chemistry and Physics 91st edition* (<http://hbcponline.com>). Se supuso que la mezcla tenía la misma solubilidad que la sacarosa.
- El cloruro de sodio no se incluye en la ventana de Ley de Beer ya que la solución es clara e incolora y no absorbe la luz en el rango visible en gran medida.
- La intensidad del color de la solución se optimizó para resaltar los cambios en la concentración para el rango permitido en cada pestaña, pero la intensidad del color no es la misma entre las ventanas de Concentración y Ley de Beer. Por ejemplo, el rango para la Mezcla es de 0-5.960 M en la ventana de Concentración, pero de 0-0.400 M en la de Ley de Beer.
- Los valores de absorptividad molar utilizados en la simulación se calcularon a partir de datos experimentales; replicar el experimento puede producir valores ligeramente diferentes.

Sugerencias de uso

Algunos ejercicios propuestos

- Describe las relaciones entre la cantidad de soluto, el volumen de la disolución, el color de la disolución y la concentración de la disolución.
- ¿Qué sucede con la concentración de una solución cuando el volumen de la disolución disminuye?
- Predice lo que sucede con la absorbancia de una solución a medida que aumenta la concentración de la disolución.
- Describe la relación entre el ancho del contenedor de la disolución (longitud de la trayectoria) y la absorbancia de la luz.
- Explica la diferencia entre la transmitancia y la absorbancia de la luz.
- ¿Cómo crees que se eligió la longitud de onda predeterminada para una disolución dada? ¿Es esta la mejor longitud de onda para usar para la disolución? ¿Por qué o por qué no?
- Describe la relación entre el color de la fuente de luz, el color de la solución y la absorbancia de la solución.
- Usa la ley de Beer ($A = \epsilon l C$) para determinar la absorptividad molar (ϵ) para una solución dada.

b) A través de la siguiente dirección se puede realizar un experimento virtual análogo al anterior:

https://web.mst.edu/~gbert/Color_Lg/A_spec.html

Pinchando en el enlace, aparece la siguiente pantalla en la que podemos seleccionar dos opciones: Continuar y Eche un vistazo.

Espectrofotometría
Un experimento simulado
por
Gary L. Bertrand
Universidad de Ciencia y Tecnología de Missouri
MST

**Este experimento utiliza mezclas de tintes rojo y azul como incógnitas. Se ingresa un número de código aleatorio en el cuadro a continuación.
Anote este número si desea volver a la misma incógnita.**

**Si se le ha asignado un número de código,
ingréselo a continuación antes de continuar.**

Ingrese su código asignado # (101-999):

Continuar

**una versión
de consulta guiada del experimento**

Eche un vistazo

- CONTINUAR

Pinchando en esta opción podemos visualizar:

- El funcionamiento del espectrofotómetro
- Se pueden realizar de manera virtual una serie de experimentos.

- ECHE UN VISTAZO

Esta opción nos conduce a un experimento simulado de investigación guiada.

El instrumento en esta simulación es un espectrofotómetro de luz visible / ultravioleta de doble haz. Compara la intensidad de la luz (I) que atraviesa una celda que contiene una muestra (un tinte de color en este caso) con la intensidad (I_0) que atraviesa una celda idéntica que contiene solo el solvente (agua en este caso), ya que la longitud de onda de la luz varía a través de las regiones visible y / o ultravioleta.

c) Simulación: espectrofotometría uv-visible

https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2117/80376/Simulacion_espectrofotometria_absorcion_UV_visible.mp4?sequence=5&isAllowed=y

Píldora formativa donde se explica:

- Funcionamiento de un espectrofotómetro uv-visible
- Realización del espectro de absorción.
- Selección de la longitud de onda de trabajo.
- Medida de la absorbancia de disoluciones de diferente concentración.
- Comprobación de la ley de Lambert-Beer: determinación del coeficiente de absorción molar.
- Determinación de la concentración de disoluciones mediante la medida de la absorbancia.

V.- CINÉTICA QUÍMICA VIRTUAL

La *Cinética Química* estudia la **velocidad** con la que transcurren las reacciones químicas y los factores de los que depende la velocidad: concentraciones, temperatura, pH, fuerza iónica, presencia de catalizadores, etc,...

$$v = f(\text{concentraciones, Temperatura, pH, P, I, catalizadores, ...})$$

Esta información permite determinar los **mecanismos de reacción**, es decir las etapas por las cuales los reactivos se transforman en productos, objetivo último de la Cinética Química.

1. REACCIÓN QUÍMICA

Reactivos \rightarrow Productos



A, B \rightarrow Reactivos C, D \rightarrow Productos

a,b,c,d \rightarrow Coeficientes estequiométricos, moles de reactivos que reaccionan o productos que se forman

2. VELOCIDAD DE REACCIÓN

Medida de la rapidez de cambio de la concentración de una de las especies que participan en la reacción.

Definición de velocidad de reacción

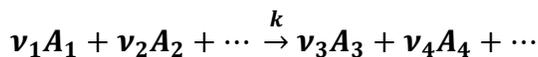
“El valor absoluto de la derivada con respecto al tiempo de la concentración de una cualquiera de las especies”

$$v_{A_i} = \left| \frac{d[A_i]}{dt} \right| \Rightarrow v_{A_i} = \pm \frac{d[A_i]}{dt}$$

Definición general de velocidad de reacción:

$$v_r = \frac{1}{v_i} \frac{dn_{A_i}}{dt}$$

v_i = Coeficiente estequiométrico ($v_i < 0$ REACTIVOS, $v_i > 0$ PRODUCTOS)



$$v_r = \frac{1}{v_1} \frac{dn_{A_1}}{dt} = \frac{1}{v_2} \frac{dn_{A_2}}{dt} = \frac{1}{v_3} \frac{dn_{A_3}}{dt} = \dots$$

$$v_r = - \frac{1}{|v_1|} \frac{dn_{A_1}}{dt} = - \frac{1}{|v_2|} \frac{dn_{A_2}}{dt} = \frac{1}{|v_3|} \frac{dn_{A_3}}{dt}$$

$$v_r = \pm \frac{1}{|v_i|} \frac{dn_{A_i}}{dt}$$

V= Volumen

$$v = \frac{v_r}{V} = \frac{1}{V} \frac{1}{v_i} \frac{dn_{A_i}}{dt} = \frac{1}{V} \frac{1}{v_j} \frac{dn_{A_j}}{dt}$$

Si V=cte

$$v = \frac{1}{v_i} \frac{d[A_i]}{dt} = \frac{1}{v_j} \frac{d[A_j]}{dt}$$

3. ECUACIÓN DE VELOCIDAD

Ecuación de velocidad de una reacción química: Expresión explícita que relaciona la velocidad de la reacción con las concentraciones de los reactivos.



$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k[A]^{n_1}[B]^{n_2}$$

$n_1, n_2 \rightarrow$ Parámetros que afectan a las concentraciones, órdenes parciales con respecto a A y B respectivamente.

$k \rightarrow$ Cte de velocidad o coeficiente de velocidad

3.1. Constante de velocidad o coeficiente de velocidad, k

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k[A]^{n_1}[B]^{n_2}$$

Contiene toda la información sobre los factores que afectan a la velocidad excepto la concentración de los reactivos

$$v = k(T, P, I, pH, catal., \dots)[A_1]^{n_1}[A_2]^{n_2} \dots$$

3.2. Orden de reacción:

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = k[A]^{n_1}[B]^{n_2}$$

Orden de reacción parcial con respecto a la especie j $\rightarrow n_j$

- Parámetros determinables experimentalmente
- Sin relación con los coeficientes estequiométricos
- Pueden ser enteros (reacción sencilla), fraccionarios (mecanismo complejo).

Orden de reacción global $\rightarrow n = n_1 + n_2 + \dots = \sum n_j$

$$n = n_1 + n_2 + \dots$$

$n, n_j =$ Números enteros, semienteros, nulos e incluso negativos.

UNIDADES

$$v \rightarrow M t^{-1} (\text{conc } t^{-1}) \quad k \rightarrow M^{(1-n)} t^{-1} (\text{conc}^{(1-n)} t^{-1})$$

$$v = k[A_1]^{n_1}[A_2]^{n_2}[A_3]^{n_3} \dots \dots$$

- Indica cómo cambia la velocidad de una reacción a una temperatura conforme modificamos las concentraciones de los reactivos.
- Para cualquier reacción química debe determinarse de forma experimental.

n=0 → Reacciones de orden cero

$$v = k[A]^0 = k$$

UNIDADES $k \rightarrow M t^{-1} (\text{conc } t^{-1})$

n=1 → Reacciones de orden uno

$$v = k[A]^1 = k[A]$$

n=2 → Reacciones de orden dos

$$v = k[A]^2$$

$$v = k[A]^1[B]^1$$

UNIDADES $k \rightarrow M^{-1} t^{-1}$

n=3 → Reacciones de orden tres

$$v = k[A]^3$$

$$v = k[A]^2[B]^1$$

$$v = k[A]^1[B]^1[C]^1$$

UNIDADES $k \rightarrow M^{-2} t^{-1}$

- El orden total n y los órdenes parciales n_j son magnitudes que se determina experimentalmente.
- n y n_j pueden tomar valores enteros, semienteros, nulos e incluso negativos.
- Los órdenes parciales no se pueden identificar con los coeficientes estequiométricos aunque en las reacciones elementales pueden coincidir.

EXPERIENCIAS VIRTUALES DE CINÉTICA QUÍMICA

Los estudiantes dispondrán de una serie de simulaciones que les permitirán analizar distintos conceptos relacionados con cinética de las reacciones químicas

a) PHET COLORADO <https://phet.colorado.edu/es/simulation>

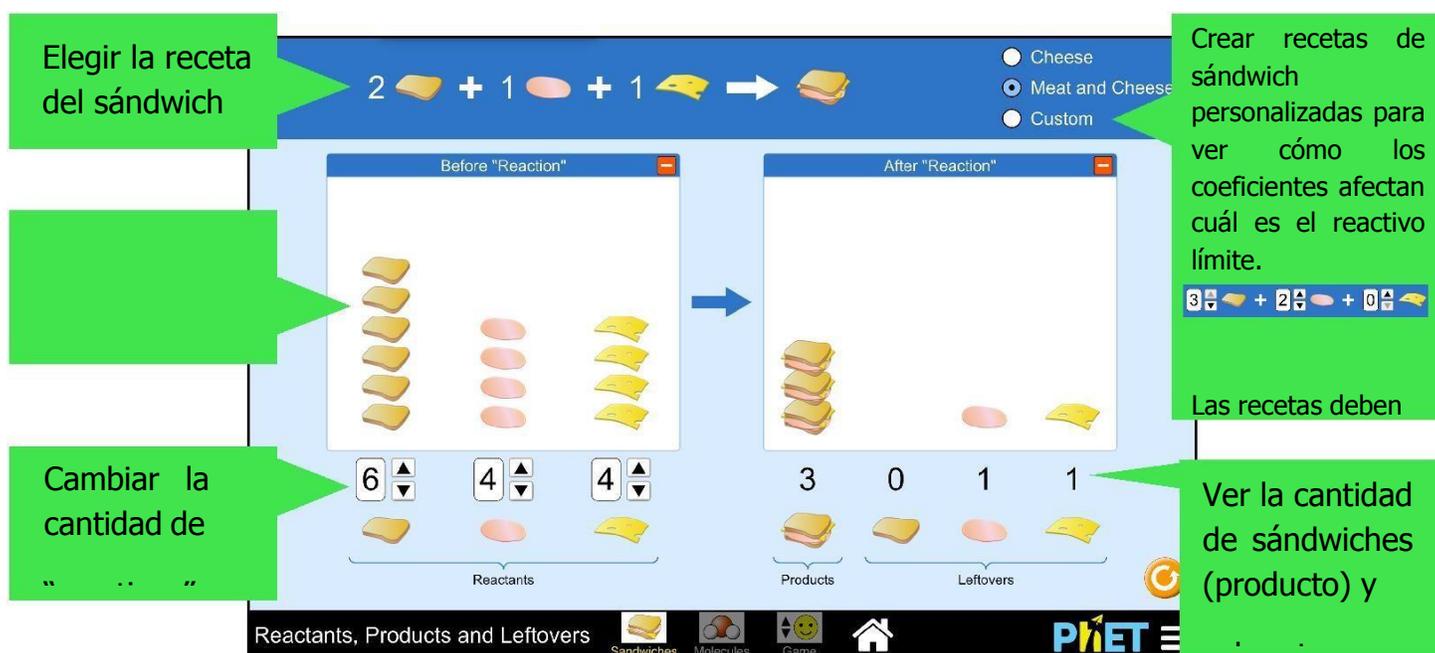
Enlace de la experiencia virtual: <https://phet.colorado.edu/es/simulation/reactants-products-and-leftovers>

ESQUEMA DE FUNCIONAMIENTO PARA PROFESORES



Pantalla de Sándwiches y Moléculas

Esta simulación está diseñada para proporcionar a los estudiantes una comprensión conceptual del reactivo límite, en lugar de practicar la solución de problemas algorítmicos que requieren conversiones masa/mol.



Elegir la receta del sándwich

Cambiar la cantidad de

Crear recetas de sándwich personalizadas para ver cómo los coeficientes afectan cuál es el reactivo límite.

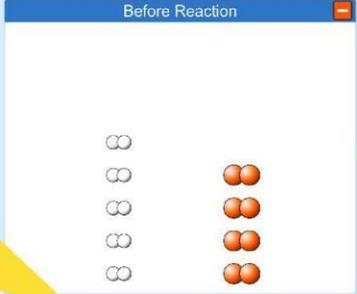
Las recetas deben

Ver la cantidad de sándwiches (producto) y

Reactants, Products and Leftovers

$2 \text{H}_2 + 1 \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{H}_2\text{O}$

Before Reaction



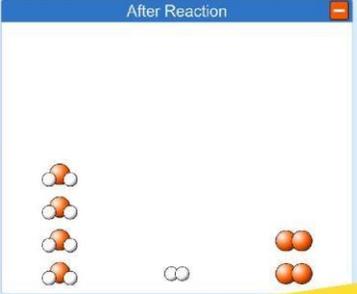
5 4

H₂ O₂

Reactants

Make Water
 Make Ammonia
 Combust Methane

After Reaction



4 1 2

H₂O H₂ O₂

Products Leftovers

Cambiar la cantidad de moléculas en los ..

Elegir entre tres

Ocultar moléculas

Ya que se muestran moléculas (no moles), el sobrante del reactivo límite también se muestra

Pantalla de juego

Se reta a los estudiantes a descubrir el número de moléculas que faltan en 5 preguntas al azar por nivel. Cada nivel tiene una pregunta en la cual la proporción de reactivos no dará lugar a la obtención de productos. Los estudiantes tienen 2 oportunidades por pregunta; luego de 2 errores, la simulación mostrará la respuesta correcta.

The screenshot shows a game interface titled "Choose Your Level" with three levels: Level 1, Level 2, and Level 3. Each level has a chemical reaction diagram and a star rating. Callouts point to various features: "Nivel 1: Descubrir la cantidad de moléculas reactivas" points to the Level 1 reaction; "Controlar el sonido del juego o habilitar el sonido" points to the volume icon; "Nivel 2 y 3: Encontrar la cantidad de moléculas en productos y sobrantes" points to the Level 2 and 3 reactions; "Ocultar moléculas o números para aumentar la dificultad" points to the "Hide Molecules" and "Hide Numbers" options in the settings menu. The bottom navigation bar includes icons for "Reactants, Products and Leftovers", "Sandwiches", "Molecules", "Game", and a home icon, along with the PIET logo.

Sugerencias de uso

- **Comparar coeficientes:** Para comenzar, pida a los estudiantes que escojan una cantidad de ingredientes para el sándwich.
Ejercicio sugerido: "Usando solo estos ingredientes, ¿puede encontrar una receta de sándwich personalizada en la cual se acabe el pan primero? ¿Qué sucede con el queso o la carne? ¿Por qué estas recetas son diferentes?"
- **Comparar moléculas y moles:** Escoja cualquier ejemplo que origine moléculas sobrantes de ambos reactivos. Pida a los estudiantes que discutan el resultado esperado, si el valor dado es en moles, en lugar de moléculas.
- **Comparar estrategias:** Pida a los estudiantes que hagan grupos para comparar cómo averiguaron el número de sobrantes en los Niveles 2 y 3 del Juego. ¿Qué información necesitaron?

b) <https://web.mst.edu/~gbert/Kinetics/Kinetics.html>

Se proponen diversas simulaciones para el estudio de las reacciones de orden uno y orden dos.

Además se propone una simulación para determinar el orden de una reacción química.

https://web.mst.edu/~gbert/Kinetics/Kinetics.html

Chemical Kinetics

First-Order Kinetics	Second-Order Kinetics	Unknown Order Kinetics	Code Number
Discussion	Discussion	Discussion	82

FIRST - ORDER KINETICS

copyright 2008
Gary L. Bertrand
A → Products

Initial Conc. moles/L:

Start Time seconds:

Interval seconds:

temp (C):

to change values,

time (sec)	[A] (mole/L)
0	0.800
700	0.645
1400	0.522
2100	0.421
2800	0.338
3500	0.274
4200	0.220
4900	0.177
5600	0.143
6300	0.116
7000	0.094

What is the half-life for this reaction (sec)?

What is the Reaction Rate Constant k (sec^{-1}) for this reaction?

17:57
24/06/2021

https://web.mst.edu/~gbert/Kinetics/Kinetics.html

Chemical Kinetics

First-Order Kinetics	Second-Order Kinetics	Unknown Order Kinetics	Code Number
Discussion	Discussion	Discussion	72

SECOND - ORDER KINETICS

copyright 2008
Gary L. Bertrand
A → Products

Initial Conc. moles/L:

Start Time seconds:

Interval seconds:

temp (C):

to change values,

time (sec)	[A] (mole/L)
0	0.0900
5000	0.0689
10000	0.0557
15000	0.0469
20000	0.0405
25000	0.0357
30000	0.0317
35000	0.0286
40000	0.0260
45000	0.0239
50000	0.0222

What is the half-life for this reaction (sec)?

What is the Reaction Rate Constant k ($\text{L}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{sec}^{-1}$) for this reaction?

18:08
24/06/2021

https://web.mst.edu/~gbert/Kinetics/Kinetics.html

Chemical Kinetics | Classroom Resources | Plop, Fi... | Classroom Resources | Reactio...

First-Order Kinetics	Second-Order Kinetics	Unknown Order Kinetics	Code Number
Discussion	Discussion	Discussion	72

Gary L. Bertrand
3 A → B

Initial Conc. moles/L:

Start Time seconds:

Interval seconds:

temp (C):

to change values, click on the number you want to change

time (sec)	[A] (mol/L)
0	0.600
100	0.517
200	0.439
300	0.366
400	0.300
500	0.242
600	0.189
700	0.143
800	0.103
900	0.069
1000	0.043

What is the half-life for this reaction (sec)?

What is the Order (n) for this reaction?

What is the Reaction Rate Constant k [(L/mol)ⁿ⁻¹/sec] for this reaction?

18:09 24/06/2021

c) http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_13

c1) http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_13_1

billvining.com/mmlib_sims/#gen_13_1

Concentration Dependence of Reaction Rates

CENGAGE Learning

Initial Concentration:

Simulation Speed:

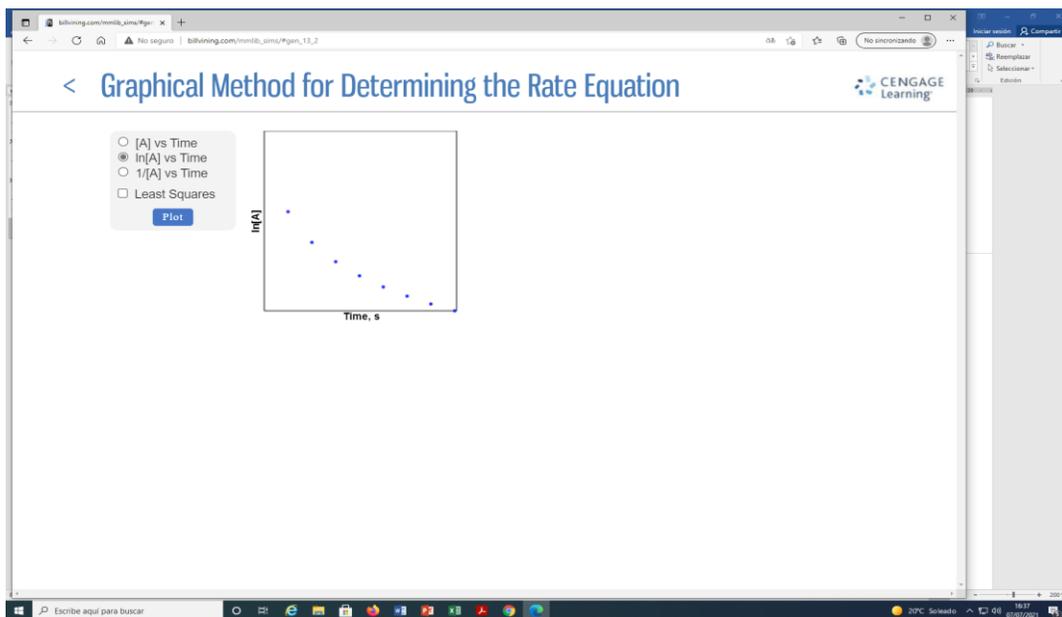
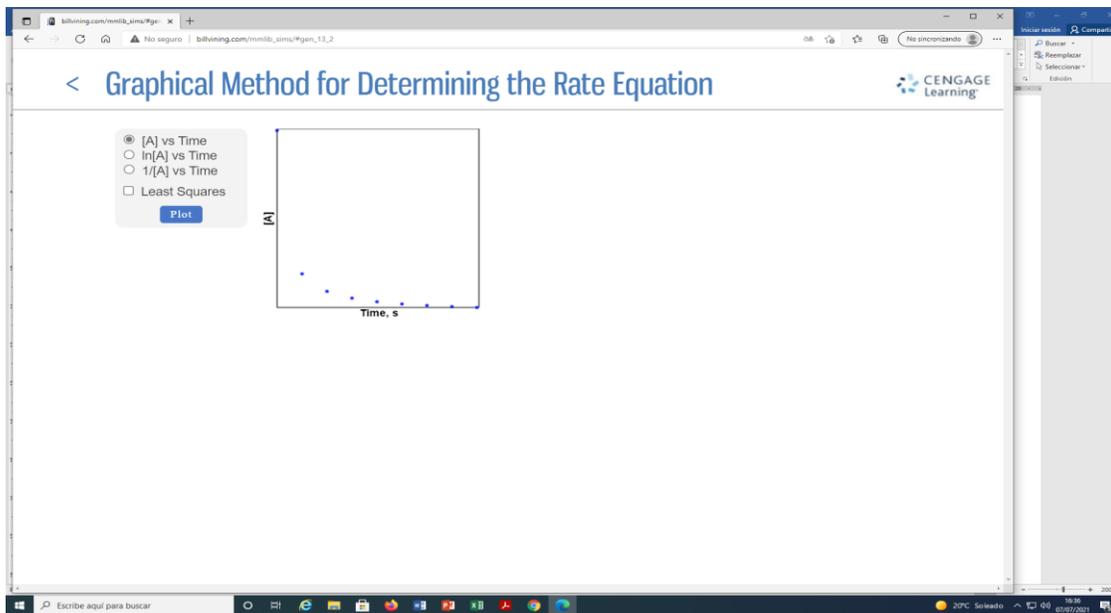
Reaction:

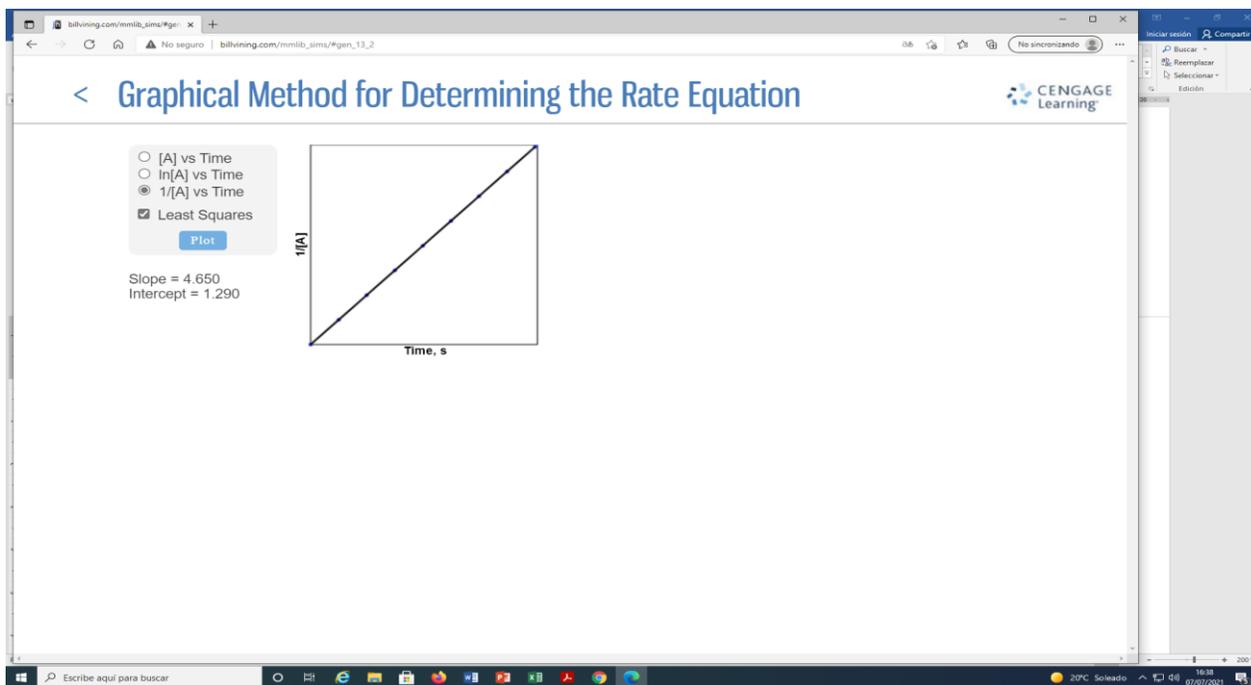
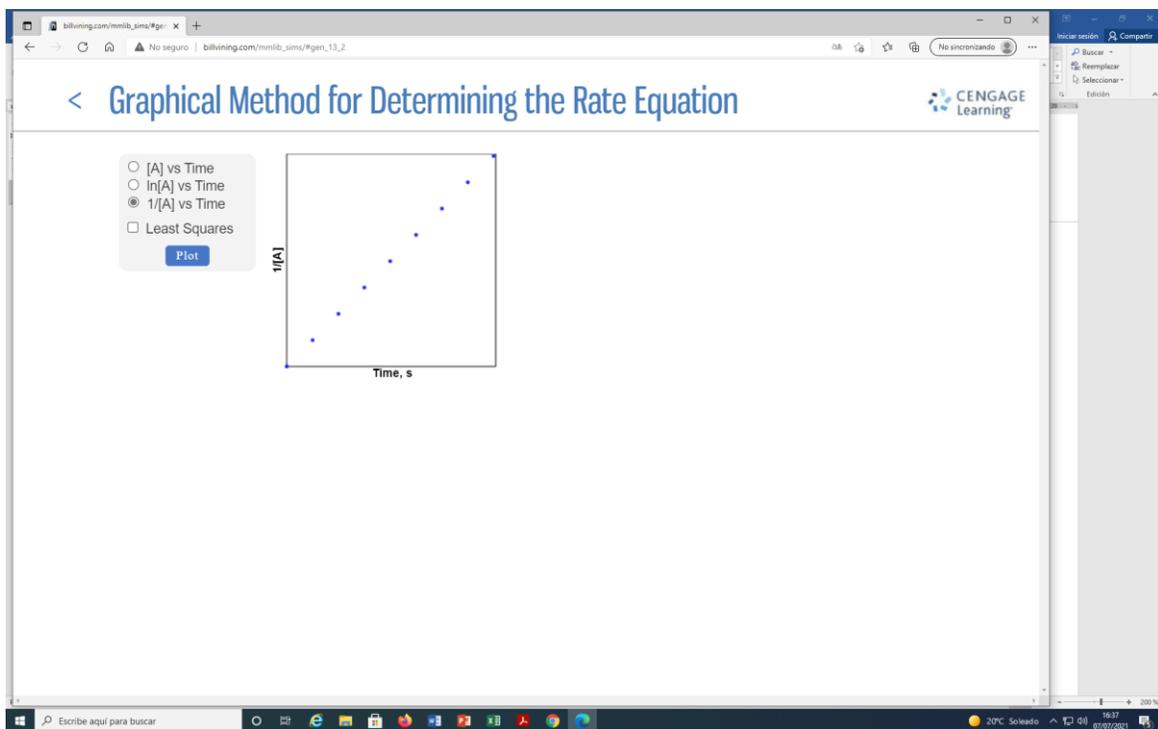
Press and hold until the reaction is complete.

Initial Rate: 8.35×10^{-3} mol/L·s

20°C Soledad 19:55

c2) http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_13_2



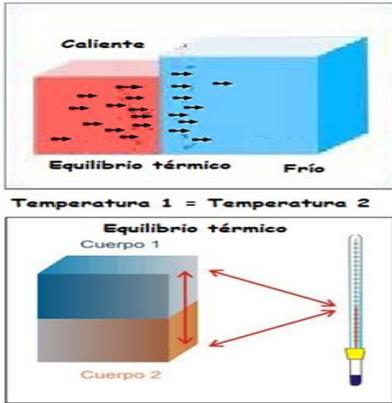


VI.- TERMOQUÍMICA

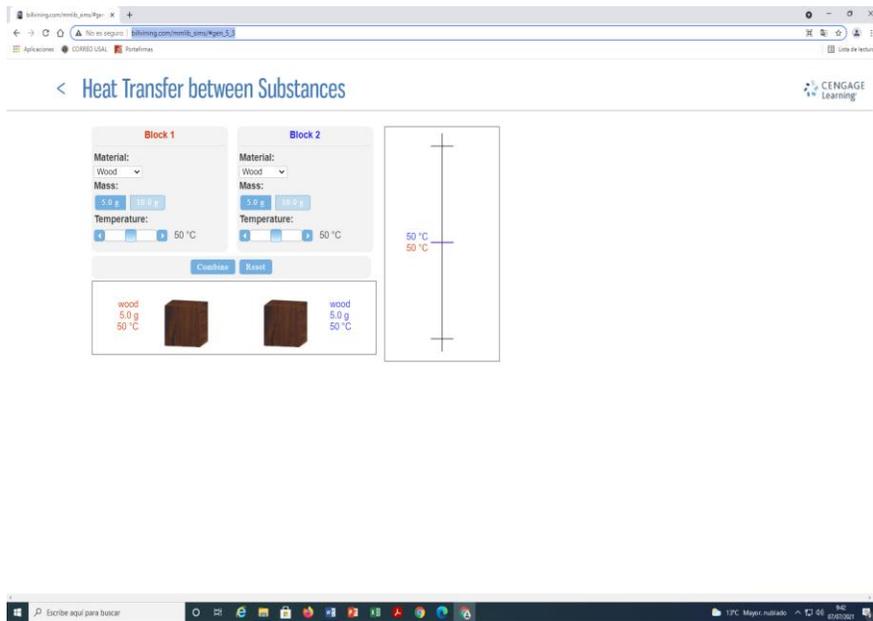
http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_5

a) TRANSFERENCIA DE CALOR

Dos o más cuerpos en contacto que se encuentran a distinta temperatura alcanzan, pasado un tiempo, el equilibrio térmico (misma temperatura).



http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_5_3



b) CAPACIDAD CALORÍFICA, C (J K⁻¹)

Variación de Q que se produce cuando cambia la temperatura.

$$C = \frac{\delta Q}{dT}; \quad dT = \frac{\delta Q}{C}$$

Cuanto mayor sea la capacidad calorífica de un sistema, menor será el cambio en la temperatura provocado por la transferencia de una cantidad de calor, Q.

CAPACIDAD CALORIFICA A PRESION CONSTANTE C_p ($J K^{-1}$)

Variación de Q a $P=cte$ $dH = \delta Q_p$.

$$C_p = \left(\frac{\partial Q_p}{\partial T} \right)_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$$

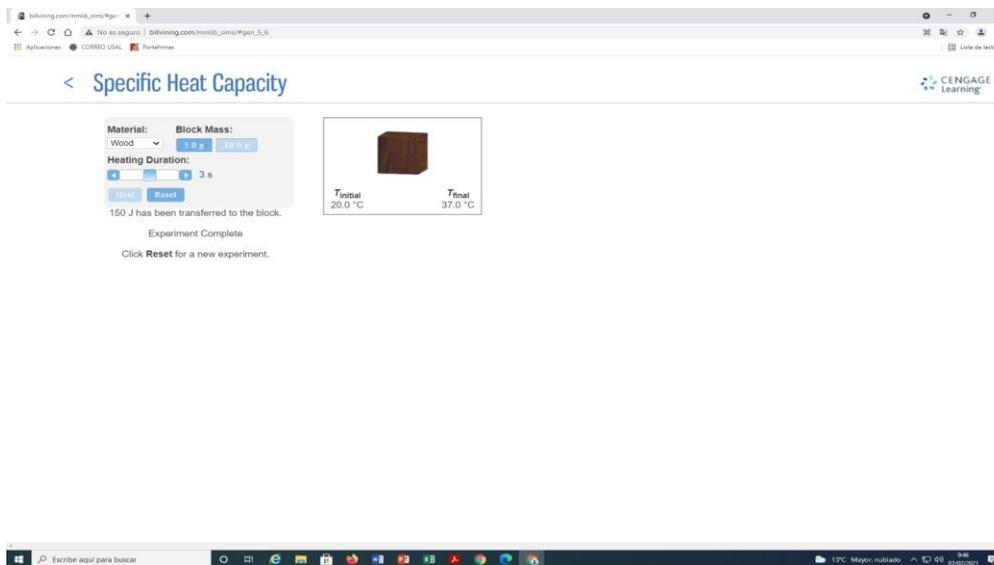
Calor que hay que suministrar al sistema a presión constante para que se eleve 1 grado su temperatura.

$\bar{C}_p \rightarrow$ Capacidad calorífica molar a presión constante, $C_p = n\bar{C}_p$

Calor que hay que suministrar a 1 mol de la sustancia para que su temperatura se eleve en 1 grado a presión constante, UNIDADES $\rightarrow cal/K mol$ o $J/ K mol$

Capacidad calorífica específica a presión constante, Calor específico a presión constante (C) $\rightarrow cal/K g$

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_5_6



c) CAMBIOS DE ESTADO

- Las sustancias puras puede presentarse en distintas fases: sólido, líquido y gaseosa.
- Dependiendo de los valores de presión y temperatura una sustancia puede estar como sólido, líquido o vapor o presentarse en dos o tres fases a la vez \rightarrow El sistema puede ser monofásico o multifásico.

Cambio de fase o estado

- Cada una de las transformaciones se le llama cambio de fase o estado que va acompañado por un cambio de E

VAPORIZACIÓN

- Cuando las moléculas de un líquido tienen suficiente energía para escapar de la superficie tiene lugar un cambio de fase (evaporación o vaporización).

CONDENSACIÓN → El proceso opuesto a la evaporación es la condensación

Temperatura de ebullición de un líquido → Temperatura a la que la presión de vapor igual a la presión atmosférica.

El **punto de ebullición normal** es la temperatura a la que el líquido hierve cuando la presión externa es 1 atm.

Calor molar de vaporización (ΔH_{vap}) → Energía necesaria para vaporizar un mol de líquido.

CONGELACIÓN → Transformación de un líquido en sólido.

FUSIÓN → Transformación de un sólido en líquido.

- El **punto de fusión de un sólido o el punto de congelación** de un líquido es la temperatura a la cual las fases sólida y líquida coexisten en equilibrio.

- El **punto de fusión/congelación normal** de una sustancia es la temperatura a la que se funde o se congela cuando la presión es 1 atm.

Calor molar de fusión (ΔH_{fus}) → Energía necesaria para fundir un mol de un sólido.

SUBLIMACIÓN → Proceso por el cual las moléculas o átomos de un sólido pasan directamente a vapor.

Los sólidos también poseen una presión de vapor (mucho menor que la del líquido)

DEPOSICIÓN → Proceso inverso a la sublimación

Calor molar de sublimación (ΔH_{sub}) → Energía necesaria para sublimar un mol de un sólido.

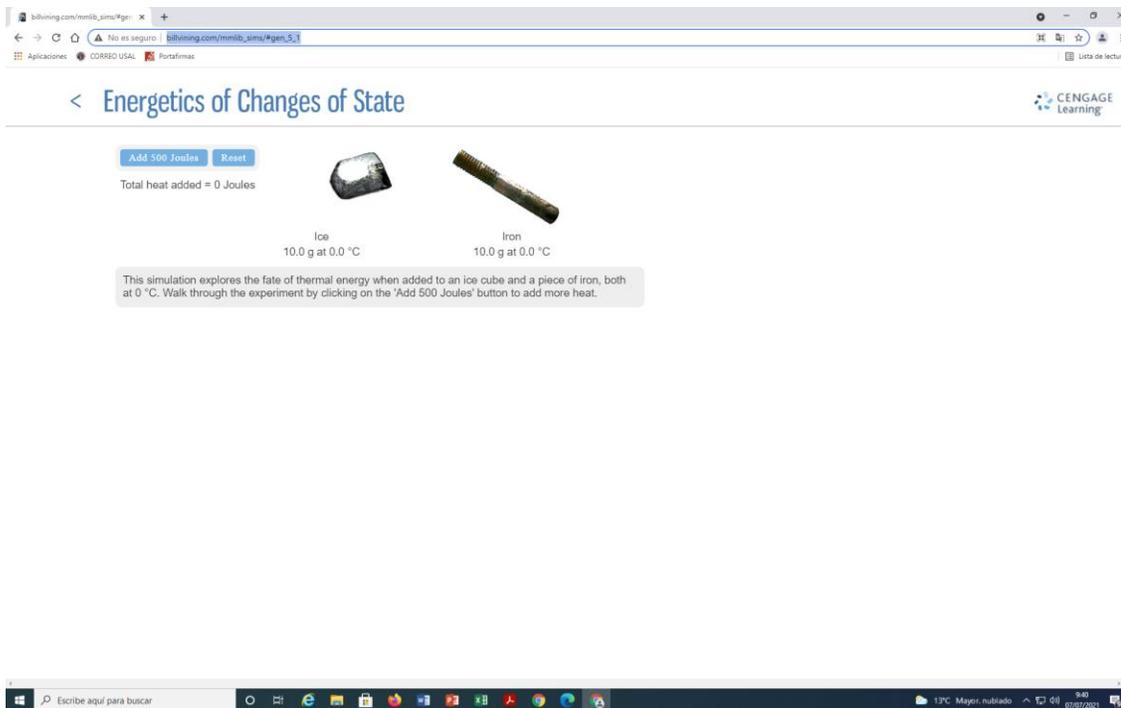
- **Procesos endotérmicos** → Requieren E para vencer la F. intermoleculares porque pasan a un estado más desordenado $\Delta H_m > 0$:

- Sublimación, ΔH_{sub} (S → G)
- Vaporización, ΔH_{vap} (L → G)
- Fusión, ΔH_{fus} (S → L).

Procesos exotérmicos → Liberan E, $\Delta H_m < 0$

- Deposición (G → S),
- Condensación (G → L),
- Congelación (L → S).

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_5_1



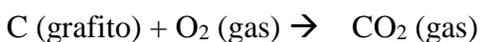
d) ENERGÉTICA DE LAS REACCIONES QUÍMICAS:

Calor de reacción

Calor intercambiado con los alrededores en la transformación de los reactivos a temperatura T y presión P en los productos a las mismas T y P

$P = \text{constante} \rightarrow \text{Calor intercambiado} = \text{Variación de entalpía.}$

$$Q_p = \Delta H$$



Estado inicial T, P Estado final T y P

Calor de reacción, $Q_p = \text{Variación de entalpía, } \Delta H$

Para esta reacción a 298 K y 1 atm, $\Delta H = -353.52 \text{ kJ/mol} \rightarrow$ los productos tienen una entalpía 353.52 kJ/mol menor que los reactivos.

Variación de entalpía de reacción

La variación de entalpía se puede considerar también de la manera siguiente:

$$H_{\text{reacción}} = H_{\text{productos}} - H_{\text{reactivos}}$$

$$\Delta H = 1 \bar{H}_{\text{CO}_2} - 1 \bar{H}_{\text{GRAFITO}} - 1 \bar{H}_{\text{O}_2}$$

\bar{H}_i = Entalpías molares a la T y P de la reacción.

Entalpías molares

- Si se dispusieran de valores tabulados de las entalpías molares de todas las sustancias se podría calcular la variación de entalpía de cualquier reacción

$$\Delta H_{\text{Reacción}} = \sum \nu_j \bar{H}_j(\text{Productos}) - \sum \nu_i \bar{H}_i(\text{Reactivos})$$

$\nu_j, \nu_i \rightarrow$ Coeficientes estequiométricos de los productos y reactivos de la reacción (valores absolutos).

La entalpía molar de cualquier sustancia es función de la temperatura y la presión:

$$\bar{H} = f(T, P)$$

Estado normal (estándar) de una sustancia a una T dada es su estado puro a **P=1 atm**

Entalpía normal (o estándar) $\rightarrow \bar{H}_{T, \text{sustancia}}^0$

Entalpía de un mol de sustancia a 1 atm y T elegida.

CONVENIO

“A la entalpía molar de cualquier elemento químico en su estado de agregación estable a 1 atm y 298 K se le asigna el valor cero ($\bar{H}_{298, i}^0 = 0$)”

$$\bar{H}_{298, O_2(g)}^0 = 0 \quad \bar{H}_{298, C(\text{grafito})}^0 = 0 \quad \bar{H}_{298, Pb(s)}^0 = 0$$

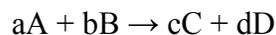
$\bar{H}_{298, O_3(g)}^0 \neq 0 \quad \bar{H}_{298, C(\text{diamante})}^0 \neq 0 \rightarrow$ No son los estados de agregación estables a 1 atm y 298 K.

Entalpías normales de reacción (Entalpías estándar de reacción)

$\Delta H^0, \Delta_r H^0, \Delta H_T^0$

Variación de entalpía al transformarse los números estequiométricos de moles de los reactivos puros separados (cada uno de ellos en sus estados normales a T), en los números estequiométricos de moles de los productos puros separados (cada uno de ellos en su estado normal a T)

Reactivos en sus estados estándar pasan a productos también en sus estados estándar



$$\Delta H_T^0 \equiv c\bar{H}_C^0 + d\bar{H}_D^0 - a\bar{H}_A^0 - b\bar{H}_B^0$$

Cálculo de la Entalpía normal de reacción

$$\Delta H^0 = \sum_{\text{productos}} \nu_i \bar{H}_{T, i}^0 - \sum_{\text{reactivos}} \nu_i \bar{H}_{T, i}^0$$

- A partir de datos termodinámicos tabulados de los reactivos y los productos
- Necesario conocer las Entalpías molares de las distintas sustancias en su estado normal a la temperatura T $\rightarrow \bar{H}_{T, i}^0$

Ley de Hess.

- Las entalpías estándar de reacciones individuales pueden combinarse para obtener la entalpía de otra reacción. Aplicación del primer principio:

La entalpía estándar de una reacción es la suma de las entalpías estándar de las reacciones individuales

Cálculo de la Entalpía normal de reacción → A partir de las **Entalpías normales de formación** de reactivos y productos.

Entalpías normales de formación (calor normal de formación) 25°C y 1 atm, $\Delta H_{f,i}^{\circ}$

Es el calor puesto en juego para la síntesis (formación) de un mol de un compuesto químico a partir de sus elementos en su estado de agregación estable mezclados en condiciones normales a 25°C y 1 atm.

ΔH_f° → A partir de valores experimentales y ecuaciones termodinámicas.

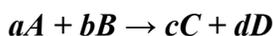
$\Delta H_f^{\circ} = 0$ para cualquier elemento en su forma de referencia

Se tabulan **Entalpías normales de formación $\Delta H_{f,i}^{\circ}$** de las sustancias i → Se determinan Entalpía normal de la reacción.

$$\Delta H^{\circ} = \sum_i \nu_i \Delta H_{f,i}^{\circ}$$
$$\Delta H^{\circ} = \sum_{\text{productos}} \nu_i \Delta H_{f,i}^{\circ} - \sum_{\text{reactivos}} \nu_i \Delta H_{f,i}^{\circ}$$

$\Delta H_{f,i}^{\circ}$ → Entalpía normal de formación de la sustancia i

Ley de Hess



a, b, c, d → valores absolutos de los coeficientes estequiométricos.

$$\Delta H^{\circ} = c\Delta H_{f,C}^{\circ} + d\Delta H_{f,D}^{\circ} - a\Delta H_{f,A}^{\circ} - b\Delta H_{f,B}^{\circ}$$

Caminos para pasar de reactivos a productos:

Etapa 1 → Conversión directa de reactivos a productos

Etapa 2 → Conversión de reactivos a elementos en sus estados normales y formas de referencia

Etapa 3 → Conversión de elementos a productos

Reactivos A y B (P,T) $\xrightarrow{1}$ Productos C y D (P,T)

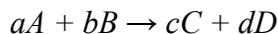


Elementos en sus estados normales de referencia a T

H función de estado → ΔH independiente del camino

$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3$$

Etapa 1 → Conversión directa de reactivos a productos



Entalpía normal del proceso 1 → ΔH_1

Entalpía normal de la reacción $\Delta H^0 = \text{Entalpía normal del proceso 1}$ → $\Delta H_1 = \Delta H^0$

$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3 \rightarrow \Delta H_1 = \Delta H^0$$

Etapa 2 → Conversión de reactivos a elementos en sus estados normales y formas de referencia

Reactivos $aA + bB$ en sus estados normales de referencia a T → *Elementos* en sus estados normales de referencia a T

Entalpía normal del proceso 2 → ΔH_2

Proceso inverso a 2 → *Formación de* $aA + bB$ a partir de sus elementos

$$-\Delta H_2 = a\Delta H_f^0(A) + b\Delta H_f^0(B)$$

$\Delta H_f^0(A)$ → Entalpía normal de formación del compuesto A a la temperatura T

$\Delta H_f^0(B)$ → Entalpía normal de formación del compuesto B a la temperatura T

Etapa 3 → Formación de $cC + dD$ a partir de sus elementos

Elementos en sus estados normales de referencia a T → Productos $cC + dD$ en sus estados normales de referencia a T

Entalpía normal del proceso 3 → ΔH_3

$$\Delta H_3 = c\Delta H_f^0(C) + d\Delta H_f^0(D)$$

$\Delta H_f^0(C)$ → Entalpía normal de formación del compuesto C a la temperatura T

$\Delta H_f^0(D)$ → Entalpía normal de formación del compuesto D a la temperatura T

$$-\Delta H_2 = a\Delta H_f^0(A) + b\Delta H_f^0(B)$$

$$\Delta H_2 = -a\Delta H_f^0(A) - b\Delta H_f^0(B)$$

$$\Delta H_3 = c\Delta H_f^0(C) + d\Delta H_f^0(D)$$

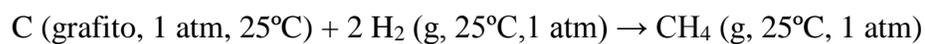
$$\Delta H^0 = \Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta H_3$$

$$\Delta H^0 = -a\Delta H_f^0(A) - b\Delta H_f^0(B) + c\Delta H_f^0(C) + d\Delta H_f^0(D)$$

Variación de entalpía normal de una reacción química

$$\Delta H^0 = \sum_{\text{productos}} \nu_i \Delta H_{f,i}^0 - \sum_{\text{reactivos}} \nu_i \Delta H_{f,i}^0$$

$$\Delta H^{\circ} = \sum_i \nu_i \Delta H_f^{\circ}(i)$$



$$\Delta H_f^{\circ}(\text{C}) = 0$$

$$\Delta H_f^{\circ}(\text{H}_2) = 0$$

$$\Delta H^{\circ}(\text{CH}_4) = \Delta H_f^{\circ}(\text{CH}_4)$$

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_5_5

Select a reaction by clicking and dragging the reaction into one of the spaces below.

Reactions	$\Delta_r H^{\circ}$ (kJ/mol)
$\text{SnCl}_2(\text{s}) + \text{TiBr}_2(\text{s}) \rightarrow \text{SnBr}_2(\text{s}) + \text{TiCl}_2(\text{s})$	+4.2
$\text{SnCl}_2(\text{s}) + \text{Cl}_2(\text{g}) \rightarrow \text{SnCl}_4(\text{l})$	-195
$\text{TiCl}_2(\text{s}) + \text{Cl}_2(\text{g}) \rightarrow \text{TiCl}_4(\text{l})$	-273

$\Delta_r H^{\circ}$ (kJ/mol)

Clear Reverse

Clear Reverse

Clear Reverse

Net Reaction: $\Delta_r H^{\circ}_{\text{net}} = 0.0 \text{ kJ/mol}$

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_5_2

billvining.com/mmlib_sims/#gen_5_0

Aplicaciones CORREO USA Portafolios

< Energy and Chemical Reactions

CENGAGE Learning

A Comparison of Molecular Speeds Before and After Combustion

The diagram shows a candle flame with three boxes illustrating molecular speeds before and after combustion:

- Above the flame:** H₂O, N₂, O₂, CO₂, N₂
- Unburned gas:** CH₄, O₂, O₂
- In the flame:** CO₂, H₂O, H₂O

Windows taskbar: Escribe aquí para buscar, 13°C, Mayo, nublado, 841, 03/07/2021

e) MEDIDA DE ΔH

Calorimétricamente controlando la variación de temperatura que acompaña a un cambio químico o físico que tiene lugar a presión constante.

Calorímetro adiabático → No transmite calor al entorno $\Delta q_v, T = 0$

- Para una reacción de combustión → Mide ΔT que se produce cuando se quema una sustancia en una fuente de oxígeno

Bomba calorimétrica → Medir la variación de energía interna en una bomba calorimétrica y posteriormente convertir ΔU en ΔH

http://billvining.com/mmlib_sims/#gen_5_0

bilivining.com/mm1ib_sims/#gen...
No es seguro | bilivining.com/mm1ib_sims/#gen_5_0
Aplicaciones CORREO USA Portafirmas Lista de lectura

< Bomb Calorimetry

CENGAGE Learning

Mass Benzoic Acid
500 mg

Mass of Water
1000 g

Compounds
Benzoic Acid

Ignite Reset

The heat capacity of the calorimeter vessel is 420 J/°C

