

ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ ΥΨΗΛΩΝ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΩΝ

Εντροπία - Ελεύθερη Ενέργεια

Παρουσίαση 3

Αυθόρμητες χημικές αντιδράσεις

Η αντίδραση οξείδωσης ενός μετάλλου μπορεί να γραφτεί στη γενική της μορφή:



Τα ερωτήματα που τίθενται είναι:

- Η οξείδωση του μετάλλου M(s) είναι **αυθόρμητη** χημική αντίδραση και κάτω από ποιες συνθήκες;
- Δηλαδή αν αφήσω το μέταλλο στο περιβάλλον αυτό θα μετατραπεί σε οξείδιο ή όχι;
- Αν η οξείδωση δεν γίνεται σε θερμοκρασία περιβάλλοντος, σε τι συνθήκες μπορεί να συμβεί;

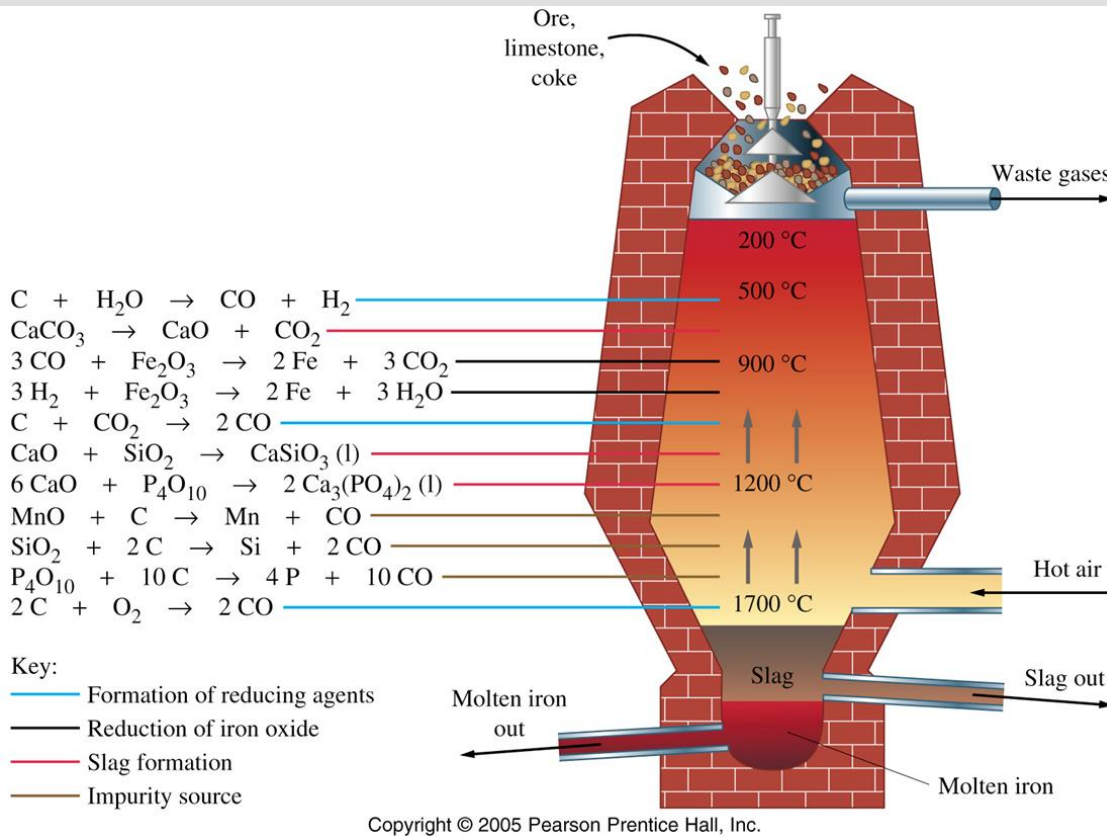
Αυθόρμητες χημικές αντιδράσεις

Αν υποθέσουμε ότι θέλω να χρησιμοποιήσω την αντίστροφη διαδικασία, δηλαδή να παράγω ένα μέταλλο με θερμική διάσπαση του οξειδίου του, μπορώ να καταλάβω αν αυτό είναι εφικτό;



- Είναι η παραπάνω αντίδραση **εφικτή** και κάτω από ποιες συνθήκες;
- Γενικά, μπορώ να προβλέψω αν και πότε κάποια χημική αντίδραση μπορεί να συμβεί ή όχι;

Αυθόρμητες χημικές αντιδράσεις



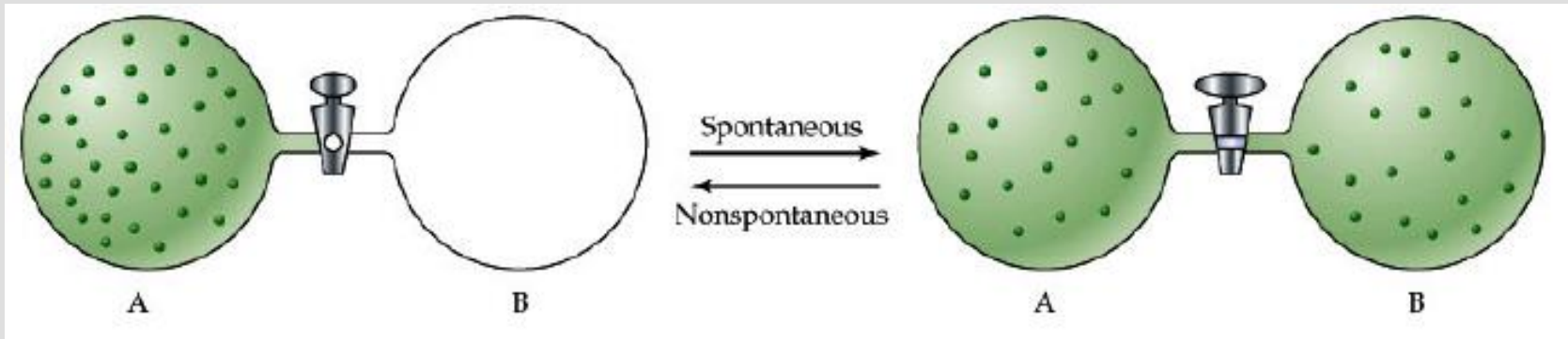
Οι χημικές αντιδράσεις που συμβαίνουν στην υψικάμινο φαίνονται στο διπλανό σχήμα.

Πώς μπορώ να προβλέψω σε ποια θερμοκρασία μπορεί να συμβεί η κάθε μια για να είναι εφικτή η μετατροπή των οξειδίων του σιδήρου σε σίδηρο;

Αυθόρμητες χημικές αντιδράσεις

- Επομένως, είναι ιδιαίτερα σημαντικό να μπορούμε να προβλέψουμε αν μία χημική αντίδραση μπορεί να συμβεί ή όχι, και κάτω από ποιες συνθήκες μπορεί να συμβεί.
- Μια χημική αντίδραση που συμβαίνει κάτω από ορισμένες συνθήκες ονομάζεται **αυθόρμητη** χημική αντίδραση.
- Μια χημική αντίδραση που δεν συμβαίνει κάτω από ορισμένες συνθήκες ονομάζεται **μη-αυθόρμητη** χημική αντίδραση.

Αυθόρμητες χημικές αντιδράσεις



- Μια αυθόρμητη χημική αντίδραση μετατοπίζει πάντα τα αντιδρώντα στην κατεύθυνση της ισορροπίας
- Η ταχύτητα της αντίδρασης δεν εξαρτάται από το εάν είναι αυθόρμητη ή όχι.

Ελεύθερη ενέργεια G

$$\Delta G_T = \Delta H_T - T\Delta S_T$$

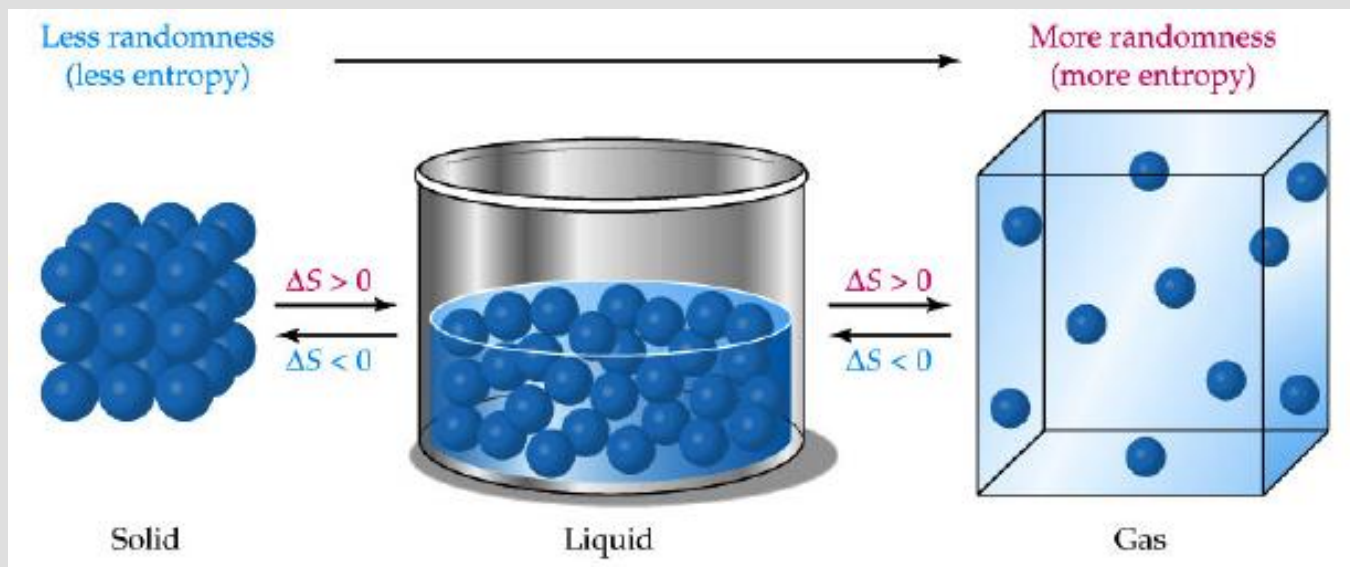
Για να μπορέσουμε να προβλέψουμε αν μια χημική αντίδραση μπορεί να συμβεί σε κάποια θερμοκρασία ή όχι, πρέπει να υπολογίσουμε ένα θερμοδυναμικό μέγεθος που ονομάζεται **ελεύθερη ενέργεια ή ελεύθερη ενθαλπία**.

Η μεταβολή της ελεύθερης ενέργειας είναι συνάρτηση της μεταβολής της **ενθαλπίας** και της **εντροπίας** της χημικής αντίδρασης.

Τι αντιπροσωπεύει η εντροπία

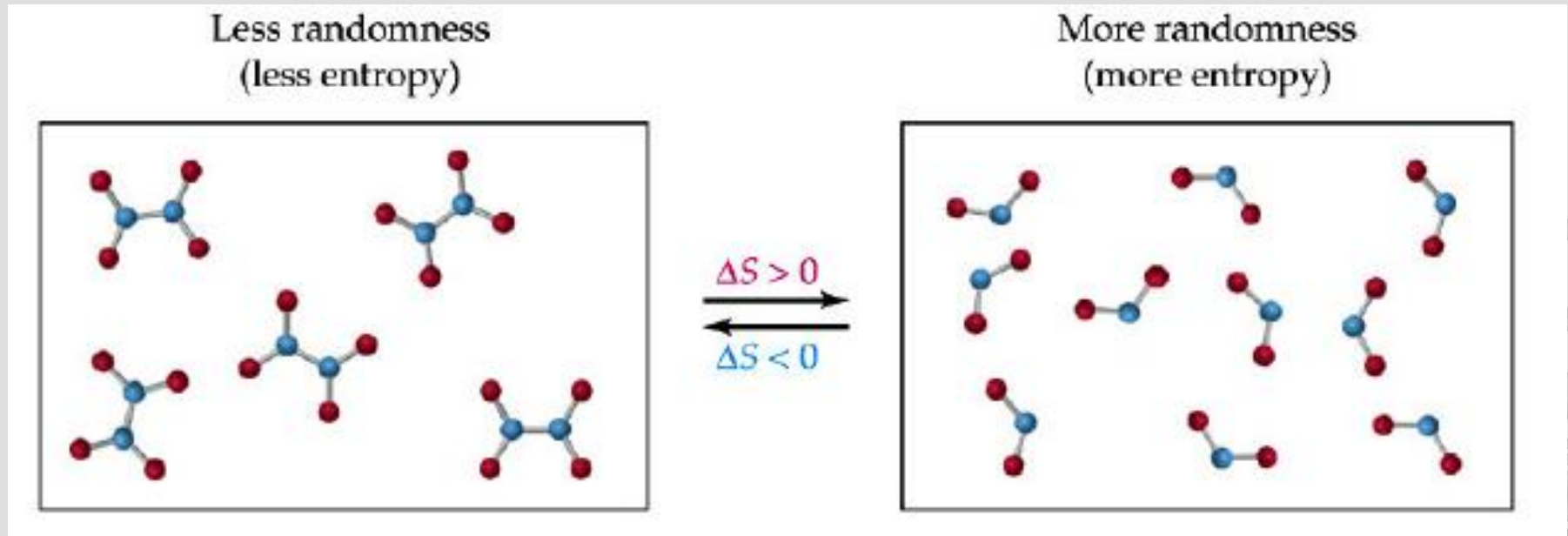
- Η **εντροπία (S)** είναι το μέτρο της τάξης ή της αταξίας ενός συστήματος.
- Μεγαλύτερη αταξία σημαίνει μεγαλύτερη εντροπία.
- Η φύση τείνει σε καταστάσεις μεγαλύτερης εντροπίας.

Εντροπία στερεής, υγρής και αέριας φάσης



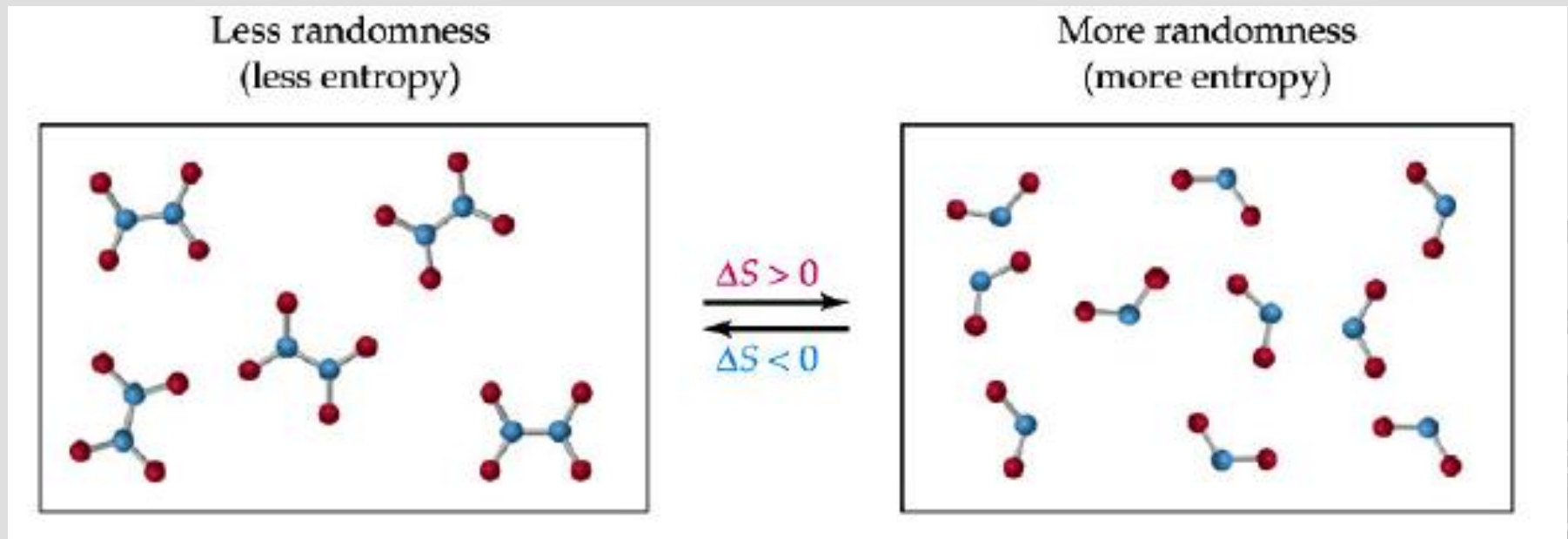
- $S_{\text{solid}} < S_{\text{liquid}} < S_{\text{gas}}$
- Η πρότυπη εντροπία S° ενός σώματος είναι η εντροπία σε θερμοκρασία 25 °C και πίεση 1 atm
- Η μεταβολή της εντροπίας είναι $\Delta S = S_2 - S_1$

Εντροπία και αταξία



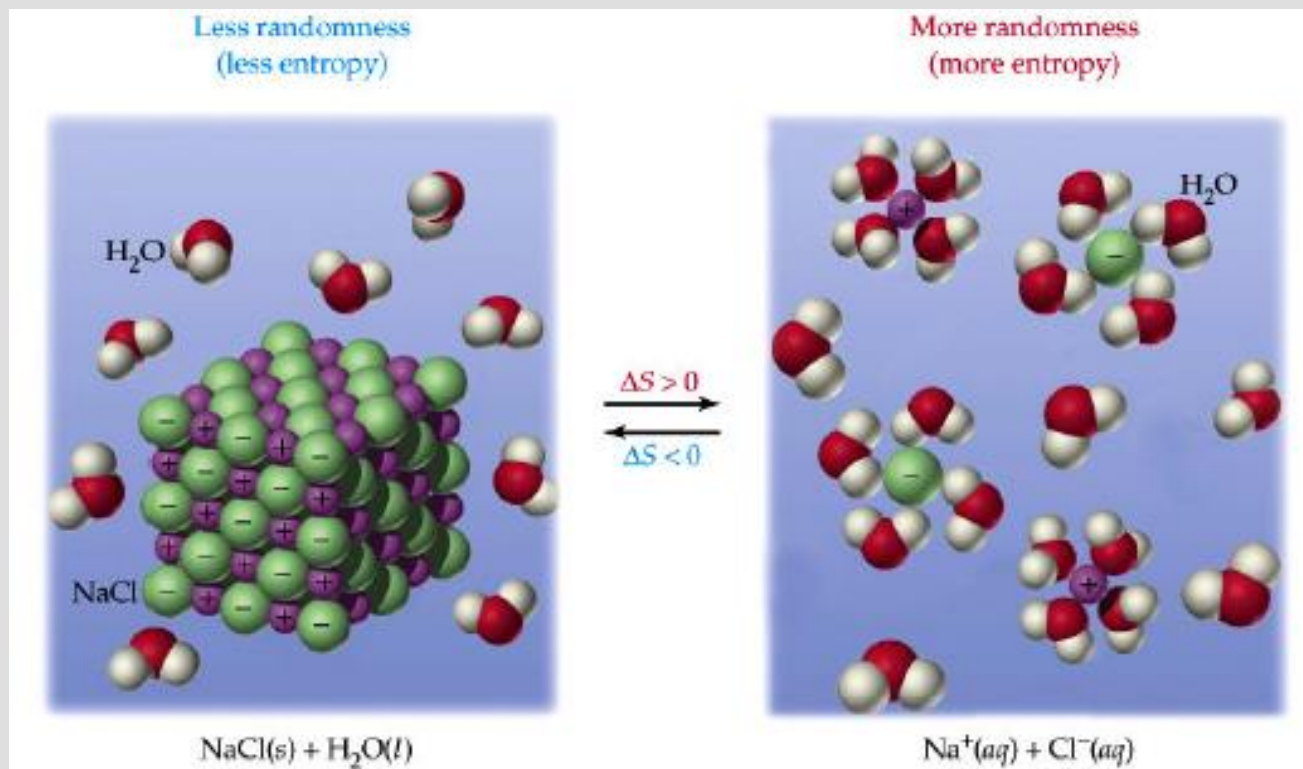
Η διάσπαση του μορίου N_2O_4 σε δύο μόρια NO_2 οδηγεί σε **αύξηση ή μείωση** της εντροπίας του συστήματος?

Εντροπία και αταξία



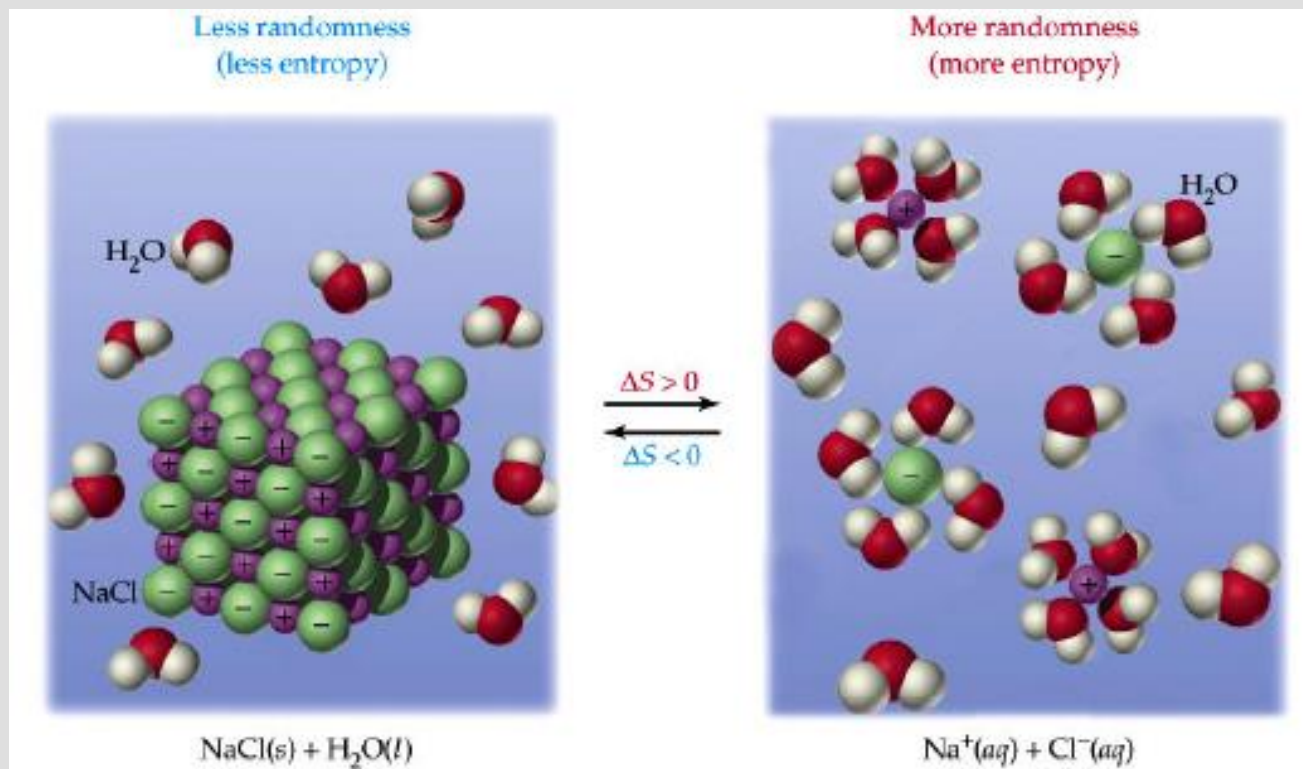
Η διάσπαση του μορίου N_2O_4 σε δύο μόρια NO_2 οδηγεί σε **αύξηση** της εντροπίας του συστήματος

Εντροπία και αταξία



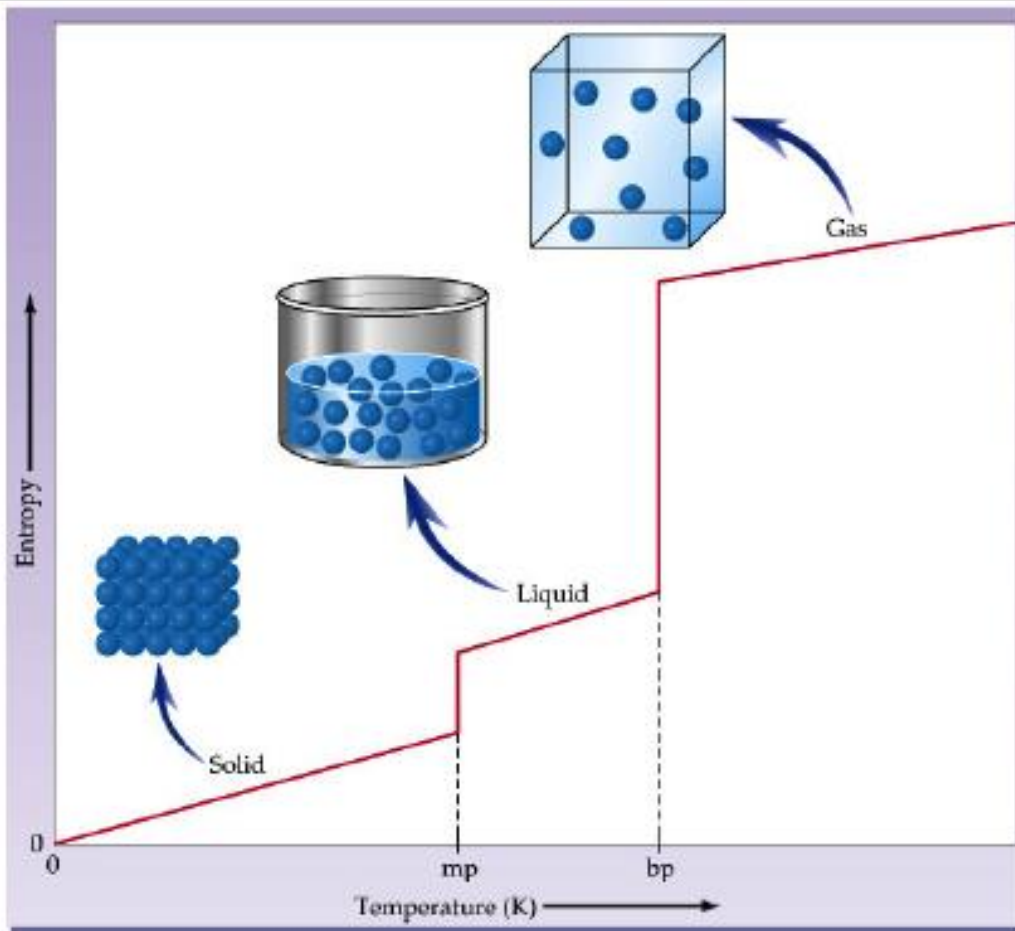
Η διάλυση του μορίου NaCl σε H₂O οδηγεί σε **αύξηση ή μείωση** της εντροπίας?

Εντροπία και αταξία



Η διάλυση του μορίου NaCl σε H₂O οδηγεί σε **αύξηση** της εντροπίας

Μεταβολή της εντροπίας με τη θερμοκρασία



- Η εντροπία μιας τέλεια κρυσταλλωμένης ουσίας στους 0 K είναι μηδέν.
- Η εντροπία αυξάνει με τη θερμοκρασία.
- Στο σημεία τήξης και στο σημείο βρασμού υπάρχει μια βηματική αύξηση στην εντροπία.

Πρότυπη Εντροπία χημικών ενώσεων

Substance	Formula	S° [J/(K · mol)]
<i>Gases</i>		
Acetylene	C_2H_2	200.8
Ammonia	NH_3	192.3
Carbon dioxide	CO_2	213.6
Carbon monoxide	CO	197.6
Ethylene	C_2H_4	219.5
Hydrogen	H_2	130.6
Methane	CH_4	186.2
Nitrogen	N_2	191.5
Nitrogen dioxide	NO_2	240.0
Dinitrogen tetroxide	N_2O_4	304.2
Oxygen	O_2	205.0

Γιατί η πρότυπη εντροπία των χημικών στοιχείων δεν είναι μηδέν ενώ η πρότυπη ενθαλπία τους είναι μηδέν;

Πρότυπη Εντροπία χημικών ενώσεων

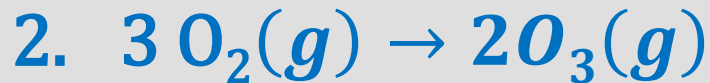
Substance	Formula	S° [J/(K · mol)]
<i>Liquids</i>		
Acetic acid	$\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$	160
Ethanol	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$	161
Methanol	CH_3OH	127
Water	H_2O	69.9
<i>Solids</i>		
Calcium carbonate	CaCO_3	92.9
Calcium oxide	CaO	39.7
Diamond	C	2.4
Graphite	C	5.7
Iron	Fe	27.3
Iron(III) oxide	Fe_2O_3	87.4

Γιατί η πρότυπη
εντροπία
διαμαντιού είναι
μικρότερη από του
γραφίτη;



Πρότυπη Εντροπία χημικών ενώσεων

Μπορείτε να προβλέψετε τη μεταβολή (αύξηση ή μείωση) της εντροπίας των παρακάτω χημικών αντιδράσεων;



Υπολογισμός της Πρότυπης Εντροπίας Χημικών Αντιδράσεων

Η πρότυπη ΔS° για μια χημική αντίδραση υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\Delta S^\circ_{\text{rxn}} = \sum n S^\circ (\text{Products}) - \sum n S^\circ (\text{Reactants})$$

$$\Delta S_{T_1}^{T_2}(A) = \int_{T_1}^{T_2} c_{p(A)} dT / T$$

Πρότυπη Εντροπία χημικών αντιδράσεων

Υπολογίστε τη μεταβολή της πρότυπης εντροπίας των χημικών αντιδράσεων:



S° (J/K.mol)

N ₂	91.5
H ₂	130.6
NH ₃	192.3
CaCO ₃	92.9
CaO	39.7
CO ₂	213.6

Μεταβολή της Εντροπίας Χημικής Ένωσης σε θερμοκρασία διαφορετική της πρότυπης

$$\Delta S_T = \Delta S_{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_m} c_p \frac{dT}{T} + \Delta S_m + \int_{T_m}^{T_T} c_p \frac{dT}{T}$$

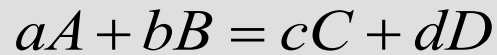
Μεταβολή εντροπίας σε
πρότυπες συνθήκες

Μεταβολή εντροπίας από
πρότυπες συνθήκες μέχρι
σημείο τήξης

Μεταβολή εντροπίας κατά
την τήξη

Μεταβολή εντροπίας από
σημείο τήξης μέχρι
θερμοκρασία T

Μεταβολή της Εντροπίας Χημικής Ένωσης σε θερμοκρασία διαφορετική της πρότυπης



$$\Delta S^T(R) = \Delta S^{T_{Ref}}(R) + \Delta S_{T_{Ref}}^T(\text{προϊόντων}) - \Delta S_{T_{Ref}}^T(\text{αντιδρώντων})$$

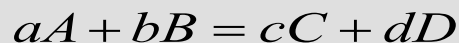
$$\Delta S^{T_{Ref}}(R) = \left[c\Delta S^{T_{Ref}}(C) + d\Delta S^{T_{Ref}}(D) \right] - \left[a\Delta S^{T_{Ref}}(A) + b\Delta S^{T_{Ref}}(B) \right]$$

$$\Delta S_{T_{Ref}}^T(\text{προϊόντων}) = \left[c\Delta S_{T_{Ref}}^T(C) + d\Delta S_{T_{Ref}}^T(D) \right]$$

$$\Delta S_{T_{Ref}}^T(\text{αντιδρώντων}) = \left[a\Delta S_{T_{Ref}}^T(A) + b\Delta S_{T_{Ref}}^T(B) \right]$$

$$\Delta S_{(A)}^{T_{ref}} = \Delta S_A^{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_m} c_{p(A)} \frac{dT}{T} + \Delta S_m + \int_{T_m}^T c_{p(A)} \frac{dT}{T}$$

Μεταβολή της Εντροπίας Χημικής Αντίδρασης σε Θερμοκρασία διαφορετική της πρότυπης



$$\Delta S^T(R) = \Delta S^{T_{Ref}}(R) + \Delta S_{T_{Ref}}^T(\text{προϊόντων}) - \Delta S_{T_{Ref}}^T(\text{αντιδρώντων})$$

$$\Delta S^{T_{Ref}}(R) = \left[c\Delta S^{T_{Ref}}(C) + d\Delta S^{T_{Ref}}(D) \right] - \left[a\Delta S^{T_{Ref}}(A) + b\Delta S^{T_{Ref}}(B) \right]$$

$$\Delta S_{T_{Ref}}^T(\text{προϊόντων}) = \left[c\Delta S_{T_{Ref}}^T(C) + d\Delta S_{T_{Ref}}^T(D) \right]$$

$$\Delta S_{T_{Ref}}^T(\text{αντιδρώντων}) = \left[a\Delta S_{T_{Ref}}^T(A) + b\Delta S_{T_{Ref}}^T(B) \right]$$

$$\Delta S_{(A)T_{ref}}^T = \Delta S_A^{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_m} c_p(A) \frac{dT}{T} + \Delta S_m + \int_{T_m}^T c_p(A) \frac{dT}{T}$$

$$c_p = a + bT + cT^2 + dT^{-2}$$

$$\Delta S_{T_{ref}}^T = \int_{T_{ref}}^{T_m} c_p(A) \frac{dT}{T} = a \ln \left(\frac{T_m}{T_{ref}} \right) + b(T_m - T_{ref}) + \frac{c}{2}(T_m^2 - T_{ref}^2) - \frac{d}{2} \left(\frac{1}{T_m^2} - \frac{1}{T_{ref}^2} \right)$$

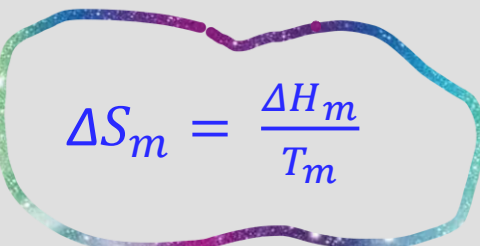
$$\Delta S_m = \frac{\Delta H_m}{T_m}$$

Υπολογισμός Μεταβολής Εντροπίας

$$c_p = a + bT + c T^2 + dT^{-2}$$

$$\Delta S_{T_{ref}}^T = \int_{T_{ref}}^{T_m} c_{p(A)} \frac{dT}{T}$$

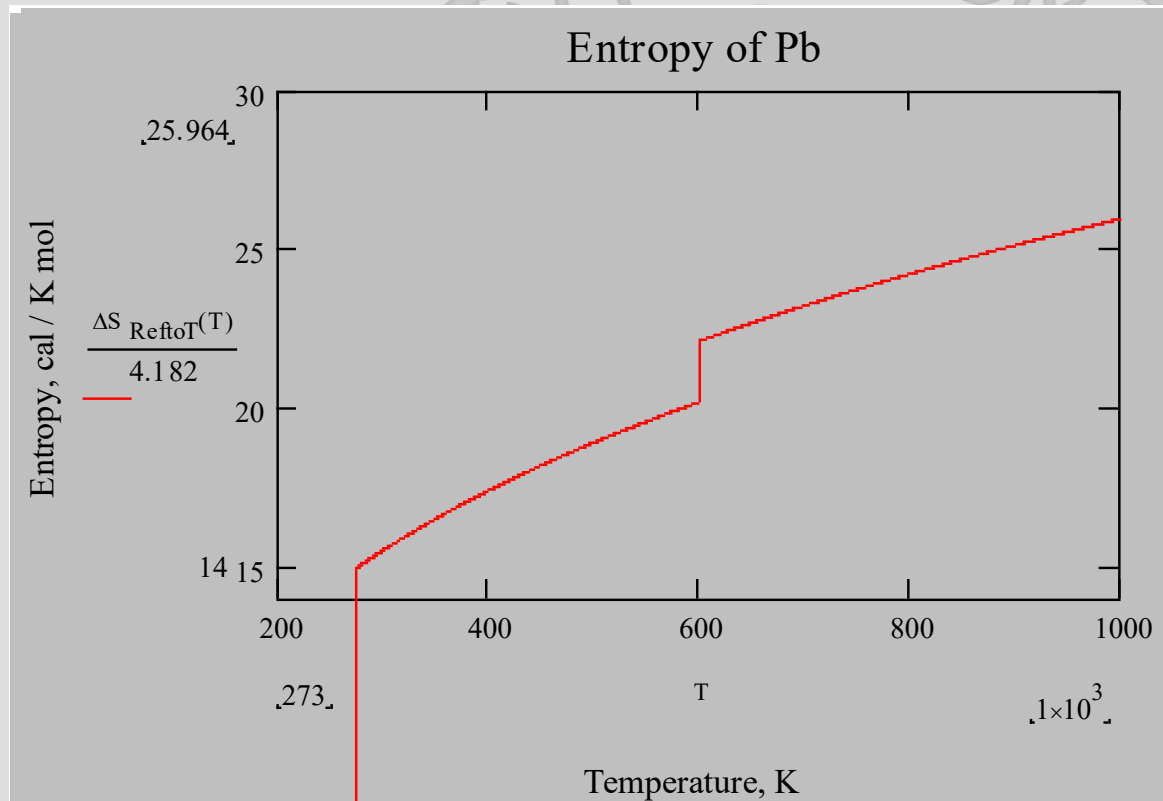
$$= a \ln \left(\frac{T_m}{T_{ref}} \right) + b (T_m - T_{ref}) + \frac{c}{2} ((T_m^2 - T_{ref}^2) - \frac{1}{2} (\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_{ref}}))$$


$$\Delta S_m = \frac{\Delta H_m}{T_m}$$

Μεταβολή Εντροπίας Pb στους 1000 K

$$\Delta S^T = \Delta S^{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_m} c_p \frac{dT}{T} + \Delta S_m + \int_{T_m}^T c_p \frac{dT}{T}$$

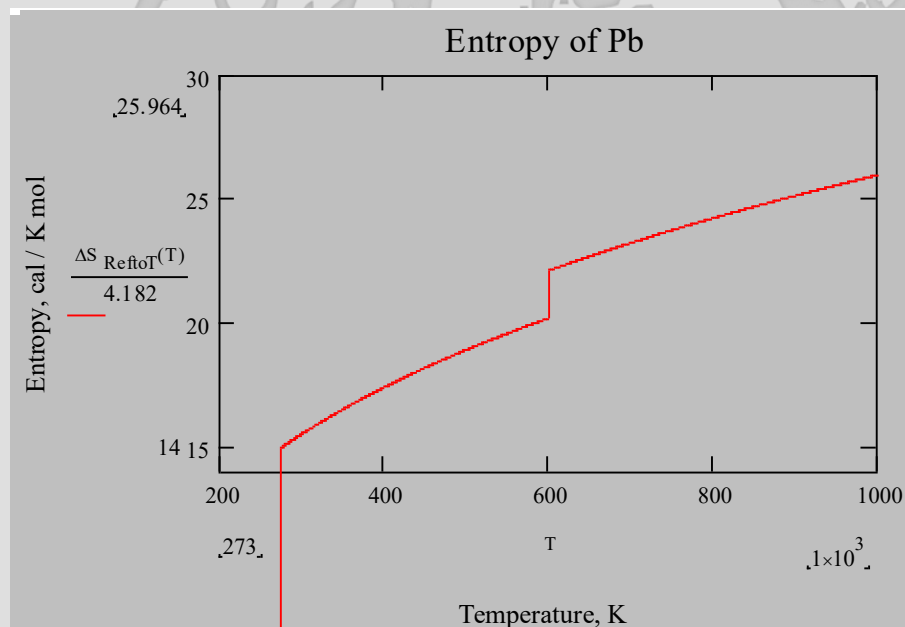
$$\Delta S_m = \frac{\Delta H_m}{T_m}$$



Μεταβολή Εντροπίας Pb στους 1000 K

Pb		Lead	
T K	Cp cal/(mol*K)	H kcal/mol	S cal/(mol*K)
273	6,31	-0,159	14,929
373	6,574	0,484	16,936
473	6,817	1,154	18,526
573	7,046	1,847	19,855
673	7,265	3,721	22,933
773	7,186	4,443	23,934
873	7,109	5,158	24,803
973	7,038	5,865	25,57
1000	7,02	6,055	25,763

Μεταβολή εντροπίας
όπως προκύπτει από
πίνακες του
προγράμματος HSC



Ελεύθερη Ενέργεια χημικής αντίδρασης

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

$$\Delta H^T = \Delta H^{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_m} c_{p(A)} dT + \Delta H_m + \int_{T_m}^T c_{p(A)} dT$$

$$\Delta S^T = \Delta S^{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_m} c_{p(A)} \frac{dT}{T} + \Delta S_m + \int_{T_m}^T c_{p(A)} \frac{dT}{T}$$

$$\Delta G^{\circ}_{rxn} = \sum n \Delta G^{\circ}_f (\text{products}) - \sum n \Delta G^{\circ}_f (\text{reactants})$$

Το δεύτερο θερμοδυναμικό αξίωμα

Σε μια αυθόρμητη διεργασία η συνολική εντροπία συστήματος (ΔS_{sys}) και περιβάλλοντος (ΔS_{sur}) αυξάνει, ενώ σε κατάσταση ισορροπίας παραμένει σταθερή:

αυθόρμητη: $\Delta S_{\text{total}} = \Delta S_{\text{sys}} + \Delta S_{\text{sur}} > 0$

σταθερή: $\Delta S_{\text{total}} = \Delta S_{\text{sys}} + \Delta S_{\text{sur}} = 0$

Για τον υπολογισμό του ΔS_{total} πρέπει να γνωρίζουμε το ΔS_{sur} και το ΔS_{sys}

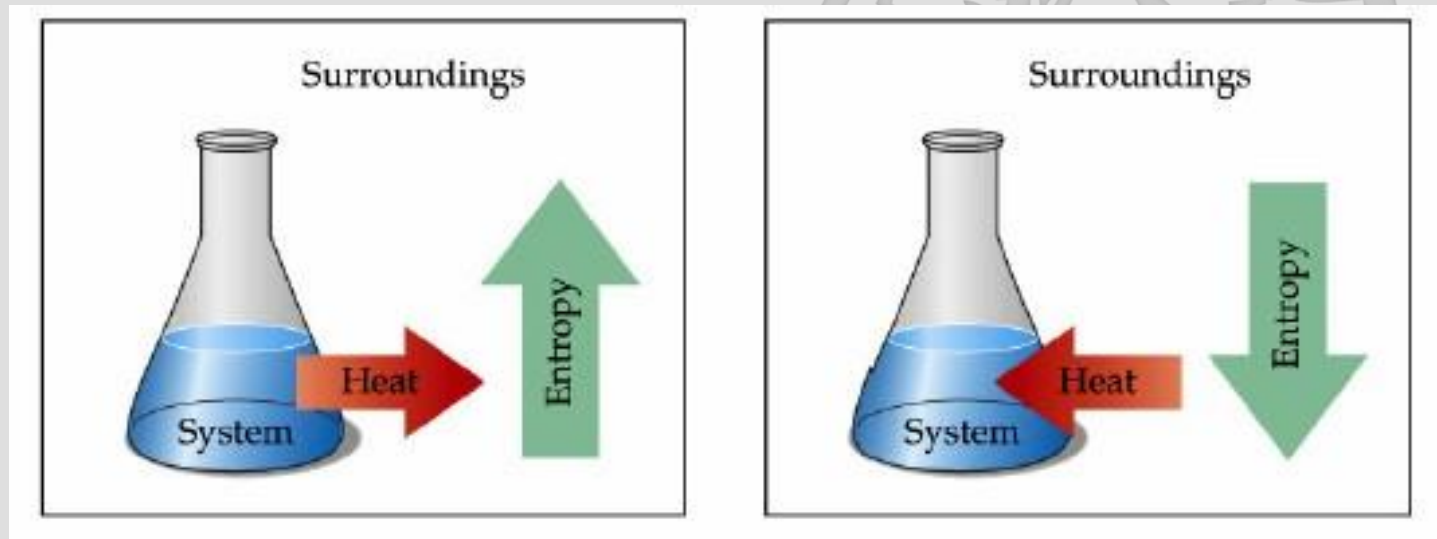
Το δεύτερο θερμοδυναμικό αξίωμα

Η μεταβολή της εντροπίας του περιβάλλοντος (ΔS_{sur}) υπολογίζεται από την σχέση:

$$\Delta S_{\text{sur}} = - \Delta H_{\text{sys}} / T$$

Εξώθερμη $\rightarrow$ αύξηση ΔS_{sur}

Ενδόθερμη $\rightarrow$ μείωση ΔS_{sur}



Το δεύτερο θερμοδυναμικό αξίωμα

Για να είναι μια διεργασία αυθόρμητη πρέπει:

$$\Delta S_{\text{total}} = \Delta S_{\text{sur}} + \Delta S_{\text{sys}} > 0$$

$$T\Delta S_{\text{total}} = T\Delta S_{\text{sur}} + T\Delta S_{\text{sys}} > 0$$

$$T\Delta S_{\text{total}} = -\Delta H_{\text{sys}} + T\Delta S_{\text{sys}} > 0$$

$$T\Delta S_{\text{total}} = \Delta H_{\text{sys}} - T\Delta S_{\text{sys}} < 0$$

$$\Delta S_{\text{sur}} = -\Delta H_{\text{sys}} / T$$

Ελεύθερη ενέργεια

Επομένως για να είναι μια διεργασία αυθόρμητη πρέπει:

$$\Delta S_{\text{total}} = \Delta H_{\text{sys}} - T \Delta S_{\text{sys}} < 0$$

Το μέγεθος ΔS_{total} ονομάζεται:

μεταβολή της Ελεύθερης Ενέργειας και συμβολίζεται με ΔG

Ελεύθερη Ενέργεια - εξέλιξη χημικών αντιδράσεων



Αντιδρώντα

Προϊόντα

Αριστερά

Δεξιά

$$\Delta G = \Delta H_{\text{sys}} - T\Delta S_{\text{sys}}$$

- Αν $\Delta G < 0$ τότε η χημική αντίδραση είναι **αυθόρμητη προς τα δεξιά**
Αν $\Delta G > 0$ τότε η χημική αντίδραση είναι **αυθόρμητη προς τα αριστερά**
Αν $\Delta G = 0$ τότε η χημική αντίδραση είναι σε **ισορροπία**

Πρότυπη Ελεύθερη Ενέργεια χημικής αντίδρασης

Πρότυπη ελεύθερη ενέργεια μιας χημικής αντίδρασης ΔG° , είναι η ελεύθερη ενέργεια της χημικής αντίδρασης σε πρότυπες συνθήκες και υπολογίζεται από την πρότυπη ελεύθερη ενέργεια των αντιδρώντων και των προϊόντων από τη σχέση:

$$\Delta G^\circ_R = \sum n \Delta G^\circ_f (\text{products}) - \sum n \Delta G^\circ_f (\text{reactants})$$

Πρότυπη Ελεύθερη Ενέργεια ενώσεων

Substance	Formula	ΔG°_f (kJ/mol)
<i>Gases</i>		
Acetylene	C_2H_2	209.2
Ammonia	NH_3	-16.5
Carbon dioxide	CO_2	-394.4
Carbon monoxide	CO	-137.2
Ethylene	C_2H_4	68.1
Hydrogen	H_2	0
Methane	CH_4	-50.8
Nitrogen	N_2	0
Nitrogen dioxide	NO_2	51.3
Dinitrogen tetroxide	N_2O_4	97.8
Oxygen	O_2	0

Πρότυπη Ελεύθερη Ενέργεια ενώσεων

Substance	Formula	ΔG°_f (kJ/mol)
<i>Liquids</i>		
Acetic acid	$\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$	-390
Ethanol	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	-174.9
Methanol	CH_3OH	-166.4
Water	H_2O	-237.2
<i>Solids</i>		
Calcium carbonate	CaCO_3	-1128.8
Calcium oxide	CaO	-604.0
Diamond	C	2.9
Graphite	C	0
Iron(III) oxide	Fe_2O_3	-742.2

Πρότυπη Ελεύθερη Ενέργεια χημικής αντίδρασης

Με βάση τα δεδομένα των πινάκων υπολογίστε τη μεταβολή της ελεύθερης ενέργειας της παρακάτω αντίδρασης και βρείτε αν είναι αυθόρμητη ή όχι.

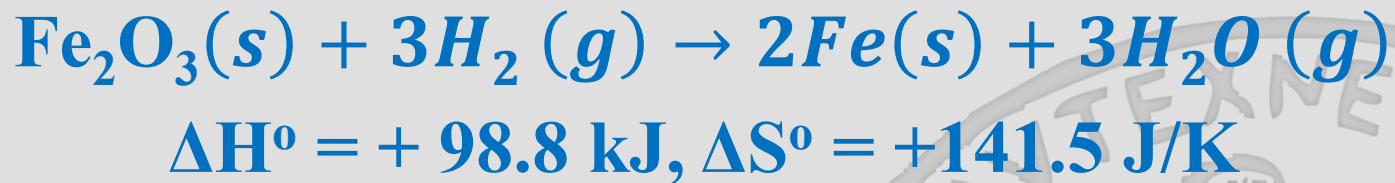


Ελεύθερη Ενέργεια και ισορροπία χημικής αντίδρασης

Η **πρότυπη ελεύθερη ενέργεια ΔG°** μας πληροφορεί αν μια χημική αντίδραση συμβαίνει αυθόρμητα προς τα δεξιά ή προς τα αριστερά, όταν τα αντιδρώντα και τα προϊόντα της χημικής αντίδρασης βρίσκονται σε πρότυπες συνθήκες.

Ελεύθερη Ενέργεια και εξέλιξη χημικών αντιδράσεων

Μεταλλικός σίδηρος μπορεί να παραχθεί με την αναγωγή του αιματίτη με υδρογόνο σύμφωνα με την αντίδραση:



Είναι η αναγωγή του αιματίτη αυθόρμητη χημική αντίδραση σε κανονικές συνθήκες;

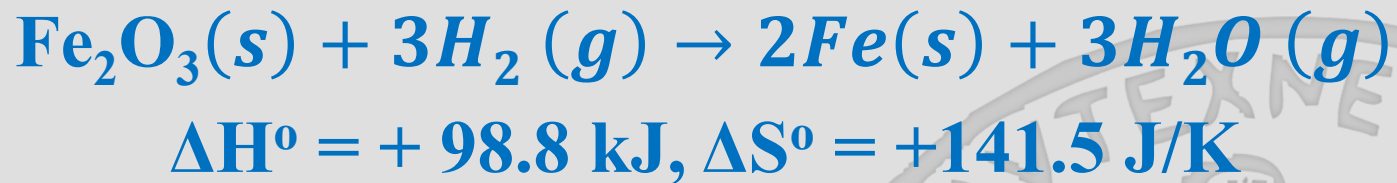
$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ = 98.9 \text{ kJ} - 298 \text{ K} \times 141.5 \text{ J/K} = 56.73 \text{ kJ} > 0$$

Συνεπώς η αναγωγή του αιματίτη δεν είναι αυθόρμητη σε κανονικές συνθήκες δηλαδή δεν μπορεί να πραγματοποιηθεί.

Σε ποια θερμοκρασία μπορεί άραγε να πραγματοποιηθεί;

Ελεύθερη Ενέργεια και εξέλιξη χημικών αντιδράσεων

Μεταλλικός σίδηρος μπορεί να παραχθεί με την αναγωγή του αιματίτη με υδρογόνο σύμφωνα με την αντίδραση:



Σε ποια θερμοκρασία άραγε μπορεί να πραγματοποιηθεί η αναγωγή του αιματίτη σε μεταλλικό σίδηρο;

$$\Delta G^T = \Delta H^T - T\Delta S^T < 0 \Rightarrow T > \Delta H^T / \Delta S^T$$

Συνεπώς για να απαντήσουμε πρέπει να μπορούμε να προσδιορίσουμε το ΔH^T και το ΔS^T

Ελεύθερη Ενέργεια χημικής αντίδρασης

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

$$\Delta H^T = \Delta H^{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_m} c_{p(A)} dT + \Delta H_m + \int_{T_m}^T c_{p(A)} dT$$

$$\Delta S^T = \Delta S^{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^{T_m} c_{p(A)} \frac{dT}{T} + \Delta S_m + \int_{T_m}^T c_{p(A)} \frac{dT}{T}$$

$$\Delta G^{\circ}_R = \sum n \Delta G^{\circ}_f (\text{products}) - \sum n \Delta G^{\circ}_f (\text{reactants})$$

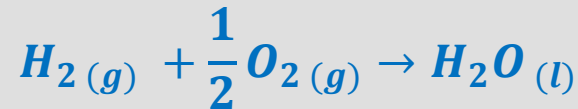
Ελεύθερη Ενέργεια χημικής αντίδρασης

$\text{Fe}_2\text{O}_3 + 3\text{H}_2(\text{g}) = 2\text{Fe} + 3\text{H}_2\text{O}$			
T K	deltaH kcal	deltaS cal/K	deltaG kcal
273	-13,075	-68,998	5,762
473	-4,897	-42,561	15,234
673	1,991	-30,748	22,684
873	10,875	-19,183	27,623
1073	20,644	-9,162	30,475
1273	30,568	-0,665	31,415
1473	39,418	5,792	30,886
1673	48,659	11,652	29,165
1873	64,132	20,309	26,093
2073	72,604	24,607	21,593
2273	80,983	28,466	16,279
2473	89,273	31,962	10,231
2673	97,477	35,152	3,515
2873	105,6	38,083	-3,813
3000	110,718	39,826	-8,761

$$\Delta G < 0$$

Συνεπώς αυτή είναι η
θερμοκρασία έναρξης της
αντίδρασης

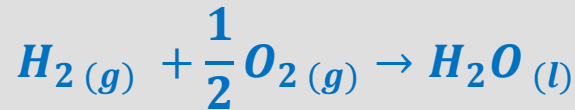
Ελεύθερη Ενέργεια αντίδρασης σχηματισμού νερού



Για τον υπολογισμό της $\Delta G_{T_{ref}}^0$ της παραπάνω χημικής αντίδρασης σε **πρότυπες συνθήκες** είναι απαραίτητο να είναι γνωστά τα ακόλουθα θερμοδυναμικά μεγέθη:

1. Ειδική θερμότητα των $\text{H}_2(\text{g})$, $\text{O}_2(\text{g})$ και $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$ συναρτήσει της θερμοκρασίας.
2. Ενθαλπίες σχηματισμού των παραπάνω συστατικών σε **πρότυπες συνθήκες αναφοράς** ($T = 298,15 \text{ K}$, $P = 1 \text{ atm}$).
3. Εντροπίες σχηματισμού των παραπάνω συστατικών σε **πρότυπες συνθήκες αναφοράς** ($T = 298,15 \text{ K}$, $P = 1 \text{ atm}$).

Ελεύθερη Ενέργεια αντίδρασης σχηματισμού νερού



1. Η ειδική θερμότητα των $H_2(g)$, $O_2(g)$ και $H_2O(l)$ συναρτήσει της θερμοκρασίας υπολογίζεται από τις παρακάτω εξισώσεις:

$$c_{pH_2} = a_{H_2} + b_{H_2} T + c_{H_2} T^2 + d_{H_2} T^{-2}$$

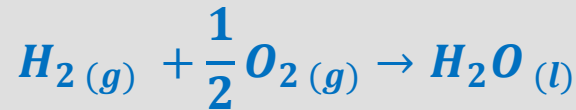
$$c_{pO_2} = a_{O_2} + b_{O_2} T + c_{O_2} T^2 + d_{O_2} T^{-2}$$

$$c_{pH_2O} = a_{H_2O} + b_{H_2O} T + c_{H_2O} T^2 + d_{H_2O} T^{-2}$$

Οι συντελεστές της ειδικής θερμότητας καθενός από τα παραπάνω συστατικά για τη θερμοκρασιακή περιοχή 273 K έως 373 K, είναι αντίστοιχα:

cal/mol.K	a	b x 10 ³	c x 10 ⁻⁵	d x 10 ⁶
c_{pH_2}	6,18	1,156	0,379	-0,089
c_{pO_2}	5,272	4,992	0,387	-1,962
c_{pH_2O}	44,666	-110,958	-4,676	131,126

Ελεύθερη Ενέργεια αντίδρασης σχηματισμού νερού



2, 3. Η ενθαλπία $\Delta H_{ref}^{\circ} (C_i)$ και η εντροπία $\Delta S_{ref}^{\circ} (C_i)$ σχηματισμού των $\text{H}_2(\text{g})$, $\text{O}_2(\text{g})$ και $\text{H}_2\text{O}(\text{l})$, σε πρότυπες συνθήκες αναφοράς ($T = 298,15 \text{ K}$, $P = 1 \text{ atm}$) είναι αντίστοιχα:

ΔH	$\Delta H^{\circ}(\text{H}_2)$	$\Delta H^{\circ}(\text{O}_2)$	$\Delta H^{\circ}(\text{H}_2\text{O})$
kJ/mole	0	0	-285,841
ΔS	$\Delta S^{\circ}(\text{H}_2)$	$\Delta S^{\circ}(\text{O}_2)$	$\Delta S^{\circ}(\text{H}_2\text{O})$
J/mole.K	130,664	205,134	69,912

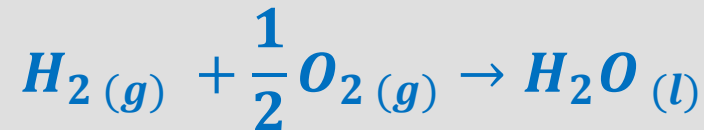
$$\Delta H_{ref}^{\circ} (R) = \Delta H_{ref}^{\circ} (\text{H}_2\text{O}) - \Delta H_{ref}^{\circ} (\text{H}_2) - \frac{1}{2} \Delta H_{ref}^{\circ} (\text{O}_2)$$

$$\Delta H_{ref}^{\circ} (R) = -285.841 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - 0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - 0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = -285.841 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta S_{ref}^{\circ} (R) = \Delta S_{ref}^{\circ} (\text{H}_2\text{O}) - \Delta S_{ref}^{\circ} (\text{H}_2) - \frac{1}{2} \Delta S_{ref}^{\circ} (\text{O}_2)$$

$$\Delta S_{ref}^{\circ} (R) = 69.912 \frac{\text{J}}{\text{mol}} - 130.664 \frac{\text{J}}{\text{mol}} - \frac{1}{2} 205.134 \frac{\text{J}}{\text{mol}} = -0.163 \text{ kJ/mol K}$$

Ελεύθερη Ενέργεια αντίδρασης σχηματισμού νερού



Επομένως η ελεύθερη ενέργεια της αντίδρασης σχηματισμού νερού σε πρότυπες συνθήκες αναφοράς είναι:

$$\Delta G_{ref}^0(R) = \Delta H_{ref}^0(R) - T\Delta S_{ref}^0(R)$$

$$\Delta G_{ref}^0(R) = -\frac{285.841 \text{ kJ}}{\text{mol}} - 298 \text{ K} \left(-0.163 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) = -237.172 \text{ kJ/mol}$$