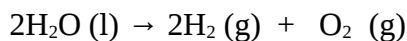


## TERMODINAMICA DELLE REAZIONI CHIMICHE

### Esercizio:

Determinare a quale temperatura la reazione



è spontanea

### Svolgimento:

La seconda legge della termodinamica afferma che l'entropia dell'universo è destinata ad aumentare, ovvero che sono spontanei tutti quei processi che producono un aumento di entropia. Viceversa, per quei processi che producono minore entropia è necessario spendere del lavoro.

La variazione di entropia dell'universo in seguito ad un processo (ad esempio una reazione chimica) è la somma di due contributi: la variazione di entropia propria del processo (sistema) e la variazione di entropia che quel processo causa nell'ambiente circostante. Quest'ultima è essenzialmente dovuta allo scambio di calore del processo con l'ambiente. Un processo che assorbe calore (una reazione endotermica) causerà una diminuzione di entropia dell'ambiente, un processo che cede calore (una reazione esotermica) causerà un aumento di entropia dell'ambiente.

La variazione di energia libera è un indicatore del fatto che un processo possa essere spontaneo o meno ed è infatti costituita da due contributi:

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

Se minore di zero, il processo è spontaneo.

La reazione in alto è un processo con aumento di entropia. Infatti aumentano il numero di moli e si passa da uno stato fisico più ordinato ad uno meno ordinato (liquido  $\rightarrow$  gas). Tuttavia è esperienza comune che l'acqua che scorre nei fiumi o che troviamo al mare non si trasformi in idrogeno e ossigeno. Il processo, alle nostre temperature, non è spontaneo e, quindi, questa reazione deve necessariamente essere endotermica. A temperatura ambiente questa reazione "ordina" l'ambiente più di quanto non "disordini" il sistema.

Calcoliamo la variazione di entalpia per questa reazione:

$$\Delta H = \sum_i \Delta H_f(\text{pro}) - \sum_i \Delta H_f(\text{reag})$$

Dalle tabelle ci ricaviamo le variazioni delle entalpie standard di formazione di reagenti e prodotti.  $\text{O}_2$  e  $\text{H}_2$  sono elementi, quindi la loro variazione di entalpia standard di formazione è zero.

$$\Delta H_f(\text{H}_2\text{O}) = -285,83 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta H = -2 \text{ mol}(-285,83) \text{ kJ mol}^{-1} = 571,66 \text{ kJ}$$

Come anticipato prima, il processo è endotermico. Ora calcoliamo la variazione di entropia:

$$\Delta S = \sum_i S_f(\text{pro}) - \sum_i S_f(\text{reag})$$

$$S_f(H_2) = 130,684 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$S_f(O_2) = 205,138 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$S_f(H_2O) = 188,83 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$\Delta S = 2(130,68) + 205,138 - 2(188,83) \text{ J K}^{-1} = 88,84 \text{ J K}^{-1}$$

La variazione di entropia è, come previsto, maggiore di zero.

Calcoliamo quindi a quale temperatura la variazione di energia libera è zero. Da quella temperatura in poi, la reazione sarà spontanea.

$$\Delta G = 571660 \text{ J} - T(88,84 \text{ J K}^{-1}) = 0$$

$$T = \frac{571660}{88,84} \text{ K} = 6435 \text{ K}$$