

# T4B - Termoquímica

Martin J. Klöckner - [mklockner@fi.uba.ar](mailto:mklockner@fi.uba.ar) - [kloeckner.com.ar](http://kloeckner.com.ar)

Química (63.01/83.01) - 2C2022 - FIUBA

<b>Termoquímica</b>	<b>1</b>
Entalpía de una reacción	1
Entalpía estándar de formación	1
Calculo de entalpía de reacción estándar	2
Ejemplo	2
Ecuación termoquímica	2
Ley de Lavoiser y Laplace	3
Ley de Hess	3
Reacciones a volumen constante	3
Reacciones a presión constante	3
Combustión	3
Entalpía estándar de combustión	3
Calculo de la entalpía estándar de Combustión	3
Entalpía de reacción estándar partiendo de la entalpía estándar de combustión	3
Combustión completa	4
Combustión incompleta	4
Poder calorífico	4
Poder calorífico inferior (PCI)	4
Poder calorífico superior (PCS)	4
Mezcla de combustibles	5
Balance de materia	5
Balance de energía	5
Ejemplo	5
Calor útil y rendimiento de una reacción de combustión	6
Calor útil	6
Rendimiento	7
Calorimetría	7
Calorímetro a presión constante	7
Calorímetro a volumen constante	7
Segundo principio de la termodinámica aplicada a reacciones químicas	8
Entropía de reacción estándar	8
Dependencia con la temperatura y la presión	8
Ejemplo	9
Entropía del entorno	9
Energía libre de Gibbs	10
La energía libre como criterio de espontaneidad	10
Energía libre de Gibbs de reacción	10
Energía de Gibbs estándar de reacción	10
Energía de Gibbs estándar de formación	10
Ejemplo	11

# Termoquímica

La termoquímica es la rama de la termodinámica que estudia la energía puesta en juego en un cambio químico o reacción química.

Una reacción química es todo proceso donde se rompen y/o forman enlaces químicos.

Toda reacción química obedece a dos leyes fundamentales.

- La ley de conservación de la masa (ley de Lavoisier): durante una reacción química no se puede generar ni destruir materia.
- La ley de la conservación de la energía (primer principio de la termodinámica): la energía no se puede crear ni destruir, aunque si se puede transferir o transformar.

## Entalpía de una reacción

La entalpía de reacción ( $\Delta H$  también simbolizado con  $\Delta H_r$ ) es la cantidad de **calor** liberado o absorbido en una reacción química cuando los reactivos a una determinada **temperatura y presión** se convierten en productos a la misma temperatura y presión.

La variación de entalpía de una reacción química se expresa como:

$$\Delta H = H_{\text{productos}} - H_{\text{reactivos}}$$

La entalpía de reacción es sólo la involucrada en la ruptura de enlaces químicos y en la formación de nuevos enlaces.

Como la entalpía es la cantidad de calor liberado o absorbido en una reacción química, podemos determinar si la reacción es exotérmica o endotérmica de acuerdo a la variación de la entalpía en durante la misma. Si la entalpía es mayor a cero ( $\Delta H > 0$ ) entonces la reacción absorbió calor durante la reacción, por lo que es **endotérmica**, en cambio si la entalpía es menor a cero ( $\Delta H < 0$ ) entonces la reacción liberó calor durante la reacción, por lo que es **exotérmica**.

## Entalpía estándar de formación

La entalpía molar estándar de formación de un compuesto es la entalpía estándar de la reacción para la formación de un mol de dicho compuesto a partir de sus elementos en su forma más estables en el estado estándar (1 bar) a temperatura especificada.

La entalpía de formación estándar de un elemento en su forma más estable es cero, y para un elemento que **no** está en su forma más estable la entalpía de formación estándar es distinta de **cero**.

La entalpía de formación estándar para varias sustancias se ha medido, a modo de ejemplo se ilustran algunos valores en la siguiente tabla

sustancia	entalpia de formación estandar
$H_2O_{(g)}$	-241,8
$H_2O_{(l)}$	-285.8
$CH_{4(g)}$	-74.81

Entalpía estándar de formación a 298K y 1 bar en unidades de  $\frac{kJ}{mol}$

## Calculo de entalpía de reacción estándar

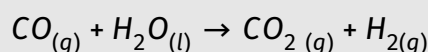
La entalpía de reacción estándar de una reacción química puede ser calculada a partir de las entalpías estándares de formación de las sustancias que intervienen en la reacción:

$$\Delta H_r^{\circ} = \sum_{\text{productos}} \Delta H^{\circ} - \sum_{\text{reactivos}} \Delta H^{\circ}$$

Esto es la suma de la entalpía estándar de formación de cada uno de los **productos**, menos la suma de la entalpía estándar de formación de cada uno de los **reactivos**.

### Ejemplo

Calcular la variación de entalpía que corresponde a la siguiente reacción:



Sabiendo que  $\Delta H_f^{\circ}(CO_2) = -393,5 \text{ kJ/mol}$ ;  $\Delta H_f^{\circ}(H_2O) = -285,6 \text{ kJ/mol}$ ;  $\Delta H_f^{\circ}(CO) = -110,5 \text{ kJ/mol}$

Por la formula del calculo de la entalpía mencionada previamente:

$$\Delta H_r^{\circ} = [\Delta H_f^{\circ}(CO_{2(g)}) + \Delta H_f^{\circ}(H_{2(g)})] - [\Delta H_f^{\circ}(CO_{(g)}) + \Delta H_f^{\circ}(H_2O_{(g)})]$$

Como el  $H_{2(g)}$  está en su forma mas estable entonces su entalpía de formación vale cero:

$$\Delta H_f^{\circ}(H_{2(g)}) = 0$$

Reemplazando con los valores de entalpías estándar de las sustancias:

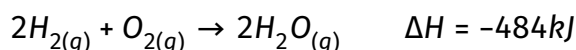
$$\Delta H_r^{\circ} = [-393.5 \text{ kJ/mol} + 0 \text{ kJ/mol}] - [-110.5 \text{ kJ/mol} - 285.6 \text{ kJ/mol}]$$

$$\Delta H_r^{\circ} = -393.5 \text{ kJ/mol} - (-396.1 \text{ kJ/mol})$$

$$\therefore \Delta H_r^{\circ} = 2.6 \text{ kJ/mol}$$

## Ecuación termoquímica

Una ecuación química balanceada, con su valor de  $\Delta H$  y especificando los estados físicos de todas las especies se denomina ecuación termoquímica.



El valor de  $\Delta H$  corresponde a como ha sido balanceada la ecuación. Es decir: "Se liberan 484kJ cuando reaccionan 2 moles de  $H_{2(g)}$  con 1 mol de  $O_{2(g)}$  para formar 2 moles de  $H_2O_{(l)}$ "

## Ley de Lavoisier y Laplace

Una reacción que es exotérmica en una dirección es endotérmica en la dirección opuesta

## Ley de Hess

Si una reacción se efectúa en una serie de pasos,  $\Delta H$  para la reacción global será igual a la suma de los cambios de entalpía de los pasos individuales

## Reacciones a volumen constante

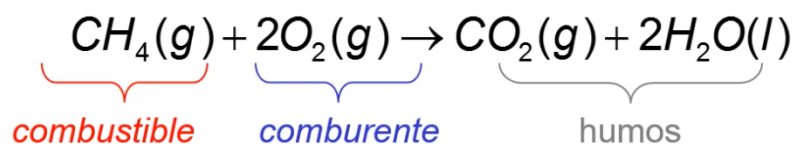
## Reacciones a presión constante

## Combustión

La reacción de combustión, es una reacción química exotérmica de una sustancia (o una mezcla de ellas) denominada **combustible**, con el **oxígeno**.

La combustión puede llevarse a cabo directamente con el oxígeno o con una mezcla de sustancia que contengan oxígeno. Esta mezcla de sustancias que contiene oxígeno se denomina **comburente**. El aire es el comburente más usual.

A los productos de una reacción de combustión se los denomina, en forma genérica, **humos**.

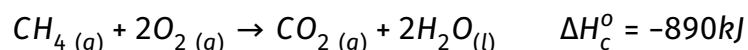


reacción de combustión del metano

## Entalpía estándar de combustión

La entalpía estándar de combustión es la entalpía estándar de reacción para la combustión de un mol de sustancia que se quema (que reacciona con el oxígeno) en una reacción de combustión completa en condiciones estándar.

Por ejemplo para la combustión del metano



Hay que aclarar que a diferencia de la entalpía de reacción estándar de formación de una sustancia, la entalpía estándar de combustión **no es cero** para sustancias en su forma más estable.

## Calculo de la entalpía estándar de Combustión

## Entalpía de reacción estándar partiendo de la entalpía estándar de combustión

## Combustión completa

En la combustión completa las sustancias combustibles se queman hasta el máximo grado posible de oxidación. De un hidrocarburo que solo contiene carbono, hidrógeno y oxígeno, se obtiene agua y dióxido de carbono.

## Combustión incompleta

En la combustión incompleta, las sustancias combustibles no se oxidan completamente, se forman sustancias que todavía pueden seguir oxidándose, por ejemplo, monóxido de carbono. El monóxido de carbono puede reaccionar con el oxígeno para dar dióxido de carbono y así la combustión se completa.

## Poder calorífico

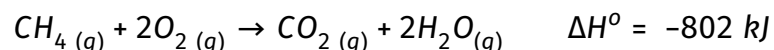
El poder calorífico de un combustible es la cantidad de energía desprendida de la reacción de combustión completa, referida a la unidad de volumen, capacidad o masa de combustible dependiendo del tipo de combustible.

Las unidades del poder calorífico dependen del estado de agregación del combustible, por ejemplo:

- Para combustibles gaseosos:  $k\cdot cal/Nm^3$  (volumen)
- Para combustibles líquidos:  $k\cdot cal/litro$  (capacidad)
- Para combustibles sólidos:  $k\cdot cal/kg$  (masa)

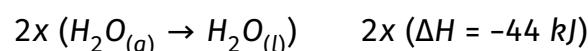
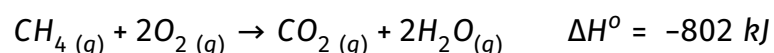
## Poder calorífico inferior (PCI)

Se denomina poder calorífico inferior cuando el agua resultante de la combustión se supone en estado de vapor con los demás productos de la combustión. Por ejemplo en la siguiente reacción de combustión la entalpía de la reacción sería el poder calorífico inferior de la misma ya que el agua resultante está en estado gaseoso.



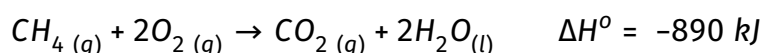
## Poder calorífico superior (PCS)

Se denomina así cuando el agua resultante de la combustión se supone líquida (condensada) en los productos de una reacción de combustión. De la reacción anterior se puede deducir fácilmente cual va a ser el poder calorífico superior ya que hay que agregar el calor necesario para condensar el agua:



La reacción de condensación del agua se multiplica por dos ya que tenemos dos moles de agua generados durante la combustión.

Finalmente luego de sumar la reacción de condensación del agua, el poder calorífico superior de un mol de metano resulta:



## Mezcla de combustibles

En general los combustibles son mezclas de sustancias combustibles, por ejemplo el gas natural es mezcla de metano y etano o las naftas, que son mezclas de hidrocarburos.

Cuando se quiere calcular el calor proporcionado por la combustión de una mezcla, hay que considerar el calor de combustión de cada sustancia combustible por separado, teniendo en cuenta los moles de cada una que reaccionan. **No se puede sumar las ecuaciones termoquímicas directamente** ya hay que tener en cuenta la proporción de cada combustible y el calor que aporta, en ese caso hay que hacer un balance de materia y un balance de energía.

### Balance de materia

Para realizar un balance de materia hay que sumar el número de moles de todos los combustibles presentes en la mezcla:

$$n_{total} = \sum n_{combustible}$$

### Balance de energía

Para realizar un balance de energía hay que sumar el producto de cada combustible presente en la mezcla por su entalpía estándar de combustión:

$$Q_{total} = \sum_i n_i \cdot \Delta H_i^\circ$$

Donde  $i$  es cada uno de los combustibles presentes en la mezcla.

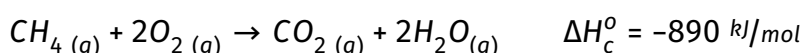
## Ejemplo

Determinar el poder calorífica superior de  $1 \text{ N m}^3$  <sup>[1]</sup> de gas natural (82%v/v metano, 18%v/v etano) sabiendo que a 298K las entalpías estándar de combustión son:

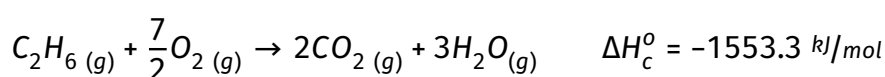
$$\Delta H_c(CH_4(g)) = -890 \text{ kJ/mol} \text{ y } \Delta H_c(C_2H_6(g)) = -1553.3 \text{ kJ/mol}$$

<sup>[1]</sup> Normal por metro cubico o normo metro cubico: es una unidad de medida de cantidad de gas que corresponde al contenido de un volumen de un metro cúbico, para un gas en condiciones normalizadas de presión y temperatura

Entonces para el metano la ecuación termoquímica:



Y para el etano:



Como el combustible es gaseoso, se puede considerar al gas natural como un gas ideal y se puede utilizar de los gases ideales para hallar el número de moles totales de gas natural que se encuentran en el volumen dado. El volumen dado está expresado en unidades de normal metro cúbico ( $Nm^3$ ), lo cual equivale a 1000 litros medidos a 1 atm y 273 K.

Utilizando la ecuación de gases ideales:

$$n_{\text{gas natural}} = \frac{P \cdot V}{R \cdot T} = \frac{1 \text{ atm} \cdot 1000 \text{ l}}{0.082 \cdot \frac{\text{l} \cdot \text{atm}}{\text{K mol} \cdot 273 \text{ K}}} = 44.68 \text{ moles}$$

Realizando el balance de materia:

$$n_{\text{gas natural}} = n_{\text{CH}_4} + n_{\text{C}_2\text{H}_6}$$

Entonces como %v/v para un gas ideal es igual que % moles, puedo calcular los moles de cada componente:

$$n_{\text{CH}_4} = 0,82 \cdot n_{\text{gas natural}} = 36,63 \text{ moles}$$

$$n_{\text{C}_2\text{H}_6} = 0,18 \cdot n_{\text{gas natural}} = 8,04 \text{ moles}$$

Ahora en el caso del balance de energía:

$$Q_{\text{total}} = n_{\text{C}_2\text{H}_6} \cdot \Delta H_{\text{C}_2\text{H}_6}^{\circ} + n_{\text{CH}_4} \cdot \Delta H_{\text{CH}_4}^{\circ}$$

Entonces sabiendo los números de moles de cada combustible que participa en la reacción y las entropías de combustión estándar de cada combustible:

$$Q_{\text{total}} = 36,63 \text{ mol} \cdot (-890 \text{ kJ/mol}) + 8,04 \text{ mol} \cdot (-1553,3 \text{ kJ/mol})$$

$$\therefore \boxed{Q_{\text{total}} = -45089,23 \text{ kJ}}$$

Es decir el poder calorífico superior del gas natural en este caso será de  $45089,23 \text{ kJ}/Nm^3$

## Calor útil y rendimiento de una reacción de combustión

Cuando ocurre una reacción de combustión ésta libera una cierta cantidad de calor, pero cuando ese calor es utilizado una parte va a ser realmente utilizado y otra parte de ese calor que se genera durante la combustión se va a perder, ya que va a ser utilizado por ejemplo para calentar el medio en el que se encuentra o los humos.

### Calor útil

$$Q_{\text{combustión}} = Q_{\text{útil}} + Q_{\text{perdidas}}$$

## Rendimiento

El rendimiento es una unidad porcentual que nos indica que porcentaje del calor útil va a ser realmente utilizado para la aplicación que le queremos dar.

$$n_{\%} = \frac{Q_{\text{útil}}}{Q_{\text{combustión}}} \cdot 100$$

## Calorimetría

El principio “cero” de la termodinámica dice que dos o más cuerpos en contacto, aislados, que se encuentran a distinta temperatura pasados un tiempo, alcanzan el equilibrio térmico (misma temperatura). El calor fluye desde el cuerpo caliente al cuerpo frío.

La **calorimetría** se refiere a la medición de flujo de calor en un sistema. Comprende la medición del flujo de calor producido en los procesos físicos y químicos.

El equipo que se emplea en un laboratorio para medir el calor intercambiado se llama calorímetro. El calorímetro posee un recipiente adiabático (que no permite la entrada ni salida de calor) en donde se determina el calor absorbido o desprendido durante la reacción o el proceso físico.

Se puede determinar la magnitud del flujo de calor al medir la magnitud del cambio de la temperatura de los cuerpos entre los que se produce el flujo de calor.

Existen varias técnicas y equipos empleados en calorimetría, dependiendo del proceso que se estudia. Hay dos clases de calorímetro que han sido diseñados para situaciones diferentes dependiendo de la reacción.

### Calorímetro a presión constante

Mide el calor a presión constante, por lo tanto determina directamente la variación de la entalpía.

$$Q_p = \Delta H$$

En las determinaciones de calor a presión constante, se trabaja con dispositivos que no están selladas y por lo tanto las mediciones se efectúan en condiciones de presión atmosférica constante y se considera que no hay pérdida de calor hacia el exterior ya que poseen paredes adiabáticas.

En el caso de muchas reacciones como las que ocurren en solución la presión es constante e igual a la atmosférica.

Por lo general se utilizan para determinar los cambios de calor en:

- Reacciones de neutralización ácido-base
- Calores de disolución.
- Calores de dilución.
- Determinación de calores específicos de sólidos.

### Calorímetro a volumen constante

Llamado también bomba calorimétrica, mide el calor a volumen constante, por lo tanto determina directamente la variación de la energía interna.



$$Q_v = \Delta U$$

Una de las reacciones mas importantes que se estudian empleando esta calorimetría son las reacciones de combustion.

La sustancia que queremos estudiar se coloca en un recipiente cerrado herméticamente (bomba calorimétrica) que soporta altas presiones. La bomba cuenta con una válvula de entrada de oxígeno y contactos eléctricos para iniciar la combustion. Se coloca oxígeno a presión en exceso. La bomba se coloca dentro de un recipiente adiabático y se llena con agua medida con exactitud. Se inicia la reacción haciendo circular corriente por el conductor eléctrico. Cuando el conductor se calienta lo suficiente la muestra se enciende. Las paredes de la bomba son rígidas y diatérmicas, por lo que permiten el intercambio de calor con el agua. El calor liberado en la combustion es absorbido por el agua del calorímetro y ésta aumenta su temperatura.

## Segundo principio de la termodinámica aplicada a reacciones químicas

La entropía de reacción del sistema cambia a medida que los reactivos se transforman en productos.

### Entropía de reacción estándar

La entropía estándar de reacción ( $\Delta S_r^0$ ) es la diferencia entre las entropías molares estándar de los productos y de los reactivos teniendo en cuenta sus coeficientes estequiométricos. Se define entonces como:

$$\Delta S_r^0 = \sum_{\text{productos}} \nu S_m^0 - \sum_{\text{reactivos}} \nu S_m^0$$

Siendo  $\nu$  los coeficientes estequiométricos y  $S_m^0$  las entropías molares de las sustancias.

Por lo que para calcular el cambio de entropía que acompaña a una reacción es necesario conocer las entropías molares de todas las sustancias que participan.

### Dependencia con la temperatura y la presión

Un **aumento** de la **temperatura**, aumenta la entropía. La energía cinética aumenta con la temperatura lo cual hace menos efectiva las fuerzas que unen a las moléculas dándoles mayor libertad de movimiento y por lo tanto desordenando al sistema.

Una **disminución** de la presión **aumenta** la entropía. Si disminuimos la presión, es como si confináramos a las moléculas en un mayor volumen. Si disponen de un volumen mayor, disminuye la efectividad de las fuerzas intermoleculares y aumenta el desorden y por lo tanto la entropía.

## Ejemplo

Calcular la entropía estándar de reacción de la siguiente reacción a 25°:



Datos:  $S_m^{\circ}(N_{2(g)}) = 191,6 \text{ J/K}\cdot\text{mol}$ ;  $S_m^{\circ}(H_{2(g)}) = 130,7 \text{ J/K}\cdot\text{mol}$ ;  $S_m^{\circ}(NH_{3(g)}) = 192,4 \text{ J/K}\cdot\text{mol}$

Como la ecuación está bien balanceada y sabiendo las entropías molares estándar de reacción de las sustancias en los reactivos y productos podemos utilizar la siguiente ecuación para determinar la entropía estándar de reacción:

$$\Delta S_r^{\circ} = \sum_{\text{productos}} \nu S_m^{\circ} - \sum_{\text{reactivos}} \nu S_m^{\circ}$$

Siendo  $\nu$  los coeficientes estequiométricos y  $S_m^{\circ}$  las entropías molares de las sustancias.

Aplicando la ecuación previa a nuestra ecuación tenemos:

$$\Delta S_r^{\circ} = [2 \cdot \Delta S_m^{\circ}(NH_{3(g)})] - [1 \cdot S_m^{\circ}(N_{2(g)}) + 3 \cdot S_m^{\circ}(H_{2(g)})]$$

Reemplazando con los datos de las entropías molares:

$$\Delta S_r^{\circ} = [2 \cdot 192,4 \text{ J/K}\cdot\text{mol}] - [1 \cdot 191,6 \text{ J/K}\cdot\text{mol} + 3 \cdot 130,7 \text{ J/K}\cdot\text{mol}]$$

$$\therefore \Delta S_r^{\circ} = -198,9 \text{ J/K}\cdot\text{mol}$$

Como la entropía resultante es negativa, nos indica que el producto se encuentra menos desordenado que los reactivos, como era de esperar porque hay una disminución de los moles gaseosos (en los reactivos 4 moles gaseosos y en los productos solo 2).

## Entropía del entorno

La espontaneidad de una reacción no solo depende de la entropía del sistema sino también de la entropía del entorno, por lo que es necesario saber la variación de la entropía del entorno para determinar la espontaneidad de la reacción.

$$\Delta S_{\text{universo}} = \Delta S_{\text{reacción}} + \Delta S_{\text{entorno}}$$

Por lo que:

$$\Delta S_{\text{entorno}} = -\frac{Q_{\text{reacción}}}{T_{\text{entorno}}}$$

A presión y temperatura constante:

$$\Delta S_{\text{entorno}} = -\frac{\Delta H_{\text{reacción}}}{T}$$

Entonces la entropía del universo nos queda expresada de la siguiente forma:

$$\Delta S_{\text{universo}} = \Delta S_{\text{reacción}} + \left( -\frac{\Delta H_{\text{reacción}}}{T} \right)$$

Esta expresión donde el cambio de entropía total únicamente depende del sistema, solo es válida a presión y temperatura constante, esta expresión o función termodinámica se conoce como la Energía libre de Gibbs.

## Energía libre de Gibbs

Lo importante de la energía libre es que siempre que la presión y la temperatura sean constantes, podemos determinar la espontaneidad de un proceso solamente en términos de las propiedades termodinámicas del sistema.

El cambio de la energía libre es una medida del cambio de la entropía total de un sistema y su entorno a temperatura y presión constante. Los procesos espontáneos a temperatura y presión constantes están acompañados por una **disminución de la energía libre**.

### La energía libre como criterio de espontaneidad

- Reacción espontánea:  $\Delta G_r < 0$
- Reacción en equilibrio:  $\Delta G_r = 0$
- Reacción no espontánea:  $\Delta G_r > 0$

### Energía libre de Gibbs de reacción

La energía libre de reacción es la diferencia entre las energías libres molares de los productos menos la de los reactivos teniendo en cuenta sus coeficientes estequiométricos.

### Energía de Gibbs estándar de reacción

La energía de Gibbs estándar ( $\Delta G_r^0$ ) de reacción es la diferencia entre las energías libres molares de los productos y de los reactivos en sus estados estándares teniendo en cuenta sus coeficientes estequiométricos.

### Energía de Gibbs estándar de formación

La energía de Gibbs estándar de formación ( $\Delta G_f^0$ ) de una sustancia es la energía de Gibbs estándar de reacción para la formación de un mol de dicha sustancia a partir de sus elementos en sus forma más estable.

$$\Delta G_f^0 = \Delta H_f^0 - T \cdot \Delta S_f^0$$

Al igual que con la entalpía estándar de formación, la  $\Delta G_f^0$  de un elemento en su estado estable a esa temperatura **es cero**.

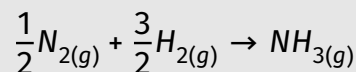
$$\Delta G_f^\circ(H_2, g) = 0 \quad \text{a } 25^\circ\text{C}$$

La energía de Gibbs estándar de formación de una sustancia a una dada temperatura, indica la estabilidad relativa de los elementos y del compuesto bajo condiciones estándar.

Si  $\Delta G_f^\circ < 0$  el compuesto tiene una energía libre mas baja que las de sus elementos puros por lo que decimos que el compuesto es termodinámicamente mas estable que sus elementos.

## Ejemplo

Calcular la energía libre de Gibbs estándar de reacción para la síntesis de amoníaco gaseoso en condiciones estándar a  $25^\circ\text{C}$



Entonces a partir de la energía libre de Gibbs de formación:

$$\Delta G_r^\circ = \Delta G_f^\circ(NH_3, g) - \left[ \frac{1}{2}\Delta G_f^\circ(N_2, g) + \frac{3}{2}\Delta G_f^\circ(H_2, g) \right]$$

$$\Delta G_r^\circ = -16,45 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - [0 + 0]$$

$$\Delta G_r^\circ = -16,45 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

De manera análoga, podemos calcular la energía libre de Gibbs estándar de reacción a partir de la entalpía de reacción y la entropía de reacción.

Calculamos la entalpía de reacción

$$\Delta H_r^\circ = \Delta H_f^\circ(NH_3, g) - \left[ \frac{1}{2}\Delta H_f^\circ(N_2, g) + \frac{3}{2}\Delta H_f^\circ(H_2, g) \right]$$

$$\Delta H_r^\circ = -46,11 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - [0 + 0]$$

$$\Delta H_r^\circ = -46,11 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

y la entropía de reacción

$$\Delta S_r^\circ = \Delta S_m^\circ(NH_3, g) - \left[ \frac{1}{2} \Delta S_m^\circ(N_2, g) + \frac{3}{2} \Delta S_m^\circ(H_2, g) \right]$$

$$\Delta S_r^\circ = 0,192245 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} - \left[ \frac{1}{2} 0,19161 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} + \frac{3}{2} 0,13068 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \right]$$

$$\Delta S_r^o = -0,09936 \frac{kJ}{mol \cdot K}$$

Por lo tanto la variación de la energía libre de Gibbs

$$\Delta G_r^o = \Delta H_o^r - T \cdot \Delta S_r^o$$

$$\Delta G_r^o = -46,11 \frac{kJ}{mol} - 298K \cdot (-0,09936 \frac{kJ}{mol \cdot K})$$

$$\Delta G_r^o = -16,5 \frac{kJ}{mol}$$

Resultando en ambos casos aproximadamente iguales.