



Estos pretenden ser unos apuntes de resumen solamente de teoría, ver ejercicios en www.fiquipedia.es
Se trata un bloque que en 1º Bachillerato LOMCE se implanta en el curso 2015-2016, cubriendo contenidos, y a veces citando criterios de evaluación y estándares de aprendizaje evaluables.
Antes LOMCE se trataba en 2º Bachillerato, por lo que hay ejercicios PAU asociados.
Son al mismo tiempo “resumen” por el nivel bachillerato, y amplios por el tema tratado.

1. Conceptos básicos en termodinámica

Se comienza definiendo conceptos; algunos se pueden obviar si se asume su significado, pero se revisan.

Se resaltan dos de ellos: los **sistemas termodinámicos** y las **variables termodinámicas**.

-**Termodinámica**: el nombre proviene de que originalmente se analizaban transformaciones recíprocas entre calor y trabajo mecánico, pero de forma general estudia la evolución de sistemas físico-químicos según los intercambios de energía de cualquier tipo entre un **sistema** y medio exterior.

-**Termoquímica**: parte de la termodinámica centrada en sistemas químicos y en intercambios de calor.

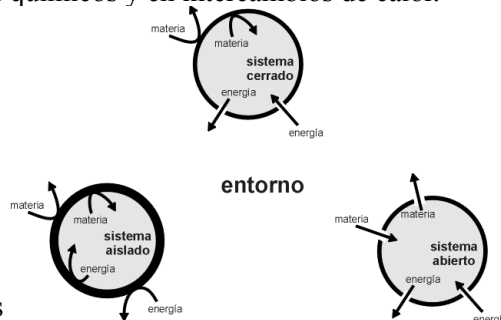
-**Sistema termodinámico** es una parte del universo analizado, separado del medio exterior (entorno/alrededores) por una frontera real o imaginaria. Pueden ser de varios tipos:

--**Sistema aislado**: frontera evita interacción con medio exterior

(ni pasa materia ni pasa energía)

--**Sistema cerrado**: no intercambia materia a través de la frontera, pero sí energía.

--**Sistema abierto**: intercambia materia y energía.



-**Variables termodinámicas**, (coordenadas termodinámicas

o variables de estado) son magnitudes que están asociadas a propiedades relacionadas con la situación del sistema, como

masa, P, V, T, densidad, composición. Las magnitudes pueden ser de dos tipos:

--Intensivas: no dependen del tamaño del sistema, tienen el mismo valor en todas sus partes.

--Extensivas: su valor es proporcional al tamaño del sistema, el valor es la suma de los valores de sus partes.

Ejemplos intensivas: P, T, ρ , temperatura de ebullición, concentración. Ejemplos extensivas: V, m, n

-**Estado** [termodinámico]: situación de un sistema en el que todas sus propiedades, **variables termodinámicas**, tienen un valor definido. Nos centramos en **sistemas en equilibrio**.

-**Cambio de estado**: transición entre dos estados, inicial y final. Definirlo implica definir esos dos estados.

-**Proceso termodinámico**: operación por la que se realiza un cambio de estado. Define sistema y frontera, cambio estado, trayectoria entre los estados, efectos en sistema externo.

-**Función de estado o variable de estado**: variable termodinámica cuyo valor depende del estado de un sistema en equilibrio, y no de cómo llegó el sistema a ese estado.

-**Ecuación de estado**: ecuación que relaciona variables de estado, por ejemplo en gases ideales $PV=nRT$.

-**Equilibrio termodinámico**: No cambian variables de estado con tiempo. Además de equilibrios térmico (T uniforme), debe haber equilibrio químico (aunque haya reacción) y mecánico (física uniforme).

-**Proceso cuasiestático**: idealización proceso real infinitamente lento/pasos, y sucesión estados “equilibrio”.

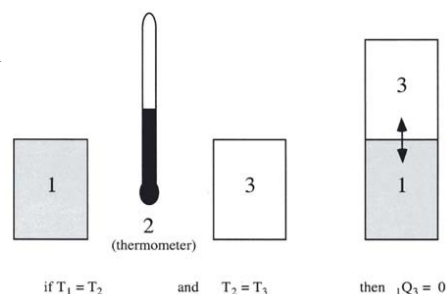
-**Proceso reversible**: proceso cuasiestático que puede invertirse y completar un ciclo (volver al estado inicial) sin cambios en sistema ni alrededores. Cuasiestático no tiene por qué ser reversible.

-**Energía interna (U)**: es la energía que contiene un sistema, asociada a todos los tipos de energías internas de las partículas: cinética (traslación, rotación, vibración) y potencial (interacción entre ellas). U es una función de estado, y en general depende entre otras cosas del tipo de sustancia, estado de agregación, P y T. En gases ideales sólo depende de T. Se puede expresar como propiedad extensiva (J) ó intensiva (kJ/mol).

>No se suele calcular su valor sino la variación de energía interna.

-**Temperatura**: el **principio cero de la termodinámica** permite definir la temperatura como la propiedad de los sistemas que están en equilibrio térmico, y permite verificar que dos sistemas no intercambian calor aunque no estén en equilibrio entre ellos. “Si los sistemas 1 y 2, 2 y 3 están en equilibrio, entonces 1 y 3 están en equilibrio” Unidades K y °C.

>Es importante tener claro que T de una idea de la energía cinética media de traslación de las partículas, pero no de U, que depende de otras cosas. Por ejemplo durante un cambio de estado T no varía pero sí lo hace U.



<https://www.educate-sustainability.eu/>



1.1 Cambios energéticos en las reacciones químicas

El intercambio de energía en un sistema se puede realizar de dos maneras:

-Calor (Q): es la energía que se intercambia entre dos cuerpos y se debe a diferencia de T. Unidades J ó cal (1 cal =4,18 J).

>Ojo al lenguaje habitual: no es algo contenido en un sistema, no es algo que se tiene, sino que se intercambia. Los cuerpos no tienen calor, sino energía interna.

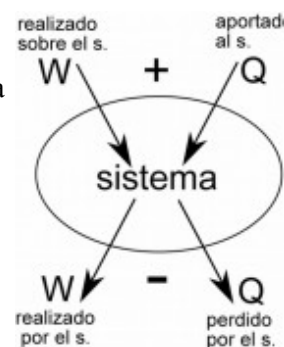
-Trabajo (W): es la energía transferida a un sistema por aplicar una fuerza sobre él que realiza desplazamiento de sus partículas.

>En termodinámica se suelen tratar sistemas fluidos, por lo que en lugar de usar fuerzas se utiliza presión. Para P constante y trabajo mecánico, se llega a la expresión $W=-P\Delta V$.

Para Q y W aquí se utiliza el convenio de signos de termodinámica de la IUPAC: Q aportado al sistema y W realizado sobre el sistema son positivos, Q perdido por el sistema y W realizado por el sistema son negativos.

>De manera general trabajo y calor NO son funciones de estado: sus valores dependen del proceso que tiene lugar, no dependen solo de los estados inicial y final, sino de cómo se llega de uno a otro.

Diferenciando el intercambio de energía en forma de Q ó W, se puede definir un **sistema adiabático** como un sistema abierto en el que se intercambia W pero no se intercambia Q.



1.4 Procesos/reacciones endotérmicas y exotérmicas

Un proceso endotérmico es aquel en el que el sistema recibe calor, y exotérmico si lo libera.

En termoquímica se habla reacciones endotérmicas o exotérmicas. El inicio de una reacción siempre necesita aporte de energía (energía de activación), aunque globalmente puede liberar energía según sea la energía final de los productos formados, además del posible trabajo si intervienen gases.

>Una combustión siempre es un proceso exotérmico.

2. Primer principio de la termodinámica.

De modo simple es la ley de conservación de la energía: la energía no se crea ni se destruye, se transforma. Matemáticamente, y según el convenio de signos IUPAC, se expresa como $\Delta U=Q+W$, que se puede leer como que la posible variación de U en un sistema es igual al Q aportado/liberado más W realizado sobre el sistema o por el sistema.

>Este primer principio establece equivalencia entre Q y W y su conversión, pero no establece ninguna limitación sobre si es posible o no la conversión / no indica bajo qué condiciones se produce o no el proceso; de ello se ocupa el segundo principio.

2.1 Transferencias de calor a volumen y a presión constante. Entalpía

Utilizando el primer principio $\Delta U=Q+W$ y la expresión de $W=-P\Delta V$, podemos plantear expresiones y ver que calor y trabajo sí son funciones de estado en ciertas situaciones.

Proceso adiabático ($Q=0$): $\Delta U=W$ (W en este caso sí es función de estado)

Proceso isócoro ($V=cte$): $W=0$, $\Delta U=Q_V$ (Q a volumen constante sí es función de estado)

Proceso isóbaro ($P=cte$): $\Delta U=Q_P - P\Delta V \rightarrow Q_P=\Delta U+P\Delta V =\Delta(U+PV)$. Se define **Entalpía** como $H=U+PV$, con lo que $Q_P=\Delta H$ (H es una función de estado ya que es combinación de funciones de estado)

Expresando $\Delta H=\Delta U+\Delta(PV)$ se puede ver H como la suma de la variación de U más el W mecánico

Como muchas reacciones ocurren a P cte, es habitual hablar de entalpías de reacción (ΔH_r).

Las entalpías de cierto tipo de reacciones tienen un nombre especial:

-Entalpía de formación (ΔH_f) de una sustancia: asociada a la formación de 1 mol de esa sustancia como producto a partir de los elementos en estado estándar.

>Por la propia definición, ΔH_f de los elementos en su estado estándar es cero.

-Entalpía de combustión (ΔH_c) de una sustancia: asociada a la combustión de 1 mol de esa sustancia como reactivo. Según el convenio IUPAC, como las combustiones son exotérmicas, siempre es negativa.

>En las reacciones asociadas a ΔH_f y ΔH_c el coeficiente estequiométrico de esa sustancia debe ser 1, y será habitual que otras sustancias tengan coeficientes fraccionarios.

>Las entalpías de reacción se expresan en kJ y no el kJ/mol salvo que quede claro a qué hace referencia mol y la cantidad, como ocurre en entalpías de formación y combustión. Este comentario está asociado a [PAU Universidad Sevilla](#) donde se indica "La unidad correcta para expresar las entalpías de reacción es el kilojulio y no el kilojulio por mol. Este error es muy frecuente y puede llevar a la pérdida de hasta 0'5 puntos en el examen." (el separador decimal arriba en el original; la posición correcta es abajo). Pero [Green Book IUPAC](#) se indica en 2.11 CHEMICAL THERMODYNAMICS para ΔH_f^θ unidades SI J mol⁻¹



>Teniendo ΔH en kJ/mol, para un reacción $Q=\Delta H \cdot n$, que estará en kJ

Entalpías “estándar” (H°) son las asociadas a ciertas condiciones de P y T. *Es confuso, porque entalpía estándar no está necesariamente asociada a condiciones estándar, sino a condiciones normales.*

STP (Standard Temperature and Pressure): *según IUPAC son 273,15 K y 10^5 Pa (antes 1982 era 1 atm), es habitual con gases. Sin embargo estado estándar de un elemento en entalpías de formación está asociado a la forma más estable de un elemento en condiciones normales, que es 1 atm y una determinada temperatura, que suele ser 298 K ó 25 °C, pero no está fijada.*

2.2 Ley de Lavoisier-Laplace y Ley de Hess

Lavoisier-Laplace: si una reacción ocurre en sentido inverso, la variación de entalpía es la misma en módulo pero de sentido opuesto. Implica que si una reacción es exotérmica en sentido directo, es endotérmica en sentido inverso y viceversa.

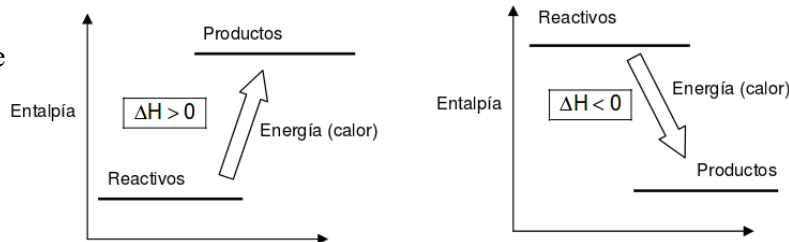
Ley de Hess: la variación de entalpía en una reacción solamente depende de la energía asociada reactivos y productos, sin que influya el número de etapas para que unos se conviertan en otros.

Uniendo ambas ideas, se llega al uso práctico de la ley de Hess: las **ecuaciones termoquímicas** (ecuaciones químicas de las que se conoce ΔH), se pueden multiplicar, sumar y restar (supone sumar la reacción invertida) como si fuesen ecuaciones algebraicas, y ΔH de la reacción resultante será igual a la misma combinación algebraica realizada con las ecuaciones.

2.3 Diagramas entálpicos

Representan la entalpía frente a un eje que indica “coordenada de reacción”, que indica el sentido en el que avanza la reacción.

Con estos diagramas se visualizan fácilmente las reacciones exo y endotérmicas.



Si $H_{\text{productos}} > H_{\text{reactivos}}$, $\Delta H > 0$, hay que FisQuiWeb.cc-by-nc-sa aportar energía, y es una reacción endotérmica.

Si $H_{\text{productos}} < H_{\text{reactivos}}$, $\Delta H < 0$, se libera energía, y es una reacción exotérmica.

>Estos diagramas se ven en más detalle en bloque de cinética, incluyendo la energía de activación.

2.4 Entalpías/energías de enlace

Cualitativamente es una medida de la estabilidad del enlace, y cuantitativamente es la energía aportada para romper (desprendida para formar) un enlace específico de un mol de sustancia en estado gaseoso obteniendo constituyentes en estado gaseoso.

En las moléculas diatómicas es la energía de disociación.

En las moléculas poliatómicas con enlaces iguales ($E_{\text{jp}} \text{ NH}_3$) es la $E_{\text{disociación}}/n^\circ \text{enlaces}$.

En moléculas con enlaces distintos, suele estar tabulada, se asume que los enlaces entre átomos iguales tienen la misma energía en cualquier molécula, y se habla de energía media de enlace.

La entalpía de enlace se mide y suele estar tabulada en kJ/mol de enlaces, a pesar de que en el Sistema Internacional la unidad de energía no es el kJ sino el Julio.

2.5 Formas de calcular la entalpía de una reacción química

2.5.1 A partir de las entalpías de formación

Utilizando la Ley de Hess se puede plantear, para cualquier reacción

$$\Delta H_r^\circ = H_{\text{productos}}^\circ - H_{\text{reactivos}}^\circ \quad \Delta H_r^\circ = \sum p_i \cdot \Delta H_f^\circ(\text{Producto}_i) - \sum r_i \cdot \Delta H_f^\circ(\text{Reactivo}_i)$$

donde p y r son los coeficientes estequiométricos de productos y reactivos en la reacción.

2.5.2 A partir de las entalpías de enlace

Como las entalpías de enlaces están tabuladas, y cualitativamente una reacción se puede plantear como la ruptura de enlaces y formación de nuevos enlaces, se puede calcular la entalpía de reacción, aproximada, como $\Delta H_r = \sum E_{\text{enlaces rotos}} - \sum E_{\text{enlaces formados}}$

3. Segundo principio de la termodinámica. Entropía

El segundo principio se centra en la **espontaneidad** de los procesos, cosa que el primer principio no trata.

El segundo principio a veces se llama el principio de la **entropía**, que es un concepto complejo.

Además de enunciados matemáticos que usan **entropía**, existen enunciados clásicos cualitativos y simples:

-Los procesos de transferencia térmica tienen una dirección espontánea. El calor nunca pasa de manera espontánea de cuerpos fríos a calientes, para que ocurra hay que aportar trabajo.



-No es posible una máquina de movimiento perpetuo, con un rendimiento del 100%, ya que parte de la energía se transforma en calor, y es imposible convertir completamente calor en trabajo.

>A veces se dice que la energía se degrada, indicando que tiende a transformarse en energía térmica que es una forma degradada de energía; es menos útil ya que no se puede aprovechar totalmente.

El segundo principio necesita definir y aclarar un nuevo concepto termodinámico, **proceso espontáneo**:

-Un proceso es espontáneo si, una vez iniciado, se produce en un sentido sin aporte de energía externa.

-Un proceso no espontáneo no implica necesariamente que sea imposible y no pueda ocurrir, pero indica que para que ocurra hay que aportar energía.

-Un proceso espontáneo no implica necesariamente que sea un proceso rápido.

De nuevo el segundo principio necesita definir y aclarar un nuevo concepto termodinámico, **entropía**.

3.1 Entropía a través de definiciones que utilizan expresiones matemáticas

Entropía (termodinámica) es una función de estado introducida por Clausius en 1865 usando una palabra griega que significa transformación ya que la asociaba al “contenido transformable” de energía, y le dio deliberadamente un nombre que se pareciera a energía. La definición se apoya en ideas de Carnot y

matemáticamente utiliza una integral $\Delta S = \int \frac{\delta Q}{T}$ Donde δQ

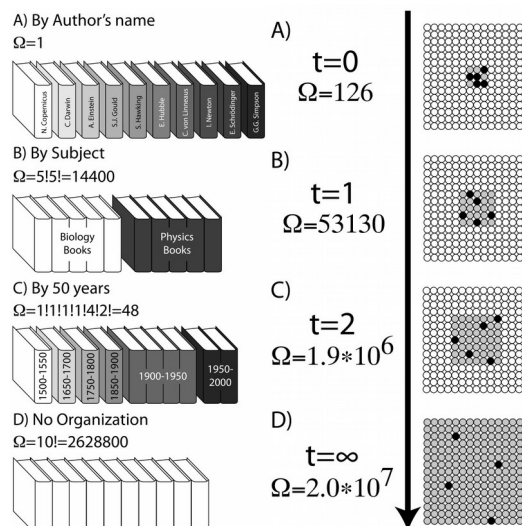
es Q aportado al sistema a temperatura T en un proceso cuasiestático.

Entropía (estadísticamente) fue introducida por Boltzman en 1877 como $S = k_B \log(\Omega)$, donde Ω es multiplicidad, el número de microestados posibles del sistema que está asociado al estado macroscópico del sistema. Un microestado es cada una de las maneras en los que la energía del sistema se puede distribuir usando los grados de libertad, es cada una de las posibles configuraciones del sistema. Aunque Schrödinger en 1944 dijo que dar una explicación de Ω en términos breves era imposible, se intentan ver “ejemplos”, microscópicos (difusión de gotas de tinte en una disolución) y macroscópicos (ovejas, ordenar 10 libros según varios criterios). Realmente son cosas distintas: el macroestado define propiedades como T, P que son macroscópicas, y los microestados asociados al mismo macroestado son indistinguibles experimentalmente entre sí.

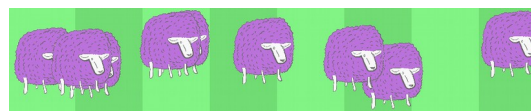
>En bachillerato no se trabaja con estas definiciones matemáticas de entropía. pero sí con la

definición matemática del segundo principio que es

$$\left(\frac{dS}{dt}\right)_{\text{sistema aislado}} \geq 0$$



www.evolution-outreach.com, cc-by



Entropy Explained, With Sheep, Aatish Bhatia, <https://aatishb.github.io/entropy/>

3.2 Entropía a través de ideas y metáforas sin usar expresiones matemáticas

La entropía es una de las magnitudes físicas más difícil de entender y se usan analogías. Esto ha ocurrido desde hace mucho tiempo, como se puede ver en esta frase de 1910 de Klein “había una sensación de que era una especie de ficción matemática, que de alguna manera era irreal y escurridiza, por lo que no es de extrañar que en algunos sectores de ingeniería que se denominó la 'cantidad fantasmal'”

Han pasado más de 100 años y la idea de entropía sigue siendo confusa; hay que ser consciente de que cuesta entenderla, y al mismo tiempo de que hay malas interpretaciones. Para añadir más dificultad, el concepto de entropía se utiliza en otras disciplinas distintas a la termodinámica, por ejemplo en teoría de la información. Se comienza por citar una serie de **ideas generales sobre entropía que no citan fórmulas**, válidas en general ya que no son aproximaciones:

-La entropía, al ser una función de estado, es algo que tiene un sistema, no como el calor que no se tiene sino que es transferencia de energía. La entropía está asociada al estado del sistema.

-La entropía no es algo abstracto; se puede medir en procesos y tiene valor y unidades. Por ejemplo en la fusión de un sólido donde T es constante, la entropía es el cociente entre el calor aportado y T.

>Las unidades habituales de entropía son $J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$

-La entropía está asociada a la energía (como se puede ver en sus unidades), pero a diferencia de la energía, la entropía no se conserva.

-La entropía de un estado indica la preferencia de la naturaleza por ese estado, por lo que en todos los procesos que se producen espontáneamente la entropía aumenta. En el primer principio no aparece el tiempo,



pero sí en el segundo principio, y a veces la variación de entropía se asocia a la llamada “flecha del tiempo”.
-La entropía está asociada a la irreversibilidad de sistemas macroscópicos, en materia condensada con muchas partículas que interactúan entre sí; a nivel microscópico y con una partícula aislada los procesos sí serían reversibles.

-Los procesos macroscópicos reversibles son una idealización; en los procesos reversibles $\Delta S=0$.

-Los procesos macroscópicos reales y espontáneos son irreversibles; en los procesos irreversibles $\Delta S>0$

-La espontaneidad se asocia a aumento de **entropía**, pero hay procesos que sí ocurren donde la entropía en un sistema disminuye, y eso no viola el 2º principio, siempre que en el entorno y globalmente aumente. Hay que pensar en que el conjunto de sistema más entorno es otro sistema que también tiene que cumplir el 2º principio. El segundo principio y la entropía aplican a sistemas aislados y que buscan el equilibrio, pero en sistemas abiertos donde hay flujo de energía y masa sí es posible que disminuya la entropía.

A continuación se presentan varias **metáforas/aproximaciones a la entropía sin uso de fórmulas**, algunas se usan en libros e incluso en pruebas de PAU, aunque según quién algunas no son totalmente correctas; varias maneras de tratar algo es una manera de intentar entenderlo, pero es importante saber cuando lo que se está usando es una analogía.

1. Entropía como medida de la dispersión de la energía. Cuando la entropía aumenta, la energía está más dispersa entre el sistema y sus alrededores. La dispersión no es solamente espacial, sino también en los “grados de libertad”, maneras en las que las partículas pueden moverse: traslación, rotación, vibración. Esto permite plantear el segundo principio como que la energía tiende a dispersarse espontáneamente si no se le impide. Un ejemplo es la expansión de un gas.

2. Entropía como medida del desorden; si el desorden es mayor, la entropía es mayor. Es una de las ideas más habituales pero no es totalmente correcta. El desorden es una metáfora de la entropía, no una definición. El concepto de orden es confuso, ya que por ejemplo hay procesos espontáneos donde aparentemente el orden aumenta, como la cristalización o una reacción endotérmica. El segundo principio según esta metáfora sería una tendencia al desorden.

>Si vemos que en una pregunta se utiliza esta aproximación (ocurre en PAU), en mi opinión debemos responder usándolo con cuidado, rectificando ligeramente para decir que “mayor desorden” supone realmente mayor dispersión de la energía ó mayor número de microestados posibles.

>Considerar la entropía como desorden no se considera correcto en algunos textos, y genera confusión sobre la relación entre entropía, información, vida y biología/evolución.

3. Entropía como cantidad de fluido que obedece “media ley de conservación”, puede ser producido pero no destruido. Es una metáfora poco conocida, se basa en ideas (Callendar 1911, Falk 1985, Pohlig 2012) según las cuales entropía es básicamente lo que se llamaba calórico, y que la idea de entropía está asociada al concepto de calor en el lenguaje común por lo piensan que con esta idea se podría enseñar de manera “que un niño pueda entender”. Por ejemplo si un cuerpo caliente se pone en contacto con otro frío en un recipiente adiabático, se produce una transferencia de entropía entre ellos hasta alcanzar el equilibrio (uno gana S y otro pierde S, aunque no en la misma cantidad, y en global la entropía aumenta)

El calórico, concepto que hacía referencia a una sustancia que además de transferirse se conservaba, es un concepto que se abandonó porque se comprobó la equivalencia trabajo calor y se estableció la conservación de la energía, pero nos quedan conceptos útiles asociados a él como el calor específico o capacidad calorífica específica, que provienen de esa idea de cantidad de ese fluido contenido en un sistema.

3.3 Tercer principio de la termodinámica

Como la entropía mide variaciones, para dar valores absolutos de entropía es necesario definir una referencia. El tercer principio de la termodinámica indica que la entropía es cero para un cristal perfecto a 0 K. En la práctica se considera nula la entropía de una sustancia pura, en estado sólido, a 0 K.

3.4 Valoración cualitativa de la variación de entropía en procesos

Se puede razonar/predecir sin fórmulas si la entropía en ciertos procesos aumenta o disminuye, apoyándose en las metáforas anteriores: si las partículas y la energía está más dispersa, la entropía es mayor:

-Realizar una disolución: $\Delta S>0$

-Cambio de estado progresivo (de sólido a líquido o de líquido a gas): $\Delta S>0$

-Reacción química en la que hay mayor número de moles gaseosos en productos que en reactivos: $\Delta S>0$

>De manera similar a entalpías, como S es una función de estado, ΔS se puede calcular a partir de entropías (no variaciones) de productos y reactivos.

>La entropía de un elemento en su estado estándar no es cero (solamente lo es a 0 K según tercer principio)

$$\Delta S_r^o = S_{\text{productos}}^o - S_{\text{reactivos}}^o \quad \Delta S_r^o = \sum p_i \cdot S^o(\text{Producto}_i) - \sum r_i \cdot S^o(\text{Reactivo}_i)$$



3.5 Factores que intervienen en la espontaneidad de una reacción química. Energía de Gibbs

Cuando se habla de “energía libre” (se cita así en libros y de hecho LOE la citaba así antes de LOMCE), se puede hacer referencia a 2 cosas:

A. Energía disponible para hacer trabajo

Un sistema tiene cierta cantidad de energía interna, y se puede visualizar esta energía no como variación según define el primer principio sino como valor absoluto si se piensa en la energía utilizada “crear” desde la nada ese sistema con ciertas variables de estado. De esa energía, debido a la limitación del segundo principio, no toda podrá convertirse en trabajo, y no toda es “libre”. En ciertas situaciones se puede restar a la energía interna la energía “no libre” y calcular la “energía libre”

B. Energía de Gibbs (G) y Energía de Helmholtz (A). Son funciones de estado, que a menudo se citan como “energía libre” de Gibbs o de Helmholtz, pero no se debe utilizar “libre”, por [recomendación IUPAC desde 1990](#). Ambas tienen unidades de energía; miden la capacidad de realizar trabajo.

Partiendo de la definición matemática de entropía, se puede llegar a la definición matemática de G

Energía de Gibbs: $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ (asociada a P y T ctes, habitual en reacciones químicas)

>La energía de Helmholtz (o función trabajo) es $\Delta A = \Delta U - T\Delta S$ (no tratada en bachillerato, asociada T=cte)

>Ojo a unidades! G y H habitualmente en $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, pero S en $\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$, y es necesaria conversión.

>Al igual que para las entalpías, ΔG_f de los elementos en su estado estándar es cero, y se puede aplicar

$$\Delta G_r^o = G_{\text{productos}}^o - G_{\text{reactivos}}^o \qquad \Delta G_r^o = \sum p_i \cdot \Delta G_f^o(\text{Producto}_i) - \sum r_i \cdot \Delta G_f^o(\text{Reactivo}_i)$$

Partiendo de la definición matemática del segundo principio según el cual la espontaneidad implica $\Delta S > 0$, se puede llegar a que, para P y T constantes, **espontaneidad implica $\Delta G < 0$** .

Según la definición de G, y teniendo en cuenta que en la expresión se utiliza T absoluta que siempre es positiva, se pueden ver distintas situaciones de espontaneidad según signos de ΔH y ΔS

Signo ΔH	Signo ΔS	Signo ΔG	Espontaneidad
+	+	$\Delta G < 0$ si T es alta	Espontánea a altas temperaturas
+	-	$\Delta G > 0$ siempre	No espontánea a cualquier temperatura
-	+	$\Delta G < 0$ siempre	Espontánea a cualquier temperatura
-	-	$\Delta G > 0$ si T es alta	Espontánea a bajas temperaturas

>Puede surgir la duda ¿pero entonces cómo se decide la espontaneidad, con S ó con G? ¿no dice el segundo principio que con S y ahora lo estamos mirando con G? Realmente lo decide S del sistema global (el universo en última instancia), y lo que ocurre por ejemplo en el último caso es que aunque $\Delta S < 0$, si la temperatura es suficientemente baja al ser la reacción exotérmica ($\Delta H < 0$), se aportará calor al entorno y globalmente el proceso sí será espontáneo. También se puede ver que aunque sea una reacción endotérmica ($\Delta H > 0$), si la entropía es positiva y la temperatura es suficientemente elevada, se recibirá calor del entorno y el proceso sí será espontáneo.

A veces se dice que “la entalpía tiende a un mínimo y la entropía a un máximo”, pero es un compromiso. Las reacciones muy exotérmicas ($\Delta H < 0$) serán espontáneas siempre que tenga poca importancia el término $T\Delta S$.

>Conocidos ΔH y ΔS , se puede calcular el valor de temperatura a partir del cual una reacción es espontánea.

4. Aplicaciones energéticas de las reacciones químicas. Consecuencias sociales y medioambientales de las reacciones químicas de combustión

Las aplicaciones energéticas de reacciones químicas son fundamentalmente exotérmicas, centrándose en la combustión de combustibles fósiles; carbón, petróleo y gas natural. El uso masivo de esta energía ha tenido una gran repercusión social, facilitando energía para el transporte, uso industrial y doméstico.

Estos combustibles presentan el problema de ser una fuente no renovable; el ritmo de consumo es mayor al de posible producción o descubrimiento de nuevos yacimientos, ya que son un recurso limitado.

La repercusión medioambiental de estos combustibles es la contaminación, que básicamente es de dos tipos:

-Lluvia ácida: es un proceso químico en la troposfera debido a combustión, básicamente de carbón, que produce óxidos de S y N. Al eliminarse con la lluvia se producen ácidos que afectan al entorno.

-Efecto invernadero y calentamiento global/cambio climático: el cambio climático es un cambio neto en la temperatura media terrestre, que se produce por el aumento en la atmósfera de ciertos gases, entre otros, el CO_2 producido por las combustiones. Estos gases de efecto invernadero dejan pasar la luz visible pero absorben la infrarroja que emite la Tierra, produciendo el efecto invernadero y el calentamiento.



El cambio climático tiene repercusiones medioambientales: aumento del nivel del mar tras deshielo casquetes polares, inundando zonas costeras lo que afectaría a personas, flora y fauna y a la agricultura.

5. Valor energético de los alimentos. Implicaciones para la salud.

Se llama valor energético o valor calórico de un alimento a la cantidad de energía que puede proporcionar en su combustión. Se mide en cal o en kcal (a veces a las kcal se las llama erróneamente Calorías (Ca))

Cada tipo de nutriente energético (glúcidos, lípidos y proteínas) tiene un valor energético promedio distinto y más o menos uniforme en ese grupo: glúcidos y proteínas unas 4 cal/g, y lípidos 9 cal/g.

El exceso de energía ingerida se acumula en forma de lípidos, en el tejido adiposo.

Hay alimentos que no tienen como tal valor energético, pero son necesarios para el organismo como las vitaminas, minerales, oligoelementos, el agua y la fibra.

Cualquier exceso o carencia de algún tipo de nutriente puede llevar asociado algún tipo de problema para la salud. A nivel energético existen unos valores de referencia de número de kcal diarias necesarias, o bien kcal/h según el tipo de actividad (reposo, ejercicio), que oscilan aproximadamente entre 1000 kcal y 5000 kcal diarias, según si es para hombre y mujer y el tipo de actividad. En ciertas situaciones, como dietas o ejercicio intenso, se controla el número de kcal ingeridas. Los organismos internacionales como OMS, UEFIC, FAO da unos valores orientativos de consumo diario de calorías.