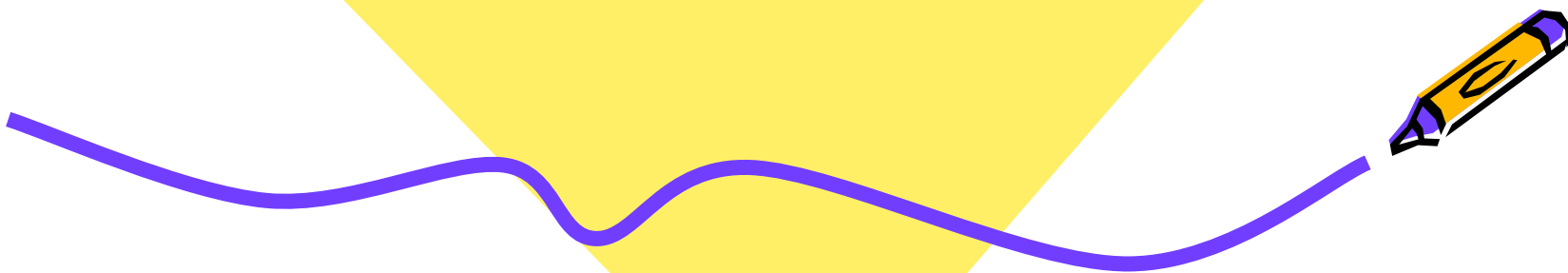


Calcolo dell'entropia



Entropia e transizioni di stato



- Calcolo dell'entropia per un sistema semplice chiuso.

$$\Delta S_{\text{transizione}} = \frac{\Delta H_{\text{trans}}}{T_{\text{trans}}}$$

La variazione entropica dell'ambiente

$$\Delta S_{\text{amb}} = \frac{Q_{\text{amb}}}{T_{\text{amb}}}$$



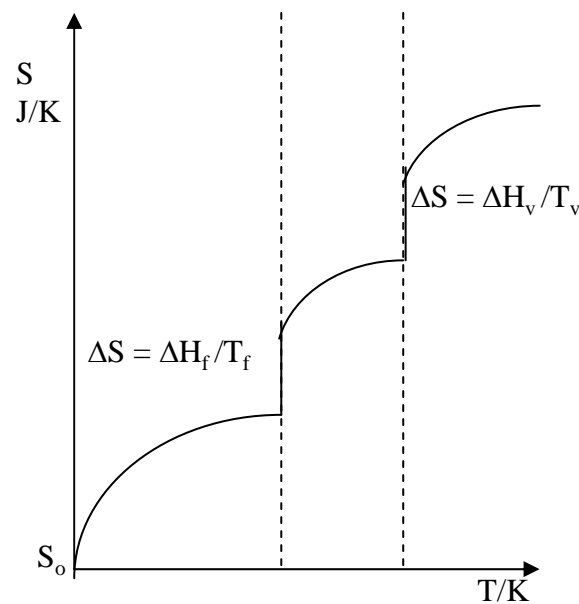
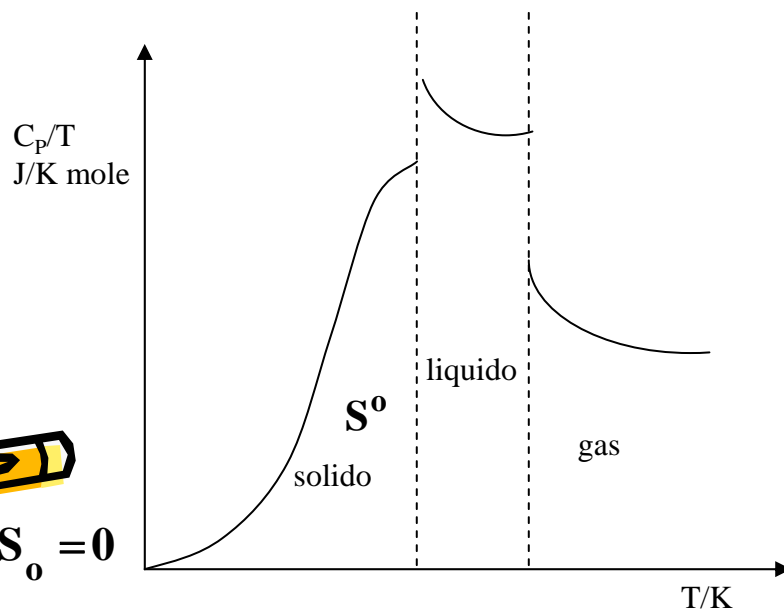
Entropia e variazione di temperatura

- Calcolo dell'entropia per un sistema semplice chiuso.

$$dS = \frac{nC_{p,m}dT}{T}$$

$$\Delta S = S_f - S_i = nC_{p,m} \int_{T_i}^{T_f} \frac{dT}{T}$$

$$\Delta S_{\text{transizione}} = \frac{\Delta H_t}{T_t}$$



Entropia e reazioni chimiche



- Poiché siamo in grado di associare a ciascuna sostanza un valore dell'entropia standard, possiamo calcolare la variazione di entropia che accompagna una reazione chimica dai valori tabulati a 298 K, e precisamente:

$$\Delta S_{298K,r}^o = \sum_P^i n_i S_i^o - \sum_R^j n_j S_j^o$$

$$S_i^o \Leftrightarrow \frac{\text{J}}{\text{K mole}}$$
$$\Delta S_{298K,r}^o \Leftrightarrow \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

I valori tabulati sono espressi in J/K mole, la variazione di entropia standard, avendo moltiplicato per i coefficienti stechiometrici in mole, sarà espressa in J/K

Per calcolare la dipendenza della variazione di entropia dalla temperatura per una reazione chimica, si procede nel modo seguente:

$$d(\Delta S_r^o) = \frac{\Delta C_p}{T} dT$$

$$\Delta C_p = \text{costante}$$

$$\Delta C_p = \Delta a + \Delta bT + \Delta cT^2$$



integrazione

$$\Delta S_T^o = \Delta S_{298K}^o + \Delta C_p \ln \frac{T}{298} \quad \Delta C_p = \text{costante}$$

$$\Delta S_T^o = \Delta S_{298K}^o + \int_{298K}^T \frac{\Delta a}{T} dT + \int_{298K}^T \frac{\Delta b T}{T} dT + \int_{298K}^T \frac{\Delta c T^2}{T} dT$$

$$\Delta S_T^o = \Delta S_{298K}^o + \Delta a \ln \frac{T}{298} + \Delta b (T - 298) + \frac{\Delta c}{2} (T^2 - 298^2)$$

$$\Delta C_p = \Delta a + \Delta b T + \Delta c T^2$$

Lo svolgimento spontaneo delle reazioni chimiche

Per stabilire se un processo è destinato o meno ad avvenire spontaneamente è necessario considerare l'entropia globale del sistema e del suo ambiente:

$$\Delta S_T = \Delta S_S + \Delta S_A \geq 0$$

Per calcolare la variazione di entropia dell'ambiente:

$$\Delta S_A = \frac{Q_p}{T_A} \quad \begin{array}{l} \Delta S_A > 0 \quad \text{quando il calore si trasferisce all'ambiente o} \\ \Delta S_A < 0 \quad \text{quando il calore esce dall'ambiente} \end{array}$$



reazioni chimiche

$$\Delta S_S = -\frac{q_{rev}}{T}$$

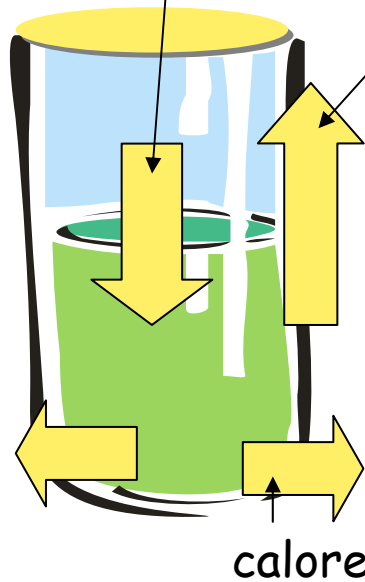
$$q_{rev} < q_{irr}$$

$$\Delta S_A = \frac{q_{irr}}{T}$$

$$q_{rev} < q_{irr}$$

Entropia del sistema

Entropia dell'ambiente



$$\Delta S_T = \Delta S_A + \Delta S_S > 0$$

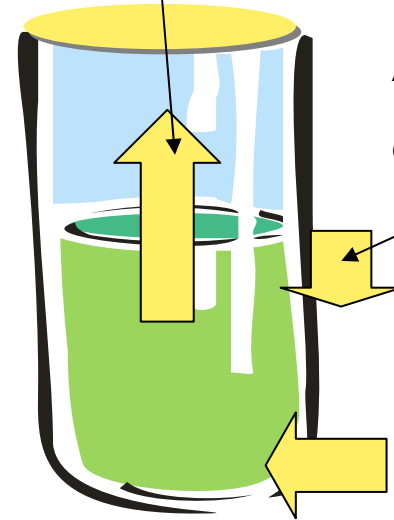
a) reazione esotermica

$$\Delta S_S = \frac{q_{rev}}{T}$$

$$q_{rev} > q_{irr}$$

$$\Delta S_A = -\frac{q_{irr}}{T}$$

$$q_{rev} > q_{irr}$$



b) reazione endotermica

