

Si no han estudiado nunca termodinámica, probablemente será necesario que lean antes un poco sobre el tema. Algunos libros de interés son:

Moore, Walter John, *Química física*, Urmo, S. A. de Ediciones, 1977.

Eisenberg, D. S. y Crothers, D. M., *Physical Chemistry with Applications to the Life Sciences*, Addison-Wesley Publishing Co., 1979.

Tinoco, I., Sauer, K. y Wang, J. C., *Physical Chemistry: Principles and Applications in Biological Sciences*, 3ª Edición, Prentice-Hall, Inc., 1994.

Van Holde, K. E., *Physical Biochemistry*, Prentice-Hall, Inc., 1985.

La termodinámica nos permite predecir cómo cambiarán las reacciones químicas en función de la temperatura y cómo los cambios en la estructura de las moléculas pueden afectar a las propiedades de equilibrio de una concentración de dichas moléculas.

Hay cuatro propiedades termodinámicas básicas:

$\Delta G$  — Variación en la **energía libre** entre reactivos y productos; esta propiedad mide la capacidad del sistema para reaccionar. Las reacciones con un valor  $\Delta G$  negativo tienen lugar de forma espontánea. Las reacciones en las que  $\Delta G$  es positivo es necesaria una aportación de energía para que se produzca la reacción.

$\Delta H$  — Variación de la **entalpía** entre reactivos y productos; la entalpía es el calor liberado o absorbido por una reacción a presión constante. Las reacciones que absorben calor tienen un valor  $\Delta H$  positivo y las que producen calor lo tienen negativo.

$\Delta S$  — Variación de la **entropía** entre reactivos y productos; la entropía es un cálculo estadístico del número de procesos o posibles conformaciones. Un  $\Delta S$  positivo indica que el desorden o número de conformaciones posibles del sistema está aumentando y viceversa.

$\Delta C_p$  — Variación en la **capacidad calorífica** entre reactivos y productos; cuando se calienta una disolución de moléculas, parte de la energía térmica aumenta la energía cinética de las moléculas, incrementando la temperatura, mientras la otra parte da lugar a vibraciones más rápidas o a la rotación de la molécula. La capacidad calorífica mide la energía que puede almacenar una molécula en estas rotaciones o vibraciones internas.

**$\Delta G$  proporciona una especie de función contable elemental para las reacciones químicas.**

La variación de energía libre de una reacción se puede calcular a partir de la constante de equilibrio de dicha reacción, mediante la siguiente ecuación:

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K$$

constante de los gases      constante de equilibrio  
 ↓                                      ↓  
 ↑                                      ↑  
 temperatura absoluta  
 variación estándar de la energía libre de Gibbs

$\Delta G^\circ$  es una función de la constante de equilibrio de la reacción, la constante de los gases  $R$  ( $1,98 \cdot 10^{-3}$  kcal/mol-g) y la temperatura absoluta (en °K). Hay que recordar que  $T(^{\circ}\text{K}) = T(^{\circ}\text{C}) + 273$ . Algunos bioquímicos políticamente correctos emplean kJ/mol en lugar de kcal/mol. La conversión es relativamente sencilla, ya que  $1 \text{ kcal/mol} \approx 4,2 \text{ kJ/mol}$  y  $R = 8,3 \cdot 10^{-3} \text{ kJ/mol-g}$  en estas unidades.

$\Delta G^\circ$  se conoce como variación estándar de la energía libre de Gibbs, donde el cero especifica un conjunto estándar de condiciones de reacción, entre las que se incluye **presión constante** (que casi siempre es de 1 at en las reacciones bioquímicas), una **temperatura** dada y un conjunto de **concentraciones estándar**. La temperatura que se emplea para calcular  $\Delta G^\circ$  es para la que se ha medido la constante de equilibrio ( $K_{\text{eq}}$ ) de la ecuación. Las concentraciones estándar de reactivos y productos se presupone que son 1 M, salvo que se especifiquen de forma explícita otros valores.

Es muy útil poder hacer un cálculo aproximado del valor de  $\Delta G^\circ$  sin necesidad de utilizar una calculadora. El modo más fácil de lograrlo es utilizar  $\Delta G^\circ = -2,3RT \log(K) \approx -1,35 \log(K)$  a temperatura ambiente. Así, una constante de equilibrio de  $10^{-10}$  M nos dará un  $\Delta G^\circ$  de 13,5 kcal/mol. Del mismo modo, un cambio de orden 10 en  $K$  modificará  $\Delta G^\circ$  en 1,35 kcal/mol.

Una vez que se conoce el valor de  $\Delta G^\circ$  para una reacción, es posible calcular la constante de equilibrio con la siguiente ecuación:

$$K_{\text{eq}} = e^{-\Delta G^\circ/RT}$$

¿Qué mide exactamente  $\Delta G^\circ$ ? Lo que mide no es la energía libre necesaria para convertir la totalidad de los reactivos 1 M en productos 1 M a una temperatura y una presión específicas. Necesitamos convertir 1 mol de reactivos en 1 mol de productos, pero nos interesa la energía libre de este proceso cuando la reacción se produce sin que las concentraciones de reactivos y productos cambien. Supongamos que tenemos una disolución 1M[A], 1M[B] y 1M[AB] para la reacción  $A+B \rightleftharpoons AB$ . Dejamos que una molécula de A se una a otra de B para formar un nuevo compuesto AB. Claramente, la variación en el grueso de las concentraciones de A, B y AB no se puede medir. Si pudiéramos calcular la cantidad de energía libre que se produce o consume en esta simple asociación, nos bastaría con multiplicar este valor por  $6 \cdot 10^{23}$  moléculas/mol para

calcular  $\Delta G^\circ$  de la reacción de asociación. A continuación, veremos cómo  $\Delta G^\circ$  de una reacción cambia cuando las concentraciones de los reactivos y los productos pueden cambiar.

Obsérvese que las constantes de equilibrio se definen para la reacción que se desarrolla desde las especies moleculares de los reactivos representados en la parte inferior de la expresión de equilibrio hacia los productos que figuran encima. Cuando utilizamos una constante de equilibrio para calcular  $\Delta G^\circ$ , la variación de la energía libre se produce también para la reacción que tiene lugar de arriba a abajo.

$$\Delta G_{\text{dis}}^\circ = -RT \ln K_d = -RT \ln \frac{[A][B]}{[AB]} \quad \curvearrowright$$

De este modo, si se utiliza  $K_d$  para calcular  $\Delta G^\circ$  en reacciones bimoleculares, la energía libre será la asociada a la disociación del compuesto y la variación de la energía libre será positiva siempre que  $K_d < 1M$ . Esto tiene sentido. Si  $K_d$  es  $10^{-6}M$ , será necesario un aporte de energía para disociar el compuesto cuando todas las especies se encuentran en concentraciones  $1M$ . Si se emplea  $K_a$  para calcular  $\Delta G^\circ$ , la energía libre será la de asociación del compuesto.

$$\Delta G_{\text{asoc}}^\circ = -RT \ln K_a = -RT \ln \frac{[AB]}{[A][B]} \quad \curvearrowright$$

Para una reacción en la que  $K_a > 1M^{-1}$ , la variación de la energía libre de asociación será negativa cuando todas las especies estén presentes en concentraciones  $1M$ . La expresión  $\Delta G_{\text{dis}}^\circ = -\Delta G_{\text{asoc}}^\circ$  se cumplirá siempre. Cuando se emplean constantes de equilibrio unimoleculares para calcular  $\Delta G^\circ$ , la variación de energía libre resultante es, una vez más, para la reacción que se produce desde las especies de la parte inferior hacia las que están encima.

$$\Delta G_{\text{desp}}^\circ = -RT \ln K_u = -RT \ln \frac{[U]}{[N]} \quad \curvearrowright$$

**$\Delta G^\circ$  depende de  $\Delta H^\circ$ ,  $\Delta S^\circ$  y de la temperatura.**

$$\begin{array}{ccc}
 \text{energía libre} & \text{entalpía} & \text{entropía} \\
 \downarrow & \downarrow & \downarrow \\
 \Delta G^\circ & = & \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ \\
 & & \uparrow \\
 & & \text{temperatura absoluta}
 \end{array}$$

El valor  $\Delta H^\circ$  de una reacción se puede determinar directamente, mediante el uso de un calorímetro, simplemente midiendo la cantidad de calor que se produce o se consume en la reacción. Como se explica a continuación, también se puede determinar  $\Delta H^\circ$ .

Para la mayoría de las reacciones,  $\Delta S^\circ$  no se mide directamente, sino que se calcula a partir de  $\Delta G^\circ$ ,  $\Delta H^\circ$  y de la temperatura. Sin embargo, se puede calcular  $\Delta S^\circ$  para procesos de dilución sencillos. La entropía de una etapa es proporcional al número de etapas posibles desde el punto de vista energético.

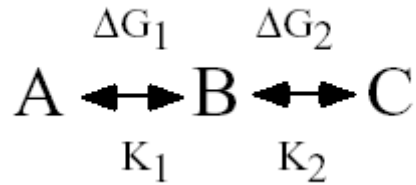
$$S = R \ln (\# \text{ etapas})$$

$$\Delta S = R \ln \frac{[\# \text{ etapas finales}]}{[\# \text{ etapas iniciales}]}$$

En las reacciones de dilución, el número de etapas es inversamente proporcional a la concentración; hay más etapas posibles para una molécula a bajas concentraciones que a altas. De este modo, la variación de la entropía a lo largo de la dilución es positiva (favorable) siempre y cuando la concentración inicial sea mayor que la final.

$$\Delta S_{\text{dil}} = R \ln \frac{[\# \text{ etapas finales}]}{[\# \text{ etapas iniciales}]} = R \ln \frac{[\text{conc. inicial}]}{[\text{conc. final}]}$$

**En relaciones enlazadas, los  $\Delta G^\circ$  son aditivos.**



En los equilibrios dobles, sabemos que la constante de equilibrio de la reacción global es el producto de las constantes de equilibrio de cada proceso.

$$K_{\text{eq}} = K_1 K_2 = \frac{[B][C]}{[A][B]} = \frac{[C]}{[A]}$$

La variación de la energía libre de la reacción global entre A y C es igual a la suma de las variaciones de energía libre de cada etapa.

$$\Delta G_{\text{global}} = \Delta G_1 + \Delta G_2$$

Si sustituimos  $-RT \ln K_1$  por  $\Delta G_1$  y  $-RT \ln K_2$  por  $\Delta G_2$  y, a continuación, simplificamos, obtenemos:

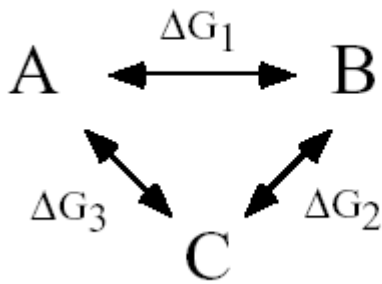
$$\Delta G_{\text{global}} = -RT \ln K_1 K_2 = -RT \ln K_{\text{eq}}$$

En reacciones dobles,  $\Delta H^\circ$  y  $\Delta S^\circ$  son también aditivos.

$$\Delta S_{\text{global}} = \Delta S_1 + \Delta S_2$$

$$\Delta H_{\text{global}} = \Delta H_1 + \Delta H_2$$

En cualquier proceso cíclico, los cambios globales en  $\Delta G$ ,  $\Delta H$  y  $\Delta S$  deben ser igual a cero y el producto global de las constantes igual a 1.



$$\Delta G_1 + \Delta G_2 + \Delta G_3 = 0$$

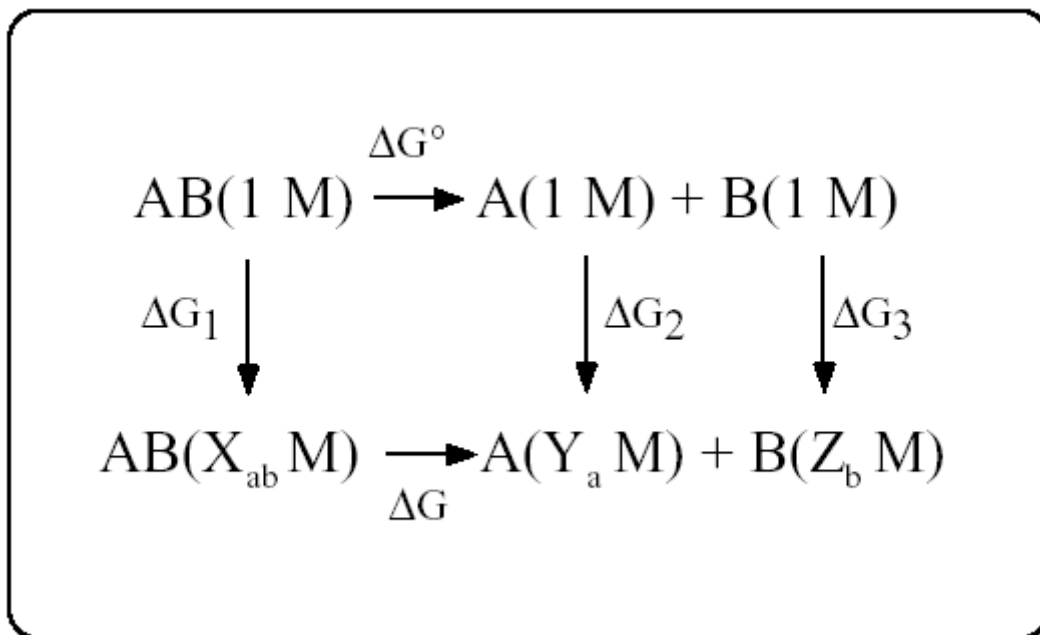
### ¿Por qué son importantes las concentraciones para $\Delta G$ ?

En las reacciones bimoleculares,  $\Delta G^\circ$  es la variación de energía libre que se produce en la conversión de reactivos en productos en concentraciones estándar 1M. Sin embargo, éstas no son las concentraciones de reactivos y productos que despiertan mayor interés. El valor  $\Delta G$  para la reacción  $AB \rightleftharpoons A + B$  se puede calcular en condiciones no estándar mediante la ecuación:

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[Y_a][Z_b]}{[X_{ab}]}$$

donde  $[Y_a]$ ,  $[Z_b]$  y  $[X_{ab}]$  son las concentraciones de  $[A]$ ,  $[B]$  y  $[AB]$  de la reacción en cuestión.

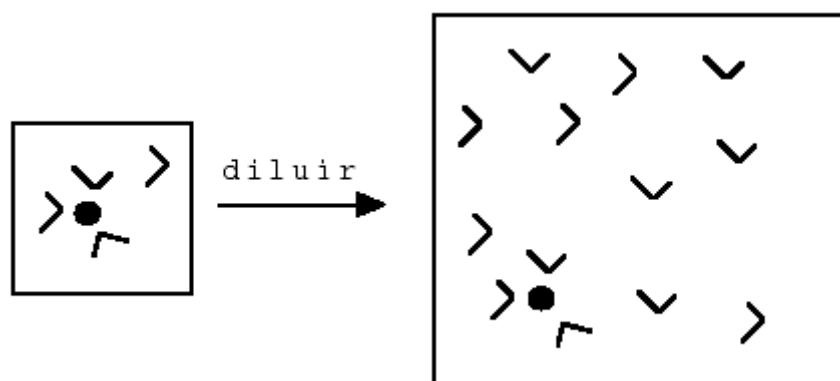
Para derivar esta ecuación, debemos construir un ciclo termodinámico para una reacción de disociación. La reacción situada en la parte superior es una disociación en la que todos los reactivos y productos se encuentran en concentraciones estándar 1M; la situada en la parte inferior muestra una disociación para cualquier otro conjunto de concentraciones de reactivos y productos; y las reacciones verticales son diluciones.



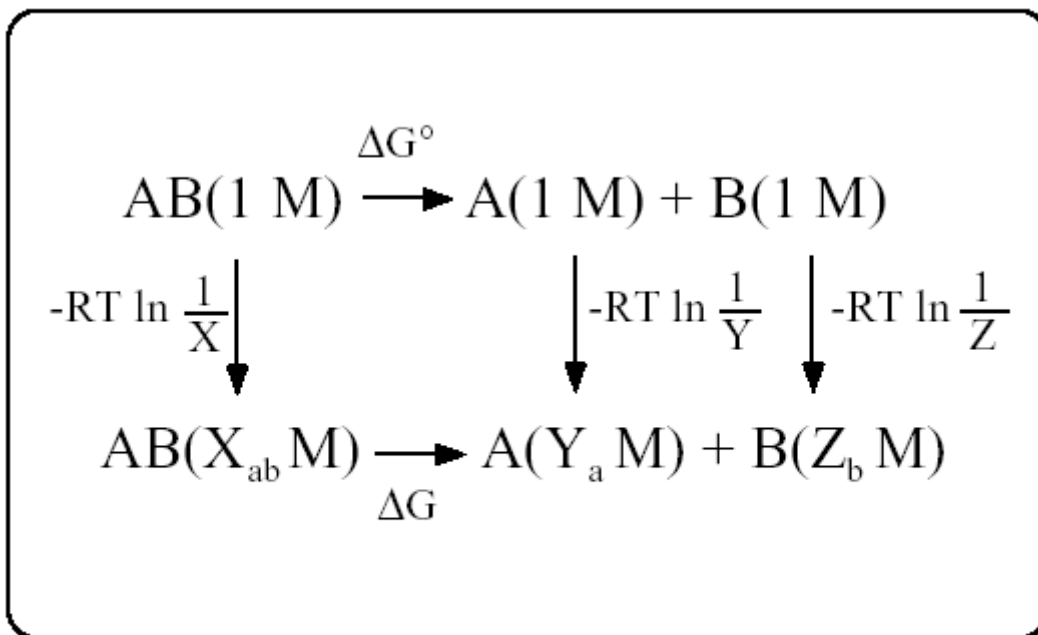
$$\Delta G^\circ + \Delta G_2 + \Delta G_3 = \Delta G + \Delta G_1$$

Puesto que  $\Delta G_1$ ,  $\Delta G_2$  y  $\Delta G_3$  son energías libres de dilución, sólo habrá que tener en cuenta la variación de entropía, ya que no se forma ni se rompe ningún enlace. De este modo,  $\Delta H_{\text{dil}} = 0$  y:

$$\Delta G_{\text{dil}} = \Delta H_{\text{dil}} - T\Delta S_{\text{dil}} = -T\Delta S_{\text{dil}}$$



Así, el ciclo termodinámico pasa a ser:



$$\Delta G + RT \ln (X_{ab}) = \Delta G^\circ + RT \ln (Y_a) + RT \ln (Z_b)$$

Reajustando los términos, obtenemos:

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[Y_a][Z_b]}{[X_{ab}]}$$

Existen dos condiciones especiales: cuando  $[Y_A] = [Z_B] = [X_{AB}] = 1\text{M}$ ,  $\Delta G = \Delta G^\circ$ , como era de esperar, ya que no hay dilución; cuando  $[Y_A]$ ,  $[Z_B]$  y  $[X_{AB}]$  son concentraciones en equilibrio, entonces:

$$\Delta G = -RT \ln \frac{[A][B]}{[AB]} + RT \ln \frac{[A][B]}{[AB]} = 0$$

Hay varias formas de expresar el hecho de que  $\Delta G$  es igual a cero para los sistemas que han alcanzado el equilibrio. En condiciones de equilibrio, no se absorbe ni se libera ninguna energía libre durante la conversión de reactivos en productos. Del mismo modo, en equilibrio, no hay ninguna "tensión" o desplazamiento de compensación en la reacción.

En una reacción unimolecular,  $A \rightleftharpoons B$ , la variación de energía libre en concentraciones distintas de las estándar se calcula a partir de la expresión:

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[\text{productos}]}{[\text{reactivos}]}$$

Es importante entender por qué en todas las reacciones la variación de energía libre es función de las concentraciones de reactivos y productos.  $\Delta G$  se puede considerar un indicador de si la representación de la energía libre local de la reacción tiende al ascenso o al descenso. Un  $\Delta G$  negativo representa las reacciones en las que la gráfica experimenta un descenso y un  $\Delta G$  positivo, aquellas en las que tiende al ascenso. Examinemos una reacción de disociación,  $AB \rightleftharpoons A + B$ , con  $K_d = 1 \mu\text{M}$ . A continuación, iniciemos diferentes reacciones de disociación con distintas concentraciones iniciales de  $[AB_0]$ ,  $[A_0]$  y  $[B_0]$ . ¿En qué medida se desarrollará cada una de las reacciones de disociación?

$[AB_0] = [A_0] = [B_0] = 1 \text{ M}$	disociación ascendente	$\Delta G = 8,2 \text{ kcal/mol}$
$[AB_0] = [A_0] = [B_0] = 1 \mu\text{M}$	sistema en equilibrio	$\Delta G = 0,0 \text{ kcal/mol}$
$[AB_0] = [A_0] = [B_0] = 1 \text{ pM}$	disociación descendente	$\Delta G = -8,2 \text{ kcal/mol}$

Para la reacción unimolecular  $A \rightleftharpoons B$ ,  $\Delta G$  será igual a  $\Delta G^\circ$  mientras  $[A_0] = [B_0]$ , ya que la entropía de la dilución de los reactivos en el ciclo termodinámico será igual a la entropía de dilución de los productos. Si  $[A_0] \neq [B_0]$ , entonces  $\Delta G \neq \Delta G^\circ$ . Supongamos una reacción con una constante de equilibrio  $K$ .

$[A_0] = 10 \cdot [B_0] / K$	$A \rightarrow B$ descendente	$\Delta G = -1.35 \text{ kcal/mol}$
$[A_0] = [B_0] / K$	sistema en equilibrio	$\Delta G = 0.0 \text{ kcal/mol}$
$10 \cdot [A_0] = [B_0] / K$	$A \rightarrow B$ ascendente	$\Delta G = 1.35 \text{ kcal/mol}$

Una vez más, la representación gráfica de la energía libre puede ser ascendente o descendente, en función de las concentraciones de reactivos y productos.

### En qué medida la temperatura depende de $\Delta G$ , $\Delta H$ , $\Delta S$ y $K_{eq}$ .

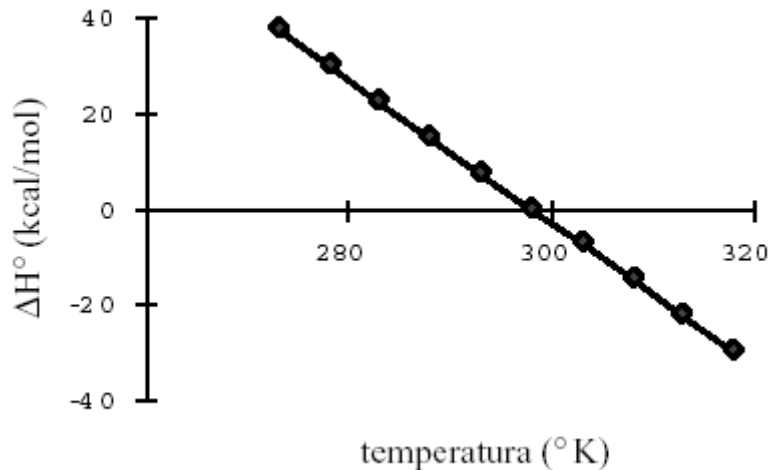
La ecuación  $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$  puede resultar engañosa, debido a que parece una sencilla ecuación lineal, con la temperatura ( $T$ ) como única variable. Sin embargo, la realidad es que tanto  $\Delta H^\circ$  como  $\Delta S^\circ$  varían en función de la temperatura, en caso de que haya diferencia entre las capacidades caloríficas de los reactivos y las de los productos.

$$\frac{\partial \Delta H}{\partial T} = \Delta C_p$$

La solución integrada es:

$$\Delta H = \Delta C_p \cdot T + \Delta H_{0^\circ\text{K}}$$

De este modo,  $\Delta H^\circ$  es una sencilla función lineal de la temperatura y es posible calcular  $\Delta C_p$  como la pendiente de una gráfica que muestre los valores de  $\Delta H^\circ$  obtenidos a distintas temperaturas. En la gráfica que se muestra a continuación,  $\Delta C_p = -1,5$  kcal/mol-g y  $\Delta H^\circ = 0$  kcal/mol a 298 °K. Obsérvese que el valor de  $\Delta H^\circ$  para la reacción cambia de signo y que la reacción pasa de ser endotérmica a ser exotérmica a esa temperatura.



Conocer  $\Delta C_p$  y  $\Delta H^\circ$  a una temperatura, permite calcular  $\Delta H^\circ$  a cualquier otra temperatura.

$$\Delta H_1 = \Delta H_2 + \Delta C_p \cdot (T_1 - T_2)$$

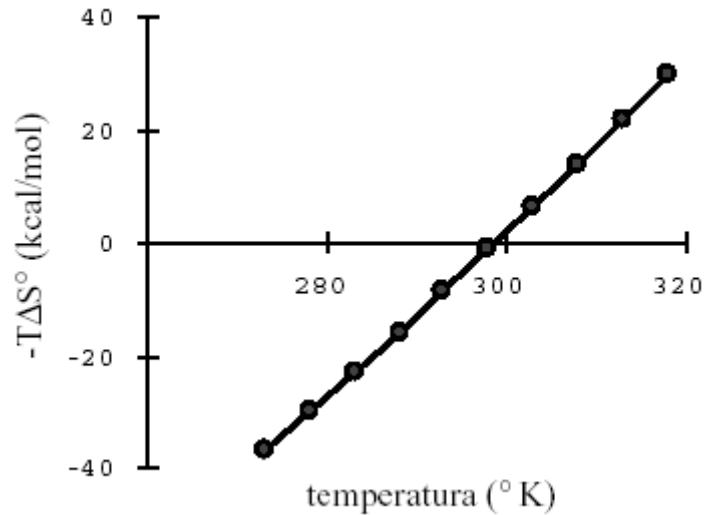
La entropía también es una función del tiempo.

$$\frac{\partial \Delta S}{\partial T} = \frac{\Delta C_p}{T}$$

La solución integrada en este caso es:

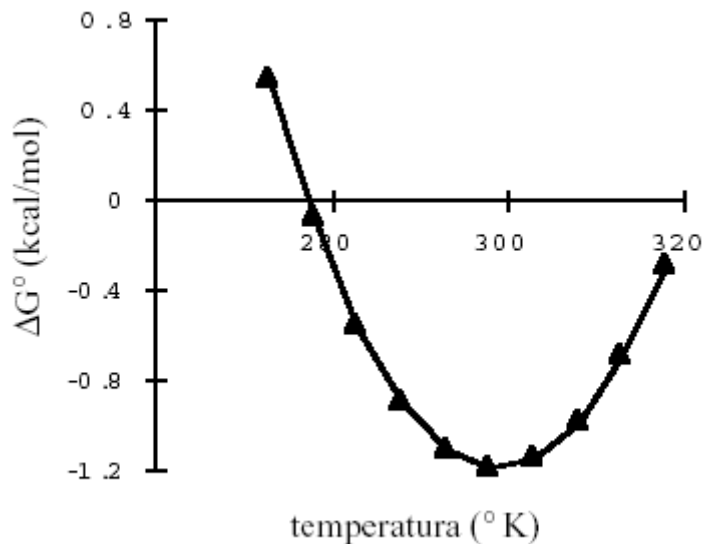
$$\Delta S_1 = \Delta S_2 + \Delta C_p \cdot \ln (T_1/T_2)$$

En la gráfica que se muestra a continuación para una reacción en la que  $\Delta C_p = -1,5$  kcal/mol y  $\Delta S_2 = 0,004$  kcal/mol-g a 298°K, se puede ver cómo  $-T\Delta S$  varía con la temperatura. La gráfica presenta una ligera curvatura que indica la dependencia logarítmica de la temperatura. En la reacción mostrada, el valor de  $\Delta S^\circ$  para la reacción cambia de signo al aproximarse a la temperatura ambiente.



Debido a que la variación en la capacidad calorífica determina el modo en el que la entalpía y la entropía de la reacción varían con la temperatura,  $\Delta H^\circ$  y  $\Delta S^\circ$  serán independientes de la temperatura siempre y cuando  $\Delta C_p$  sea igual a 0, algo bastante raro en sistemas biológicos.

Dado que  $\Delta H^\circ$ ,  $\Delta S^\circ$  y  $T$  son todas funciones de temperatura,  $\Delta G^\circ$  variará también con la temperatura, como se puede ver en la gráfica mostrada a continuación en la que, a 298 $^\circ\text{K}$ ,  $\Delta H^\circ = 0$  kcal/mol,  $\Delta S^\circ = 0,004$  kcal/mol-g y  $\Delta C_p = -1,5$  kcal/mol.



Cabe destacar que, al comparar las gráficas de  $\Delta H^\circ$ ,  $T\Delta S^\circ$  y  $\Delta G^\circ$  en función de la temperatura, se pueden observar grandes variaciones en los valores  $\Delta H^\circ$  y  $T\Delta S^\circ$  al pasar de 270 a 315  $^\circ\text{K}$ , mientras que en  $\Delta G^\circ$  los cambios son relativamente pequeños. Esto se debe a que la variación en  $\Delta H^\circ$ , compensa con creces la de  $T\Delta S^\circ$ . Este proceso se conoce como compensación entropía-entalpía. Para ver cómo varía  $\Delta G^\circ$  con la temperatura, empezar con:

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

Tomando las derivadas de todos los términos con respecto a T:

$$\frac{\partial \Delta G^\circ}{\partial T} = \frac{\partial \Delta H^\circ}{\partial T} - T\frac{\partial \Delta S^\circ}{\partial T} - \Delta S^\circ \frac{\partial T}{\partial T}$$

Sustituir  $\Delta C_p$  en  $\frac{\partial \Delta H^\circ}{\partial T}$  y  $\Delta C_p/T$  en  $\frac{\partial \Delta S^\circ}{\partial T}$ ; obsérvese que los dos primeros términos se anulan entre sí. Esta anulación es el origen de la compensación entropía-entalpía: la mayor parte de la variación que se produce en  $T\Delta S^\circ$  con el cambio de temperatura anula directamente la variación en  $\Delta H^\circ$ .

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial T} = -\Delta S$$

De este modo, la pendiente de la gráfica de  $\Delta G^\circ$  frente a la temperatura es  $-\Delta S^\circ$  y  $\Delta G^\circ$  alcanzará un valor máximo o mínimo cuando  $\Delta S^\circ = 0$ .

Las constantes de equilibrio varían también en función de la temperatura, como muestra la ecuación de van't Hoff. A continuación, se muestra la derivación de esta interrelación:

$$-RT \ln (K) = \Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

$$-R \ln (K) = \frac{\Delta H^\circ}{T} - \Delta S^\circ$$

$$-R \frac{\partial \ln (K)}{\partial T} = \Delta H^\circ \frac{\partial(1/T)}{\partial T} + \cancel{\left( \frac{1}{T} \frac{\partial \Delta H^\circ}{\partial T} \right)} - \cancel{\left( \frac{\partial \Delta S^\circ}{\partial T} \right)}$$

$\downarrow$   
 $\frac{\Delta C_p}{T}$

$\downarrow$   
 $-\frac{\Delta C_p}{T}$

$$-R \frac{\partial \ln (K)}{\partial(1/T)} = \Delta H^\circ \frac{\partial T}{\partial T}$$

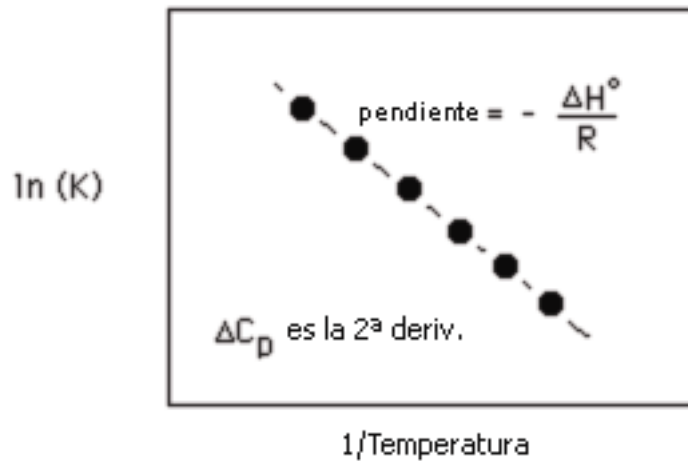
$$\frac{\partial \ln (K)}{\partial(1/T)} = -\frac{\Delta H^\circ}{R}$$

$\ln(K)$  y, por tanto, también  $K$ , cambian con la temperatura, a menos que  $\Delta H^\circ = 0$ .

Una alternativa a la ecuación de van't Hoff es la siguiente:

$$\frac{\partial \ln (K)}{\partial T} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2}$$

Calculando las constantes de equilibrio a distintas temperaturas, podemos determinar  $\Delta H^\circ$  a partir de la pendiente de la representación gráfica de  $\ln(K)$  frente a  $1/T$ . Si  $\Delta C_p \neq 0$ , la representación gráfica de la ecuación de van't Hoff será una curva y  $\Delta C_p$  se podrá calcular como segunda derivada. Por el contrario, si  $\Delta C_p = 0$ , la representación gráfica de la ecuación de van't Hoff será una recta y  $\Delta H^\circ$  será independiente de la temperatura.



## Repaso de cómo se calculan los parámetros termodinámicos

La constante de equilibrio (K) se calcula a partir de las concentraciones en equilibrio de reactivos y productos.

La variación de energía libre en una reacción en condiciones estándar ( $\Delta G^\circ$ ) se calcula mediante  $-RT \ln(K)$ .

La variación de energía libre en una reacción con concentraciones distintas de las estándar ( $\Delta G$ ) se obtiene a partir de  $\Delta G^\circ + RT \ln([\text{productos}]/[\text{reactivos}])$ .

La variación de entalpía de una reacción en condiciones estándar ( $\Delta H^\circ$ ) se determina mediante el uso de un calorímetro o calculando las constantes de equilibrio a distintas temperaturas y utilizando la ecuación de van't Hoff.

La variación en la capacidad calorífica de una reacción en condiciones estándar ( $\Delta C_p$ ) se obtiene midiendo la dependencia que presenta  $\Delta H^\circ$  de la temperatura.

La variación en la entropía de una reacción en condiciones estándar ( $\Delta S^\circ$ ) se calcula con  $(\Delta H^\circ - \Delta G^\circ)/T$ .

## Listado de ecuaciones útiles

$$\Delta G^\circ = -RT \ln (K) = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

$$K_{eq} = e^{-\Delta G^\circ/RT}$$

*para  $AB \rightleftharpoons A+B$*

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[Y_a][Z_b]}{[X_{ab}]}$$

*para reactivos  $\rightleftharpoons$  productos*

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln \frac{[\text{productos}]}{[\text{reactivos}]}$$

*dependencia de la temperatura por parte de los parámetros termodinámicos*

$$\Delta H = \Delta H_{ref} + \Delta C_p \cdot (T - T_{ref})$$

$$\Delta S = \Delta S_{ref} + \Delta C_p \cdot \ln (T/T_{ref})$$

$$\Delta G = \Delta H_{ref} - T\Delta S_{ref} + \Delta C_p \cdot (T - T_{ref} - T \cdot \ln (T/T_{ref}))$$

$$\frac{\partial \Delta H}{\partial T} = \Delta C_p$$

$$\frac{\partial \Delta S}{\partial T} = \frac{\Delta C_p}{T}$$

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial T} = -\Delta S$$

$$\frac{\partial \ln(K)}{\partial(1/T)} = -\frac{\Delta H^\circ}{R}$$

$$\frac{\partial \ln(K)}{\partial T} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2}$$