

2. IKASGAIA: TERMODINAMIKAREN LEHEN PRINTZIPIOA ETA TERMOKIMIKA

2.1.- BARNE-ENERGIA

Sistema baten egoera termodinamiko definitzeko, aldagai termodinamikoak erabiltzen ditugu: presioa, bolumena, temperatura... Orain baino lehen esan dugu ez dela beharrezkoa aldagai guztiak zehaztea; zergatik? Aldagai horiek elkarren artean lotuta baitaude.

Eta nola aldatuko da sistema baten egoera termodinamiko? Sistemaren gainean lana eginez, edo berak lana eginez edo sistemari beroa emanaz edo kenduz.

Sistemak lana egiteko ahalmen edo gaitasun ezberdina izango du egoera bakoitzean, hots, energia ezberdina. Sistemaren gertatutako aldaketan arabera, sistemaren energia edo ahalmen hori handiagoa edo txikiagoa izango da.

Sistemaren energia bitan banatu dezakegu:

- Berez sistemak duena, hau da, sistemaren molekulek duten bibraziozko, errotaziozko eta traslaziozko energien batura.

- Sistemak bere abiadura eta posizioagatik duen energia, hau da, energia zinetikoa eta potentziala.

(Ez gara kontuan hartzen ari eremu elektriko edo magnetiko batean sistemak izango lituzkeen energia mota berriak).

Termodinamikan, eremu grabitatorioa eta abiadura kontuan hartuko ez ditugunez, lehenengo energia motaz arduratuko gara. Beraz, sistemak berez lan egiteko duen ahalmen horri BARNE-ENERGIA esango diogu: U .

Barne-energia aldatu egingo da noski egindako lanarekin eta jasotako edo askatutako beroarekin, baina, bi horiek ibilbidearen menpeko baldin badira ere, barne-energia egoera-funtzio bat da, hau da, ez da egoera horretara iristeko ibilbidearen menpeko: egoera termodinamiko bakoitzari barne-energiaren balio zehatz bat dagokio, eta ez du zerikusirik egoera horretara heltzeko egindako ibilbidearekin. Adibidez, mendigoizale bat Txindokira iristean, altuerari zor zaio tontorrean egotearen ondoriozko energia potentziala; ez du zerikusirik nola iritsi den altuera horretaraino.

Molekula guztiei dagokien energia guztien batura sistema horren BARNE-ENERGIA da. Eta hortxe dago termodinamikaren 1. printzipioa:

$$dU = dQ + dW$$

Beraz, sistema baten barne-energiaren aldaketa bere gain egindako edo berak egindako lanaren eta transferitutako beroaren arteko balantzea izango da. Lehenengo printzipio hori ezin da matematikoki frogatu, baina ez dago inongo gertaera esperimenterik haren aurka doanik, edo, beste hitz batzuetan esanda, energia ez da ez galtzen, ezta sortzen ere; gehienez, trukatu egiten da.

Lanean ari garen baldintza arruntetan, lana espantsiozko edo konpresiozko lana izango denez, lehenengo printzipioa honela idatziko dugu:

$$dU = dQ - pdV$$

Zer esanahi fisiko du barne-energiaren aldaketak?

Eman dezagun ontzi itxi batean gertatzen ari dela gure erreakzioa, prozesua, transformazioa, aldaketa edo dena delakoa, hots, bolumena konstante mantentzen dela. Baldintza horietan ez da espantsiozko edo konpresiozko lanik egongo; beraz, bero-transferentzia izango da barne-energiaren aldaketa:

$$dU = dQ_v$$

v azpiindizeak esan nahi du bolumen konstantea izanik gertatu dela bero-transferentzia. Beraz, prozesuan zehar bolumena konstante mantendu baldin bada, neurtutako bero-transferentzia sistemak jasan duen barne-energiaren aldaketa izango da.

2.2.- ENTALPIA

Laborategian gertatzen diren prozesu gehienetan, presioa konstante mantentzen da, eguratsera irekitako saiakerak izaten baitira normalean.

Har dezagun esperimentu simple bat:

Enbolo mugikorreko zilindro batean, gas kantitate bat dugu, baldintza jakin batzuetan (m_1, p_1, V_1, T), eta sistema horri beroa emango diogu. Enboloa mugikorra denez, gasa expanditu egingo da, eta, une oro sistema orekan egongo bada, kanpoko presioa eta barnekoa berdinak izango dira, hau da, eguratseko presioa.

Aldaketa horri 1. printzipioa aplikatuko diogu:

$$dU = dQ - pdV$$

Eta ekuazio hori integratuz gero:

$$\int_1^2 dU = Q_p - p \int_1^2 dV$$

$$U_2 - U_1 = Q_p - p(V_2 - V_1)$$

Ekuazio hori berrordenatuko dugu:

$$(U_2 + p_2V_2) - (U_1 + p_1V_1) = Q_p$$

U, p eta V sistemaren egoeraren arabera aldatzen dira soilik, hau da, egoera-funtzioak dira. Beraz $U+pV$ batura ere egoera-funtzioa izango da. Magnitude berri horri entalpia esaten zaio:

$$H = U + pV$$

Eta aurreko ekuazioa honela geldituko da, orduan:

$$H_2 - H_1 = \Delta H = Q_p$$

Beraz, presioa konstante mantenduz gertatzen den bero-transferentziak (nahiz positibo, nahiz negatibo izan) entalpia-aldaketa ematen digu. Horrexegatik, entalpia oso erabilia da laborategian, neurketa gehienak presio atmosferikoan egiten baitira. Prozesu asko eta oso garrantzitsuak gertatzen dira p konstantepean; adibidez, fusioa, lurruntzea... Eta fase-aldaketa horietan neurtutako beroa prozesu horri dagokion entalpia-aldaketa izango da zuzenean:

$$Q_{fusio} = \Delta_{fusio}H$$

Beroa sistemari ematen badiogu, positiboa izango da, eta prozesua ENDOTERMIKOA dela esango dugu; aldiz, negatiboa denean, EXOTERMIKOA.

Bestalde, bero-ahalmenaren definizioa kontuan izanik, zera idatz dezakegu:

$$C_p = mc_p = \frac{dq_p}{dT} = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$$

$$C_v = mc_v = \frac{dq_v}{dT} = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v$$

Ekuazio horietan agertzen denaren arabera, presioa konstante mantenduz gertatutako entalpia-aldaketa kalkulatzeko, bero-ahalmena temperatura-aldaketaz biderkatu beharko da, eta gauza bera bolumena konstante mantenduz barne-energiaren aldaketa lortzeko. Deribatu partzial horiek zera azaltzen dute: bai entalpia, bai barne-energia temperaturaren, presioaren, bolumenaren menpeko izango dira, oro har.

Ez dugu frogatuko, baina, **gas idealetan**, bi egoera-funtzio horiek temperaturaren menpeko dira soilik, ez beste inongo aldagairen menpeko. Beraz,

$$\Delta U = \int C_v dT$$

$$\Delta H = \int C_p dT$$

eta bien arteko erlazioa hauxe izango da:

$$c_p - c_v = R$$

Bero espezifikoa izan, bero-ahalmena izan edo bero-ahalmen molarra izan, erabili behar diren ekuazioak zertxobait aldatuko dira. Edozein modutan, errazena unitateei begiratzea da, ea beroa gramo eta graduko, beroa graduko edo beroa moleko eta graduko emana datorren, eta horrela jakingo dugu ea masa kontuan hartu behar dugun, ea mol kopurua kontuan hartu behar dugun, edo ez bata eta ez bestea.

2.3.- ERREAKZIO-ENTALPIAK

Prozesu edo erreakzio kimikoetan gertatzen diren entalpia-aldaketak aztertzea da TERMOKIMIKAREN helburua. Erreakzio kimiko bat gertatzen denean transferitutako beroa ez da egoera-funtzio bat, ibilbidearen menpe baitago. Egokiagoa izango litzateke gertatutako energia-transferentzia hori egoera-funtzio baten menpe idaztea.

Bero-transferentzia bolumena konstante izanik gertatu baldin bada, sistemak jasan duen barne-energiaren aldaketa izango da bero hori:

$$\Delta U = Q_v$$

Aldiz, bero-transferentzia presioa konstante izanik gertatu baldin bada, sistemaren entalpia-aldaketa izango da bero-transferentzia hori:

$$\Delta H = Q_p$$

Erreakzio-beroa: erreakzio bat gertatutakoan inguruetik sistemara isurtzen den beroa edo ingurunera sistematik isurtzen dena, sistemak hasierako tenperatura berreskura dezan.

Baina, presioa konstante baldin bada, erreakzio-beroa erreakzio-entalpia izango da:

$$q_{\text{erreakzio}} = \Delta_r H$$

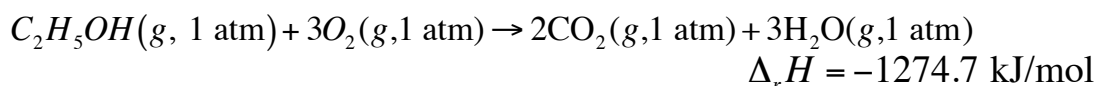
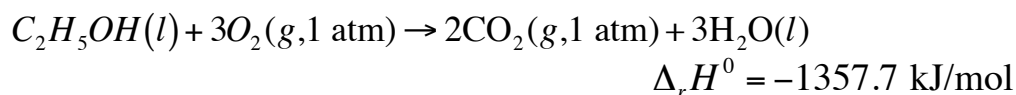
Eta, aldaketa hori erreaktiboak produktu bihurtzeagatik gertatu denez:

$$\Delta_r H = \sum H_{\text{produktuak}} - \sum H_{\text{erreaktiboak}}$$

Erreakzio-entalpia erraz lor daiteke erreakzioan zeharreko bero-transferentzia neurtuz, baina ezinezkoa da inondik inora osagai ezberdinen entalpiaren balio absolutuak neurtzea. Adibidez:



Erreakzio-entalpia aldatu egingo da erreaktiboen eta produktuen egoera fisikoaren arabera, baita presioaren eta tenperaturaren arabera, eta erreaktiboen eta produktuen kopuruen arabera ere. Horrexegatik, erreakzio baten entalpia-aldaketa gertatzen denean, substantzia guztien egoera fisikoa adierazi behar da (g, l, aq., ...), zer tenperaturatan eta presiotan gertatu den erreakzioa, eta, disoluziotan gertatu bada, zer kontzentrazioan.



Etanola egoera likidoan edo gaseosoan izan, erreakzio-entalpia ezberdina izango da. Lehenengo kasuan, zerotxo bat ipini diogu erreakzio-entalpiari, indize moduan. Zergatik hori? Egoera estandarrean lanean ari garelako.

Egoera estandarra: tenperatura jakin batean, 1 bar-eko presiopean, substantzia horren formarik egonkorrena. Adibidez, oxigenoaren kasuan, 25 °C-an, oxigeno diatomiko gaseosoa (O₂ (g)), edo, 25 °C-an, etanolaren kasuan, etanol likido purua...

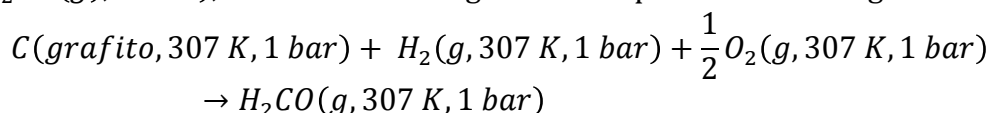
Beraz, erreakzio bat oso-osorik eta presioa konstante izanik gertatzen baldin bada, erraza da erreakzioari dagokion entalpia-aldaketa lortzea. Horretarako, KALORIMETROA erabiliko dugu, hau da, askatu edo xurgatutako beroa neurtzeko balio duen tresna, eta bero hori izango da erreakzioaren entalpia-aldaketa edo erreakzio-entalpia. Baina, erreakzioa oso-osorik gertatzen ez bada, edo beste produktu desegokirik ere ematen duenean, ezinezkoa da neurtutako beroa eta erreakzio-entalpia berdintzea. Beste bide bat asmatu beharko da erreakzio-entalpia lortzeko, eta horretarako definitzen dira formazio-entalpiak.

2.4.- FORMAZIO-ENTALPIA ESTANDARRA

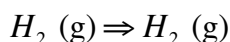
Substantzia baten formazio-entalpia estandarra zera da: substantzia baten mol bat bere elementuetatik abiatuz egoera estandarrean formatzen denean, elementu horiek ere egoera estandarrean egonik, gertatzen den entalpia-aldaketa:

$$\Delta_f H^0(T)$$

Adibidez: formaldehido gaseosoaren formazio-entalpia estandarra 307 K-ean, $\Delta_f H^0(H_2CO(g), 307 K)$, erreakzio honi dagokion entalpia-aldaketa izango da:



Zenbatekoa izango da elementu baten formazio-entalpia estandarra? Adibidez, hidrogenoarena, 298 K-ean:

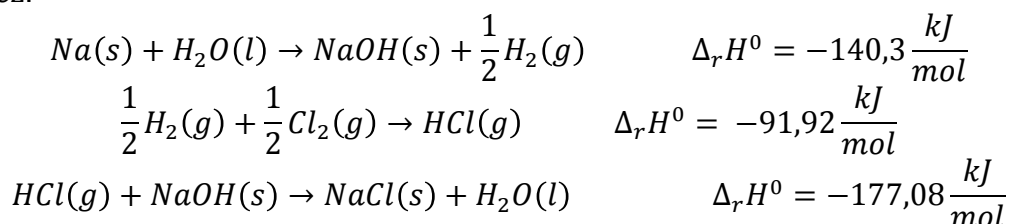


Garbi dago gauza bera dagoela erreaktiboen aldean eta produktuenean; beraz erreakzio horren entalpia-aldaketa zero izango da. Beraz, elementu guztien formazio-entalpia estandarra zero izango da. Eta zertarako erabili formazio-entalpia estandarrak? Beste erreakzio askoren entalpia-aldaketak lortu ahal izateko, aurreraxeago ikusiko dugun moduan.

2.5.- HESS-EN LEGEA

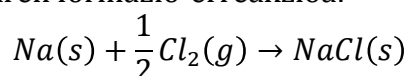
Hess-en legea entalpia egoera-funtzio izatetik dator, hau da, erreakzio bati dagokion entalpia-aldaketa ez da erreakzio hori gertatzeko egindako ibilbidearen menpeko; aitzitik, hasierako eta bukaerako egoerak bakarrik hartu behar dira kontuan. Beraz, erreakzio jakin bat beste bide batetik gertaraziz gero, entalpia-aldaketa berdina izango da bietatik.

Adibidez:



Hiru erreakzio horien balioak jakinda, lortuko al zenuke sodio kloruroaren formazio-entalpia tenperatura horretan?

Idatz dezagun sodio kloruroaren formazio-erreakzioa:



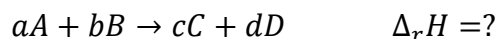
Idatzitako azkenengo erreakzio hori beste hiruak konbinatuz lor daiteke; elkarren batura eginez, hain zuzen ere.

Beraz, sodio kloruroaren formazio-entalpia aurreko hiru entalpien batura izango da:

$$\Delta_r H^0 = \Delta_f H^0 = -140,3 - 91,92 - 177,08 = -409,3 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

Hess-en legearen beste ondorioetako bat zera da: erreakzio bat alderantziz idaztean, zeinuz aldatu beharko dugu haren entalpia-aldaketa.

Itzul gaitezen, orain, formazio-entalpien erabilerara.



Erreakzio hori beste bide batetik lortzen saiatuko gara: lehenik, errektiboak beren elementuetan deskonposatuko ditugu, eta, ondoren, elkarrekin behar bezala konbinatuko dira elementu horiek, konposatuak emateko. Beraz, idatzita dagoen moduan, beste bide batetik lortutakoaren berdina izango da erreakzio horren entalpia-aldaketa. Erreaktiboak beren elementuetan deskonposatzea formazio-erreakzioaren aurkakoa da, hain zuzen ere ($-\Delta_f H(\text{erreaktiboak})$), eta produktuen formazio-entalpia izango da elementu horiek konbinatu eta produktuak ematea ($\Delta_f H(\text{produktuak})$). Beraz:

$$\Delta_r H = c \cdot \Delta_f H^0(C) + d \cdot \Delta_f H^0(D) - a \cdot \Delta_f H^0(A) - b \cdot \Delta_f H^0(B)$$

Eta, oro har:

$$\Delta_r H^0 = \sum_{\text{produktuak}} \nu_i \Delta_f H_i^0 - \sum_{\text{erreaktiboak}} \nu_i \Delta_f H_i^0$$

Beraz, edozein erreakzio aurrean dugula, nahikoa izango da erreakzio horretan azaltzen diren substantzia guztien formazio-entalpiak zein diren jakitea, eta, produktuen baturari errektiboena kenduta, erreakzio-entalpia kalkulatu dugu. (ν substantzia guztien koefiziente estekiometrikoak dira).

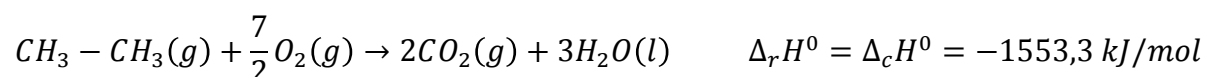
Errazagoa da substantzia guztien formazio-entalpiak taula batean gordetzea, erreakzio posible guztien entalpia-aldaketak jasotzea baino.

Konposatua	$\Delta_f H^0$ kJ mol ⁻¹	Konposatua	$\Delta_f H^0$ kJ mol ⁻¹
O ₃ (g)	142.1	HgO (s)	-90.62
H ₂ O (g)	-241.6	AgCl (s)	-126.9
H ₂ O (l)	-285.6	FeO (s)	-266.3
HCl (g)	-92.2	FeS (a, s)	-95.0
Br ₂ (g)	30.7	Al ₂ O ₃ (s)	-1668.2
N ₂ O (g)	81.5	MgCO ₃ (s)	-1111.9
NH ₃ (g)	-46.1	Ca(OH) ₂ (s)	-985.6
C (diamante) (s)	1.9	BaO (s)	-557.6
CH ₄ (g)	-74.8	NaOH (s)	-426.4
CH ₃ OH (l)	-238.3	NaCl (s)	-410.6
C ₂ H ₆ (g)	-84.6	Na ₂ SO ₄ (s)	-1383.2
C ₂ H ₅ OH (l)	-277.4	Na ₂ SO ₄ · 10 H ₂ O (s)	-4320
C ₆ H ₆ (g)	82.8	KF (s)	-562.0
SiO ₂ (s)	-858.6	KCl (s)	-435.4
PbO (s)	-219.0	KBr (s)	-391.8
ZnO (s)	-347.6	KI (s)	-327.3

2.1 taula: Zenbait konposaturen formazio-entalpia estandarrak

2.6.- ERREKUNTZA-BEROA EDO ERREKUNTZA-ENTALPIA

Askotan, formazio-entalpia neurtzea oso zaila da; beharbada, erreakzioa idatzita dagoen moduan gertatzen ez delako, edo etekina baxua duelako... Erreakzio-entalpiak lortzeko modu eraginkor bat errekuntza-erreakzioak erabiltzea da. Zer da errekuntza? Substantziek (gehienetan, organikoak) oxigenoarekin ematen duten erreakzioa. Gehienetan, produktuak karbono dioxidoa eta ura izango dira. Adibidez:



Baina, aldi berean, errekuntza-erreakzio horren entalpia produktuen formazio-entalpiak ken errektiboen formazio-entalpiak izango dira:

$$\Delta_r H^0 = \Delta_c H^0 = 3 \cdot \Delta_f H^0(H_2O(l)) + 2 \cdot \Delta_f H^0(CO_2(g)) - \Delta_f H^0(CH_3 - CH_3(g))$$

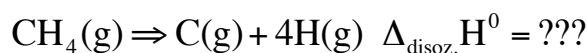
Oxigenoaren formazio-entalpiarik ez dugu jarri, zero izango baita. Beraz, ur likidoaren eta karbono dioxidoaren formazio-entalpiak ezagunak baldin badira, etanoaren errekontza-entalpiak aukera emango digu bere formazio-entalpia lortzeko.

Errekuntza-erreakzioak, normalean, oso-osorik gertatzen dira, eta, kalorimetro batean askatutako beroa neurtuz gero, modu fidagarria dira beste substantzia batzuen formazio-entalpiak lortzeko.

2.7.- LOTURA-ENERGIAK

Termokimikaren bidez, lotura kimiko baten indarra zenbatekoa den kalkula daiteke, lotura apurtzeko behar den batez besteko energia moduan, berriro ere Hess-en legeari esker.

C-H loturaren energia metanoa bere loturetan apurtzeko behar den energia moduan kalkula daiteke:



Baina gauza erraza al da erreakzio hori gertaraztea eta transferitutako beroa neurtzea? Ez. Baina Hess-en legea aplikatuko dugu. Erreakzio horren entalpia-aldaketa produktuen formazio-entalpiak ken erreaktiboena izango denez, idatz ditzagun formazio-erreakzio horiek:

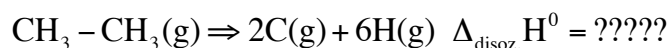


Hess-en legea aplikatuz gero, metanoaren disoziatze-erreakzioari dagokion entalpia-aldaketa beste hiruren konbinazioz lor daiteke:

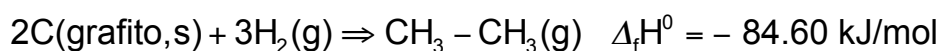
$$\Delta_{disoz} H^0 = 716,7 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} + 4 \cdot 218 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - \left(-74,81 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) = 1663,51 \text{ kJ}$$

Metanoaren disoziatze-erreakzioan, 4 lotura C-H apurtu dira; beraz, batez beste, C-H loturaren energia horren laurdena izango litzateke: 415,9 kJ.

Antzera egin daiteke beste substantzia batzuekin; adibidez, har dezagun etanoaren kasua:



Aurreko prozedura berari jarraituz:



Etanoaren disoziatze-entalpia lor daiteke:

$$\Delta_{disoz}H^{\circ} = 2 \cdot 716,7 \frac{kJ}{mol} + 6 \cdot 218 \frac{kJ}{mol} - 84,60 \frac{kJ}{mol} = 2826 \text{ kJ}$$

Disoziatze horretan, C-C lotura bat eta 6 lotura C-H apurtu dira; beraz, C-C loturari dagokion energia:

$$2826 \text{ kJ} = (C - C) + 6 \cdot 415,9 \text{ kJ}$$

$$E_{C-C} = 330,6 \frac{kJ}{mol}$$

Baina, metanoa eta etanoa erabili beharrean, beste konposatu batzuk erabil daitezke lotura-energia horiek kalkulatzeko, eta ezberdintasun txikiak agertzen dira beren artean. Horregatik, liburuetan ematen diren lotura-energien balioak zenbait esperimintutan lortutako emaitzen batezbestekoak dira.

Lotura mota	Disoziazio-energia (kJ/mol)
H-H	436
C-H	413
C-C	348
C=C	682
C≡C	962
N-H	391
O-H	463
C-O	351
C=O	732

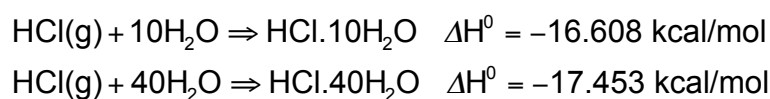
2.2. taula: Lotura batzuen energiak

2.8.- DISOLBATZE- ETA DILUITZE-BEROAK

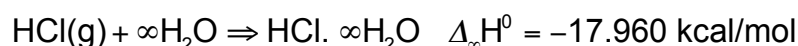
Erreakzio asko eta asko gertatzen dira disoluziotan, eta, gehienetan, ura izan ohi da disolbatzailea. Horregatik, askotan, jakin beharra dago zenbat bero askatu edo xurgatu den errektiboa/solutua disolbatutakoan.

Disolbatze-entalpia presio konstantean disolbatzaile kantitate bati solutu kantitate jakin bat gehitutakoan egondako entalpia-aldaketa izango da, eta, presio konstantean dagoenez, gertatutako bero-transferentzia izango da.

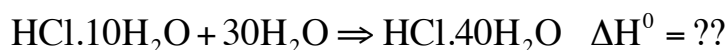
Baina kontuan hartu behar da zenbat solutu eta zenbat disolbatzaile dagoen, eta, horregatik, balioak moleko adierazten dira, hots, disolbatutako solutu mol bakoitzeko, baina disolbatzailea ere zehaztu egin beharko da:



Adibide horretan ikus daitekeen moduan, ur gehiago jarritakoan, disolbatze-beroa aldatu egiten da, asko ez bada ere. Disolbatzailearen kantitate batetik aurrera, disolbatze-beroa ez da gehiago aldatuko; diluzio infinituko disolbatze-beroa esaten zaio horri:



Bestalde, izenak dioen bezala, diluitze-beroa disoluzio bat gehiago diluitutakoan izandako entalpia-aldaketa izango da. Adibidez, Hess-en legea aplikatuz, diluitze honen entalpia-aldaketa kalkula daiteke:



$$\Delta_{\text{diluitze}}H = -17,453 - 16,608 = -0,845 \text{ kcal/mol}$$

2.9.- TEMPERATURAREN ERAGINA ERREAKZIO-BEROAN: KIRCHHOFF-EN EKUAZIOA

Egoera estandarra definitu dugunean, esan dugu substantziaren egoera normala dela 1 bar-eko presiopean eta T temperaturan. Eta zer gertatuko da erreakzio bat temperatura batean gertatu beharrean beste batean gertatuz gero? Erreakzio-entalpia aldatu egingo da temperaturarekin, eta, temperatura bateko entalpia-aldaketa zein den jakinda, Kirchhoff-en legea erabiliko dugu, beste temperatura batekoa kalkulatzeko. Erreakzio-entalpia nola dagoen definituta gogoratu:

$$\Delta_r H = \sum_i (v_i H_i)_{\text{produktuak}} - \sum_i (v_i H_i)_{\text{erreaktiboak}}$$

Temperaturarekin zer aldaketa duen jakin nahi dugunez, aurreko adierazpena deribatuko dugu, temperaturarekiko presioa konstante mantenduz:

$$\left(\frac{\partial \Delta_r H}{\partial T} \right)_p = \sum_i \left[v_i \left(\frac{\partial H_i}{\partial T} \right)_p \right]_{\text{prod}} - \sum_i \left[v_i \left(\frac{\partial H_i}{\partial T} \right)_p \right]_{\text{ere}}$$

Baina, entalpia presio konstantepeko beroa denez, temperaturarekiko deribatua bero-ahalmena izango da:

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$$

Bero-ahalmenak erabiliz, beraz:

$$\left(\frac{\partial \Delta_r H}{\partial T}\right)_p = \sum_i (\nu_i C_{p,i})_{prod} - \sum_i (\nu_i C_{p,i})_{erre}$$
$$\left(\frac{\partial \Delta_r H}{\partial T}\right)_p = \Delta C_p \quad \text{Kirchhoff-en ekuazioa}$$

Beraz, erreakzio baten entalpia-aldaketa tenperatura jakin batean zein den jakinez gero, beste tenperatura batean izango duen balioa kalkulatzeko, erreaktiboan eta produktuen bero-ahalmenak behar dira, eta, ondoren, integrala kalkulatu. ΔC_p produktuen bero-ahalmenen eta erreaktiboan bero-ahalmenen arteko kendura da, eta, kenketa hori egiteko, erreakzioan parte hartzen duten substantzia guztien koefiziente estekiometrikoak jakin behar dira. Kirchhoff-en ekuazioa integratuz gero:

$$\Delta_r H(T_2) = \Delta_r H(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p \cdot dT$$

Oro har, bero-ahalmena tenperaturaren menpeko izango da, eta, integrala askatzeko, haren adierazpen matematikoa zein den jakin behar dugu. Tenperatura-tartea oso handia ez denean, bero-ahalmenen kendura hori konstantetzat har daiteke, eta, kasu horretan, integrala askatzea bat-batekoa da.

$$\Delta_r H(T_2) = \Delta_r H(T_1) + \Delta C_p \cdot \Delta T$$

