

TERMO KONTROLA ERREPASATZEKO ARIKETAK. -EBAZPENAK

1. A) Kalkulatu erreakzio honen entalpia estandarra:  $C(s) + CO_2(g) \rightarrow 2 CO(g)$

Horretarako, erabili itzazu ekuazio termokimiko hauek:



B) Azaldu, kualitatiboki, erreakzio horren entropiaren aldaketa.

C) Irudikatu, gutxi gora behera, erreakzioari dagokion  $\Delta G$ -T grafikoa eta aztertu prozesu horren berezkitasunak duen tenperaturarekiko menpekotasuna.

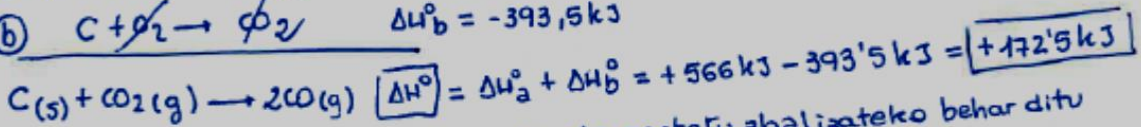
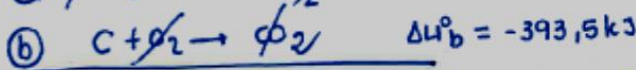
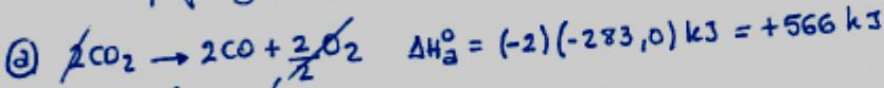
a)  $C(s) + CO_2(g) \rightarrow 2CO(g) \quad \Delta H^\circ = ?$

- 2 · ( $CO(g) + 1/2 O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ )  $\Delta H_a^\circ = (-283,0 \text{ kJ}) \cdot (-2)$

$C(s) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g) \quad \Delta H_b^\circ = -393,5 \text{ kJ}$

• Datu guztiak ez dira Formazio-ENTALPIA ALDAGETAK beraz HESS-en legea erabiliko dugu erreakzioaren entalpia aldaketa kalkulatzeko.

• Sinplifikazioak:



Beraz, erreakzioa endotermikoa da eta gertatu ahalizateko behar ditu 172,5 kJ bero eran.

b) Erreaktiboetan C solidoa da eta produktuz gaseoak dira, ondorioz desordena handitu da, beraz, entropia ere bai  $\Delta S \Rightarrow S_p > S_e \Rightarrow \Delta S = S_p - S_e \Rightarrow \Delta S > 0$

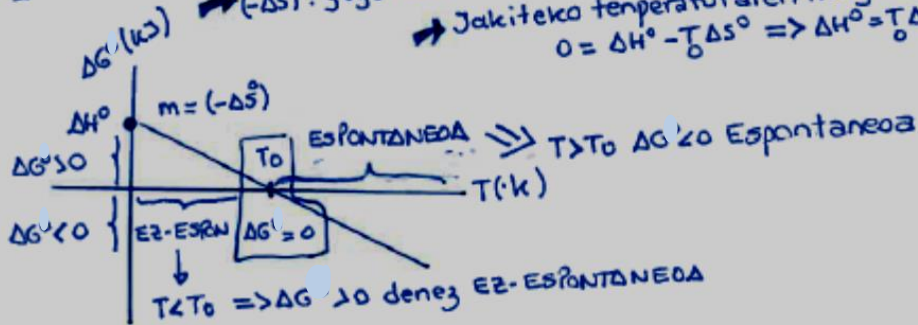
c)  $\Delta H^\circ = +172,5 \text{ kJ}$  ENDOTERMIKOA  $\Delta S^\circ > 0$  DESORDEUA HANDIPENA  $\Delta G^\circ$  (Gibbsen energia askea tenperatura ren menpekongo da)

$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$  edo  $\Delta G^\circ = \Delta H^\circ + (-\Delta S^\circ) \cdot T$  lerro zuzen batek forma izango du  $\Delta G^\circ/T$  diagramak.

$\Delta H^\circ$ :  $\Delta G^\circ$  ardatzeko zuzenaren jatorria

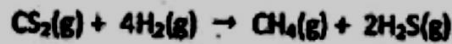
$(-\Delta S)$ : zuzenaren malda,  $\Delta S^\circ > 0$  denez malda negatiboa

Jakituko tenperatura ren muga  $\Rightarrow \Delta G^\circ = 0 \Rightarrow T_0$   
 $0 = \Delta H^\circ - T_0 \Delta S^\circ \Rightarrow \Delta H^\circ = T_0 \Delta S^\circ \Rightarrow T_0 = \frac{\Delta H^\circ}{\Delta S^\circ}$



TERMO KONTROLA ERREPASATZEKO ARIKETAK. -EBAZPENAK

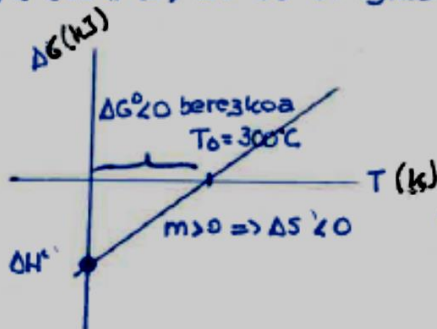
2. Honiako erreakzio hau berez gertatzen da  $300^{\circ}\text{C}$  azpitiko temperaturetan. (2 puntu)



Galdetzen da:

- Determina ezazu, era arrazoiatua, zelan izango den entropia aldaketaren zeinua. (0,8p)
- Irudika ezazu, gutxi gora behera, erreakzioari dagokion  $\Delta G$ -T grafikoa. (0,7p)
- Azal ezazu erreakzioa exotermikoa edo endotermikoa den. (0,5p)  
a) b) c)

$T < 300^{\circ}\text{C} \rightarrow \Delta G < 0$  berezkoa da. ( $\Delta G$  gibbs-en energia askea)



•  $\Delta G = \Delta H + (-\Delta S)T \rightarrow$  lerro zuzen baten forma  
↓  
zuzenaren malda  $m = -\Delta S$

•  $T < 300^{\circ}\text{C}$  berezkoa izateko  $\Delta H < 0$  negatiboa  
ijan behar du (EXOTERMIKOA) eta malda  
positiboa, beraz,  $\Delta S < 0$  (negatiboa).  
Ondorioz desordena gutxitzen da eta entropia  
ere bai  $S_p < S_e \Rightarrow \Delta S = S_p - S_e < 0$

• Erreakzioan ikusten denez substantzia guztiak gasosoak dira  
baina mol kopurua gutxitzen da (5 mol erreak. eta 3 mol produktuetan)  
beraz desordena gutxitzen dela baieztatzen du mol kopuru aldaketak.



TERMO KONTROLA ERREPASATZEKO ARIKETAK. -EBAZPENAK

3. 25 °C-an eta 1 atm-ko presioan  $2 \text{ ZnS}(s) + 3 \text{ O}_2(g) \rightarrow 2 \text{ ZnO}(s) + 2 \text{ SO}_2(g)$  erreakzioaren entalpia-aldaketa  $\Delta H = -884,4 \text{ kJ}$  dela jakinik, kalkula itzazu:

- Zink oxidoaren formazio-entalpia estandarra.
- 17 g zink sulfurok, oxigeno kantitate nahikoarekin, erreakzionatzean askaturiko energia.
- 17 g zink sulfurok erreakzionatzean askatzen den  $\text{SO}_2$ -aren bolumena baldintza estandarretan.
- 10 L ur 15°C-tik 25°C-ra berotzeko behar den zink sulfuro-masa, prozesuaren etekina %80 dela pentsatuta.

$\Delta H_f^\circ[\text{ZnS}(s)] = -202,9 \text{ kJ/mol}$     $\Delta H_f^\circ[\text{SO}_2(g)] = -296,8 \text{ kJ/mol}$

$R = 0,082 \text{ atm}\cdot\text{L}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ;   Uraren bero espezifikoa =  $4,18 \text{ kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ;   Uraren dentsitatea =  $10^3 \text{ kg/m}^3$

Masa atomikoak: O=16; S=32; Zn=65,4

a) Datu formazio entalpiak direnez:  $\Delta H^\circ = (\sum n \Delta H_f^\circ)_p - (\sum n \Delta H_f^\circ)_e$

$$\Delta H^\circ = \left( 2 \text{ mol} \cdot \Delta H_f^\circ_{\text{ZnO}} + 2 \text{ mol} \cdot \Delta H_f^\circ_{\text{SO}_2} \right)_p - \left( 2 \text{ mol} \cdot \Delta H_f^\circ_{\text{ZnS}} + 3 \text{ mol} \cdot \Delta H_f^\circ_{\text{O}_2} \right)_e$$

0 Elementua delako

$$-884,4 \text{ kJ} = 2 \text{ mol} \cdot \Delta H_f^\circ_{\text{ZnO}} + 2 \text{ mol} \cdot \frac{(-296,8) \text{ kJ}}{\text{mol}} - 2 \text{ mol} \cdot \frac{(-202,9) \text{ kJ}}{\text{mol}}$$

$$-884,4 \text{ kJ} = 2 \text{ mol} \cdot \Delta H_f^\circ_{\text{ZnO}} - 593,6 \text{ kJ} + 405,8 \text{ kJ}$$

$$2 \text{ mol} \cdot \Delta H_f^\circ_{\text{ZnO}} = -884,4 \text{ kJ} + 593,6 \text{ kJ} - 405,8 \text{ kJ} = -696,6 \text{ kJ}$$

$$\Delta H_f^\circ_{\text{ZnO}} = \frac{-696,6 \text{ kJ}}{2 \text{ mol}} = \boxed{-348,3 \text{ kJ/mol}}$$

=> 1 mol ZnO osatzeko elementuetatik abiatuta, subs.guztiak baldintza estandarretan, askatu den beroa adierazten du. (EXOTERMIKOA)

b) 17g ZnS  $\rightarrow \Delta H^\circ$ ? (2 mol ZnS  $\rightarrow \Delta H^\circ = -884,4 \text{ kJ}$  erreakziotik)

$M_{\text{ZnS}} = 65,4 + 32 = 97,4 \text{ g/mol}$

$$17 \text{ g ZnS} \cdot \frac{1 \text{ mol ZnS}}{97,4 \text{ g ZnS}} \cdot \frac{-884,4 \text{ kJ}}{2 \text{ mol ZnS}} = \boxed{-77,2 \text{ kJ}}$$

Askatzen den beroa 17g ZnS erretzean

c) 17g ZnS  $\rightarrow V_{\text{SO}_2}$ ? b.e)  $T = 298 \text{ K}$  (25°C) (Erreakziotik 2 mol ZnS  $\rightarrow$  2 mol  $\text{SO}_2$ )  
 $P = 1 \text{ atm}$ .

$$17 \text{ g ZnS} \cdot \frac{1 \text{ mol ZnS}}{97,4 \text{ g ZnS}} \cdot \frac{2 \text{ mol SO}_2}{2 \text{ mol ZnS}} = 0,17 \text{ mol SO}_2 \Rightarrow P \cdot V_{\text{SO}_2} = n_{\text{SO}_2} \cdot R \cdot T$$

Sortzen diren  $\text{SO}_2$  mola 17g ZnS erretzean.

$$\boxed{V_{\text{SO}_2}} = \frac{n_{\text{SO}_2} \cdot R \cdot T}{P} = \frac{0,17 \text{ mol} \cdot 0,082 \frac{\text{atm}\cdot\text{L}}{\text{mol}\cdot\text{K}} \cdot 298 \text{ K}}{1 \text{ atm}} = \boxed{4,15 \text{ L}}$$

$\text{SO}_2$  ren bolumena baldintza estandarretan.

d)  $V_{\text{H}_2\text{O}} = 10 \text{ L}$   $\xrightarrow{d=1 \text{ kg/L}}$   $m = 10 \text{ kg}$

$T_0 = 15^\circ\text{C}$   
 $T = 25^\circ\text{C}$   
 $\Delta T = 25 - 15 = 10 \text{ K}$

$m_{\text{ZnS}}$ ?  
 Etekin %80

• Zenbat bero behar duzun ura berotzeko:  
 $Q = m \cdot c \cdot \Delta T = 10 \text{ kg} \cdot 4,18 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}\cdot\text{K}} \cdot 10 \text{ K} = \boxed{418 \text{ kJ}}$

• 418 kJ lortuko ditugu ZnS berotzean:

$$418 \text{ kJ} \cdot \frac{2 \text{ mol ZnS}}{884,4 \text{ kJ}} \cdot \frac{97,4 \text{ g ZnS}}{1 \text{ mol ZnS}} \cdot \frac{100}{80} = \boxed{115,1 \text{ g ZnS}}$$

• behar duzuna  
 ZnS kantitate gehiago  
 behar duzu erreakzioaren etekina  
 %80 delako (ihesak daude)

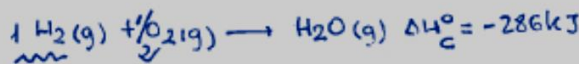
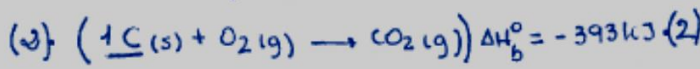
TERMO KONTROLA ERREPASATZEKO ARIKETAK. -EBAZPENAK

4. Azetileno ( $C_2H_2$ ) mol bat, karbono mol bat eta hidrogeno (molekular) mol bat erretzean askatzen dira, hurrenez hurren, 845kJ, 393 kJ eta 286kJ. (3 puntu)
- Kalkula ezazu azetilenoaren eraketa-entalpia (formazio-entalpia) molar estandarra eta idatz ezazu dagokion ekuazio termokimikoa (1'5p)
  - Egin ezazu azetilenoaren errektuntza erreakzioari dagokion entalpia-diagrama (0'5p)
  - Zenbat azetileno masa erre behar da baldintza estandarretan, 100 L ur berotzeko,  $17^\circ C$ -tik  $45^\circ C$ -ra, etekina %65a bada? (1p)

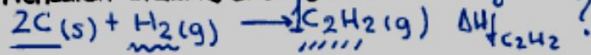
Datuak: Masa atomikoak: H =1, C =12.

Uraren bero espezifikoak,  $c_p = 4,18 \text{ kJ/kg.K}$ , uraren dentsitatea  $1000 \text{ Kg/m}^3$

a) Errektuntza erreakzioak idatziko ditugu eta beroa askatzen denez megafitoak izango dira.  $\Delta H$

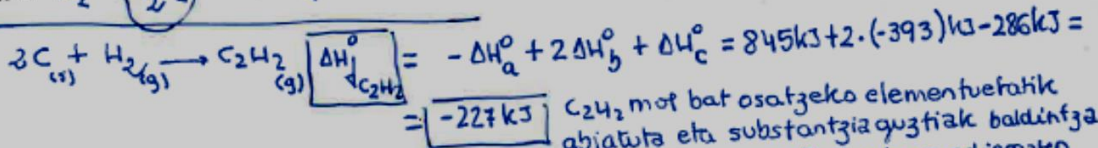
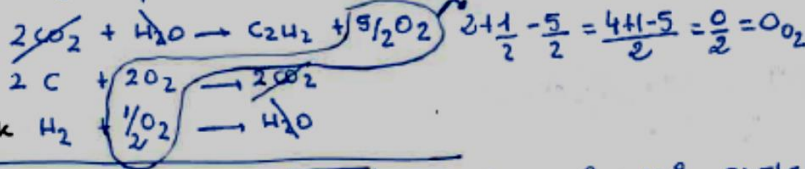


• Azetilenoaren ERAKETA erreakzioa:



(datuak ez dira formazio entalpiak beraz Hessen legea aplikatuko dugu)

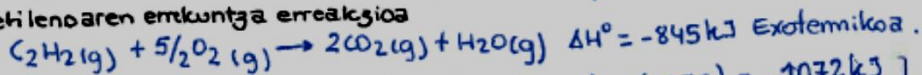
• Nola garatzen diren erreakzioak aldaketak aplikatu ondoren



$C_2H_2$  mol bat osatzeko elementuetatik abiatuta eta substantzia guztiak baldintza estandarretan, askatu den beroa adierazten du. Negatiboa denez prozesua EXOTERMIKOA da.

• Ekuazio termokimikoa:  $2C(s) + H_2(g) \rightarrow C_2H_2(g) + 227 \text{ kJ} // 2C(s) + H_2(g) \rightarrow C_2H_2(g) \Delta H^\circ = -227 \text{ kJ}$

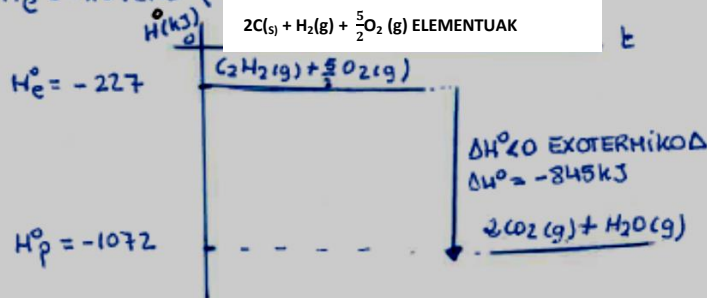
b) Azetilenoaren errektuntza erreakzioa



$$H_p^\circ = \sum m \Delta H_{f,p}^\circ = 2 \cdot \Delta H_{f,CO_2}^\circ + 1 \cdot \Delta H_{f,H_2O}^\circ = 2 \cdot (-393) + (-286) = -1072 \text{ kJ}$$

$$H_e^\circ = \sum n \Delta H_{f,e}^\circ = 1 \cdot \Delta H_{f,C_2H_2}^\circ + \frac{5}{2} \Delta H_{f,O_2}^\circ = -227 \text{ kJ}$$

$$\Delta H^\circ = H_p^\circ - H_e^\circ = -1072 \text{ kJ} - (-227 \text{ kJ}) = -845 \text{ kJ}$$



TERMO KONTROLA ERREPASATZEKO ARIKETAK. -EBAZPENAK

4.- c)  $m_{C_2H_2}$ ?  $\rightarrow$  % 65

b.e. ( $P=1\text{atm}$   $T=298\text{K}$ )

$$V_{H_2O} = 100\text{L} \xrightarrow{d=1\text{kg/L}} m_{H_2O} = 100\text{kg}$$

$$T_0 = 17^\circ\text{C} \quad \Delta T = 28^\circ\text{C} = 28\text{K}$$

$$T = 45^\circ\text{C}$$

1 mol  $C_2H_2$  erretzean  $-227\text{kJ}$  askatzen dira

• Ura berotzeko behar dugun beroa:

$$Q = m \cdot c_e \cdot \Delta T = 100\text{kg} \cdot \frac{4.18\text{kJ}}{\text{kg}\cdot\text{K}} \cdot 28\text{K} = 11.704\text{kJ}$$

• Erre behar den  $C_2H_2$  masa:

$$11.704\text{kJ} \cdot \frac{1\text{mol } C_2H_2}{227\text{kJ}} \cdot \frac{30\text{g } C_2H_2}{1\text{mol } C_2H_2} \cdot \frac{100}{65} = 2379,6\text{g } C_2H_2$$

$$M_{C_2H_2} = 2 \cdot 14 + 2 = 30\text{g/mol}$$

$\rightarrow$  aprobetxatzen da %65 denez  $C_2H_2$  masa gehiago erre behar duzu ihesaldi dardelako.



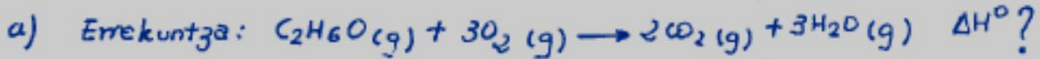
TERMO KONTROLA ERREPASATZEKO ARIKETAK. -EBAZPENAK

5.-a) Idatzi etanolaren errektuntza-erreakzioa, eta kalkulatu dagokion entalpia, baldintza estandarretan. Etanolaren, karbono dioxidoaren eta uraren formazio-entalpia estandarrek ( $\Delta H_f^\circ$ ), hurrenez hurren -278, -394 eta -286 KJ/mol dira.

b) Idatzi ekuazio termokimikoa eta egin dagokion diagrama entalpikoa.

c) Kalkulatu zelan den erre beharko den etanol-kantitatea, 200g ur 8°C-tik 98°C-ra berotzeko, suposatuz sortutako beroaren %50a baino ez dela aprobetxatzen.

**DATUAK:** Ce ura=4,18 KJ/kg.K. Masa atomikoak: H=1 ; C=12 ; O= 16



DATUAK :  $\Delta H_f^\circ$  (kJ/mol)



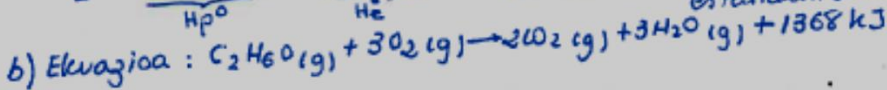
Datuak formazio-entalpiak direnez :  
 $\Delta H^\circ = (\sum n \Delta H_f^\circ)_p - (\sum n \Delta H_f^\circ)_e$   
 o elementua delako

$$\Delta H^\circ = \underbrace{(2 \cdot \Delta H_f^\circ \text{CO}_2 + 3 \cdot \Delta H_f^\circ \text{H}_2\text{O})}_H - \underbrace{(\Delta H_f^\circ \text{C}_2\text{H}_6\text{O} + 3 \Delta H_f^\circ \text{O}_2)}_e =$$

$$= \left( 2 \text{mol} \cdot \frac{(-394) \text{kJ}}{\text{mol}} + 3 \text{mol} \cdot \frac{(-286) \text{kJ}}{\text{mol}} \right) - \left( -278 \text{kJ} \right) =$$

$$= \frac{-1646 \text{kJ}}{H_p} - \frac{(-278 \text{kJ})}{H_e} = \boxed{-1368 \text{kJ}}$$

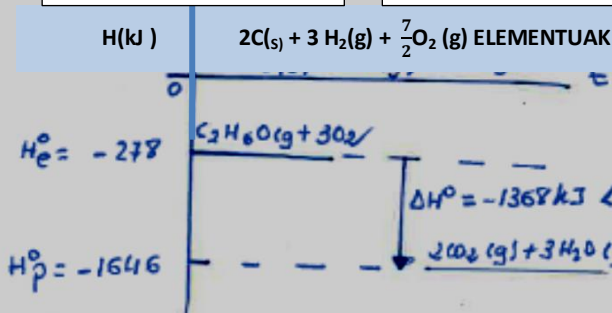
Etanolaren mol bat erretzean askatzen den beroa baldintza estandarretan. Erreakzio EXOTERMIKOA



ENTALPIA/DENBORA GRAFIKOA

$H_e^\circ = -278 \text{ KJ}$   
 $H_p^\circ = -1646 \text{ KJ}$

$\Delta H^\circ = H_p^\circ - H_e^\circ = -1646 \text{KJ} - (-278 \text{KJ}) = -1368 \text{KJ}$  erreakzio exotermikoa da.  
 $H_p^\circ < H_e^\circ$



$\Delta H^\circ = -1368 \text{kJ} < 0$  Exotermikoa  $\rightarrow$  produktuen entalpia eraktiboena baino txikiagoa energia askatu delako.

## TERMO KONTROLA ERREPASATZEKO ARIKETAK. -EBAZPENAK

c)  $m_{C_2H_6O}$  ? %50  
 $m_{H_2O} = 200g = 0.2kg$   
 $T_0 = 8^\circ C > \Delta T = 90^\circ C = 90K$   
 $C_e = 4.188 kJ/kg K$

Beharrezkoa den bero ura berotzeko:  
 $Q = m \cdot C_e \cdot \Delta T = 0.2kg \cdot 4.188 kJ/kg \cdot K \cdot 90K = 75,24 kJ$

Bero hau erreaktzatik lortuko dugunez kontuan hartu behar dugu erreakzioaren aprobetxamendua, horretatik etanolaren kantitatea bikoitza izan behar du giurtatzeko lortzen dugun beroa nahikoa dela ura berotzeko.

Ere behar den etanolaren masa 75,24 kJ lortzeko kontuan hartuta erreaktzaren aprobetxamendua %50 dela.

$75,24 kJ \cdot \frac{1 mol C_2H_6O}{1368 kJ} \cdot \frac{46g C_2H_6O}{1 mol C_2H_6O} \cdot \frac{100}{50} = 5,06g C_2H_6O$

$M_{C_2H_6O} = 2 \cdot 12 + 6 + 16 = 46g/mol$

### 6.-Prozesu honen entalpia-aldaketa:



a) Zehaztu ezazu prozesuaren entropia-aldaketa.

b) Azaldu zer temperatura tartean erreakzioa berezkoa izango den.

c) Espontaneo izango da baldintza estandarretan?. Demostratu matematikoki.

**DATUAK:**  $S^\circ (J/mol \cdot K)$ :  $CO(g)=197,7$ ;  $H_2(g)=130,7$ ;  $CH_3OH(g)=239,8$ .

$$\Delta S^\circ = (\sum n S^\circ)_p - (\sum n S^\circ)_e = (1 mol S^\circ_{CH_3OH})_p - (1 mol S^\circ_{CO} + 2 mol S^\circ_{H_2})_e$$

$$= 1 mol \cdot \frac{239,8 J}{mol \cdot K} - 1 mol \cdot \frac{197,7 J}{mol \cdot K} - 2 mol \cdot \frac{130,7 J}{mol \cdot K} = -219,3 \frac{J}{K}$$

Erreakzioaren entropia aldaketa negatiboa denez entropia gutxitu egin da  $\Rightarrow S^\circ_p < S^\circ_e$  beraz desordena gutxitu da.

Erreakzioa ikusita, substantzia guztiak gaseosoak dira, baina mol kopuru gutxiago dago produktuen aldean, beraz desordena gutxitu da.  $\Delta n = n_p - n_e = 1 - 3 = -2 mol$  gutxipena  $n_p < n_e$

b) **Espontaneitatea** aztertzeko **Gibbsen energia askea** behar dugu:  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$

Gibbsen energia askea entalpia aldaketaren, entropia aldaketaren eta tenperaturaren menpe dago. Gure kasuan:

$$\Delta S = -219,3 \cdot 10^{-3} \frac{KJ}{K} \text{ desordena molekularra gutxitu da eta ondorioz entropia ere bai.}$$

$\Delta H = -90,2 KJ$  erreakzioa exotermikoa da, energia askatzen da bero eran.

**Erreakzioa berezkoa izateko  $\Delta G < 0$ .**

Aztartzeko menpekotasuna tenperaturarekin  $\Delta G/T$  grafikoa egingo dugu, kontuan hartuta lerro zuzen bat dela.  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S \rightarrow \Delta G = \Delta H + T(-\Delta S)$

- $\Delta H$  zuzenaren lehenengo puntua ( $T=0 K$ ).
- $(-\Delta S)$  zuzenaren malda, gure kasuan malda +

## TERMO KONTROLA ERREPASATZEKO ARIKETAK. -EBAZPENAK

Jakiteko zuzenak zer tenperatutatan T ardatza mozten duen:

$$\Delta G = 0 \text{ (oreka baldintza).} - 0 = \Delta H - T_0 \Delta S \rightarrow \Delta H = T_0 \Delta S$$

$$T_0 = \frac{\Delta H}{\Delta S} = \frac{-90,2 \text{ KJ}}{-219,3 \cdot 10^{-3} \frac{\text{KJ}}{\text{K}}} = 411,31 \text{ K OREKAKO TENPERATURA (produktuak osatzeko joera eta$$

erreaktiboak osatzeko joera berdina dira)

