

# TERMOKIMIKA SELEK 2021

2021 EKAINA

C1. Erreakzio kimiko batek 300 K-an balio termodinamiko hauek ditu:  $\Delta G = -500 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}$  eta  $\Delta S = 10 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ . Kalkula ezazu:

- a) Erreakzioaren  $\Delta H$ -a tenperatura horretan. (0,75)
- b)  $\Delta H$  eta  $\Delta S$  tenperaturarekin ez direla aldatzen onartuz gero, kalkula ezazu zer tenperaturatik gora izango den espontaneoaren erreakzioa. (0,75)

DATUAK:

$T = 300 \text{ K}$

$\Delta G = -500 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$

$\Delta S = 10 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$

OHARRA

- Magnitudeak neurtuta daude 300k-tan, beraz, ez baldintza estandarretan (298k), horregatik ez daude adierazita  $\Delta G^\circ$  eta  $\Delta S^\circ$
- Unitateak sistema berean daudenez horrela utziko ditugu.

$\Delta G$ : GIBBSEN ENERJIA ASKEA.

$\Delta H$ : ENTALPIA ALDAKETA

$\Delta S$ : ENTROPIA ALDAKETA

a) Magnitude termodinamikoaren arteko erlazioa:  $\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$

Entalpia askatuko dugu:  $\Delta H = \Delta G + T \cdot \Delta S$

$$\Delta H = -500 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + 300 \text{ K} \cdot 10 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} = +2500 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Erreakzioa ENDOTERMIKOA da  $\Delta H > 0$ , beraz, erreakzioak energia xurgatu du berean.

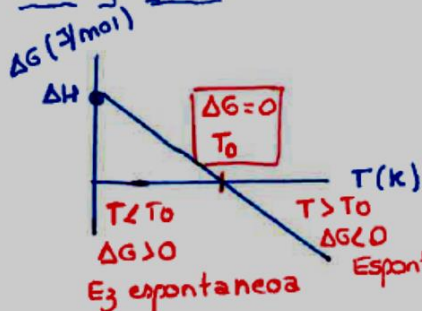
b)  $\Delta H = +2500 \text{ J/mol} \rightarrow$  ENDOTERMIKOA

$\Delta S = +10 \text{ J/mol K} \rightarrow$  ENTROPIA (desorden molekularra) handipena.

Jakiteko espontaneo den ala ez GIBBSEN energia askea ( $\Delta G$ ) tenperaturaren funtzioan ezagutu behar dugu:  $\Delta G = \Delta H - T \Delta S \rightarrow \Delta G/T$  lerro zuzen bat da.

- Zuzenaren hasierako puntua:  $T=0 \text{ K} \Rightarrow \Delta G = \Delta H = 2500 \text{ J/mol}$
- Zuzenaren malda:  $\Delta S = +10 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} \Rightarrow$  malda negatiboa.

$\Delta G/T$  grafikoa



- Zuzenak oreka tenperaturan mozten du  $T$  ardatza, beraz oreka baldintza  $\Delta G = 0$  aplikatuko dugu  $T_0$  kalkulatzeko:

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S \quad \Delta G = 0 \rightarrow \Delta H = T_0 \cdot \Delta S \rightarrow T_0 = \frac{\Delta H}{\Delta S}$$

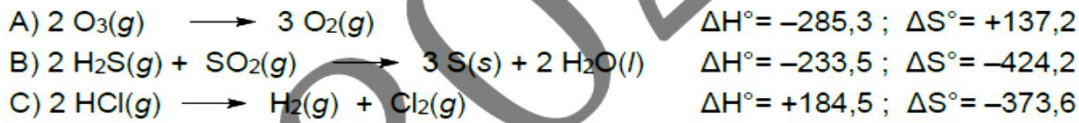
$$T_0 = \frac{2500 \text{ J/mol}}{10 \text{ J/mol K}} = 250 \text{ K}$$

Temperatura muga ez espontaneotik espontaneoera pasatzeko.

Temperatura 250k baino altuagoa denean prozesua espontaneo da.

2021 UZTAILA

A3. Erreakzio hauek eta haien  $\Delta H^\circ$  (KJ-tan) eta  $\Delta S^\circ$  ( $J \cdot K^{-1}$ ) balioak kontuan hartuz:



- a) Adierazi zein erreakzio ez den izango espontaneo inolako tenperaturan. (0,75)  
 b) Arrazoitu zein erreakzio izango den espontaneo edozein tenperaturan. (0,75)  
 c) Adierazi zein erreakzio pasatuko den ez-espontaneo izatetik espontaneo izatera tenperatura aldatuz gero. Zer tenperaturan ( $^\circ C$ -tan) gertatuko da aldaketa hori? (1,00)

a) Espontaneitatea agertzeko erreakzioaren Gibbsen energia askearen aldaketa agertu behar da ( $\Delta G$ ),  $\Delta G < 0$  erreakzioa espontaneoa izango da.  $\Delta G > 0$  ez-espontaneo. Entalpia aldaketa eta entropia aldaketa ezagunak direnez haien erlazioa  $\Delta G$ -rekin eta suposatuz  $\Delta H^\circ$  eta  $\Delta S^\circ$  ez direla aldatzen tenperaturarekin:

$$\Delta G = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ \rightarrow \Delta G > 0 \text{ izateko edozein tenperatura:}$$

- $\Delta G = (+) - T \cdot (-) = (+)$  beti
- $\Delta H^\circ > 0$  erreakzio endotermikoa
- $\Delta S^\circ < 0$  entropiaren murrizketa eta ondorioz desordena ere txikiagotzen da
- c) erreakzioak betetzen ditu baldintzak

- b) Espontaneo izateko edozein  $T$ -tan  $\Delta G < 0$  izan behar du, horretarako:
- $\Delta H < 0$  erreakzio exotermikoa
  - $\Delta S > 0$  entropiak handitu behar du, desorden molekularra ere bai
  - a) erreakzioa izango da.

c)  $\Delta G = \Delta H^\circ + T(-\Delta S)$  lerrozuzen baten forma dauka eta b) erreakzioetako

- Hasierako puntua  $T=0 \Rightarrow \Delta G = \Delta H^\circ = -233,5 \text{ kJ}$  EXOTERMIKOA  $\Delta H^\circ < 0$
- Zuzenaren malda  $m = -\Delta S \Rightarrow m = -(-424,2 \cdot 10^{-3}) \frac{\text{kJ}}{\text{K}} = +424,2 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}}$  DESORDEN TXIKI PENA  $\Delta S^\circ < 0$



• Zuzenak  $T$  erdatza  $T_0$ -n mozten du, oreka tenperatura, puntu honetan  $\Delta G = 0$  delako eta hau da oreka baldintza. Hau erabiliko dugu  $T_0$  kalkulatzeko:

$$\Delta G = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ \xrightarrow{\text{OREKAN}} 0 = \Delta H^\circ - T_0 \cdot \Delta S^\circ$$

$$\boxed{T_0} = \frac{\Delta H^\circ}{\Delta S^\circ} = \frac{-233,5 \text{ kJ}}{-424,2 \cdot 10^{-3} \text{ kJ}} = \boxed{550,4 \text{ K}}$$

- Tenperatura muga erreakzioa espontaneetik ez-espontaneo pasatzeko.
- $T < 550,4 \text{ K} \rightarrow \Delta G < 0$  espontaneo
- $T > 550,4 \text{ K} \rightarrow \Delta G > 0$  ez-espontaneo
- $T = 550,4 \text{ K}$  erreakzioaren  $\Delta G = 0$ , erreakzioa orekan dago, hau da, joera erreaktiboa produktuetara pasatzeko eta joera erreaktiboa produktuetatik erreaktiboei pasatzeko berdizak dira.