

TERMOKIMIKA ARIKETAK.-SELEKTIBITATEA 2019.-EBAZPENAK

2019EAG1

G1. Erreakzio jakin baten $\Delta H^\circ = 8,46 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ da eta $\Delta S^\circ = 21,62 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ da 25°C -an. Azaldu ea 25°C -an baieztapen hauek zuzenak ala okerrak diren, eta arraioitu erantzunak.

- a) Erreakzioa endotermikoa da. (0,50)
 b) Erreakzioan, gutxitu egiten da desordena. (0,50)
 c) Erreakzioa espontaneo da. (0,50)

a) Egia da : $\Delta H^\circ = +8'46 \text{ kJ/mol}$ (EGIA)

Entalpia aldaketa egoera jurtjioa deneg definitzen da $\Delta H_e^\circ = H_p^\circ - H_e^\circ$

$\Delta H^\circ > 0$ deneg $\rightarrow H_p^\circ > H_e^\circ$, erreakzioa gertatzeko

jurgatuko du energia bero eran, ondorioz prozesua ENDOTERMIKO DA.

• p : produktua.
 • e : erreaktiboak.

b) Desordena gutxitu egiten da

(GEZURRA) :

Desordena neurtzeko, entropia (s) erabiltzen da, erreakzio kimiko batean entropia aldaketa egoera jurtjioa deneg $\rightarrow \Delta S^\circ = S_p^\circ - S_e^\circ$

kasu honetan $\Delta S^\circ = +21'62 \text{ kJ/K}$, beraz $S_p^\circ > S_e^\circ$ ondorioz produkuen entropia erreaktiboena baino handiagoa da, eta orduan desordena ere handitzen da.

c) Erreakzio kimiko batean berezkatasuna Gibbs energiaren balioa ezaugaritu behar dugu : $\Delta G = \Delta H - T\Delta S < 0$ espontaneo izateko.

$$\text{Gure kasuan } T = 25^\circ\text{C} = 298 \text{ K} \Rightarrow \Delta G = 8'46 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - 298 \text{ K} \cdot 21'62 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$$

$$= 2'01 \text{ kJ/mol} \rightarrow \Delta G > 0 \text{ deneg ez da espontaneo } 25^\circ\text{C-tan}$$

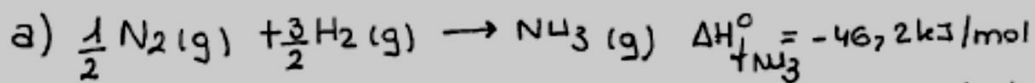
TERMOKIMIKA ARIKETAK.-SELEKTIBITATEA 2019.-EBAZPENAK

2019UAP2

P2. Datu hauek emanda: ΔH_f° (kJ·mol⁻¹): NH₃ (g) = -46,2

S° (J·mol⁻¹·K⁻¹): N₂ (g) = 191 ; H₂ (g) = 130 ; NH₃ (g) = 192,3

- Idatz ezazu amoniakoaren formazio-ekuazioa. Zer energia kantitate (1,00) trukutzen da (askatzen edo xurgatzen den adierazi behar duzu) 20 L NH₃(g), baldintza normaletan neurtuak, lortzen direnean?
- Kalkula ezazu amoniakoaren formazio-erreakzioaren entropia-aldaketa. (0,75) Erreakzioaren estekiometriaren arabera, zein espero da izatea prozesu honen entropiaren aldaketaren zeinua?
- Espontaneo izango al da amoniakoaren formazioa 25 °C-an? (0,75)



- Formazio erreakzioa: 1 mol amoniako osatzeko elementuetatik abiatuta eta substantzia guztiak baldintza estandarretan.

20 L NH₃ b.n lortzeko → ΔH° ?

- Erreakzioaren estekiometria kontuan hartuta eta edozein gasaren mol baten bolumena b.n.-etan 22,4 L-koa dela:

$$20 \cancel{\text{L NH}_3} \cdot \frac{1 \text{ mol NH}_3}{22,4 \cancel{\text{L/b.n}}} \cdot \frac{-46,2 \text{ kJ}}{1 \text{ mol NH}_3} = -41,25 \text{ kJ}$$

- Exotermikoa denez $\Delta H^\circ < 0$ energia askatzen da bero eran. $H_p^\circ < H_e^\circ$ baldintza estandarretan.

b) $\Delta S^\circ = (\sum n S^\circ)_p - (\sum n S^\circ)_e \rightarrow$ datuak entropia molar estandarrek direnez hurrengo formula erabiliko dugu (Hessen legearen ondorioa da)

$$\Delta S^\circ = 1 \text{ mol } S_{NH_3}^\circ - \left(\frac{1}{2} \text{ mol } \cdot S_{N_2}^\circ + \frac{3}{2} \text{ mol } \cdot S_{H_2}^\circ \right) = 1 \text{ mol} \cdot \frac{192,3 \text{ J}}{\text{mol K}} - \left(\frac{1}{2} \text{ mol} \cdot \frac{191 \text{ J}}{\text{mol K}} + \frac{3}{2} \text{ mol} \cdot \frac{130 \text{ J}}{\text{mol K}} \right) \Rightarrow$$

$$\Delta S^\circ = -98,2 \frac{\text{J}}{\text{K}}$$

$\Delta S^\circ < 0 \rightarrow$ egoera jontzia denez $\Delta S^\circ = S_p^\circ - S_e^\circ \rightarrow S_p^\circ < S_e^\circ$ entropia gutxi da eta desordena molekularra ere bai. Erreakzioan mol kopurua gutxitzen da eta honek baieztatzen du entropiaren gutxipena.

c) $T = 298 \text{ K} \rightarrow \Delta G^\circ < 0$ espontaneoa? \rightarrow gibbu energia askea kalkulatu behar dugu jakiteko espontaneoa den ala ez.

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ = -46,2 \text{ kJ} - 298 \text{ K} \left(-98,2 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}} \right) = -16,93 \text{ kJ}$$

- $\Delta H^\circ = -46,2 \text{ kJ}$
- $\Delta S^\circ = -98,2 \frac{\text{J}}{\text{K}} = -98,2 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}}$
- $T = 298 \text{ K}$

• $\Delta G^\circ < 0$ $T = 298 \text{ K}$ denean, baldintza estandarretan, berezkoa izango da.

2019UBG1

G1. Erreakzio kimiko batean, hau betetzen da: $\Delta H^\circ = +10,2 \text{ kJ}$ eta $\Delta S^\circ = +45,8 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$. Adierazi, arrazoituz, ea baieztapen hauek egia edo gezurra diren:

- a) Erreakzioak energia askatzen du bero gisa. (0,50)
- b) Erreakzioaren produktuak ordenatuago daude erreaktiboak baino. (0,50)
- c) 25°C -an erreakzioa ez da espontaneoa. (0,50)
- d) Erreakzioa espontaneoa da edozein temperaturatan, entropia handitzen delako. (0,50)

$$\Delta H^\circ = +10,2 \text{ kJ}$$

$$\Delta S^\circ = +45,8 \text{ J/K}$$

a) Ez, energia ez da askatzen jurgatzen da baizik. \rightarrow **GEZURRA**.

$\Delta H^\circ > 0$ ENDOTERMIKOA DA. ΔH° egoera jurtzioa denez $\Delta H^\circ = H^\circ_p - H^\circ_e$ beraz $H^\circ_p > H^\circ_e$ produktuen entalpia erreaktiboena baino handiagoa denez, energia bero moduan xurgatu da erreakzioa gertatu ahal izateko.

b) Produktuak ordenatuago daude? \rightarrow **GEZURRA**

Entropiak desordena molekularra neurtzen du. Entropia egoera jurtzioa denez $\Delta S^\circ = S^\circ_p - S^\circ_e \Rightarrow S^\circ_p > S^\circ_e$ produktuen entropia erreaktiboena baino handiagoa denez, desordena molekularra ere handiagoa izango da, ondorioz, produktuak ez daude ordenatuago.

c) $T = 25^\circ\text{C}$ ez da espontaneoa. \rightarrow GEZURRA

Hau irrogatzeko Gibbse energia askea eragutu behar dugu. ΔG -ren eta entalpia, entropia eta tenperaturaren menpekotasuna, hurrengo da:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad T = 25^\circ\text{C} \quad \Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \cdot \Delta S^\circ = 10,2 \text{ kJ} - 298 \text{ K} \cdot 45,8 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}}$$

b.e.

$$\bullet \Delta H^\circ = 10,2 \text{ kJ}$$

$$\bullet \Delta S^\circ = 45,8 \frac{\text{J}}{\text{K}} = 45,8 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}}$$

$$\bullet T = 25^\circ\text{C} + 273 = 298 \text{ K}$$

$$\Delta G^\circ = -3,45 \text{ kJ}$$

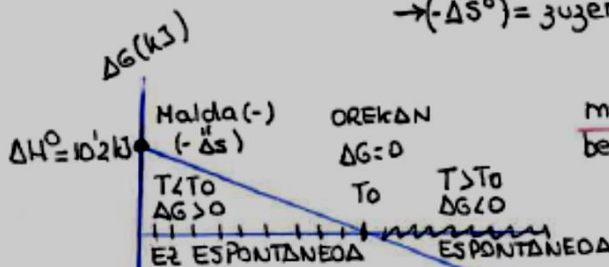
$\bullet \Delta G^\circ < 0$ denez erreakzioa espontaneoa izango da baldintza estandarretan.

d) Edozein T -tan berezkoa da $\Delta S > 0$ delako. \rightarrow GEZURRA

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S^\circ \rightarrow \Delta G/T \text{ grafikoa lerro zuzen bat da}$$

$\rightarrow T = 0 \text{ K}$ $\Delta G = \Delta H^\circ$ hasierako puntua. $\Delta H^\circ = 10,2 \text{ kJ}$

$\rightarrow (-\Delta S^\circ) =$ zuzenaren malda. $= -45,8 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}}$ (beheraka)



\bullet Zuzenak T -ardatza oreka tenperatura mugten du (T_0). T_0 tenperatura mugudenez berezotasuna jakiteko, kalkulatuko dugu:

$$\Delta G = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ \quad \Delta G = 0 \quad T = T_0 \quad 0 = \Delta H^\circ - T_0 \Delta S^\circ$$

$$T_0 = \frac{\Delta H^\circ}{\Delta S^\circ} = \frac{10,2 \text{ kJ}}{45,8 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}}} = 222,7 \text{ K}$$

\bullet Grafikoa ikusten denez:

$T > 222,7 \text{ K}$ erreakzioa ESPONTANEOA DA Gibbse energia askearen aldeketa negatiboa delako. $\Delta G < 0$
 $T < 222,7 \text{ K}$ erreakzioa EZ-ESPONTANEOA izango da $\Delta G > 0$ delako.

\bullet Ondorioz $\Delta S > 0$: erreakzioa ez da berezkoa edozein T -tan baina $222,7 \text{ K}$ baino handiagoa bada. $\Delta S > 0$ eta $\Delta H > 0$ direnean berezotasuna tenperaturaren menpe dago.