

2023EC2

C2. Erreakzio kimiko baten entalpia-aldaketa $-94,6 \text{ kJ mol}^{-1}$ da eta entropia-aldaketa aldiz, $-189,1 \text{ J mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Magnitude hauek temperaturarekin aldatzen ez badira:

- a) Kalkulatu zein temperaturatan dagoen sistema orekan. (0,75)
 b) Kalkulatu zein temperaturatik aurrera den erreakzioa berezkoa (espontaneo). (0,75)

$$\Delta H = -94,6 \text{ kJ/mol} \rightarrow \text{Exotermikoa}$$

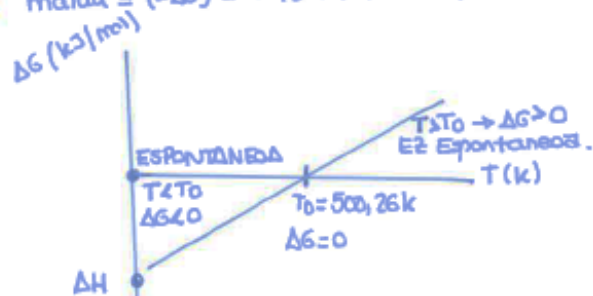
$$\Delta S = -189,1 \frac{\text{J}}{\text{mol K}} \cdot \frac{1 \text{ kJ}}{10^3 \text{ J}} = -189,1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{mol K}} \rightarrow \text{S} \downarrow \text{ desordena} \downarrow$$

- a) Energia askearen murrizketasuna temperaturarekin kontuan hartuz: $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ orekan egoteko $\Delta G = 0$

$$\begin{aligned} \downarrow \Delta G = 0 \\ 0 = \Delta H - T_0 \Delta S \Rightarrow \boxed{T_0} = \frac{\Delta H}{\Delta S} = \frac{-94,6 \text{ kJ/mol}}{-189,1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{mol K}}} = \boxed{500,26 \text{ K}} \end{aligned}$$

- Oreka tenperatura, tenperatura muga da erreakzioa espontaneotik ez espontaneora pasatzeko edo alderantziz.

- b) $\Delta G = \Delta H - T\Delta S \rightarrow \Delta G/T$ grafikoa lerrozuzena da
 $\rightarrow T=0 \text{ K}$ denean $\Delta G = \Delta H = -94,6 \text{ kJ/mol}$
 \rightarrow malda = $(-\Delta S) = +189,1 \cdot 10^{-3} \text{ kJ/mol K}$



- Tenperatura $500,26 \text{ K}$ baino txikiagoa bada erreakzioa espontaneoa izango da, $\Delta G < 0$ gibbu energia aldatuta negatiboa delako.

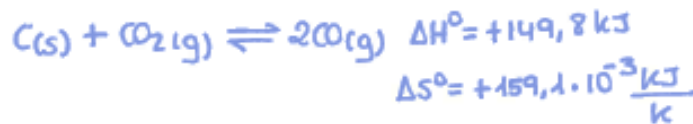
2023UC4

C4. Erreakzio honen ΔH° eta ΔS° balioak tenperaturaren menpe ez daudela onartuz,



- a) Adierazi ea erreakzioa espontaneo izango den 25 °C-an. (0,50)
- b) Adierazi ea erreakzioa espontaneo izango den 1.000 °C-an. (0,50)
- c) Zer tenperaturan (°C-tan) aldatuko da espontaneo ez izatetik espontaneo izatera? (0,50)

2023 UC4



a) Espontaneitatea jakiteko energia askearen aldaketaren ikurra (ΔG) jakin behar dugu; kasu honetan ΔH° eta ΔS° ezagunak direnez hurrengo formula erabiliko dugu:

$$\Delta G_1^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ = 149,8 \text{ kJ} - 298 \text{ K} \cdot 159,1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}} \approx \boxed{102,39 \text{ kJ}}$$

↓
be-tan 25°C = 298 k

• $\Delta G^\circ > 0$ denez baldintza estandarretan erreakzioa ez da espontaneo.

b) $T = 1000 \text{ °C} + 273 = 1273 \text{ k}$

$$\Delta G = 149,8 \text{ kJ} - 1273 \text{ K} \cdot 159,1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}} = \boxed{-52,73 \text{ kJ}}$$

100°C-tan erreakzioa espontaneo da $\Delta G < 0$ delako.

c) Oreka tenperatura edo tenperatura mugia erreakzioa pasatzeke espontaneotik ez-espontaneora edo alderantziz, kalkulatu behar dugu.

$$\text{Orekan } \Delta G = 0 \Rightarrow \Delta G = \Delta H^\circ - T_0 \Delta S^\circ \Rightarrow 0 = \Delta H^\circ - T_0 \Delta S^\circ \Rightarrow T_0 = \frac{\Delta H^\circ}{\Delta S^\circ}$$

$$\boxed{T_0} = \frac{149,8 \text{ kJ}}{159,1 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{K}}} \approx \boxed{941,55 \text{ k}}$$



• $\Delta G/T$ diagrama kontuan hartuz leku zuzena denez:

- $T = 0 \text{ K} \rightarrow \Delta G = \Delta H^\circ$
- maldak $= (-\Delta S) = \ominus$

• $T > 941,55 \text{ k}$ erreakzioa espontaneo da $\Delta G < 0$ delako.