

# GIBBS-en ENERGIA

## ERREAKZIOEN ESPONTANEITATEA



PAZ

TERMODINAMIKAREN  
HELBURURIK  
NAGUSIENA DA  
JAKITEA PROZESU BAT  
BEREZKOA DEN ALA EZ

ESPONATENOA



EZ ESPONTANEOA



espontáneo



espontáneo



espontáneo

espontáneo



no espontáneo

# GIBBS-en ENERGIA / ENERGIA ASKEA

PENTSA DEZAKEGU prozesu bat ,  $\Delta H < 0$ , EXOTERMIKOA eta DESORDENA HANDITZEN BADA ,  $\Delta S > 0$ , ESPONTANEOA izango dela.  
BAINA ZER GERTATZEN DA ENDOTERMIKOA BADA EDO DESORDENA GUTXITZEN BADA?

Bai entalpia aldaketa bai entropiaren aldaketa kontuan hartu behar ditugu jakiteko prozesu bat berezkoa den ala ez. Temperaturaren eragina ere kontuan hartu behar da. Horretarako beste magnitude termodinamiko berri bat definitzen da:

GIBBS-en energia edo ENERGIA ASKEA (G)

Gibbs-en energia askea:  $G = H - T \cdot S$  (KJ)

- Egoera funtzioa
- Magnitude estensiboa

OREKA EGOERAN  $\Delta G^\circ = 0$   
MUGA JAKITEKO ERREAKZIOA  
ESPONTANEOA DEN ALA EZ.

Aldakuntzetan, erreakzioetan:  $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$

$\Delta G < 0$  prozesu espontaneo

$\Delta G > 0$  prozesu ez espontaneo, alderantzizkoa espontaneo izango da.

$\Delta G = 0$  prozesua orekan egongo da.

# GIBBS-en ENERGIA MOLAR ESTANDARRAREN ALDAKETA

Energia askearen aldaketa:  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ , erreakzioan benetan erabilgarria den energiaren neurriaren informazioa ematen digu. Entalpia aldaketa, entropia aldaketa eta temperaturaren menpekoa da.

$\Delta G = G_p - G_e$  EGOERA FUNTZIOA DA ETA MAGNITUDE ESTENTSIBOA.

$\Delta G_f^0$  formazio-energia aske molar estandarrak (KJ/mol) (konposatu mol bat eratzeko, elementutik abiatuta eta baldintza estandarretan trukaturiko energia kantitatea da.

Tabulatuta daude eta positiboak ala negatiboak izan daitezke.

Elementuena 0 da.

ERAKETA ENERGIA ASKE ESTANDARRAK	
Substantzia	$\Delta G_f^0$ (kJ · mol <sup>-1</sup> · °C <sup>-1</sup> )
H <sub>2</sub> O (l)	-237,2
H <sub>2</sub> O (g)	-228,6
CO <sub>2</sub> (g)	-394,4
CH <sub>4</sub> (g)	-50,8
MgO (s)	-569,6
NO (s)	+86,7
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> (g)	209,2
SO <sub>2</sub> (g)	-300,4
SO <sub>3</sub> (g)	-370,4

## GIBBS-en ENERGIA MOLAR ESTANDARRAREN ALDAKETAREN KALKULOA

Energia askea, magnitude estentsiboa eta egoera-funtzioa denez Hess-en legearen bidezko konbinaketa berdinak egin daitezke. Edo, formularen bitartez substantzien formaziokoak ezagutzen baditugu.

$$\Delta G^0 \text{ (kj)} = \sum n. \Delta G^0_f \text{ (produktuak)} - \sum n. \Delta G^0_f \text{ (erreaktiboak)}$$

- Erreakzio kimikoen berezkotasuna neurtzen du, hau da, erreakzioa espontaneo gertatzen den ala ez.

1.  $\Delta G < 0$   $G_p < G_e$  erreakzio ESPONTANEOA DA

2.  $\Delta G > 0$   $G_p > G_e$  erreakzioa EZ-ESPONTANEOA

$\Delta G = 0$   $G_p = G_e$  SISTEMA OREKAN DAGO → Muga espontaneotik ez-berezkora edo ez-berezkotik berezkora izateko. Erreakzioa orekan dagoenean  $\Delta G = 0$  da, eta dagokion tenperatura orekaren tenperatura da,  $T_0$

Kalkula ezazu metano,  $\text{CH}_4$ , gaseosoaren errektuntza-erreakzioaren energia aske estandarren aldakuntza, eraketa-energia askeen taularen datuak erabiliz:  $\text{CH}_4(\text{g}) + 2 \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2 \text{H}_2\text{O}(\text{l})$

— Datuak:  $\Delta G_f^\circ [\text{CH}_4(\text{g})] = -50,8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $\Delta G_f^\circ [\text{CO}_2(\text{g})] = -394,4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $\Delta G_f^\circ [\text{H}_2\text{O}(\text{l})] = -237,2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

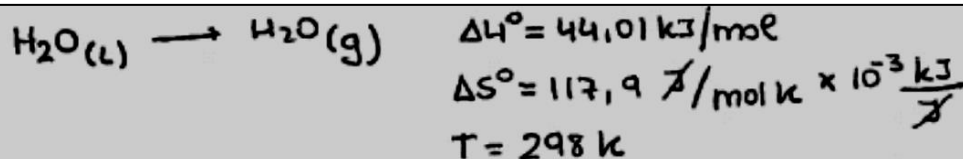
— Adierazpen hau aplikatuko dugu:  $\Delta G_{\text{erreakzioa}}^\circ = \sum n \cdot \Delta G_f^\circ \text{ produktuak} - \sum m \cdot \Delta G_f^\circ \text{ erreaktiboak}$

$$\Delta G_{\text{erreakzioa}}^\circ = 1 \text{ mol} \left( -394,4 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) + 2 \text{ mol} \left( -237,2 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) - 1 \text{ mol} \left( -50,8 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right) = -818 \text{ kJ}$$

Mol bat metanoren errektuntzan gertatzen den energia askearen aldaketa **-818 kJ-koa** da.

**\*Baldintza estandarretan erreakzioa berezkoa da.**

Uraren lurrunketan,  $\Delta H = 44,01 \text{ kJ/mol}$  eta ,  $\Delta S = 117,9 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$  dira  $298 \text{ K}$  eta atmosfera 1ean. Kalkulatu, egoera horretan, ur lurrunketaren energia askea.



$$a) \Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ = 44,01 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} - 298 \text{ K} \cdot 117,9 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} =$$

$$= 8,9 \text{ kJ/mol}$$

Erreakzioaren Gibbsen energia aldaketa molarra, baldintza estandarretan.  $\Delta G > 0$  erreakzioa EZ-ESPONTANEOA da, baldintza estandarretan.

Kontuz entropiaren unitateekin ( $\text{J}/^\circ\text{K}$ ), energia askea, kalkulatzeko gogoratu **ENTROPIA**  $\text{kJ}/^\circ\text{K}$ -tan jarri behar duzula.

## BEREZKOTASUNA ETA TENPERATURA ( $\Delta G/T$ diagramak)

Gibbsen ekuazioaren forma lerro zuzenarena da:

$\Delta G = \Delta H^0 + (-\Delta S^0) \cdot T \rightarrow y = b + m \cdot x$  (lerro zuzen baten forma)

\*  $\Delta H^0$  -k bat egiten du jatorrizko ordenatuarekin, b, (T=0 denean ( $\Delta G = \Delta H = b$ ). Zuzenaren 1. puntua (0,  $\Delta H^0$ ).

\*  $(-\Delta S^0)$  -k bat egiten du zuzenaren maldarekin, m, baina kontrako ikurrarekin.  $\Delta S^0 < 0$  malda (+) zuzena gorakoa.  $\Delta S^0 > 0$  malda (-) zuzena beherakoa.

\*\* suposatzen da  $\Delta H^0$  eta  $\Delta S^0$  ez direla aldatzen tenperaturarekin.

# ΔG/T GRAFIKOAK

ΔG -T grafikoa egiten bada, zuzen bat ateratzen zaigu, non ΔH ordenatua jatorrian (b) eta (-ΔS) zuzenaren malda (m) diren. Horrela ikusiko dugu T-ren eragina Gibbs-en energiari

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \quad \text{edo} \quad \Delta G = \Delta H + (-\Delta S) T$$

↑  
y =

↑  
b +

↑  
m · x

malda (m = -ΔS°)

## ·A) ΔH < 0 eta ΔS > 0 (m < 0)

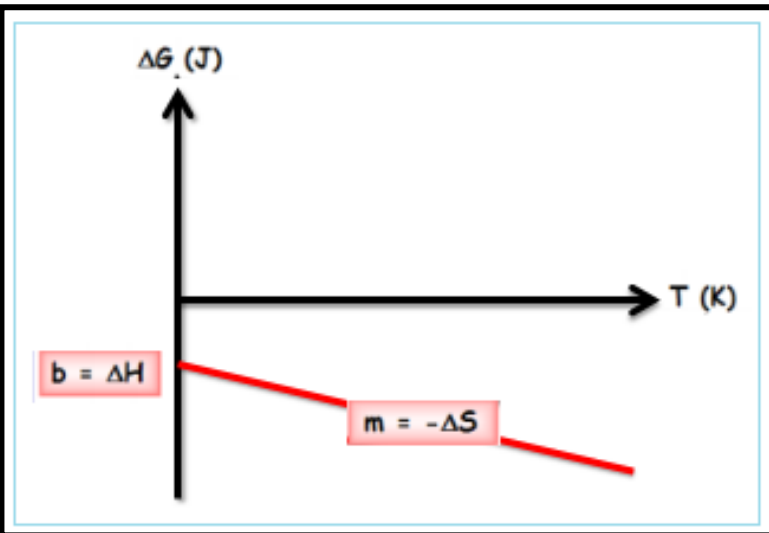
.-exotermikoa

.-desordena handipena (S ↑)

.-Temperatura guztietan

**ΔG < 0 ESPONTANEOA ΔG < 0 edozein T-tan.**

**(Zuzena T ardatzaren behian, temperatura guztietan). ERREAKZIOA BEREZKOA DA EDOZEIN TEMPERATURATAN, ESPONTANEOKI GERTATZEN DA.**



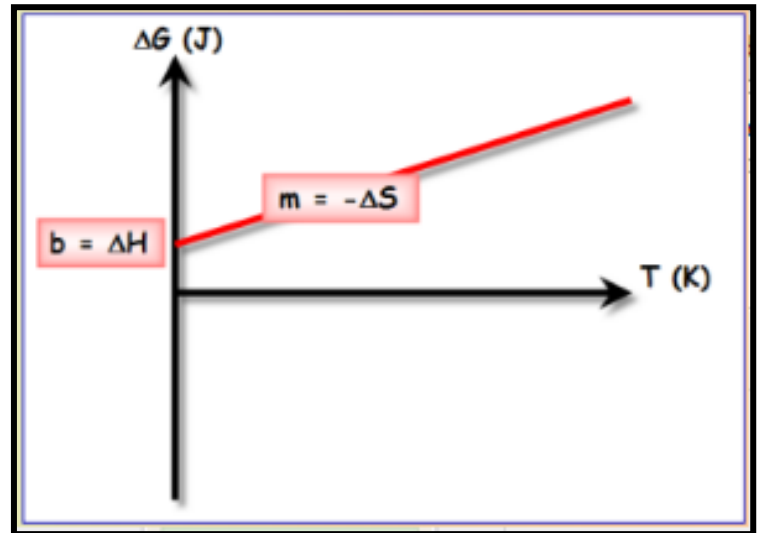
## ·B) ΔH > 0 eta ΔS < 0 (m > 0)

.-endotermikoa

.-desordena gutxipena (S ↓)

**Temperatura guztietan ΔG > 0 ERREAKZIO EZ-ESPONTANEOA EDOZEIN TEMPERATURATAN. ΔG > 0 edozein T-tan.**

**(Zuzena, T ardatzaren goian, temperatura guztietan).**





Aurreko kasuetan, zuzenak ez du mozten T ardatza, eta horrela dakigu erreakzio bat espontaneoki gertatuko den ala ez, edozein temperaturatan.

**HURRENGO KASUETAN ZUZENAK ,T ARDATZA MOZTUKO DU, ETA AZTERTUKO DUGU HONEN ESANAHIA:**

Erreakzioa **orekan** dagoela esaten da, muqa daqoenean berezkoa eta ez-berezkoa izateko eta  $\Delta G=0$  eta daqokion tenperatuta,  **$T_0$ , dira.  $T_0$ , tenperaturen muqa izango da jakiteko erreakzioa zer tenperatura tartetan espontaneo edo ez-berezkoa izango den.**  $\Delta G/T$  zuzenak T ardatza moztuko du orekako tenperaturan,  $T_0$ -n.

### OREKAKO TENPERATURAREN KALKULOA

$\Delta G=0$  oreka baldintza aplikatuko dugu.:

$$\Delta G = \Delta H_0 + (-\Delta S_0) \cdot T \rightarrow \Delta G = 0 \rightarrow T_0 = \Delta H_0 / \Delta S_0$$

$T_0$  OREKAKO TENPERATURA.

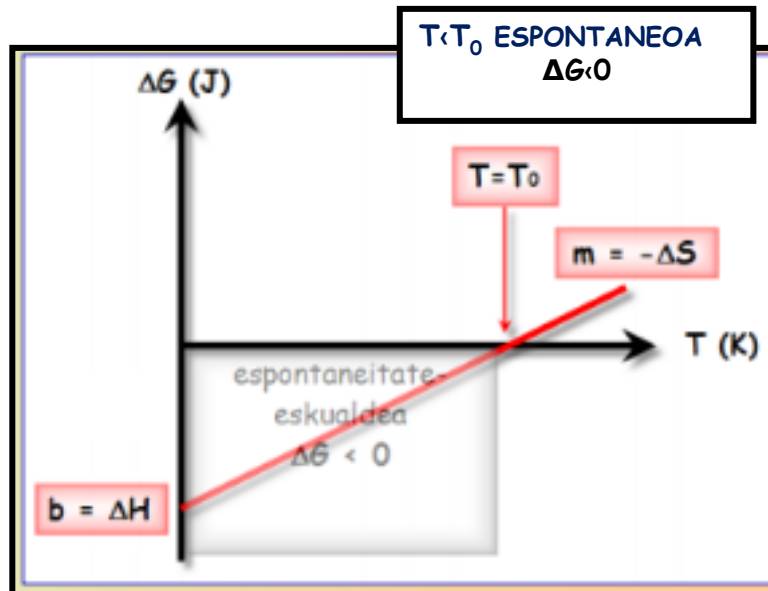
•C)  $\Delta H < 0$  eta  $\Delta S < 0$  ( $m > 0$ )

•Exotermikoa

•Desordena gutxipena ( $S \downarrow$ )

T BAXUETAN erreakzioa  
ESPONTANEOA  $\Delta G < 0$  ( $T < T_0$ ).

T altuetan erreakzioa ez-espontaneoa  
 $\Delta G > 0$  ( $T > T_0$ ).



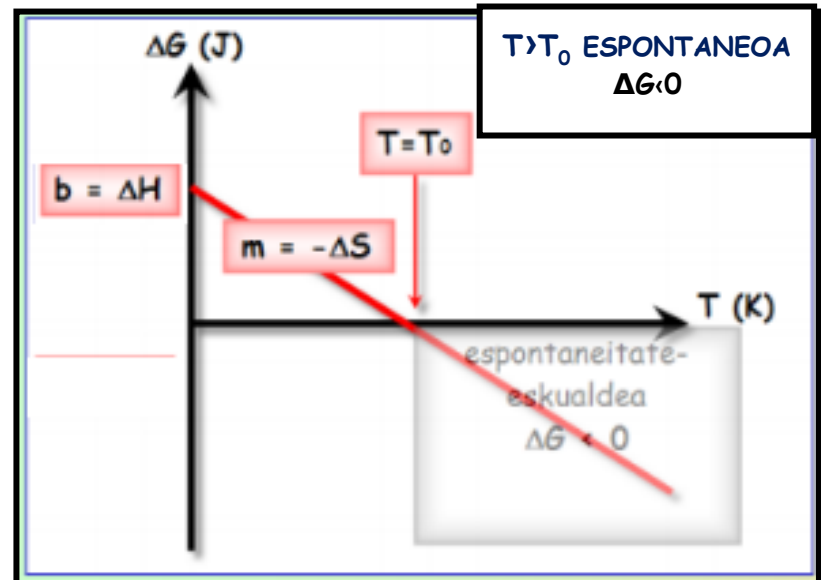
•D)  $\Delta H > 0$  eta  $\Delta S > 0$  ( $m < 0$ )

•Endotermikoa

•Desordena handipena ( $S \uparrow$ )

T baxuetan erreakzioa ez-espontaneoa  
 $\Delta G > 0$  ( $T < T_0$ ).

T ALTUETAN erreakzioa ESPONTANEOA  
 $\Delta G < 0$  ( $T > T_0$ )



Kalkulatu zer tenperaturatan izango den espontaneoa kaltzio karbonatoaren deskonposizio-erreakzioa,  $\text{CaCO}_3 (s) \rightarrow \text{CaO} (s) + \text{CO}_2 (g)$ , erreakzio horrentzat  $\Delta H^0 = +177,8 \text{ kJ}$ , eta  $\Delta S^0 = 160,5 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$  direla jakinda.

— Emandako erreakzioaren energia aske estandarra kalkulatuko dugu:

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T \Delta S^0 = 177,8 \text{ kJ} - 298 \text{ K} \cdot 160,5 \frac{\text{J}}{\text{K}} \cdot \frac{1 \text{ kJ}}{1000 \text{ J}} = +129,97 \text{ kJ}$$

— Erreakzioa  $25^\circ\text{C}$ -an espontaneoa ez denez, zeren  $\Delta G > 0$  baita, ikusi beharko da zein tenperaturatan beteko den  $\Delta G^0 = 0$ :

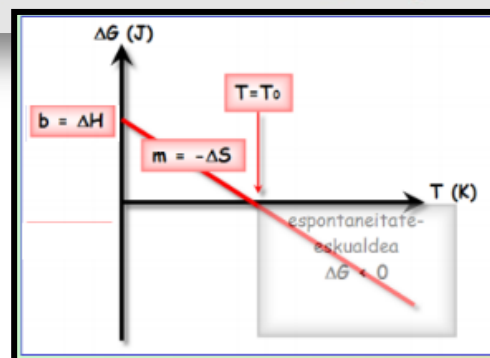
$$0 = \Delta H^0 - T \Delta S^0$$

Joko dugu  $\Delta H^0$  eta  $\Delta S^0$  ez direla tenperaturarekin era nabarian aldatzen.

$$T_0 = \frac{\Delta H^0}{\Delta S^0} = \frac{177,8 \text{ kJ}}{0,1605 \text{ kJ} \cdot \text{K}^{-1}} = 1107,8 \text{ K} = (1107,8 - 273) ^\circ\text{C} = 834,8 ^\circ\text{C}$$

**$834,8^\circ\text{C}$ -tik gora,  $\Delta G$  negatiboa izango da, eta erreakzioa, espontaneoa.**

- $\Delta H > 0$  eta  $\Delta S > 0$  ( $m < 0$ )
- Endotermikoa
- Desordena handipena ( $S \uparrow$ )
- T baxuetan erreakzioa ez-espontaneoa  $\Delta G > 0$  ( $T < T_0$ ).
- T ALTUETAN erreakzioa ESPONTANEOA  $\Delta G < 0$  ( $T > T_0$ )**



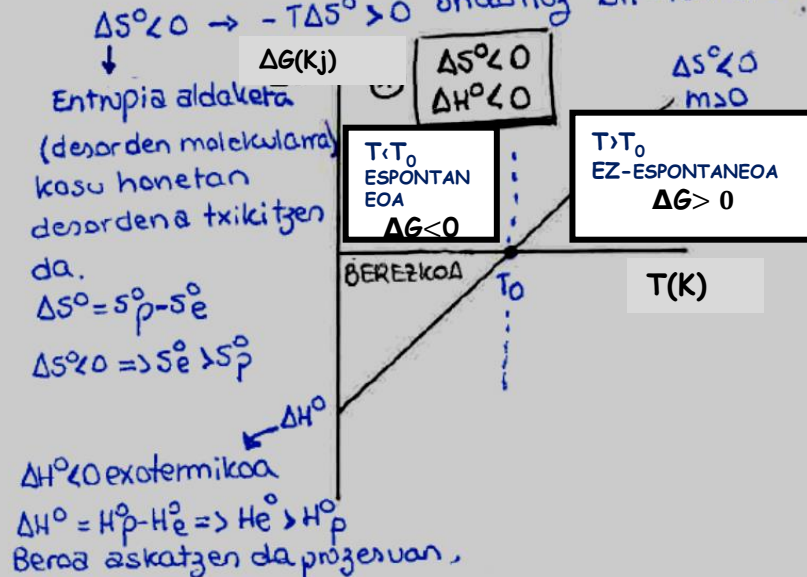
Adierazi, erantzuna arrazoituz, adierazpen hauek zuzenak ala okerrak diren:

a) Energia askea temperaturaren menpekoa da.

b) Erreakzio espontaneo batean entropia-aldaketa negatiboa da beti.

a) Energia askea temperaturaren menpekoa da: Gibbsen energia aldaketa edo energia askearen aldaketa. Entropia aldaketa.  $\Delta G = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$  ikusten da temperaturaren menpe dagoela. Entalpia aldaketa. Temperatura.

c) Erreakzio espontaneo batean entropia-aldaketa negatiboa da beti. Gibbsen energia aztertu behar dugu erreakzio bat espontaneoa den ala ez jakiteko.  $\Delta G = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ$  eta entropia aldaketaz aparte, entalpia aldaketa eta temperatura kontuan hartu behar dira. Espontaneoa izateko  $\Delta G < 0$  izan behar du, beraz  $\Delta S^\circ < 0 \rightarrow -T \Delta S^\circ > 0$  ondorioz  $\Delta H^\circ$ -ren eta  $T$ -ren menpe geratzen da berezkitasuna.



- $\Delta G/T$  adierazpen grafikoa lemu juben baten forma dauka, non maldak bat egiten du  $\Delta S^\circ$ -arekin kontrako ikurrarekin.
- Zuzenak  $T$ -ardatzan oreka tenperatura ( $T_0$ ) mozten du:  $\Delta G = 0$  orekako baldintza denez  $T_0 = \Delta H^\circ / \Delta S^\circ$
- Ondorioz:  $\Delta S^\circ < 0$  denean bakamik berezkoa izango da erreakzioa exotermikoa bada  $\Delta H^\circ < 0$  eta tenperatura orekako baino txikiagoa bada.  $T < T_0$ , horrela  $\Delta G < 0$