

3. IKASGAIA: ENTROPIA ETA GIBBS ENERGIA

3.1.- BEREZKO PROZESUAK ETA TERMODINAMIKAREN 2. PRINTZIPIOA

Termodinamikaren lehenengo printzipioarekin gertatzen denaren antzera, bigarren printzipioa ere gertaera esperimentaletan oinarritzen da, eta gertaera horiek inork ez ditu zalantzan jarri, inoiz.

Termodinamikaren bigarren printzipioak era askotako definizioak ditu; denak baliokideak dira, nahiz batzuetan baliokidetasun hori begien bistakoa ez izan. Bigarren printzipioaren interesik handiena prozesu baten noranzkoa aurreratzeko gaitasuna da.

Lehenengo printzipioaren arabera, badakigu energia ez dela galduko, ez eta sortuko ere, baina, adibidez, sistema bat $60\text{ }^{\circ}\text{C}$ -an dagoena ez da berez erdia hoztuko beste erdia berotzeko. Zati batek galdutako beroa besteak irabaziko luke; beraz, 1. printzipioa ongi beteko litzateke, baina denok dakigu gertaera hori ez dela BEREZ gertatuko.

Adibidez, bi osagaien nahaste bat dugunean, inoiz ez da gertatuko nahastearen osagaiak BEREZ bereiztea.

Adibidez, biraka ari den gurgil bat marruskaduraren eraginez geratu egingo da; bero bihurtuko da haren energia zinetikoa, baina inolaz ere ez da gertatuko geldirik dagoen gurgila berotutakoan biraka hastea eta, ondorioz, beroa energia zinetiko bihurtzea.

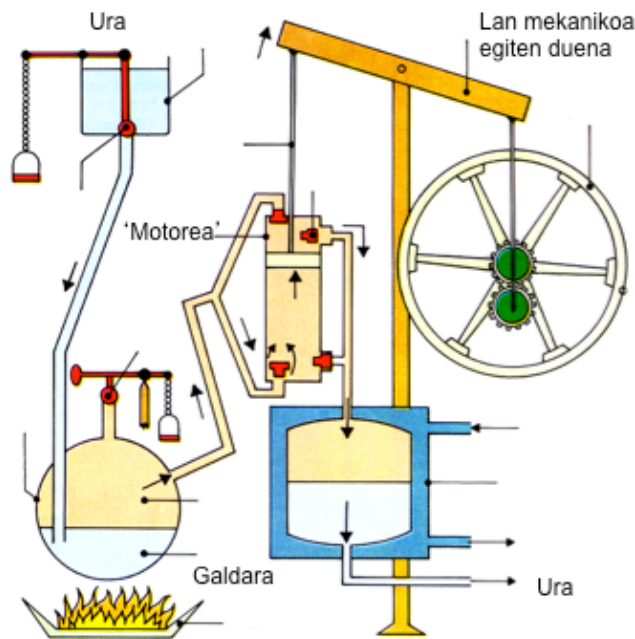
2. printzipioa azaltzera garamatza horrek guztiak:

Clausius-en enuntziatua:

“Beroa ez da BEREZ pasatuko gorputz hotz batetik beroagoa den beste batera, beste ezer gertatzen ez bada behintzat”.

2. printzipioa hobeki ulertzeko eta Carnot-en zikloa azaltzeko, komeni da lurrun-makinaren funtzionamendua ulertzea. Lurrun-makina batean, pistoi mugikorra duen zilindro batek galdaratik datorren lurruna jasoko du. Eta, pistoi horri lotuta, gailu mekanikoa daukagu, beroa energia mekaniko bihurtuko duena.

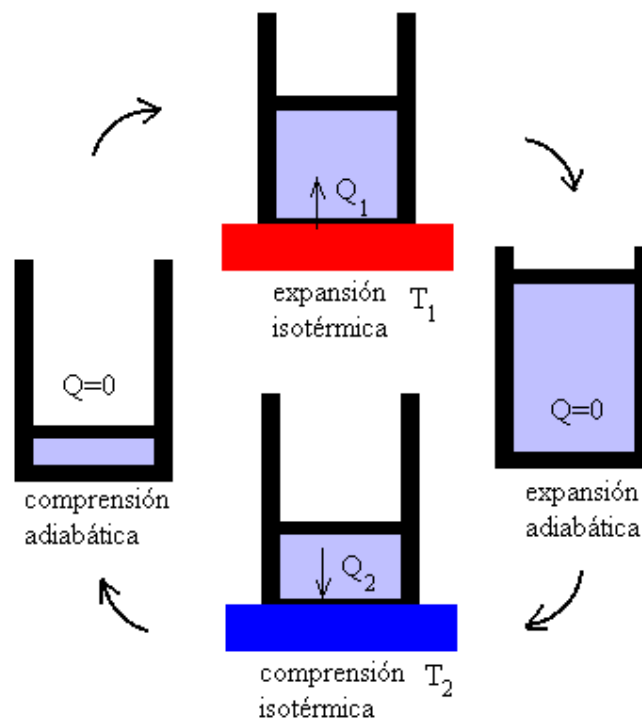
Pistoi goian dagoenean, galdaran sortutako lurruna zilindrora sartuko da, eta horrek beheeraka eramango du pistoi, berari lotuta dagoen ardatzarekin batera. Inertziak bultzaturik, pistoiak goraka egiten du, eta hoztu den lurruna kanpora irtengo da; beraz, hasierako egoerara itzuliko da, berriro.



3.1. irudia: Lurrin-makinaren irudi eskematikoa

Prozesua ziklikoa da, behin eta berriz errepikatuko da, eta, horretan oinarriturik, Sidi Carnot-ek (1824) makina termiko ideala asmatu zuen.

Badugu 1 mol gas ideal zilindro batean, eta, haren gainean, marruskadurarik gabeko pistoi mugikorra. Bi bero-iturri dauzkagu: bata beroa eta bestea hotza. Zilindroa material isolatzailez inguratutakoan, baldintza adiabatikoetan lan egin daiteke, hau da, ingurunearekin berorik trukatu gabe.



3.2. Carnoten zikloa betetzen duen makina ideala

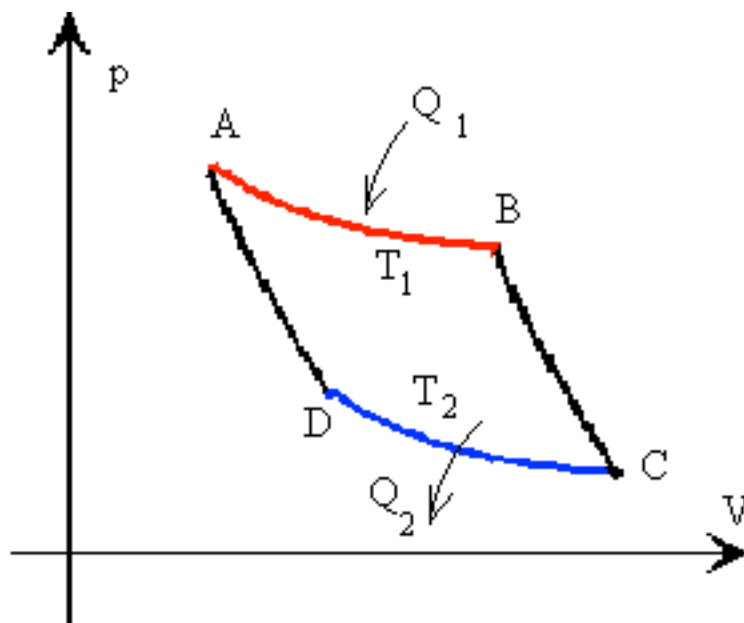
Carnot-en zikloak 4 etapa dauzka:

1.- Gasa, bero-iturri beroarekin kontaktuan ipinitakoan, espanditu egingo da, hots, espantsio isotermikoa jasango du (bero-iturria hain handia denez, zilindroaren barnean dagoen gasak konstante mantenduko du tenperatura). $(p_1, V_1) \rightarrow (p_2, V_2)$

2.- Ondoren, zilindroa bero-iturri berotik bereizi eta isolatu egiten da, eta gasak bere inertzia espanditzen jarraituko du; oraingoan, ingurunearekin bero-trukerik izan gabe (espantsio adiabatikoa). $Q=0$ denez, gasa hoztu egingo da espantsio horretan, eta espanditzen utziko dugu, bero-iturri hotzaren tenperaturara iritsi arte. $(p_2, V_2) \rightarrow (p_3, V_3)$

3.- Orain, horma isolatzailea kendu, eta bero-iturri hotzarekin kontaktuan ipiniko dugu zilindroa. Gasa konprimatu egingo du, tenperatura konstante mantenduz. $(p_3, V_3) \rightarrow (p_4, V_4)$

4.- Azkenik, horma isolatzailea berriz ipini, eta gasa konprimatuko dugu, hasierako egoerara itzuli arte. $(p_4, V_4) \rightarrow (p_1, V_1)$



3.3. irudia: p/V aldaketak Carnoten zikloa betetzen duen makina batean

Carnot-en zikloko urrats bakoitzean beroa, lana eta barne-energiaren aldaketa kalkulatu gero, honelako taula bat osatuko genuke:

URRATSA	ΔU	Q_{itzulg}	W
1	0	$RT_b \ln(V_2/V_1)$	$-RT_b \ln(V_2/V_1)$
2	$C_v (T_h - T_b)$	0	$C_v (T_h - T_b)$
3	0	$RT_h \ln(V_4/V_3)$	$-RT_h \ln(V_4/V_3)$
4	$C_v (T_b - T_h)$	0	$C_v (T_b - T_h)$
GUZTIRA	0	$q_{itzulg} = RT_{be} \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right) + RT_{hot} \ln\left(\frac{V_4}{V_3}\right)$	$W_{itzulg} = -RT_{be} \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right) + RT_{hot} \ln\left(\frac{V_4}{V_3}\right)$

Prozesu adiabatiko itzulgarrietan betetzen den ekuazio hau kontuan izanik:
 $TV^{\gamma-1} = \text{konstante}$, zera froga daiteke:

$$\frac{V_4}{V_3} = \frac{V_1}{V_2}$$

Erlazio hori kontuan izanik, honela geldituko dira ziklo osoan zehar egindako lana eta trukaturako beroa:

$$q_{itzulg} = R(T_{be} - T_{hot}) \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right)$$

$$w_{itzulg} = R(T_{be} - T_{hot}) \ln\left(\frac{V_1}{V_2}\right)$$

Beraz, Carnot-en zikloan, beroa jasoko da bero-iturri berotik:

$$RT_{be} \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right) > 0$$

Bero-iturri hotzari beroa emango dio:

$$RT_{hotza} \ln\left(\frac{V_4}{V_3}\right) = RT_{hotza} \ln\left(\frac{V_1}{V_2}\right) < 0$$

Eta makinak egingo duen lana izango da bien arteko kendura:

$$R(T_{be} - T_{hotz}) \ln\left(\frac{V_1}{V_2}\right)$$

Makina batez ari garenez, zein izango da makina horren etekina?

Oro har, makina baten etekina egindako lanaren eta jasotako beroaren arteko zatidura izango da:

$$\eta = \frac{|w_{itzulgarrria}|}{q_b}$$

Beraz, Carnot-en zikloan lortutako adierazpenak ekuazio horretan ordezkatzuz:

$$\eta = \frac{R(T_{be} - T_{hotz}) \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right)}{RT_{be} \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right)} 1 - \frac{T_h}{T_b} = 1 + \frac{q_h}{q_b}$$

Ekuazio horren arabera, Carnot-en zikloa betetzen duen makina baten etekina bi bero-iturrien tenperaturek mugatuko dute. Eta zein izango litzateke etekinik handiena? Bero-iturri hotzaren tenperatura 0 K denean. Esperientziak azaldu duenez, ezinezkoa da tenperatura hori lortzea (urrats finitu batzuetan behintzat); beraz, makina termikoaren etekina beti izango da bat baino txikiagoa. Bi tenperatura jakinen artean (T_b eta T_h) lanean ari diren makina termikoen artean, modu itzulgarrian lanean diharduenak izango du etekinik handiena.

Termodinamikaren 2. printzipioaren beste definizio batera garamatza horrek guztiak: "Ezinezkoa da makina zikliko bat asmatzea jasotako bero guztia lan bihurtzeko".

3.2.- ENTROPIA

Oraindik ere, prozesuen noranzkoa mugatuko duen magnitude baten bila gabiltza. Gatozen berriro ere Carnot-en makinaren etekinera.

$$\eta = \frac{|w_{itzulgarria}|}{q_b} = 1 - \frac{T_h}{T_b} = 1 + \frac{q_h}{q_b}$$

Ekuazio hori honela berriedatz dezakegu:

$$\frac{q_h}{T_h} + \frac{q_b}{T_b} = 0$$

Ekuazio hori egia izango da Carnot-en zikloa betetzen duten makinetan (makina ideala). Beraz, ziklikoki eta modu itzulgarrian lan egiten duen makina ideal batean, q/T erlazio guztien batura zero izango da, ziklo osoan zehar. Ziklo batean magnitude baten batura zero izateak esan nahi du magnitude hori egoera-funtzio dela. Egoera-funtzio berri horri ENTROPIA esango diogu, eta, matematikoki, honela definituko dugu:

$$dS = \frac{dq_{itzulgarria}}{T}$$

Eta honela kalkulatu da 1 egoeratik 2 egoerara igarotakoan sistemak jasaten duen entropia-aldaketa:

$$\Delta S = S_2 - S_1 = \int_1^2 \frac{dq_{itzulgarria}}{T}$$

Eta haren unitateak $J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$ izango dira, Nazioarteko Sistematan.

Nolakoa izango da entropiaren aldaketa prozesu itzulezin edo itzulgarrietan?

Has gaitzen kasu sinpleenarekin, hau da, jo dezagun sistema isolatu batean ari garela. Horrek zera esan nahi du: sistemak ingurunearekin trukaturako beroa nulua izango da. Prozesua itzulgarria baldin bada, aurreko ekuazioan ordezkatu dugu beroaren balioa -hots, zero-, eta, horrenbestez, entropiaren aldaketa zero izango da. Beraz, sistema isolatu batean prozesu itzulgarri bat gertatzen baldin bada, sistemaren entropia-aldaketa zero izango da.

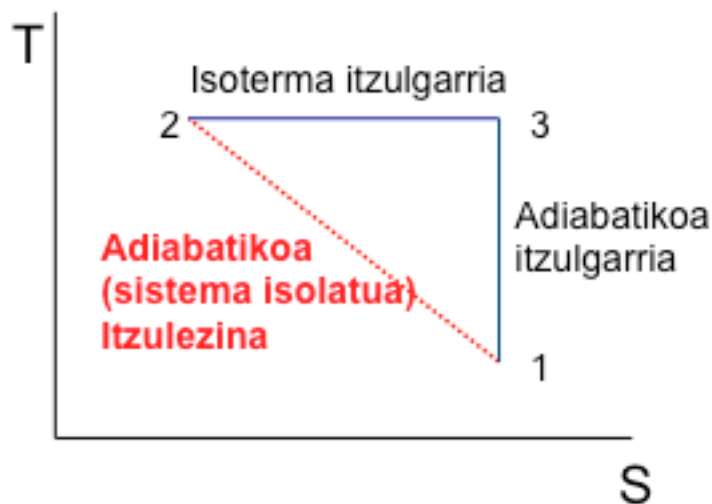
$$dS = \frac{dq_{itzulg}}{T} = \frac{0}{T} = 0$$

Baina zer gertatuko da sistema isolatu batean prozesu itzulezin bat gertatzen denean? Kasu horretan esan dezakegun gauza bakarra zera da: entropia-aldaketak ez du zero izan behar. Hau da, gure balioa (zero) ezin da ordezkatu azkenengo formularen beroa agertzen den lekuan, prozesua ez baita modu itzulgarrian gertatu.

$$dS = \frac{dq_{itzulg}}{T} \neq 0$$

Nolakoa izango da $\Delta S = S_2 - S_1$, prozesu itzulezin bat gertatzen denean sistema isolatu batean? Positiboa ala negatiboa? Badira bi aukera: edo $S_2 < S_1$, edo alderantziz, $S_1 < S_2$.

Irudika dezagun egoera horietako lehena Tenperatura vs Entropia diagrama batean: $S_2 < S_1$ eta $\Delta S < 0$



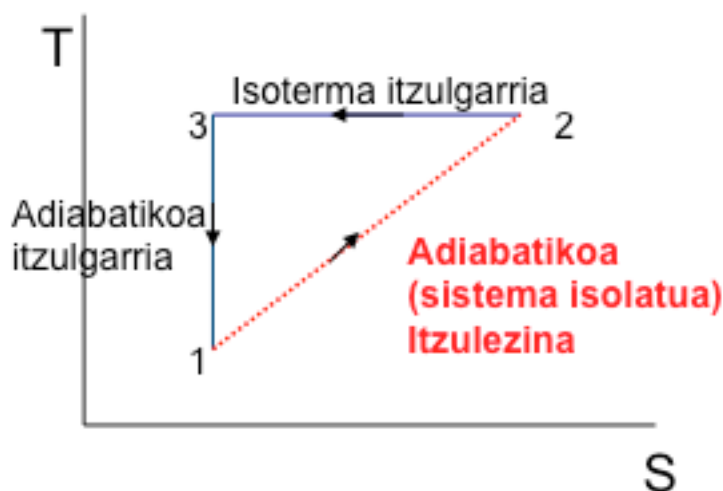
3.4. irudia: Temperatura/entropia diagrama bat, $S_2 < S_1$ kasurako

$$\begin{aligned} \Delta U_{12} + \Delta U_{23} + \Delta U_{31} &= 0 \\ W_{12} + W_{23} + W_{31} + Q_{12} + Q_{23} + Q_{31} &= 0 \\ W_{12} + W_{23} + W_{31} + Q_{23} &= 0 \\ -(W_{12} + W_{23} + W_{31}) &= Q_{23} \end{aligned}$$

Urrats bakoitzean lana, beroa eta barne-energiaren aldaketa kalkulatu gero, goiko emaitza lortuko genuke. Kontuan izan behar da $Q_{23} > 0$ izango dela, $Q_{23} = T(S_3 - S_2)$ baita, eta, gure hipotesiaren arabera, $S_3 > S_2$ baita.

Beraz, ziklo batean sistemak jaso duen beroa lan bihurtzen du, oso-osorik. Emaitza hori 2. printzipioaren aurka doa; beraz, hasierako baldintzak $-$ hots, $S_2 < S_1$ ez dauka zentzurik.

Eman dezagun orain aurkako egoera $-$ hots, $S_1 < S_2$, eta, horrenbestez, $\Delta S > 0$.



3.5. irudia: Temperatura/entropia diagrama bat, $S_1 < S_2$ kasurako

$$\begin{aligned}\Delta U_{12} + \Delta U_{23} + \Delta U_{31} &= 0 \\ W_{12} + W_{23} + W_{31} + Q_{12} + Q_{23} + Q_{31} &= 0 \\ W_{12} + W_{23} + W_{31} + Q_{23} &= 0 \\ -(W_{12} + W_{23} + W_{31}) &= Q_{23}\end{aligned}$$

Baina $Q_{23} < 0$ zeren $Q_{23} = T(S_3 - S_2)$ eta $S_3 < S_2$

Beraz, sistemak jaso duen energia guztia bero moduan ematen du. Ziklo horrek bai 1. printzipioa bai 2. printzipioa betetzen ditu; beraz, sistema isolatuetan prozesu itzulezina gertatzen denean, entropiaren aldaketa positiboa izango da. Eta zer esan isolatuak ez diren sistemen inguruan? Kasu horretan, emaitza ez da hain azalekoa. Beraz, har dezagun beti isolatuztat har daitekeen sistema bat; adibidez, unibertsoa. Unibertsoaren entropia-aldaketa positiboa izango da prozesu itzulezin bat gertatzen denean, eta, aldis, prozesu itzulgarri bat gertatutakoan, entropia ez da aldatuko:

$$\begin{aligned}\Delta S_{unib} &= 0, \text{ prozesu itzulgarri bakoitzagatik} \\ \Delta S_{unib} &> 0, \text{ prozesu itzulezin bakoitzagatik}\end{aligned}$$

Horrek aukera ematen du 2. printzipioa beste modu batean esateko: "Unibertsoaren entropia etengabe handituz doa".

Adibide batzuk aztertuko ditugu, entropia-aldaketa nolakoa den ikusteko.

1.- Gorputz bero bat BEREZ HOZTUKO balitz gertatuko zer-nolako entropia-aldaketa gertatuko litzatekeen unibertsoan

Demagun badugula gorputz bat T_b temperaturan eta temperatura hori giro-temperatura baino handiagoa dela: $T_b > T_g$. Badakigu gorputz bero horrek beroa askatuko duela; demagun dQ bero infinitesimala galdu duela. Bero hori inguruak hartuko du, baina inguru hain da handia, ez baitu haren temperatura aldatuko. Prozesu infinitesimal horri dagokion unibertsoaren entropia-aldaketa honela kalkulatu genuke:

$$dS_{Unibertsoa} = dS_{gorputza} + dS_{inguru} = -\frac{dq}{T_b} + \frac{dq}{T_h} = dq \left[\frac{1}{T_h} - \frac{1}{T_b} \right] > 0$$

Eta, $T_b > T_g$ denez, unibertsoaren entropia-aldaketa positiboa izango da, prozesu itzulezin bati dagokion bezala.

2.- Gas ideal baten espantsio aske isotermikoa, p_1 -etik p_2 -raino

Badugu gas ideal bat p_1 presioan, eta hutsunearen aurka espanditzen uzten dugu, p_2 -ra iritsi arte; aldaketa hori modu isotermikoan gertatzen da. Ideala denez, barne-energia ez da aldatuko (isotermikoa baita, eta, gas idealetan, barne-energia temperaturaren menpekoa da soilik): $\Delta U = Q + W = 0$. Bestalde, lana hutsunearen aurka egin duenez, kanpoko presio hori 0 denez, ez du lanik egin, eta, ondorioz, prozesuan transferitutako beroa ere zero izango da.

Eta nola kalkulatu gugu entropia-aldaketa? Ezin da bero nulu hori erabili, ez baita prozesu itzulgarri bati dagokiona.

Bide itzulgarri bat asmatuko dugu, zeinean gasa p_1 , V_1 egoetatik p_2 , V_2 egoerara pasatuko den, modu isotermikoan:

$$Q_{itzulgarria} = -W_{itzulgarria} = \int_{V_1}^{V_2} nRT \frac{dV}{V} = nRT \ln \frac{V_2}{V_1}$$

eta
$$\Delta S_{sistema} = \frac{q_{itzulgarria}}{T} = nR \ln \frac{V_2}{V_1}$$

$$\Delta S_{sistema} > 0$$
 da zeren $V_2 > V_1$

Eta inguruarena?

Sistemak lanik egin ez duenez, eta berorik jaso ez duenez, inguruak ez du ezer sumatu, eta aldagai berberetan gelditu da. Beraz: inguruaren entropia-aldaketa zero izango da.

Beraz:
$$\Delta S_{unibertsoa} = \Delta S_{sistema} + \Delta S_{ingurua} > 0$$

3.- Fase-aldaketa bati dagokion entropia-aldaketa

Substantzia baten entropia aldatu egingo da substantzia horren egoera fisikoa aldatutakoan; adibidez, fusioa edo lurruntzea gertatzen denean.

Fusioa edo haren alderantzizkoa (solidotzea) nahi bezain mantso gertaraz daiteke substantziaren fusio-tenperatura normalean; adibidez, uraren kasuan, 273,15 K-ean.

Trukatutako beroa presio konstatean eginez gero, $q_p = \Delta H$ izango da, eta, beraz:

$$\Delta_m S = \frac{q_{itzulgarria}}{T_m} = \frac{\Delta_m H}{T_m}$$

Fusioa gertatzeko, beroa eman behar zaio sistemari; beraz, sistemak jasandako entropia-aldaketa magnitude positiboa izango da.

Eta zenbatekoa izango da unibertsoaren entropia-aldaketa? Sistemari eman zaion beroa ingurunetik hartu da, baina ingurunearen tenperatura ez da aldatuko, eta 273,15 K izango da. Beraz, ingurunearen entropia-aldaketa:

$$(\Delta_m S)_{ingurunea} = -\frac{q_{itzulgarria}}{T_m} = -\frac{\Delta_m H}{T_m}$$

Eta, unibertsoaren entropia-aldaketa bien arteko batura denez, zero izango da. Zergatik? Prozesu hori modu itzulgarrian gertatu delako.

Zer gertatuko litzateke izotz-pusketa bat giro-tenperaturan bere kasa utziz gero? Prozesu hori itzulezina izango da, eta unibertsoaren entropia handiagoa egingo da.

Bai fusioan, bai lurrunketan, sistemaren entropia handiagoa egiten da. Fase-aldaketa horietan, sistemaren desordena handiagoa egiten da. Egoera solidoan, molekulak sare kristalino batean ordenatuta daude, eta, fusio-tenperatura gainditutakoan, sare kristalino hori apurtu, eta atomoek eta molekulek aukera gehiago dute mugitzeko, eta sistemaren desordena handiagoa izango da.

Materia edota energiaren desordena/dispersioa eta entropia gauza beraren bi aurpegi dira. Boltzmann-ek lotu zituen bi kontzeptu horiek:

$$S = -k \ln \Omega$$

Ω sisteman probabilitate bera duten antolamendu mikroskopikoen kopurua da, eta k , berriz, Boltzmann-en konstantea.

3.3.- HITZARMENEZKO ENTROPIAK

Demagun prozesu bat non solido bat dT kantitatean berotzen den, presio atmosferikoan $dQ_{itzulgarria}$ erabiliz.

$$\left. \begin{aligned} dQ_{itzulgarria} &= C_p dT \\ dS &= \frac{dQ_{itzulgarria}}{T} = C_p \frac{dT}{T} \end{aligned} \right\} \Delta S = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_p}{T} dT$$

Beraz, integral hori kalkulatzeko, tenperatura ezberdinetan neurtutako bero-ahalmenak beharko ditugu.

XX. mendearen hasieran, T. W. Richards-ek eta W. Nernst-ek zenbait erreakzio kimiko aztertu zuten, bakoitzak bere aldetik, eta ondorio honetara iritsi ziren: tenperatura zerorantz hurbildu ahala, entropia-aldakuntza ere zerorantz hurbiltzen da. Handik sortu zen termodinamikaren 3. printzipioaren enuntziatuetako bat; Nernst-en enuntziatua, hain zuzen ere:

“Zero absolutuan gertatzen den prozesu termodinamiko baten entropia-aldaketa zero da”.

M. Planck haratago joan zen, eta zera proposatu zuen: ez bakarrik entropia-aldakuntza, baizik eta substantzia ororen entropia 0 K-ean 0 izango zela.

Planck-en enuntziatua: “Solido puru baten entropia 0 absolutuan 0 izango da”.

Esperimentalki, aspalditik saiatu dira gero eta tenperatura baxuagoak lortzen. Gorputzak hozteko Joule-Thomson efektuari jarraituz, gasen espantsio adiabatikoak gertarazten dira, eta gasa hoztuz joaten da, egoera likidora pasatu arte. Sir James Dewar-ek, 1898an, hidrogeno likidoa lortu zuen. Hasteko, konpresio isotermikoa gertatzen da (tenperatura konstante mantenduz), eta, ondoren, espantsio adiabatikoa gertatu, eta gasa hoztu egingo da. Lehen espantsioan hoztutako gasa berriro ere isotermikoki konprimatu, lehen espantsioan hoztutako gas zati bat erabiliz, eta, ondoren, espantsio adiabatikoa gertatuko da, berriro ere. Behin eta berriz errepikatuz, gasa likido egoerara iritsiko da. Modu horretan eta helio likidoarekin lan eginez lorturiko tenperaturarik baxuena 1 K-etik gertu dago. Tenperatura horretatik behera joateko, desmagnetizazio adiabatikora jo behar da. Bortizki magnetizatuta dauden gatz paramagnetikoetan gertatzen da efektu hori. Ahalik eta tenperaturarik baxuenean, eremu magnetiko bortitz batek gatz magnetizatuko du. Gatzak ingurunearen tenperatura hartu duenean, eremu magnetikoa eten egiten da, eta substantzia desmagnetizatu egingo da, beroa erabiliz, eta, horrenbestez, substantzia hoztu egingo da. Esperimentalki, zera ikusi da: laneko tenperatura zenbat eta baxuagoa izan, orduan eta zailagoa da gehiago jaitea. Frogatuko ez badugu ere, zera ondorioztatu daiteke 3. printzipiotik: “Ezinezkoa da zero absolutua lortzea urrats finitu multzoa erabiliz”.

Beraz, hitzarmenez, entropiaren balioa 0 K-ean 0 izango da substantzia kristalino puruentzat, eta, haren balioa beste edozein tenperaturatan kalkulatzeko, ekuazio hau erabiliko dugu:

$$S_T - S_0 = \int_0^T \frac{C_p dT}{T}$$

Substantzia hori berotutakoan solido-likido egoera-aldaketa gertatu baldin bada:

$$\text{Likidoak: } S(T) = S(0) + \int_0^{T_m} \frac{C_p(s)}{T} dT + \frac{\Delta_m H}{T_m} + \int_{T_m}^T \frac{C_p(l)}{T} dT$$

Eta, berotze horretan lurrundu eta gas egoerara pasatu baldin bada:

$$\text{Gas: } S(T) = S(0) + \int_0^{T_m} \frac{C_p(s)}{T} dT + \frac{\Delta_m H}{T_m} + \int_{T_m}^{T_{\text{lur}}} \frac{C_p(l)}{T} dT + \frac{\Delta_{\text{lur}} H}{T_{\text{lur}}} + \int_{T_{\text{lur}}}^T \frac{C_p(g)}{T} dT$$

Formula hori erabiliz, substantzia ororen entropia molar absolutuak kalkulatu dira:

SUBSTANTZIA	ENTROPIA MOLAR ABSOLUTUA (J/(K MOL))
GASAK	
Amoniakoa (NH ₃)	192,5
Karbono dioxidoa (CO ₂)	213,7
Hidrogenoa (H ₂)	130,7
Nitrogenoa (N ₂)	191,6
Oxigenoa (O ₂)	205,1
Ur lurrina (H ₂ O)	188,8
LIKIDOAK	
Ura (H ₂ O)	69,9
Etanola (CH ₃ CH ₂ OH)	160,7
Bentzenoa (C ₆ H ₆)	173,3
SOLIDOAK	
Kaltzio oxidoa (CaO)	39,8
Kaltzio karbonatoa (CaCO ₃)	92,9
Kobrea (Cu)	33,2
Diamantea (C)	2,4
Grafitoa (C)	5,7
Beruna (Pb)	64,8
Sodio kloruroa (NaCl)	72,1
Sakarosa (C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁)	360,2
Iodoa (I ₂)	116,1

3.1. taula: Zenbait substantziaren entropia molar absolutuak

Eta, taulako datuak erabiliz, konposatu askoren formazio-entropiak kalkula daitezke.

Adib.

$$H_2(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \Rightarrow H_2O(l)$$
$$\Delta_f S^0 = S^0(H_2O) - S^0(H_2) - \frac{1}{2}S^0(O_2) =$$
$$69.9 - 130.7 - 0.5 \times 205.1 = -163.3 JK^{-1} mol^{-1}$$

3.4.- GIBBS ENERGIA ASKEA

Entropia magnitudea sartzeak aukera eman digu jakiteko noiz izango diren prozesuak berezkoak eta noiz ez; prozesu itzulgarria gertatutakoan, unibertsoaren entropia-aldaketa zero izango da, eta, aldiz, prozesu itzulezina gertatutakoan, unibertsoaren entropia handiagoa egingo da.

Baina ba al dago magnituderik prozesu baten itzulgarritasuna esango diguna, unibertso osoaren entropia kalkulatzeko ibili behar izan gabe?

Demagun sistemak beroa jaso duela, presio konstantean, temperatura aldatu gabe (adibidez, fusioan), eta inguruneak bero hori galdu duela, temperatura ere aldatu gabe:

$$\Delta S_{ingurunea} = -\frac{\Delta H}{T}$$

Unibertso osoaren entropia-aldaketa honela kalkulatu dugu:

$$\Delta S_{unib} = \Delta S + \Delta S_{ingurunea} = \Delta S - \frac{\Delta H}{T}$$
$$-T\Delta S_{unib} = \Delta H - T\Delta S$$

Bai ΔH , bai ΔS , bai T sistemaren aldagaiak dira. Funtzio termodinamiko berri bat definitu dugu; G funtzioa, hain zuzen ere:

$$G = H - T \cdot S$$

Eta Gibbs-en funtzioa, Gibbs-en energia askea esango diogu funtzio horri.

Gainerako magnitudeak egoera-funtzioak direnez, G ere egoera-funtzioa izango da. Aldaketa edo transformazioa tenperatura konstantean gertatuz gero:

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Beraz:

$$-T\Delta S_{unib} = \Delta H - T\Delta S = \Delta G$$

Ikusi dugu unibertsoaren entropia-aldaketa positiboa dela prozesu itzulezinetan:

$$-T \cdot \Delta S_{unib} < 0$$

Beraz: $\Delta G_{sist} < 0$

Presio eta tenperatura konstantean, prozesu bat berezkoa denean (itzulezina), Gibbs-en energia-aldaketa negatiboa izango da, eta, prozesua orekan dagoenean (itzulgarria), Gibbs-en energia-aldaketa 0 izango da.

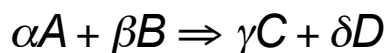
3.6.- GIBBS FORMAIZIO-ENERGIA ESTANDARRA

Termokimika ikusi genuenean, ikusi genuen zein egokia zen zenbait konposaturen formazio-entalpiak tabulatuta egotea, edozein erreakziori dagokion entalpia-aldaketa kalkula baitaiteke haietatik abiatuz. Gauza bera egin genuen entropiarekin, eta, orain, antzera egin dezakegu Gibbs-en energia askearekin. Entalpiarekin gertatzen zenaren antzera, ez da posible Gibbs-en energiaren balio absolutuak lortzea, eta, horrexegatik, hitzarmenez onartu egiten da Gibbs-en energia estandarra 0 dela elementu orotan, egoerarik egonkorrean. Horrenbestez, konposatu baten G^0 balioa bere sintesi-erreakzioari dagokion Gibbs-en energiaren aldaketa izango da; betiere, egoera estandarrean dauden elementuetatik abiatuz lortu bada.

Entalpiarekin eta entropiarekin egin genuenaren antzera, Gibbs-en formaziozko energiak tabulatuta daude konposatu askotan, eta horrek aukera ematen digu Gibbs-en energiaren aldaketa edozein erreakziotan kalkulatu ahal izateko.

SUBSTANTZIA	FORMAZIOZKO ENERGIA ASKE ESTANDARRA (kJ/mol)
GASAK	
Amoniakoa (NH ₃)	-16,5
Karbono dioxidoa (CO ₂)	-394,4
Nitrogeno tetroxidoa (N ₂ O ₄)	97,9
Hidrogeno ioduroa (HI)	1,7
Nitrogeno dioxidoa (NO ₂)	51,3
Anhidrido sulfurosoa (SO ₂)	-300,2
Ur lurrina (H ₂ O)	-228,6
LIKIDOAK	
Ura (H ₂ O)	-237,1
Etanola (CH ₃ CH ₂ OH)	-174,8
Bentzenoa (C ₆ H ₆)	124,3
SOLIDOAK	
Kaltzio karbonatoa (CaCO ₃)	-1128,8
Oxido ferrikoa (Fe ₂ O ₃)	-742,2
Zilar bromuroa (AgBr)	-96,9
Zilar kloruroa (AgCl)	-109,8

3.2. taula: Zenbait konposaturen formazio-energia aske estandarrak



Gibbs-en energia-aldaketa erreakzio horretan kalkulatzeko:

$$\Delta_r G^0 = \gamma \Delta_f G^0(C) + \delta \Delta_f G^0(D) - \alpha \Delta_f G^0(A) - \beta \Delta_f G^0(B)$$

