

# 3. TERMODINAMIKA KIMIKOA

Termokimikak erreakzio kimikoetan gertatzen diren bero-aldaketak aztertzen ditu.  
 Erreakzio kimikoetan → energia-trukea → beroa

## Erreakzio entalpia ( $\Delta H$ ) [KJ / mol]

- Presio konstantean, prozesu batean xurgatutako edo askatutako beroari entalpiaren aldakuntza deritzo.
- $\Delta H$  tenperatura eta presioaren araberakoa da.
- $V_{kte}$ ,  $P_{kte}$  → guk presioa hartuko dugu konstante bezala
- Entalpiak neurtzeko, eraketa-erreakzioak erabili:

$$\Delta H_{\text{erreakzio}} = H_{\text{produktu}} - H_{\text{erreaktibo}}$$

ERREAKTIBOAK

→

PRODUKTUAK

↓

$$H_p - H_0 = \Delta H = Q_p$$

{  $\Delta$  = aldakuntza  
 H = entalpia  
 Q = beroa  
 P = presio kte

- Konposatuaren mol baten eraketaren prozesua, osatzen diren elementuetatik abiatuta.
- Magnitude estentsiboa da, hau da, zuzenki proportzionala.  
 Mola bikoiztu → entalpia bikoiztu
- Egoera funtzioa da.  
 Erreakzioaren noranzkoa aldatu → entalpiaren zeinua aldatu

$\Delta H < 0$	$\Delta H > 0$
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Erreakzio EXOTERMIKOA.  <math>H_{\text{prod.}} &lt; H_{\text{erreakt.}}</math></li> <li>• Energia askatzen da.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Erreakzio ENDOTERMIKOA.  <math>H_{\text{prod.}} &gt; H_{\text{erreakt.}}</math></li> <li>• Energia xurgatzen da.</li> </ul>

## I. $\Delta H^\circ_f$ → ERAKETA-ENTALPIA ESTANDARRA (= ERAKETA-BEROA)

- Egoera estandarretan.

**EGOERA ESTANDARRA (EE)**

$P = 1\text{atm}$

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

- Substantzia baten mol baten eraketaren entalpiaren-aldakuntza ( $\Delta H$ ) da.
  - POSITIBOAK eta NEGATIBOAK
- Elementu kimikoen entalpia estandarra 0-tzat hartzen da.  
 $\Delta H^\circ_{\text{elem.}} = 0$

## II. $\Delta H^\circ \rightarrow$ ERREKUNTZA-ENTALPIA ESTANDARRA (ERREKUNTZA-BEROA)

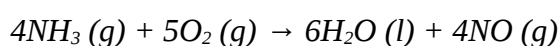
- Egoera estandarretan.
- Substantzia baten mol baten erretzean entalpiaren-aldakuntza ( $\Delta H$ ) da.
  - NEGATIBOAK DIRA

### Erreakzio baten entalpia aldakuntza kalkulatzeko erak:

#### 1. Eraketa-entalpia estandarretatik:

(erreakzio-entalpia estandarren kalkulua)

$$\Delta H^\circ_{\text{erreakzio}} = \sum n \cdot \Delta H^\circ_{\text{fprod.}} - \sum m \cdot \Delta H^\circ_{\text{ferreakt.}}$$



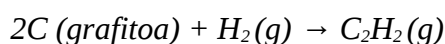
$\Delta H^\circ_{\text{erreakzio}}?$

$$\Delta H^\circ_{\text{errekz.}} = 6 \cdot \Delta H^\circ_{\text{fH}_2\text{O}} + 4 \cdot \Delta H^\circ_{\text{fNO}} - 4 \cdot \Delta H^\circ_{\text{fNH}_3} - 5 \cdot \Delta H^\circ_{\text{fO}_2} = \\ 6 \cdot (-285,8) + 4 \cdot 90,4 - 4 \cdot (-46,3) - 5 \cdot 0 = -1168 \text{ KJ / mol}$$

#### 2. Hess-en legea

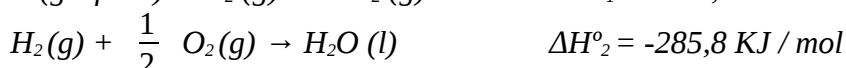
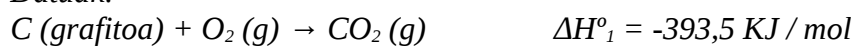
- Erreakzio bat etapaka agertzen denean, entalpiaren-aldakuntza tarteko etapa horietako entalpien batuketa da.

$$\Delta H_{\text{erreakzio}} = \Delta H_a + \Delta H_b + \dots$$



$\Delta H^\circ_{\text{erreakzio}}?$

Datuak:



$$\Delta H^\circ_{\text{erreakzioa}} = 2 \cdot \Delta H^\circ_1 + \Delta H^\circ_2 + \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \Delta H^\circ_3 =$$

$$2 \cdot (-393,5) + (-285,8) + \left[\left(-\frac{1}{2}\right) \cdot (-2598,5)\right] = 226,45 \text{ KJ / mol}$$

### 3. Lotura-entalpia

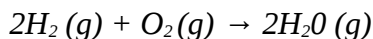
(erreakzio-entalpia estandarren kalkulua)

- loturen apurketak → energia kontsumitzen
- loturen eraketak → energia askatzen

↓

Entalpiaren aldakuntza = kontsumitutako energia – askatutako energia

$$\Delta H^{\circ}_{\text{erreakzio}} = \sum m \cdot \Delta H_{\text{lot apur.}} - \sum n \cdot \Delta H_{\text{lot erat.}}$$



$\Delta H^{\circ}_{\text{erreakzio}}?$

*Datuak:*

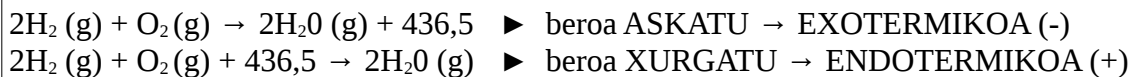
$$\Delta H_{\text{H-H}} = 436,4 \text{ KJ / mol}$$

$$\Delta H_{\text{O=O}} = 498 \text{ KJ / mol}$$

$$\Delta H_{\text{O-H}} = 460 \text{ KJ / mol}$$

$$\Delta H^{\circ}_{\text{erreakzio}} = \sum m \cdot \Delta H_{\text{lot apur.}} - \sum n \cdot \Delta H_{\text{lot erat.}} = 2 \cdot \Delta H_{\text{H-H}} + \Delta H_{\text{O=O}} - 4 \cdot \Delta H_{\text{O-H}} = 2 \cdot 436,4 + 498 - 4 \cdot 460 = -436,5 \text{ KJ / mol}$$

<u>O<sub>2</sub></u>	<u>CO<sub>2</sub></u>	<u>H<sub>2</sub></u>	<u>Cl<sub>2</sub></u>
O = O	O = C = O	H – H	Cl – Cl
<u>CH ≡ CH</u>	<u>H<sub>2</sub>O</u>	<u>Br<sub>2</sub></u>	<u>HCl</u>
H – C ≡ C – H	H – O – H	Br – Br	H – Cl



### Erreakzio entropia ( $\Delta S$ ) [J / K · mol]

- Sistemen desordena molekularren maila neurtzen du.
- $S \uparrow$  : sistema baten molekula desordenatzen dira (gasak)
- $S \downarrow$  : sistema baten molekula ordenatzen dira (solidoak)
- Erreakzio baten  $\Delta S$  kalkulatzeko:

$$\Delta S_{\text{erreakzio}} = S_{\text{prod.}} - S_{\text{erreakt.}} = \sum n \cdot S^{\circ}_{\text{prod.}} - \sum m \cdot S^{\circ}_{\text{erreakt.}}$$

<u><math>\Delta S &lt; 0</math></u>	<u><math>\Delta S &gt; 0</math></u>
$S_{\text{prod.}} < S_{\text{erreakt.}}$ • Desordena gutxitzen	$S_{\text{prod.}} > S_{\text{erreakt.}}$ • Desordena handitzen

- Gainera termodinamikaren 3. printzipioak dio:
  - Sistema bat 0K-ean dagoenean sistema horren entropia 0ere izango da.
$$T = 0\text{K} \rightarrow S = 0 \text{ J / K} \cdot \text{mol}$$

- ➔ Magnitude intentsiboa da.
- Ez dago substantzia kantitatearen menpe.
- ➔ Egoera-funtzioa da.

## I. $\Delta S^\circ \rightarrow$ ENTROPIA MOLAR ESTANDARRA

- Egoera estandarretan.
- Substantzia baten mol batek duen entropia.

$$1000 \text{ J} = 1 \text{ KJ}$$

## Energia askea (G) [KJ / mol]

- Entalpia eta entropia erlazionatu behar dira jakiteko prozesu bat ESPONTANEOA izango den.
- $\Delta G$  kalkulatzeko GIBSS-en EKUAZIOA erabiltzen da:

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

- Magnitude estentsiboa da.
  - Hess-en legea erabili dezakegu
- Egoera-funtzio da.

## I. $\Delta G^\circ_f \rightarrow$ ERAKETA-ENERGIA ASKE ESTANDARRA

- Egoera estandarretan.
- Substantzia baten mol baten eraketaren energia askearen aldakuntza da.
- $\Delta G^\circ_{\text{felementu}} = 0$

## II. $\Delta G^\circ_{\text{erreakzio}} \rightarrow$ ERREAKZIOAREN ENERGIA ASKE ESTANDARRA

- Egoera estandarretan.

$$\Delta G^\circ_{\text{erreakzio}} = \sum n \cdot \Delta G^\circ_{\text{fprod.}} - \sum m \cdot \Delta G^\circ_{\text{ferreakt.}}$$

## Erreakzio kimiko baten espontaneotasuna

Jakiteko erreakzio kimiko bat espontaneoki gerta daitekeen bai  $\Delta H$ , bai  $\Delta S$  eta bai  $\Delta G$  aztertu behar dira.

- $\Delta G < 0 \rightarrow$  espontaneoa
- $\Delta G > 0 \rightarrow$  ez-espontaneoa
- $\Delta G = 0 \rightarrow$  sistema orekan dago

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

$$\Delta H < 0, \Delta S > 0 \rightarrow \Delta G < 0 \rightarrow \text{ESPONTANEOA}$$

$$\Delta H < 0, \Delta S < 0 \rightarrow \begin{array}{l} T \downarrow \rightarrow \Delta G < 0 \rightarrow \text{ESPONTANEOA} \\ T \uparrow \rightarrow \Delta G > 0 \rightarrow \text{EZ-ESPONTANEOA} \end{array}$$

$$\Delta H > 0, \Delta S > 0 \rightarrow \begin{array}{l} T \downarrow \rightarrow \Delta G > 0 \rightarrow \text{EZ-ESPONTANEOA} \\ T \uparrow \rightarrow \Delta G < 0 \rightarrow \text{ESPONTANEOA} \end{array}$$

$$\Delta H > 0, \Delta S < 0 \rightarrow \Delta G > 0 \rightarrow \text{EZ-ESPONTANEOA}$$