

Entalpi, entropi och fri energi

Datum: 2024-01-02

Inledning

Entalpi är den energi som finns lagrad i ett ämne och den består av termisk och kemisk energi. Den är värme- och tryckberoende. Storheten för entalpi är H .

Entropi är ett mått på graden av oordning i ett system. Ett högre värde visar en högre grad av oordning. För att endoterma reaktioner ska ske spontant måste oordningen öka, alltså att det sker en entropiökning. Storheten för entropi är S .

Den fria energin eller gibbsenergin, är den energi som driver en reaktion. Storheten för den fria energin är G . Vid en spontan reaktion, minskar alltid den fria energin, $\Delta G < 0$. När ett nytt jämviktsläge ställer in sig är den fria energin vid sitt minimum.

Sambandet mellan entalpi, entropi och fri energi

För en reaktion som sker i ett stängt system med samma tryck och temperatur gäller följande samband mellan förändringarna av den fria energin, entalpin och entropin:

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \quad (\text{Ekvation 1})$$

Tecknet Δ står för förändring.

G = gibbsenergin, den fria energin S = entropi, oordning

H = entalpi, värmeinnehåll T = temperaturen i Kelvin

Temperaturen utgår från absoluta nollpunkten, 0 K. Det innebär att $T > 0$ i alla system. Rumstemperatur 25 °C motsvarar 298 K. Entropin, entalpin och den fria energin kan ha både positiva och negativa värden. För en given process kan man beräkna termerna för varje reaktant med följande allmänna ekvationer, där X motsvarar storheterna H , S eller G .

$$\Delta X^0 = \sum X^0(\text{produkter}) - \sum X^0(\text{reaktanter}) \quad \text{eller} \quad \Delta X^0 = \sum \Delta X^0(\text{produkter}) - \sum \Delta X^0(\text{reaktanter})$$

Tabell 1: Entropivärden för några olika joner och molekyler samt värden på förändringar av entalpi och Gibbs fria energi för bildandet av några olika joner och molekyler från grundämnena de består av.

Ämne	S^0 (kJ/K · mol)	ΔH^0 (kJ/mol)	ΔG^0 (kJ/mol)
HCO_3^-	0,09494	-691,1	-587,1
H^+	0	0	0
$\text{H}_2\text{O}(l)$	0,0699	-285,8	-237,2
$\text{CO}_2(g)$	0,2136	-393,5	-394,4

Material

Vinäger (5–10 % ättiksyra), natriumvätekarbonat (*bikarbonat*), bägare, tesked, matsked, termometer.

Utförande

- Häll två matskedar vinäger i en bägare. Mät temperaturen. Tillsätt två teskedar bakpulver i bägaren.
 - Beskriv vad som händer vid reaktionen i bägaren? Mät temperaturen under reaktionsförloppet.
 - Skriv de kemiska formlerna för vinäger (ättika) och bikarbonat.
 - Skriv en reaktionsformel för reaktionen i jonform.
- Har systemets entropi förändrats? Förklara. Använd entropidata från tabell 1 och beräkna entropiförändringen (ΔS) för reaktionen.
- Vilken betydelse har tecknet framför entalpin? Beräkna entalpiförändringen ΔH för din reaktion utgående från data i Tabell 1. Visa beräkningarna och diskutera dina slutsatser.
- Det finns två sätt att beräkna förändringar av "den fria energin" ΔG . Antingen genom att använda data i Tabell 1 eller genom att använda beräkningarna från punkt 2 och 3 (reaktionen kan antas ske vid 25°C) med det givna sambandet. Jämför värdena! Vilka slutsatser om reaktionen kan du dra utifrån dina beräkningar av ΔG ?
- Tänk dig en process där is smälter vid rumstemperatur. Argumentera för hur entropin, entalpin och den fria energin förändras utan att göra beräkningar.
- Fyll i tabellen. Utgå från sambandet $\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$.

Tabell 2: Värden på ΔH och ΔS avgör om den ändringen av den fria energin ΔG är positiv eller negativ.

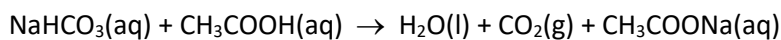
ΔH	ΔS	ΔG
Positiv	Negativ	
Negativ	Positiv	
Stor och negativ	Liten och positiv	
Liten och negativ	Stor och positiv	

Till läraren

Teori

1. Reaktionen är en neutralisationsreaktion. Ättiksyra neutraliseras av bikarbonaten som är basisk. Gasutveckling uppstår under reaktionen vilket syns som bubblor och temperaturen sjunker. Reaktionen är endoterm, $\Delta H > 0$.

Reaktionsformeln skrivs enligt följande:



Nettoekvationen för neutralisationsreaktionen i jonform:



2. Entropin är ett mått på oordning. En positiv förändring i entropivärdet ($\Delta S > 0$) indikerar att systemet har blivit mer ordnat. En negativ förändring ($\Delta S < 0$) visar på att systemet har fått ökad ordning. En gas har större oordning än vätska. Entropin ökar när ämnen går från (s) eller (l) till (g) och när antal mol i produkten ökar jämfört med reaktanterna. I detta exempel utvecklas gas i steg 1, därför har entropin ökat. Entropiförändringen för reaktionen, $\Delta S = 213,6 + 69,9 - 94,94 = +188,56 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$. $\Delta S = 188,6 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$. Värdet visar på att oordningen har ökat ($\Delta S > 0$). Observera att entropivärdena i tabellen anges i $\text{kJ}/(\text{mol}\cdot\text{K})$.
3. Entalpin mäter värmeinnehållet. För en endoterm reaktion är entalpiförändringen positiv, $\Delta H > 0$. För en exoterm reaktion är entalpiförändringen negativ, $\Delta H < 0$. Systemet får ett minskat värmeinnehåll då reaktionen är exoterm. I detta exempel är entalpiförändringen, $\Delta H = -393,5 - 285,8 - (691,1) = 11,8 \text{ kJ/mol}$.
4. Den fria energin beskriver den mängd energi som är tillgänglig för "arbete". Om förändringen i den fria energin, ΔG är negativ, innebär det att processen är spontan. Om $\Delta G > 0$ sker inte processen spontant. Med tabellvärden för den fria energin blir $\Delta G = -394,4 - 237,2 - (-587,1) = -44,5 \text{ kJ/mol}$. Med de beräknade entropi- och entalpiförändringarna från punkt 2 och 3 och det givna sambandet, blir $\Delta G = 11,8 - 298 \cdot 188,56 - 44,4 \text{ kJ/mol}$. Ungefär samma värde erhålls i de olika beräkningarna. $\Delta G < 0$, alltså sker reaktionen spontant.
5. Isbiten smälter vid rumstemperatur. Det är därför en spontan reaktion och $\Delta G < 0$. En fasförändring från fast till vätska ökar oordningen; entropiförändringen är positiv ($\Delta S > 0$). Värme tas upp, alltså är reaktionen endoterm, entalpiförändringen är positiv ($\Delta H > 0$).

6.

ΔH	ΔS	ΔG
Positiv	Negativ	<i>Positiv</i>
Negativ	Positiv	<i>Negativ</i>
Stor och negativ	Liten och positiv	<i>Negativ</i>
Liten och negativ	Stor och positiv	<i>Negativ</i>

Övrigt

Idén till materialet är hämtad från www.terrificscience.org/lessonpdfs/Entropy.pdf

Underlag för riskbedömning – Entalpi, entropi och fri energi

En anpassning av riskbedömningen görs på arbetsplatsen.

Kemikalie	Faropiktogram och faroangivelser	Om något händer
Vinäger	Ej märkningspliktigt.	Vid ögonkontakt: Skölj med ljummet vatten.
Natriumvätekarbonat $\text{NaHCO}_3(\text{s})$ (bikarbonat)	Ej märkningspliktigt.	
Natriumacetat $\text{CH}_3\text{COONa}(\text{aq})$	Produkten som bildas är inte märkningspliktig.	

Förebyggande åtgärder	
Avfall och andra kommentarer	Alla lösningar som bildas kan hällas ut i vasken.

Datum	2024-01-02	Utförd av	KRC	Klass	
--------------	------------	------------------	-----	--------------	--