

Entalpi, entropi och fri energi

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 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 . För att en reaktion skall kunna ske måste det ske en entalpinminskning eller en entropiökning. Riktningen i reaktionen bestäms av om den fria energin minskar. När en spontan reaktion sker, minskar alltid den fria energin ($\Delta G < 0$). När ett nytt jämviktsläge har uppnåtts är den fria energin vid sitt minimum. För en reaktion som sker i ett stängt system med samma tryck och temperatur gäller följande samband mellan förändringar av den fria energin, entalpin och entropin:

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

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

H = entalpi, värmeinnehåll T = temperaturen i Kelvin

Tecknet Δ står för förändring

Temperaturen anges utifrån den absoluta nollpunkten 0 K, vilket 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 räkna fram termerna för varje reaktant med följande allmänna ekvationer, där X står för storheterna H , S eller G .

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

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

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
$\text{CO}_2(\text{g})$	0,2136	-393,5	-394,4

Material

Vinäger (utspädd ättiksyra), bikarbonat, bägare, tesked, matsked, termometer.

Utförande

- Häll två matskedar vinäger i en bägare. Mät temperaturen. Tillsätt två teskedar bakpulver i bägaren.
 - Vad för slags förändring sker? Mät temperaturen.
 - Skriv de kemiska formlerna för vinäger (ättika) och bikarbonat.
 - Skriv formeln för reaktionen i jonform.
- Har entropin förändrats i systemet? Förklara. Använd entropidata från tabell 1 och beräkna entropiförändringen (ΔS) för reaktionen.
- Vilken betydelse har tecknet framför entalpi? 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 använda beräkningarna från punkt 2 och 3 (antag att reaktionen sker vid 25°C) med det givna sambandet. Jämför värdena! Vad säger de om den förändring som har skett?
- Tänk dig en process där is smälter vid rumstemperatur. Vad för slags förändring är det, energetiskt sett? Argumentera för åt vilket håll entropin, entalpin och den fria energin bör ändras utan att göra beräkningar.
- Försök nu att fylla i följande tabell. 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

Datum: 2023-09-05

Målgrupp

[Gy]

Underlag för riskbedömning

Vinäger (utspädd ättiksyra) och **Bikarbonat** (natriumvätekarbonat): ej märkespliktiga

En fullständig riskbedömning ges av undervisande lärare.

Teori

1. Det syns och hörs bubblor och under reaktionen blir det kallare. Reaktionsformeln skrivs enligt följande:
$$\text{NaHCO}_3(\text{aq}) + \text{CH}_3\text{COOH}(\text{aq}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{CO}_2(\text{g}) + \text{CH}_3\text{COONa}(\text{aq})$$

Nettoekvationen för neutralisationsreaktionen är:
$$\text{HCO}_3^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{CO}_2(\text{g})$$
2. Entropin mäter oordningen. En positiv förändring i entropivärdet ($\Delta S > 0$) indikerar att systemet har blivit mer oordnat och 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! 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, $\Delta H < 0$ (värme går ur systemet). Systemet blir kallare 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, indikerar det att processen är spontan. Ett positivt värde på ΔG visar att processen inte är spontan. 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 $\Delta G = 11,8 - 298 \cdot 188,56 - 44,4 \text{ kJ/mol}$. Nästan samma värde i de olika beräkningarna. Förändringen av den fria energin, $\Delta G < 0$, är negativ, vilket visar att reaktionen sker spontant.
5. Isbiten smälter. Is smälter vid rumstemperatur. Det är därför en spontan reaktion och den fria energin är negativ. En fasförändring från fast till vätska ökar oordningen; entropiförändringen är positiv ($\Delta S > 0$). Värme tas upp, processen är endoterm, entalpiförändringen är positiv ($\Delta H > 0$).

6.

Tabell 3: Värden på ΔH och ΔS avgör om den fria energin ΔG är positiv eller negativ.

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

Källa: www.terrificscience.org/lessonpdfs/Entropy.pdf



Webbplats: www.su.se/krc