

II.- TERMODINAMIKA KIMIKOA

(Oharra: behar diren datu termodinamikoaren balioak, "Datu Termodinamiko" fitxategian bilatu)

KALORIMETRIA

1. Ponpa kalorimetriko batean 200 g-ko pakete bat patata frijituen eduki energetikoa neurtu nahi da.
 - Horretarako, lehenengoz, ponpa kalibratzen da. Inguru tenperaturan (19,6 °C) dagoen ponpa kalorimetrikoan 150 mL ur sartzen dira tenperatura berean. Ondoren 40,3 °C-tan dagoen 150 mL ur gainean botatzen da eta bukaerako tenperatura 28,2 °C dela neurtu da.
 - Ondoren paketetik 2,7 g sartzen dira eta oxigeno soberarekin betetzen da. Txinpart elektroniko bati esker pataten errekontza sortzen da eta erreakzioaren ondorioz aurreko uraren tenperatura 28,2 °C-tik 69,4 °C-ra igotzen da.
 - ✓ Zein da paketearen errekontzatik askatzen den beroa?
 - ✓ Paketearen eduki energetiko kilokaloria 100 gramoko eta kilojoule 100 gramoko moduan agertu behar da, eta halaber eduki totala. Zein kantitate jarri behar dira?
- Datua: $C(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = 75,291 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$

PLANTEAMENDUA

Ponpa kalorimetriko batean gertatzen den prozesuaren beroa kuantifikatzeko aurretik ponpa kalibratu egin behar. Horretarako ura erabiltzen da. Uraren tenperatura aldaketatik ponparen konstantea determina daiteke.

Ondoren eta lagina erretzean askatzen den beroa uraren tenperaturaren aldaketatik kalkulatu da, eta laginaren kantitatea kontutan hartuz eduki energetikoa.

PROZEDURA

Ponpa kalorimetrikoaren kalibrazioa

Ponpa kalorimetrikoa sistema adiabatikoa da, inguruarekin ez dago bero trukerik. Beraz, ur berotik askatzen den beroa ur hotzak eta ponpa kalorimetrikoak xurgatzen dute.

$$\begin{aligned}
 q_{\text{tot}} &= 0 & q_{\text{tot}} &= q_{\text{bero}} + q_{\text{hotza}} + q_{\text{kalori}} = 0 \\
 & & -q_{\text{bero}} &= q_{\text{hotza}} + q_{\text{kalori}} \\
 & & q_{\text{ura}} &= n \cdot c \cdot \Delta T \\
 q_{\text{bero}} &= \frac{150 \text{ mL} \cdot 1,000 \frac{\text{g}}{\text{mL}}}{18,018 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \cdot 75,291 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot (28,2 \text{ °C} - 40,3 \text{ °C}) \text{ K} \\
 q_{\text{bero}} &= -7584,26 \text{ J}
 \end{aligned}$$

$$q_{\text{hotz}} = \frac{150 \text{ mL} \cdot 1,000 \frac{\text{g}}{\text{mL}}}{18,018 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \cdot 75,291 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot (28,2 \text{ } ^\circ\text{C} - 19,6 \text{ } ^\circ\text{C}) \text{ K}$$

$$q_{\text{hotz}} = 5390,46 \text{ J}$$

$$q_{\text{kalori}} = C_{\text{kalori}} \cdot \Delta T = C_{\text{kalori}} \cdot (28,2 \text{ } ^\circ\text{C} - 19,6 \text{ } ^\circ\text{C}) \text{ K} = 8,6 \text{ K} \cdot C_{\text{kalori}}$$

$$-q_{\text{bero}} = q_{\text{hotza}} + q_{\text{kalori}} \quad 7584,26 \text{ J} = 5390,46 \text{ J} + 8,6 \cdot C_{\text{kalori}}$$

$$C_{\text{kalori}} = 255,10 \text{ J/K}$$

Eduki energetiko

Sistema adiabatikoa denez, erreakziotik askatzen den beroa urak eta kalorimetroak xurgatzen dute

$$q_{\text{tot}} = 0 \quad q_{\text{tot}} = q_{\text{erreakzio}} + q_{\text{ura}} + q_{\text{kalori}} = 0$$

$$-q_{\text{erreakzio}} = q_{\text{ura}} + q_{\text{kalori}}$$

$$q_{\text{ura}} = \frac{300 \text{ mL} \cdot 1,000 \frac{\text{g}}{\text{mL}}}{18,018 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \cdot 75,291 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot (69,4 \text{ } ^\circ\text{C} - 28,2 \text{ } ^\circ\text{C}) \text{ K}$$

$$q_{\text{ura}} = 51645,17 \text{ J} = 51,65 \text{ kJ}$$

$$q_{\text{kalori}} = 255,10 \frac{\text{J}}{\text{K}} \cdot (69,4 \text{ } ^\circ\text{C} - 28,2 \text{ } ^\circ\text{C}) \text{ K}$$

$$q_{\text{kalori}} = 10510,10 \text{ J} = 10,51 \text{ kJ}$$

$$-q_{\text{erreakzio}} = 51,65 \text{ kJ} + 10,51 \text{ kJ}$$

$$q_{\text{erreakzio}} = -62,16 \text{ kJ}$$

Eduki energetiko:

$$\frac{62,16 \text{ kJ}}{2,7 \text{ g}} \times 100 \text{ g} = 2302 \text{ kJ} = 550 \text{ kcal}$$

Eduki energetiko: 2302 kJ 100 g-tan / 550 kcal 100 g-tan

Eduki energetiko totala:

$$\frac{2302 \text{ kJ}}{100 \text{ g}} \times 200 \text{ g} = 4604 \text{ kJ} = 1100 \text{ kcal}$$

Paketearen eduki energetiko totala: 4604 kJ / 1100 kcal

2. Propano erregai moduan erabiliz, 2,4 m-ko altuera duen 83 m²-ko pisu bat 15 °C-tik 20 °C-tara berotzeko gastua kalkulatu nahi da. Horretarako propanoaren errekuntza-entalpia behar da eta ponpa kalorimetriko batean neurtzen da.
- Lehenengoz, ponpa kalibratzen da: azido bentzoiko 1,02 g-ko lagin bat oxigeno soberarekin erretzen da eta ondorioz 2,0 L ur 20,12 °C-tik 21,73 °C-tara berotzen da.
 - Ondoren propanoa sartzen da, hain zuzen 25 °C-tan 5 atm-pean dagoen 100 mL propano sartzen dira eta erre ondoren ponparen eta uraren temperatura 2,66 °C igotzen da.
 - ✓ Zenbat kostatzen da pisua berotzea?
 - ✓ Zenbat izango da gastua propanoaren ordez gasolioa erabiltzen bada?

<i>Datuak:</i>	Propano	Azido bentzoiko	Ura
	Prezio=1,183 €/kg	$\Delta_c H^\circ = 3227 \text{ kJ/mol}$	$C = 75,291 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
	Gasolioa		Aire
	$d = 850 \text{ kg/m}^3$		$d(15^\circ\text{C}) = 1,23 \text{ kg/m}^3$
	Prezio=0,976 €/L		$C = 1005 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
	Erregai ahalmena $\approx 43,1 \text{ MJ/kg}$		

PLANTEAMENDUA

Hasteko, pisua berotzeko behar den beroa kalkulatu behar dugu. Behin hori lortuta zenbat propano behar den bero hori lortzeko eta bukatzeko gastua.

PROZEDURA

• Behar den beroa

Pisuan dagoen airearen kantitatea aterako dugu eta aire horren temperatura igotzeko beroa:

$$V = 83 \text{ m}^2 \times 2,4 \text{ m} = 199,2 \text{ m}^3$$

$$m(\text{aire}) = 199,2 \text{ m}^3 \times 1,23 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3} = 245,016 \text{ kg}$$

$$q(\text{aire}) = m \cdot c \cdot \Delta T = 245,016 \text{ kg} \cdot 1,005 \text{ kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} \cdot 5 \text{ K} = 1231 \text{ kJ}$$

$$\mathbf{q(\text{aire}) = 1231 \text{ kJ}}$$

• Propanoaren kantitatea

1231 kJ lortu behar dugu propanoaren errekuntzaren bidez, beraz

$$q(\text{propano}) = -1231 \text{ kJ} = \Delta_c H^\circ(\text{propano}) \cdot n(\text{propano})$$

$\Delta_c H^\circ(\text{propano})$ lortzeko ponpa kalorimetrikoa erabiliko dugu. Lehenengoz kalibrazioa eta ondoren propanoaren erreketa

Ponparen kalibrazioa

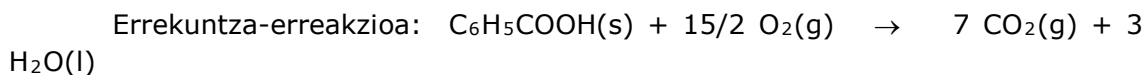
Sistema adiabatikoa denez, azido bentzoiko erretzean askatzen den beroa urak eta kalorimetroak xurgatzen dute. Erreketa, ponpa kalorimetrikoan gertatzen denez, beroa barne-energiarekin erlazionatzen da eta ez entalpiarekin.

$$q_{\text{tot}} = 0 \quad q_{\text{tot}} = q_{\text{bentzoiko}} + q_{\text{ura}} + q_{\text{kalori}} = 0$$

$$-q_{\text{bentzoiko}} = q_{\text{ura}} + q_{\text{kalori}}$$

$$q_{\text{bentzoiko}} = \Delta_c U^\circ(\text{bentzoiko}) \cdot n(\text{bentzoiko})$$

$\Delta_c H^\circ(\text{bentzoiko})$ ezaguna denez, $\Delta_c U^\circ(\text{bentzoiko})$ kalkula daiteke.



$$\Delta_c H^\circ = \Delta_c U^\circ + \Delta n(\text{gas})RT$$

$$-3227 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = \Delta_c U^\circ + \left(7 - \frac{15}{2}\right) 8,314 \cdot 10^{-3} \cdot 298,15$$

$$\Delta_c U^\circ = -3226 \text{ kJ/mol}$$

$$q_{\text{bentzoiko}} = \Delta_c U^\circ(\text{bentzoiko}) \cdot n(\text{bentzoiko})$$

$$q_{\text{bentzoiko}} = -3226 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \cdot \frac{1,02 \text{ g}}{122,12 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = -26,94 \text{ kJ}$$

$$q_{\text{ura}} = n \cdot c \cdot \Delta T$$

$$q_{\text{ura}} = \frac{2000 \text{ mL} \cdot 1,000 \frac{\text{g}}{\text{mL}}}{18,018 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \cdot 75,291 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot (21,73 - 20,12) \text{ K}$$

$$q_{\text{ura}} = 13,46 \text{ kJ}$$

$$q_{\text{kalori}} = C_{\text{kalori}} \cdot \Delta T = C_{\text{kalori}} \cdot (21,73 - 20,12) \text{ K}$$

$$-q_{\text{bentzoiko}} = q_{\text{ura}} + q_{\text{kalori}}$$

$$26,94 \text{ kJ} = 13,46 \text{ kJ} + C_{\text{kalori}} \cdot (21,73 \text{ }^\circ\text{C} - 20,12 \text{ }^\circ\text{C}) \text{ K}$$

$$C_{\text{kalori}} = 8,37 \text{ kJ/K}$$

Propanoaren errekuntza-entalpia

Propano erretzean lortzen den beroa.

$$q_{\text{tot}} = 0 \quad q_{\text{tot}} = q_{\text{propano}} + q_{\text{ura}} + q_{\text{kalori}} = 0$$

$$-q_{\text{propano}} = q_{\text{ura}} + q_{\text{kalori}}$$

$$-q_{\text{propano}} = \frac{2000 \text{ mL} \cdot 1,000 \frac{\text{g}}{\text{mL}}}{18,018 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \cdot 75,291 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 2,66 \text{ K} + 8,37 \text{ kJ/K} \cdot 2,66 \text{ K}$$

$$q_{\text{propano}} = -44,50 \text{ kJ}$$

Esperimentua ponpa kalorimetriko batean gertatzen denez, lortutako $q_{\text{propano}} = q_v$ da eta orduan erreakzioaren ΔU -rekin erlazionatu behar.

$$q_{\text{propano}} = \Delta_c U^\circ(\text{propano}) \cdot n(\text{propano}) = \Delta_c U^\circ(\text{propano}) \cdot \frac{PV}{RT}$$

$$-44,50 \text{ kJ} = \Delta_c U^\circ(\text{propano}) \cdot \frac{5 \text{ atm} \cdot 100 \cdot 10^{-3} \text{ L}}{0,082 \cdot 298,15} = \Delta_c U^\circ(\text{propano}) \cdot 0,020 \text{ mol}$$

$$\Delta_c U^\circ(\text{propano}) = \frac{-44,50 \text{ kJ}}{0,020 \text{ mol}} = -2176 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

ΔU -tik ΔH -a kalkula daiteke: $\Delta H = \Delta U + \Delta nRT$

Erreakzioa: $\text{C}_3\text{H}_8 (\text{g}) + 5 \text{O}_2 (\text{g}) \rightarrow 3 \text{CO}_2 (\text{g}) + 4 \text{H}_2\text{O} (\text{l})$

$$\Delta_c H^\circ = \Delta_c U^\circ + \Delta n(\text{gas})RT$$

$$\Delta_c H^\circ = -2176 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} + (3 - 6) 8,314 \cdot 10^{-3} \cdot 298,15$$

$$\Delta_c H^\circ = -2183 \text{ kJ/mol}$$

Propanoaren kantitatea

Pisua berotzeko erre behar den mol kopurua lortzeko q_{aire} eta $\Delta_c H(\text{propano})$ konparatuko dugu:

$$n(\text{propano}) = \frac{-1231 \text{ kJ}}{-2183 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}} = 0,564 \text{ mol}$$

• Propanoaren kostea

Propanoaren kantitatearekin eta merkatuan duen prezioa (€/kg) jakinik pisua berotzeko gastua kalkula daiteke:

$$m(\text{propano}) = 0,564 \text{ mol} \frac{44,16 \text{ g}}{1 \text{ mol}} = 24,90 \text{ g}$$

$$\text{Gastua} = 0,02490 \text{ kg} \times 1,183 \text{ €/kg} = 0,029 \text{ €}$$

• Gasolioaren kostea

Gasolioaren gastua kalkulatzeko bi datu ditugu, alde batetik prezioa eta bestetik erregai ahalmena, 43,1 MJ/kg; honek esan nahi du gasolio 1 kg erretzean 43,1 MJ lortzen direla. Pisua berotzeko 1231 kJ behar dugunez:

$$m(\text{gasolioa}) = \frac{1231 \text{ kJ}}{43100 \text{ kJ/kg}} = 0,0286 \text{ kg}$$

$$\text{Gastua (gasolioa)} = \frac{0,0286 \text{ kg}}{850 \cdot 10^{-3} \text{ kg L}} \times 0,976 \frac{\text{€}}{\text{L}}$$

$$\text{Gastua (gasolioa)} = 0,033 \text{ €}$$

TERMOKIMIKA

3. 25 °C-tan 150 mL heptanoa ponpa kalorimetriko batean guztiz erretzen da. Askatzen den beroaren bidez 20,5 °C-tan dagoen ur-kantitate bat berotzeko erabiltzen da eta 40,5 °C-ko tenperatura lortzen da. Kalkulatu uraren masa.

Datuak:	$\Delta_f H^\circ$	D(lot)	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	
	C(g)	C-C	$\Delta_c H^\circ(\text{H}_2, \text{g}) = -285,83$	$c_p(\text{H}_2\text{O}, \text{l})$
	H(g)	C-H	$\Delta_c H^\circ(\text{CO}, \text{g}) = -282,98$	$d(\text{C}_7\text{H}_{16}) = 0,684 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$
	CO(g)		$\Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{C}_7\text{H}_{16}) = 36,6$	

PLANTEAMENDUA

Heptanoaren erreketaren bidez beroa askatzen da eta bero hori ura berotzeko erabiltzen da. Uraren kantitatea determinatzeko, eta tenperatura aldaketa ezagutzen denez, aurretik kalkulatutako behar dugu zenbat bero askatzen den.

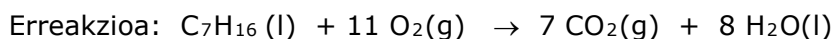
Askatzen den beroa, ponpa kalorimetriko batean egiten denez, erreakzioaren ΔU -tik eta erreakzionatzen duen mol kopurutik lortu behar dugu. ΔU , erreakzioaren entalpiatik lortzen da.

Hau da: $m(\text{ur}) \leftarrow q_v \leftarrow n(\text{heptano}) \leftarrow V, d, M_m$

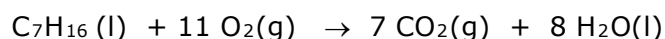
$\leftarrow \Delta U \leftarrow \Delta H \leftarrow \Delta_f H$

PROZEDURA

Beroa bolumen konstantean kalkulatzeko erreakzionatzen duen heptanoaren mol kopurua eta erreakzioaren barne energia kalkulatu behar da. Mol kopurua heptanoaren bolumena, dentsitatea eta masa molarrarekin, dena ezaguna, lortuko dugu. Barne energia entalpiatik lor daiteke eta azken hau errektibo eta produktuen formazio-entalpietatik.



Datuen artean ez dago errektiboen edo produktuen formazio-entalpiarik, beraz gainontzeko datuak eraili behar dira konposatu bakoitzaren formazio-entalpia lortzeko.



Entalpia

$$\Delta_r H^\circ = \sum \Delta_f H^\circ(\text{produktu}) - \sum \Delta_f H^\circ(\text{erreaktibo})$$

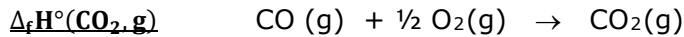
$$\Delta_r H^\circ = 7\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) + 8\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) - \Delta_f H^\circ(\text{C}_7\text{H}_{16}, \text{l}) - 11\Delta_f H^\circ(\text{O}_2, \text{g})$$

$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g})$ CO – ren erreketatik lortzen da

$\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l})$ H₂ – ren erreketatik lortzen da

$\Delta_f H^\circ(\text{C}_7\text{H}_{16}, \text{l})$ lotura energiaren bidez lortzen da

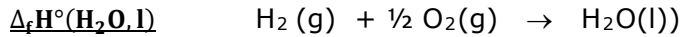
$\Delta_f H^\circ(\text{O}_2, \text{g}) = 0 \text{ kJ/mol}$



$$\Delta_c H^\circ(\text{CO, g}) = \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) - \Delta_f H^\circ(\text{CO, g}) - \frac{1}{2} \Delta_f H^\circ(\text{O}_2, \text{g})$$

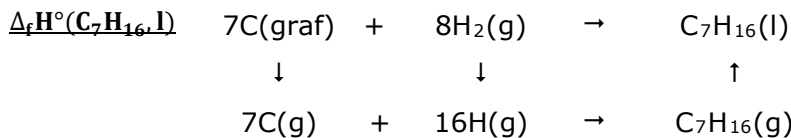
$$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = \Delta_c H^\circ(\text{CO, g}) + \Delta_f H^\circ(\text{CO, g}) = -282,98 + (-110,53) = -393,51 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = -393,51 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$



$$\Delta_c H^\circ(\text{H}_2, \text{g}) = \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O, l}) - \Delta_f H^\circ(\text{H}_2, \text{g}) - \frac{1}{2} \Delta_f H^\circ(\text{O}_2, \text{g}) = \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O, l})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O, l}) = -285,83 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$



$$\Delta_f H^\circ(\text{C}_7\text{H}_{16}, \text{l}) = 7\Delta_f H^\circ(\text{C, g}) + 16\Delta_f H^\circ(\text{H, g}) - [16\text{D}(\text{C}-\text{H}) + 6\text{D}(\text{C}-\text{C})] - \Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{C}_7\text{H}_{16})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{C}_7\text{H}_{16}, \text{l}) = 7 \times 716,68 + 16 \times 217,97 - 16 \times 413 - 6 \times 348 - 36,6 = -228 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{C}_7\text{H}_{16}, \text{l}) = -228 \text{ kJ/mol}$$

$\Delta_r H^\circ$

$$\Delta_r H^\circ = 7\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) + 8\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O, l}) - \Delta_f H^\circ(\text{C}_7\text{H}_{16}, \text{l})$$

$$\Delta_r H^\circ = 7(-393,51) + 8(-285,83) - (-228)$$

$$\Delta_r H^\circ = -4813 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Barne energia

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_r U^\circ + \Delta n(\text{gas}) \cdot RT$$

$$\Delta_r U^\circ = -4813 - (7 - 11) \cdot 8,31410^{-3} \cdot 298,15$$

$$\Delta_r U^\circ = -4803 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Mol kopurua

$$n = V \cdot d / M_m$$

$$n = 150 \text{ mL} \cdot 0,684 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} \frac{1 \text{ mol}}{100 \text{ g}} = 1,03 \text{ mol}$$

Beroa:

$$q_v = \Delta_r U^\circ \cdot n = -4803 \cdot 1,03 = -4928 \text{ kJ}$$

Ura

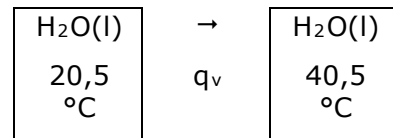
Askatzen den beroa urak xurgatzen du berotzeko: -
 $q_v = q(\text{ura}) = 4928 \text{ kJ}$

$$q(\text{ura}) = n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot c_p(\text{H}_2\text{O}, l) \cdot \Delta T$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{q(\text{ura})}{c_p(\text{H}_2\text{O}, l) \cdot \Delta T}$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{4928 \text{ kJ}}{75,291 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 20,0 \text{ K}} = 3273 \text{ mol}$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}} = 3273 \text{ mol} \cdot 18 \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$$



Emaítza: 59 kg

4. 58,2 g propano guztiz erretzen dira bolumena konstante mantenduz 25 °C-tan. Askatzen den beroaren bidez 10,3 °C-tan dagoen ur-kantitate bat berotzeko erabiltzen da eta 30,3 °C-ko tenperatura lortzen da. Kalkulatu uraren masa.

Datuak:	$\Delta_f H^\circ$	D(lot)	$\Delta_c H^\circ(\text{CO}, \text{g}) = -282,98 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
	C(g) CO(g)	C-C	$c_p(\text{H}_2\text{O}, \text{l})$
	H(g) H ₂ O(l)	C-H	

PLANTEAMENDUA

Propanoaren erreketaren bidez beroa askatzen da eta bero hori ura berotzeko erabiltzen da. Uraren kantitatea determinatzeko, tenperatura aldaketa ezaguna denez, aurretik kalkulatutako behar dugu zenbat bero askatzen den.

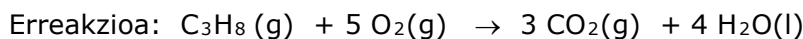
Askatzen den beroa, bolumen konstantean egiten denez, erreakzioaren ΔU -tik eta erreakzionatzen duen mol kopurutik lortu behar dugu. ΔU , erreakzioaren entalpiatik lortzen da.

Hau da: $m(\text{ur}) \leftarrow q_v \leftarrow n(\text{propano}) \leftarrow m, M_m$

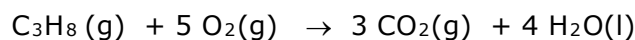
$$\leftarrow \Delta U \leftarrow \Delta H \leftarrow \Delta_f H$$

PROZEDURA

Beroa bolumen konstantean kalkulatzeko erreakzionatzen duen heptanoaren mol kopurua eta erreakzioaren barne energia kalkulatu behar da. Mol kopurua heptanoaren bolumena, dentsitatea eta masa molarrarekin, dena ezaguna, lortuko dugu. Barne energia entalpiatik lor daiteke eta azken hau erreaktibo eta produktuen formazio-entalpietatik.



Erreakzioko konposatuen formazio-entalpia, urarena izan ezik, ez ditugu ezagutzen, beraz ematen diren datuak eraili behar dira falta diren formazio-entalpia lortzeko.



Entalpia

$$\Delta_r H^\circ = \sum \Delta_f H^\circ(\text{produktu}) - \sum \Delta_f H^\circ(\text{erreaktibo})$$

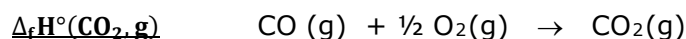
$$\Delta_r H^\circ = 3\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) + 4\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) - \Delta_f H^\circ(\text{C}_3\text{H}_8, \text{g}) - 5\Delta_f H^\circ(\text{O}_2, \text{g})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) \text{ CO - ren erreketatik lortzen da}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) = -285,83 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{C}_3\text{H}_8, \text{g}) \text{ lotura energiaren bidez lortzen da}$$

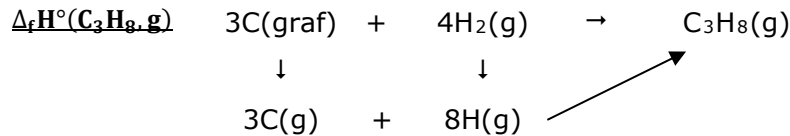
$$\Delta_f H^\circ(\text{O}_2, \text{g}) = 0 \text{ kJ/mol}$$



$$\Delta_c H^\circ(\text{CO}, \text{g}) = \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) - \Delta_f H^\circ(\text{CO}, \text{g}) - \frac{1}{2}\Delta_f H^\circ(\text{O}_2, \text{g})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = \Delta_c H^\circ(\text{CO}, \text{g}) + \Delta_f H^\circ(\text{CO}, \text{g}) = -282,98 + (-110,53) = -393,51 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = -393,51 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$



$$\Delta_f H^\circ(\text{C}_3\text{H}_8, \text{l}) = 3\Delta_f H^\circ(\text{C}, \text{g}) + 8\Delta_f H^\circ(\text{H}, \text{g}) - [8D(\text{C}-\text{H}) + 2D(\text{C}-\text{C})]$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{C}_3\text{H}_8, \text{l}) = 3 \times 716,68 + 8 \times 217,97 - 8 \times 413 - 2 \times 348 = -106 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{C}_3\text{H}_8, \text{l}) = -106 \text{ kJ/mol}$$

$\Delta_r H^\circ$

$$\Delta_r H^\circ = 3\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) + 4\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) - \Delta_f H^\circ(\text{C}_3\text{H}_8, \text{g})$$

$$\Delta_r H^\circ = 3(-393,51) + 4(-285,83) - (-106)$$

$$\Delta_r H^\circ = -2218 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Barne energia

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_r U^\circ + \Delta n(\text{gas}) \cdot RT$$

$$\Delta_r U^\circ = -2218 - (3 - 5 - 1) \cdot 8,314 \cdot 10^{-3} \cdot 298,15$$

$$\Delta_r U^\circ = -2210 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Mol kopurua

$$n = m/M_m \quad n = 58,2 \text{ g} \frac{1 \text{ mol}}{44,10 \text{ g}} = 1,32 \text{ mol}$$

Beroa:

$$q_v = \Delta_r U^\circ \cdot n = -2210 \cdot 1,32 = -2907 \text{ kJ}$$

Ura

Askatzen den beroa urak xurgatzen du berotzeko: -

$$q_v = q(\text{ura}) = 2907 \text{ kJ}$$

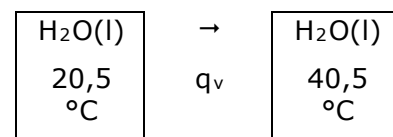
$$q(\text{ura}) = n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot c_p(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) \cdot \Delta T$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{q(\text{ura})}{c_p(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) \cdot \Delta T}$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{2907 \text{ kJ}}{75,291 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot (30,3 - 10,3) \text{K}} = 1,93 \cdot 10^3 \text{ mol}$$

$$m_{\text{H}_2\text{O}} = 1,93 \cdot 10^3 \text{ mol} \cdot 18 \cdot 10^3 \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Emaitza: 35 kg



TERMODINAMIKA

5. Kloroetano likidoa (A) ondoko erreazioaren arabera deskonposatzen da:



Erreakzio honen arabera kloroetanoa konposatu egonkorra dela esan daiteke? Temperatura guztietan? Ezezkotan, zein temperatura-tartetan?

$\Delta_f H^\circ$	$\Delta_f G^\circ$ (kJ·mol ⁻¹)	D	S° (J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹)
Cl(g)	CH ₂ =CH ₂ (g)	H-H	Cl ₂ (g)
CH ₂ =CH ₂ (g)	HCl(g)	Cl-H	H ₂ (g)
	CH ₃ -CH ₂ Cl(l)=-59,31		C(grafi)
			HCl(g)
			CH ₃ -CH ₂ Cl(l)=190,79

PLANTEAMENDUA

Erreakzioa kloroetanoaren (A-ren) deskonposizioa denez, A egonkorra izateko erreakzio hori ez-espontaneo izan behar du; espontaneo izanez gero berez A deskonposatuko da eta ez da egonkorra izango. Beraz erreakzioaren espontaneitatea aztertu behar dugu, $\Delta_r G^\circ$. Espontaneo edo ez izatea $\Delta_r G^\circ$ -ren seinuaren menpe dago. Negatiboa izanez gero erreakzio espontaneo, eta positiboa bada ez-espontaneo.

$\Delta_r G^\circ = f(T)$ espontaneitatea T-ren menpe dago.

Beraz, erreakzioaren $\Delta_r G^\circ$ kalkulatu behar dugu

PROZEDURA

Erreakzioaren $\Delta_r G^\circ$ kalkulatzeko bi aukera daukagu:

- Erreaktiboan eta produktuen $\Delta_f G^\circ$ -ren bidez:

$$\Delta_r G^\circ = \sum \Delta_f G^\circ(\text{produktu}) - \sum \Delta_f G^\circ(\text{erreaktibo})$$

$$\Delta_r G^\circ = \Delta_f G^\circ(\text{HCl, g}) + \Delta_f G^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, \text{g}) - \Delta_f G^\circ(\text{A, l})$$

eta datuen artean behar ditugun guztiak agertzen dira.

$$\Delta_r G^\circ = -95,30 + 68,15 - (-59,31) = 32,16 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Baina datu horiek 25°C-tan daude eta orduan temperatura horretan bakarrik azter dezakegu espontaneitatea; dena den enuntziatuan temperatura tartean galdetzen denez, beste modu bat erabili behar dugu.

- Erreakzioaren entalpia eta entropiaren aldaketatik: $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ$

Formula honen bidez $\Delta_r G^\circ$ -ren temperaturarekiko menpekotasuna azter dezakegu. Beraz, erreakzioaren $\Delta_r H^\circ$ eta $\Delta_r S^\circ$ kalkulatu behar dira



Erreakzioaren entalpia produktuen eta erreaktiboien formazio-entalpiaren menpe jar dezakegu.

$$\Delta_r H^\circ = \sum \Delta_f H^\circ(\text{produktu}) - \sum \Delta_f H^\circ(\text{erreaktibo})$$

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_f H^\circ(\text{HCl, g}) + \Delta_f H^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, \text{g}) - \Delta_f H^\circ(\text{A, l})$$

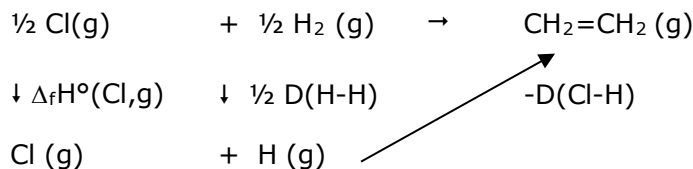
Datuak aztertuz

$\Delta_f H^\circ(\text{HCl, g})$ lotura – energetatik

$\Delta_f H^\circ(\text{A, l})$ $\Delta_f G^\circ$ – ren balio eta $\Delta_f S^\circ(\text{A, l})$ kalkulaturaz

$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, \text{g})$ datua = $52,26 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

• $\Delta_f H^\circ(\text{HCl, g})$



$$\Delta_f H^\circ(\text{HCl, g}) = \Delta_f H^\circ(\text{Cl, g}) + \frac{1}{2} D(\text{H-H}) - D(\text{Cl-H})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{HCl, g}) = 121,68 + \frac{1}{2} \cdot 436 - 431 = -91,32 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{HCl, g}) = -91 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

• $\Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{Cl} \approx \text{A, l})$ $2\text{C}(\text{graf}) + \frac{1}{2}\text{Cl}_2(\text{g}) + \frac{5}{2}\text{H}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{Cl (l)}$

$$\Delta_f H^\circ(\text{A, l}) = \Delta_f G^\circ(\text{A, l}) + T \cdot \Delta_f S^\circ(\text{A, l})$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{A, l}) = S^\circ(\text{A, l}) - S^\circ(\text{C, graf}) - \frac{1}{2} S^\circ(\text{Cl}_2, \text{g}) - \frac{5}{2} S^\circ(\text{H}_2, \text{g})$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{A, l}) = 190,79 - 2 \cdot 5,74 - \frac{1}{2} 223,07 - \frac{5}{2} 130,684$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{A, l}) = -258,94 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\Delta_f G^\circ(\text{A, l}) = -59,31 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{A, l}) = -59,31 + 298 \cdot (-258,94 \cdot 10^{-3}) = -136,47 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{A, l}) = -136,47 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_f H^\circ(\text{HCl}, g) + \Delta_f H^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) - \Delta_f H^\circ(\text{A}, l)$$

$$\Delta_r H^\circ = (-91) + 52,36 - (-136,47) = 97,83 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r H^\circ = \mathbf{98 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}}$$

Erreakzio-Entropia

Erreakzio-entropiaren seinua jakin dezakegu: likido batetik gasak lortzen dira, beraz desordena handitzen da eta entropia positiboa da. Erreakzio-entalpia positiboa ere bada, beraz $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ$ erreakzio-Gibbs-en energia askea negatiboa da temperatura altuetan, prozesu espontaneo, kloroetano ez-egonkorra.

Erreakzio-entropia kalkulatu dugu zein T-tan $\Delta_r G^\circ$ -ren zeinua aldatuko den determinatzeko:

Erreakzioaren $\Delta_r S^\circ$ kalkulatzeko bi aukera daukagu:

- Erreaktiboaren eta produktuen S° -ren bidez:

$$\Delta_r S^\circ = S^\circ(\text{HCl}, g) + S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) - S^\circ(\text{A}, l)$$

baina datuen artean $S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g)$ ez dago. Nola lortu? $\Delta_f H^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g)$ eta $\Delta_f G^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g)$ datuekin $\Delta_f S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g)$ kalkula daitekeen eta hortik $S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2)$ kalkulatu.

$$\Delta_f S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) = \frac{\Delta_f H^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) - \Delta_f G^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g)}{T}$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) = \frac{52,26 - (68,15)}{298,15} \cdot 1000 = -53,32 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) = S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) - 2S^\circ(\text{C}, \text{grafi}) - 2S^\circ(\text{H}_2, g)$$

$$S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) = -53,32 + 2 \cdot 5,74 + 2 \cdot 130,684 = 219,53 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\Delta_r S^\circ = S^\circ(\text{HCl}, g) + S^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) - S^\circ(\text{A}, l)$$

$$\Delta_r S^\circ = 186,91 + 219,53 - 190,79 = 215,65 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

- Erreakzioaren entalpia eta Gibbs-en energiatik : $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ$

Formula honen bidez $\Delta_r G^\circ$ -ren 25 °C-tan lor dezakegu, eta temperatura hori jarri behar dugu $\Delta_f S^\circ(\text{A}, s)$ kalkulatzeko.

$$\Delta_r S^\circ = \frac{\Delta_r H^\circ - \Delta_r G^\circ}{T}$$

$$\Delta_r G^\circ = \Delta_f G^\circ(\text{CH}_2 = \text{CH}_2, g) + \Delta_f G^\circ(\text{HCl}, g) - \Delta_f G^\circ(\text{A}, l)$$

$$\Delta_r G^\circ = 68,15 + (-95,30) - (-59,31) = 32,16 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r G^\circ(25 \text{ }^\circ\text{C}) = 32,16 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r S^\circ = \frac{\Delta_r H^\circ - \Delta_r G^\circ}{T} = \frac{98 - (32,16)}{298} \cdot 1000 = 221 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\Delta_r S^\circ = 221 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

Erreakzioaren Espontaneitatea

$\Delta_r G^\circ$ -ren zeinua aztertu behar dugu. Temperatura baxuetan positiboa da eta altuetan berriz negatiboa. Aldaketa zeinetan gertatzen den adierazpena 0 berdinduko dugu

$$\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ = 0$$

$$T = \frac{\Delta_r H^\circ}{\Delta_r S^\circ} \quad T = \frac{98}{215,65 \cdot 10^{-3}} = 454 \text{ K} = 181 \text{ }^\circ\text{C}$$

Beste balioarekin:

$$T = \frac{98}{221 \cdot 10^{-3}} = 443 \text{ K} = 170 \text{ }^\circ\text{C}$$

Beraz: $T < 170 \text{ }^\circ\text{C}$ $\Delta_r G^\circ$ positiboa da \rightarrow erreakzio ez-espontaneo \rightarrow deskonposizio ez-espontaneo \rightarrow kloroetanoa egonkorra.

6. Amonio karbamato solidoa (A) ondoko erreakzioaren arabera deskonposatzen da:



Erreakzio honen arabera amonio karbamatoa konposatu egonkorra da? Zein tenperatura-tartetan?

$\Delta_f H^\circ$ (kJ·mol ⁻¹)	$\Delta_f G^\circ$ (kJ·mol ⁻¹)	S°	D
C(g)	NH ₃ (g)	N ₂ (g)	C=O
A(s)=-635,16	CO ₂ (g)	H ₂ (g)	O=O
	A(s)=-434,18	NH ₃ (g)	
		CO ₂ (g)	

PLANTEAMENDUA

Erreakzioa amonio karbamatoaren (A-ren) deskonposizioa denez, A egonkorra izateko erreakzio hori ez-espontaneo izan behar du; espontaneo izanez gero berez A deskonposatuko da eta ez da egonkorra izango. Beraz erreakzioaren espontanietatea aztertu behar dugu, $\Delta_r G^\circ$. Espontaneo edo ez izatea $\Delta_r G^\circ$ -ren seinuaren menpe dago. Negatiboa izanez gero erreakzio espontaneo, eta positiboa bada ez-espontaneo.

$\Delta_r G^\circ = f(T)$ espontanietatea T-ren menpe dago.

Beraz, erreakzioaren $\Delta_r G^\circ$ kalkulatu behar dugu

PROZEDURA

Erreakzioaren $\Delta_r G^\circ$ kalkulatzeko bi aukera daukagu:

- Erreaktiboaren eta produktuen $\Delta_f G^\circ$ -ren bidez:

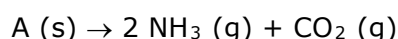
$$\Delta_r G^\circ = \sum \Delta_f G^\circ(\text{produktu}) - \sum \Delta_f G^\circ(\text{erreaktibo})$$

eta datuen artean behar ditugun guztiak agertzen dira. Baina datu horiek 25°C-tan daude eta orduan bakarrik tenperatura horretan espontaneitatea azter dezakegu; baina enuntziatuan tenperatura tartean galdetzen denez, beste modu bat erabili behar dugu.

- Erreakzioaren entalpia eta entropiaren aldaketatik: $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ$

Formula honen bidez $\Delta_r G^\circ$ -ren tenperaturarekiko menpekotasuna azter dezakegu. Beraz, erreakzioaren $\Delta_r H^\circ$ eta $\Delta_r S^\circ$ kalkulatu behar dira

Erreakzio-Entalpia



Erreakzioaren entalpia produktuen eta errektiboen formazio-entalpiaren menpe jar dezakegu.

$$\Delta_r H^\circ = \sum \Delta_f H^\circ(\text{produktu}) - \sum \Delta_f H^\circ(\text{erreaktibo})$$

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) + 2\Delta_f H^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) - \Delta_f H^\circ(\text{A}, \text{s})$$

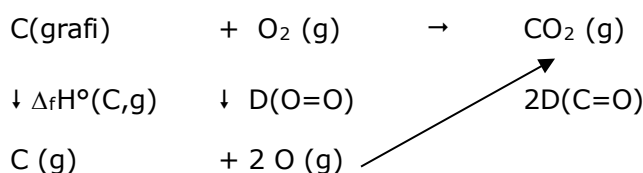
Datuak aztertuz

$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g})$ lotura – energietatik

$\Delta_f H^\circ(\text{NH}_3, \text{g})$ $\Delta_f G^\circ$ – ren balio eta $\Delta_f S^\circ(\text{NH}_3, \text{g})$ kalkulaturaz

$\Delta_f H^\circ(\text{A}, \text{s}) = -635,16 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ datua

• **$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g})$**

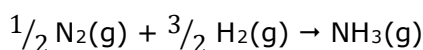


$$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = \Delta_f H^\circ(\text{C}, \text{g}) + D(\text{O} = \text{O}) - 2D(\text{C} = \text{O})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = 716,68 + 498 - 2 \cdot 804 = -393 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) = -393 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

• **$\Delta_f H^\circ(\text{NH}_3, \text{g})$**



$$\Delta_f H^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) = \Delta_f G^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) + T \cdot \Delta_f S^\circ(\text{NH}_3, \text{g})$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) = S^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) - \frac{1}{2} S^\circ(\text{N}_2, \text{g}) - \frac{3}{2} S^\circ(\text{H}_2, \text{g})$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) = 192,45 - \frac{1}{2} 191,61 - \frac{3}{2} 131,687$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) = -99,38 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\Delta_f G^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) = -16,45 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) = -16,45 + 298 \cdot (-99,38 \cdot 10^{-3}) = -46,07 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) = -46,07 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) + 2\Delta_f H^\circ(\text{NH}_3, \text{g}) - \Delta_f H^\circ(\text{A}, \text{s})$$

$$\Delta_r H^\circ = (-393) + 2 \cdot (-46,07) - (-635,18) = 150 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r H^\circ = 150 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Erreakzio-Entropia

Erreakzio-entropiaren seinua jakin dezakegu: solido batetik gasak lortzen dira, beraz desordena handitzen da eta entropia positiboa da. Erreakzio-entalpia positiboa ere bada, beraz $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ$ erreakzio-Gibbs-en energia askea negatiboa da temperatura altuetan, prozesu espontaneo, amonio karbamato ez-egonkorra.

Erreakzio-entropia kalkulatu dugu zein T-tan $\Delta_r G^\circ$ -ren zeinua aldatuko den determinatzeko:

Erreakzioaren $\Delta_r S^\circ$ kalkulatzeko bi aukera daukagu:

- Erreaktiboaren eta produktuen S° -ren bidez:

$$\Delta_r S^\circ = \sum S^\circ(\text{produktu}) - \sum S^\circ(\text{erreaktibo})$$

baina datuen artean $S^\circ(A,s)$ ez dago eta, datuekin $\Delta_f S^\circ(A,s)$ kalkula daitekeen arren, $\Delta_f G^\circ(A,s)$ eta $\Delta_f H^\circ(A,s)$ balioetatik, hortik ezin da $S^\circ(A,s)$ kalkulatu, $S^\circ(O_2,g)$ eta $S^\circ(C,\text{grafito})$ falta direlako.

- Erreakzioaren entalpia eta Gibbs-en energiatik : $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ$

Formula honen bidez $\Delta_r G^\circ$ -ren 25 °C-tan lor dezakegu, eta temperatura hori jarri behar dugu $\Delta_f S^\circ(A,s)$ kalkulatzeko.

$$\Delta_r S^\circ = \frac{\Delta_r H^\circ - \Delta_r G^\circ}{T}$$

$$\Delta_r G^\circ = \Delta_f G^\circ(\text{CO}_2, g) + 2\Delta_f G^\circ(\text{NH}_3, g) - \Delta_f G^\circ(A, s)$$

$$\Delta_r G^\circ = (-394,36) + 2 \cdot (-16,45) - (-434,18) = 6,92 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r G^\circ(25 \text{ }^\circ\text{C}) = 6,92 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r S^\circ = \frac{\Delta_r H^\circ - \Delta_r G^\circ}{T} = \frac{150 - 6,92}{298,15} \cdot 1000 = 480 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\underline{\Delta_r S^\circ = 480 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}}$$

Erreakzioaren Espontaneitatea

$\Delta_r G^\circ$ -ren zeinua aztertu behar dugu. Temperatura baxuetan positiboa da eta altuetan berriz negatiboa. Aldaketa zeinetan gertatzen den adierazpena 0 berdinduko dugu

$$\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \cdot \Delta_r S^\circ = 0$$

$$T = \frac{\Delta_r H^\circ}{\Delta_r S^\circ} \quad T = \frac{150}{480 \cdot 10^{-3}} = 312 \text{ K} = 39 \text{ }^\circ\text{C}$$

Beraz

- $T < 39 \text{ }^\circ\text{C}$ $\Delta_r G^\circ$ positiboa da \rightarrow erreakzio ez-espontaneoa \rightarrow deskonposizio ez-espontaneoa \rightarrow karbamato egonkorra.
- $T > 39 \text{ }^\circ\text{C}$ $\Delta_r G^\circ$ negatiboa da \rightarrow erreakzio espontaneoa \rightarrow deskonposizio espontaneoa \rightarrow karbamato ez-egonkorra.

7. 2 L-ko ponpa kalorimetriko batean 25 °C-tan 32,2 cm³ azido azetiko eta 10 atm-ko presioa lortu arte fosforo pentakloruro sartzen dira. Ondoren temperatura 160 °C-raino igotzen da eta baldintza horietan erreakzio hau gertatzen da:



- a. Jakinik erreakzioan 16,79 kJ askatzen direla, kalkulatu POCl₃-aren formazio-entalpia estandarra.
- b. Prozesu honetan trukutzen den beroa 35,2 °C-tan dagoen 50 mL-ko ur lagin batek zurgatzen du. Zein da uraren bukaerako egoera?

Datuak:

$\Delta_f H^\circ$	S°	D	$d(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,052 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$
C(g)	P(s)	C-Cl	$C_p(\text{H}_2\text{O}, \text{l})$
H(g)	Cl ₂ (g)	C=O	$\Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{H}_2\text{O}) = 40,67 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
Cl(g)	PCl ₅ (g)	C-C	$\Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l}) = 41,69 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
O(g)		C-H	$\Delta_f G^\circ(\text{PCl}_5, \text{g})$
CO ₂ (g)			$\Delta_c H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l}) = -876,1 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
H ₂ O(l)			
HCl(g)			

PLANTEAMENDUA

- a. Erreakziotik askatzen den beroa bolumen konstante mantenduz ETA erreakzionatzen duen mol kopurutik erreakzioaren barne energia aldaketa kalkula dezakegu. Ondoren erreakzio entalpia lortzen da. Bukatzeko erreakzio-entalpiarekin eta erreakzioan parte hartzen duten substantzia guztien formazio-entalpiarekin POCl₃-rena kalkulatu dugu.
- b. Erreakzio exotermikoa denez, urak beroa zurgatuko du eta berotuko da.

$$\left. \begin{array}{l} q_v(\text{erreakzio}) \\ n(\text{mugatzaille}) \end{array} \right\} \Delta_r U^\circ \rightarrow \Delta_r H^\circ \rightarrow \Delta_f H^\circ(\text{POCl}_3)$$

$$q_v(\text{erreakzio}) = -q_{\text{ura}}$$

PROZEDURA-1

Erreakzioaren beroa bolumen konstantekoa da. Bi erreaktiboaren mol kopurua aterako dugu eta mugatzaille zein den erabaki. Mugatzaillearen mol kopurutik eta erreakzioaren berotik erreakzioaren barne energiaren aldaketa kalkulatu dugu eta bukatzeko erreakzioaren entalpia.

$$q_v = -16,79 \text{ kJ}$$

$$n(\text{CH}_3\text{COOH}) = \frac{32,2 \text{ cm}^3 \cdot 1,052 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}}{60,06 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 0,564 \text{ mol}$$

$$n(\text{PCl}_5) = \frac{P \cdot V}{R \cdot T} = \frac{10 \text{ atm} \cdot (2 - 32,2 \cdot 10^{-3}) \text{ L}}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 298 \text{ K}} = 0,805 \text{ mol}$$

Mugatzailea: azido azetikoa

$$\Delta_r U^\circ = \frac{q_v}{n} = \frac{16,79 \text{ kJ}}{0,564 \text{ mol}} = -29,77 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_r U^\circ + \Delta n_{\text{gas}} RT = -29,77 + (3 - 2) \cdot 8,314 \cdot 10^{-3} \cdot (273 + 160)$$

$$\Delta_r H^\circ = -26,17 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

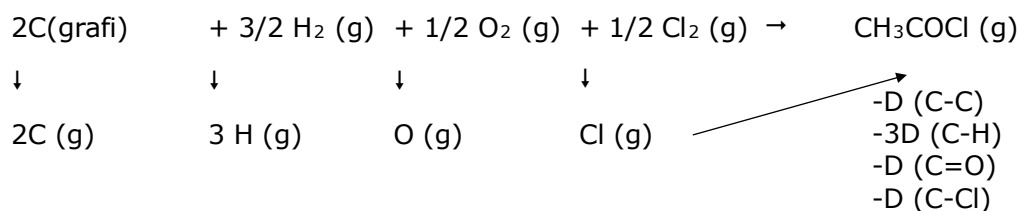
PROZEDURA-2

Erreakzioaren entalpia produktuen eta errektiboen formazio-entalpiaren menpe jar dezakegu. POCl_3 -rena izan ezik, gainontzekoenak kalkulatu ditugu eta ondoren ariketaren a atala.

$$\Delta_r H^\circ = \sum \Delta_f H^\circ(\text{produktuak}) - \sum \Delta_f H^\circ(\text{erreaktiboak})$$

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COCl}, g) + \Delta_f H^\circ(\text{HCl}, g) + \Delta_f H^\circ(\text{POCl}_3, g) - \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, g) - \Delta_f H^\circ(\text{PCl}_5, g)$$

- **$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COCl}, g)$**



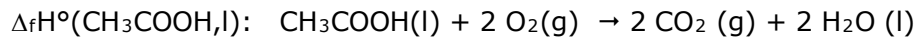
$$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COCl}, g) = 2\Delta_f H^\circ(\text{C}, g) + 3\Delta_f H^\circ(\text{H}, g) + \Delta_f H^\circ(\text{O}, g) + \Delta_f H^\circ(\text{Cl}, g) - [\text{D}(\text{C}-\text{C}) + 3\text{D}(\text{C}-\text{H}) + \text{D}(\text{C}=\text{O}) + \text{D}(\text{C}-\text{Cl})]$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COCl}, \text{g}) = 2 \cdot 716,68 + 3 \cdot 217,97 + 121,68 + 249,17 - [348 + 3 \cdot 413 + 727 + 328] = -184 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

- **$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{g})$**

$$\Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}) = \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{g}) - \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{g}) = \Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}) + \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l})$$



$$\Delta_c H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l}) = 2 \cdot \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) + 2 \cdot \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) - \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l}) = 2 \cdot \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}) + 2 \cdot \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) - \Delta_c H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{l}) = 2(-393,51) + 2(-285,83) - (-876,1) = -482,58 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{g}) = 41,69 + (-482,58) = -440,89 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

- **$\Delta_f H^\circ(\text{PCl}_5, \text{g})$**

$$\Delta_f H^\circ(\text{PCl}_5, \text{g}) = \Delta_f G^\circ(\text{PCl}_5, \text{g}) + T \cdot \Delta_f S^\circ(\text{PCl}_5, \text{g})$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{PCl}_5, \text{g}) = S^\circ(\text{PCl}_5, \text{g}) - S^\circ(\text{P}, \text{s}) - 5/2 S^\circ(\text{Cl}_2, \text{g}) = 364,6 - 41,09 - 5/2 \cdot 223,07 = -234,165 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{PCl}_5, \text{g}) = -305,0 + 298 \cdot (-234,165 \cdot 10^{-3}) = -374,82 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{POCl}_3, \text{g}) = -\Delta_r H^\circ - \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COCl}, \text{g}) + \Delta_f H^\circ(\text{HCl}, \text{g}) + \Delta_f H^\circ(\text{CH}_3\text{COOH}, \text{g}) + \Delta_f H^\circ(\text{PCl}_5, \text{g})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{POCl}_3, \text{g}) = -(-26,17) - (-184) + (-440,89) + (-374,82) = -606 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

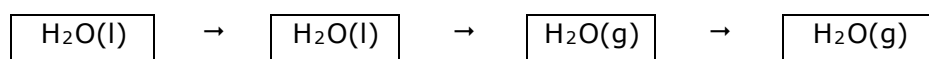
Negatiboa da, beroa askatzen da.

$$\Delta_f H^\circ(\text{POCl}_3, \text{g}) = -606 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

PROZEDURA-3

Urak zurgatzen duen beroa eta gerta daitekeen aldaketak hauek dira: lehenengoz ura likido berotuko da gehienez 100 °C-raino (q_1), gero lurrunduko da (q_2), eta bukatzeko lurruna berotuko da (q_3). Aldaketa hauek guztiak egiteko 16,79 kJ daude.

$$q_v = -q_{\text{ura}} = 16,79 \text{ kJ}$$



$$\boxed{35,2 \text{ }^{\circ}\text{C}} \quad q_1 \quad \boxed{100 \text{ }^{\circ}\text{C}} \quad q_2 \quad \boxed{100 \text{ }^{\circ}\text{C}} \quad q_3 \quad \boxed{T}$$

$$q_1 = n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot C_p(\text{H}_2\text{O}, l) \cdot \Delta T = \frac{50,0 \text{ mL} \cdot 1,00 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}}{18,02 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \cdot 75,291 \cdot 10^{-3} \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot (100 - 35,2) \text{ K} \\ = 13,55 \text{ kJ}$$

$$q_2 = n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \Delta_{\text{vap}} H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}) = \frac{50,0 \text{ mL} \cdot 1,00 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}}{18,02 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \cdot 40,67 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} = 112,85 \text{ kJ}$$

$q_1 < q_{\text{ura}} \rightarrow$ Behar dugun beroa ura 100 °C-raino berotzeko badago.

$q_2 > q_{\text{ura}} - q_1 \rightarrow$ Ura hasiko da lurruntzen, baina ez daukagu bero nahikoa ur guztia lurruntzeko. Geratzen den beroarekin kalkulatu dugu zenbat lurrunduko den:

$$q_{\text{ura}} - q_1 = 16,79 - 13,55 = 3,24 \text{ kJ}$$

$$q_2 = 3,24 \text{ kJ} = n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \Delta_{\text{vap}} H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}) = n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot 40,67 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = 0,08 \text{ mol lurrundu dira}$$

Uraren egoera: 48,55 mL ur likido 100 °C-tan eta gainontzekoa lurrundu da (0,08 mol)

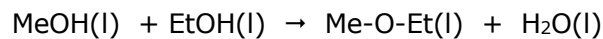
8. Etanol eta metanol erreakzionaraziz eta azido sulfuriko katalizatzaile moduan erabiliz, metil etil eter lor daiteke, ura ere lortzen delarik. Bai produktuak bai erreaktiboak egoera likidoan daude. Kalkulatu presio konstantetan eta 298K-etan erreakzioa espontaneo den. Baiezkoan zein ezezkoan, zertarako sartzen da azido sulfurikoa? 300 cm³ etanol eta 250 cm³ metanol erreakzionarazten direnean askaturiko beroa 24,0 °C-an dagoen 200 mL urak xurgatzen du eta bukaeran 189 mL ur 100 °C-an aurkitzen da.

Datu horiekin kalkulatu metoxi etanoaren errekuntza-entalpia.

Datuak:

$\Delta_f H^\circ$	S°	D	$\Delta_f G^\circ$ (kJ·mol ⁻¹)	$\Delta_{\text{vap}} H^\circ$ (metanol)=38,20 kJ·mol ⁻¹
C(g)	C(grafit)	C-H	Metanol	$\Delta_{\text{vap}} H^\circ$ (ura)=44,01 kJ·mol ⁻¹
H(g)	H ₂ (g)	O-H	Etanol	C_p (ur, l)=75,291 J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹
O(g)	O ₂ (g)	C-O	Ura	d (CH ₃ CH ₂ OH,l)=0,789 g·cm ⁻³
H ₂ O(l)	etanol		Eter=-117,61	d (CH ₃ OH,l)=0,791 g·cm ⁻³
CO ₂ (g)				

PLANTEAMENDUA



Erreakzioaren espontaneitatea aztertzeko erreakzio Gibbsen energia-aldaketa kalkulatu behar da: negatiboa izanez gero erreakzio espontaneo da; bestea ez-espontaneo.

Erreakziotik askatzen den berotik eta erreakzionatzen duen mol kopurutik erreakzioaren entalpia aldaketa kalkula daiteke. Ondoren erreakzioan parte hartzen duten substantzia guztien formazio-entalpiarekin eterarena kalkulatu da eta ondoren bere errekuntza-entalpia.

$$\left\langle \begin{matrix} q_{\text{ura}} = -q_r \rightarrow q_r \\ n(\text{mugatzaille}) \end{matrix} \right\rangle \Delta_r H^\circ \rightarrow \Delta_f H^\circ (\text{eter}) \rightarrow \Delta_c H^\circ (\text{eter})$$

PROZEDURA-1: erreakzio-Gibbs energia

Erreaktiboan eta produktuen formazio-Gibbs energietatik erreakzio Gibbs-energia kalkulatu da, eta hortik ondorioztatu espontaneitatea.

$$\Delta_r G^\circ = \sum \Delta_f G^\circ(\text{produktu}) - \sum \Delta_f G^\circ(\text{erreaktibo})$$

$$\Delta_r G^\circ = \Delta_f G^\circ(\text{MeOEt, l}) + \Delta_f G^\circ(\text{H}_2\text{O, l}) - \Delta_f G^\circ(\text{MeOH, l}) - \Delta_f G^\circ(\text{EtOH, l})$$

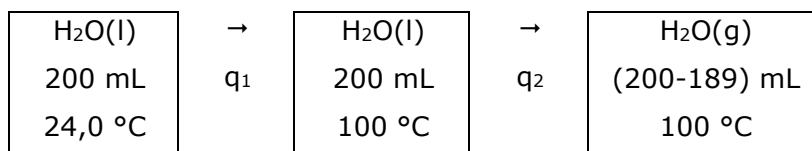
$$\Delta_r G^\circ = -117,61 + (-237,13) - (-166,27) - (-174,78) = -13,69 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$\Delta_r G^\circ < 0$ denez, erreakzio espontaneo da. Azido sulfurikoa katalizatzailea da, ez da botatzen erreakzioa espontaneo izateko, berez espontaneo da, abiadura bizkortzeko baizik. Espontaneo izateak ez du esan nahi azkarra denik, berez gertatzen dela baizik.

PROZEDURA-2: erreakzio-entalpia

Uraren beroa

Urak zurgatzen duen beroak ur likidoa berotuko da 24,0°C-tik 100 °C-raino (q_1), gero ur apur bat, (200-189) mL lurrunduko da (q_2). Aldaketa hauek guztiak egiteko behar den beroa kalkulatu da.



$$q_1 = n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot c(\text{H}_2\text{O}, \text{l}) \cdot \Delta T = \frac{200 \text{ mL} \cdot 1,00 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}}{18,02 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \cdot 75,291 \cdot 10^{-3} \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot (100,0 - 24,0)$$

$$= 63,51 \text{ kJ}$$

$$q_2 = n_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{H}_2\text{O}) = \frac{(200 - 189) \text{ mL} \cdot 1,00 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}}{18,02 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} \cdot 44,01 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} = 26,87 \text{ kJ}$$

$$q_{\text{ura}} = q_1 + q_2 = 63,51 + 26,87 = 90,38 \text{ kJ}$$

Erreakzio-beroa

$$q_r = -q_{\text{ura}} = -90,38 \text{ kJ}$$

Erreaktibo mugatzailea

Erreakzio-entalpia kalkulatzeko erreaktibo mugatzailea zein den determinatu behar da, eta ondorioztatu erreakzionatu duen mol kopurua.

Metanol:
$$n_{\text{metanol}} = \frac{250 \text{ mL} \cdot 0,791 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}}{32,04 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 6,17 \text{ mol}$$

Etanol:
$$n_{\text{etanol}} = \frac{300 \text{ mL} \cdot 0,789 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}}{46,06 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 5,14 \text{ mol}$$
 Mugatzailea: etanol

Erreakzio-entalpia

Erreakzio-entalpia kalkulatzeko erreaktibo mugatzailea eta beroa kontutan hartzen dira:

$$\Delta_r H^\circ = \frac{q_r}{n} = \frac{-90,38 \text{ kJ}}{5,14 \text{ mol}} = -17,59 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

PROZEDURA-3: eterraren formazio-entalpia

Erreakzioaren entalpia produktuen eta errektiboen formazio-entalpiaren menpe jar daiteke. Eterraren formazio-entalpia izan ezik, gainontzekoenak jakin edo kalkula daiteke.

$$\Delta_r H^\circ = \sum \Delta_f H^\circ(\text{produktu}) - \sum \Delta_f H^\circ(\text{erreaktibo})$$

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_f H^\circ(\text{MeOEt, l}) + \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O, l}) - \Delta_f H^\circ(\text{MeOH, l}) - \Delta_f H^\circ(\text{EtOH, l})$$

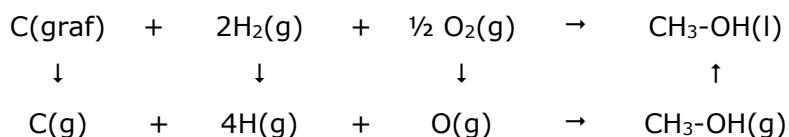
$\Delta_r H^\circ$ aurreko atala

$\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O, l})$ datua

$\Delta_f H^\circ(\text{MeOH, l})$ lotura energiaren bidez

$\Delta_f H^\circ(\text{EtOH, l})$ $\Delta_f G^\circ$ – baliotik

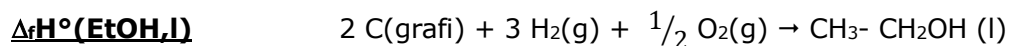
$\Delta_f H^\circ(\text{MeOH, l})$



$$\Delta_f H^\circ(\text{MeOH, l}) = \Delta_f H^\circ(\text{C, g}) + 4\Delta_f H^\circ(\text{H, g}) + \Delta_f H^\circ(\text{O, g}) - [3D(\text{C-H}) + D(\text{C-O}) + D(\text{O-H})] - \Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{HAc})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{MeOH, l}) = 716,68 + 4 \cdot 217,97 + 249,17 - 3 \cdot 413 - 350 - 463 - 38,20 \text{ (kJ} \cdot \text{mol}^{-1}\text{)}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{MeOH, l}) = -252 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$



$$\Delta_f H^\circ(\text{EtOH, l}) = \Delta_f G^\circ(\text{EtOH, l}) + T \cdot \Delta_f S^\circ(\text{EtOH, l})$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{EtOH, l}) = S^\circ(\text{EtOH, l}) - 2S^\circ(\text{C, grafi}) - 3S^\circ(\text{H}_2, \text{g}) - 1/2 S^\circ(\text{O}_2, \text{g})$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{EtOH, l}) = 160,7 - 2 \cdot 5,74 - 3 \cdot 130,684 - 1/2 \cdot 205,138$$

$$\Delta_f S^\circ(\text{EtOH, l}) = -345,401 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\Delta_f G^\circ(\text{EtOH, l}) = -174,78 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{EtOH, l}) = -174,78 + 298 \cdot (-345,401 \cdot 10^{-3}) = -277,71 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{EtOH, l}) = -277,71 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$\Delta_f H^\circ(\text{MeOEt, l})$

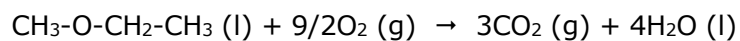
$$\Delta_f H^\circ(\text{MeOEt, l}) = \Delta_r H^\circ - \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O, l}) + \Delta_f H^\circ(\text{MeOH, l}) + \Delta_f H^\circ(\text{EtOH, l})$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{MeOEt}, l) = -17,59 - (-285,83) + (-252) + (-277,71)$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{MeOEt}, l) = -261 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

PROZEDURA-3: eterraren errektuntza-entalpia

Errekuntza-entalpia kalkulatzeko, errektiboen eta produktuen formazio-entalpiak erabiliko dira:



$$\Delta_c H^\circ(\text{MeOEt}, l) = 3 \cdot \Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, g) + 4 \cdot \Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}, l) - \Delta_f H^\circ(\text{MeOEt}, l)$$

$$\Delta_c H^\circ(\text{MeOEt}, l) = 3 \cdot (-393,51) + 4 \cdot (-285,83) - (-261)$$

$$\Delta_c H^\circ(\text{MeOEt}, l) = -2062 \text{ kJ/mol}$$