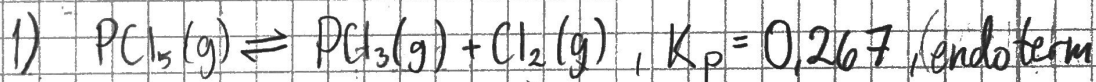


Termoøving 5

Kjapp teori

1. Gibbs energi er den teoretisk største mengden av ikke-ekspansjonsarbeid som kan hentes ut av en prosess ved konstant T og P
2. Helmholtz energi er den teoretisk største mengden av ikke-ekspansjonsarbeid som kan hentes ut av en prosess ved konstant T og V
3. $dG = VdP - SdT$ $dA = -PdV - SdT$
4. $dU = TdS - PdV$ $dH = TdS + VdP$
Både dU og dH avhenger av dS (TdS),
men dU avhenger av dV ($-PdV$) mens dH avhenger av dP (VdP).

Oppgave 1



$$P_{\text{PCl}_5} = 1 - x, P_{\text{PCl}_3} = P_{\text{Cl}_2} = x$$

$$\Rightarrow K_p = 0,267 = \frac{x^2}{1-x} \Rightarrow x^2 + 0,267x - 0,267$$

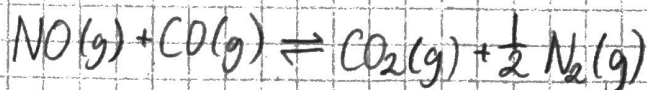
$$x = 0,40$$

$$\Rightarrow \underline{P_{\text{PCl}_5} = 0,60 \text{ atm}, P_{\text{PCl}_3} = P_{\text{Cl}_2} = 0,40 \text{ atm}}$$

- 2) a) Likevekten går til venstre for å få mindre Cl_2
- b) Likevekten går til venstre for å få færre gassmolekyl, og dermed utlikne trykket
- c) Likevekten går til høyre for å fordeler energien jevnere ettersom den reaksjonsreningen krever energi.

Oppgave 2

1) For enkelhets skyld: $\Delta_r G^\circ_{298} = \Delta G^\circ$



$$\begin{aligned} \Delta_r G^\circ &= \Delta_f G^\circ(\text{prod}) - \Delta_f G^\circ(\text{reak}) \\ &= -394 \text{ kJ/mol} - (87 - 137) \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

$\Delta_r G^\circ = -344 \text{ kJ/mol}$, siden $\Delta_r G^\circ < 0$ er reaksjonen spontan

For gass (SID)

$$\Delta_f G^\circ(\text{NO}) = 87 \text{ kJ/mol}$$

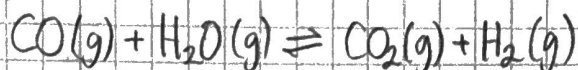
$$\Delta_f G^\circ(\text{CO}) = -137 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_f G^\circ(\text{CO}_2) = -394 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_f G^\circ(\text{N}_2) = 0$$

Kan ikke si noe om det er mulig, må beregne $\Delta_r G$ for det

2)



$$\Delta_r G^\circ = (-394 - (-137 - 229)) \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_r G^\circ = -28 \text{ kJ/mol}$$

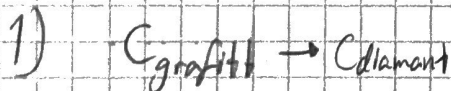
$\Delta_r G^\circ < 0 \Rightarrow$ Reaksjonen er spontan, og vil skje.
Den bør regnes med

For gass (SID)

$$\Delta_f G^\circ(\text{H}_2\text{O}) = -229 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_f G^\circ(\text{H}_2) = 0$$

Oppgave 3



$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$$

$$= 1,88 \text{ kJ/mol} + 298 \text{ K} \cdot 3,18 \text{ J/K} \cdot \text{mol}$$

$$\Delta G = 2,83 \text{ kJ/mol}$$

Siden $\Delta G > 0$ er ikke prosessen spontan

$\Rightarrow$ Grafitt er mest stabil

$$\Delta H^\circ = 1,88 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta S^\circ = -3,18 \text{ J/K} \cdot \text{mol}$$

2) Dannelsentalpi: Energien som kreves for å danne ett mol stoff fra grunnstoff under standardbetingelser.

$$\Delta_f H^\circ = \sum \Delta_f H^\circ(\text{produkt}) - \sum \Delta_f H^\circ(\text{reaktanter})$$

Fra 1. grafitt er mer stabilt enn diamant, og er grunnstoffet

$$\text{til karbon} \Rightarrow \Delta_f H = (720,62 - 718,74) \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_f H^\circ = 1,88 \text{ kJ/mol}$$

$$3) \quad dG = VdP - SdT, \text{ konstant } T \Rightarrow dT = 0$$

$$dG = VdP, \text{ for reaksjoner:}$$

$$\Delta G = \int_{G_1}^{G_2} dG = \int_{P_1}^{P_2} \Delta V_m dP = \Delta V_m (P_2 - P_1)$$

$$\Delta G_2 - \Delta G_1 = \Delta V_m (P_2 - P_1)$$

Diamant dannes når $\Delta G_2 = 0$,

$$\Rightarrow P_2 = \frac{-\Delta G_1}{\Delta V_m} + P_1$$

$$P_2 = \frac{-2,83 \text{ kJ/mol}}{-1,89 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}} + 10^5 \text{ Pa}$$

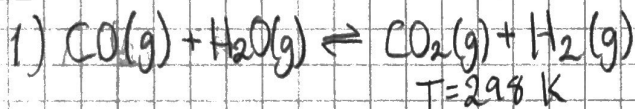
$$P_2 = 1,50 \cdot 10^9 \text{ Pa} = \underline{\underline{1,50 \cdot 10^4 \text{ bar}}}$$

$$V_m = \frac{M_m}{\rho}$$

$$\Delta V_m = M_m \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) = 12 \text{ g/mol} \cdot \left(\frac{1}{3,51} - \frac{1}{2,26} \right) \frac{\text{m}^3}{\text{kg}} \cdot 10^{-3}$$

$$\Delta V_m = -1,89 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^3}{\text{mol}}$$

Oppgave 4



$$\Delta_{\text{rx}} G^\circ = (-394 - (-229 - 137)) \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_{\text{rx}} G^\circ = -28 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta G = -RT \ln K \Rightarrow K = e^{-\Delta G/RT}$$

$$\underline{\underline{K = 80934}}$$

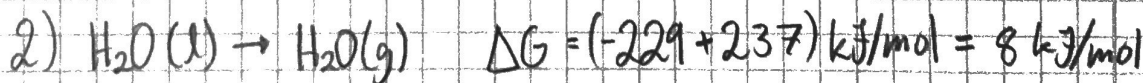
ΔG° for gasser

CO: -137 kJ/mol

H₂O: -229 kJ/mol

CO₂: -394 kJ/mol

H₂: 0

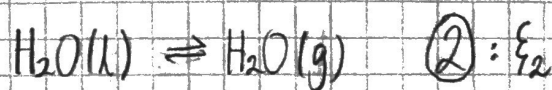
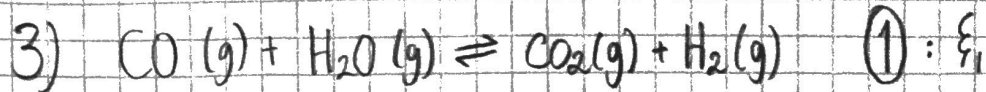


$$K = e^{-\Delta G/RT} = \underline{\underline{0,0396}}$$

$$K = \frac{a_{\text{H}_2\text{O(g)}}}{a_{\text{H}_2\text{O(l)}}} = a_{\text{H}_2\text{O(g)}} \quad \downarrow \text{ per def}$$

$$\Rightarrow a_{\text{H}_2\text{O(g)}} = \frac{P_{\text{H}_2\text{O(g)}}}{1 \text{ bar}} = 0,0396$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{P_{\text{H}_2\text{O}} = 0,0396 \text{ bar}}}$$



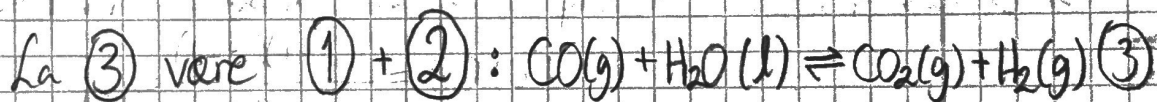
	CO(g)	H ₂ O(g)	CO ₂ (g)	H ₂ (g)	H ₂ O(l)
Før	1	0	1	1	∞
Δ	$-\xi_1$	$+\xi_2 - \xi_1$	$-\xi_1$	ξ_1	$-\xi_2$
Etter	$1 - \xi_1$	$\xi_2 - \xi_1$	$1 + \xi_1$	$1 + \xi_1$	∞

Fra 1) $\Delta_r G_1^\circ = -28 \text{ kJ/mol}$

Fra 2) $\Delta_r G_2^\circ = 8 \text{ kJ/mol}$

Ved likevekt: $\Delta G_1 = 0, \Delta G_2 = 0$

$K_1 = 80934, K_2 = 0,0396$



$$K_3 = \frac{P_{\text{CO}_2} \cdot P_{\text{H}_2}}{P_{\text{CO}}} \quad (P_{\text{H}_2\text{O(l)}} = 0)$$

$$K_3 = K_1 \cdot K_2 \Rightarrow \frac{P_{\text{CO}_2} \cdot P_{\text{H}_2}}{P_{\text{CO}}} = K_1 \cdot K_2$$

$$\frac{(1 + \xi_1)^2}{(1 - \xi_1)} = 80934 \cdot 0,0396 = 3205$$

$$\Rightarrow \xi_1 = 0,999 \text{ bar}$$

$$\Rightarrow \underline{P_{\text{CO}_2} = P_{\text{H}_2} = 1,999 \text{ bar}, P_{\text{CO}} = 0,001 \text{ bar}, P_{\text{H}_2\text{O}} = 0,0396 \text{ bar}}$$