



Entalpi, entropi och fria energi

Definitioner:

Entalpi är den energi som finns lagrad i ett ämne och den består av termisk och kemisk energi; dvs. den är värme- och tryckberoende.

Entropi är ett mått på graden av oordning i ett system. Alla spontana endoterma reaktioner har en entropiökning.

Den fria energin är den energi som driver en reaktion. För att en reaktion skall kunna ske måste det ske en entalpiminskning eller en entropiökning. Riktningen i reaktionen bestäms av om den fria energin minskar. När en spontan reaktion sker, minskar alltid den fria energin. När ett nytt jämviktsläge har uppnåtts är den fria energin vid sitt minimum. Samband mellan den fria energin, entalpin och entropin kan skrivas:

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

G = Gibb's konstant, den fria energin

S = entropi, oordning

H = entalpi, värmeinnehåll
med 25°C)

T = temperaturen i Kelvin (räkna

Tecknet Δ står för förändring

Material

Vinäger, bikarbonat, bägare, tesked, matsked, termometer.

Riskbedömning

Denna riskbedömning är inte komplett. Laborationen bedöms ha liten risk. Laborationen kan utföras som hemlab. *En fullständig riskbedömning ges av undervisande läraren.*

Eftersom temperaturen är positiv i biologiska system kan entropin, entalpin och den fria energin vara både positiva och negativa. För en given process kan man räkna fram termerna för varje reaktans med den allmänna ekvationen. $\Delta X^0 = \sum X^0(\text{produkter}) - \sum X^0(\text{reaktanter})$. Ex. se följande schema:

Tabell 1	ΔH^0 (kJ/mol)	S^0 (kJ/K·mol)	ΔG^0 (kJ/mol)
HCO ₃ ⁻	-691,1	0,09494	-587,1
H ⁺	0	0	0
H ₂ O(l)	-285,8	0,0699	-237,2
CO ₂ (g)	-393,5	0,2136	-394,4

Utförande

- Häll två matskedar (ca 30 cm³) vinäger i en bägare. Mät temperaturen. Tillsätt en eller 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? ($\Delta H < 0$ eller $\Delta H > 0$). Beräkna entalpiförändringen för din reaktion utgående från data i tab. 1. Visa beräkningarna och diskutera dina slutsatser.
- Det finns två sätt att beräkna "den fria energi". Antingen genom att använda data i tabell 1 eller genom uträkningar från 2 och 3 (antag att reaktionen skedde vid 25°C). Jämför värdena! Vad säger värdena 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 vilka förtecknen entropin, entalpin och den fria energin bör ha utan att göra beräkningar.

Utmaning:

Försök nu att fyll i följande tabell utgående från ekvationen $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$

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

Till läraren

Underlag för
riskbedömning

Teori

Vinäger(Ättiksyra utspädd): ej märkespliktigt
Bikarbonat (natriumvätekarbonat): ej märkespliktigt

1. Det syns och hörs bubblor och blir kallare. Reaktionen är:
2. $\text{NaHCO}_3(\text{aq}) + \text{CH}_3\text{COOH}(\text{aq}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{CO}_2(\text{g}) + \text{CH}_3\text{COONa}(\text{aq})$
Nettoekvationen är:
 $\text{HCO}_3^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{CO}_2(\text{g})$
3. Entropin mäter oordningen. En positiv förändring i entropivärdet indikerar att systemet har blivit mer ordnat och en negativ förändring visar på att systemet har fått mera ordning. En gas har större ordning än vätska. Entropin ökar när ämnen går från (s) eller (l) till (g) och när antal mol i produkten ökar i jämfört med reaktanterna.
I detta exempel har entropin ökat i steg 1 därför att gas utvecklas. Entropin för reaktionen är +188,6 J/K. ($213,6+69,9-94,94=188,56$). Värdet visar på att oordningen har ökat!
4. Entalpin mäter värmeinnehållet. För en endoterm reaktion är entalpin positiv. För en exoterm reaktion är värdet negativt. (värme går ur systemet). Systemet blir kallare då reaktionen är exoterm och entalpin är negativ.
I detta exempel är entalpiförändringen 11,8 kJ ($-393,5-285,8-(691,1)=11,8$)
5. Den fria energin beskriver den mängd energi som är tillgänglig för "arbete". Ett negativt värde indikerar att processen är spontan. Ett positivt värde på den fria energin visar att det inte är en spontan reaktion.
Används värdena för den fria energin i tabellen blir $\Delta G = -44,5$ kJ ($-394,4-237,2-(-587,1)$) och med entropi- och entalpivärdena enligt ekvation 1 blir $\Delta G -44,4$ kJ ($11,8-298 \cdot 188,56$). Nästan samma värden!
Ett negativt värde på den fria energin visar att processen är spontan.
6. 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; entropin är positiv. Värme tas in, processen är endoterm. Och entalpin är positiv.

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

Literature: General Chemistry; Discovery-Based Advances for Two-Year College Chemistry