



www.tendonsie.com
www.leeriets.nl
tendonsie@tendonsie.be

Enthalpie, entropie en Gibbsse vrije energie

5/12/2010

Symbol	Naam	Eenheid
ΔU	inwendige energie	J
H	enthalpie	J (per mol...)
Q	warmte	J
W	arbeid	J
S	entropie	J/mol.K
ΔG	Gibbsse vrije energie	J

Formules

$$W = p \cdot \Delta V$$

$$\Delta U = Q + W$$

(reactie-energie = reactiewarmte + volumearbeid)

$$\Delta H = Q = \Delta U - W$$

$$\Delta H_{reactie}^0 = \sum \Delta H_f^0 (product) - \sum \Delta H_f^0 (reagentia)$$

(reactie-enthalpie)

(Bij bindingsenthalpie product & reagentia wisselen van plaats. + atomen in gasfase!)

$$\Delta S^0 = S_{(eindproducten)}^0 - S_{(reagentia)}^0$$

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

Inwendige energie U vinden we terug in:

Atomair niveau → potentiële energie → aantrekkingskracht tussen e- en protonen.

Atomair niveau → kinetische energie → De e- bewegen rond de kern.

Moleculair niveau → potentiële energie → type binding (ionbinding, covalente binding,...)

Moleculair niveau → kinetische energie → beweging v/d moleculen.

Meervoudige bindingen hebben een grotere bindingsenergie dan enkelvoudige bindingen.

Een enkelvoudige binding heeft een grotere bindingsenergie naarmate de gebonden atomen kleiner zijn. (=straal kleiner)

Exotherme reactie = er komt warmte **vrij**.

Endotherme reactie = het neemt warmte **op**.

Systeem **W** naar omgeving = -

Omgeving **W** naar systeem = +

Systeem **Q** naar omgeving = -

Omgeving **Q** naar systeem = +

<p>Enthalpie is een toestandsgröotheid. (= Is afhankelijk van druk, hoeveelheid stof, temp.) $H = U - p \cdot V$ Standaarddruk: $p = 101325 \text{ Pa}$ Standaardtemperatuur: $T = 298.15 \text{ K}$ Standaardhoeveelheid: $n = 1 \text{ mol}$ Standaardenthalpieverandering = ΔH^0</p>
<p>De Enthalpie-inhoud van enkelvoudige stoffen in hun standaardaggregatietoestand bij standaardvoorwaarden is gelijk aan nul. $H = 0 \text{ J/mol}$. Bv O_2, H_2 (elementen van gassen altijd "2")</p>
<p>De energie om de reactie op gang te brengen, heet activeringsenergie. Deze energie is nodig om de eerste moleculen te laten reageren.</p>
<p>Spontane reactie: reacties die verlopen zonder dat er continu energie aan moet worden toegevoegd. Eens de reactie begint met de activeringsenergie blijft de reactie doorgaan. Niet-spontane reactie: Je moet continu energie toevoegen om de reactie te laten doorgaan.</p>
<p>Beginsel van Berthelot: Een systeem streeft naar een zo laag mogelijke energie-inhoud dus naar een minimum enthalpie.</p>
<p>De regel van Mattignon: Een systeem zal een zodanige verandering ondergaan dat het grootste aantal gasmoleculen gevormd worden.</p>
<p>Entropie (S): de maat voor de hoeveelheid wanorde.</p>
<p>Entropie (Wanorde) wil zo hoog mogelijk zijn, en enthalpie (energie-inhoud) wil zo laag mogelijk zijn. Als de ene de andere tegenwerkt gaat de reactie evolueren naar een evenwichtstoestand. Deze reactievergelijking noemen we de evenwichtsreactie.</p>
<p>Een proces kan slechts spontaan verlopen als het in staat is om arbeid te leveren aan de omgeving of dus wanneer ΔW_m negatief is. ($\Delta W_m = \Delta H - T \cdot \Delta S$)</p>

hfst2. Chemische kinetica.

<p>Reactiesnelheid is gelijk aan de hoeveelheid stof (n) die per seconde omgezet of gevormd wordt.</p> $v = - \frac{\Delta n_{\text{reagens}}}{\Delta t} = + \frac{\Delta n_{\text{product}}}{\Delta t} = - \frac{\Delta C_{\text{reagens}}}{\Delta t} = + \frac{\Delta C_{\text{product}}}{\Delta t} \text{ (mol l/s)(M/s)}$
<p>Botsingsmodel: effectieve botsingen: gebeuren tussen de deeltjes, niet iedere botsing tussen twee deeltjes heeft zodoende een reactie tot gevolg, enkel de effectieve botsingen. (Voldoende E_{kin} nodig!)</p>
<p>Het transitiecomplex = geactiveerd complex: Dit complex bezit enorm veel potentiële energie. Deze structuur is zeer onstabiel en zal uiteen vallen in de vorige moleculen of een nieuwe molecule vormen. Hoe meer moleculen per tijdseenheid over deze energieberg geraken, hoe sneller het eindproduct gevormd wordt!</p>
<p>Factoren die de reactiesnelheid beïnvloeden: katalysator: is een stof die de reactiesnelheid v/e bepaalde reactie enorm kan veranderen. De katalysator zelf wordt niet gebruikt en kan verbruikt worden. Ook de temperatuur verhogen versnelt een reactie. (bv voedsel). De curve die aantoont hoe de verdeling in elkaar zit noemen we de verdelingscurve of ook wel de distributiecurve of ook wel de Maxwell-Boltzmann-curve genoemd. De temperatuur verhogen, verhoogt ook de kinetische energie = meer botsingen per tijdseenheid. De totale oppervlakte van de curve blijft altijd hetzelfde, hoe groter de temperatuur, hoe platter de top en hoe meer deeltjes voldoen aan de minimale energie die nodig is om te reageren.</p>