**Algemene Chemie I –**

**voorbereidende vragen**

**Deel 2: Thermodynamica**

1. Bespreek de verschillende ideale gaswetten.  
   1) Nulde Hoofdwet van de Thermodynamica: Wanneer systeem A in thermisch evenwicht is met systeem B, en wanneer systeem B in thermisch evenwicht is met systeem C, dan is systeem A ook in thermisch evenwicht met systeem C.  
   2) Wet van Boyle: Voor eenzelfde hoeveelheid gas is bij constante temperatuur het volume omgekeerd evenredig met de druk. pV = C met C een constante, waarvan de grootte afhangt van de hoeveelheid gas en van de druk.  
   3) Wet van Charles (en Gay-Lussac): zie afleiding p206. Het volume van een hoeveelheid gas is bij constante druk recht evenredig met Kelvin temperatuur. V = C2\*T  
   4) Wet van Amantons (druk-temperatuur wet): De druk van een gegeven hoeveelheid gas is bij constant volume recht evenredig met de Kelvin temperatuur. P = C3\*T  
   5) Gecombineerde gaswet: pV/T = C  
   6) Wet van Avogadro: Gelijke volumes van verschillende gassen bevatten bij gelijke temperatuur en druk eenzelfde aantal moleculen. V = C4N  
   7) De Ideale gaswet: pV = nRT  
   8) Wet van Dalton: zie afleiding p210. De totale druk uitgeoefend door een gasmengsel is de som van de drukken die ieder van de samenstellende gassen zou uitoefenen indien het alleen in het beschouwde volume aanwezig was.
2. Geef en bespreek de postulaten van de kinetische gastheorie, en bespreek het verband met ideale gaswetten  
   1. Gassen zijn samengesteld uit moleculen waarvan de afmetingen verwaarloosbaar klein zijn in vergelijking met de gemiddelde afstand tussen de moleculen.  
   2. De moleculen van een gas bewegen voortdurend in alle richtingen en vertonen hierbij uiteenlopende snelheden.  
   3. De wisselwerkingen tussen de moleculen van een gas zijn verwaarloosbaar zwak, tenzij op het ogenblik van een botsing.  
   4. De botsingen tussen moleculen onderling, en tussen moleculen en een wand van de kamer waarin het gas opgesloten is, zijn elastisch.  
   5. De gemiddelde kinetische energie van een molecule van een gas is recht evenredig met de absolute temperatuur van het gas.   
   Uit postulaat 2 en 4 leiden we af dat F = dp/dt, deze kracht, genomen per eenheid van oppervlakte, is niets anders dan de druk die door het gas wordt uitgeoefend. 2 factoren bepalen de druk: de botsingsfrequentie en de grootte van de impulsverandering tijdens een botsing. Het experiment van Boyle wordt bij constante temperatuur uitgevoerd zodat de gemiddelde impulsverandering per botsing dezelfde blijft. Als we het volume van het gas verminderen, dan zal in overeenstemming met de wet van Boyle de druk van het gas toenemen. Bij de wet van Charles, wordt de invloed van de temperatuur op het volume van een gas onderzocht, terwijl de druk constant wordt gehouden. Bij temperatuurverhoging stijgt volgens postulaat 5 de kinetische energie, hierdoor zal de druk van het gas toenemen. Om de druk van het gas constant te houden, moeten we in overeenstemming met de wet van Charles het volume verhogen.
3. Leidt de ideale gaswet af uit het Model van Bernouilli  
   zie p214-216
4. Wat is het verschil tussen effusie en diffusie?

Effusie is het proces waarbij een gas uit een kamer naar een geëvacueerde ruimte stroomt doorheen één of meerdere zeer kleine gaatjes.  
Diffusie is het proces waardoor twee gassen, wanneer ze met elkaar in contact gebracht worden, ook zonder hulp van buitenaf (zoals roeren) spontaan met elkaar zullen mengen.

1. Hoe kan men de afwijking van het gedrag van een reëel gas tov een ideaal gas beschrijven, en waaruit vloeit deze afwijking voort?  
   Volume: Bij het ideaal gas neemt men aan dat de volume’s puntmassa’s zijn. De moleculen hebben dus het hele volume V van de kamer tot hun beschikking. Bij een reëel gas nemen de moleculen wel een bepaald volume in en is het volume dat ze tot hun beschikking hebben dus kleiner als het volume V van de kamer. Dit wordt gecorrigeerd door de parameter b. Dit is dus niets anders dan het eigenvolume van 1mol van het beschouwde gas.Vreëel > Videaal  
   Druk: Bij reële gassen oefenen de moleculen bij niet al te kleine onderlinge afstanden een aantrekkende kracht uit op elkaar. Wanneer een molecule uit het grensvlak van het gas naar de wand toevliegt, wordt zij door deze aantrekkende krachten tegengehouden door andere moleculen van het gas. Hierdoor valt de impulsverandering tijdens de botsing met de wand kleiner uit.  
   preëel < pideaal
2. Leg uit:

* open, gesloten en geïsoleerde systemen Open systeem kan zowel energie als materie uitwisselen, een gesloten systeem kan met zijn omgeving energie maar geen materie uitwisselen en een geïsoleerd systeem kan noch materie noch energie met zijn omgeving uitwisselen.
* intensieve en extensieve eigenschappen Intensieve eigenschappen zijn grootheden die niet afhangen van de uitgebreidheid van het systeem, en dus een welbepaalde waarde hebben in ieder klein gebied van het systeem.   
  Extensieve eigenschappen zijn grootheden waarvan de waarde afhangt van de uitgebreidheid van het systeem. Dus, wanneer we als systeem een hoeveelheid van een chemische stom beschouwen, dan zijn de extensieve variabelen die waarvan de waarde afhangt van het aantal mol in de aanwezige stof.
* thermodynamisch evenwicht Een systeem heft een toestand van thermodynamisch evenwicht bereikt als het in functie van de tijd geen neiging tot veranderen vertoont.
* thermodynamische procesvoorwaarden   
  1. Isotherm proces: een proces waarbij de temperatuur van het systeem constant gehouden wordt.  
  2. Isobaar proces: “ waarbij de druk “  
  3. Isochoor proces: “ waarbij het volume “  
  4. Adiabatisch proces: Een adiabatisch proces is een proces dat plaatsgrijpt in een systeem dat van de omgeving afgesloten is met thermisch ondringbare wanden, en daarom met de omgeving geen warmte kan uitwisselen. (We vermijden de term “thermische isolatie”, omdat dit tot verwarring zou kunnen leiden met geïsoleerde systemen, die niet alleen warmte, maar ook geen arbeid kunnen uitwisselen met de omgeving, terwijl bij een adiabatisch proces het in principe mogelijk is dat arbeid uitgewisseld wordt.)
* het begrip “toestandsfunctie” en de hieraan verbonden wiskundige eigenschappen In een kringproces hebben de toestandsvariabelen zoals p, V en T dezelfde waarde voor en na het proces. Alle toestandsvariabelen die aan deze voorwaarde voldoen, dus dat hun waarde voor en na het kringproces dezelfde is, noemt men toestandsfuncties. Zie p237-238
* spontane, reversibele en irreversibele processen Een spontaan proces gebeurt zonder tussenkomst van buitenaf.  
  Een proces verloopt reversibel wanneer het systeem een continue reeks evenwichtstoestanden doorloopt en voortdurend in evenwicht is met zijn omgeving.  
  Een irreversibel proces is een proces dat niet reversibel is.

1. Leg het verband uit tussen de inwendige energie van een systeem, en de met de omgeving uitgewisselde arbeid en warmte.

De eerste wet van de thermodynamica: ΔU = q + w  
De verandering als gevolg van een proces, van de inwendige energie U van een gesloten systeem wordt gegeven als de som van de warmte q die het systeem tijdens het proces opgenomen heeft, en de arbeid w die tijdens het proces op het systeem uitgeoefend werd.

1. Leg uit wat het verschil is tussen de inwendige energie, de enthalpie, de Gibbs vrije energie en de Helmholtz vrije energie

Inwendige energie is de som van alle soorten energie opgesloten in een systeem.

De enthalpie is de inwendige energie van het systeem, plus de energie die nodig is om ruimte te maken voor het systeem met een gegeven volume en druk.

1. Definieer het begrip warmtecapaciteit, en leidt de uitdrukkingen af voor de isochore warmtecapaciteit en de isobare warmtecapaciteit, alsook het verband tussen beiden voor een ideaal gas.

Warmtecapaciteit C: meet hoeveel warmte q nodig is om de temperatuur van het systeem te verhogen met een zekere hoeveelheid deltaT.

Isochore warmtecapaciteit Cv: bij constant volume (partiele afgeleide van U naar T bij cte V) De isochore warmtecapaciteit meet de temperatuursafhankelijkheid van de inwendige energie.

Isobare warmtecapaciteit Cp: bij constante druk (partiele afgeleide van H naar T bij cte p)

Cp meet de temperatuusafhankelijkheid van de enthalpie.

Cp>Cv want bij Cp wordt er expansie arbeid verricht (er zal meer warmte moeten worden toegevoegd)

Verband: Cp-Cv=nR

1. Bespreek het begrip warmtecapaciteit in verband met molecuulbewegingen van een gas  
   zie p.267-273

Equipartitie: gemiddeld evenveel energie in iedere soort beweging

1. Definieer volgende begrippen:

* Reactiewarmte De som van alle warmten die tijdens de reactie door het system met de omgeving uitgewisseld worden, en de warmte die na afloop van de reactie moet uitgewisseld worden om het systeem terug op zijn begintemperatuur te brengen, noemt men de reactiewarmte.
* thermochemische reactievergelijking Een vergelijking die de volgende elementen bevat: de reactievergelijking, de faselabels en de reactie-enthalpie.
* Wet van Hess (en leg uit) De isobare reactiewarmte van een chemische reactie die kan uitgevoerd worden als een som van deelreacties is gelijk aan de som van de isobare reactiewarmten van de deelreacties. De isobare reactiewarmte is de reactie-enthalpie. Deze is een toestandsfunctie dus deze is langs beide paden gelijk. ΔHg = ΔHa + ΔHb
* Standaard reactie-enthalpie De standard-enthalpie is de enthalpie bij een reactie onder standaardtemperatuur (T = 25°C) en standaarddruk (p = 1000hPa).
* Vormingsenthalpie De enthalpie bij een reactie die de vorming voorstelt van één mol van de beschouwde verbinding uit de samenstellende elementen, waarbij deze laatsten zich bevinden in hun vorm die zij vertonen bij de gekozen reactiedruk en reactietemperatuur.

1. Leidt de wet van Kirchhoff af zie p.282-283
2. Geef de definitie(s) van entropie (formule + woorden), formuleer de 2e hoofdwet van de thermodynamica, en toon aan dat warmte altijd spontaan van een warmer naar een kouder lichaam stroomt

De toestandsfunctie waarvoor onderstaande uitdrukking de totale differentiaal is wordt de entropie S genoemd. dS = d(met streep)qrev/T, ook S = kb\*lnW met kb de constante van Boltzmann.  
Tweede Hoofdwet: Ieder spontaan proces gaat gepaard met een toename in entropie van het universum.  
Als uit een compartiment A met hogere T een infinitesimale hoeveelheid warmte wordt uitgewisseld met een compartiment B, dan is dSsys positief. Omdat het systeem een perfecte thermische isolatie heeft, is dSomg = 0, De entropieverandering van het systeem is dus positief en dit is dus volgens de tweede hoofdwet een spontaan proces.

1. Geef een statistische interpretatie aan het begrip entropie, relateer dit aan het begrip wanorde, en bespreek het belang voor chemische reacties  
   De entropie is een maat voor het aantal manieren waarop op microscopisch niveau een macroscopische toestand kan gerealiseerd worden. Entropie is een maat voor de wanorde in een systeem. Chemische toepassingen: De wanorde van het systeem, en dus zijn entropie, nemen toe wanneer: 1. Een molecule splitst in twee kleinere moleculen. 2. Het aantal mol gas neemt toe. 3.Een vaste stof overgaat naar een vloeistof of een gas, en wanneer een vloeistof overgaat naar een gas.
2. Geef de 4 hoofdwetten van de thermodynamica.  
   Nulde Hoofdwet van de Thermodynamica: Wanneer systeem A in thermisch evenwicht is met systeem B, en wanneer systeem B in thermisch evenwicht is met systeem C, dan is systeem A ook in thermisch evenwicht met systeem C.  
   Eerste Hoofdwet van de Thermodynamica: De verandering, als gevolg van een proces, van de inwendige energie U van een gesloten systeem wordt gegeven als de som van de warmte q die het systeem tijdens het proces opgenomen heeft, en de arbeid w die tijdens het proces op het systeem uitgeoefend werd.  
   Tweede Hoofdwet van de Thermodynamica: Ieder spontaan proces gaat gepaard met een toename in entropie van het universum.  
   Derde Hoofdwet van de Thermodynamica: Het is onmogelijk het absolute nulpunt te bereiken in een eindig aantal stappen.
3. Bespreek de begrippen “standaard vormingsenthalpie” en “standaardentropie”  
   De standaardenthalpie van een stof definiëren we als de absolute entropie per mol van die stof bij standaard temperatuur en druk.

In tegenstelling tot hun standaardvormingsenthalpie is de standaardentropie van chemische elementen niet nul.

1. Leid uit de 1e hoofdwet de uitdrukking af voor de Helmholz vrije energie en de Gibbs vrije energie, geef hun betekenis en bespreek het verband tussen de Gibbs vrije energie en de spontaneïteit van een proces.  
   Zie p.305-306

Volgende vragen zie cursus

1. Leid uit de definitie van G de Gibbs vrije energie af voor een ideaal gas
2. Leid uit de uitdrukking *dG = Vdp – SdT* de chemische potentiaal van een ideaal gas en een reëel gas af, en bespreek het begrip fugaciteit
3. Leid de uitdrukking af voor evenwicht tussen fasen
4. Leid de chemische potentiaal af van een component in een mengsel van ideale gassen
5. Leid de uitdrukking af voor de chemische potentiaal van een component in een ideaal vloeistofmengsel en bespreek de Wet van Raoult.
6. Leid de uitdrukking af voor de chemische potentiaal van een component in een reëel vloeistofmengsel, en bespreek het begrip activiteit
7. Leid de uitdrukking af voor de Gibbs energie bij het mengen van ideale gassen
8. Bespreek de vorderingsgraad en de evenwichtsvoorwaarde voor een gasreactie, en de evenwichtsconstante voor een ideale en voor een reële gasreactie
9. Leid de uitdrukkingen af voor de evenwichtsconstante van een reactie in een ideale oplossing, een reële oplossing en een verdunde oplossing
10. Geef en bespreek de Wet van Le Chatelier
11. Leid de wet van Van’t Hoff af en bespreek