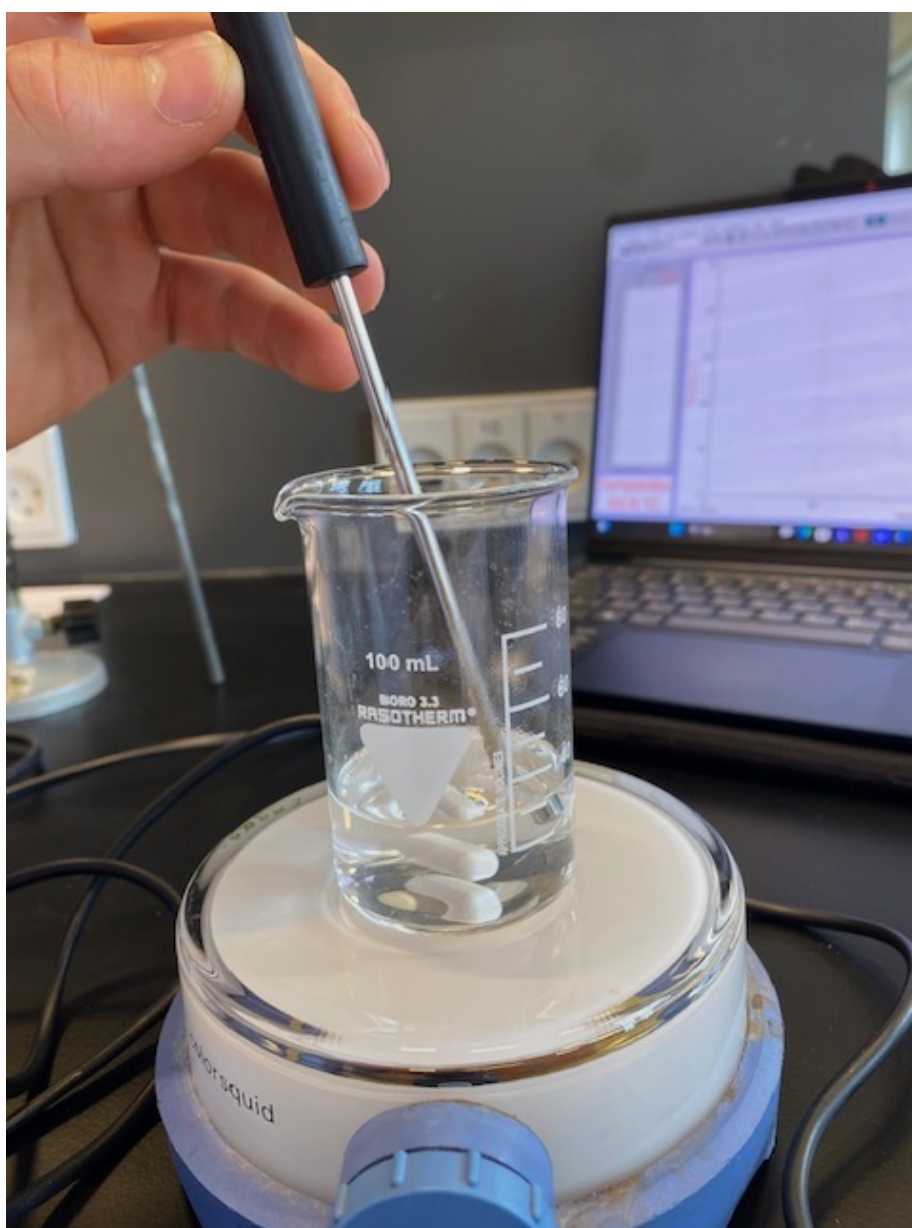


Rapport 2:  
 $\Delta G^\ominus$ ,  $\Delta H^\ominus$  og  $\Delta S^\ominus$  for en opløselighedsreaktion  
**3.b kemi A**

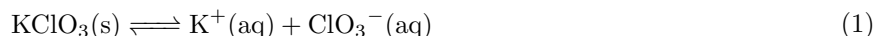
Kevin Zhou

27. oktober 2024



## Formål

Formålet med eksperimentet er at bestemme  $\Delta G^\circ$ ,  $\Delta H^\circ$  og  $\Delta S^\circ$  for reaktionen



## Teori

Ligevægtsloven for reaktion 1 må være

$$K_o(\text{KClO}_3) = [\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_3^-] \quad (2)$$

I eksperimentet varmer vi først opløsningen op til alt kaliumchlorat er opløst, hvorefter vi måler temperaturen, hvor kaliumchlorat begynder at udfælde sig igen og opløsningen lige netop er mættet. Vi måler temperaturen her, da der så er ligevægt.  $K_o(\text{KClO}_3)$  afhænger både af den formelle stofmængdekonzentration af det opløste kaliumchlorat og temperaturen. Vi kan da få forskellige temperaturer for udfældningen ved at ændre på den formelle stofmængdekonzentration af det opløste kaliumchlorat

Der gælder følgende sammenhæng mellem opløselighedsproduktet og  $\Delta G^\circ$ :

$$\Delta G^\circ = -R \cdot T \cdot \ln(K_o(\text{KClO}_3)) \quad (3)$$

hvor  $R$  er gaskonstanten og  $T$  er den absolutte temperatur. Derudover har vi også

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \cdot \Delta S^\circ \quad (4)$$

Det er vigtigt at tilføje, at  $\Delta H^\circ$  og  $\Delta S^\circ$  næsten er konstante ved det anvendte temperaturområde. Altså vil det sige, at der burde være en lineær sammenhæng mellem  $\Delta G^\circ$  og  $T$ .

## Apparatur, kemikalier og sikkerhed

### Apparatur

- Bægerglas, 100 mL, smal form
- Bunsenbrænder
- Trefod med trådnet
- Termometer
- Vægt
- Måleglas, 50 mL
- Magnetomrører
- Magnet

### Kemikalier

- Kaliumchlorat,  $\text{KClO}_3$

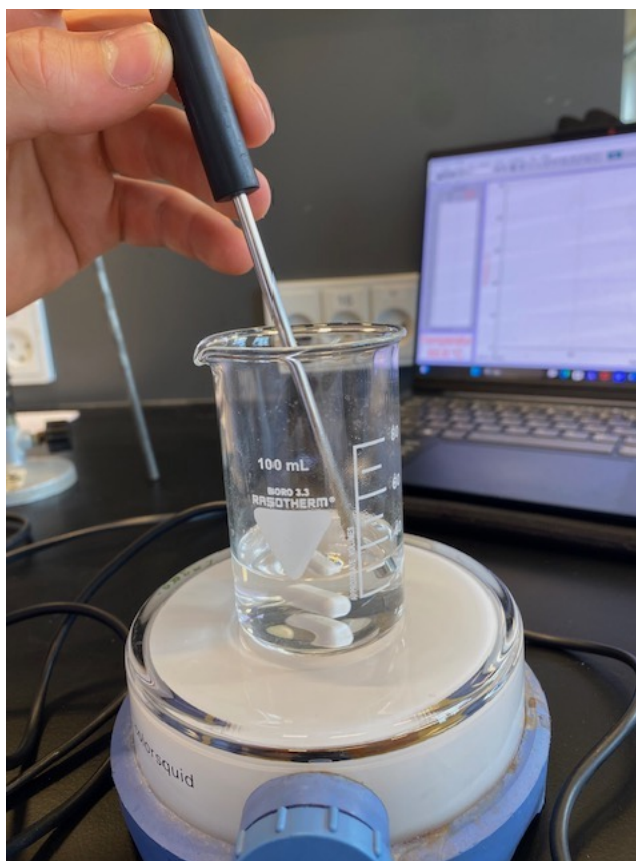
### Sikkerhed

- Kaliumchlorat er sundhedsskadeligt ved indtagelse og indånding. Det er brandnærende og kan forårsage brand eller eksplosion.

## Udførelse

Forsøget gentages med ni forskellige volumener af demineraliseret vand: 25 mL, 27,5 mL, 30 mL, 35 mL, 37,5 mL, 40 mL, 42,5 mL, 45 mL og 50 mL.

Der afvejes cirka 5 g kaliumchlorat med 0,01 g's nøjagtighed i et 100 mL bægerglas, og massen noteres ned. En magnet anbringes i bægerglasset, og det ønskede volumen af demineraliseret vand afmåles i et måleglas og hældes derefter op i bægerglasset. Opløsningen opvarmes så forsigtigt under omrøring med termometeret indtil alt stoffet lige netop er opløst. Da stoppes opvarmningen, og bægerglasset placeres på en magnetomrører med langsom omrøring som i fig. 1. Herefter holdes der nøje øje med bægerglasset, og temperaturen noteres, når de første krystaller observeres.



Figur 1: Der holdes nøje øje med bægerglasset, hvor temperaturen noteres, når de første krystaller observeres

Opvarmning og efterfølgende nedkøling gentages af opløsningen, indtil der er to temperaturlæsninger, der ikke afviger mere end 1 °C fra hinanden, og gennemsnittet af de to temperaturer, som vi betegner  $t$ , noteres.

Til sidst opvarmes blandingen igen til alt kaliumchlorat er opløst, hvorefter opløsningen hældes over i et måleglas og opløsningens volumen bestemmes og noteres.

## Resultater

De sammenhørende værdier for opløsningens målte volumen, gennemsnittet af de to sidste temperaturlæsninger ved observation af de første krystaller  $t$  og massen af kaliumchlorat ses i table 1.

Opløsningens volumen $V/\text{mL}$	Gennemsnitstemperatur $t/^{\circ}\text{C}$	$m(\text{KClO}_3)/\text{g}$
22.3	57.5	5.147
28.0	50.55	5.030
29.9	49.35	5.297
45.9	32.6	5.045
34.7	42.45	5.015
36.5	39.0	5.000
41.5	35.2	5.023
45.0	33.1	5.059
53.0	28.5	5.002

Tabel 1: De noterede værdier fra de ni delforsøg

## Efterbehandling og sammenfatning

Efterbehandlingen laves for alle ni delforsøg i LoggerPro regneark, men vi gennemgår følgende kun ét af forsøgene, da de andre regnes på tilsvarende måde. Vi ser nu på forsøget, hvor opløsningens volumen målttes til 22,3 mL (øverste række i table 1). Først regner vi stofmængden af  $\text{KClO}_3$ .

$$\begin{aligned}
 n(\text{KClO}_3) &= \frac{m(\text{KClO}_3)}{M(\text{KClO}_3)} \\
 &= \frac{5,147 \text{ g}}{122,55 \text{ g/mol}} \\
 &= 0,041999 \text{ mol}
 \end{aligned}$$

Da vi kender opløsningens volumen, kan vi beregne  $c(\text{KClO}_3)$ .

$$\begin{aligned}
 c(\text{KClO}_3) &= \frac{n(\text{KClO}_3)}{V} \\
 &= \frac{41,999 \text{ mmol}}{22,3 \text{ mL}} \\
 &= 1,88337 \text{ M}
 \end{aligned}$$

Da vi ser på tilfældet, hvor alt kaliumchlorat kun lige er opløst, og vi fra reaktion 1 ser, at reaktionsforholdet mellem  $\text{KClO}_3$  og  $\text{K}^+$  samt  $\text{KClO}_3$  og  $\text{ClO}_3^-$  er 1:1, så må der gælde, at

$$c(\text{KClO}_3) = [\text{K}^+] = [\text{ClO}_3^-]$$

Da der er ligevægt, så må opløselighedsproduktet være lig med ionproduktet:

$$\begin{aligned}
 K_o(\text{KClO}_3) &= [\text{K}^+] \cdot [\text{ClO}_3^-] \\
 &= c(\text{KClO}_3)^2 \\
 &= (1,88337 \text{ M})^2 \\
 &= 3,5471 \text{ M}^2
 \end{aligned}$$

Vi kan nu beregne  $\Delta G^\circ$ .

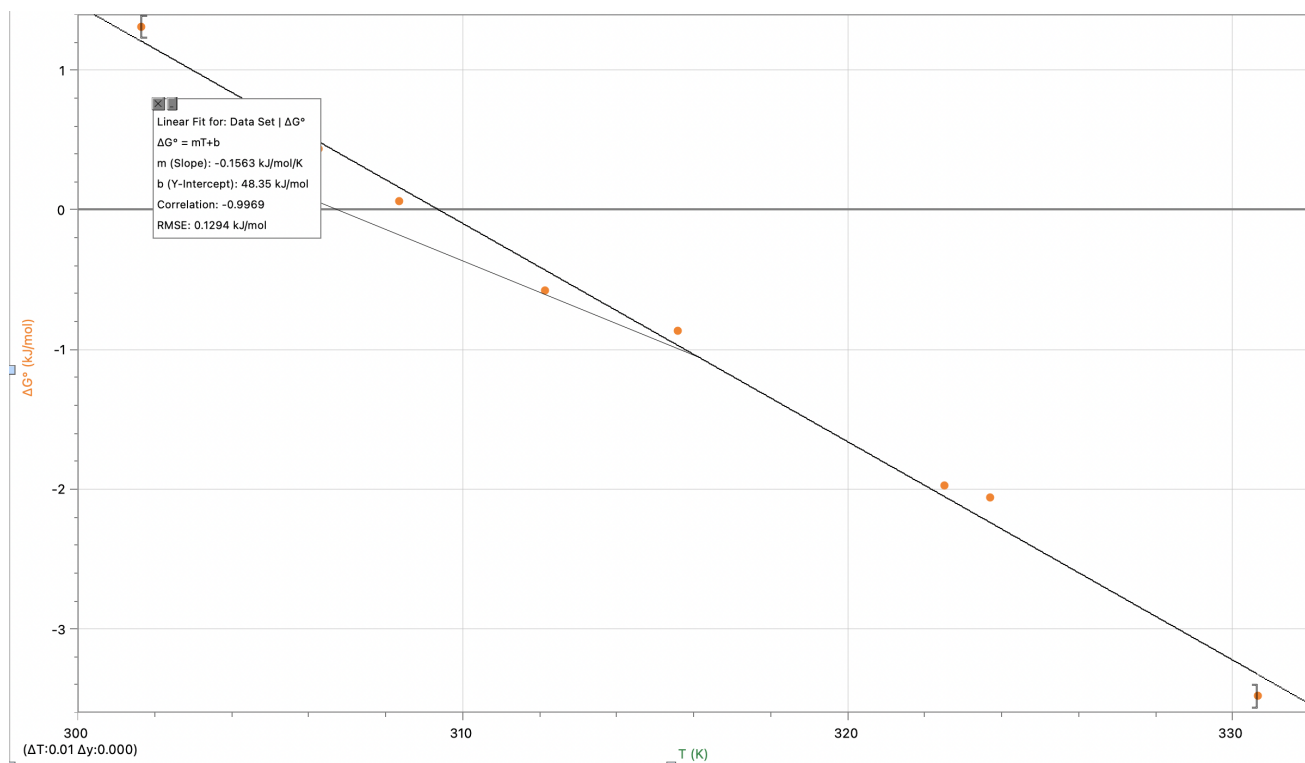
$$\begin{aligned}
 \Delta G^\circ &= -R \cdot T \cdot \ln(K_o(\text{KClO}_3)) \\
 &= -8,314 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot (57,5 + 273,15) \text{ K} \cdot \ln(3,5471) \\
 &= -3,4806 \text{ kJ/mol}
 \end{aligned}$$

Som sagt gøres tilsvarende for alle de andre delforsøg i et regneark, hvilket ses i fig. 2.

	Data Set									
	V (mL)	t (°C)	m(KClO <sub>3</sub> ) (g)	n(KClO <sub>3</sub> ) (mol)	c(KClO <sub>3</sub> ) (mol/L)	[K*] (mol/L)	[ClO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ] (mol/L)	K <sub>o</sub> (KClO <sub>3</sub> ) (M <sup>2</sup> )	T (K)	ΔG° (kJ/mol)
1	22.3	57.5	5.147	0.041999184	1.88337148	1.8833	1.883	3.547088132	330.65	-3.4806136
2	28	50.55	5.03	0.041044472	1.465873987	1.4658	1.465	2.148786547	323.7	-2.0585396
3	29.9	49.35	5.297	0.043223174	1.445591111	1.4455	1.445	2.08973366	322.5	-1.9761904
4	45.9	32.6	5.045	0.041166871	0.896881714	0.8968	0.896	0.804396809	305.75	0.55329949
5	34.7	42.45	5.015	0.040922073	1.17931045	1.1793	1.179	1.390773138	315.6	-0.8655186
6	36.5	39	5	0.040799674	1.117799277	1.1177	1.117	1.249475223	312.15	-0.5780157
7	41.5	35.2	5.023	0.040987352	0.987647039	0.9876	0.987	0.975446673	308.35	0.06373109
8	45	33.1	5.059	0.04128111	0.917357994	0.9173	0.917	0.84154569	306.25	0.43925115
9	53	28.5	5.002	0.040815993	0.770113084	0.7701	0.770	0.593074163	301.65	1.31022626

Figur 2: Udregningerne er lavet i Logger Pro

Siden vi fra ligning 4 (hvor  $\Delta H^\circ$  og  $\Delta S^\circ$  er konstante) har, at der er en lineær sammenhæng mellem  $\Delta G^\circ$  og  $T$ , laver vi en lineær regression, hvilket ses i fig. 3.



Figur 3: Lineær regression lavet i Logger Pro

Punkterne ligger tilnærmelsesvist på en ret linje, og vi har fra vores regression, at

$$\Delta G^\circ = 48,35 \text{ kJ/mol} - T \cdot 0,1563 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

Hvis vi kombinerer dette med ligning 4, kan vi finde værdier for  $\Delta H^\circ$  og  $\Delta S^\circ$ .

$$\Delta H^\circ = 48,35 \text{ kJ/mol} \approx 48,4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta S^\circ = 0,1563 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \approx 156 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

Vi ser da, at  $\Delta H^\circ > 0$ , hvilket betyder, at reaktionen mod højre er endoterm. Derudover er  $\Delta S^\circ > 0$ , hvilket betyder, at uordenen forøges ved reaktionen mod højre.

Da  $\Delta G^\circ$  aftager, når temperaturen forøges, så stiger opløseligheden med temperaturen (fordi  $\Delta G^\circ < 0$  for at kemisk reaktion kan forløbe spontant ved konstant tryk og temperatur). Dette er i overensstemmelse med Le Chateliers princip, da reaktionen mod højre jo er endoterm.

Vi er også interesserede i at beregne  $\Delta G^\circ$  ved 298 K, hvilket er cirka 25 °C.

$$\begin{aligned}\Delta G^\circ(298 \text{ K}) &= 48,35 \text{ kJ/mol} - 298 \text{ K} \cdot 0,1563 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \\ &\approx 1,77 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

## Mulige fejlkilder

Ved forsøgene er det svært at bestemme præcist, hvornår kaliumchlorat begynder at udfælde sig igen, hvilket ville føre til en lavere målt temperatur, hvis man opdager udfældningen for sent.

## Konklusion

Vi har for reaktion 1 bestemt  $\Delta G^\circ(298 \text{ K}) = 1,77 \text{ kJ/mol}$ ,  $\Delta H^\circ = 48,4 \text{ kJ/mol}$  og  $\Delta S^\circ = 156 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$ .