11.4 a) Calcule a entropia correspondente ao processo de mistura de 3 mol de hidrogênio com um mol de nitrogênio.

b) Calcule a energia de Gibbs do processo de mistura a 25°C.

c) A 25° C, calcule a energia de Gibbs da mistura de $1 - \xi$ mol de nitrogênio, $3(1 - \xi)$ mol de hidrogênio e 2ξ mol de amoníaco como uma função de ξ. Lance em gráfico os valores para $\xi = 0$ a $\xi = 1$, em intervalos de 0,2.

d) Se $\Delta G_f^\circ(NH_3) = -16{,}5$ kJ/mol, a 25° C, calcule a energia de Gibbs da mistura para os valores de $\xi = 0$ a $\xi = 1$ em intervalos de 0,2. Construa o gráfico de G contra ξ para o caso do estado inicial ser uma mistura de 1 mol de N_2 e 3 mol de H_2. Compare o resultado encontrado com a Fig. 11.5.

e) Calcule G para ξ_e a $p = 1$ atm.

$$\Delta G\ puro(\xi) = nN2 . \Delta Gf(N2) + nH2 . \Delta Gf(H2) + nNH3 . \Delta Gf(NH3)$$

11.4 a) ΔS do processo de mistura de 3 mols de H com 1 mol de N

$$\Delta S = -nR\sum_i x_i \ln x_i$$

$$\Delta S = -4\,\text{mols} \cdot 8{,}3144\,\frac{m^2 \cdot Kg}{s^2\,K\,mol} \cdot \left(\frac{3}{4} \cdot -0{,}2876 + \frac{1}{4} \cdot -1{,}3863\right)$$

$$\Delta S = 18{,}6989 \; \frac{m^2\,Kg}{s^2 \cdot K}\;J$$

$$\boxed{\Delta S = 18{,}6989\,\frac{J}{K}}$$

b) Energia de Gibbs a 25°C (298K)

$$\Delta G_{mist} = n.R.T\sum_i x_i \ln x_i$$

$$\Delta G_{mist} = 4\,mol \cdot 8{,}3144\,\frac{m^2\,Kg}{s^2\,K\,mol} \cdot 298K \left(\frac{3}{4} \cdot -0{,}2876 + \frac{1}{4} \cdot -1{,}3863\right)$$

$$\Delta G_{mist} = -5572{,}57\,\frac{m^2\,Kg}{s^2}$$

$$\boxed{\begin{array}{l}\Delta G_{mist} = -5572{,}57\,J \\ \Delta G_{mist} = -5{,}572\,KJ\end{array}}$$

	nN	nH	nNH3	nt
0	1	3	0	4
0,2	0,8	2,4	0,4	3,6
0,4	0,6	1,8	0,8	3,2
0,6	0,4	1,2	1,2	2,8
0,8	0,2	0,6	1,6	2,4
1	0	0	2	2

xN	xH	xNH3
0,25	0,75	0
0,222222	0,666667	0,111111
0,1875	0,5625	0,25
0,142857	0,428571	0,428571
0,083333	0,25	0,666667
0	0	1

lnN	lnH	lnNH3
-1,386294361	-0,28768	#NÚM!
-1,504077397	-0,40547	-2,19722
-1,673976434	-0,57536	-1,38629
-1,945910149	-0,8473	-0,8473
-2,48490665	-1,38629	-0,40547
0	0	0

xlnN	xlnH	xlnNH3
-0,34657	-0,215761554	0
-0,33424	-0,270310072	-0,24414
-0,31387	-0,323642332	-0,34657
-0,27799	-0,363127654	-0,36313
-0,20708	-0,34657359	-0,27031
0	0	0

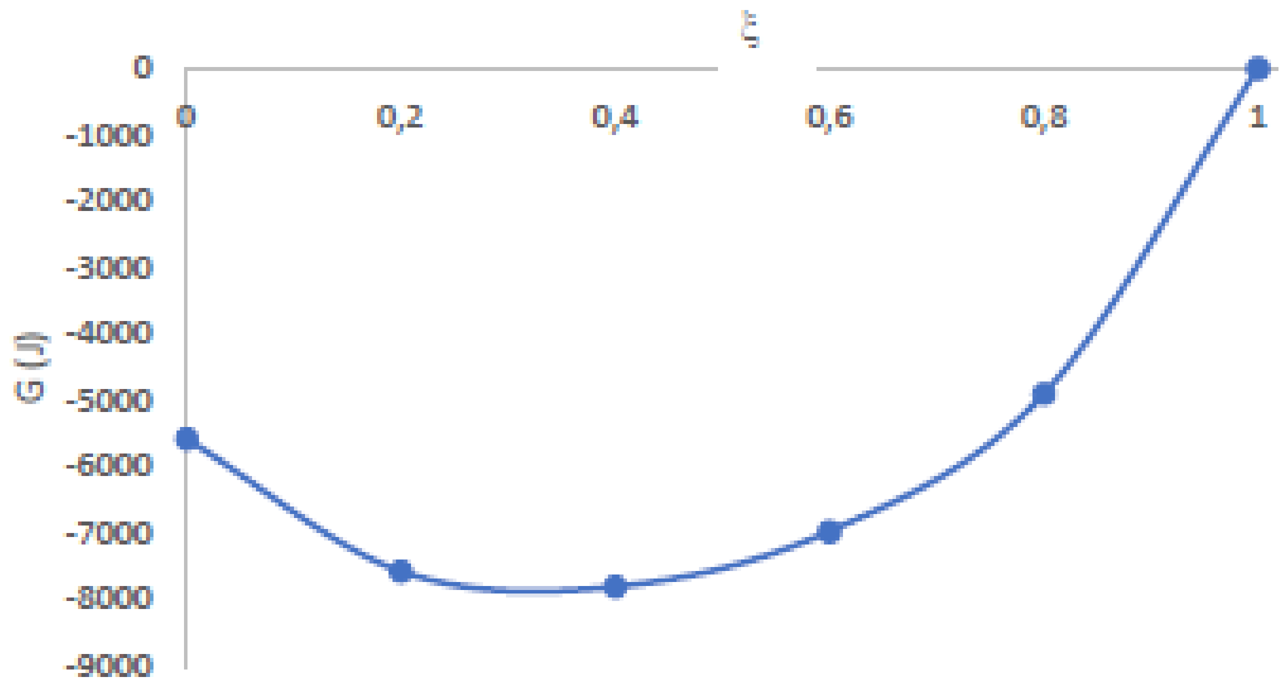
ξ	Gmist (J)
0	-5573,17
0,2	-7570,01
0,4	-7802,44
0,6	-6966,97
0,8	-4899,64
1	0

G = G puro + G mist

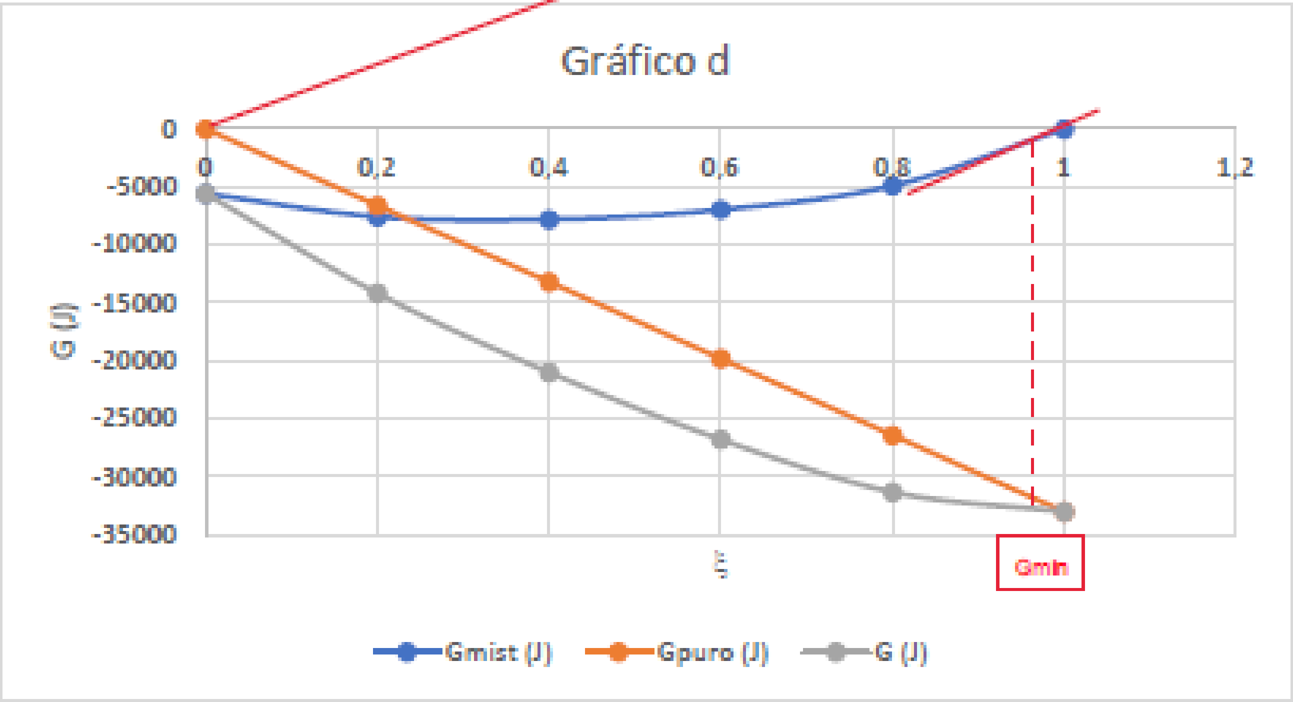
O cálculo da reta de Gpuro é:
Gpuro = Gf(N2) + Gf(H2) + Gf(NH3)
convenção
das tabelas:
Gf(N2) = Gf(H2) = 0
Gf(NH3) = -16500J/mol

Gpuro = 2.(qsi)(-16500)

ξ	Gmist (J)	Gpuro (J)	G (J)
0	-5573,17	0	-5573,17
0,2	-7570,01	-6600	-14170
0,4	-7802,44	-13200	-21002,4
0,6	-6966,97	-19800	-26767
0,8	-4899,64	-26400	-31299,6
1	0	-33000	-33000



A reta vermelha é a reta com inclinação negativa da reta de Gpuro e vai tangenciar a curva de Gmist no ponto de (qsi)equilibrio = ponto de Gmin



A inclinação negativa da reta de Gpuro tangencia a curva de Gmistura no ponto de equilíbrio (Gmínimo = E(qsi) eq tangente acontece próximo de E(qsi) = 1

Vamos ampliar os cálculos nessa região para valores de E (qsi) entre 0,91 e 0,99. S vocês plotarem em outro gráfico só valores de E(qsi) entre 0,90 e 1,0, vocês terão um ponto de Gmínimo para E(qsi)= 0,97
Gmínimo = - 33311,6 J