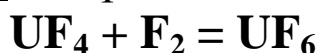


**Пример.** Определим значения  $\Delta G_T^0$  и  $\lg K_p$  по значениям абсолютных энтропий для реакции:



при температуре 1000 К.

**Решение.** Используя результаты термодинамического исследования данной реакции **методом изобары**, имеем:

$$\Delta H_{298}^0 = -239,8 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}; \Delta S_{298}^0 = 46,7 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}};$$

$$\Delta a = 8,8; \Delta b = -25,7 \cdot 10^{-3}; \Delta c' = -16,7 \cdot 10^5.$$

Рассчитаем:

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{A}{T} = 6,698\Delta a + \Delta b \cdot 298 - 5,63 \cdot 10^{-6} \Delta c' - \Delta S_{298}^0 = \\ &= 6,698 \cdot 8,8 + 298 \cdot (-25,7 \cdot 10^{-3}) - 5,65 \cdot 10^{-6} \cdot (-16,7 \cdot 10^5) - 46,7 = \\ &= 58,9 - 7,7 + 9,4 - 46,7 = \mathbf{13,98}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_2 &= -B = 298\Delta a + 4,44 \cdot 10^4 \Delta b - 3,356 \cdot 10^{-3} \Delta c' = \\ &= 298 \cdot 8,8 + 4,44 \cdot 10^4 \cdot (-25,7 \cdot 10^{-3}) - 3,356 \cdot 10^{-3} \cdot (-16,7 \cdot 10^5) = \\ &= 2622,4 - 1141,1 + 5604,5 = \mathbf{7085,8}. \end{aligned}$$

**T = 1000 К:**

$$\begin{aligned} \Delta G_{1000}^0 &= \Delta H_{298}^0 - 2,3\Delta a \cdot T \cdot \lg T - \frac{1}{2} \cdot \Delta b \cdot T^2 - \frac{1}{2} \Delta c' \cdot T^{-1} + I_1 \cdot T - I_2 = \\ &= -239800 - 2,3 \cdot 8,8 \cdot 1000 \cdot \lg 1000 - \frac{1}{2} \cdot (-25,7 \cdot 10^{-3}) \cdot 1000^2 - \\ &- \frac{1}{2} \cdot (-16,7 \cdot 10^5) \cdot \frac{1}{1000} + 13,98 \cdot 1000 - 7085,8 = -239800 - 60720 + \\ &+ 12850 + 13900 - 7085,8 = -280020,8 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}}. \end{aligned}$$

$$\ln K_{p1000} = -\frac{\Delta G_{1000}^0}{R \cdot 1000} = -\frac{-280020,8}{8,314 \cdot 1000} = \mathbf{33,7}.$$

$$\lg K_{p1000} = \frac{\lg K_p}{\ln 10} = \frac{\lg K_p}{2,3} = \frac{33,7}{2,3} = \mathbf{14,65}.$$

$$K_{p1000} = \mathbf{4,49 \cdot 10^{14}}.$$

Значение  $\Delta G_{1000}^0$ , рассчитанное по уравнению изобары, составляет  $\mathbf{-301006 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}}$ , а значение  $\Delta G_{1000}^0$ , рассчитанное по

значениям абсолютных энтропий – **280021**  $\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$  или на  $20985 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$  меньше первого значения.

Рассчитаем погрешность первого значения  $\Delta G_{1000}^0$  относительно второго.

$$301006 - 100 \%$$

$$280021 - x \%$$

$$x = 93 \%$$

**Погрешность** составит:

$$\Delta = 100 - 93 = 7 \%$$