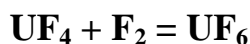


Пример. Определим значения ΔG_T^0 и $\lg K_p$ методом Темкина-Шварцмана для реакции:



при температуре 1000 К.

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

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

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

$$\Delta G_{1000}^0 = -301,006 \frac{\text{кДж}}{\text{моль}};$$

Рассчитаем:

По табл. 8 “Величины M_n для вычисления термодинамических функций методом Темкина-Шварцмана”, приведенной в “Рябин В.А., Остроумов М.А., Свит Т.Ф. Термодинамические свойства веществ. Справочник” или по табл. 2 “Значения температурных функций для точных расчетов равновесия химических реакций”, приведенной в “Владимиров Л.П. Термодинамические расчеты равновесия металлургических реакций” находим, что при $T=1000$ К:

$$M_0=0,5088; \quad M_1 \cdot 10^{-3}=0,2463; \quad M_{-2} \cdot 10^5=0,2783.$$

Тогда:

$$\Delta G_{1000}^0 = \Delta H_{298}^0 - T \cdot \Delta S_{298}^0 - T(\Delta a \cdot M_0 + \Delta b \cdot M_1 + \Delta c' \cdot M_{-2}) = -239800 - 1000 \cdot 46,7 - 1000 (8,8 \cdot 0,5088 + (-25,7 \cdot 10^{-3}) \cdot 0,2463 \cdot 10^3 + (-16,7 \cdot 10^5) \cdot 0,2783 \cdot 10^{-5}) = -293\,300 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}.$$

$$\lg K_p = \square \frac{\Delta G_{1000}^0}{2,303 \cdot RT} = -\frac{-293\,300}{2,303 \cdot 8,314 \cdot 1000} = 15,32.$$

При расчете ΔG_{1000}^0 методом изобары получено, что $\Delta G_{1000}^0 = \square 301\,006 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$, $\lg K_p = 15,72$.

Рассчитаем погрешность первого значения ΔG_{1000}^0 относительно второго.

$$\square 301006 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}} - 100 \%$$

$$\square 293300 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}} - x \%$$

$$x = 94,7 \%$$

Погрешность составит:

$$\Delta = 100 - 94,7 = 2,6 \%$$

Погрешность между соответствующими значениями $\lg K_p$ составит:

$$15,72 \square 100 \%$$

$$15,32 \square x \%$$

$$x = 97,5 \%$$

$$\Delta = 100 - 97,5 = 2,5 \%$$