

Задача 6. В какую сторону идет химическая реакция?

Решение

1) Стандартная энергия Гиббса реакции (1) равна удвоенной энергии Гиббса образования NiO:

$$\Delta G = 2 \cdot (-72.1) = -144.2 \text{ кДж/моль.}$$

При $T = 1900 \text{ К}$ получаем константу равновесия и равновесное давление кислорода:

$$K = \frac{1}{p(\text{O}_2)} = \exp\left(-\frac{\Delta G^\circ}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{144200}{8.314 \cdot 1900}\right) = 9215,$$

$$p(\text{O}_2) = \frac{1}{K} = 1.085 \cdot 10^{-4} \text{ атм} = 0.0825 \text{ Торр.}$$

Если давление кислорода больше равновесного, то реакция идет слева направо. Условию задачи удовлетворяет интервал давлений

$$0.0825 \text{ Торр} < p(\text{O}_2) < 1 \text{ Торр.}$$

2) Возможность протекания реакции в определенном направлении определяет величина ΔG , а не ΔG° . Для реакции (2) справедливо соотношение (изотерма химической реакции):

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln p(\text{CO})^2$$

(концентрации твердых веществ постоянны и в уравнение изотермы не входят). Реакция может идти слева направо при $\Delta G < 0$:

$$\Delta G^\circ > -RT \ln p(\text{CO})^2,$$

$$p(\text{CO}) < \exp\left(-\frac{\Delta G^\circ}{2RT}\right)$$

По данным таблицы 1 находим:

$$\Delta G^\circ = -162.6 + 2 \cdot (-200.2) - (-757.8) = 194.8 \text{ кДж/моль.}$$

$$p(\text{CO}) < \exp\left(-\frac{194800}{2 \cdot 8.314 \cdot 1000}\right) = 8.17 \cdot 10^{-6} \text{ атм.}$$

Если давление CO в системе меньше указанного, реакция может идти слева направо.

3) По данным таблицы (1), получим выражение для ΔG реакции (3)

$$\begin{aligned} \Delta G &= \Delta G^\circ + RT \ln \frac{p(\text{NH}_3)^2}{p(\text{H}_2)^3 p(\text{N}_2)} = 2 \cdot (-16260) + 8.314 \cdot 300 \cdot \ln \frac{1^2}{0.5^3 \cdot 3} = \\ &= -30100 \text{ Дж/моль} = -30.1 \text{ кДж/моль.} \end{aligned}$$

При температуре 300 К реакция (3) может протекать только слева направо. Реакция, однако, не идет в этом направлении из-за очень низкого значения константы скорости. Реакция справа налево – термодинамически запрещена.