

**Расчетно-графическое задание по темам: «Термохимия. Энтропия.
Термодинамические потенциалы. Химическое равновесие.»**

1-1. 1) Вычислите тепловой эффект данной реакции А при 298 К. **2)** Выведите аналитическую зависимость теплового эффекта реакции А от температуры. Уравнения зависимости $C_p^\circ = f(T)$ возьмите из справочника [1]. **3)** Вычислите тепловой эффект реакции при температуре T . **4)** Постройте графики зависимости $\sum_1^i (v_i C_p^\circ)_{\text{кон}} = f(T)$; $\sum_1^i (v_i C_p^\circ)_{\text{исх}} = f(T)$ и $\Delta H_T^\circ = f(T)$ в том интервале температур, для которого справедливо выведенное уравнение зависимости $\Delta H_T^\circ = f(T)$. **5)** Определите графически $(d\Delta H)/dT$ при температуре T_1 . Рассчитайте ΔC_p° при этой температуре.

№ варианта	Уравнения реакций А	T , К	T_1 , К
1	$2\text{H}_2 + \text{CO} = \text{CH}_3\text{OH}_{(r)}$	800	350
2	$4\text{HCl} + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}_{(r)} + 2\text{Cl}_2$	750	650
3	$\beta\text{-NH}_4\text{Cl} = \text{NH}_3 + \text{HCl}$	450	350
4	$2\text{N}_2 + 6\text{H}_2\text{O}_{(r)} = 4\text{NH}_3 + 3\text{O}_2$	1300	1000
5	$4\text{NO} + 6\text{H}_2\text{O}_{(r)} = 4\text{NH}_3 + 5\text{O}_2$	1000	900
6	$2\text{NO}_2 = 2\text{NO} + \text{O}_2$	700	500
7	$\text{N}_2\text{O}_4 = 2\text{NO}_2$	400	350
8	$\text{Mg}(\text{OH})_2 = \text{MgO} + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	500	300
9	$\text{CaCO}_3 = \text{CaO} + \text{CO}_2$	1000	700
10	$\text{Ca}(\text{OH})_2 = \text{CaO} + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	500	350
11	$1/2\text{S}_{2(r)} + 2\text{H}_2\text{O}_{(r)} = \text{SO}_2 + 2\text{H}_2$	1000	900
12	$1/2\text{S}_{2(r)} + 2\text{CO}_2 = \text{SO}_2 + 2\text{CO}$	900	850
13	$2\text{SO}_2 + \text{O}_2 = 2\text{SO}_3$	700	600
14	$\text{SO}_2 + \text{Cl}_2 = \text{SO}_2\text{Cl}_{2(r)}$	400	300
15	$\text{CO} + 3\text{H}_2 = \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	1000	900
16	$2\text{CO} + \text{SO}_2 = 1/2\text{S}_{2(r)} + 2\text{CO}_2$	900	700
17	$\text{CO} + \text{Cl}_2 = \text{COCl}_2$	400	350
18	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	1200	1000
19	$\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 = \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}_{(r)}$	1000	900
20	$2\text{CO}_2 = 2\text{CO} + \text{O}_2$	700	500
21	$\text{CH}_4 + \text{CO}_2 = 2\text{CO} + 2\text{H}_2$	900	400
22	$\text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	400	350
23	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}_{(r)} = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	400	300
24	$\text{CH}_3\text{CHO}_{(r)} + \text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}_{(r)}$	500	450
25	$\text{C}_6\text{H}_6_{(r)} + 3\text{H}_2 = \text{C}_6\text{H}_{12}_{(r)}$	600	500

1-2. 1) Рассчитайте $\Delta_r S^\circ_{298}$ для реакции А.

2) Рассчитайте изменение энтропии $\Delta_r S^\circ$ при увеличении температуры до T К.

3) Рассчитайте изменение энергии Гиббса в реакции при температуре T К.

4) Рассчитайте изменение энергии Гиббса в реакции при температуре T К и парциальных давлениях 3 бар. Будет ли эта реакция самопроизвольной при данных условиях?

1-3. Зависимость константы равновесия реакции А от температуры выражается уравнением:

$$\lg K_p = \frac{a}{T} + b \lg T + cT + d;$$

коэффициенты a , b , c и d приведены в таблице, давление выражено в Па: **1)** определите константу равновесия реакции А при температуре T , К; **2)** постройте график $\lg K = f(T^{-1})$ в пределах температур от $(T - 100)$ до $(T + 100)$ К; **3)** укажите, как изменится константа равновесия при повышении температуры; **4)** определите тепловой эффект реакции ΔH_T° при T , К; **5)** сопоставьте тепловой эффект, вычисленный в п. 4, с тепловым эффектом, вычисленным по закону Кирхгофа при температуре T , К (задание 1-1, п. 3); **6)** определите изменение энергии Гиббса при T , К, сопоставьте его с ранее найденной величиной (задание 1-2, п. 3).

№ вар.	Уравнения реакций	T , К	a	b	c	d
1	$2\text{H}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{OH}_{(r)}$	800	3724	-9,1298	0,00308	3,401
2	$4\text{HCl} + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{H}_2\text{O}_{(r)} + 2\text{Cl}_2$	750	5750	-2,136	-0,000857	-4,710
3	$\beta\text{-NH}_4\text{Cl}_{(тв)} \rightleftharpoons \text{NH}_3 + \text{HCl}$	450	-9,650	1,83	-0,00324	28,239
4	$2\text{N}_2 + 6\text{H}_2\text{O}_{(r)} \rightleftharpoons 4\text{NH}_3 + 3\text{O}_2$	1300	-66250	-1,75	0	-10,206
5	$4\text{NO} + 6\text{H}_2\text{O}_{(r)} \rightleftharpoons 4\text{NH}_3 + 5\text{O}_2$	1000	-47500	-1,75	0	-13,706
6	$2\text{NO}_2 \rightleftharpoons 2\text{NO} + \text{O}_2$	700	-5749	1,75	-0,0005	7,809
7	$\text{N}_2\text{O}_4 \rightleftharpoons 2\text{NO}_2$	400	-2692	1,75	-0,00483	1,944
8	$\text{Mg}(\text{OH})_{2(тв)} \rightleftharpoons \text{MgO}_{(тв)} + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	500	-4600	0,623	-0,00102	17,776
9	$\text{CaCO}_{3(тв)} \rightleftharpoons \text{CaO}_{(тв)} + \text{CO}_2$	1000	-9680	-1,385	-0,000219	17,756
10	$\text{Ca}(\text{OH})_{2(тв)} \rightleftharpoons \text{CaO} + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	500	-5650	0,67	0,000414	9,616
11	$1/2\text{S}_{2(r)} + 2\text{H}_2\text{O}_{(r)} \rightleftharpoons \text{SO}_2 + 2\text{H}_2$	1000	-13810	-0,877	0,00267	8,386
12	$1/2\text{S}_{2(r)} + 2\text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{SO}_2 + 2\text{CO}$	900	-2300	4,34	-0,00162	2,567
13	$2\text{SO}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{SO}_3$	700	10373	1,222	0	-18,806
14	$\text{SO}_2 + \text{Cl}_2 \rightleftharpoons \text{SO}_2\text{Cl}_{2(r)}$	400	2250	-1,75	0,000455	-7,206
15	$\text{CO} + 3\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	1000	9874	-7,14	0,00188	-1,371
16	$2\text{CO} + \text{SO}_2 \rightleftharpoons 1/2\text{S}_{2(r)} + 2\text{CO}_2$	900	2300	-4,34	0,0000002	-2,576
17	$\text{CO} + \text{Cl}_2 \rightleftharpoons \text{COCl}_2$	400	5020	1,75	0	-3,748
18	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	1200	-2203	0	-0,0000516	2,3
19	$\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}_{(r)}$	1000	7674	-6,23	0,000906	-1,291
20	$2\text{CO}_2 \rightleftharpoons 2\text{CO} + \text{O}_2$	700	-29500	1,75	-0,001215	-3,29
21	$\text{CH}_4 + \text{CO}_2 \rightleftharpoons 2\text{CO} + 2\text{H}_2$	900	11088	3,113	-0,0028524	-1,483
22	$\text{C}_2\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	400	-6365	2,961	-0,000766	-2,344
23	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}_{(r)} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O}_{(r)}$	400	-1485	7,54	-0,00425	7,006
24	$\text{CH}_3\text{CHO}_{(r)} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}_{(r)}$	500	1522	5,42	-0,00229	-2,810
25	$\text{C}_6\text{H}_6_{(r)} + 3\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_{12}_{(r)}$	600	9590	-9,9194	0,002285	-6,452