## Задача 501

$$MnO_{2(\kappa)} + 2H_{2(\Gamma)} \longleftrightarrow Mn_{(\kappa)} + 2H_2O_{(\Gamma)}$$

T = 1000K

Стандартная энтальпия реакции:

$$\begin{split} &\Delta_r H_{298}^0 = \sum \Bigl( \nu \cdot \Delta_f H_{298}^0 (\text{продуктов реакции}) \Bigr) - \sum \Bigl( \nu \cdot \Delta_f H_{298}^0 (\text{исходных веществ}) \Bigr) = \\ &= \Delta_f H_{298}^0 (Mn) + 2\Delta_f H_{298}^0 (H_2O) - \Bigl( \Delta_f H_{298}^0 (MnO_2) + 2\Delta_f H_{298}^0 (H_2) \Bigr) = \\ &= 0 \text{ кДж/моль} + 2 \cdot \Bigl( -242 \text{ кДж/моль} \Bigr) - \Bigl( -520 \text{ кДж/моль} + 2 \cdot 0 \text{ кДж/моль} \Bigr) = 36 \text{ кДж} = 36000 \text{ Дж} \end{split}$$

Реакция экзотермическая, так как  $\Delta_{r}H_{298}^{0}>0$ 

Стандартная энтропия реакции:

$$\begin{split} &\Delta_{r}S_{298}^{0} = \sum \left(\nu \cdot S_{298}^{0} (\text{продуктов реакции})\right) - \sum \left(\nu \cdot S_{298}^{0} (\text{исходных веществ})\right) = \\ &= S_{298}^{0} (Mn) + 2S_{298}^{0} (H_{2}O) - \left(S_{298}^{0} (MnO_{2}) + 2S_{298}^{0} (H_{2})\right) = \\ &= 32 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}} + 2 \cdot 189 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}} - \left(53 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}} + 2 \cdot 131 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{K}}\right) = 95 \frac{\text{Дж}}{\text{K}} \end{split}$$

Стандартное изменение энергии Гиббса при Т = 1000К:

$$\Delta_r G_{1000}^0 = \Delta_r H_{298}^0 - T \cdot \Delta_r S_{298}^0 = 36000$$
Дж  $-1000$ К  $\cdot 95$ Дж/К  $= -59000$  Дж

 $\Delta_{r}G_{1000}^{0} < 0$  Реакция может протекать самопроизвольно в прямом направлении

Рассчитаем при этой температуре константу равновесия.

$$K^{0} = \exp\left(\frac{-\Delta_{r}G^{0}}{RT}\right) = \exp\left(\frac{59000}{8,314 \cdot 1000}\right) = 1208$$

Реакция протекает в прямом направлении, так как  $K^0 > 1$ 

Выражения констант равновесия:

$$K_P = \frac{\overline{p}_{H_2O}^2}{\overline{p}_{H_2}^2}$$

$$K_C = \frac{\left[H_2O\right]^2}{\left[H_2\right]^2}$$

Уравнение изобары Вант-Гоффа:

$$\frac{d\ln K^0}{dT} = \frac{\Delta_r H^0}{RT^2}$$

Если  $\Delta_{r}H^{0}>0$ , то температурный коэффициент  $\frac{d\ln K^{0}}{dT}>0$ , то есть с повышением температуры константа равновесия увеличивается, а равновесие смещается вправо (в нашем случае  $\Delta_{r}H^{0}>0$ ).