

1. Общие положения и условие расчётно-графического задания

1.1. Общие методические указания

Целью предлагаемого расчётно-графического задания является приобретение навыков по расчёту основных термодинамических свойств системы, в которой протекает химическая реакция при различных температурах и неизменном внешнем давлении, т.е. при наиболее часто реализуемых на практике внешних условиях.

Выполняющий задание рассчитывает изменение теплоёмкости ΔC_p системы при протекании в ней химической реакции, тепловой эффект ΔH_T^0 , изменение энтропии ΔS_T^0 , стандартное химическое средство ΔG_T^0 или максимально полезную работу, которую может совершить система при взаимодействии веществ, находящихся в стандартных исходных состояниях, константу химического равновесия K^0 в широком диапазоне температур. Кроме этого, для одной из температур, требуется определить направление химического процесса при заданных исходных давлениях газов и соотношении веществ при установлении конечного равновесного состояния.

Для выполнения задания необходимо получить у преподавателя вариант расчётно-графической работы, тщательно ознакомиться с настоящими методическими указаниями, подобрать в справочной литературе необходимые исходные величины, произвести расчёты, построить необходимые графики, обработать их и полученные материалы представить в форме отчёта.

1.2. Содержание варианта расчётно-графического задания

Выдаваемый каждому студенту вариант содержит вещества, между которыми осуществляется химическое взаимодействие, записываемое как



где A_i – реагенты; ν_i – стехиометрические коэффициенты.

Реакции подобраны таким образом, чтобы исходных и конечных реагентов было не более двух. В задании приводятся значения трёх температур:

T_1 – верхняя температурная граница расчётов (нижняя граница 300 К);

T_2 – температура, при которой необходимо произвести графические определения; T_3 – температура, при которой определяется равновесный химический состав. Исходный состав газа и общее давление P приведены для температуры T_3 . В составе газа могут присутствовать вещества, не принимающие участие в реакции (1).

1.3. Условие расчётно-графического задания

1.3.1. Уравнения зависимостей

Для реакции (1) (используя табл. 7) составить уравнения зависимостей:

$$\Delta C_p = f(T); \Delta H_T^0 = f(T); \Delta S_T^0 = f(T); \Delta G_T^0 = f(T); \ln K^0 = f(T).$$

Произвести расчёты указанных величин в интервале температур от 300 К до T_1 . Результаты расчётов представить в форме таблицы. На основании полученных данных построить графики зависимостей:

$$\Delta C_p = f(T); \Delta H_T^0 = f(T); \Delta S_T^0 = f(T); \Delta G_T^0 = f(T); \ln K^0 = f\left(\frac{1}{T}\right).$$