

問題 6. 化学反応はどちらの方向に進むのか？

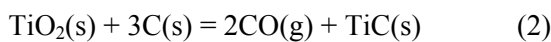
一定の温度、圧力において、どんな化学反応でもそれがあがる方向へ自然に進む傾向を決めるのは、反応のギブズエネルギー(ΔG)の符号である。これは普遍的原理である。もし、 $\Delta G < 0$ であるならば、反応は優勢的に正方向(すなわち生成物を好む反応)に進む。また $\Delta G > 0$ であるならば、反応は優勢的に逆方向(すなわち反応物を好む反応)に進む。 $\Delta G = 0$ の場合、その反応は平衡に達している。

標準反応ギブズエネルギー(ΔG°)は、以下の表に示した反応物と生成物の生成のギブズエネルギーから計算する事ができる(表参照)。

1. 反応(1)の 1627 °C における平衡定数を計算せよ。また、 O_2 の初期分圧が 1.00 Torr 以下の場合、反応(1)は優勢的に右方向へ進むことができるか？

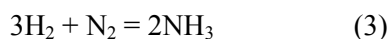


2. 反応(2)の 727 °C における標準ギブズエネルギーは正である。



727 °C における CO の平衡圧力を計算せよ。この反応が起こりうる場合、この温度において反応(2)が優勢的に右へ進む反応条件とは一体何か？

3. 反応(3)の 300 K における標準ギブズエネルギーを計算せよ。



また、 $p(NH_3) = 1.0 \text{ atm}$, $p(H_2) = 0.50 \text{ atm}$, $p(N_2) = 3.0 \text{ atm}$ の条件下で、反応(3)は優勢的に右へ進むことができるのか？

実際には、300 K においてこの反応は顕著な速度では起こらない。それはなぜか？

表 1 生成のギブズエネルギーの値

Substance	$t, ^\circ C$	$\Delta_f G^\circ, \text{kJ/mol}$
NiO	1627	-72.1
TiO ₂	727	-757.8
TiC	727	-162.6
CO	727	-200.2
NH ₃	27	-16.26

*標準圧力 = 1 atm、JANAF テーブル