

よくある疑問に「標準生成ギブスエネルギーの定義は何ですか?」、
 熱力学の演習に『□□の活量を求めよ。ただし $\Delta_f^\circ G(\text{CO}, 1273\text{K}) = -224.163 \text{ kJ/mol}$,
 $\Delta_f^\circ G(\text{CO}_2, 1273\text{K}) = -396.156 \text{ kJ/mol}$ とする。』と記載されている場合、「この $\Delta_f^\circ G$ 値
 を CaTCalc ソフトウェアで確認できるのか?」、
 「熱化学データ集や便覧等に記載されている値を CaTCalc ソフトウェアで確認できる
 のか?」などが挙げられる。本書でこれらの疑問を解決していこう。

圧力 1 bar の状態の元素物質から化合物 1 モルが生成するギブスエネルギー変化を
 標準生成ギブスエネルギーという。たとえば分子式 A_nB_m で表される化合物の標準
 生成ギブスエネルギー $\Delta_f^\circ G$ は

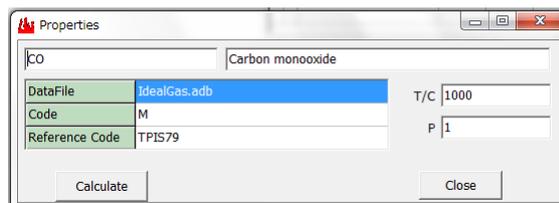


より

$$\Delta_f^\circ G(A_nB_m) = G(A_nB_m) - nG(A) - mG(B)$$

である。ここで下付 f は formation の f で、上付 0 は標準状態を意味する。

CaTCalc を起動し、元素 C と 元素 O を選択し、IdealGas ファイルを Load する。
 ガス種 CO をダブルクリックすると、
 Properties 画面が表示される。
 温度 1000°Cを入力し、Calculate
 ボタンをクリックする。



| List Viewer | | | | | | | | | |
|-------------|--------------|------------|------------|------------|-----------|-------------|---------|--------------|--|
| CO | IdealGas.adb | | | | | | | | |
| T (C) | P (bar) | G (kJ/mol) | H (kJ/mol) | S (J/molK) | V (L/mol) | Cp (J/molK) | K (/Pa) | VTE (/K) | |
| 1000 | 1 | -388.6077 | -79.59703 | 242.7135 | 105.8562 | 34.4685 | -100000 | 0.0007854534 | |

| List Viewer | | | | | | | | | |
|-------------|--------------|------------|------------|------------|-----------|-------------|---------|-------------|--|
| CO | IdealGas.adb | | | | | | | | |
| T (C) | P (bar) | G (kJ/mol) | H (kJ/mol) | S (J/molK) | V (L/mol) | Cp (J/molK) | K (/Pa) | VTE (/K) | |
| 25 | 1 | -169.4677 | -110.5347 | 197.6624 | 24.78971 | 29.14633 | -100000 | 0.003354016 | |

25°Cの値も求める。同様にガス種 C (gas) , O₂ , CO₂ についてそれぞれ求める。計算
 結果を次の表にまとめた。

表1 CaTCalc から得られるエネルギー値

| ガス種 | J/mol | | | J/mol | |
|-----------------|---------|---------|--|---------|-----------|
| | H298 | S298 | | G(25°C) | G(1000°C) |
| O ₂ | 0.06 | 205.150 | | -61165 | -288626 |
| C (gas) | 716680 | 158.100 | | +669542 | +497225 |
| CO | -110535 | 197.662 | | -169468 | -388608 |
| CO ₂ | -393510 | 213.787 | | -457251 | -704861 |

| 固相 | H298 | S298 | | G(25°C) | G(1000°C) |
|---------|------|-------|--|---------|-----------|
| C (sol) | 0.00 | 5.734 | | -1709 | -20096 |

上記の表を利用し

$C(sol) + 0.5(O_2) = CO$ と考え、1000°Cにおける標準生成ギブスエネルギーは
 $\Delta_f^0G(CO) = -388608 - 1*(-20096) - 0.5*(-288626) = -224199$

を得る。

$C(sol) + O_2 = CO_2$ と考え、1000°Cにおける標準生成ギブスエネルギー値は
 $\Delta_f^0G(CO_2) = -704861 - 1*(-20096) - 1*(-288626) = -396139$

を得る。

なお、CO₂ の 25°Cにおける標準生成ギブスエネルギー値は

$\Delta_f^0G(CO_2) = -457251 - 1*(-1709) - 1*(-61165) = -394377$

となり、1000°Cの値から大きく変化しない。このためエリンガム図においては

$C + O_2 = CO_2$ の線は水平に見える。

反応式を $2(CO) + O_2 = 2(CO_2)$ とした場合は値が変化し、エリンガム図において線は右肩上がりとなる。

CaTCalc ソフトウェアは標準生成ギブスエネルギー値を直接に表示することは出来ない。しかし上記のような変換をすることにより、任意の温度における標準生成ギブスエネルギー値を簡単に求めることができる。