

= 0. Отсюда ясно, что чем больше абсолютное значение ΔG со знаком плюс, тем менее осуществима, с термодинамической точки зрения, данная реакция.

Итак, знак при ΔG указывает на термодинамическую вероятность прямой реакции. Чем больше абсолютное значение отрицательной величины ΔG , тем глубже может идти реакция и тем больше будут равновесные концентрации продуктов реакции.

По величине ΔG может быть рассчитана константа равновесия K_p согласно уравнению:

$$-\Delta G = RT \ln K_p \text{ или } \lg K_p = -\Delta G/19,13 T,$$

где R – газовая постоянная, равная 8,317 Дж/моль.

Так как константа равновесия представляет собой отношение произведения концентраций (или парциальных давлений для газовых смесей) конечных веществ к произведению концентраций начальных веществ, то, зная K_p , чисто алгебраическим путем можно подсчитать и достижимые выходы продуктов реакции.

Для подсчета ΔG пользуются табличными данными по изменению энергии Гиббса образования начальных и конечных продуктов реакции из элементов (ΔG^0) с учетом стехиометрических коэффициентов уравнения реакции.

Символом ΔG^0 (ΔG^0_{298}) обозначается изменение энергии Гиббса (в кДж/моль) для стандартных условий ($T=298,17$ К, парциальное давление вещества 101325 Па).

Величины ΔG и K_p в сильной степени зависят от температуры. Для температур примерно до 1000 °С эта зависимость приближенно имеет линейный характер:

$$\Delta G_T = A + BT.$$

В таблицах термодинамических величин приводятся данные для углеводородов и других веществ по ΔG^0 при различных температурах (табл.1).

Зная ΔG^0 при двух температурах, можно для любых исследуемых реакций углеводородов нефти (для которых имеются табличные данные по ΔG^0) составить два уравнения и, решив систему, найти коэффициенты A и B в общем уравнении зависимости ΔG исследуемой реакции от температуры. Дальнейшее исследование этого уравнения позволит сделать выводы о влиянии температуры на состояние равновесия и на термодинамическую вероятность реакции.

Например, для реакции распада гептана на бутулен и пропан