

сайын, солғұрлым бұл реакцияның термодинамикалық тұрғыдан жүру мүмкіншілігі аз болады.

Сонымен, ΔG белгісі тіке реакцияның термодинамикалық ықтималдығын көрсетеді. ΔG кері шамасының абсолюттік мәні неғұрлым көп болса, солғұрлым реакция тереңірек жүруі мүмкін және солғұрлым реакция өнімдерінің тепе-теңдік концентрациялары көп болады.

ΔG шамасы бойынша тепе-теңдік тұрақтысы K_{T-T} мына теңдеуге сәйкес есептелінуі мүмкін:

$$-\Delta G = RT \ln K_{T-T} \quad \text{немесе} \quad \lg K_{T-T} = -\Delta G/19,13 T,$$

мұндағы R – газ тұрақтысы, 8,317 Дж/мольге тең.

Тепе-теңдік тұрақтысы дегеніміз - соңғы заттар концентрацияларының көбейтіндісінің (немесе газды қоспалар үшін парциальдық қысымдарының) бастапқы заттар концентрацияларының көбейтіндісіне қатынасы. K_{T-T} біле отырып, таза алгебралық жолмен жете алатын реакция өнімдерінің шығымын есептеуге болады.

ΔG есептеу үшін реакция теңдеуінің стехиометриялық коэффициенттерін ескере отырып, элементтерден реакцияның бастапқы және соңғы өнімдерінің түзілуінің Гиббс энергияларының өзгерістері (ΔG^0) бойынша кесте мәліметтерін пайдаланады.

ΔG^0 (ΔG^0_{298}) символдарымен стандартты жағдайлар үшін ($T=298,17$ К, заттың парциальдық қысымы - 101325 Па) Гиббс энергиясының өзгерісі (кДж/мольмен) белгіленеді.

ΔG және K_{T-T} шамалары температураға тәуелді болады. Шамамен 1000⁰С дейінгі температуралар үшін бұл тәуелділік сызықтық сипатқа жуық болады:

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

Термодинамикалық шамалар кестелерінде көмірсутектер және басқа заттар үшін түрлі температуралар кезіндегі ΔG^0 бойынша мәліметтер берілген (2-кесте).

Екі температура кезіндегі ΔG^0 біле отырып, кез келген зерттелетін мұнай көмірсутектерінің реакциялары үшін (ΔG^0 бойынша кестелік мәліметтері бар) екі теңдеу құруға болады, жүйені шеше отырып, зерттелетін реакция ΔG температураға тәуелділігі жалпы теңдеудегі A және B коэффициенттерін табады. Бұл теңдеуді ары қарай зерттеу температураның тепе-теңдік күйге және реакцияның