

тактирования исходных реагентов, об оптимальных параметрах процесса (температура, продолжительность, давление) и т.д.

Условия реакции могут решительным образом повлиять на ход реакции, механизм протекания процесса.

Так, в зависимости от условий реакции метан может образовывать, например, свободные метильные радикалы:



свободные метиленовые и метинные радикалы:



или гидридные ионы:



Эти частицы могут участвовать во многих последующих реакциях с образованием разных продуктов.

При оценке возможности осуществления нефтехимического процесса важны его термодинамические данные. Основным критерием при такой оценке является изменение свободной энергии (изобарного потенциала) ΔG или стандартной свободной энергии $\Delta G^\circ_{298 \text{ K}}$ (ΔG°).

Для оценки возможного осуществления какой-либо реакции с точки зрения термодинамики изучается зависимость изменения стандартной свободной энергии G° от температуры. На рис. 1 представлена зависимость ΔG° от температуры для эндотермической реакции метана с парами воды и для экзотермической реакции образования метана из углерода и водорода.

По характеристике $\Delta G^\circ = \varphi(T)$ можно определить температурную зависимость константы равновесия, так как

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K,$$

Это соотношение верно только в том случае, если концентрации (парциальные давления) компонентов в исходной смеси равны единице.