

РГЗ №1 «Термодинаміка хімічної реакції та хімічна рівновага»

Для реакції з таблиці 1 та заданих T і P , користуючись довідковими даними:

1. Знайти рівняння залежності теплового ефекту реакції при $P = \text{const}$ від температури та побудувати графік залежності $\Delta H = f(T)$ в інтервалі температур від $(T-200 \text{ К})$ до $(T+200 \text{ К})$ з кроком 100 К .

Обчислити значення теплового ефекту реакції при $V = \text{const}$ (ΔU) і температурі T . Зробити висновок про тепловий характер протікання реакції.

2. Знайти рівняння залежності ентропії реакції від температури та побудувати графік залежності $\Delta S = f(T)$ в інтервалі температур від $(T - 200 \text{ К})$ до $(T+200 \text{ К})$ з кроком 100 К .

Зробити висновок про напрямок мимовільного перебігу реакції в ізольованій системі.

3. Обчислити значення ΔG для п'яти температур в інтервалі температур від $(T - 200 \text{ К})$ до $(T+200 \text{ К})$ з кроком 100 К . Побудувати відповідний графік. Зробити висновок про напрямок мимовільного перебігу реакції в умовах P і $T = \text{const}$.

4. Обчислити значення $\ln K^0$ для п'яти температур в інтервалі температур від $(T-200\text{К})$ до $(T+200\text{К})$ з кроком 100 К . Побудувати графік $\ln K^0 = f(1/T)$.

Знайти середнє значення ΔH для цього температурного інтервалу та порівняти його з точним значенням ΔH , знайденим у п. 1.

5. Вважаючи, що реакція протікає без зміни теплоємності ($\Delta C_p = \text{const}$), обчислити наближене значення K^0 для температури T . Порівняти його з точним значенням K^0 , знайденим для цієї температури в п.4.

6. Використовуючи рівняння ізобари хімічної реакції Вант-Гоффа та рівняння Планка, визначити, як впливають температура та тиск на стан рівноваги хімічної реакції.

7. Припускаючи, що речовини вступають у реакцію в стехіометричних кількостях, розрахувати склад рівноважної суміші.

Приклад розв'язання РГЗ



$$T = 600 \text{ К}, P = 10^3 \text{ Па.}$$

Формула, що дозволяє розраховувати тепловий ефект реакції при будь-якій температурі:

$$\Delta H_{T_2}^0 = \Delta H_{T_1}^0 + \Delta a \cdot (T_2 - T_1) + \frac{\Delta b}{2} (T_2^2 - T_1^2) + \frac{\Delta c}{3} (T_2^3 - T_1^3) - \Delta c' \cdot \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

У якості $\Delta H_{T_1}^0$, доцільно вибирати ΔH_{298}^0 , тому що цю величину дуже легко розрахувати за допомогою таблиць термодинамічних величин, тоді отримаємо:

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 - \Delta a \cdot 298 - \frac{\Delta b}{2} 298^2 - \frac{\Delta c}{3} 298^3 + \frac{\Delta c'}{298} + \Delta a T + \frac{\Delta b}{2} T^2 + \frac{\Delta c}{3} T^3 - \frac{\Delta c'}{T}, \quad (1)$$

або

$$\Delta H_T^0 = B + \Delta a T + \frac{\Delta b}{2} T^2 + \frac{\Delta c}{3} T^3 - \frac{\Delta c'}{T}, \quad (2)$$

де B – так звана константа інтегрування:

$$B = \Delta H_{298}^0 - \Delta a \cdot 298 - \frac{\Delta b}{2} 298^2 - \frac{\Delta c}{3} 298^3 + \frac{\Delta c'}{298}, \quad (3)$$

Формула, що дозволяє розраховувати зміну ентропії при будь-якій температурі:

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \Delta a (\ln T - \ln 298) + \Delta b (T - 298) + \frac{\Delta c}{2} (T^2 - 298^2) - \frac{\Delta c'}{2} (T^{-2} - 298^{-2}), \quad (4)$$

або

$$\Delta S_T^0 = D + \Delta a \cdot \ln T + \Delta b \cdot T + \frac{\Delta c}{2} \cdot T^2 - \frac{\Delta c'}{2} \cdot T^{-2}, \quad (5)$$

де

$$D = \Delta S_{298}^0 - \Delta a \cdot \ln 298 - \Delta b \cdot 298 - \frac{\Delta c}{2} \cdot 298^2 + \frac{\Delta c'}{2} \cdot 298^{-2} \quad (6)$$

Звернемо увагу на те, що для розрахунків необхідні значення стандартних змін ентальпії (ΔH_{298}^0), ентропії (ΔS_{298}^0) та коефіцієнтів рівняння залежності $C_p = f(T)$ (Δa , Δb , Δc , $\Delta c'$). Ці параметри розраховуються за доволі стандартними рівняннями (різниці сум відповідних значень по продуктам реакції та по вихідним речовинам). Наприклад:

$$\Delta H_{298}^0 = \Delta_f H^0 (C_4H_8) + \Delta_f H^0 (H_2) - \Delta_f H^0 (C_4H_{10}) = -0,13 + 0 - (-126,15) = +126,02 \text{ кДж} = 126020 \text{ Дж}$$

Тому подібні розрахунки зручно виконувати безпосередньо у таблиці, до якої заносяться довідкові дані.

Таблиця для довідкових даних та попередніх розрахунків

Речовина	$\Delta_f H_{298}^0$ кДж/моль	S_{298}^0 Дж/моль·К	$C_{p,298}^0$ Дж/моль·К	Коефіцієнти рівняння $C_p = f(T)$				Інтервал темп.
				a	b·10 ³	c·10 ⁶	c'·10 ⁻⁵	
C₄H₈	-0,13	305,6	85,65	21,47	258,4	-80,84	0	298 - 1500
H₂	0	130,52	28,83	27,28	3,26	0	0,5	298 - 3000
Σ по прод	-0,13	436,12	114,48	48,75	261,66	-80,84	0,5	298 - 1500
C₄H₁₀	-126,15	310,12	97,45	18,23	303,56	-92,65	0	298 - 1500
Σ по вих	-126,15	310,12	97,45	18,23	303,56	-92,65	0	298 - 1500
Δ реакції	126,02	126,0	17,03	30,52	-41,9	11,81	0,5	298 - 1500

Відмітимо, що температура перебігу реакції (600К) та температурний інтервал для розрахунків (400К-800К) задовольняють температурному інтервалу, визначеному за допомогою таблиці (298К-1500К), а останній рядок таблиці містить усі необхідні дані для подальших розрахунків.

1. Знайти рівняння залежності теплового ефекту реакції при $P = const$ від температури та побудувати графік залежності $\Delta H = f(T)$ в інтервалі температур від $(T-200\text{ К})$ до $(T+200\text{ К})$ з кроком 100 К.

Розрахуємо константу інтегрування B на підставі даних, одержаних у таблиці:

$$B = 126020 + 30,52 \cdot 298 - 41,9 \cdot 10^{-3} \cdot 298^2 - 11,72 \cdot 10^{-6} + 0,5 \cdot 10^5 \cdot 1/298 = \\ = 126020 - 9094,96 + 1860,44 - 103,38 + 167,78 = 118849,88 \text{ Дж}$$

Тоді, згідно з (3), рівняння залежності теплового ефекту ΔH від температури набуває наступного вигляду:

$$\Delta H_T^0 = 118849,2 + 30,52T - 20,95 \cdot 10^{-3}T^2 + 3,94 \cdot 10^{-6}T^3 - 0,5 \cdot 10^5 T^{-1}.$$

Підстановка в це рівняння значень температур з заданого діапазону дає наступні значення:

$T, \text{ К}$	400	500	600	700	800
$\Delta H_T^0, \text{ кДж}$	127,83	129,26	130,39	131,23	131,81

По отриманим значенням ΔH_T^0 будемо графік залежності $\Delta H = f(T)$.

Обчислити значення теплового ефекту реакції при $V = const$ (ΔU) і температурі T . Зробити висновок про тепловий характер протікання реакції.

Тепловий ефект при $V = const$ визначається за формулою

$$\Delta U = \Delta H - \Delta \nu RT,$$

де $\Delta \nu$ - зміна кількості молів газів за рівнянням реакції. Для даної реакції $\Delta \nu = 1$, тоді

$$\Delta U = 130,39 - 8,31 \cdot 10^{-3} \cdot 600 = 125,4 \text{ кДж}$$

Теплові ефекти ΔH та ΔU додатні, отже реакція іде з поглинанням тепла як при $p = const$, так і при $V = const$.

2. Знайти рівняння залежності ентропії реакції від температури та побудувати графік залежності $\Delta S = f(T)$ в інтервалі температур від $(T - 200 \text{ K})$ до $(T + 200 \text{ K})$ з кроком 100 K .

Зробити висновок про напрямок мимовільного перебігу реакції в ізольованій системі.

Розрахуємо константу інтегрування D по рівнянню (6):

$$D = 126,0 - 30,52 \cdot \ln 298 - 41,9 \cdot 10^{-3} \cdot 298 - \frac{11,72}{2 \cdot 10^6} \cdot 298^2 + \frac{0,5 \cdot 10^5}{2 \cdot 298^2} = -35,63.$$

Тоді рівняння залежності ентропії реакції від температури має вигляд:

$$\Delta S_T^0 = -35,63 + 30,52 \ln T - 41,9 \cdot 10^{-3} T + 5,905 \cdot 10^{-6} T^2 - 0,25 \cdot 10^5 T^{-2}.$$

Підстановка в це рівняння значень температур з заданого діапазону дає наступні значення:

T, K	400	500	600	700	800
ΔS_T^0 , кДж	131,26	134,46	135,52	137,82	138,60

По отриманим значенням ΔS_T^0 будуюмо графік залежності $\Delta S = f(T)$.

Значення ΔS додатні у всьому температурному діапазоні, отже реакція у ізольованій системі можлива.

3. Обчислити значення ΔG для п'яти температур в інтервалі температур від $(T - 200 \text{ K})$ до $(T + 200 \text{ K})$ з кроком 100 K . Побудувати відповідний графік. Зробити висновок про напрямок мимовільного перебігу реакції в умовах P і $T = \text{const}$.

Значення ΔG можна розрахувати за рівнянням Гіббса-Гельмгольца:

$$\Delta G_T^0 = \Delta H_T^0 - T \Delta S_T^0$$

$$\Delta G_{400}^0 = 127,83 - 400 \cdot 131,26 \cdot 10^{-3} = 75,33 \text{ кДж}$$

$$\Delta G_{500}^0 = 129,26 - 500 \cdot 134,46 \cdot 10^{-3} = 62,03 \text{ кДж}$$

$$\Delta G_{600}^0 = 130,39 - 600 \cdot 135,52 \cdot 10^{-3} = 49,08 \text{ кДж}$$

$$\Delta G_{700}^0 = 131,23 - 700 \cdot 137,82 \cdot 10^{-3} = 33,76 \text{ кДж}$$

$$\Delta G_{800}^0 = 131,81 - 800 \cdot 138,6 \cdot 10^{-3} = 20,93 \text{ кДж}$$

По отриманим значенням будуюмо графік залежності $\Delta G = f(T)$.

Значення ΔG додатні у всьому температурному діапазоні, отже реакція в умовах p і $T = \text{const}$ піде у зворотному напрямку.

4. Обчислити значення $\ln K^0$ для п'яти температур в інтервалі температур від $(T - 200 \text{ K})$ до $(T + 200 \text{ K})$ з кроком 100 K . Побудувати графік $\ln K^0 = f(1/T)$.

Знайти середнє значення ΔH для цього температурного інтервалу та порівняти його з точним значенням ΔH , знайденим у п. 1.

Значення $\ln K^0$ отримуємо за допомогою формули $\ln K_T^0 = -\frac{\Delta G_T^0}{RT}$

$$T= 400\text{K} \quad \ln K_{400}^0 = -\frac{75,33}{8,31 \cdot 400 \cdot 10^{-3}} = -22,66$$

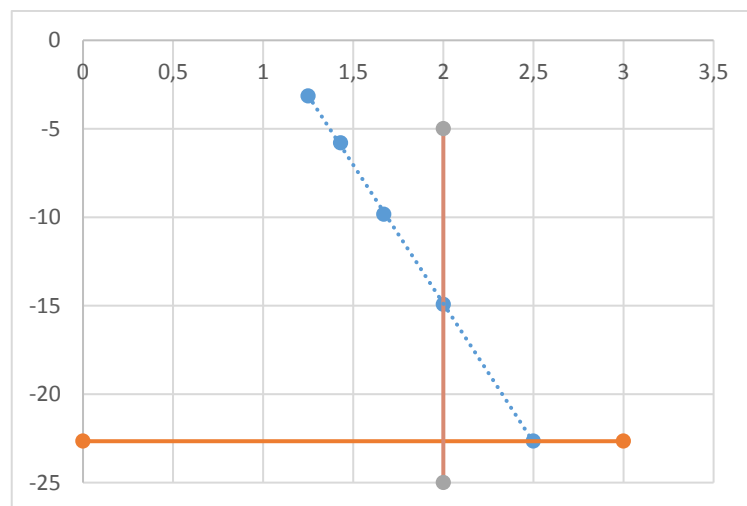
$$T= 500\text{K} \quad \ln K_{500}^0 = -\frac{62,03}{8,31 \cdot 500 \cdot 10^{-3}} = -14,93$$

$$T= 600\text{K} \quad \ln K_{600}^0 = -\frac{49,08}{8,31 \cdot 600 \cdot 10^{-3}} = -9,84 \quad K_{600}^0 = e^{-9,84} = 5,33 \cdot 10^{-5}$$

$$T= 700\text{K} \quad \ln K_{700}^0 = -\frac{33,76}{8,31 \cdot 700 \cdot 10^{-3}} = -5,8$$

$$T= 800\text{K} \quad \ln K_{800}^0 = -\frac{20,93}{8,31 \cdot 800 \cdot 10^{-3}} = -3,15$$

T, K	400	500	600	700	800
$1/T \cdot 10^3$	2,5	2,0	1,67	1,43	1,25
$\ln K$	-22,66	-14,93	-9,84	-5,8	-3,15



Графік залежності $\ln K^0 = f(1/T)$

Графік залежності $\ln K^0 = f(1/T)$ є прямою лінією, причому тангенс нахилу її до горизонтальної осі

$$\operatorname{tg} \alpha = -\frac{\Delta H}{R}, \text{ отже } \Delta H = -R \cdot \operatorname{tg} \alpha$$

$$\text{По графіку: } \operatorname{tg} \alpha = \frac{-22,66 - (-14,93)}{(2,5 - 2,0) \cdot 10^{-3}} = -15460$$

$$\Delta H = -8,31 \cdot 10^{-3} \cdot (-15460) = 128,47 \text{ кДж}$$

$$\text{Точне значення } \Delta H_{600}^0 = 130,39 \text{ кДж}$$

5. Вважаючи, що реакція протікає без зміни теплоємності ($\Delta C_p = \text{const}$), обчислити наближене значення K^0 для температури T . Порівняти його з точним значенням K^0 , знайденим для цієї температури в п.4.

Якщо вважати, що реакція йде без зміни теплоємності ($\Delta C_p = 0$), то

$$\begin{aligned}\Delta H_T^0 &= \Delta H_{298}^0 + \Delta C_p (T - 298); \\ \Delta H_{600}^0 &= 126,02 + 17,03 \cdot 10^{-3} (600 - 298) = 131,16 \text{ кДж} \\ \Delta S_T^0 &= \Delta S_{298}^0 + \Delta C_p \ln \frac{T}{298} \\ \Delta S_{600}^0 &= 126 + 17,03 \cdot \ln \frac{600}{298} = 137,92 \text{ Дж/К}\end{aligned}$$

Тоді

$$\begin{aligned}\Delta G_{600}^0 &= 131,16 - 600 \cdot 137,92 \cdot 10^{-3} = 48,41 \text{ кДж}; \\ \ln K_{600}^0 &= -\frac{48,41}{8,31 \cdot 10^{-3} \cdot 600} = -9,71 \quad K_{600}^0 = e^{-9,71} = 6,07 \cdot 10^{-5}\end{aligned}$$

При точному розрахунку $K_{600}^0 = e^{-9,84} = 5,33 \cdot 10^{-5}$

6. Використовуючи рівняння ізобари хімічної реакції Вант-Гоффа та рівняння Планка, визначити, як впливають температура та тиск на стан рівноваги хімічної реакції.

Вплив температури на рівновагу реакції визначається рівнянням ізобари Вант-Гоффа:

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H}{RT^2}$$

Так як $\Delta H_T^0 > 0$, то функція $\ln K = f(T)$ зростає, тобто константа рівноваги зростає зі збільшенням температури. Це значить, що при підвищенні температури рівновага буде зсуватися у бік продуктів.

Вплив тиску на рівновагу реакції визначається рівнянням Планка:

$$\frac{d \ln K_N}{dp} = -\frac{\Delta n}{p}$$

Так як реакція йде зі збільшенням об'єму ($\Delta n = 1$), то функція $\ln K_N = f(p)$ зменшується з ростом тиску. Це значить, що при підвищенні тиску рівновага реакції буде зсуватись бік вихідних речовин.

7. Припускаючи, що речовини вступають у реакцію в стехіометричних кількостях, розрахувати склад рівноважної суміші.

Виразимо склад рівноважної газової суміші для заданої реакції через рівноважну кількість бутену, яку позначимо через x .



до реакції: 1 – –
 під час рівноваги: 1–x x x

Знайдемо сумарну кількість газоподібних речовин в рівноважній суміші:

$$\Sigma n = 1 - x + x + x = 1 + x.$$

Застосуємо закон Дальтона і виразимо парціальні тиски газоподібних учасників реакції, враховуючи, що тиск в системі дорівнює P .

Закон Дальтона: парціальний тиск газу в газовій суміші дорівнює добутку

його мольної частки на загальний тиск $P_i = \frac{n_i}{\Sigma n_i} \cdot P$.

$$P_{\text{C}_4\text{H}_8} = \frac{x}{1+x} \cdot P, \quad P_{\text{H}_2} = \frac{x}{1+x} \cdot P, \quad P_{\text{C}_4\text{H}_{10}} = \frac{1-x}{1+x} \cdot P.$$

Напишемо вираз константи швидкості, яку надамо через рівноважні тиски газоподібних речовин K_p :

$$K_p = \frac{P_{\text{C}_4\text{H}_8} \cdot P_{\text{H}_2}}{P_{\text{C}_4\text{H}_{10}}},$$

Підставимо вирази для парціальних тисків газів у рівняння для константи рівноваги і спростимо:

$$K_p = \frac{x \cdot x \cdot (1+x) \cdot P^2}{(1+x) \cdot (1+x) \cdot (1-x) \cdot P} = \frac{x^2 \cdot P}{(1-x^2)}.$$

Розрахуємо константу рівноваги K_p :

$$K_p = K^0 \cdot (p^0)^{\Delta n}$$

$$K_p = 5,33 \cdot 10^{-5} \cdot (1,013 \cdot 10^5)^1 = 5,4 \text{ Па}$$

Підставимо в отриманий вираз задані в умові завдання величини K_p , $P = 10^3 \text{ Па}$ і знайдемо рівноважну кількість C_4H_8 :

$$\frac{x^2 \cdot 10^3}{(1-x^2)} = 5,4.$$

Розв'яжемо рівняння і знайдемо x .

$$x^2 \cdot 10^3 = 5,4 \cdot (1-x^2); \quad x^2 \cdot 10^3 + 5,4 \cdot x^2 = 5,4; \quad 1005,4 \cdot x^2 = 5,4;$$

$$x^2 = \frac{5,4}{1005,4} = 5,37 \cdot 10^{-3}; \quad x = 0,073 \text{ моль.}$$

Таким чином, склад рівноважної газової суміші буде наступним:

$\text{C}_4\text{H}_{10} = \text{C}_4\text{H}_8 + \text{H}_2$
 під час рівноваги: 1–x x x
 0,927 моль 0,073 моль 0,073 моль

Розрахуємо вихід бутену (C_4H_8): $[\text{C}_4\text{H}_8] = \frac{x}{\Sigma x} \cdot 100\% = \frac{0,073}{1+0,073} \cdot 100\% = 6,8\%$.

ПЕРЕЛІК РЕАКЦІЙ

№	Реакція	№	Реакція
1	$2\text{H}_2\text{O}(\text{r.}) = 2\text{H}_2 + \text{O}_2$	26	$\text{C}_2\text{H}_6(\text{r.}) + \text{CO} = \text{CH}_3\text{COCH}_3(\text{r.})$
2	$2\text{NH}_3 = \text{N}_2 + 3\text{H}_2$	27	$2\text{HI} = \text{H}_2 + \text{I}_2(\text{r.})$
3	$\text{COCl}_2(\text{r.}) = \text{CO} + \text{Cl}_2$	28	$\text{HI} + \text{CH}_3\text{I} = \text{CH}_4 + \text{I}_2(\text{u})$
4	$\text{SO}_2 + \text{Cl}_2 = \text{SO}_2\text{Cl}_2(\text{r.})$	29	$\text{CH}_3\text{OH}(\text{r.}) = 2\text{H}_2 + \text{CO}$
5	$\text{CO} + 3\text{H}_2 = \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}(\text{r.})$	30	$\text{N}_2\text{O}_4 = 2\text{NO}_2$
6	$2\text{H}_2\text{S} = 2\text{H}_2 + \text{S}_2(\text{r.})$	31	$\text{N}_2\text{O}_4 = 2\text{NO} + \text{O}_2$
7	$\text{C}_2\text{H}_4 = \text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_2$	32	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 = \text{H}_2\text{O}(\text{r.}) + \text{CO}$
8	$\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_4$	33	$\text{CH}_3\text{COH}(\text{r.}) + \text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{r.})$
9	$\text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	34	$2\text{C}(\text{rp.}) + 2\text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_4$
10	$\text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_2 + 2\text{H}_2$	35	$2\text{NO}_2 = 2\text{NO} + \text{O}_2$
11	$2\text{CO} = 2\text{C}(\text{rp.}) + \text{O}_2$	36	$\text{NO} + 0,5\text{O}_2 = \text{NO}_2$
12	$2\text{C}(\text{rp.}) + \text{O}_2 = 2\text{CO}$	37	$2\text{SO}_3 = 2\text{SO}_2 + \text{O}_2$
13	$2\text{C}(\text{rp.}) + \text{O}_2 = 2\text{CO}$	38	$2\text{SO}_3 = 2\text{SO}_2 + \text{O}_2$
14	$2\text{CO}_2 = 2\text{CO} + \text{O}_2$	39	$\text{CS}_2(\text{r.}) = \text{C}(\text{rp.}) + \text{S}_2(\text{r.})$
15	$\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 = \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl}$	40	$\text{C}(\text{rp.}) + \text{S}_2(\text{r.}) = \text{CS}_2(\text{r.})$
16	$2\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{r.}) = (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}(\text{r.}) + \text{H}_2\text{O}$	41	$\text{CH}_4 = \text{C}(\text{граф.}) + 2\text{H}_2$
17	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}(\text{r.}) = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O}(\text{r.})$	42	$\text{C}(\text{граф.}) + 2\text{H}_2 = \text{CH}_4$
18	$\text{PCl}_5(\text{r.}) = \text{Cl}_2(\text{r.}) + \text{PCl}_3(\text{r.})$	43	$2\text{N}_2 + 6\text{H}_2\text{O} = 4\text{NH}_3 + 3\text{O}_2$
19	$\text{PCl}_3(\text{r.}) + \text{Cl}_2(\text{r.}) = \text{PCl}_5(\text{r.})$	44	$\text{CaO} + \text{CO}_2 = \text{CaCO}_3$
20	$\text{CH}_4 + \text{CO}_2 = \text{CH}_3\text{COOH}(\text{r.})$	45	$\text{MgO} + \text{CO}_2 = \text{MgCO}_3$
21	$\text{HCOOH}(\text{r.}) = \text{CO}_2 + \text{H}_2$	46	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 = \text{HCOOH}(\text{r.})$
22	$\text{HCOOH}(\text{r.}) = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}(\text{r.})$	47	$\text{Fe} - \alpha + \text{H}_2\text{O}(\text{r.}) = \text{FeO} + \text{H}_2$
23	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O}(\text{r.}) = \text{HCOOH}(\text{r.})$	48	$4\text{NO} + 6\text{H}_2\text{O} = 4\text{NH}_3 + 5\text{O}_2$
24	$2\text{C}(\text{граф.}) + \text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_2$	49	$4\text{HCl} + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}(\text{u}) + \text{Cl}_2$
25	$\text{C}_2\text{H}_6(\text{r.}) + \text{CO} = \text{CH}_3\text{COCH}_3(\text{r.})$		

Термодинамічні величини простих речовин та хімічних сполук

Речовина	ΔH_0 , кДж/моль	ΔS_0 , Дж/моль·К	C_p , Дж/моль·К	Коефіцієнти рівняння $C_p = a + bT + cT^2 + C'T^{-2}$, Дж/(кмоль·К)			
				a	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^6$	$c' \cdot 10^{-5}$
C (графіт)	0	5,74	8,54	16,86	4,77		- 8,54
Cl ₂ (г)	0	222,98	33,93	37,03	0,67		-2,85
H ₂ (г)	0	130,52	28,83	27,28	3,26		0,5
I ₂ (г)	62,43	260,6	36,9	37,40	0,59		-0,71
N ₂	0	191,5	29,12	27,88	4,27		-
O ₂ (г)	0	205,04	29,37	31,46	3,39		-3,77
α Fe	0	27,15	24,98	17,24	24,77		0
FeO	-264,85	60,75	49,92	50,8	8,61		-3,31
S ₂ (г)	128,37	228,03	32,51	36,11	1,09		-3,51
CO(г)	-110,53	197,55	29,14	28,41	4,10		-0,46
CO ₂ (г)	-393,51	213,66	37,11	44,14	9,04		-8,54
COCl ₂ (г)	-219,5	283,64	57,76	67,15	12,03		-9,04
CS ₂ (г)	116,7	237,77	45,48	52,09	6,69		-7,53
CaCO ₃ (кр)	-1206,8	91,71	83,47	104,52	21,92		-25,94
CaO (кр)	-635,09	38,07	42,05	49,62	4,52		-6,95
HCl (г)	92,31	186,79	29,14	26,53	4,60		1,09
HI (г)	26,36	206,48	29,16	26,32	5,94		0,92
H ₂ O(г)	-241,81	188,72	33,61	30,00	10,71		0,33
H ₂ S (г)	-20,15	205,64	33,93	29,37	15,40		-
MgCO ₃ (кр)	-1095,85	65,1	76,11	77,91	57,74		-17,41
MgO (кр)	-601,49	27,07	37,2	48,98	3,14		-11,44
NH ₃	-45,94	192,66	35,16	29,8	25,48		-1,67
NO (г)	90,37	210,62	29,83	29,58	3,85		-0,59
NO ₂ (г)	34,19	240,06	36,66	41,16	11,33		-7,02
N ₂ O ₄ (г)	11,11	304,35	79,16	83,89	39,75		-14,9
PCl ₃ (г)	-287,02	311,71	71,84	80,11	3,1		-7,99
PCl ₅ (г)	-374,89	364,47	112,97	129,49	2,93		-16,4
SO ₂ (г)	-296,9	248,07	39,87	46,19	7,87		-7,7
SO ₂ Cl ₂ (г)	-363,17	311,29	77,4	87,91	16,15		-14,23
SO ₃ (г)	-395,85	256,69	50,09	64,98	11,75		-16,37
CH ₄ (г)	-74,85	186,27	35,71	14,32	74,66	-17,43	
C ₂ H ₂ (г)	226,75	200,82	43,93	26,44	66,65	-26,48	
C ₂ H ₄ (г)	52,3	219,45	43,56	11,32	122,01	-37,9	
C ₂ H ₆ (г)	-84,67	229,49	52,64	5,75	175,11	-57,85	
HCOOH (г)	-378,8	248,77	45,8	19,4	112,8	-47,5	
CH ₃ I (г)	13,97	254,01	44,14	19,67	92,67	-32,28	
CH ₃ OH (г)	- 201,0	239,76	44,13	15,28	105,2	-31,04	
CH ₃ COH (г)	- 166,0	264,2	54,64	13,0	153,5	- 53,7	
CH ₃ COOH (г)	-434,84	282,5	14,82	196,7	-77,7		
C ₂ H ₅ OH (г)	-234,8	281,38	65,75	10,99	204,7	-74,2	
CH ₃ COCH ₃ (г)	-217,57	294,93	74,9	22,47	201,8	-63,5	
CH ₃ Cl	-86,31	234,47	40,75	15,57	92,74	-28,31	
(C ₂ H ₅) ₂ O (г)	-252,21	342,67	112,51	21,09	341,7	-117,9	

Довідник:

http://web.kpi.kharkov.ua/fchem/wp-content/uploads/sites/30/2022/10/Therm_Tabl_U.pdf