この反応において、$\Delta H^\circ_{298} = -241.826\ [\mathrm{kJ\,mol^{-1}}]$ より、$\Delta H = -241826\ [\mathrm{J}]$
したがって、

$$\Delta U = \Delta H + (\Delta n)RT$$
$$= -241826 + \frac{1}{2} \times 8.314 \times 298 = \underline{-240587\ [\mathrm{J}]}$$

☆ 反応熱の問題

温度T_1における反応熱が温度T_2の生成物を与える反応。

$$\begin{array}{lccc} T_2 & \text{反応物} & \xrightarrow{\Delta H_{T_2}} & \boxed{\text{生成物}} \\ & \uparrow \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p^R dT & & \uparrow \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p^P dT \\ T_1 & \boxed{\text{反応物}} & \xrightarrow[\Delta H_{T_1}]{} & \text{生成物} \end{array}$$

☆ どのような経路をとっても、熱力学第1法則より出入りする熱は等しい。

(ΔC_p^R = 反応物に現れるすべての反応物の熱容量の和
ΔC_p^P = 〃 生成物 〃)

☆より

$$\Delta H_{T_1} + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p^P dT = \Delta H_{T_2} + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p^R dT$$

よって、

$$d(\Delta H) = \Delta C_p dT$$ (キルヒホッフの法則) ← 11Mの3参照

〈エントロピー〉

$$dS = \frac{d'Q}{T}$$ (孤立系ではエントロピーが増大する方向に変化が起こる)

〈自由エネルギー〉

ヘルムホルツの自由エネルギー A　$A = U - TS$ (TSを束縛エネルギーという)

- 体積・温度が一定のとき、Aが極小($dA=0$)のとき平衡に達する。
- $-dA \geqq -d'W$ が成り立つことから(詳しくはP187・188参照)
  ヘルムホルツの自由エネルギーの減少量は系の行う最大仕事を表す。

ギブスの自由エネルギー G　$G = U - TS + PV = A + PV$

- 温度・圧力が一定のとき、Gが極小のとき平衡に達する。
- $dG = \underbrace{d'W_{net}}_{\text{正味仕事}}$ より、(詳しくはP189・190参照)
  ギブスの自由エネルギーの減少量は系が行う正味仕事を表す。
  ※ 正味仕事: 系が行うすべての仕事から系自身の膨張収縮を伴う仕事を差し引いたもの。