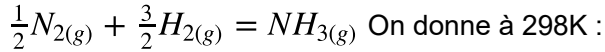


Enthalpie standard de réaction et rendement d'une réaction

On considère la réaction suivante :



$$\Delta_f H^0(NH_3(g)) = -46,1 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}; S_{m0}(NH_3(g)) = 192,3 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}; S_m^0(N_{2(g)}) = 191,5 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

1) Calculer la valeur de de l'enthalpie libre standard $\Delta_r G^0(T)$ de cette réaction à 298K.

2) En déduire la valeur de la constante d'équilibre à cette température.

3) Sous une pression constante de 1,00bar et à 298K, On part d'une mole de diazote, 1 mol de de dihydrogène et 2 moles d'ammoniac. Calculer Q et en déduire le sens d'évolution du système.

4) Sous une pression constante de 1,00bar, on part d'une mole de diazote, 1 mol de de dihydrogène et 0 mole d'ammoniac.

a) Donner l'expression permettant de calculer l'avancement de la réaction pour toute température et

b) Proposer un programme itératif basée sur une résolution dichotomique permettant de calculer l'avancement au millième

c) Proposer un programme récursif basée sur une résolution dichotomique permettant de calculer l'avancement au millième

d) Obtenir l'évolution du rendement en fonction de T pour $T \in [200, 800] \text{ K}$.

e) Le résultat obtenu à la question précédente est-il cohérent avec la loi de Van't Hoff ?

Les grandeurs standard de réaction sont définies par :

$$\Delta_r G^0(T) = \Delta_r H^0(T) - T \Delta_r S^0(T) \quad \Delta_r H^0(T) = \Delta_r H^0(298) + \int_{298}^T \Delta_r C_p^0(T) dT \quad \Delta_r S^0(T) = \Delta_r S^0(298) + \int_{298}^T \frac{\Delta_r C_p^0(T)}{T} dT$$

Donc avec: $G = H - TS$ On a :

$$\Delta_r H^0(298) = -46,1 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \quad \Delta_r S^0(298) = -99,35 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1} \quad \Delta_r G^0(298) = \Delta_r H^0(298) - 298 \Delta_r S^0(298)$$

On sait que $\Delta_r G^0(T) = -RT \ln K^0(T)$ Donc : $K^0(298) = \exp \left(-\frac{\Delta_r G^0(298)}{RT} \right) = 778,4$ Ce qui correspond à une réaction favorisée dans le sens direct On calcule le quotient de réaction :

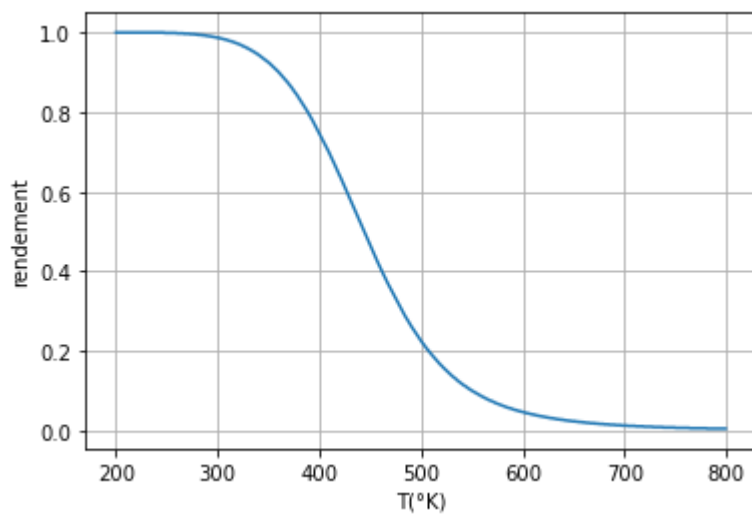
$$Q = \left(\frac{a_{NH_3(g)}}{a_{H_2(g)}^{\frac{1}{2}} a_{N_2(g)}^{\frac{3}{2}}} \right) = \left(\frac{n_{NH_3(g)} n_t P_0}{n_{H_2(g)}^{\frac{1}{2}} n_{N_2(g)}^{\frac{3}{2}} P_t} \right) Q = 8 < K^0 \rightarrow \text{sens 1} \quad K^0(T) = \left(\frac{x(2-x)}{(1-\frac{1}{2}x)^{1/2} (1-\frac{3}{2}x)^{3/2}} \right)$$

In [8]:

```

1  import numpy as np
2  import matplotlib.pyplot as plt
3  import scipy.optimize as sc
4  R=8.314
5  def f(x,T):
6      K1=(x*(2-x))/((1-x/2)**0.5*(1-1.5*x)**1.5)
7      delta_H=-46.1*10**3
8      delta_S=-99.35
9      R=8.314
10     delta_G=delta_H-T*delta_S
11     K2=np.exp(-delta_G/(R*T))
12     return K1-K2
13 def dichot(f,a,b,T):#argument T facultatif
14     x_d=a
15     x_f=b
16     while abs(x_f-x_d)>0.001:
17         x_m=(x_d+x_f)/2
18         if f(x_m,T)*f(x_d,T)>=0:
19             x_d=x_m
20         else :
21             x_f=x_m
22     return x_m
23
24 def dichot2(f,a,b,T):#argument T facultatif
25     if abs(a-b)<=0.001:
26         return (a+b)/2
27     else :
28         x_m=(a+b)/2
29         if f(a,T)*f(x_m,T)>=0:
30             return dichot2(f,x_m,b,T)
31         else :
32             return dichot2(f,a,x_m,T)
33 liste_r=[]#liste des rendements avec un avancement max de 2/3
34 liste_T=[i for i in range(200,800,1)]
35 for T in liste_T:
36     liste_r.append(dichot2(f,0,2/3,T)/(2/3))
37 plt.plot(liste_T,liste_r,label="rendement en fonction de T")
38 plt.xlabel("T(°K)")
39 plt.ylabel("rendement")
40 plt.grid()
41 plt.show()
42

```



On retrouve un rendement plus faible avec T ce qui est en accord avec la loi de Van't Hoff car la réaction est exothermique

In []:

1