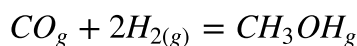


Prévisions de l'état final d'une réaction chimique

On considère la réaction de synthèse du méthanol :



A 573K, la constante d'équilibre de cette réaction est $K^0(573K) = 2,5 \times 10^{-3}$.

On définit le rendement ρ de la réaction par $\rho = \frac{\xi_{final}}{\xi_{max}}$ où ξ désigne l'avancement

$\Delta_f H^0_{CH_3OH(g)}$	$\Delta_f H^0_{CO(g)}$
$-201,5 kJ/mol$	$-110,6 kJ/mol$

1) Calculer l'enthalpie standard de réaction $\Delta_r H^0$ de cette synthèse. Commenter l'effet de la seule variation de la température T à partir d'un système initialement l'équilibre.

2) Ecrire une fonction sous python permettant de calculer la constante d'équilibre pour n'importe quelle température.

In [11]:

```
1 import numpy as np
2 def Keq(T):
3     delta_H = -90.6 * 10**3
4     K1 = 2.5 * 10**-3
5     T1 = 573
6     R = 8.314
7     K2 = K1 * np.exp(delta_H / R * (1/T1 - 1/T))
8     return K2
```

3) Tester votre fonction pour $T = 633K$.

3) Exprimer le quotient réactionnel et prédire l'effet d'une augmentation de la pression

4) On se place des proportions stœchiométriques en réactifs (pas de produit), exprimer la constante d'équilibre en fonction de ρ , P_t et P_0 ?

On donne la fonction suivante :

In [8]:

```
1 P0=1
2 def f(r, Pt, K): #dans les condition stochio
3     return K - (r * (1 - 2/3 * r) / (1 - r)**3) * (P0 / Pt)**2
```

4) Implémenter une méthode dichotomique, permettant de calculer le rendement pour n'importe quelle valeur de pression P_t et n'importe quelle valeur de K . Tester votre code pour $P_t=80$ bar et à 573K.

In [9]:

```
1 P0=1
2 def f(r,Pt,K): #dans les condition sctochio
3     return K-(r*(1-2/3*r)/(1-r)**3)*(P0/Pt)**2
4 def dichot(f,a,b,epsilon,Pt,K):
5     deb=a
6     fin=b
7     while abs(deb-fin)>epsilon:
8         m=(deb+fin)/2
9         if f(deb,Pt,K)*f(m,Pt,K)<=0:
10            fin=m
11        else:
12            deb=m
13    return (deb+fin)/2
14
15 dichot(f,0,1,0.1,80,2.5*10**-3)
```

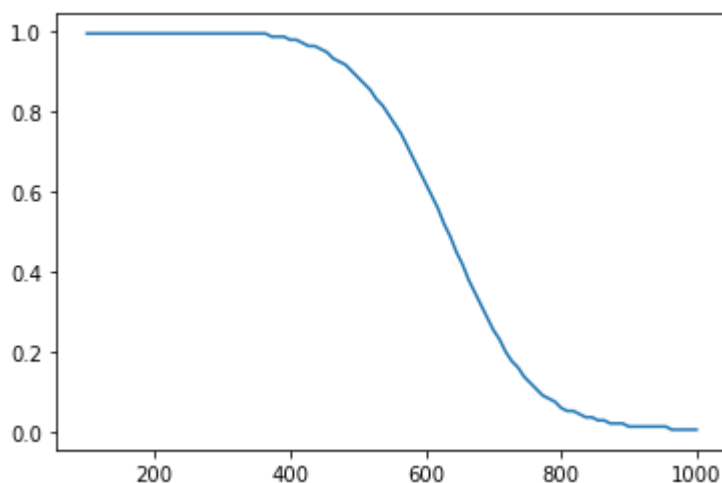
Out[9]:

0.71875

5) Tracer l'évolution du rendement pour des températures comprises entre 100K et 1000K à une pression de 80bar.

In [14]:

```
1 import matplotlib.pyplot as plt
2 tab_T=np.linspace(100,1000,100)
3 liste_r=[]
4 for i in tab_T:
5     K=Keq(i)
6     liste_r.append(dichot(f,0,1,0.01,80,K))
7 plt.plot(tab_T,liste_r)
8 plt.show()
```

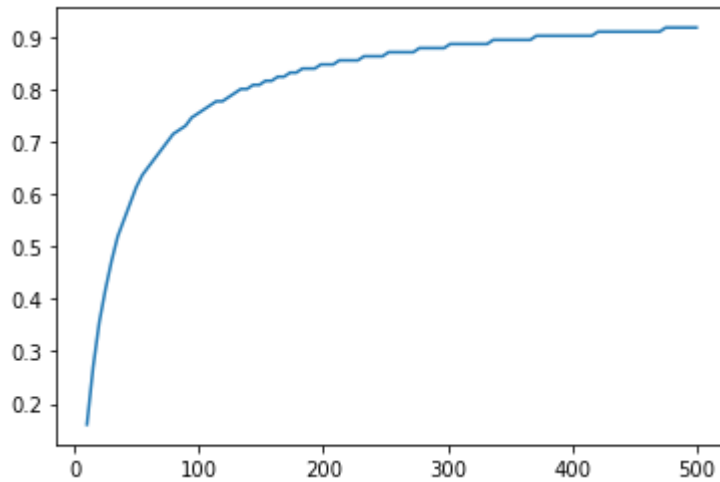


6) Tracer l'évolution du rendement pour des pressions comprises entre 10bar et 50bar et pour $T=573$ K.

Typesetting math: 100%

In [15]:

```
1 tab_P=np.linspace(10,500,100)
2 liste_r=[]
3 for i in tab_P :
4     liste_r.append(dicho(f,0,1,0.01,i,Keq(573)))
5 plt.plot(tab_P,liste_r)
6 plt.show()
```



In []:

1