

# Cinétique d'une réaction exothermique

On considère la réaction d'une solution d'acide chlorhydrique de concentration  $C_a = 1 \text{ mol.L}^{-1}$ , de volume  $V_a = 0.25 \text{ L}$  avec de la soude de concentration  $C_b = 1 \text{ mol.L}^{-1}$ , de volume  $V_b = 0.25 \text{ L}$  dans un calorimètre parfaitement calorifugé. L'ensemble {solution-réacteur} est de capacité thermique  $C = 2000 \text{ J.K}^{-1}$ .

1) Ecrire la réaction observée, donner la valeur de sa constante d'équilibre à 298K

2) A l'aide d'un thermomètre, on mesure une température initiale de  $298^\circ\text{K}$  et une température finale de  $305^\circ\text{K}$ . En déduire la valeur de l'enthalpie de réaction dans l'approximation d'Ellingham.

On suppose la cinétique d'ordre 1 par rapport à chacun de deux réactifs (ordre globale égale à 2). On considère également que la température  $T$  impacte la constante cinétique  $k(T)$  qui suit la loi d'Arrhénius.

3) Montrer que la concentration  $[H^+_{aq}]$  vérifie une équation différentielle telle que :

$$\frac{d[H^+_{aq}]}{dt} = f(T, [H^+_{aq}])$$

On donnera l'expression de la fonction  $f(T, [H^+_{aq}])$

4) Montrer qu'un schéma d'Euler explicite aboutit au système d'équation suivant : 
$$\begin{pmatrix} [H^+_{aq}]_{i+1} \\ T_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [H^+_{aq}]_i \\ T_i \end{pmatrix} + \Delta t \begin{pmatrix} -k_0 [H^+_{aq}]_i^2 \exp(-\frac{E_a}{RT_i}) \\ \frac{Q_{rxn}}{C} \end{pmatrix}$$
 Où  $k_0 = 10 \text{ s}^{-1}$

$T_e$  est la période d'échantillonnage, à l'échantillon  $i$ ,  $t_i = i \cdot T_e$

$$E_a = 1 \text{ kJ.mol}^{-1}$$

4) Proposer une implémentation sous python permettant de connaître l'évolution de la température, supposée homogène, du milieu réactionnel

In [ ]:

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 k0=10
4 C=2000
5 Ea=1000
6 R=8.314
7 tau=1/k0
8 tab_t=np.arange(0,100*tau,tau/100)
9 Te=tau/100
```

5) Commenter la valeur finale.

Processing math: 100%

Processing math: 100%