

Cinétique d'une réaction exothermique 18da-1603617

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°K et une température finale de 305°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 :

$$\begin{pmatrix} [H_{aq}^+]_{i+1} = [H_{aq}^+]_i - [H_{aq}^+]_i^2 k_0 T_e \exp(-\frac{E_a}{RT_i}) \\ X_e = [H_{aq}^+]_{i+1} - [H_{aq}^+]_i \\ T_{i+1} = T_i - \Delta_r H^0 X_e / C \end{pmatrix}$$

Où $k_0 = 10 \text{ s}^{-1}$

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

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

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.