

DM. DE PHYSIQUE N°3 - MPI

A rendre pour le Vendredi 03 Octobre :

Traiter obligatoirement la question 1) puis la partie B du problème N°2

Facultatif : problèmes 1 OU problème 2 questions 1 à 4

La présentation, la lisibilité, l'orthographe, la qualité de la rédaction, la clarté et la précision des raisonnements entreront pour une part importante dans l'appréciation des copies.

En particulier, les résultats non justifiés ne seront pas pris en compte.

Les candidats sont invités à encadrer les résultats de leurs calculs.

PROBLEME N°1 : LA PREPARATION DU PASTIS LANDAIS

Exercice N° 25 du TD CHIM1

PROBLEME N°2 : SYNTHESE DU TRIOXYDE DE SOUFRE

Le trioxyde de soufre est produit comme intermédiaire de la production industrielle d'acide sulfurique. On s'intéresse à la synthèse du trioxyde de soufre $\text{SO}_{3(g)}$ en phase gazeuse à partir du dioxyde de soufre $\text{SO}_{2(g)}$ et du dioxygène $\text{O}_{2(g)}$.

- 1 - Ecrire l'équation de réaction correspondante en prenant un coefficient stœchiométrique égal à 2 pour $\text{SO}_{3(g)}$.

On part d'un mélange contenant une quantité $n_0 = 1,0$ mol de $\text{O}_{2(g)}$ et $2n_0$ de $\text{SO}_{2(g)}$. On suppose que la pression P est maintenu constante et égale à la pression standard $P^\circ = 1$ bar et que les gaz sont assimilables à des gaz parfaits.

- 2 - Sous ces hypothèses, montrer que l'activité d'un gaz s'écrit $a_i = n_i/n_{tot}$, où n_i est le nombre de moles du gaz considéré et n_{tot} le nombre total de moles de gaz.
- 3 - On note ξ l'avancement de la réaction, exprimé en mole. Dresser le tableau d'avancement de la réaction. On ajoutera une colonne donnant le nombre total de moles de gaz. Exprimer le quotient de réaction Q en fonction de ξ/n_0 uniquement.

A une température T_0 donnée, le système évolue jusqu'à atteindre un équilibre chimique. On mesure l'avancement à l'équilibre : $\xi_{eq} = 0,9$ mol.

- 4 - Calculer numériquement la constante d'équilibre $K^\circ(T_0)$ ainsi que les fractions molaires des différents gaz à l'équilibre.

On étudie à présent l'influence de la température sur l'avancement à l'équilibre de cette réaction, en partant du même mélange de réactifs (1,0 mol de $\text{O}_{2(g)}$, 2,0 mol de $\text{SO}_{2(g)}$) et en conservant $P = P^\circ$.

Partie B - Dichotomie

On donne la relation entre la constante d'équilibre K° et la température T (exprimée en Kelvins) :

$$K^\circ(T) = \exp\left(\frac{198.10^3 - 188 \times T}{8,31 \times T}\right)$$

Pour déterminer ξ_{eq} à une température T donnée, on propose d'utiliser une méthode dichotomique. On définit pour cela la fonction $f(\xi) = Q(\xi) - K^\circ$.

- 5- Que vaut $f(\xi_{\text{eq}})$? Tracer qualitativement l'allure de la fonction f (une étude de fonction n'est pas attendue) et rappeler, en 5 lignes maximum, le principe de la méthode dichotomique en vous appuyant sur cette représentation graphique.

Le script 1 présente une trame de programme, écrite en langage Python, mettant en jeu cette méthode.

SCRIPT 1

```

1 import matplotlib.pyplot as plt
2 from math import exp
3 def constante(T):
4     return exp((198000-188*T)/(8.31*T))
5
6 def quotient(ksi):
7     # A COMPLETER
8
9 def avancement_eq(T)
10     gauche = # A COMPLETER
11     droite = # A COMPLETER
12     ksi = 0.5
13     K = constante(T)
14     Q = quotient(ksi)
15
16     while abs(Q-K) > 0.0001:
17         if Q > K:
18             # A COMPLETER
19         else:
20             # A COMPLETER
21             ksi = # A COMPLETER
22             Q = quotient(ksi)
23     return ksi
24
25 # Balayage de la température entre 600 K et 1500 K
26 # construction de la liste liste_ksi contenant les valeurs de ksi
27 # à l'équilibre pour les différentes températures
28
29 liste_T = [T for T in range(600, 1501, 10)]
30 liste_ksi = []
31 for T in liste_T:
32     # A COMPLETER

```

- 6 - Compléter le corps de la fonction quotient, renvoyant la valeur du quotient réactionnel pour l'avancement ξ .
- 7 - Dans le corps de la fonction `avancement_eq`, compléter les lignes 10, 11, 18, 20 et 21.
- 8 - Dans la partie « Balayage en température » du script, compléter le corps de la boucle `for` permettant de remplir la liste `liste_ksi` avec les valeurs de `avancement_eq(T)` pour les valeurs de T comprises dans la liste `liste_T`.

La figure 10 représente l'évolution de l'avancement à l'équilibre en fonction de la température.

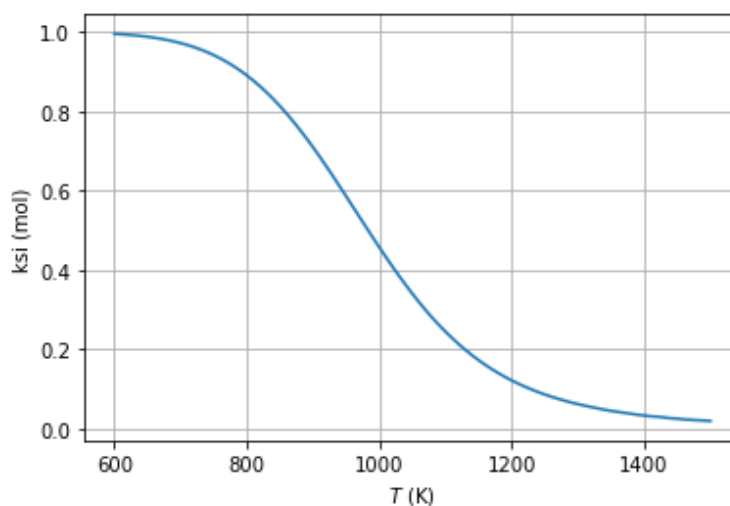


Figure 10 – Evolution de l'avancement à l'équilibre en fonction de la température

- 9 - En calculant les valeurs de la constante de réaction pour des températures de 600 K et 1500 K, vérifier la cohérence des valeurs limites observées.
- 10 - Dans quel sens faut-il faire évoluer la température pour favoriser la synthèse du trioxyde de soufre ? Justifier.

On cherche à vérifier le résultat obtenu à la question 4 : avec $\xi_{eq} = 0,9$ mol à T_0 :

$$K^\circ(T_0) = 1\,701 \approx 1\,700$$

- 11 - Calculer numériquement la température T_0 à partir de la valeur de $K^\circ(T_0)$ obtenue à la question 4 en utilisant la loi $K^\circ(T)$ fournie, puis comparer vos résultats à la figure 10.