

# A Thermodynamique du polymorphisme de la caféine.

①

1.  $G = G_s + G_g = n_s \mu_s + n_g \mu_g$   
 $dG = dG_s + dG_g = n_s (\mu_s dp - s_s dT) + n_g (\mu_g dp - s_g dT)$   
 $+ \mu_s dn_s + \mu_g dn_g$

$dG = (n_s \mu_s + n_g \mu_g) dp - (n_s s_s + n_g s_g) dT + \mu_s dn_s + \mu_g dn_g$

2.  $\mu_g = \mu_g^0(T) + RT \ln \frac{p}{p^0}$  et  $\mu_s = \mu_s^0(T)$  en négligeant les effets de pression.

$\mu_g^0(T)$  potentiel chimique standard  $p=p^0$  à T du gaz purifié  
 $\mu_s^0(T)$  potentiel chimique standard du solide pur à T  $p=p^0$

3. L'identité thermodynamique s'écrit pour un système donné :

$dG = V dp - S dT + \sum \mu_i dn_i$  ①

D'autre part,

$G = H - TS = U + pV - TS \Rightarrow dG = -pdV + \delta Q + p dV + V dp - T ds - S dT$   
en appliquant le premier principe et en admettant que seul le travail des forces de pression doit être pris en compte  
 $dU = -p dV + \delta Q$

Le deuxième principe s'écrit

$dS = \frac{\delta Q}{T} + dS_{\text{irr}} \Rightarrow \delta Q = T dS - T dS_{\text{irr}}$

En remplaçant  $\delta Q$  par son expression, on obtient :

$dG = T dS - T dS_{\text{irr}} + V dp - T dS - S dT$

$dG = V dp - S dT - T dS_{\text{irr}}$  ②

En égalant ① et ②, il vient :

$\sum \mu_i dn_i = -T dS_{\text{irr}}$

- ④ On déduit alors le ~~hypothèse~~ d'évolution spontanée  
 car  $S > 0$  et  $T > 0$
- $\sum_i \mu_i dn_i < 0$  et ( $\sum_i \mu_i dn_i = 0$  à l'équilibre)

Pour le système précédent :  ~~$\mu_{\text{solide}}(s)$~~   $\mu_s(s) = \mu_g(g)$   
 $n_s$   $n_g$

L'état d'équilibre s'écrit :

$$\mu_s dn_s + \mu_g dn_g = 0 \quad \text{et} \quad n = \text{cst} = n_s + n_g$$

$$dn_g = -dn_s$$

$$\mu_s = \mu_g$$

avec les expressions du 2,  $\mu_s^0(T) = \mu_g^0(T) + RT \ln \frac{P_{\text{sat}}(T)}{P^0}$  ③

si  $P > P_{\text{sat}} \parallel \mu_g(T, P) > \mu_g(T, P_{\text{sat}})$   
 $\parallel \mu_s^0(T) < \mu_g(T, P)$  la phase solide  
 est la + stable.

En reprenant l'expression de la pression d'équilibre,  
 on a  $P_{\text{sat}}(T) = P^0 \exp \left( \frac{\mu_s^0(T) - \mu_g^0(T)}{RT} \right)$

⑤ en A, l'équilibre est établi à  $P$  et  $T$   
 $\mu_s(T, P) = \mu_g(T, P)$

$$\left. \frac{\partial \mu_i}{\partial T} \right|_{P, n_i} = \left. \frac{\partial \left( \frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, P}}{\partial T} \right|_{P, n_i} = \left. \frac{\partial \frac{\partial G}{\partial T} \big|_{P, n_i}}{\partial n_i} \right|_{P} = -s_i$$

de  $\hat{m}$   $\left. \frac{\partial \mu_i}{\partial P} \right|_{T, n_i} = \hat{v}_i$  car  $\left. \frac{\partial G}{\partial P} \right|_{T, n_i} = V$



⑥ on B on a

$$\mu_s(T+dT, P+dp) = \mu_g(T+dT, P+dp)$$

$$\text{On } \mu_s(T+dT, P+dp) = \mu_s(T, P) + d\mu_s = \mu_s(T, P) + v_s dp + s_s dT$$

$$\text{et } \mu_g(T+dT, P+dp) = \mu_g(T, P) + d\mu_g = \mu_g(T, P) + v_g dp - s_g dT$$

Avec la relation du ⑤, on obtient

$$v_s dp - s_s dT = v_g dp - s_g dT$$

$$dp(v_g - v_s) = dT(s_g - s_s)$$

$$s_g - s_s = +\Delta_r S_{\text{sub}} \quad \text{à l'équilibre, } \Delta_r S_{\text{sub}} = \frac{\Delta_r H_{\text{sub}}}{T}$$

$$\text{d'autre part } v_g \gg v_s \quad v_g - v_s \approx v_g = \frac{RT}{P}$$

$$\boxed{\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta_r H_{\text{sub}}}{v_g T^2}} = \frac{\Delta_r H_{\text{sub}} \times P}{RT^2}$$

⑦ On sépare les variables, puis on intègre entre  $P$  et  $P_0$  et donc  $T$  et  $T_{\text{sub}}$

$$\frac{dp}{P} = \frac{\Delta_r H_{\text{sub}}}{R} \frac{dT}{T^2}$$

$$\ln \frac{P}{P_0} = \frac{\Delta_r H_{\text{sub}}}{R} \left( -\frac{1}{T} \right) + \frac{\Delta_r H_{\text{sub}}}{R} \times \left( \frac{1}{T_{\text{sub}}} \right)$$

$$\boxed{A = \frac{\Delta_r H_{\text{sub}}}{R}} \quad \left( \text{et } B = \frac{\Delta_r H_{\text{sub}}}{R T_{\text{sub}}} \right)$$

$$\textcircled{8} \quad C(\text{I}) = C(g)_{\text{(I)}} \text{ et } C(\text{II}) = C(g)_{\text{(II)}}$$

Si les 2 équilibres sont vérifiés, on a également.

$$C(\text{I}) = C(\text{II}) \quad \textcircled{\text{III}}$$

$$\mu_{\text{I}}^{\text{os}}(T) = \mu^g(T) + RT \ln \frac{P_{\text{sat I}}}{P^0}$$

$$\mu_{\text{II}}^{\text{os}}(T) = \mu^g(T) + RT \ln \frac{P_{\text{sat II}}}{P^0}$$

si  $C(\text{I})$  est la forme la + stable.  
 $\mu_{\text{I}}^{\text{os}}(T) < \mu_{\text{II}}^{\text{os}}(T)$

$$\Leftrightarrow P_{\text{sat I}} < P_{\text{sat II}}$$

⑨ si (III) est établi,  $\mu_{\text{I}}^{\text{os}}(T) = \mu_{\text{II}}^{\text{os}}(T) \Leftrightarrow P_{\text{sat}}(\text{I}) = P_{\text{sat}}(\text{II})$  ④

$$\Leftrightarrow \ln \frac{P_{\text{sat}}(\text{I})}{P_A} = \ln \frac{P_{\text{sat}}(\text{II})}{P_A}$$

$$-\frac{A_{\text{I}}}{T_{\text{fus}}} + B_{\text{I}} = -\frac{A_{\text{II}}}{T_{\text{fus}}} + B_{\text{II}}$$

$$\frac{A_{\text{II}} - A_{\text{I}}}{T_{\text{fus}}} = (B_{\text{II}} - B_{\text{I}})$$

$$T_{\text{fus}} = \frac{A_{\text{II}} - A_{\text{I}}}{B_{\text{II}} - B_{\text{I}}}$$

⑩ Pour la forme I  $A_{\text{I}} = 12,6 \cdot 10^3$   $\Rightarrow \Delta_{\text{f}} H_{\text{I}}^{\circ} = 1,05 \cdot 10^5 \text{ J mol}^{-1}$   
 Pour la forme II  $A_{\text{II}} = 13,7 \cdot 10^3$   $\Delta_{\text{f}} H_{\text{II}}^{\circ} = 1,14 \cdot 10^5 \text{ J mol}^{-1}$

$$T_{\text{fus}} = \frac{13,7 \cdot 10^3 - 12,6 \cdot 10^3}{35,8 - 33,1} = \underline{\underline{370 \text{ K}}}$$

⑪ (III) = (I)  $\neq$  (II)

$$-\Delta_{\text{f}} H_{(\text{II} \rightarrow \text{I})} = 1,05 \cdot 10^5 - 1,14 \cdot 10^5 \Rightarrow$$

$$\Delta_{\text{trans}} H_{\text{II} \rightarrow \text{I}} = 0,09 \cdot 10^5 = 9 \cdot 10^3 \text{ J mol}^{-1}$$

$$\underline{\underline{\Delta_{\text{trans}} H_{\text{II} \rightarrow \text{I}} = 9 \text{ kJ mol}^{-1}}}$$

Il faudrait tenir compte de l'influence de la température.



Problème 1:

1. def. La variance est le nbre de paramètres intensifs à fixer pour déterminer complètement l'état d'équilibre d'un système, c'est le nbre de paramètres intensifs indépendants à l'équilibre.

On dénombre les paramètres intensifs:  $\text{ZnF}_2(\text{s}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) = 2\text{HF}(\text{g}) + \text{ZnO}(\text{s})$

$$X: p, T, x(\text{ZnF}_2), x(\text{H}_2\text{O}(\text{g})), x(\text{HF}(\text{g})), x(\text{ZnO}(\text{s}))$$

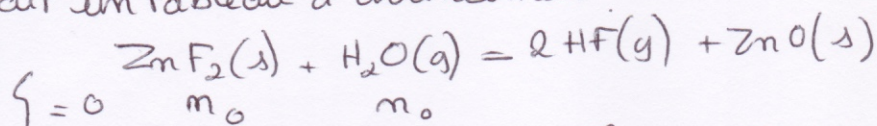
Soit  $Y$  le nbre de relations entre ces paramètres intensifs:

$$Y: \text{formettes de phases} \quad 1 = x(\text{ZnF}_2) = x(\text{ZnO}) = x(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) + x(\text{HF}(\text{g}))$$

$$1 \text{ loi d'action des masses} \quad K^0(T) = Q_r(p, x)$$

$$\boxed{\nu = 2}$$

2. On fait un tableau d'avancement:



$$\begin{array}{ccccccc} \xi = 0 & n_0 & & n_0 & & & \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccccc} \xi & n_0 - \xi & & n_0 - \xi & & 2\xi & \end{array}$$

Les deux réactifs et les 2 pds n'appartiennent pas à la même phase: on n'a pas de nouvelles relations entre paramètres intensifs.

$$\boxed{\nu' = 2}$$

3. Le volume est une grandeur extensive. En imposant uniquement la température, l'expérimentateur laisse un degré de liberté au système:

Il ne peut donc y avoir unicité de l'état initial à l'équilibre unique.

4. Avec la loi de Hess appliquée aux grandeurs de formation, on obtient:

$$\Delta_r H^0 = \sum_i \nu_i \Delta_f H_i^0 = 115,7 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \quad \text{La transformation est endothermique.}$$

Par définition,

$$\Delta_r S^0 = \sum_i \nu_i S_{i,m}^0 = 128,5 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Il y a augmentation des quantités gazeuses au cours de la transformation.

5. Par définition  $K^0 = \exp(-\Delta_r G^0/RT)$  et  $\Delta_r G^0 = \Delta_r H^0 - T \Delta_r S^0$

$$\Delta_r G^0(873 \text{ K}) = 3519,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \quad \text{du cadre de l'approximation d'Ellingham}$$

$$\boxed{K^0(873 \text{ K}) = 0,62}$$



6. On augmente la température & pression et compositions des

$$T_1 \rightarrow T_2$$

On calcule  $\Delta_r G$  après augmentation de température et avant évolution.

$$\Delta_r G(T_2, P_{1eq}, \xi_{1eq}) = RT_2 \ln \frac{Q_r}{K^\circ(T_2)}$$

Car  $Q_r = K^\circ(T_1)$ , donc  $\Delta_r G(T_2, P_{1eq}, \xi_{1eq}) = RT_2 \ln \frac{K^\circ(T_1)}{K^\circ(T_2)}$

La loi de Van t'Hoff s'écrit:  $\frac{d \ln K^\circ}{dT} = \frac{\Delta_r H^\circ}{RT^2} > 0$   $K^\circ(T_2) > K^\circ(T_1)$

$$\Delta_r G(T_2, P_{1eq}, \xi_{1eq}) < 0$$

L'évolution est prévue dans le sens direct.

7.

|           |             |             |              |             |                   |
|-----------|-------------|-------------|--------------|-------------|-------------------|
|           | $ZnF_2(s)$  | $+ H_2O(g)$ | $= 2HF(g)$   | $+ ZnO(s)$  | $n_g$             |
| $\xi = 0$ | $n_0$       | $n_1$       | $n_2$        | $n_3$       | $n_1 + n_2$       |
| $\xi$     | $n_0 - \xi$ | $n_1 - \xi$ | $n_2 + 2\xi$ | $n_3 + \xi$ | $n_1 + n_2 + \xi$ |

$$Q_r = \frac{(a_{HF})^2 a_{ZnO}}{a_{ZnF_2} \times a_{H_2O}} = \frac{(n_2 + 2\xi)^2}{(n_1 - \xi) \times (n_3 + \xi) \times p_0} = \frac{(n_2 + 2\xi)^2}{(n_1 - \xi) \times (n_1 + n_2 + \xi)} \times \frac{p}{p_0}$$

Car après augmentation de pression s'écrit:  $P_{eq} \rightarrow P'$

$$Q_{rAFAE} = \frac{(n_2 + 2\xi_{eq})^2}{(n_1 - \xi_e) \times (n_1 + n_2 + \xi_e)} \times \frac{P'}{P_0} > K^\circ(T) = \frac{(n_2 + 2\xi_e)^2}{(n_1 - \xi_e) \times (n_1 + n_2 + \xi_e)} \times \frac{P_e}{P_0}$$

L'évolution est attendue ds le sens indirect

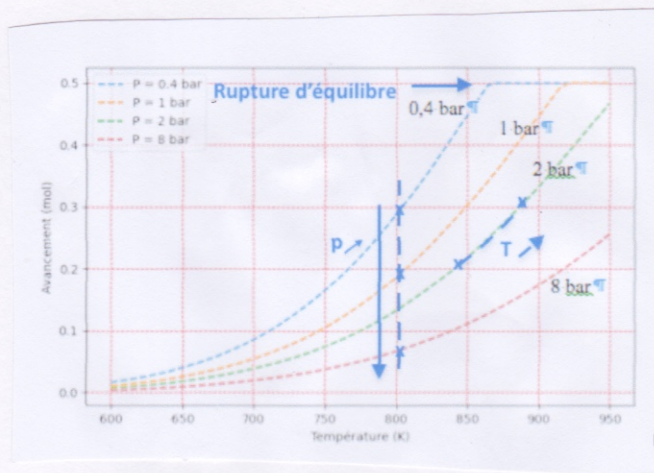
8. Lors de l'ajout,  $p$  cite mais  $n_g \nearrow$

$$Q_{rAFAE} = \frac{(n_2 + 2\xi_{eq})^2}{(n_1 - \xi_e) \times (n_1 + n_2 + \xi_e)} \times \frac{p_e}{P_0} \searrow Q_{rAFAE} < K^\circ(T)$$

L'évolution est attendue ds le sens direct

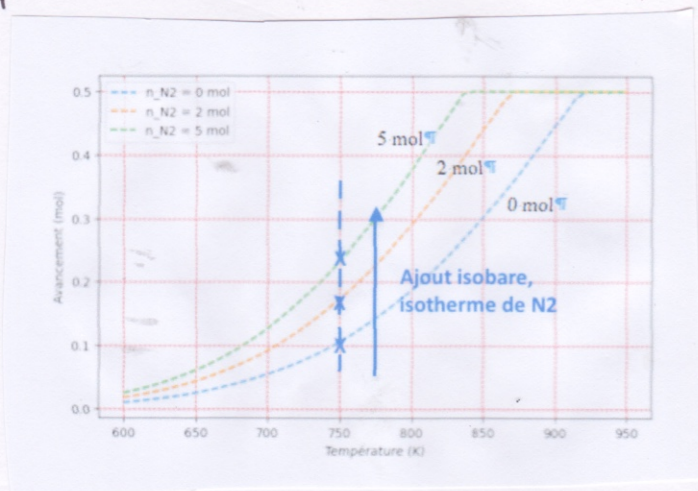
9.





on voit que :

- Pour une même valeur de la température, l'avancement diminue quand  $P \uparrow$ . OK avec théorie
- L'avancement final est également ce pression cste, une fonction  $\uparrow$  de la température OK avec théorie



|| L'ajout d'isotherme et isobare de  $N_2$  augmente l'avancement final  
OK avec théorie

10. On reprend le tableau d'avancement de la question 7  
initialement  $n_0 = 0,5 \text{ mol}$   $n_1 = 1 \text{ mol}$   $n_2 = n_3 = 0$

$Q_{298} = 0$  ~~OK~~  $< K^0(T)$  L'évolution est attendue dans le sens direct.

|          | $ZnF_2(s)$  | $+ H_2O(g)$ | $= 2HF(g)$ | $+ ZnO(s)$ | $n_g$     |
|----------|-------------|-------------|------------|------------|-----------|
| $\} = 0$ | $n_0 = 0,5$ | $n_1 = 1$   |            |            |           |
| $\}$     | $n_0 - \xi$ | $n_1 - \xi$ | $2\xi$     | $\xi$      | $n + \xi$ |



- on sait que  $\xi_{\max} = 95 \text{ mol}$  (rupture d'équilibre due à la disparition du solide  $\text{ZnF}_2(\text{s})$ )
- L'expression de l'équilibre chimique est donnée par

$$K^0(T) = \frac{(2\xi)^2}{(1-\xi)(1+\xi)} \times \frac{P}{P^0} \quad (1-\xi^2) \mid K^0(T) = 4\xi^2 \text{ et } P = P^0$$

$$\xi_{\text{eq}} = m_1 \sqrt{\frac{K^0(T)}{4 + K^0(T)}} > 0 \quad (\text{évolution du } \xi \text{ dans le sens direct})$$

$$\xi_{\text{eq}} = 0,35 \text{ mol} < \xi_{\max}$$

L'équilibre chimique peut être atteint.

$$\xi_f = \xi_{\text{eq}} = 0,35 \text{ mol}$$

$$\begin{aligned} n_{\text{ZnF}_2, f} &= 0,13 \text{ mol} & n_{\text{HF}, f} &= 0,74 \text{ mol} \\ n_{\text{H}_2\text{O}, f} &= 0,13 \text{ mol} & n_{\text{ZnO}, f} &= 0,37 \text{ mol} \end{aligned}$$

On calcule les pressions partielles avec la loi de Dalton.

$$n_{\text{gaz}, f} = 1,37 \text{ mol} \quad x_{\text{H}_2\text{O}, f} = 0,46 \quad x_{\text{HF}, f} = 0,54$$

$$\begin{aligned} p_{\text{H}_2\text{O}, f} &= 0,46 \text{ bar} \\ p_{\text{HF}, f} &= 0,54 \text{ bar} \end{aligned}$$

11. L'état final est un état d'équilibre  $\Delta_r G_{\text{final}} = 0$

12.  $\Delta G = G_f - G_i$  avec l'identité d'Euler  $G = \sum_i n_i \mu_i$

$$\mu_{\text{ZnF}_2(\text{s})} = \mu_{\text{ZnF}_2, \text{s}}^0$$

$$\mu_{\text{ZnO}(\text{s})} = \mu_{\text{ZnO}, \text{s}}^0 \quad \text{car } P = P^0 \quad \checkmark$$

$$\mu_{\text{HF}}(\text{g}) = \mu_{\text{HF}, \text{g}}^0 + RT \ln \frac{P_{\text{HF}}}{P^0}$$

$$\mu_{\text{H}_2\text{O}}(\text{g}) = \mu_{\text{H}_2\text{O}, \text{g}}^0 + RT \ln \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P^0}$$

$$\begin{aligned} G_f &= (0,5 - \xi_f) \mu_{\text{ZnF}_2}^f + (1 - \xi_f) \mu_{\text{H}_2\text{O}}^f + 2\xi_f \mu_{\text{HF}}^f - \xi_f \mu_{\text{ZnO}}^f \\ &= \xi_f \underbrace{(\mu_{\text{ZnO}}^f + 2\mu_{\text{HF}}^f - \mu_{\text{H}_2\text{O}}^f - \mu_{\text{ZnF}_2}^f)}_{\Delta_r G_f^0 = 0} + 0,5 \mu_{\text{ZnF}_2}^f + \mu_{\text{H}_2\text{O}}^f \end{aligned}$$

$$G_i = 0,5 \mu_{\text{ZnF}_2}^i + 1 \mu_{\text{H}_2\text{O}}^i$$

$$\Delta G = RT \ln \frac{P_{\text{H}_2\text{O}, f}}{P_{\text{H}_2\text{O}, i}} \quad \Delta G = -5,6 \text{ kJ}$$

$\Delta G < 0$  cohérent pour une évolution isotherme, isobare d'un système fermé



13.  $n_0 = 0,3 \text{ mol}$   $n_1 = 1 \text{ mol}$   $T = 873 \text{ K}$   $p = p^0 = 1 \text{ bar}$

$T = 873 \text{ K} : p_{eq} = 0,37 \text{ mol}$   
 $f_{max} = 0,3 \text{ mol}$

l'équilibre chimique ne peut être atteint

$p_f = p_{max}$

$n_{ZnF_2, f} = 0 \text{ mol}$   $n_{HF, f} = 0,6 \text{ mol}$   
 $n_{H_2O, f} = 0,7 \text{ mol}$   $n_{ZnO, f} = 0,3 \text{ mol}$

$n_{g, f} = 1,3 \text{ mol} \Rightarrow x_{H_2O, f} = 0,54$   $x_{HF, f} = 0,46$

$p_{H_2O, f} = 0,54 \text{ bar}$

$p_{HF, f} = 0,46 \text{ bar}$

14.  $\Delta G_f \neq 0$  car l'état final n'est pas à l'équilibre chimique.

$\Delta G_f = RT \ln \frac{Q_r}{K^0(T)} = RT \ln \left( \frac{\Delta n_g^2}{n_1^2 - n_0^2} \times \frac{p}{K^0 p^0} \right)$

$\Delta G_f = -3,3 \text{ kJ mol}^{-1} < 0$

car le système est encompromis son évolution se fait dans le sens direct.

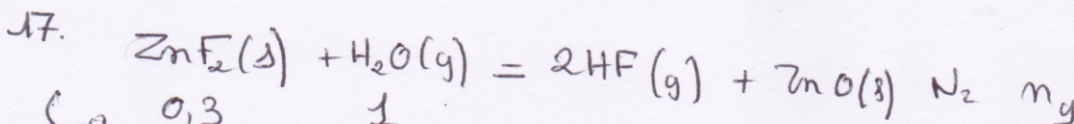
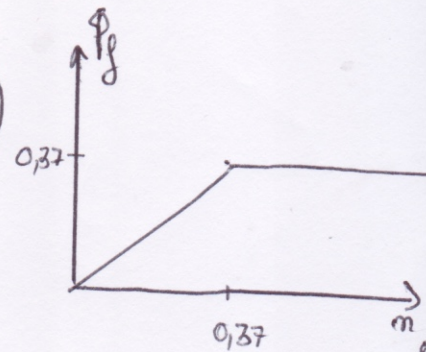
15. Comme précédemment,  $\Delta G < 0$ , cohérent pour une évolution isotherme isobare d'un système fermé

16. à  $T = 873 \text{ K}$   $p_{eq} = 0,37 \text{ mol}$  si  $p = p^0$

$p_f = \min(p_{max}, p_{eq}) = \min(n_0, p_{eq})$

• si  $n_0 < p_{eq}$  alors  $p_f = n_0$

• si  $n_0 > p_{eq}$  alors  $p_f = p_{eq} = 0,37 \text{ mol}$



$f=0$   $0,3$   $1$

$f$   $n_0 - f$   $1 - f$   $2f$   $f$   $n_1$   $1 + n_g$   
 $n_2$   $1 + n_g + f$

$Q = Q_{rev} < 0$  évolution de la densité direct

$p_{max} = \min(0,3, 1) = 0,3 \text{ mol}$



17. calcul de  $\xi_{eq}$

$$K^0(T) = \frac{4\xi^2}{(1-\xi)(1+\xi)} \frac{P}{P^0} \quad PV = (1+\xi)RT$$

$$K^0(T) = \frac{4\xi^2}{(1-\xi)} \frac{RT}{VP^0} \quad \xi_{eq} = 0,14 \text{ mol} \quad \text{avec} \quad P^0 = 10^5 \text{ Pa} \\ V = 10^{-2} \text{ m}^3$$

$\xi_{eq} < \xi_{max}$  L'équilibre chimique peut être atteint

$$\xi = \xi_{eq} = 0,14 \text{ mol.}$$

18. Dans ce cas  $PV = (1 + n_{tot})RT$   $\frac{P}{(1+n_{tot})} = \frac{RT}{V}$   
mais l'expression

$$K^0(T) = \frac{4\xi^2}{(1-\xi)} \frac{RT}{VP^0} \text{ est inchangée}$$

$$\xi = \xi_{eq} = 0,14 \text{ mol.}$$

19. à  $T, V$  cste, l'ajout de diazote ne perturbe pas un système à l'équilibre chimique alors que l'ajout de cet ajout entraîne une évolution dans le sens direct.

20. il faudra comparer  $\xi_{max} = \min(n_0, n_1)$  à  $\xi_{eq}$  qu'on obtient avec  $Q_d(P) = K^0(T)$  (la fonction différence  $K^0(T) - Q_d(P)$  devra être annulée).



```

9
10 #IMPORTATION DES BIBLIOTHEQUES
11 import matplotlib.pyplot as plt
12 import numpy as np
13 from scipy.optimize import newton
14
15 #SAISIE DES DONNEES
16 DrHo = 115.7e3 #Enthalpie std de réaction à 298 K en J/mol
17 DrSo = 128.5 #Entropie std de réaction à 298 K en J/K/mol
18 R = 8.31 #Cte d'état du gaz parfait en J/mol/K
19 P_std = 1 #Pression std en bar
20 P = 1 #Pression imposée en bar
21 ni = [.5 , 1] #Qt de matière initiales [n0 en ZnF2,n1en H2O]
22
23
24 #CREATION DE LISTES de température et d'avancement
25 #Liste des températures à tester
26 Temp = np.linspace(600,950,100)
27
28 #Liste des valeurs finales de l'avancement
29 Ksi = []
30
31
32 #RECHERCHE DE L'ETAT FINAL
33
34 #Définition de fonctions
35 def K_std(T) : #Calcul des valeurs de K°(T)
36     DrGo = DrHo - T * DrSo
37     return np.exp(-DrGo/(R*T))
38
39 def Qr(ksi) : #Calcul des valeur de Qr(P,ksi)
40     return 4*ksi**2 / (ni[1]-ksi) / (ni[1]+ksi) * P/P_std
41
42 def GW(ksi) : #Différence entre K°(T) et Qr
43     return K_std(T) - Qr(ksi)
44
45
46 #Boucle de calcul de ksi_eq pour chaque température
47 for T in Temp :
48     ksi_max = min(ni[0],ni[1]) #Avancement maximal
49
50     ksi_eq = newton(GW,0.4,tol=1e-6 ) #Détermine la valeur de ksi_eq
51
52     ksi_f = min(ksi_max,ksi_eq)
53
54     Ksi.append(ksi_f)
55
56
57 #PROCEDURE DE TRACE
58 plt.figure(1,figsize=(8,5), dpi=100)
59 plt.plot(Temp , Ksi)
60 plt.xlabel('Température (K)')
61 plt.ylabel('Avancement final (mol)')
62 plt.grid(color='r', linestyle='--', linewidth=0.75)
63 plt.title(f"Avancement final en fonction de T pour ni = {ni} mol et P = {P} bar")
64 plt.show()

```

