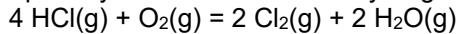


### Capacité numérique n°2 (Merci aux collègues Rapahel Blareau et Eric Noizet)

Tracer, à l'aide d'un langage de programmation, le taux d'avancement à l'équilibre en fonction de la température pour un système siège d'une transformation chimique modélisée par une seule réaction.

#### Etude du procédé Deacon

En présence d'un catalyseur à base de sulfate ou de chlorure de cuivre déposé sur de la pierre ponce, le dichlore peut être préparé vers 800 K par oxydation du chlorure d'hydrogène selon l'équilibre de Deacon :



Industriellement la synthèse est réalisée à température et pression constantes à partir d'un mélange des réactifs en proportions stœchiométriques.

##### Données :

- Constante des gaz parfaits :  $R = 8,314 \text{ kJ mol}^{-1}$ ;
- Pression totale à laquelle la réaction est réalisée :  $P = 1 \text{ bar}$ .
- Grandeur thermodynamique standard à 298 K :

|   |        |                     |                     |                    |
|---|--------|---------------------|---------------------|--------------------|
| Composé   | HCl(g) | H <sub>2</sub> O(g) | Cl <sub>2</sub> (g) | O <sub>2</sub> (g) |
| $\Delta_f H^\circ \text{ (kJ.mol}^{-1}\text{)}$       | - 92,8 | - 241,8             |                     |                    |
| $S^\circ m \text{ (J.K}^{-1}\text{.mol}^{-1}\text{)}$ | 186,9  | 188,7               | 223,1               | 205,1              |

#### I - Taux d'avancement et taux de conversion d'un réactif

1. Rappeler la relation de définition du taux d'avancement de la réaction et du taux de conversion d'un réactif. Dans quel cas ces deux grandeurs ont-elles la même valeur ?
2. Exemple d'application : on suppose qu'au cours d'un essai, on introduit initialement dans le réacteur un mélange de 1 mole de HCl et de 1 mole de O<sub>2</sub>. Dans l'état final, la quantité de matière de HCl est de 0,6 mol. Déterminer dans cet état final le taux d'avancement, ainsi que le taux de conversion de HCl.
3. Dans toute la suite, on se place dans les conditions industrielles. Établir le bilan de matière dans l'état final en fonction du taux d'avancement final  $\tau$ .

#### II - Constante d'équilibre

4. Déterminer la valeur de la constante d'équilibre à  $T_0 = 298 \text{ K}$ , soit  $K^\circ(T_0)$ . (vous pouvez déterminer sa valeur à l'aide de python).
5. Trouver une expression littérale de la constante d'équilibre en fonction de la température  $K^\circ(T)$ .
6. Établir l'expression littérale du quotient réactionnel en fonction de la pression totale  $P$  fixée et du taux d'avancement  $\tau$  dans le cadre des conditions industrielles retenues.
7. À pression constante, écrire la condition d'équilibre chimique sous la forme  $f(\tau) = 0$ .

#### III - Optimisation du procédé Deacon

8. À pression constante, prévoir qualitativement l'influence d'une augmentation de température sur la valeur de  $\tau$ .
9. À température constante, prévoir qualitativement l'influence d'une augmentation de pression sur la valeur de  $\tau$ .

Le but des questions suivantes est de confirmer numériquement ces prédictions.

#### IV - S'organiser pour réussir

10. On suppose que l'état final est un état d'équilibre.

Poser par écrit la suite d'opérations à effectuer pour être capable de tracer le graphe illustrant l'évolution du taux d'avancement final en fonction de la température. Aucune ligne de code n'est demandée.

Le but de cette question est que vous explicitiez **votre propre démarche**. Après avoir fait cela, vous devriez plus facilement répondre à la question suivante qui, elle, nécessite d'écrire le code.

#### V - Programmation en Python

11. On se lance et on programme. Vous pouvez utiliser le programme proposé CN2-aremplir qui contient les bibliothèques et les variables de l'énoncé disponible sur cahier de prépa onglet « capacité numérique ».

♦ pour trouver les zéros d'une fonction, 2 possibilités :

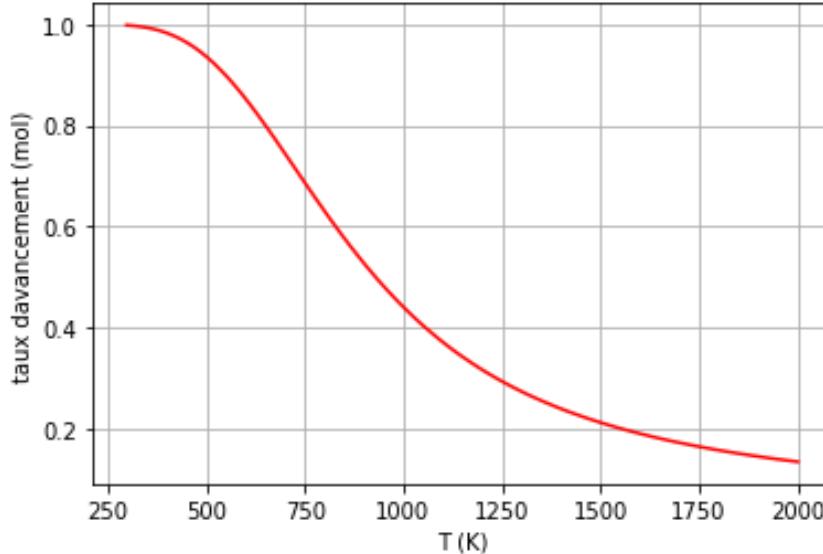
- La dichotomie que vous devriez connaître

- Les fonctions toutes prêtes mais un peu boite noire... incluses dans la bibliothèque `scipy.optimize`
  - La fonction `fsolve`
  - La fonction `Bisect`
  - La fonction `Newton`

| Fonctions                     | Actions réalisées  |
|-------------------------------|--|
| <code>op.fsolve(f,x0)</code>  | Résoudre l'équation $f(x) = 0$ , $x_0$ est la valeur initiale de l'algorithme  |
| <code>op.bisect(f,a,b)</code> | Résoudre l'équation $f(x) = 0$ sur le segment $[a ; b]$ par la méthode de dichotomie.<br>Mettre la fonction $f(x)$ sous forme polynomiale pour éviter les divisions par zéro |
| <code>op.newton(f,x0)</code>  | Résoudre l'équation $f(x) = 0$ par la méthode de Newton en précisant la valeur initiale de l'algorithme  |

Si vous trouvez ce graphe c'est gagné !!!

évolution de tau avec T pour l'équilibre de Deacon méthode Dichoto



#### VI - Exploitation du graphe obtenu

12. Le graphe obtenu est-il en accord avec la prévision faite à la question 8.?
13. Industriellement, la température est choisie entre 700 et 900 K. Commentez ce choix.