

$$1) \alpha(\text{réactif } i) = \alpha_i = \frac{n(\text{Réactif } i)_{\text{ayant réagi}}}{n(\text{Réactif } i)_0} = \frac{n(\text{Réactif } i)_0 - n(\text{réactif } i)_{\text{eq}}}{n(\text{Réactif } i)_0} \quad \text{et} \quad \tau = \frac{\xi}{\xi_{\max}}$$

$\alpha(\text{réactif } i) = \tau$ lorsque le réactif i est le réactif limitant.

2) tableau d'avancement :

	$4 \text{ HCl}(g)$	$+ \text{O}_2(g)$	$= 2 \text{ Cl}_2(g)$	$+ 2 \text{ H}_2\text{O}(g)$	$n_{\text{tot}}^{\text{gaz}}$
El	1	1	0	0	2
EF	$1 - 4\xi = 0.6$ $\Rightarrow \xi = 0.1 \text{ mol}$	$1 - \xi$	2ξ	2ξ	$2 - \xi$
EF	0.6	0.9	0.2	0.2	1.9

Alors $\xi_{\max} = 0.25 \text{ mol}$

$$\alpha(\text{HCl}) = \frac{1-0.6}{1} = 0.40 \text{ et } \alpha(\text{O}_2) = \frac{1-0.9}{1} = 0.10 \quad \text{et} \quad \tau = \frac{0.1}{0.25} = 0.40$$

3) à partir d'un mélange des réactifs en proportions stœchiométriques

	$4 \text{ HCl}(g)$	$+ \text{O}_2(g)$	$= 2 \text{ Cl}_2(g)$	$+ 2 \text{ H}_2\text{O}(g)$	$n_{\text{tot}}^{\text{gaz}}$
El	$4n_0$	n_0	0	0	$5n_0$
EF	$4n_0(1-\tau)$	$n_0(1-\tau)$	$2n_0\tau$	$2n_0\tau$	$n_0(5-\tau)$

$$4) \Delta_r G^\circ(T) = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ \text{ avec } \Delta_r H^\circ = \sum_i \nu_i \Delta_f H^\circ_i = -112.4 \text{ kJ/mol et } \Delta_r S^\circ = \sum_i \nu_i S_m^\circ_i = -129 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$$

$$\text{Enfin } K^\circ(T) = \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\circ(T)}{RT}\right) \text{ alors } K^\circ(T_0) = 9.10 \cdot 10^{12}$$

$$5) K^\circ(T) = \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\circ(T)}{RT}\right)$$

```

13 # 2- Définition des paramètres du problème
14 DrH0 = (2*-241.8-4*-92.8)*10**3 #J.mol-1
15 DrS0 = (2*223.1+2*188.7-4*186.9-205.1) #J/K/mol
16 T0 = 298.00 #K
17 TF= 2000 #K
18 R= 8.314 #J/K/mol
19 P0=1 #bar
20 P=1 #bar
21 N=100

```

```

22
23 # 3- Fonction DrG0 dans l'approx d'Ellingham

```

```

24 def DrG0(T):
25     return DrH0 - T*DrS0

```

```

26
27 # 3- Fonction K dans l'approx d'Ellingham

```

```

28 def K(T):
29     return np.exp(-DrG0(T)/(R*T))

```

$$6) Q = \frac{P(\text{Cl}_2)^2 \times P(\text{H}_2\text{O})^2 P^\circ}{P(\text{O}_2) \times P(\text{HCl})^4} = \frac{n(\text{Cl}_2)^2 \times n(\text{H}_2\text{O})^2 \times n_{\text{tot}}^{\text{gaz}} \times P^\circ}{n(\text{O}_2) \times n(\text{HCl})^4 P} = \frac{(2\tau)^2 \times (2\tau)^2 (5-\tau) P^\circ}{(1-\tau) \times (4(1-\tau))^4 P} = \frac{\tau^4 (5-\tau) P^\circ}{4^2 \times (1-\tau)^5 P} = K(T)$$

$$7) f(\tau) = \tau^4 \times (5-\tau) P^\circ - K(T) \times 4^2 \times (1-\tau)^5 P = 0$$

```

31 # 3- Fonction à annuler si Q=num/denom=K alors f(T,tau)=num - K*denom
32 def f(T,P,tau):
33     return tau**4*(4 - 2*tau)*P0**2-K(T)*4**2*(1-tau)**5*P

```

8) Loi de Van't Hoff, la réaction étant exothermique, une élévation de température fait évoluer l'équilibre dans le sens endothermique cad indirect : *quand* $T \nearrow$, $\tau \searrow$

9) Loi de Le Chatelier, une élévation de pression fait évoluer l'équilibre dans le sens d'une diminution du nombre de mole gazeuse cad direct (car $Q \searrow$) : *quand* $P \nearrow$, $\tau \nearrow$

10) 1- importation des bibliothèques

2- entrer les données de l'énoncé

3- définir Fonction K(T)

4- définir la fonction $f(\tau, T, P)$ à annuler

5- créer une liste de N valeurs de température

6- faire une boucle sur N pour calculer chaque valeur de τ en déterminant le zéro de $g(\tau) = f(\tau, T[i], P)$.

7- tracer la courbe

11) fonction dichotomie :

```

35 # 3-définir la fonction dichotomie
36 def dichoto(min,max,ff,precision):
37     while (max-min) > precision:
38         m=(max+min)/2
39         if ff(min)*ff(m) < 0 :
40             max=m
41         else :
42             min=m
43     return m

```

```

45 # 3-liste des abscisses :
46 T_abs=np.linspace(T0,TF,N)
#3- recherche des N  $\tau$  associés au N valeur de T : recherche des zéro de g zéro
69 tau_dichoto=[]
70 for i in range(len(T_abs)):
71     def g(tau):
72         return f(T_abs[i],P,tau)
73     tau_dichoto.append(dichoto(0,1,g,0.0001))
#4- tracé eu graphe
100 plt.plot(T_abs,tau_dichoto,'-g',label='par dichoto')
101 plt.xlabel('T (K)')
102 plt.ylabel('taux d'avancement (mol)')
103 plt.title('évolution de tau avec T pour l'équilibre de Deacon méthode Dichoto')
104 plt.grid()
105 plt.show()

```

12) oui, quand $T \nearrow$, $\tau \searrow$

13) COMPROMIS !!!

Thermo : entre 700 et 900K on a entre 50% et 70% de rendement

Cinétique : plus T est élevée plus la vitesse est grande

Pour aller plus loin : on peut faire une double boucle sur P et T pour superposer les effet de P et T.

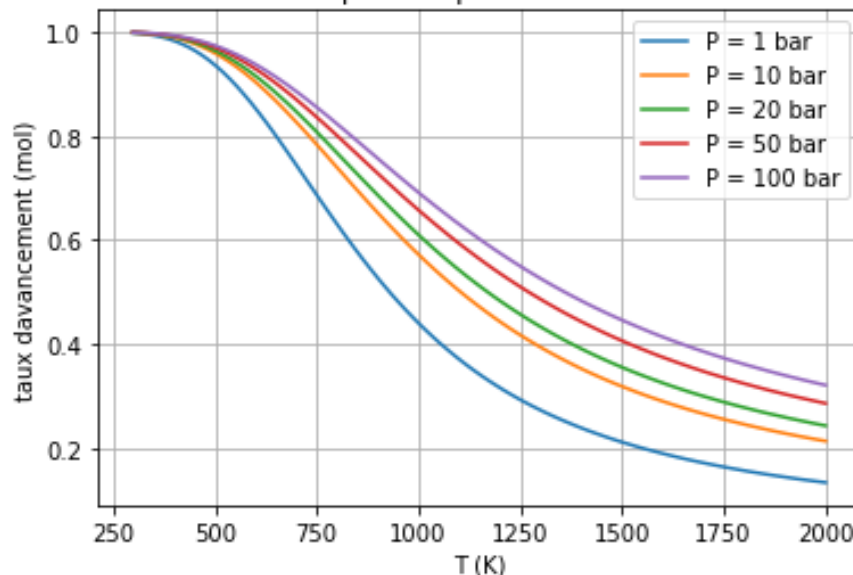
```

52 for i in range(len(Ptot)):
53     def fp(T,tau):
54         return f(T,Ptot[i],tau)
55     tau_dichoto=[]
56     for j in range(len(T_abs)):
57         def g(tau):
58             return fp(T_abs[j],tau)
59         tau_dichoto.append(dichoto(0,1,g,0.0001))
60     #4-tracé de chaque courbe
61     titre = 'P = {}'.format(Ptot[i])
62     plt.plot(T_abs,tau_dichoto,label=titre)

```

} dans la boucle sur P

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



On retrouve le résultat de la question 9) quand $P \nearrow$, $\tau \nearrow$