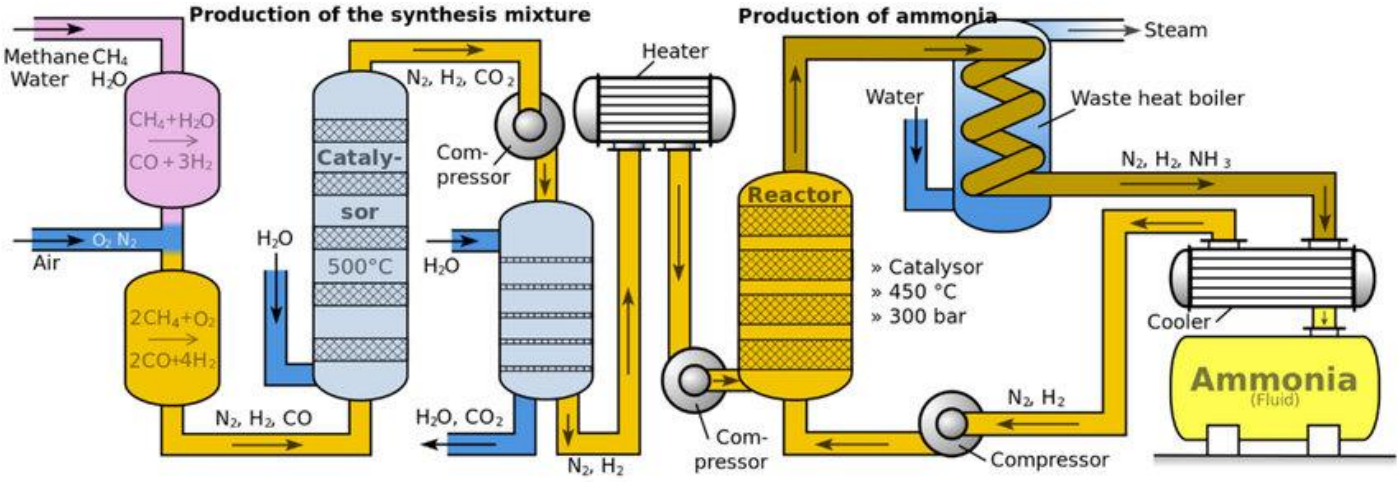
Thermodynamique chimique

Documents de l'introduction



Procédé Haber de synthèse de l'ammoniac, base de la composition des engrais.



Combustion du mélange air-essence dans un moteur thermique.

1. Enthalpie de réaction.
2. Combustions, température de flamme.
3. 2ème principe appliqué à une transformation chimique isobare et isotherme. Enthalpie libre.
4. Equilibre et évolution.
5. Déplacement d'équilibre chimique.

Thermodynamique chimique

1.3 Enthalpies standard de formation

Les tables thermodynamiques fournissent les enthalpies des réactions de formation des espèces chimiques courantes, à la température de 25°C (298 K), et dans les conditions standard (constituants purs ou mélanges idéaux, sous la pression standard $P^o = 1$ bar)

Exemples :

Réaction de formation du méthane

Réaction de formation du monoxyde de carbone

Réaction de formation de la vapeur d'eau

Réaction de formation du dihydrogène

Définition : la réaction de formation d'une espèce chimique A est la réaction dont le produit est l'espèce A toute seule, avec un coefficient stoechiométrique 1, et dont les réactifs sont des corps simples (1 seul type d'atome), dans leur état standard de référence (forme la plus stable).

Notation : l'enthalpie de formation de l'espèce A est $\Delta_f H^O(A)$.

Valeurs utiles pour la suite :

$$\Delta_f H^o\big(CH_4(g)\big) = -74{,}9\ \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^o\big(CO(g)\big) = -110{,}6\ \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

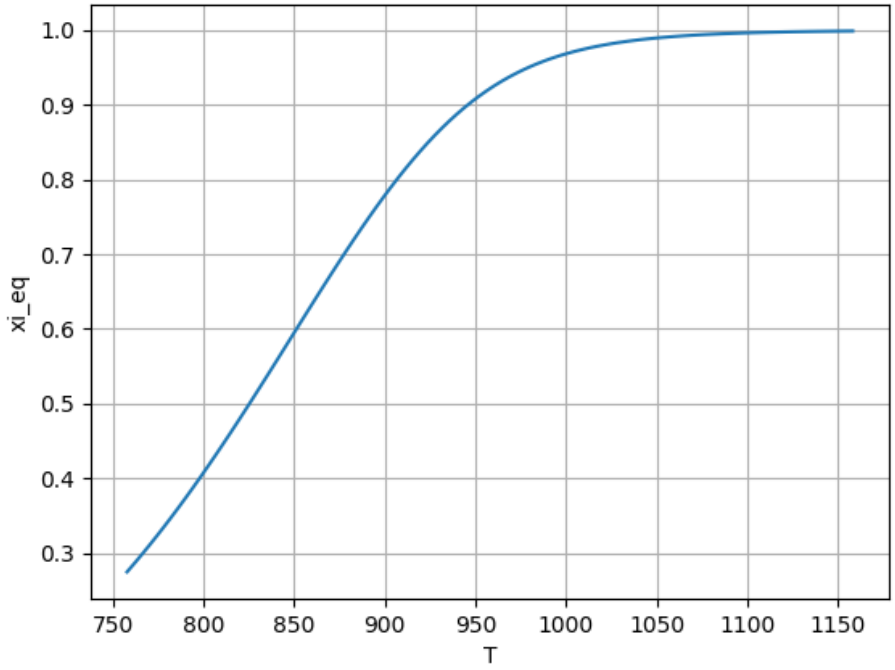
$$\Delta_f H^o\big(H_2O(g)\big) = -241{,}8\ \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^o\big(H_2(g)\big) = 0\ \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

L'enthalpie standard de formation des corps simples dans leur état standard de référence est nulle.

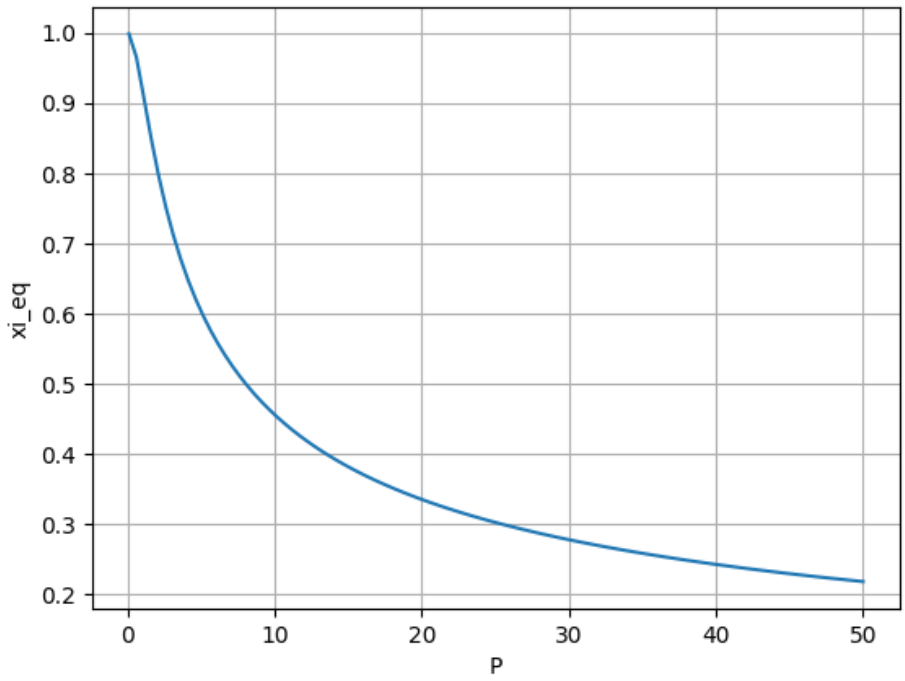
Thermodynamique chimique

Documents de la partie 5 : Déplacements d'équilibre chimique



Avancement à l'équilibre de la réaction $CH_4(g) + H_2O(g) = CO(g) + 3\mathrm{H_2(g)}$

en fonction de la température, pour une pression fixée $P = 1$ bar.



Avancement en fonction de la pression P pour une température fixée à $T_{inv} = 958$ K.

5.4 Influence de la pression. Loi de Le Chatelier.

On part d'un état d'équilibre $Q_r = K^o(\mathrm{T})$. La pression augmente d'une petite quantité $dP > 0$, cela peut faire varier le quotient réactionnel. La température est maintenue constante donc $K^o(T)$ ne varie pas.

- Si Q_r a augmenté, $Q_r > K^o(T)$, le système évolue dans le sens indirect jusqu'à ce que Q_r revienne à $K^o(T)$.
- Si Q_r a diminué, $Q_r < K^o(T)$, le système évolue dans le sens direct jusqu'à ce que Q_r revienne à $K^o(T)$.
- Si Q_r ne dépend pas de la pression (réaction de phases condensées), la pression n'est pas un facteur d'équilibre.

Comment évolue Q_r avec P ?

Propriété mathématique : le quotient réactionnel est proportionnel à $\left(\frac{P}{P^o}\right)^{\sum_i \nu_{i,gaz}}$

Exemple : $CH_4(g) + H_2O(g) = CO(g) + 3\mathrm{H}_2(\mathrm{g})$

Bilan sur l'influence de P