I - Enthalpie libre standard de la synthèse de l'eau

I.A -

à
$$T_1 = 298K$$
, on a $\Delta_r S^{\circ}(T_1) = \sum_i \nu_i S_{m,i}^{\circ}(T_1) = S_{m,H_2O}^{\circ}(T_1) - \frac{1}{2} S_{m,O_2}^{\circ}(T_1) - S_{m,H_2O}^{\circ}(T_1)$

A.N.
$$\Delta_r S^{\circ}(T_1) = 188.7 - \frac{1}{2} * 205.0 - 130.6 = -44.40 J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$$

Alors on a
$$\Delta_r G^{\circ}(T_1) = \Delta_r H^{\circ}(T_1) - T_1 \Delta_r S^{\circ}(T_1)$$

A.N.
$$\Delta_r G^{\circ}(T_1) = -241.8 * 10^3 - 298 * (-44.40) = -2.29 * 10^5 J \cdot mol^{-1}$$

I.B -

Les capacités thermiques molaires standard sont supposées indépendantes de T, on a donc $\Delta_r C_p^{\circ} = C_{p,m,H_2O}^{\circ} - \frac{1}{2} C_{p,m,O_2}^{\circ} - C_{p,m,H_2}^{\circ}$

A.N.
$$\Delta_r C_p^{\circ} = 33.6 - \frac{1}{2} * 29.4 - 28.8 = -9.90 J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$$

I.B.1 -

à $T_2 = 1000K$, par les apprximations d'Ellinghams, on a

$$\Delta_r H^{\circ}(T_2) = \Delta_r H^{\circ}(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta_r C_p^{\circ} dT$$

$$\Delta_r S^{\circ}(T_2) = \Delta_r S^{\circ}(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \frac{\Delta_r C_p^{\circ}}{T} dT$$

Les capacités thermiques molaires standard sont supposées indépendantes de T, on a donc

$$\Delta_r H^{\circ}(T_2) = \Delta_r H^{\circ}(T_1) + (T_2 - T_1) \Delta_r C_n^{\circ}$$

$$\Delta_r S^{\circ}(T_2) = \Delta_r S^{\circ}(T_1) + \ln \frac{T_2}{T_1} \Delta_r C_p^{\circ}$$

A.N.

$$\Delta_r H^{\circ}(T_2) = -241.8 * 10^3 + (1000 - 298) * (-9.90) = -2.49 * 10^5 J \cdot mol^{-1}$$
$$\Delta_r S^{\circ}(T_2) = -44.40 + \ln \frac{1000}{298} * (-9.90) = -56.4 J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$$

On a donc
$$\Delta_r G^{\circ}(T_2) = \Delta_r H^{\circ}(T_2) - T_2 \Delta_r S^{\circ}(T_2)$$

A.N.
$$\Delta_r G^{\circ}(T_2) = -2.49 * 10^5 - 1000 * (-56.4) = -1.93 * 10^5 J \cdot mol^{-1}$$

I.B.2 -

On a aussi

$$\Delta_r G^{\circ}(T_2) = \Delta_r G^{\circ}(T_1) - \int_{T_1}^{T_2} \Delta_r S^{\circ}(T) dT$$

οù

$$\Delta_r S^{\circ}(T) = \Delta_r S^{\circ}(T_1) - \ln \frac{T}{T_1} \Delta_r C_p^{\circ}$$

donc

$$\Delta_r G^{\circ}(T_2) = \Delta_r G^{\circ}(T_1) - (T_2 - T_1) \Delta_r S^{\circ}(T_1) - \Delta_r C_p^{\circ} [T \ln T - T - T \ln T_1]_{T_1}^{T_2}$$
A.N.
$$\Delta_r G^{\circ}(T_2) = -1.93 * 10^5 J \cdot mol^{-1}$$

I.B.3 -

On a aussi

$$\frac{\Delta_r G^{\circ}(T_2)}{T_2} = \frac{\Delta_r G^{\circ}(T_1)}{T_1} - \int_{T_1}^{T_2} \frac{\Delta_r H^{\circ}(T)}{T^2} dT$$

avec

$$\Delta_r H^{\circ}(T) = \Delta_r H^{\circ}(T_1) + (T - T_1) \Delta_r C_p^{\circ}$$

On a donc

$$\Delta_r G^{\circ}(T_2) = T_2 * \left(\frac{\Delta_r G^{\circ}(T_1)}{T_1} - \left[\frac{-\Delta_r H^{\circ}(T_1)}{T} \right]_{T_1}^{T_2} - \Delta_r C_p^{\circ} \left[\ln T \right]_{T_1}^{T_2} + T_1 \Delta_r C_p^{\circ} \left[\frac{-1}{T} \right]_{T_1}^{T_2} \right)$$

A.N.
$$\Delta_r G^{\circ}(T_2) = -1.93 * 10^5 \ J \cdot mol^{-1}$$

Par les trois méthodes, on a toujours le meme resultat.