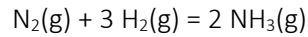


## Influence de la température sur le taux d'avancement à l'équilibre : exemple de la synthèse de l'ammoniac

**Capacité numérique :** 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.

L'exemple étudié est celui de la synthèse de l'ammoniac :



Conditions de la transformation étudiée et hypothèses :

- composition initiale : 1 mol de diazote et 3 mol de dihydrogène (proportions stœchiométriques) ;
- pression  $P$  fixée (quatre valeurs différentes de pression sont étudiées) ;
- température  $T$  : on étudie la plage de température [300 K, 1200 K] ;
- l'ensemble du mélange est gazeux et se comporte comme un gaz parfait ;
- l'enthalpie et l'entropie standard de réaction sont supposées indépendantes de la température.

Données thermodynamiques à 298 K :

Espèce chimique	Enthalpie standard de formation à 298 K (kJ.mol <sup>-1</sup> )	Entropie molaire standard à 298 K (J.K <sup>-1</sup> .mol <sup>-1</sup> )
N <sub>2</sub> (g)	0	192
H <sub>2</sub> (g)	0	131
NH <sub>3</sub> (g)	-45,9	193

Enthalpie standard de réaction :  $\Delta_r H^\circ = -91,8 \text{ kJ.mol}^{-1}$

Entropie standard de réaction :  $\Delta_r S^\circ = -199 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$

**Détermination du taux d'avancement à l'équilibre :**

Définition du taux d'avancement :  $\tau = \frac{\xi}{\xi_{\max}}$  avec ici  $\xi_{\max} = 1 \text{ mol}$ .

Pour le système étudié, le taux d'avancement à l'équilibre est solution de l'équation :

$$\Delta_r G = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ + RT \ln \frac{4 \tau^2 (4 - 2\tau)^2 P^{\circ 2}}{27 (1 - \tau)^4 P^2} = 0$$

Pour une pression  $P$  donnée, le programme calcule par dichotomie le taux d'avancement à l'équilibre pour une liste de valeurs de  $T$  dans l'intervalle considéré et superpose les différentes courbes  $\tau = f(T)$ . La figure obtenue est reproduite ci-dessous.

