

## Fiche de cours – Thermodynamique des réactions chimiques : utilisation du 1<sup>er</sup> principe

Ceci est un exemple minimal de fiche de cours concernant ce chapitre. Je vous encourage à vous en inspirer pour faire votre propre fiche (écrire votre fiche vous aidera à retenir), qui pourra être plus complète, plus personnelle, avec des schémas, des couleurs, des flèches...

► **Loi de Hess** : donne l'enthalpie standard de réaction  $\Delta_r H^0$  [J/mol]

$$\Delta_r H^0 = \sum_{\text{produit}} \nu_i \Delta_f H^0(\text{produit } i) - \sum_{\text{réactif}} \nu_i \Delta_f H^0(\text{réactif } i)$$

▷  $\Delta_r H^0$  dépend de  $T$  seulement, mais pas si on effectue l'approximation d'Ellingham (sauf si changement d'état).

▷ Les enthalpies standards de formation  $\Delta_f H^0$  sont tabulées, souvent à 298 K.

Cas particuliers à connaître :  $\Delta_f H^0(\text{H}_{2(\text{g})}) = \Delta_f H^0(\text{N}_{2(\text{g})}) = \Delta_f H^0(\text{O}_{2(\text{g})}) = \Delta_f H^0(\text{Cl}_{2(\text{g})}) = \Delta_f H^0(\text{C}_{(\text{gr})}) = 0$  (car ces constituants correspondent à l'état standard de référence d'un élément).

► **Variation d'enthalpie** :

Pour un avancement  $\xi$  d'une réaction isotherme :

$$\Delta H = \xi \times \Delta_r H^0(T).$$

Se souvenir également de la variation d'enthalpie pour :

▷ un échauffement ou refroidissement d'un gaz parfait ou d'une phase condensée incompressible indilatable :  $\Delta H = C_p \Delta T$ ,

▷ un changement d'état isotherme, par exemple une vaporisation d'une masse  $m$  de corps pur :  $\Delta H = m \Delta_{\text{vap}} h(T)$ .

► **Transfert thermique** :

Transfert thermique reçu par le système physico-chimique pour un avancement  $\xi$  d'une réaction isotherme et isobare :

$$Q_{\text{reçu}} = \Delta H = \xi \times \Delta_r H^0(T).$$

Il faut justifier que  $Q_{\text{reçu}} = \Delta H$  en appliquant le 1<sup>er</sup> principe version isobare.

► **Méthode – calcul de température de flamme** :

Pour calculer la température finale dans un réacteur adiabatique monobare :

- obtenir les  $n_{i,f}$  quantités de matière dans l'état final en dressant un tableau d'avancement, ainsi que l'avancement final  $\xi_f$
- décomposer en deux étapes et écrire (en justifiant)

$$\begin{aligned} 0 = Q_{\text{reçu}} &= \Delta H_{\text{réaction isotherme}} + \Delta H_{\text{échauffement des constituants}} \\ &= \xi_f \Delta_r H^0 + \sum_i n_{i,f} C_{p,m}^0 (T_f - T_i), \end{aligned}$$

- et isoler  $T_f$ .

## Bilan sur les grandeurs physiques introduites dans ce chapitre

Grandeur	Symbole	Concerne	Rôle	Exemple
Variation d'enthalpie	$\Delta H$	Concerne une réaction chimique avec un avancement $\xi$	Permet d'étudier les transferts thermiques	$\Delta H$ associé à l'avancement $\xi$ de la réaction isotherme $\text{CO}_{(g)} + \frac{1}{2}\text{O}_{2(g)} = \text{CO}_{2(g)}$
Enthalpie de réaction	$\Delta_r H$	Concerne une équation de réaction chimique	Permet de calculer $\Delta H = \xi \times \Delta_r H$ (si év. isotherme)	$\Delta_r H$ associé à la réaction $\text{CO}_{(g)} + \frac{1}{2}\text{O}_{2(g)} = \text{CO}_{2(g)}$
Enthalpie standard de réaction	$\Delta_r H^0$	Concerne une équation de réaction chimique, prise dans les conditions standards	Permet de calculer $\Delta H \simeq \Delta H^0 = \xi \times \Delta_r H^0$ (si év. isotherme)	$\Delta_r H^0$ associé à la réaction $\text{CO}_{(g)} + \frac{1}{2}\text{O}_{2(g)} = \text{CO}_{2(g)}$
Enthalpie standard de formation	$\Delta_f H^0$	Concerne un constituant physico-chimique (donc une espèce chimique dans un état donné) lorsqu'il est dans son état standard	Permet ensuite de calculer $\Delta_r H^0$ avec la loi de Hess	$\Delta_f H^0(\text{CO}_{(g)}), \Delta_f H^0(\text{CO}_{(l)}), \Delta_f H^0(\text{Fe}_{(s)}), \Delta_f H^0(\text{O}_{2(l)}) \dots$ Cas particuliers : $\Delta_f H^0(\text{H}_{2(g)}) = \Delta_f H^0(\text{N}_{2(g)}) = \Delta_f H^0(\text{O}_{2(g)}) = \Delta_f H^0(\text{Cl}_{2(g)}) = \Delta_f H^0(\text{C}_{(gr)}) = 0$
État standard		Concerne un constituant physico-chimique (donc une espèce chimique dans un état donné)		État standard de $\text{CO}_{2(g)}$ à $100^\circ\text{C}$ sous 10 bar : $\text{CO}_{2(g)}$ à $100^\circ\text{C}$ sous 1 bar pris comme gaz parfait
État standard de référence		Concerne un élément chimique (de la classification périodique)	On part des éléments dans leur état standard de référence pour former un constituant physico-chimique, ceci étant associé à $\Delta_f H^0$ de ce constituant physico-chimique	État standard de référence : - de l'élément fer Fe à $100^\circ\text{C}$ : $\text{Fe}_{(s)}$ (variété $\alpha$ ), - de l'élément brome à $30^\circ\text{C}$ : $\text{Br}_{2(l)}$ , etc.