

Q20

07| $\Delta_r H = -48000$ # Valeur de $\Delta_r H^\circ$ en J/mol

08| $\Delta_r S = -130$ # Valeur de $\Delta_r S^\circ$ en J/mol.

17| return np.exp $\left((-\Delta_r H + T * \Delta_r S) / (R * T) \right)$

19| return $\left(4 * (X^{**2}) * (2 - X)^{**2} \right) / \left(27 * ((1 - X)^{**4}) * P^{**2} \right)$

21| return $K(T) - Q(X)$

Q21

25| $a = 0$ # valeur minimale de X

26| $b = 1$ # valeur maximale de X

28| $m = (a + b) / 2$

35| $y_{\text{-CH}_3\text{OH}} = m / (2 * (2 - m))$

$$\# \text{ car } y_{\text{-CH}_3\text{OH}} = \frac{n_{\text{CH}_3\text{OH}}}{N_{\text{tot CO}_2}} = \frac{X_{\text{CO}_2}}{2(2 - X_{\text{CO}_2})} = \frac{X_{\text{CO}_2}}{2(2 - X_{\text{CO}_2})}$$

or $X_{\text{CO}_2} = m$ valeur calculée par dichotomie.

Q22

Pour les températures "basses" ($< 523 \text{ K}$), la conversion de CO_2 conduit très majoritairement à CH_3OH - la réaction (1) est donc majoritaire - la conversion de CO_2 diminue avec T , conformément à l'exothermicité de la réaction (1). $T \uparrow$ est défavorable à (1).

Pour les températures "élevées" ($> 523 \text{ K}$), la conversion de CO_2 conduit très majoritairement à CO - la réaction (2) est donc majoritaire - La conversion de $\text{CO}_2 \uparrow$ avec $T \Leftrightarrow \Delta_r H^\circ(2) > 0$ (2) endothermique)