

## TD THERMODYNAMIQUE PAR PYTHON

Il s'agit d'étudier la réaction de synthèse de l'ammoniac :



On donne  $\Delta_r H^\circ = -92,4 \text{ kJ.mol}^{-1}$  et  $\Delta_r S^\circ = -199 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$

On souhaite, grâce à Python, tracer un faisceau de courbes donnant le taux d'avancement de la réaction en fonction de la température, pour différentes valeurs de pressions totales choisies, pour des conditions initiales qu'il serait possible de modifier facilement dans le code, avant de lancer le programme.

### Travail préparatoire :

1. Donner l'équation qui permet de calculer  $K^\circ(T)$ , en fonction des données thermodynamiques fournies, en fonction de T.
2. Etablir un tableau d'avancement à l'équilibre de la réaction, pour un état initial noté  $n_0 \text{N}_2$ ,  $n_0 \text{H}_2$ ,  $n_0 \text{NH}_3$ . Faire apparaître la colonne  $N_{\text{tot GAZ}}$ .
3. Etablir l'équation qui permet de calculer l'avancement  $x$  à l'équilibre. Lui donner une forme polynomiale non développée (ie par de fraction).

### Travail Python :

Le programme Python est ainsi construit :

Choix d'une **liste** de pressions P auxquelles l'influence de T est étudiée

⇒ Création d'une première boucle qui fait défiler les valeurs de P

Choix d'une **gamme ( range )** de températures ( → abscisses ) auxquelles résoudre l'équation qui donne l'avancement  $x$  → fonction de  $x$  créée

⇒ Création de la deuxième boucle imbriquée qui calcule  $x$  quand  $f(x)$  s'annule par dichotomie.

⇒ Chaque  $x$  permet de calculer le taux d'avancement (→ ordonnées)

⇒ Faire tracer la courbe obtenu en fin de chaque 1° boucle

Afficher tous les tracés

4. Sur la version papier du programme incomplet fourni, compléter le code manquant, à l'aide des commentaires largement développés.
5. Rapporter ce code dans le fichier python fourni et le faire tourner.
6. Montrer la cohérence des tracés avec l'influence prévisible de T et P sur cette réaction.
7. Si vous avez le temps, changer les conditions initiales, et discuter du choix des conditions stœchiométriques qui utilisées dans l'industrie.