

C2 - Thermodynamique des transformations chimiques - L'essentiel

- Pour une réaction **isotherme**, la variation d'enthalpie du milieu réactionnel vaut

$$\Delta H = x_F \Delta_r H^0(T)$$

x_F (en mol) : avancement final de la réaction

$\Delta_r H^0(T)$ (en $J \cdot mol^{-1}$) : enthalpie standard de réaction à la température T

$\Delta_r H^0(T) > 0 \iff$ réaction endothermique

$\Delta_r H^0(T) < 0 \iff$ réaction exothermique

- L'enthalpie standard de formation d'une espèce à 298 K, notée $\Delta_f H^0(298 K)$ est associée à la réaction de formation de cette espèce à partir des corps purs simples sous leur forme la plus stable.

Pour un corps pur simple sous sa forme la plus stable ($H_{2(g)}$, $O_{2(g)}$, $C_{(s)}$...), on a donc $\Delta_f H^0(298 K) = 0$

- Loi de Hess : si $(R) = \sum_k \alpha_k (R_k)$, alors $\Delta_r H^0(T) = \sum_k \lambda_k \Delta_r H_k^0(T)$ (on peut obtenir un $\Delta_r H^0$ inconnu par combinaison linéaire de réactions dont le $\Delta_r H^0$ est connu).

- L'enthalpie standard d'une réaction peut être calculée à partir des enthalpies standard de formation :

$$\Delta_r H^0(298 K) = \sum_i \nu_i \Delta_f H^0(298 K)$$

ν_i : coefficient stoechiométrique **algébrique** (< 0 pour un réactif, > 0 pour un produit)

- On associe à un changement d'état une enthalpie standard de changement d'état (L_{fus} ou $\Delta_{fus} H^0$ pour la fusion, L_{vap} ou $\Delta_{vap} H^0$ pour la vaporisation)

ex : $L_{vap}(H_2O)$ (ou $\Delta_{vap} H^0_{H_2O}$) est associée à l'équation-bilan $H_2O_{(l)} = H_2O_{(g)}$

- Dans l'**approximation d'Ellingham**, on néglige l'influence de T sur $\Delta_r H^0$ (tant que les réactifs et produits ne changent pas d'état) ; on a donc $\Delta_r H^0(T) \simeq \Delta_r H^0(298 K)$.

- Pour une transformation **isotherme et isobare** à la température T :

$$Q = x_F \Delta_r H^0(T)$$

Q : transfert thermique **reçu par le milieu réactionnel** (de la part de l'extérieur)

- Pour une transformation **adiabatique et isobare**, on décompose en deux étapes grâce à un état intermédiaire fictif (correspondant à la réaction terminée, à la température initiale T_i)

$$\Delta H = Q = 0 = x_F \Delta_r H^0(T_i) + C_{P,f}(T_f - T_i)$$

T_i : température initiale T_f : température finale x_F : avancement final de la réaction

$C_{P,f}$: capacité thermique à pression constante **du milieu réactionnel** dans l'état final

$C_{P,f} = \sum_i n_i C_{P,i}^0$ (n_i : quantités de matière de **toutes** les espèces présentes à la fin de la réaction)