

DM 03 : Thermodynamique – Chimie quantique

A rendre le vendredi 07/10/2016

I) L'aluminium

- 1) Quels sont les noms respectifs des trois nombres quantiques n , l et m_l ?
- 2) Donner les valeurs respectives du couple (n,l) pour les orbitales 3d et 4p.
- 3) Quelles sont les valeurs que peut prendre le nombre quantique m_l pour une orbitale de type p et de type d ?
- 4) Donner la configuration électronique de l'aluminium ($Z = 13$) dans son état fondamental et déterminer les valeurs numériques (en eV) des niveaux d'énergie des orbitales de cet atome.
- 5) Définir, pour un atome, l'énergie de première ionisation EI. Calculer cette énergie dans le cas de l'aluminium. Comparer ce résultat à la valeur expérimentale 5,98 eV.
- 6) Pourquoi l'énergie de première ionisation du magnésium ($Z = 12$) est-elle supérieure à celle de l'aluminium ? On donne $EI(\text{Mg}) = 7,64$ eV.

II) Pouvoir calorifique de l'éthanol

- Composition molaire de l'air : 20 % de dioxygène et 80% de diazote.
- Capacité calorifique massique de l'eau liquide : $c_{p,\text{eau}} = 4\,180 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$.
- Chaleur latente de vaporisation de l'eau à 40°C : $L_{v(40^\circ\text{C})} = 43\,340 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$.
- L'échangeur de chaleur est isobare ($P^0 = 1 \text{ bar}$).
- Masse molaire de l'éthanol : $46 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.
- Pression de vapeur saturante, en pascal, de l'eau en fonction de sa température T exprimée en kelvin :
$$P_{\text{eau}}^{\text{sat}}(T) = \exp\left(23,1964 - \frac{3816,44}{T - 46,13}\right)$$

Composé	$\Delta_f H^\circ$ (J/mol)	C_p (J/mol/K)
Éthanol liquide	- 276 520	110,5
Dioxygène gazeux	0	29,5
Diazote gazeux	0	29,1
Dioxyde de carbone gazeux	- 393 500	38,7
Eau vapeur	- 241 810	37,7

- 1) Ecrire l'équation bilan de la réaction [1] de combustion, en présence de dioxygène, d'une mole d'éthanol liquide (C_2H_5OH) en dioxyde de carbone gazeux et en vapeur d'eau.
- 2) Calculer l'enthalpie standard à $25^\circ C$ de la réaction [1] :
- 3) On appelle pouvoir calorifique inférieur (PCI) d'un combustible, la chaleur libérée, à $25^\circ C$ et 1 bar, lors de la réaction de combustion quand l'eau est formée à l'état vapeur. Calculer le PCI de l'éthanol exprimé en $kJ.kg^{-1}$.
- 4) Un brûleur est alimenté à pression constante ($P^\circ = 1 \text{ bar}$) et à $25^\circ C$ par 4 moles d'éthanol liquide et par 100 moles d'air. La réaction de combustion est totale et conduit à la formation de dioxyde de carbone et de vapeur d'eau.
 - 4.1) Calculer le nombre de moles de chaque composé dans le mélange sortant du brûleur.
 - 4.2) Calculer la pression partielle de l'eau dans ce mélange.
 - 4.3) En considérant que l'intégralité de la chaleur de combustion est reçue par les gaz de combustion, déterminer la température T_1 des gaz sortant du brûleur.
- 5) A la sortie du brûleur les gaz circulent dans un échangeur de chaleur d'où ils ressortent à $110^\circ C$ et au sein duquel ils cèdent de la chaleur à de l'eau liquide dont la température augmente de $15^\circ C$ à $40^\circ C$.
 - 5.1) Calculer la quantité de chaleur échangée par les gaz de combustion.
 - 5.2) Calculer la masse d'eau liquide chauffée par les gaz de combustion.