CALCULS THERMODYNAMIQUES SUR LA COMBUSTION D'UN MÉLANGE DE H2 ET O2

Données du problème :

Nb de moles du mélange H2-O2 :	0,08 mol
Pourcentage de dioxygène (O2) :	20 %
Pourcentage de dihydrogène (H2) :	80 %

On cherche :

La température du mélange final après l'auto-ignition

Données nécessaires aux calculs :

Remarques:

- les gaz sont considérés comme étant idéaux
- les propriétés thermodynamiques sont des valeurs moyennes
- les données thermodynamiques sont tirés des ouvrages :
"Fundamentals of Thermodynamics", 6e ed., R.E. Sonntag, Wiley
"Thermochemical Data of Pure Substances", I. Barin, VCH

Température d'auto-ignition d'un mélange H2-O2 :	778 K	(trouvé sur le Net)
Masse molaire de H2 :	2,016 g/mol	
Masse molaire de O2 :	31,998 g/mol	
Masse molaire de H2O :	18,015 g/mol	
Cp molaire moyenne de H2 :	29,52 J/mol/K	entre 298 K et 1000 K
Cp molaire moyenne de O2 :	32,12 J/mol/K	entre 298 K et 1000 K
Cp molaire moyenne de H2O gaz :	37,43 J/mol/K	entre 298 K et 1000 K
Enthalpie de la réaction : H2 + 1/2 O2 --> H2O	-241,826 kJ/mol/K	à 298 K
	-246,282 kJ/mol/K	à 778 K

Calculs :

État initial :

Nombre de moles de O2 :	0,016 mol
Nombre de moles de H2 :	0,064 mol
Température :	298 K

État final :

Nombre de moles d'eau formé :	0,016 mol
Nombre de moles de H2 restant :	0,032 mol

Bilan thermique :

Chaleur à fournir pour emmener le mélange initial de 298 à 778 K :	1153,57 J	
Chaleur dégagée par la combustion :	-3940,51 J	
Cp molaire moyenne de H2 :	33,27 J/mol/K	entre 700 K et 3000 K
Cp molaire moyenne de O2 :	36,32 J/mol/K	entre 700 K et 3000 K
Cp molaire moyenne de H2O gaz :	47,12 J/mol/K	entre 700 K et 3000 K
Énergie disponible pour élever la température du nouveau mélange :	3940,51 J	
Énergie pour porter ce mélange de 778 K à sa température finale :	3940,51 J	Tfinale à déterminer
Bilan thermique fonction de Tfinal (doit être ≈ 0) :	0,00 J	

Température finale du mélange : 2945 K

(Estimation haute : ne tient pas compte des pertes thermiques, de la dissociation possible des molécules, de la non idéalité des gaz...)