

1. Atomistique

1.1. isotopes : deux atomes ayant le même nombre de proton, mais les nombres des neutrons sont différents

1.2. $Z = 1$: nombre de charge = nombre des protons ; $A = 2$: nombre de masse : $A = N + Z$

1.3. les nombres d'oxydation possible de l'hydrogène H :

- $n.o = -1$: LiH
- $n.o = 0$: H_2
- $n.o = +1$: H_2O

1.4. .

1.4.1. les molécules

Masse	2,016	3,022	4,028
Intensité	0,99968	0,000312	x
Molécule H_2	$H_2 = {}^1_1H + {}^1_1H$	$H_2 = {}^1_1H + {}^2_1H$	$H_2 = {}^2_1H + {}^2_1H$

1.5. les abondances

- 1_1H : $M = \sum_i x_i M_i \Rightarrow 1,008 = M({}^1_1H) \cdot x_1 + M({}^2_1H) \cdot x_2 \Rightarrow 1,008 = x_1 + 2x_2$
- 2_1H : $x_1 + x_2 = 1$
- $x_1 = 99,2\%$ et $x_2 = 0,8\%$

1.5.1. $x = 1 - x_1 - x_2 = 8.10^{-6}\%$

1.6. la molécule H_2 est formé de deux atomes de H donc mise en commun de deux électrons, elle est stable d'après la règle de duet

He : molécule entouré par deux électrons l'atome est stable = gaz rare donc elle ne peut pas former des autres liaisons avec d'autres atomes

2. Production du dihydrogène par réformage du gaz naturel

2.1. Synthèse d'ammoniac NH_3

2.2. .

2.2.1. Si on utilise pas de catalyseur la réaction est très lente

Un catalyseur permet d'accélérer une réaction thermodynamiquement possible sans apparaître dans son équation bilan, donc sans modifier l'état final.

2.2.2. Il s'agit d'un catalyseur hétérogène

Pour avoir une efficacité maximale il faut l'introduire sous forme d'un solide en poudre très finement divisée, car l'activité du catalyseur hétérogène est liée à sa surface

2.2.3. La présence du catalyseur ne modifie pas le rendement de la réaction

2.3.

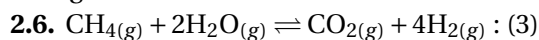
- $CH_4(g) + H_2O(g) \rightleftharpoons CO(g) + 3H_2(g) : (1)$
- $\Delta_r H_1^0 > 0$ donc lorsqu'on augmente la température à pression fixe l'équilibre se déplace dans le sens directe (1) : sens endothermique
- $CO(g) + H_2O(g) \rightleftharpoons CO_2(g) + H_2(g) : (2)$
- $\Delta_r H_2^0 < 0$: lorsqu'on augmente la température à pression fixe l'équilibre se déplace dans le sens (2)

2.4. l'influence de la pression

- $\Delta_r n_{gaz} = 3 + 1 - 1 - 1 = 2 > 0$ l'augmentation de la pression à température fixe entraîne l'évolution de l'équilibre (1) dans le sens indirecte (2)

- $\Delta_r n_{2gaz} = 1 + 1 - 1 - 1 = 0$ la pression n'a pas d'effet sur l'équilibre (2)

2.5. L'excès de H₂O permet de transformer CO en H₂, donc favoriser le sens direct de la synthèse et augmenter le rendement

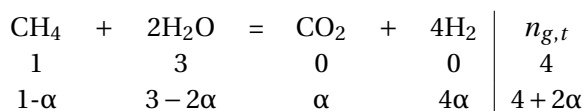


2.6.1. $\Delta_r H_3^0 = \Delta_r H_1^0 + \Delta_r H_2^0 = 217 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

$\Delta_r G_3^0 = \Delta_r H_3^0 - T \Delta_r S_3^0 = 217 - (760 + 273) \cdot 262 \cdot 10^{-3} = -53,646 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

$k_3^0 = \exp\left(-\frac{\Delta_r G_3^0}{RT}\right) = 516$

2.6.2. .



• $k^0 = \frac{P_{\text{CO}_2} \cdot P_{\text{H}_2}^4}{P_{\text{CH}_4} P_{\text{H}_2\text{O}}^2 P_0^2}$

• $P_{\text{CO}_2} = \frac{\alpha}{4+2\alpha} P$; $P_{\text{H}_2} = \frac{2\alpha}{2-\alpha} P$; $P_{\text{CH}_4} = \frac{1-\alpha}{4+2\alpha} P$; $P_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{3-2\alpha}{4+2\alpha} P$

• $k^0 = \frac{\left(\frac{\alpha}{4+2\alpha}\right) \left(\frac{4\alpha}{4+2\alpha}\right)^4 P^5}{\left(\frac{1-\alpha}{4+2\alpha}\right) \left(\frac{3-2\alpha}{4+2\alpha}\right)^2 P^3 P_0^2} = \frac{64\alpha^5 P^2}{(2+\alpha)^2 (1-\alpha) (3-2\alpha)^2 P_0^2}$

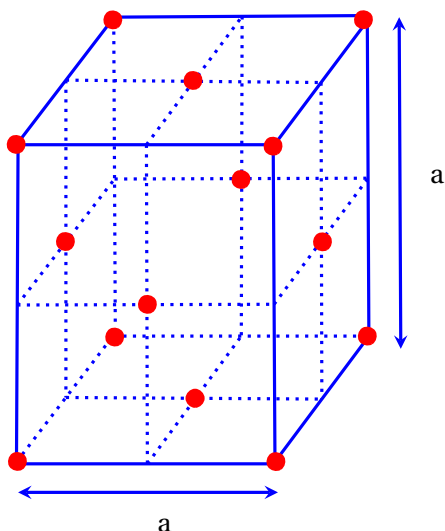
2.6.3. $0,08 = \frac{1-\alpha}{2(2+\alpha)} \Rightarrow \alpha = 0,59$

2.7. Synthèse de H₂ par l'électrolyse de H₂O

2.8. Energie non propre car il y a production de CO₂

3. Stockage du dihydrogène

3.1. Cubique à faces centrés



Nombre d'atomes par maille élémentaire : $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$ atomes par maille

3.1.1. les sites octa et tétra

- sites octa : milieu des arêtes et le centre du cube donc : $N_{\text{Octa}} = 1 + 12 \cdot \frac{1}{4} = 4$
- sites tétra : centre des 8 cubes d'arête $a/2$: $N_{\text{tétra}} = 8$

3.2. .

- contact suivant l'arête : $2r_o + 2r = a = \frac{4r}{\sqrt{2}} \Rightarrow r_o = (\sqrt{2} - 1)r = 0,414r = 66,24pm$

- contact suivant la diagonal du petite cube : $d = 2r_T + 2r = \frac{a\sqrt{3}}{2} \Rightarrow$

$$r_T = \left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \right) r = 0,225r = 36pm$$

3.3. $r' > r_T$ donc les sites compatibles sont les sites octa

3.4. Zr forme un cfc et H occupe les sites tétra = structure de type fluorure de calcium CaF_2

Formule : $Zr_4H_8 = 4ZrH_2$

3.5.

3.5.1. $C_{va} = \frac{n_i M}{v_i} = \frac{8M(H)}{N_A \cdot v_i}$

- $v_i = a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{2}} \right)^3 = 9,27 \cdot 10^{-29} m^{-3}$

- $C_{va} = 144,5 kg \cdot m^{-3}$

3.5.2.

- le volume du Zr nécessaire pour stocker $m = 700Kg$ de dihydrogène est :

$$V = \frac{700}{36,13} = 4,844 m^3$$

- $\rho = \frac{m}{V} = \frac{4M}{N_A a^3}$

$$m = \frac{4M(Zr)V}{N_A a^3} = 31,68 \cdot 10^3 kg$$

4. Energie libérée par la combustion du dihydrogène dans une pile à combustible

4.1.

4.1.1. le produit de la réaction est H_2O donc la réaction est non polluante

4.1.2.

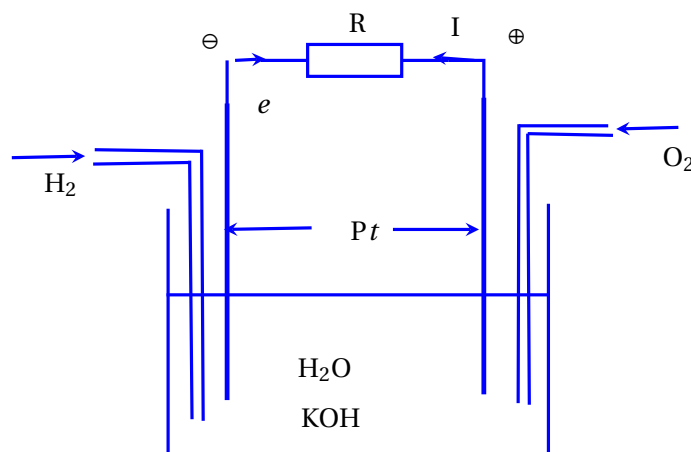
- $\Delta_r H^0 = \Delta_f H^0(H_2O) = -285,2 kJ \cdot mol^{-1}$

- $\Delta H^0 = \xi_f \cdot \Delta_r H^0 = \frac{m}{M(H_2)} \Delta_r H^0 = \frac{10^3}{2 \cdot 1,008} \cdot (-285,2) = -141,47 MJ$

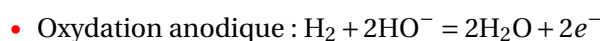
- donc l'énergie dégagée par $1kg$ de dihydrogène est $141,47 MJ$ cette energie est très supérieur à celle de l'essence ($45 MJ$)

4.2.

4.2.1. schéma du pile



4.2.2.



- réduction cathodique : $O_2 + 2H_2O + 4e^- = 4HO^-$
- equation bilan : $O_2 + 2H_2 = 2H_2O$: synthèse de H_2O

4.2.3. $e = E_1 - E_2 = E_1^0 - E_2^0 + \frac{0,059}{4} \log P_{O_2} + \frac{0,059}{2} \log P_{H_2}$
 $e = 1,23V$

4.2.4. la charge débitée en 1h : $Q = \frac{P}{e} t = \frac{10 \cdot 10^3}{1,23} 3600 = 29,27 \cdot 10^6 C$

- $Q = nF\xi = 4F\xi \Rightarrow \xi = \frac{Q}{4F}$
- $m_{O_2} = \xi M_{O_2} = \frac{Q}{4F} M_{O_2} = 2,43 \cdot 10^3 g h^{-1}$
- $m_{H_2} = 2\xi M_{H_2} = 2 \frac{Q}{4F} M_{H_2} = 303,32 g h^{-1}$

4.2.5.

- $W = U_t \cdot I \cdot t$ avec $U_t = 32 \cdot U \Rightarrow W = 32 \cdot 0,875 \cdot 250 \cdot 10 \cdot 24 \cdot 3600 = 6048 \cdot 10^6 J$
- $W = U \cdot q = 4UF\xi \Rightarrow \xi = \frac{W}{4UF}$
- $m_{H_2O} = 2\xi M_{H_2O} = 2 \frac{W}{4UF} M_{H_2O} = 1296 kg$
- $V = 3 \cdot \frac{m}{\rho} = 3888 \cdot 10^3 l \gg 100 l$: cette quantité est suffisante pour 5 personnes en vol pendant 10 jours

4.2.6. inconvénients : consommation d'une très grande quantité de O_2 , risque d'explosion.....