

## — Préparation CN – TP 1 —

# Évolution d'un système chimique vers un état final

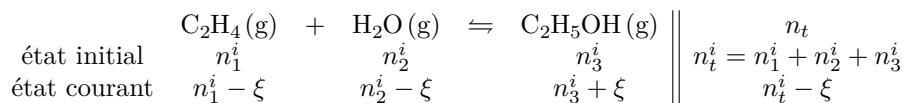
## I - Détermination de l'état final

$$1. Q_r = \frac{a(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH(g)})}{a(\text{C}_2\text{H}_4(\text{g}))a(\text{H}_2\text{O(g)})}$$

Pour un gaz  $a_i = \frac{P_i}{P^\circ}$  et  $P_i = \frac{n_i}{n_t} P$ , on en déduit  $Q_r = \frac{n_3}{n_1 n_2} n_t \frac{P^\circ}{P}$

2. On a  $n_1 = n_2 = n_3 = n_0$  et donc  $n_t = 3n_0$ . Soit  $Q_{r,i} = \frac{3}{70} = 4,29 \cdot 10^{-2}$ .  
On a donc  $Q_{r,i} > K^\circ$  : la réaction avance dans le sens inverse.

3. On écrit le tableau d'avancement, en ajoutant une colonne pour la quantité de matière totale sous forme gazeuse :



Et donc  $Q_r(\xi) = \frac{(n_3^i + \xi)(n_t^i - \xi)}{(n_1^i - \xi)(n_2^i - \xi)} \frac{P^\circ}{P}$

4. Pour le mélange équimolaire,

$$Q_r(\xi) = \frac{(n_0 + \xi)(3n_0 - \xi)}{(n_0 - \xi)^2} \frac{P^\circ}{P} = \frac{(1 + \frac{\xi}{n_0})(3 - \frac{\xi}{n_0})}{(1 - \frac{\xi}{n_0})^2} \frac{P^\circ}{P} = \frac{(1+x)(3-x)}{(1-x)^2} \frac{P^\circ}{P} \quad \text{en posant } x = \frac{\xi}{n_0}$$

En appliquant la loi d'action de masse, on peut écrire  $Q_r(x_{eq}) = K^\circ$  soit

$$(1+x)(3-x) = \frac{P}{P^\circ} K^\circ (1-x)^2$$

On remplace les constantes littérales par leurs valeurs numériques :

$$250(-x^2 + 2x + 3) = 70(x^2 - 2x + 1)$$

et on obtient l'équation du second degré suivante :

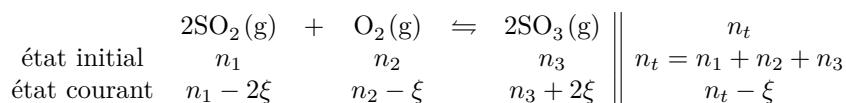
$$8x^2 - 16x - 17 = 0$$

Le discriminant  $\Delta = 16^2 + 4 \times 8 \times 17 = 800$  est positif, on a donc deux racines  $x_{1,2} = \frac{16 \pm \sqrt{800}}{2 \times 8} = 1 \pm \frac{5\sqrt{2}}{4}$ . La réaction avançant dans le sens inverse, on garde la racine négative. Au final

$$\xi_{eq} = x_{eq} n_0 = -0,768 n_0$$

## II - Optimisation d'un procédé chimique : modification de la constante d'équilibre

1. On écrit le tableau d'avancement, en ajoutant une colonne pour la quantité de matière totale sous forme gazeuse :



Le quotient réactionnel est alors, en notant respectivement  $P_1$ ,  $P_2$  et  $P_3$  les pressions partielles de  $\text{SO}_2$ ,  $\text{O}_2$  et  $\text{SO}_3$  :

$$Q_r = \frac{\left(\frac{P_3}{P^\circ}\right)^2}{\left(\frac{P_1}{P^\circ}\right)^2 \left(\frac{P_2}{P^\circ}\right)}$$

et donc, en appliquant la loi  $P_i = \frac{n_i}{n_t} P$  :

$$Q_r = \frac{(n_3 + 2\xi)^2(n_t - \xi) P^\circ}{(n_1 - 2\xi)^2(n_2 - \xi) P}$$

3. On détermine l'avancement maximal relatif à chaque réactif. Pour  $\text{SO}_2$  :  $\xi_{1,max} = \frac{n_1}{2}$ , pour  $\text{O}_2$  :  $\xi_{2,max} = \frac{n_2}{1}$ . Et donc

$$\xi_{max} = \min\left(\frac{n_1}{2}, n_2\right)$$

4. La quantité de  $\text{SO}_2$  ayant réagi est égale à la quantité initiale moins la quantité restante. D'après le tableau d'avancement, on peut alors écrire

$$\alpha = \frac{n_1 - (n_1 - 2\xi)}{n_1} \quad \text{soit} \quad \alpha = \frac{2\xi}{n_1}$$

### III - Optimisation d'un procédé chimique : modification du quotient réactionnel

1. Le tableau d'avancement est :

|              |                        |                                                                     |              |
|--------------|------------------------|---------------------------------------------------------------------|--------------|
|              | $\text{N}_2(\text{g})$ | $+ 3\text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{NH}_3(\text{g})$ |              |
| état initial | $n_1$                  | $n_2$                                                               | $n_3$        |
| état courant | $n_1 - \xi$            | $n_2 - 3\xi$                                                        | $n_3 + 2\xi$ |

$$\left. \begin{array}{l} n_t \\ n_t = n_1 + n_2 + n_3 \\ n_t - 2\xi \end{array} \right|$$

En reprenant un raisonnement similaire à celui tenu pour les exercices précédents, on trouve

$$Q_r = \frac{(n_3 + 2\xi)^2(n_t - 2\xi)^2}{(n_1 - \xi)(n_2 - 3\xi)^3} \left(\frac{P^\circ}{P}\right)^2$$

2. Une fois l'équilibre atteint, on a  $Q_r = K^\circ$

- Si on augmente  $P$ ,  $Q_r$  va diminuer car  $P$  est au dénominateur dans l'expression de  $Q_r$  tandis que  $K^\circ$ , qui ne dépend que de  $T$ , va rester constant. On aura alors  $Q_r < K^\circ$  : la réaction va redémarrer dans le sens direct.
- Si on diminue  $P$ ,  $Q_r$  va augmenter et on aura alors  $Q_r > K^\circ$  : la réaction va redémarrer dans le sens inverse.

On voit que, que la pression augmente ou diminue, la réaction redémarre dans le sens qui va avoir tendance à s'opposer à cette cause : si  $P$  augmente, la réaction avance dans le sens direct, on consomme 4 mol de gaz pour en former seulement 2 : la quantité totale de matière sous forme gazeuse va diminuer, ce qui aura tendance à faire baisser la pression. On aura le même effet dans le sens inverse si  $P$  diminue. Cette loi générale, dite de *modération*, s'appelle la loi de LE CHÂTELIER.

3. Comme vu précédemment,  $\alpha = \frac{n_1 - (n_1 - \xi)}{n_1}$  et donc à l'équilibre  $\alpha = \frac{\xi_{eq}}{n_1}$

4. Par définition  $x = \frac{n(\text{NH}_3)}{n_{total}}$  et donc  $x = \frac{n_3 + 2\xi}{n_t - 2\xi}$