

Préparation CN – TP 1

Évolution d'un système chimique vers un état final

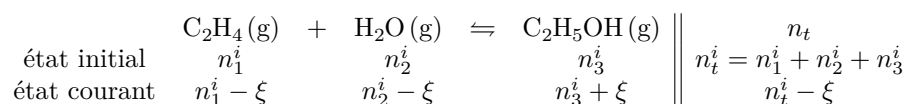
I - Détermination de l'état final

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

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 :

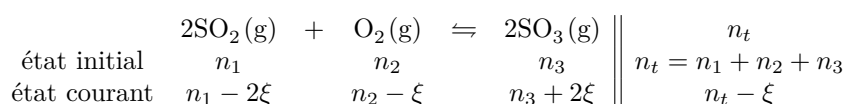
$$8x^2 - 16x - 17 = 0$$

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 SO_2 , O_2 et 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 $P_i = \frac{n_i}{n_t} P$:

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

3. On détermine l'avancement maximal relatif à chaque réactif. Pour SO_2 : $\xi_{1,max} = \frac{n_1}{2}$, pour O_2 : $\xi_{2,max} = \frac{n_2}{1}$. Et donc

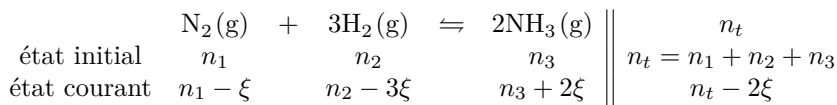
$$\xi_{max} = \min\left(\frac{n_1}{2}, n_2\right)$$

4. La quantité de 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 :



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° , 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 $x = \frac{n_3 + 2\xi}{n_t - 2\xi}$