

Exercices supplémentaires du TD 4

Exercice 5

A- Le mélange est-il à l'équilibre ?

$$Q = \frac{a(\text{CO}_2) * a(\text{H}_2)}{a(\text{CO}) * a(\text{H}_2\text{O})} = \frac{P(\text{CO}_2) * P(\text{H}_2)}{P(\text{CO}) * P(\text{H}_2\text{O})} = \frac{\frac{n(\text{CO}_2)}{n_{\text{tot}}} * P_{\text{tot}} * \frac{n(\text{H}_2)}{n_{\text{tot}}} * P_{\text{tot}}}{\frac{n(\text{CO})}{n_{\text{tot}}} * P_{\text{tot}} * \frac{n(\text{H}_2\text{O})}{n_{\text{tot}}} * P_{\text{tot}}}$$
$$= \frac{n(\text{CO}_2) * n(\text{H}_2)}{n(\text{CO}) * n(\text{H}_2\text{O})}$$

Soit $Q = 2 \neq 1,43$, la réaction n'est pas à l'équilibre.

$Q > K$ donc la réaction évolue dans le sens 2 (soit la formation des réactifs CO et H₂O).

- La composition du mélange à l'équilibre est :



$$K = \frac{(n(\text{CO}_2) - x) * (n(\text{H}_2) - x)}{(n(\text{CO}) + x) * (n(\text{H}_2\text{O}) + x)}$$

$$(n(\text{CO}) + x) * (n(\text{H}_2\text{O}) + x) * K = (n(\text{CO}_2) - x) * (n(\text{H}_2) - x)$$

$$n(\text{CO}) * n(\text{H}_2\text{O}) * K + (n(\text{CO}) * K + n(\text{H}_2\text{O}) * K) * x + Kx^2 = n(\text{CO}_2) * n(\text{H}_2) - (n(\text{CO}_2) + n(\text{H}_2)) * x + x^2$$

On obtient en remplaçant K et les nombres de moles de chaque produit :

$$\begin{aligned} 0,43 x^2 + 5,86 x - 0,57 &= 0 \\ ax^2 + bx + c &= 0 \end{aligned}$$

Il faut donc résoudre cette équation du second degré.

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

$$\Delta = b^2 - 4ac = 5,86^2 - 4 * 0,43 * (-0,57) = 35,32$$

Il y a deux solutions possibles :

$$x_1 = -13,7 \text{ (cette valeur est impossible)}$$

$$x_2 = 0,097$$

Grâce à la valeur de x_2 on en déduit la composition du mélange à l'équilibre :

$$n(\text{CO}) = n(\text{CO}) + x = 1 + x = 1,097 \text{ mol}$$

$$n(\text{H}_2\text{O}) = n(\text{H}_2\text{O}) + x = 1 + x = 1,097 \text{ mol}$$

$$n(\text{CO}_2) = n(\text{CO}_2) - x = 1 - x = 0,903 \text{ mol}$$

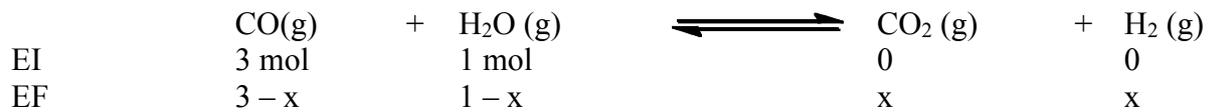
$$n(\text{H}_2) = n(\text{H}_2) - x = 2 - x = 1,903 \text{ mol}$$

B- A l'équilibre



$x = 0,36 \text{ mol}$ soit $n(\text{CO}) = 1 \text{ mol}$ et $n(\text{H}_2\text{O}) = 0,5 \text{ mol}$

C- Calcul de $n(\text{H}_2)$ à l'équilibre



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

$$(3 - 4x + x^2) * K = x^2 \text{ soit } 0,43 x^2 - 5,72x + 4,29 = 0$$

Il faut résoudre l'équation du second degré :

$$\Delta = 25,34$$

$x_1 = 12,5$ ce qui est impossible car $3-x$ et $1-x$ seraient <0

$$x_2 = 0,8$$

Donc : $n(\text{H}_2) = n(\text{CO}_2) = 0,8 \text{ mol}$

$n(\text{CO}) = 2,2 \text{ mol}$

$n(\text{H}_2\text{O}) = 0,2 \text{ mol}$

$$n(\text{total}) = 4 \text{ mol}$$

Pour calculer les pressions partielles :

$$P_i = x_i * P_{\text{tot}}$$

avec P_i = pression partielle du composé i

x_i = fraction molaire du composé i ($n_i/n(\text{total})$)

P_{tot} = pression totale

On trouve :

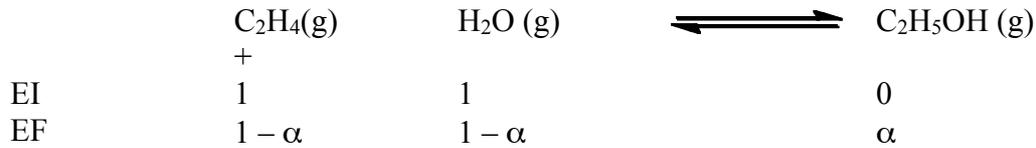
$$\mathbf{P(\text{CO}_2) = (0,8/4) * 2 = 0,4 \text{ bar}}$$

$$\mathbf{P(\text{H}_2) = 0,4 \text{ bar}}$$

$$\mathbf{P(\text{CO}) = 1,1 \text{ bar}}$$

$$\mathbf{P(\text{H}_2\text{O}) = 0,1 \text{ bar}}$$

Exercice 6



α = coefficient de dissociation ou rendement de la réaction.

A- Calcul du rendement de la réaction

$$K = \frac{\frac{P(C_2H_5OH)}{P^\circ}}{\frac{P(C_2H_4)}{P^\circ} * \frac{P(H_2O)}{P^\circ}} = \frac{P(C_2H_5OH) * P^\circ}{P(C_2H_4) * P(H_2O)}$$

La pression de chaque composé peut être exprimée en mol selon la loi des gaz parfaits (V = volume total de gaz qui est constant).

$$K = \frac{n(C_2H_5OH) * \frac{RT}{V} * P^\circ}{n(C_2H_4) * \frac{RT}{V} * n(H_2O) * \frac{RT}{V}} = \frac{n(C_2H_5OH) * P^\circ * V}{n(C_2H_4) * n(H_2O) * RT}$$

Notons que $\frac{V}{RT} = \frac{n_{totale}}{P_{totale}}$ donc :

$$K = \frac{n(C_2H_5OH)}{n(C_2H_4) * n(H_2O)} * P^\circ * \frac{n_{totale}}{P_{totale}} = \frac{n(C_2H_5OH)}{n(C_2H_4) * n(H_2O)} * 1 * \frac{2}{1}$$

$$K = 2 * \frac{\alpha}{(1 - \alpha)^2}$$

$$\text{soit : } K - 2K\alpha + K\alpha^2 = 2\alpha$$

$$10^{-2} \alpha^2 - 1,98 \alpha + 10^{-2} = 0$$

$$\Delta = 3,92$$

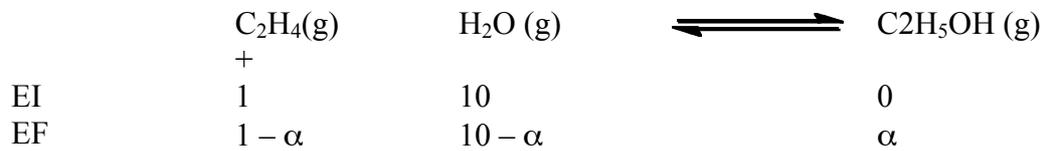
Les solutions de l'équation sont :

$$x_1 = 198,9 \text{ (impossible)}$$

$$x_2 = 0,005.$$

Le rendement de la réaction est donc de 0,5%.

B – Calcul du rendement de la réaction avec 10 moles d'eau



D'après la question précédente :

$$K = 2 * \frac{\alpha}{(1 - \alpha)(10 - \alpha)}$$

$$(10 - \alpha - 10\alpha + \alpha^2) * K = 2\alpha$$

$$10^{-2} \alpha^2 - 2,11 \alpha + 0,1 = 0$$

$$\Delta = 4,45$$

Les solutions de cette équation sont :

$$\alpha_1 = 0,025 \text{ soit un rendement de } 2,5\%$$

$$\alpha_2 = 210,9 \text{ (impossible)}$$

Conclusion : l'ajout d'eau fait déplacer la réaction vers la droite (sens 1).