

Équilibres chimiques

Les chapitres précédents ont permis de mettre en place les outils nécessaires à la description des systèmes chimiques. On a notamment déterminé les fonctions permettant la définition de grandeurs de réaction. Ce chapitre permettra de justifier la définition de la constante d'équilibre mise en place en MPSI. Le second axe de ce chapitre est de quantifier l'impact des paramètres intensifs (p , T , x_i) sur un équilibre afin d'optimiser un procédé chimique de synthèse.

A. Critère d'évolution d'une transformation chimique

Grâce au second principe, on a mis en évidence, dans le chapitre C1, le critère d'évolution spontanée d'un système chimique :

$$dG = -T_{\text{ext}} \delta S_c \leq 0$$

Dans le chapitre C2, on a aussi défini l'enthalpie libre de réaction $\Delta_r G$ telle que :

$$dG = \Delta_r G d\xi$$

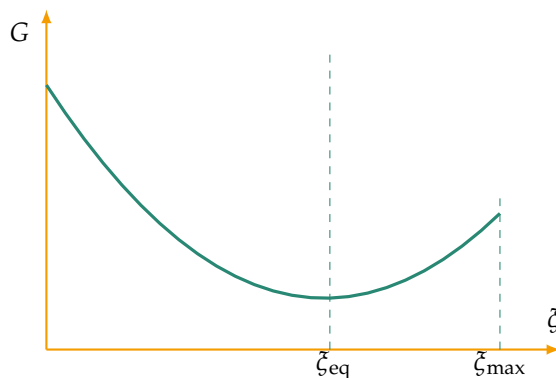
En combinant les deux équations, on démontre le critère d'évolution à retenir :

$$\Delta_r G d\xi \leq 0$$

Ainsi,

- si l'enthalpie libre de réaction $\Delta_r G$ est négative ($\Delta_r G < 0$) alors $d\xi > 0$: l'avancement de la réaction augmente. Le système évolue dans le sens direct, vers la droite, dans le sens 1, vers la formation des produits.
- si l'enthalpie libre de réaction $\Delta_r G$ est positive ($\Delta_r G > 0$) alors $d\xi < 0$: l'avancement de la réaction diminue. Le système évolue dans le sens indirect, vers la gauche, dans le sens 2, vers la formation des réactifs.

On peut utiliser une représentation graphique $G(\xi)$ pour mieux appréhender ce résultat. Pour cela, on rappelle que $\Delta_r G = \left. \frac{\partial G}{\partial \xi} \right|_{T,p}$ est la pente du graphique qui donne l'évolution de G en fonction de l'avancement de la réaction.



B. Quotient de réaction Q et constante d'équilibre K°

B.1 Enthalpie libre de réaction et quotient de réaction

B.2 Cas de l'équilibre

B.3 Évolution vers l'équilibre

C. Variation de K° avec la température T

D. Déplacement d'équilibre et optimisation des procédés