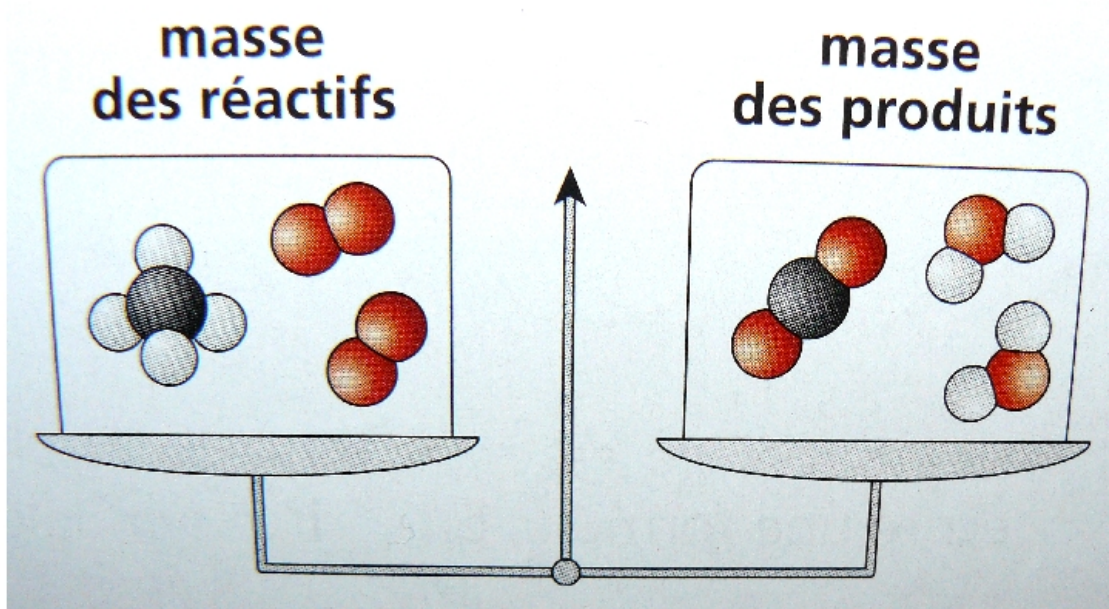


COURS CH4

TRANSFORMATION D'UN SYSTÈME PHYSICO-CHEMIQUE



David Malka

MPSI – 2017-2018 – Lycée Saint-Exupéry



Table des matières

1	Description d'un système physico-chimique	1
1.1	Système thermodynamique	1
1.2	Système ouvert, fermé, isolé	1
1.3	Description d'un système thermodynamique	1
1.3.1	Variables d'état extensives	1
1.3.2	Variables d'état intensives	1
1.4	Notion de phase	1
1.5	Composition chimique d'un système	1
1.5.1	Cas général	2
1.5.2	Solutions	2
1.5.3	Mélange gazeux idéal	3
2	La transformation chimique	3
2.1	La transformation chimique	3
2.2	Un modèle de transformation chimique : la réaction chimique	4
2.3	Coefficients stœchiométriques algébriques	4
2.4	Etat d'équilibre thermodynamique	4
2.5	Activité d'une espèce chimique	5
2.5.1	Activité d'un solide ou liquide seul dans sa phase	5
2.5.2	Activité du solvant	5
2.5.3	Activité d'un soluté	5
2.5.4	Activité d'un gaz au sein d'un mélange gazeux	5
2.6	Quotient réactionnel	5
2.6.1	Un exemple	5
2.6.2	Définition	6
2.7	Loi d'action de masse – Equilibre chimique	6
2.7.1	Loi d'action de masse – Constante d'équilibre	6
2.7.2	Sens d'évolution spontanée d'un système	7
2.7.3	Réaction quantitative ou quasi-totale	7
2.7.4	Réaction limitée	7
2.7.5	Réaction très limitée	7
2.7.6	Détermination de la constante d'équilibre d'une réaction chimique	8
3	Bilan de matière	8
3.1	Avancement de réaction	8
3.2	Tableau d'avancement	8
3.3	Bilan de matière – Cas d'une réaction totale ou quantitative	9
3.4	Bilan de matière – Cas d'une réaction limitée	9
3.5	Synthèse	11

Table des figures

Capacités exigibles

1. Recenser les constituants physico-chimiques présents dans un système.
2. Décrire la composition d'un système à l'aide des grandeurs physiques pertinentes (fractions molaires, pression partielle, concentration...).
3. Exprimer l'activité d'une espèce chimique pure ou dans un mélange dans le cas de solutions état d'équilibre chimique, transformation totale. aqueuses très diluées ou de mélanges de gaz parfaits avec référence à l'état standard.
4. Écrire l'équation de la réaction qui modélise une transformation chimique donnée.
5. Exprimer le quotient réactionnel.
6. Prévoir le sens de l'évolution spontanée d'un système chimique.
7. Identifier un état d'équilibre chimique.

8. Déterminer la composition chimique du système dans l'état final dans le cas d'équilibre modélisée par une réaction chimique unique.
9. **Déterminer une constante d'équilibre.**

1 Description d'un système physico-chimique

1.1 Système thermodynamique



Système thermodynamique

On appelle *système* Σ l'ensemble matériel contenu à l'intérieur d'une surface fermée S^1 . Le reste de l'univers est appelé milieu extérieur. Un système est dit thermodynamique s'il est constitué d'un nombre macroscopique de particules ; typiquement 1 mol.

1.2 Système ouvert, fermé, isolé

Un système :

ouvert échange de la matière et a fortiori de l'énergie avec l'extérieur,

fermé échange de l'énergie mais de pas de matière avec l'extérieur,

isolé n'échange ni énergie ni a fortiori de matière avec l'extérieur.

On se limite à l'étude de système fermé.

1.3 Description d'un système thermodynamique

A l'échelle macroscopique, un système est décrit à l'aide d'un petit nombre de variables : les *variables d'état*.

➤ **Exemple** : la pression P , le volume V , la quantité de matière n .

1.3.1 Variables d'état extensives

Les variables d'état extensives :

- décrivent globalement le système,
- sont additives pour des systèmes indépendants.

➤ **Exemple** : la quantité de matière n , le volume V , la masse m , l'énergie E .

1.3.2 Variables d'état intensives

Les variables d'état intensives sont :

- définies localement (i.e. en chaque point du système),
- non additives.

➤ **Exemple** : la pression P , la température T , la concentration molaire C .

1.4 Notion de phase



Phase

On appelle *phase* toute région de l'espace dans laquelle les variables d'état intensives varient continûment.

La phase est dite *uniforme* si les variables intensives ont même valeur en tout point de la phase.

Enfin, on appelle système *homogène* un système constitué d'une unique phase uniforme.

1.5 Composition chimique d'un système



Objectif(s)

Comprendre et savoir décrire la composition chimique d'un système à l'aide de variables extensives ou intensives : quantités de matière, masses, concentrations, pressions partielles, fractions molaires...

1. Les parois de la surface peuvent être réelles ou virtuelles.

1.5.1 Cas général

On peut décrire la composition chimique d'un système composé de constituants $\{i\}$ à l'aide des variables suivantes :

- les quantités de matières des constituants n_i
- les fractions molaires des constituants $x_i = \frac{n_i}{\sum_j n_j} = \frac{n_i}{n}$
- les masses des constituants m_i
- les fraction massiques des constituants $y_i = \frac{m_i}{\sum_j m_j} = \frac{m_i}{m}$



Application 1

Grossièrement, l'air est constitué, en quantité de matière, à 80% de diazote N_2 et à 20% de dioxygène O_2 . On donne les masse molaires $M_{N_2} = 28,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ et $M_{O_2} = 32,0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

1. Donner les fraction molaires en dioxygène et diazote.
2. Déterminer les masses en dioxygène et en diazote dans 1 mol d'air.
3. En déduire les fractions massiques en dioxygène et diazote.

Réponse

1. Par définition de la fraction molaire : $x_{O_2} = 20 \%$, $x_{N_2} = 80 \%$.
2. $m_{O_2} = M_{O_2} n_{O_2}$ où M_{O_2} est la masse molaire du dioxygène. $n_{O_2} = x_{O_2} n$ avec $n = 1 \text{ mol}$ la quantité de matière totale. On en déduit : $m_{O_2} = x_{O_2} n M_{O_2}$. De même $m_{N_2} = x_{N_2} n M_{N_2}$.
A.N. : $m_{O_2} = 6,4 \text{ g}$, $m_{N_2} = 22,4 \text{ g}$.
3. Par définition : $y_{O_2} = \frac{m_{O_2}}{m} = \frac{m_{O_2}}{m_{O_2} + m_{N_2}}$. De même $y_{N_2} = \frac{m_{N_2}}{m} = \frac{m_{N_2}}{m_{O_2} + m_{N_2}}$.
A.N. : $y_{O_2} = 22,2 \%$, $y_{N_2} = 77,8 \%$

1.5.2 Solutions



Qu'appelle-t-on solution ?

Une solution est un mélange monophasique dans lequel une espèce chimique est ultra-majoritaire. Cette espèce est appelée *solvant*. Les espèces minoritaires sont appelées *solutés*.

On peut décrire la composition chimique d'une solution, de volume V , composée de solutés $\{i\}$ à l'aide des variables suivantes :

- concentrations molaires $C_i = \frac{n_i}{V}$
- concentrations massiques $c_i = \frac{m_i}{V}$



Application 2

Soit 500 millilitres d'eau dans lequel on dissout, sans variation de volume, 0,1 mol de chlorure de sodium $NaCl$. A l'état final, le cristal $NaCl$ est dissocié en ses ions constitutifs Na^+ et Cl^- . Calculer les concentrations molaires en ions sodium Na^+ et ion chlorure Cl^- de la solution.

Réponse

A l'état final, $n_{Na^+} = n_{Cl^-} = n_{NaCl} = 0,1 \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$ et le volume de la solution vaut $V = 0,500 \text{ L}$.

Concentrations molaires :

- $C_{Na^+} = [Na^+] = \frac{n_{Na^+}}{V} = 0,2 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$
- $C_{Cl^-} = [Cl^-] = \frac{n_{Cl^-}}{V} = 0,2 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$

1.5.3 Mélange gazeux idéal

Equation d'état du gaz parfait

Soit n moles de gaz à la température T et occupant un volume V . Le modèle du gaz parfait ^a prévoit qu'à l'équilibre les variables d'état n , T et V sont liées par l'équation d'état :

$$PV = nRT$$

où est $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{K} \cdot \text{mol}^{-1}$ est la constante du gaz parfait.

a. Ce modèle sera abordé dans le chapitre T1 de thermodynamique.

Pression partielle

Soit un mélange gazeux. On appelle *pression partielle*² du gaz i du mélange la pression P_i qu'exercerait ce gaz s'il était seul à occuper l'espace.


Expression de la pression partielle d'un gaz

Soit un mélange idéal de gaz parfaits de volume V , de température T et de quantité de matière totale n . Soit n_i la quantité de matière du gaz i du mélange. Alors la pression partielle P_i de ce gaz vérifie la relation du gaz parfait :

$$P_i V = n_i R T$$

Si on note P la pression totale et $x_i = \frac{n_i}{n}$ la fraction molaire du gaz i alors :

$$P_i = x_i P$$

 On en déduit de manière triviale la loi de Dalton : $\sum_i P_i = P$.

Dans ces conditions, on peut décrire la composition du mélange gazeux par la donnée de la pression partielle de chacun des constituants.

Notion de pression partielle



<https://vimeo.com/davidmalka/ch41>

Application 3

Soit un mélange de gaz nobles contenu dans une enceinte de 100 L à la température $T = 298 \text{ K}$: 2 mol d'hélium He , 5 mol d'argon Ar et 10 mol de néon Ne . Calculer la pression partielle de chacun des gaz ainsi que la pression totale P dans l'enceinte. On donne la constante du gaz parfait $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Réponse

$P = 4,21 \text{ bar}$, $P_{He} = 0,50 \text{ bar}$, $P_{Ar} = 1,24 \text{ bar}$, $P_{Ne} = 2,48 \text{ bar}$.

2 La transformation chimique

2.1 La transformation chimique

Transformation chimique

Au cours de la *transformation chimique* d'un système, les espèces chimiques constituant le système changent mais les éléments chimiques sont conservés.

2. De par sa définition, la pression partielle d'un gaz est une grandeur non mesurable.

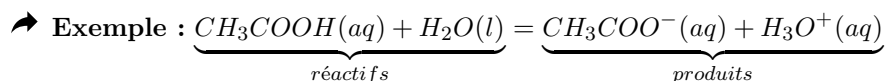
 Une transformation ne conservant pas les éléments chimiques est dite nucléaire.

2.2 Un modèle de transformation chimique : la réaction chimique

Objectif(s)

I Savoir écrire et équilibrer l'équation d'une réaction chimique.

La *réaction chimique* est un modèle de la transformation chimique ne s'intéressant qu' au *bilan de matière* de la transformation. Ce bilan est symbolisé par une équation-bilan ou équation chimique.



De façon générale, on pourra écrire :

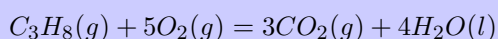
$$\sum_i a_i R_i = \sum_i b_i P_i$$

avec R_i les réactifs, P_i les produits, a_i et b_i leurs coefficients stœchiométriques respectifs.

Application 4

Ecrire l'équation-bilan de la combustion du propane (gazeux) C_3H_8 par le dioxygène.

Réponse



2.3 Coefficients stœchiométriques algébriques

Soit la réaction chimique d'équation-bilan :

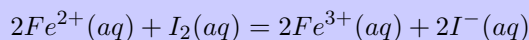
$$\sum_i a_i R_i = \sum_i b_i P_i$$

On note ν_i le coefficient stœchiométrique algébrique associé à l'espèce chimique i intervenant dans le bilan d'une réaction chimique :

- si cette espèce est un produit : $\nu_i = b_i$
- si cette espèce est un réactif : $\nu_i = -a_i$

Application 5

Donner les coefficients stœchiométriques algébriques des espèces chimiques intervenant dans le bilan suivant :



Réponse

$$\nu_{Fe^{2+}} = -2, \nu_{I_2} = -1, \nu_{Fe^{3+}} = 2, \nu_{I^-} = 2.$$

On note alors formellement l'équation de réaction chimique :

$$\sum_i \nu_i A_i = 0$$

où A_i est indifféremment un réactif ou un produit.

2.4 Etat d'équilibre thermodynamique

Etat d'équilibre thermodynamique

A l'état d'équilibre thermodynamique, les variables d'état d'un système thermodynamique sont stationnaires et les échanges du système avec l'extérieur sont nuls en moyenne.

2.5 Activité d'une espèce chimique



Objectif(s)

Savoir écrire l'activité d'une espèce chimique dans les 5 cas suivants : soluté, gaz, solvant, solide seul dans sa phase, liquide seul dans sa phase.

On constate expérimentalement que l'évolution chimique et l'état d'équilibre d'un système thermodynamique sont déterminés par les valeurs des variables intensives (pressions partielles, concentrations molaires,...). Plus précisément, par les *activités chimiques* des espèces constituant le système.



Activité chimique

L'activité chimique a_i de l'espèce chimique i d'un système est une grandeur intensive sans dimension caractérisant le comportement chimique de cette espèce au sein du système.

2.5.1 Activité d'un solide ou liquide seul dans sa phase

$$a_i = 1$$

2.5.2 Activité du solvant

Le solvant étant ultra-majoritaire, on l'assimile à un liquide pur.

$$a_i = 1$$

2.5.3 Activité d'un soluté

Soit un soluté de concentration C_i infiniment dilué en solution. Son activité est donnée par :

$$a_i = \frac{C_i}{C^\circ}$$

où $C^\circ = 1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ est la *concentration standard*.

En pratique, cette expression est une bonne approximation de l'activité du soluté pour des solutions faiblement concentrées. On retiendra $C_i < 5 \times 10^{-2} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

2.5.4 Activité d'un gaz au sein d'un mélange gazeux

Soit un mélange gazeux idéal² de pression totale P . L'activité de chaque gaz i constituant le mélange est donné par :

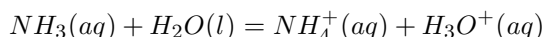
$$a_i = \frac{P_i}{P^\circ}$$

où P_i est la pression partielle du gaz et $P^\circ = 1 \text{ bar} = 1 \times 10^5 \text{ Pa}$ est la *pression standard*.

2.6 Quotient réactionnel

2.6.1 Un exemple

Soit la réaction chimique d'équation-bilan :



Le quotient réactionnel Q associé à cette réaction s'écrit :

$$Q = \frac{[\text{NH}_4^+][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{NH}_3]C^\circ}$$

1. Nous aurons malgré tout tendance à l'utiliser pour des solutions plus concentrées !
2. Interactions négligeables entre les constituants.

2.6.2 Définition



Quotient réactionnel

Soit la réaction chimique d'équation-bilan :

$$\sum_i \nu_i A_i = 0$$

Le *quotient réactionnel* Q associé à cette réaction est défini par :

$$Q = \prod_i a_i^{\nu_i}$$

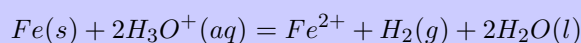
où a_i et ν_i sont l'activité et le coefficient stœchiométrique associés à l'espèce chimique A_i .

Le quotient réactionnel est une grandeur adimensionnée. Il dépend de la température T , de la pression P et de l'avancement ξ de la réaction à travers les activités des espèces chimiques intervenant dans la réaction.



Application 6

Ecrire le quotient réactionnel associé à la réaction chimique d'équation-bilan :



Réponse

$$Q = \frac{[Fe^{2+}]P_{H_2}C^\circ}{[H_3O^+]^2P^\circ}$$

2.7 Loi d'action de masse – Equilibre chimique



Objectif(s)

Savoir prédire le sens d'évolution d'une réaction chimique. Savoir dire si une réaction chimique est quantitative, limitée ou très limitée. Savoir calculer la constante d'équilibre d'une réaction par combinaison linéaire d'équations-bilan.

Le sens d'évolution d'un système chimique et son état d'équilibre sont régis par la *loi d'action de masse*.

2.7.1 Loi d'action de masse – Constante d'équilibre



Loi d'action de masse

- A l'équilibre thermodynamique,
- En présence de tous les espèces chimiques intervenant dans la réaction chimique,

$$Q_{eq} = K^\circ$$

où $Q_{eq} = \prod_i a_{i,eq}^{\nu_i}$ est la valeur du quotient réactionnel à l'équilibre et K° est la *constante d'équilibre* associée à la réaction chimique. K° est un nombre sans dimension ne dépendant que de la température.


➤ **Exemple :** soit la réaction d'autoprotolyse de l'eau $2H_2O(l) = HO^-(aq) + H_3O^+(aq)$. A $T = 298\text{ K}$, la constante d'équilibre associée à cette réaction vaut $K = 1 \times 10^{-14}$.



Sens physique de la loi d'action de masse

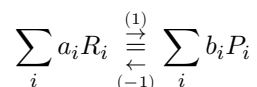


<https://vimeo.com/davidmalka/ch42>

 Si la loi d'action de masse ne peut pas être vérifiée dans l'état final d'un système, on parle de rupture d'équilibre (ex : voir cours CH8 - Réactions de précipitation).

2.7.2 Sens d'évolution spontanée d'un système

Soit la réaction chimique d'équation-bilan :



Formellement, R_i représente les réactifs car positionné arbitrairement à gauche de l'équation et P_i représente les produits car positionné arbitrairement à droite de l'équation. Le système peut évoluer dans le *sens direct* $\xrightarrow{(1)}$ de formations des produits P_i mais aussi dans le *sens indirect* $\xleftarrow{(-1)}$ de formation des réactifs R_i .

Sens d'évolution spontanée d'un système physico-chimique

Au cours de la transformation chimique, le quotient réactionnel tant vers la constante d'équilibre :

$$Q \rightarrow K^\circ$$

aussi, en notant Q_0 la valeur initiale du quotient réactionnel :

- si $Q_0 < K^\circ$, la réaction se déroule dans le sens direct $\xrightarrow{(1)}$,
- si $Q_0 > K^\circ$, la réaction se déroule dans le sens indirect $\xleftarrow{(-1)}$.

Sens d'évolution spontanée d'un système physico-chimique



<https://vimeo.com/davidmalka/ch43>

2.7.3 Réaction quantitative ou quasi-totale

Réaction quantitative ou quasi-totale

Si la constante d'équilibre associée à une réaction vérifie $K^\circ \gtrsim 10^4$ alors on peut considérer la réaction comme quasi-totale.

Dans ce cas, on réalisera le bilan de matière par recherche du réactif limitant.

2.7.4 Réaction limitée

Réaction limitée

Si la constante d'équilibre associée à une réaction vérifie $K^\circ \lesssim 10^4$ alors la réaction est limitée dans le sens direct.

Dans ce cas, on réalisera le bilan de matière en appliquant la loi d'action de masse.

2.7.5 Réaction très limitée

Réaction quantitative ou quasi-totale

Si la constante d'équilibre associée à une réaction $K^\circ \lesssim 10^{-4}$ alors la réaction est très limitée dans le sens direct.

Dans ce dernier cas, on réalise le bilan de matière en appliquant la loi d'action de masse et on peut négliger l'avancement devant la quantité initiale des réactifs pour simplifier les calculs.

2.7.6 Détermination de la constante d'équilibre d'une réaction chimique

▶ Calcul de la constante d'équilibre d'une réaction chimique



<https://vimeo.com/davidmalka/ch44>

3 Bilan de matière



Objectif(s)

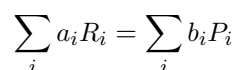
Savoir calculer la composition chimique finale d'un système dans le cas d'une réaction quantitative et dans le cas d'une réaction limitée.

3.1 Avancement de réaction



Avancement de réaction

Soit la réaction chimique d'équation-bilan :



On définit l'avancement de réaction ξ à l'instant t par :

$$\xi(t) = \frac{\Delta n_i}{\nu_i} = \frac{n_i(t) - n_i(0)}{\nu_i}$$

soit

$$n_i(t) = n_i(0) + \nu_i \xi$$

où n_i est la quantité de matière d'un réactif ou d'un produit quelconque de la réaction et ν_i son coefficient stœchiométrique algébrique.

☞ On définit de même l'avancement infinitésimal par $d\xi = \frac{dn_i}{\nu_i}$.

3.2 Tableau d'avancement

Ce tableau donne les quantités de matière de chaque espèce chimique pour un avancement de réaction ξ donné.

➔ **Exemple :** un tableau d'avancement.

ξ	$N_{2(g)}$	$+3H_{2(g)}$	$= 2NH_{3(g)}$
0	1mol	4mol	0mol
ξ	$1 - \xi$	$4 - 3\xi$	2ξ
ξ_f	$1 - \xi_f$	$4 - 3\xi_f$	$2\xi_f$



Equation-bilan, avancement de réaction et tableau d'avancement



<https://vimeo.com/davidmalka/ch45>

3.3 Bilan de matière – Cas d'une réaction totale ou quantitative

Réaction totale

Une réaction est *totale* si à la fin de la réaction au moins un des réactifs a été entièrement consommé. Ce réactif est dit limitant ou en défaut.

Le bilan de matière se fait par recherche du réactif limitant. On opérera de même pour une réaction quantitative (quasi-totale).

L'avancement final ξ_f est alors égale à l'avancement maximal ξ_{max} .

Bilan de matière d'une réaction quantitative



<https://vimeo.com/davidmalka/ch46>

Application 7

On considère la réaction de combustion de 7 mol d'éthane C_2H_6 dans 10 mol de dioxygène O_2 . Sachant que la réaction est totale, déterminer la composition finale du système.

Réponse

ξ	$C_2H_6(g)$	$+ \frac{7}{2}O_2(g)$	$= 2CO_2(g)$	$+ 3H_2O(l)$
0	7	10	0	0
ξ	$7 - \xi$	$10 - \frac{7}{2}\xi$	2ξ	2ξ
ξ_f	$7 - \xi_f$	$10 - \frac{7}{2}\xi_f$	$2\xi_f$	$3\xi_f$

La réaction est totale donc pour déterminer l'avancement final ξ_f , on cherche le réactif limitant :

- si l'éthane est le réactif limitant alors $n_{C_2H_6}^f = 0 \Leftrightarrow \xi_f^1 = 7 \text{ mol}$;
- si le dioxygène est le réactif limitant alors $n_{O_2}^f = 0 \Leftrightarrow \xi_f^2 = \frac{20}{7} \text{ mol}$;
- comme $\xi_f^2 < \xi_f^1$, $x_{i_f} = \xi_f^2 = \frac{20}{7} \text{ mol}$ le réactif limitant est donc le dioxygène.

On en déduit les quantité de matière des réactifs et des produits à l'état final.

ξ	$C_2H_6(g)$	$+ \frac{7}{2}O_2(g)$	$= 2CO_2(g)$	$+ 3H_2O(l)$
0	7	10	0	0
ξ	$7 - \xi$	$10 - \frac{7}{2}\xi$	2ξ	2ξ
$\xi_f = \frac{20}{7}$	$7 - \xi_f = \frac{29}{7}$	$10 - \frac{7}{2}\xi_f = 0$	$2\xi_f = \frac{40}{7}$	$3\xi_f = \frac{60}{7}$

3.4 Bilan de matière – Cas d'une réaction limitée

Réaction limitée

Une réaction est *limitée* si la réaction prend fin avant que l'un des réactifs ait été entièrement consommé. L'état final est alors un état d'équilibre du système.

Le bilan de matière se fait par application de la loi d'action de masse.

L'avancement final ξ_f est alors noté ξ_{eq} .

Bilan de matière d'une réaction limitée

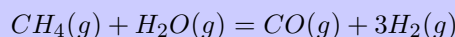


<https://vimeo.com/davidmalka/ch47>



Application 8

On considère la préparation industrielle du dihydrogène mettant en jeu la réaction suivante et phase gazeuse :



La réaction se déroule sous pression totale $P = 10$ bar constante. La température demeure également constante et la valeur de constante d'équilibre est $K^\circ = 15$. Initialement, le réacteur contient 10 mol de méthane et 10 mol d'eau. Déterminer l'état final du système.

Réponse

ξ	$CH_4(g)$	$+H_2O(g)$	$= CO(g)$	$+3H_2(g)$
10	10	10	0	0
ξ	$10 - \xi$	$10 - \xi$	ξ	3ξ
ξ_f	$10 - \xi_f$	$10 - \xi_f$	ξ_f	$3\xi_f$

La réaction est limitée donc pour déterminer l'avancement final ξ_f , on applique la loi d'action de masse à la réaction. A l'équilibre :

$$Q_{eq} = K^\circ$$

$$\Leftrightarrow \frac{P_{CO,eq} P_{H_2,eq}^3}{P_{CH_4,eq} P_{H_2O,eq} (P^\circ)^2}$$

avec :

$$- P_{CO,eq} = x_{CO,f} P = \frac{n_{CO}^f}{n} \text{ avec } n_{CO}^f = \xi_f \text{ et } n = n_{CO}^f + n_{H_2}^f + n_{CH_4}^f + n_{H_2O}^f = 20 + 2\xi_f \text{ d'où :}$$

$$P_{CO,eq} = \frac{\xi_f}{20 + 2\xi_f} P$$

— avec le même raisonnement, on trouve :

$$- P_{H_2,eq} = \frac{3\xi_f}{20 + 2\xi_f} P$$

$$- P_{CH_4,eq} = \frac{10 - \xi_f}{20 + 2\xi_f} P$$

$$- P_{H_2O,eq} = \frac{10 - \xi_f}{20 + 2\xi_f} P$$

La loi d'action de masse donne alors l'équation :

$$\frac{27\xi_f^4}{(10 - \xi)^2 (20 + 2\xi_f)^2} \left(\frac{P}{P^\circ} \right)^2 = K^\circ$$

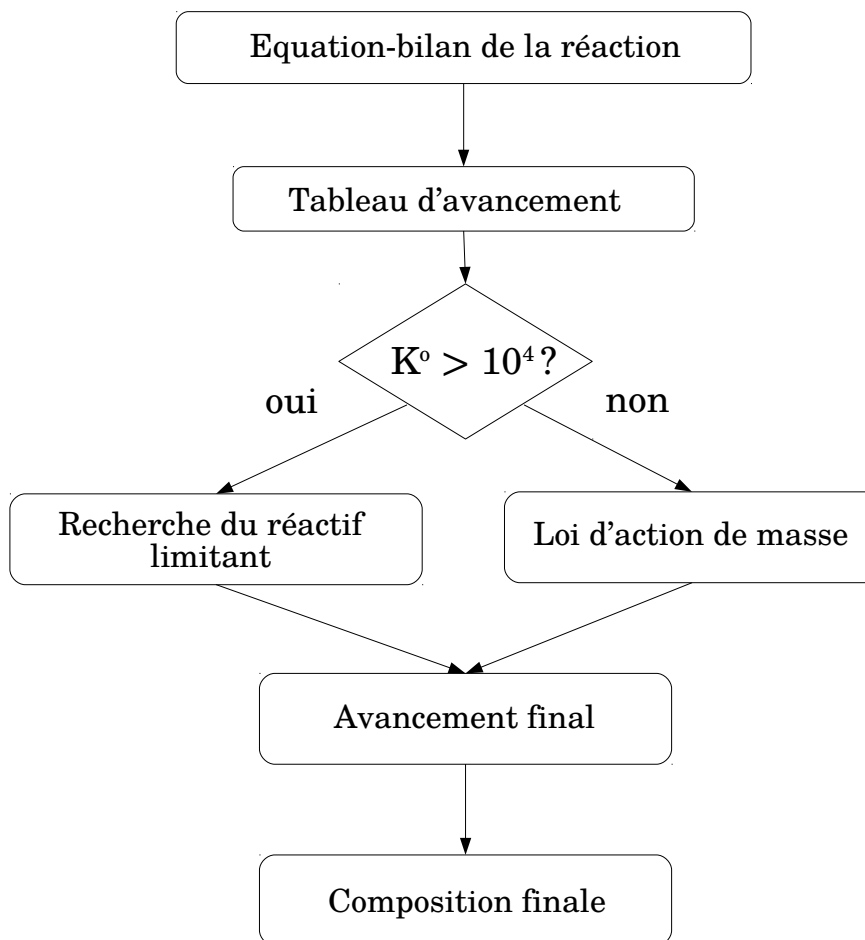
La résolution de l'équation (à la main, à la calculatrice ou sous Python) donne $\xi_f = 3,6$ mol.


On en déduit les quantité de matière des réactifs et des produits à l'état final.

ξ	$CH_4(g)$	$+H_2O(g)$	$= CO(g)$	$+3H_2(g)$
10	10	10	0	0
ξ	$10 - \xi$	$10 - \xi$	ξ	3ξ
ξ_f	$10 - \xi_f = 6,4$ mol	$10 - \xi_f = 6,4$ mol	$\xi_f = 3,6$ mol	$3\xi_f = 10,8$ mol

3.5 Synthèse

Comment réaliser un bilan de matière i.e. déterminer l'état final d'un système siège d'une réaction chimique ?



 Pour les réactions quantitatives, on peut également réaliser le bilan de matière par application de la loi d'action de masse mais les calculs sont alors plus longs que la simple recherche du réactif limitant.