

Description d'un système et évolution vers un état final

#chapitre2

#chimie

Phases et états physiques

Phases

Domaine où les grandeurs intensives sont continues.

Grandeurs extensives

La valeur dépend de l'étendu du système.

Grandeurs intensives

La valeur ne dépend pas de l'étendu du système.

Etats de la matière

Etat gazeux

- Fluide, pas de volume, très compressible.
- Peu d'interaction entre particules.
- Pression d'un fluide : $P = \frac{F_s}{S}$.

Etat liquide

- Fluide, possède un volume, faiblement compressible
- interaction entre particules voisins

Etat solide

- Assemblage compact d'entités, assemblage possible.

- Solides amorphes : arrangement désordonnée.
- Solides cristallins : géométrie régulière.

Système physico-chimique

Définie par la donnée des constituants physico-chimiques.

Composition

Revient à déterminer les quantités de matière dans chaque phase.

Gaz

- $n_g = \sum_{i=1}^N n_i p_i = \frac{n_i}{n_g} p_{tot}$
- $x_i = \frac{n_i}{n_g} p_{tot} = \sum_{i=1}^N p_i$

Solution

- $w_i = \frac{m_i}{m_g} C_i = \frac{n_i}{V}$
- $C_{m,i} = \frac{m_i}{V}$

Activité d'une espèce chimique

Représente l'écart de comportement par rapport à une état standard.

Phase gazeuses :

Pression de référence p^0

- $a_i = \frac{p_i}{p^0}$

Phases condensées :

$$p = p^0 = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ pa}$$

Solide ou liquide

- $a_i = 1$

Espèce dissout

- $a_i = \frac{c_i}{c^0}$

Transformation

Modification de la matière (entièrement ou en partie) présente dans le système.
Peut être physique, chimique ou nucléaire.

Liaison covalente :

Deux atomes se partagent deux électrons, double liant.

Entité chimique :

Ion, molécule ou atome, pas de double liant.

Espèce chimique

Ensemble d'entités chimiques identiques.

Modélisation d'une transformation chimique

Nombres stœchiométriques algébriques

Soit ν_i le coefficient stœchiométrique de l'espèce i :

- Avancement de la réaction en mol : $\xi = \frac{n_i - n_{i,0}}{\nu_i}$
- Quantité de matière : $n_i = n_{i,0} + \nu_i \xi$

Quotient de réaction

$$Q = \prod_{i=1}^N a_i^{\nu_i} = \frac{\prod \text{produits } a_i^{\nu_i}}{\prod \text{réactif } a_i^{\nu_i}}$$

Evolution d'un système lors d'une transformation

Constante thermodynamique d'équilibre :

$$K^0(T) = Q_{eq} = \frac{\prod_{\text{produits}} a_{i,eq}^{\nu_i}}{\prod_{\text{réactif}} a_{i,eq}^{\nu_i}}$$

Critère d'évolution

Tout système où $Q \neq K^0(T)$ n'est pas à l'équilibre.

- Si $Q < K^0(T)$: Q augmente, sens directe.
- Si $Q > K^0(T)$: Q diminue, sens indirecte.

Transformation totale