

Transformation et équilibre chimique

- /1.5 [1] Expliquer en trois phrases succinctes la différence entre avancement final, avancement à l'équilibre et avancement maximal. Aucune comparaison mathématique sur des ξ n'est attendue.

Toute réaction chimique atteint un état final, caractérisé par un avancement final. Dans certains cas, on atteint un équilibre : les réactions en sens direct et indirect se compensent et il reste des réactifs et des produits. Si à l'état final on a consommé en totalité un (ou plusieurs) réactifs, on atteint l'avancement **maximal** : la réaction ne peut plus avancer mais ce n'est pas un équilibre.

- /8.5 [2] On travaille dans une enceinte initialement vide de tout gaz, et de volume $V = 10 \text{ L}$. On insère $n_{\text{BaO}_2}^0 = 0,10 \text{ mol}$ de peroxyde de baryum qui suit la réaction de dissociation suivante :



- a – Dresser un tableau d'avancement et remplir les deux premières lignes.
 b – Déterminez la quantité de matière $n_{\text{O}_2, \text{eq}}$ qui permet d'atteindre l'équilibre ¹.
 c – Déterminer le sens d'évolution du système.
 d – Déterminer ξ_f et remplir la dernière ligne du tableau. Comment s'appelle cette situation finale ?

Équation		$2\text{BaO}_{2(s)}$	\rightleftharpoons	$2\text{BaO}_{(s)}$	$+$	$\text{O}_{2(g)}$	$n_{\text{tot, gaz}}$
Initial (mol)	$\xi = 0$	0,10		0,00		0,00	0,00
Interm. (mol)	ξ	$0,10 - 2\xi$		2ξ		ξ	ξ
Final (mol)	$\xi_f = \xi_{\text{max}}$	0,00		0,10		0,05	0,05

- b – Avec la loi des gaz parfaits et la loi d'action des masses, on a

$$p_{\text{O}_2, \text{eq}} V = n_{\text{O}_2, \text{eq}} RT \Leftrightarrow n_{\text{O}_2, \text{eq}} = \frac{p_{\text{O}_2, \text{eq}} V}{RT}$$

$$\Leftrightarrow n_{\text{O}_2, \text{eq}} = \frac{K^\circ p^\circ V}{RT} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} K^\circ = 0,50 \\ p^\circ = 1,00 \times 10^5 \text{ Pa} \\ V = 10 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \\ T = 1068,15 \text{ K} \end{cases} \quad K^\circ = \frac{p_{\text{O}_2, \text{eq}}}{p^\circ}$$

A.N. : $n_{\text{O}_2, \text{eq}} = 0,056 \text{ mol}$

- c –

$$Q_{r,0} = \frac{\overbrace{p_{\text{O}_2,0}}^{=0}}{p^\circ} = 0$$

On a donc $Q_{r,0} < K^\circ$, et l'évolution se fait en sens direct.

- d – S'il y a équilibre, ça veut dire que $n_{\text{O}_2, \text{eq}} = 0,056 \text{ mol}$ comme déterminé au début. Or, le tableau nous indique que $n_{\text{O}_2, f} = \xi_f$, donc si c'est un équilibre $\xi_{\text{eq}} = 0,056 \text{ mol}$.

L'avancement est maximal si BaO_2 est limitant : on trouve donc ξ_{max} en résolvant $0,10 - 2\xi_{\text{max}} = 0$, c'est-à-dire $\xi_{\text{max}} = 0,050 \text{ mol}$.

La valeur finale ξ_f est la plus petite valeur (en valeur absolue) de ξ_{eq} et ξ_{max} ; or ici $\xi_{\text{eq}} > \xi_{\text{max}}$: il n'y a donc **pas équilibre**, et on a

$$\xi_f = \xi_{\text{max}} = 0,050 \text{ mol}$$

1. On rappelle que $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$.