

## I - Étude de l'équilibre

### I.A -

	$C_2H_4(g)$	+	$H_2O(g)$	=	$C_2H_5OH(g)$
$n_{initial}$	$n_{1,i} = 200$		$n_{2,i} = 200$		$n_{3,i} = 0$
$n_{final}$	$n_{1,f} = 200 - \xi_{eq}$		$n_{2,f} = 200 - \xi_{eq}$		$n_{3,f} = \xi_{eq}$

à  $T_1 = 298\text{ K}$

$$\blacktriangleright \Delta_r H^\circ(T_1) = \Delta_f H^\circ_{C_2H_5OH}(T_1) - \Delta_f H^\circ_{C_2H_4}(T_1) - \Delta_f H^\circ_{H_2O}(T_1).$$

$$\text{A.N. } \boxed{\Delta_r H^\circ(T_1) = -235.1 - 52.3 + 241.8 = -45.6\text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}}$$

$$\blacktriangleright \Delta_r S^\circ(T_1) = S^\circ_{m,C_2H_5OH}(T_1) - S^\circ_{m,C_2H_4}(T_1) - S^\circ_{m,H_2O}(T_1).$$

$$\text{A.N. } \boxed{\Delta_r S^\circ(T_1) = 282.7 - 188.7 - 219.5 = -125.5\text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}}$$

$$\blacktriangleright \Delta_r G^\circ(T_1) = \Delta_r H^\circ(T_1) - T_1 \Delta_r S^\circ(T_1)$$

$$\text{A.N. } \boxed{\Delta_r G^\circ(T_1) = -45.6 * 10^3 - 298 * (-125.5) = -8.20\text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}}$$

### I.B -

- $\blacktriangleright \sum_{i,gaz} \nu_i = -1 < 0$ , donc selon la loi de modération de Le Chatelier, cet équilibre évolue dans le sens direct, qui diminue la quantité totale du gaz.
- $\blacktriangleright$  Comme  $\Delta_r H^\circ(T_1) < 0$ , c'est une réaction exothermique. Selon la loi de modération de Van't Hoff, une élévation de température provoque donc une évolution dans le sens indirect.

Donc pour la synthèse industrielle, on va introduire une pression élevée, mais un compromis pour la température entre la vitesse de réaction et de l'équilibre est nécessaire. On peut donc choisir une température de  $300^\circ\text{C}$ , qui n'est pas trop haute ni trop basse pour une réaction industrielle.

## II - Évolution de l'équilibre et rendement

### II.A -

Par l'approximation d'Ellingham, on a  $\Delta_r G^\circ(T_2) = \Delta_r G^\circ(T_1) - (T_2 - T_1) * \Delta_r S^\circ$ .

$$\text{A.N. } \Delta_r G^\circ(T_2) = -8.2 * 10^3 - 275 * (-125.5) = 2.6 * 10^4\text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\text{On a donc } K^\circ(T_2) = \exp\left(-\frac{\Delta_r G^\circ(T_2)}{RT_2}\right) = \exp\left(-\left(\frac{2.6*10^4}{8.31*573}\right)\right) = 4.3 * 10^{-3}$$

$$\text{Et on a } K^\circ(T_2) = Q_r = \frac{n_{C_2H_5OH}}{n_{C_2H_4} n_{H_2O}} \frac{P^\circ}{P} = \frac{\xi_{eq}(400-\xi_{eq}) * 1}{(200-\xi_{eq})^2 * 70}.$$

Finalement,  $\xi_{eq} = 24.2 \text{ mol}$

## II.B -

Si on ajoute  $10,0 \text{ mol}$  d'eau au mélange obtenu à l'équilibre, à pression et température constantes, seulement  $n_{H_2O}$  et  $n$  sont changés :  $n'_{H_2O} = 210 - \xi_{eq}$ ,  $n' = 410 - \xi_{eq}$ .

On a donc  $Q = \frac{24.2 \cdot (410 - 24.2)}{(200 - 24.2)(210 - 24.2) \cdot 70} = 4.1 \cdot 10^{-3}$

Comme  $Q$  diminue, alors  $Q < K^\circ(T_2)$ , il faut que la réaction évolue dans le sens  $\boxed{\text{direct}}$

Et on a  $\Delta_r G = \Delta_r G^\circ(T) + RT \ln(Q) = 2.6 \cdot 10^4 + 8.314 \cdot 573 \cdot \ln(4.1 \cdot 10^{-3}) = -186.2 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$

Car  $\Delta_r G < 0$ , on arrive à le même résultat : l'équilibre évolue dans le sens direct

## II.C -

Si on veut augmenter  $\eta$ , on a besoin d'augmenter  $\xi_{eq}$ , c'est-à-dire l'évolution de cette réaction dans le sens direct, sans augmenter  $n_{C_2H_4,i}$ . Il faut que  $Q_r$  diminue.

On peut donc

- Rajouter plus de  $H_2O_{(g)}$  : Par la dérivation logarithmique, on a

$$\frac{dQ_r}{Q_r} = \frac{dn}{n} - \frac{dn_{H_2O}}{n_{H_2O}} = dn_{H_2O} \left( 1 - \frac{n}{n_{H_2O}} \right)$$

Comme  $n_{H_2O} < n$ , pour que  $dQ_r < 0$ , il faut  $\boxed{dn_{H_2O} > 0}$

- Enlever  $C_2H_5OH$  formé :  $n_{C_2H_5OH}$  et  $n$  sont tous diminués,  $Q_r$  diminue aussi.