Thibault Hiron–Bédiée

Variance et équilibre

Variance Variance réduite Rupture d'équilibre Paramètres

Optimisatio thermodyna mique

Modification de *h*Modification de *G* 

à T constante à p et V constants

à T et V constants

Enjeux industriels

# LC — Optimisation d'un procédé chimique (CPGE, MP)

### Thibault Hiron-Bédiée

### 6 mai 2022

Élément imposé : Mettre en œuvre un protocole pour étudier l'influence de la

température ou de la pression sur un déplacement d'équilibre

chimique.

Niveau : CPGE deuxième année — MP

Prérequis : Programme de première année (MPSI)

Dosages acide-base

Thermodynamique de deuxième année jusqu'à ce cha-

pitre (premier et second principe)

Thibault Hiron–Bédié

Variance e équilibre Variance

Variance réduite Rupture d'équilib Paramètres d'influence

thermodyna mique

Le Chatelier
Modification de K°
Modification de Q,
à T constante
à p et V constants
à T et V constants
à T constante

Enjeux industriels

### Extrait du bulletin officiel

Notions et contenus	Capacités exigibles
8. Thermodynamique de la transformation chimique 8.2 Application du second principe à la transformation chimique	
Relation entre $\Delta_r \mathcal{G},  \mathcal{K}^o$ et $\mathcal{Q}_r.$	Prévoir le sens d'évolution à $p$ et $T$ fixées d'un système physicochimique dans un état donné à l'aide de $Q_r$ et $K^o$ . Énoncer et exploiter la relation de Van't Hoff.
	Déterminer la valeur de la constante d'équilibre thermodynamique à une température quelconque.
	Déterminer la valeur d'une constante d'équilibre thermodyna- mique d'une réaction par combinaison de constantes d'équilibres thermodynamiques d'autres réactions.
État final d'un système : équilibre chimique ou transformation totale.	Déterminer la composition chimique d'un système dans l'état fi- nal, en distinguant les cas d'équilibre chimique et de transforma- tion totale, pour une transformation modélisée par une réaction chimique unique.
	Mettre une œuvre une démarche expérimentale pour détermi- ner la valeur d'une constante d'équilibre en solution aqueuse.
Caractérisation de l'état intensif d'un sys- tème en équilibre : nombre de degrés de li- berté (variance) d'un système à l'équilibre.	Reconnaître si une variable intensive est ou non un paramètre d'influence d'un équilibre chimique.
	Recenser les variables intensives pertinentes de description du système à l'équilibre pour en déduire le nombre de degrés de liberté de celui–ci.
Optimisation d'un procédé chimique :	Identifier les paramètres d'influence et leur sens d'évolution pour

secondaire indésirable

pects environnementaux inclus.

par modification de la valeur de  $K^o$ :

tient réactionnel

par modification de la valeur du quo-

optimiser une synthèse ou minimiser la formation d'un produit

Approche documentaire : à partir de documents décrivant une unité de synthèse industrielle, analyser les choix industriels, as-

Thibault Hiron–Bédiée

#### Variance et équilibre

Variance réduite
Rupture d'équilibre
Paramètres
d'influence

Optimisation thermodynamique

Le Chatelier

Modification de  $K^o$ Modification de  $Q_s$ 

à p et V constants à T et V constants

Enjeux industriels

# Optimisation d'un procédé chimique

# I. Facteurs d'équilibre et variance d'un système

- 1. Variance d'un système chimique
- 2. Influence des conditions expérimentales : variance réduite
- 3. Déplacement et rupture d'équilibre
- 4. Paramètres d'influence

### II. Optimisation d'hermodynamique d'un processus

- 1. Principe de modération de Le Chatelier
- 2. Modification de la valeur de la constante d'équilibre  $K^o$
- 3. Modification de la valeur du quotient réactionnel  $Q_r$ 
  - Modification de la pression à température constante
  - Ajout d'un gaz à presison et volume constant
  - Ajout d'un gaz à température et volume constant
  - Modification de la pression à température constante
- III. Enjeux industriels : exemple de la synthèse de l'ammoniac, procédé Haber–Bosch

Thibault

Variance et équilibre Variance

Variance réduite Rupture d'équilibr Paramètres d'influence

Optimisation thermodyna-mique

Le Chatelier Modification de K°

à p et V constants à T et V constant

Enjeux industriels

# Application du premier principe à la transformation chimique

- I. Facteurs d'équilibre et variance d'un système
  - 1. Variance d'un système chimique
  - 2. Influence des conditions expérimentales : variance réduite
  - 3. Déplacement et rupture d'équilibre
  - 4. Paramètres d'influence
- II. Optimisation d'hermodynamique d'un processus
  - 1. Principe de modération de Le Chatelier
  - 2. Modification de la valeur de la constante d'équilibre  $K^o$
  - 3. Modification de la valeur du quotient réactionnel  $Q_r$ 
    - Modification de la pression à température constante
    - Ajout d'un gaz à presison et volume constant
    - Ajout d'un gaz à température et volume constant
    - Modification de la pression à température constante
- III. Enjeux industriels : exemple de la synthèse de l'ammoniac, procédé Haber–Bosch

chimique

Thibault Hiron–Bédiée

Variance e équilibre

Variance réduite

Optimisation

mique

Modification de K°

Modification de A

Modification de Q,

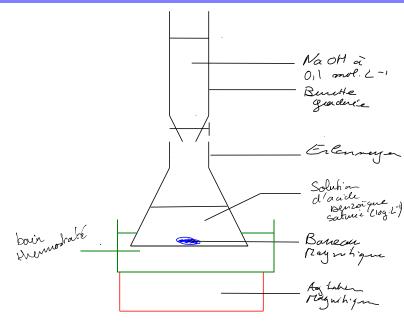
à not V constan

à T et V constan

à T et V constant
à T constante

Enjeux industriels

# Modification de la valeur de la constante d'équilibre $K^o$



# Application du premier principe à la transformation chimique

Thibault Hiron–Bédié

Variance et équilibre <sub>Variance</sub>

Variance réduite Rupture d'équilibre Paramètres d'influence

Optimisatio thermodyna mique

Modification de K°

Modification de Q.

à T constante

à p et V constants

Enjeux industriels

### I. Facteurs d'équilibre et variance d'un système

- 1. Variance d'un système chimique
- 2. Influence des conditions expérimentales : variance réduite
- 3. Déplacement et rupture d'équilibre
- 4. Paramètres d'influence

### II. Optimisation d'hermodynamique d'un processus

- 1. Principe de modération de Le Chatelier
- 2. Modification de la valeur de la constante d'équilibre  $K^o$
- 3. Modification de la valeur du quotient réactionnel  $Q_r$ 
  - Modification de la pression à température constante
  - Ajout d'un gaz à presison et volume constant
  - Ajout d'un gaz à température et volume constant
  - Modification de la pression à température constante
- III. Enjeux industriels : exemple de la synthèse de l'ammoniac, procédé Haber–Bosch

Variance réduite Rupture d'équilible Paramètres d'influence

Optimisatio thermodyna mique

Le Chatelier

Modification de *h* 

Modification de  $Q_r$ 

à p et V constants à T et V constants

Enjeux industriels

- Modification de la pression à température constante
- Ajout d'un gaz à presison et volume constant
- Ajout d'un gaz à température et volume constant
- Modification de la pression à température constante

# Rappel:

$$Q_r = \prod_{i \text{ gaz}} \left(\frac{p_i}{p^o}\right)_i^{\nu} \prod_{j \text{ solut\'e}} (a_j)_j^{\nu}$$

$$Q_r = \left[\prod_{i \text{ gaz}} (x_i)_i^{\nu} \prod_{j \text{ solut\'e}} (a_j)_j^{\nu}\right] \left(\frac{p}{p^o}\right)^{\Delta_r \nu_{\text{gaz}}}$$

où 
$$\Delta_r \nu_{\rm gaz} = \sum_{i \, {\rm gaz}} \nu_i$$

Thibault Hiron–Bédiée

Variance e équilibre

Variance réduite Rupture d'équilibre Paramètres

Optimisatio thermodyna mique

Le Chatelier

Modification de  $K^o$ Modification de  $Q_r$ 

à p et V constant à T et V constan

Enjeux industriels

# Application du premier principe à la transformation chimique

### I. Facteurs d'équilibre et variance d'un système

- 1. Variance d'un système chimique
- 2. Influence des conditions expérimentales : variance réduite
- 3. Déplacement et rupture d'équilibre
- 4. Paramètres d'influence

### II. Optimisation d'hermodynamique d'un processus

- 1. Principe de modération de Le Chatelier
- 2. Modification de la valeur de la constante d'équilibre  $K^o$
- 3. Modification de la valeur du quotient réactionnel  $Q_r$ 
  - Modification de la pression à température constante
  - Ajout d'un gaz à presison et volume constant
  - Ajout d'un gaz à température et volume constant
  - Modification de la pression à température constante
- III. Enjeux industriels : exemple de la synthèse de l'ammoniac, procédé Haber–Bosch

# Synthèse de l'ammoniac, procédé Haber–Bosch

chimique

Thibault

Hiron–Bédiée

Optimisation

d'un procédé

Variance et équilibre Variance

Variance réduite Rupture d'équilibre Paramètres

Optimisation thermodyna mique

Le Chatelier

Modification de 6

à p et V constant à T et V constant

Enjeux industriels

