

Equilibres

Equilibre chimique et constante d'équilibre

Thermodynamique des mélanges

Principe de Le Chatelier (qualitatif)

Loi de Van't Hoff (quantitatif)

EPFL Equilibre chimique

2

Certaines réactions sont totales (ou complètes), c'est-à-dire que les réactifs sont consommés jusqu'à épuisement total de l'un d'eux (le réactif limitant).

Les réactions de combustion sont des exemples de réactions totales:

Exemple : combustion de l'éthanol



D'autres réactions s'arrêtent avant d'être totales (même s'il resterait encore suffisamment de réactifs pour qu'elles continuent). On dit de ces réactions qu'elles ont atteint l'équilibre. A l'équilibre, la réaction inverse se produit à la même vitesse que la réaction directe.

Toutes les réactions peuvent être considérée comme des équilibres chimiques entre la réaction directe et inverse. Dans le cas d'une réaction totale, on dira que la réaction est totalement déplacée vers la droite (vers les produits).

Exemple : production de l'acide iodhydrique



Constante d'équilibre

Un équilibre chimique est caractérisé par une constante d'équilibre K . Cette constante d'équilibre est reliée à l'enthalpie libre standard $\Delta_r G^\circ$ par la relation suivante :

$$\Delta_r G^\circ = -R T \ln K$$

K dépend des **activités** des réactifs et des produits.

$$K = \prod_i [a_i]_{\text{éq}}^{\nu_i}$$

Pour un équilibre type : $a A + b B \rightleftharpoons c C + d D$

$$K = \frac{[a_C]_{\text{éq}}^c \cdot [a_D]_{\text{éq}}^d}{[a_A]_{\text{éq}}^a \cdot [a_B]_{\text{éq}}^b}$$

Les activités sont des valeurs sans unité qui caractérisent l'activité chimique de l'espèce. Elles sont intimement liées à la concentration molaire pour les solutions et à la pression partielle pour les gaz. Par définition, l'activité d'un corps pur est de 1.

Activités, pressions et concentrations

- Pour un corps pur, l'activité est de 1.
- Un solide est toujours considéré comme un corps pur avec une activité de 1.
- Pour un gaz réel, l'activité du gaz (aussi appelé fugacité f) est reliée à sa **pression partielle** p_i par un **coefficient de fugacité** ϕ_i (sans unité) et par une **pression standard** $p^\circ = 1 \text{ bar}$

$$a_i = \phi_i \left(\frac{p_i}{p^\circ} \right)$$

- Pour un gaz parfait, le coefficient de fugacité est de 1 et l'activité correspond donc à la pression partielle normalisée par la pression standard de 1 bar.
- Pour une solution réelle, l'activité a_i de l'espèce i est reliée à sa **concentration molaire** c_i par un **coefficient d'activité** γ_i (sans unité) et par une **concentration standard** $c^\circ = 1 \text{ mol/L}$:

$$a_i = \gamma_i \left(\frac{c_i}{c^\circ} \right)$$

- Pour une solution idéale (solutions très diluées), le coefficient d'activité est de 1 et les activités correspondent aux concentrations molaires normalisées par une concentration standard $c^\circ = 1 \text{ mol/L}$.

L'activité mesure essentiellement la différence entre un système réel et un système idéal. Dans le cadre de ce cours, nous nous intéressons uniquement aux systèmes idéaux. Le concept d'activité n'est donc pas crucial pour nous. (γ_i sera toujours égal à 1 dans nos calculs).

Néanmoins, le concept d'activité permet :

- D'écrire correctement les constantes d'équilibre des réactions hétérogènes (en omettant les solides et les liquides purs dont l'activité = 1)
- De travailler avec des expressions sans unités (possibilité d'utiliser les logarithmes; permet la comparaison de réactions hétérogènes mélangeant pressions et concentrations...)

Constante d'équilibre et concentrations

La constante d'équilibre K peut être exprimée en termes de concentration molaire.

$$K = \frac{[a_C]_{\text{éq}}^c \cdot [a_D]_{\text{éq}}^d}{[a_A]_{\text{éq}}^a \cdot [a_B]_{\text{éq}}^b} = \frac{\left(\gamma_C \frac{[c_C]_{\text{éq}}}{c^\circ}\right)^c \cdot \left(\gamma_D \frac{[c_D]_{\text{éq}}}{c^\circ}\right)^d}{\left(\gamma_A \frac{[c_A]_{\text{éq}}}{c^\circ}\right)^a \cdot \left(\gamma_B \frac{[c_B]_{\text{éq}}}{c^\circ}\right)^b}$$

Les coefficients d'activité peuvent être sortis et mis avec la constante d'équilibre afin de définir une nouvelle constante d'équilibre K_c pour les concentrations.

$$K_c = \frac{\left(\frac{[c_C]_{\text{éq}}}{c^\circ}\right)^c \cdot \left(\frac{[c_D]_{\text{éq}}}{c^\circ}\right)^d}{\left(\frac{[c_A]_{\text{éq}}}{c^\circ}\right)^a \cdot \left(\frac{[c_B]_{\text{éq}}}{c^\circ}\right)^b}$$

Vu que $c^\circ = 1 \text{ mol/L}$, celles-ci sont souvent négligées dans l'expression de K_c . Mais K_c reste toujours sans unité (malgré ce que l'on trouve dans certains livres).

Constante d'équilibre et pressions

De manière similaire aux concentrations pour les solutions, la constante d'équilibre K peut être exprimée en termes de pressions partielles pour les gaz.

$$K = \frac{[a_C]_{\text{éq}}^c \cdot [a_D]_{\text{éq}}^d}{[a_A]_{\text{éq}}^a \cdot [a_B]_{\text{éq}}^b} = \frac{\left(\phi_C \frac{[p_C]_{\text{éq}}}{p^\circ}\right)^c \cdot \left(\phi_D \frac{[p_D]_{\text{éq}}}{p^\circ}\right)^d}{\left(\phi_A \frac{[p_A]_{\text{éq}}}{p^\circ}\right)^a \cdot \left(\phi_B \frac{[p_B]_{\text{éq}}}{p^\circ}\right)^b}$$

En mettant les ϕ avec K , on retrouve l'expression pour les gaz parfaits :

$$K_p = \frac{\left(\frac{[p_C]_{\text{éq}}}{p^\circ}\right)^c \cdot \left(\frac{[p_D]_{\text{éq}}}{p^\circ}\right)^d}{\left(\frac{[p_A]_{\text{éq}}}{p^\circ}\right)^a \cdot \left(\frac{[p_B]_{\text{éq}}}{p^\circ}\right)^b}$$

Vu que, généralement, $p^\circ = 1$ bar, on néglige souvent p° dans l'expression de K_p . Mais comme K_c , K_p reste toujours sans unité.

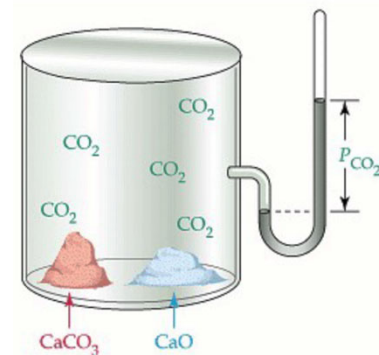
Equilibre dans un mélange hétérogène

Equilibre homogène :

- Equilibre chimique dans lequel tous les réactifs et les produits sont dans la **même phase**.
- **Exemple :** $\text{N}_2 (\text{g}) + 3 \text{H}_2 (\text{g}) \rightleftharpoons 2 \text{NH}_3 (\text{g})$

Equilibre hétérogène :

- Equilibre chimique dans lequel **plusieurs phases** sont présentes.
- Si des solides ou des liquides purs sont impliqués dans un équilibre, leur concentration (pression) est constante et n'apparaît donc pas dans l'expression de la constante d'équilibre de la réaction.
- **Exemple :** $\text{CaCO}_3 (\text{s}) \rightleftharpoons \text{CaO} (\text{s}) + \text{CO}_2 (\text{g})$



Constante d'équilibre des mélanges hétérogènes



Les solides étant considérés comme des corps purs, leurs activités sont de 1. La constante d'équilibre dans ce cas précis est donc juste la pression en CO_2 .

$$K_p = \frac{p_{\text{CO}_2}}{p^\circ}$$

L'indice p de K_p indique ici qu'il s'agit d'une constante d'équilibre pour des pressions.

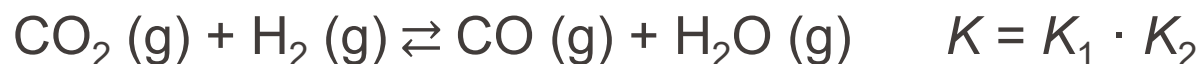
$$\text{A } 298 \text{ K, } \Delta_r G^\circ = 100,626 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}, \Rightarrow K = 2,3 \cdot 10^{-18} = \frac{p_{\text{CO}_2}}{p^\circ}$$

$$\Rightarrow p_{\text{CO}_2} = 2,3 \cdot 10^{-18} \text{ bar}$$

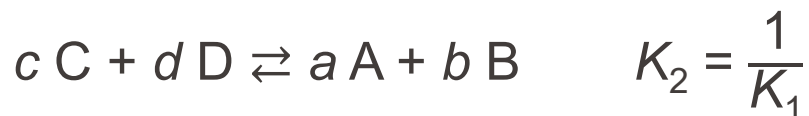
Même si $\Delta_r G^\circ > 0$, une très petite quantité de produit peut se former pour atteindre l'équilibre !

Combinaison de constantes d'équilibre

- Les constantes de 2 ou plusieurs équilibres peuvent être combinées pour déterminer la constante d'un autre équilibre.



- Lorsqu'un équilibre est inversé, on inverse également la constante d'équilibre.



$\Delta_r G^\circ$ et chemin réactionnel

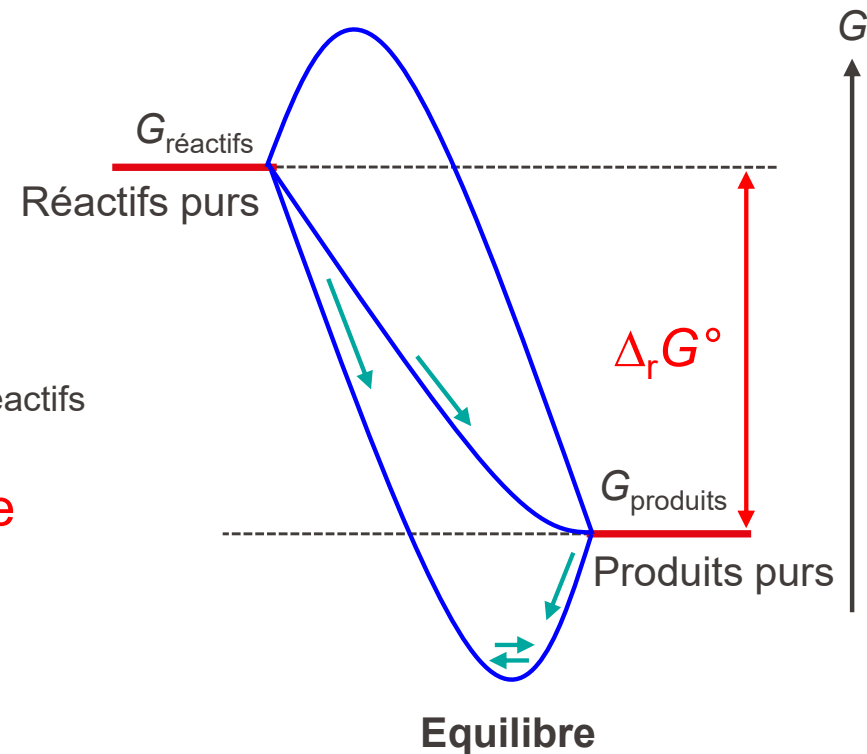
Pourquoi les équilibres existent-ils ?

$\Delta_r G^\circ$ défini dans les conditions standard 1 bar et à 298 K en partant de réactifs purs pour une réaction complète formant des produits purs.

$\Delta_r G^\circ$ est une fonction d'état $\Delta_r G^\circ = G_{\text{produits}} - G_{\text{réactifs}}$
 \Rightarrow ne dépend pas du chemin

Que se passe-t-il si la variation de l'enthalpie libre le long du chemin réactionnel augmente ?
 \rightarrow Perte de spontanéité, la réaction s'arrête.

Un minimum de l'enthalpie libre lors de l'avancement de la réaction ($dG = 0$) correspond à un équilibre. La composition ne change plus car la réaction directe et inverse sont à l'équilibre.



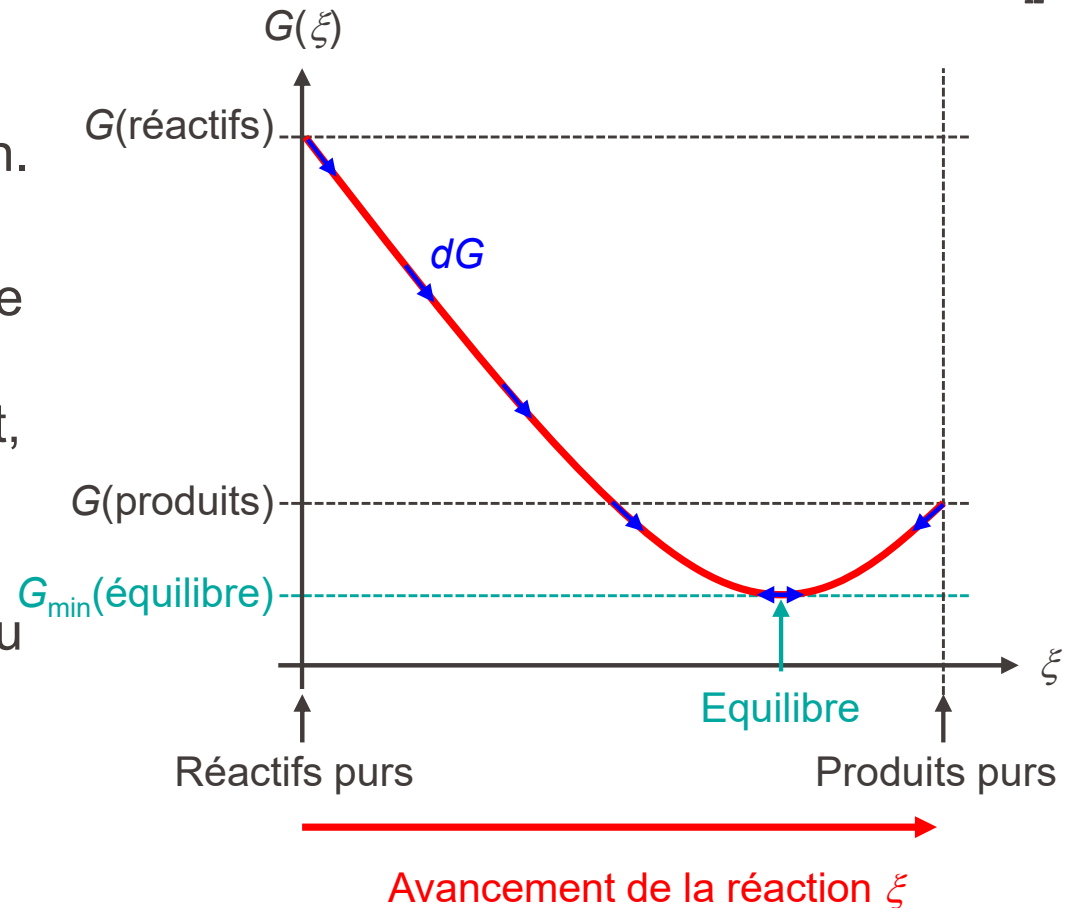
Relation entre G et le chemin réactionnel

Le chemin entre les réactifs et les produits dépend de la variation de l'enthalpie libre G au cours de la réaction.

La réaction avance afin de minimiser G , par pas infinitésimaux dG , jusqu'à ce que G du mélange réactionnel atteigne une valeur minimum. Lorsque G_{\min} est atteint, $dG = 0$.

Si le minimum est atteint pour les produits purs, la réaction est complète ou totale (avancement maximum).

Si le minimum est atteint pour un mélange réactifs + produits, on parle d'équilibre chimique.



Avancement de la réaction ξ

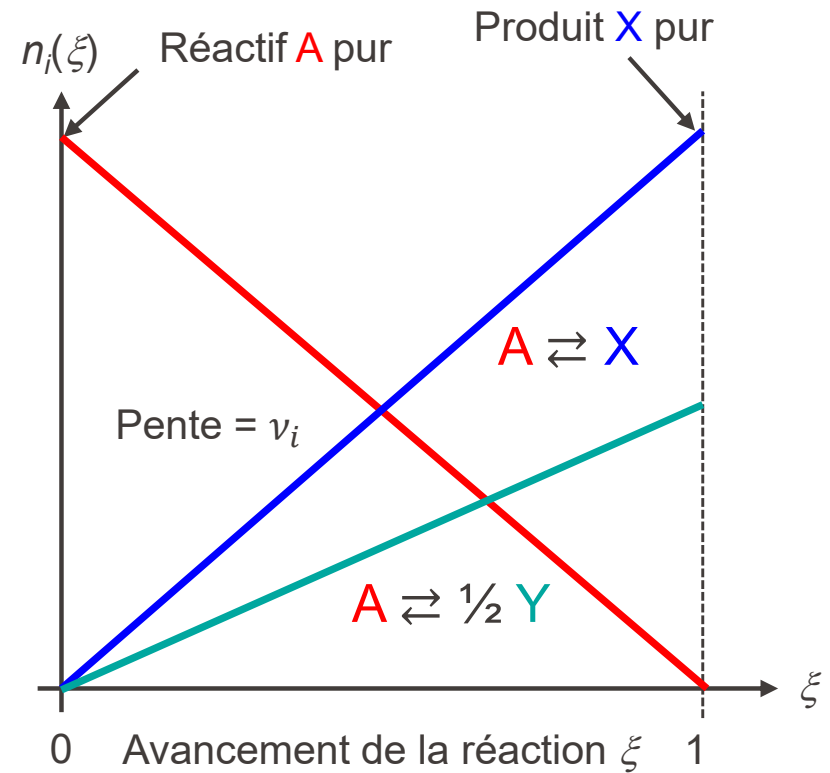
L'avancement de la réaction ξ est un paramètre (en mol) faisant varier la quantité de matière des réactifs et des produits au cours de la réaction. Pour une espèce réactionnelle i :

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

La variation du nombre de mole de i au cours de la réaction sera :

$$dn_i = \nu_i d\xi$$

Les coefficients stœchiométriques ν_i sont positifs pour les produits et négatifs pour les réactifs. Afin de simplifier la valeur maximale de l'avancement de la réaction, on choisit les ν_i de telle façon que $\xi_{\max} = 1$ pour la réaction totale.



$\Delta_r G$ et spontanéité en fonction de ξ

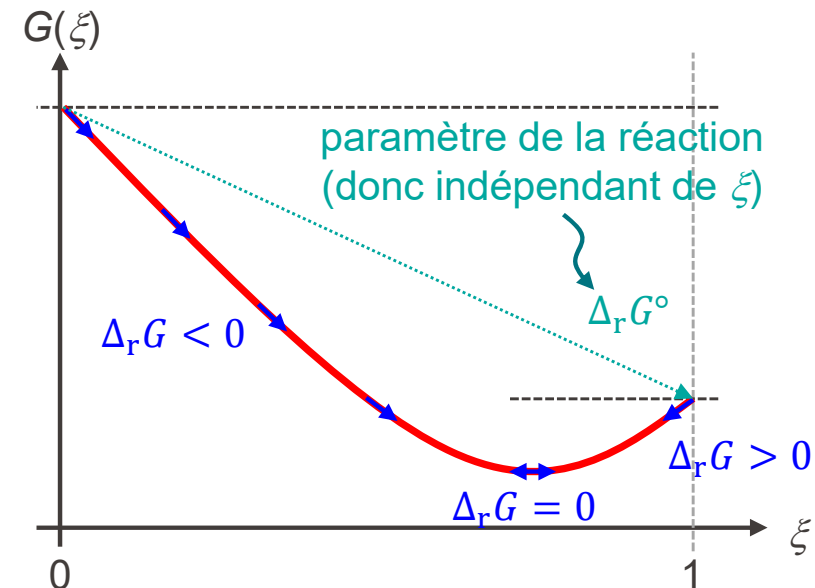
La variation (à p et T constantes) de G en fonction de l'avancement de la réaction ξ est l'enthalpie libre de réaction $\Delta_r G$. Elle détermine si la réaction avance, recule ou stagne.

$$\Delta_r G = \left(\frac{\partial G}{\partial \xi} \right)_{p,T}$$

$\Delta_r G$ dépend de la composition de la réaction et décrit sa spontanéité à cette composition (qui correspond à un ξ donné).

Lorsque $\Delta_r G < 0$, la réaction est spontanée et la réaction avance. Lorsque $\Delta_r G > 0$, la réaction inverse se produit et la réaction recule (par rapport au sens donné par l'équation chimique).

Lorsque $\Delta_r G = 0$, la réaction est à l'équilibre. La réaction n'est plus spontanée ni dans un sens, ni dans l'autre. La réaction n'avance plus et la composition reste constante.



Tout comme la grandeur standard $\Delta_r G^\circ$, l'enthalpie libre de réaction $\Delta_r G$, qui dépend de la composition, peut être exprimée comme la différence entre la somme de l'enthalpie libre molaire des produits et celle des réactifs :

$$\Delta_r G = \sum_{\text{produits } y} |\nu_y| \cdot G_{m,y} - \sum_{\text{réactifs } x} |\nu_x| \cdot G_{m,x}$$

L'enthalpie molaire $G_{m,i}$ d'une substance i (réactif ou produit) s'appelle le **potentiel chimique de i (μ_i)**. Il correspond à la variation de G lorsqu'on change la quantité de i dans le mélange en gardant les autres paramètres constants (p , T et $n_{j \neq i}$) :

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{p,T,n_{j \neq i}} \quad \Delta_r G = \sum_i \nu_i \cdot \mu_i$$

μ_i donne une information sur la potentialité d'un corps à être chimiquement actif. C'est un paramètre qui définit à quel point une espèce i affecte l'enthalpie libre G lorsqu'elle disparaît (réactif consommé) ou apparaît (produit créé).

Potentiel chimique μ d'un corps pur et dans un mélange

Le potentiel chimique peut être défini pour un corps pur dans les conditions standard. On parle alors de potentiel chimique standard μ_i° .

On peut montrer à partir de la loi des gaz parfait, que de faire passer un gaz A pur dans les conditions standard (à $p^\circ = 1$ bar) dans un mélange où sa pression partielle devient p_A entraîne un changement de potentiel chimique

$$\mu_A - \mu_A^\circ = R T \ln \left(\frac{p_A}{p^\circ} \right)$$

De manière générale, pour n'importe quel type de substance i , la correction dû au mélange est proportionnelle au logarithme de son activité dans le mélange. Le potentiel chimique est défini donc comme suit :

$$\mu_i = \mu_i^\circ + R T \ln(a_i)$$

$\Delta_r G$ et quotient de réaction Q

En réécrivant l'enthalpie de réaction en fonction du potentiel chimique et en séparant le potentiel chimique en un potentiel standard + une correction dans le mélange, on trouve la relation suivante:

$$\Delta_r G = \sum_i \nu_i \mu_i^\circ + \sum_i \nu_i R T \ln(a_i)$$

Le premier terme n'est autre que le $\Delta_r G^\circ$ que l'on connaît. Le second terme peut être transformé à partir des propriétés des logarithme comme le logarithme d'un produit d'activités à la puissance de leur coefficient stœchiométrique respectifs :

$$\Delta_r G = \Delta_r G^\circ + R T \ln \prod_i a_i^{\nu_i}$$

Ce produit des activités est appelé **quotient de réaction Q** . Il ne doit pas être confondu avec la chaleur Q . Pour une réaction type $a A + b B \rightleftharpoons c C + d D$

$$Q = \prod_i a_i^{\nu_i} = \frac{a_C^c \cdot a_D^d}{a_A^a \cdot a_B^b}$$

$$\Delta_r G = \Delta_r G^\circ + R T \ln Q$$

A l'équilibre, $\Delta_r G = 0$ et le quotient de réaction Q devient la constante d'équilibre K :

$$\Delta_r G = 0 = \Delta_r G^\circ + R T \ln K$$

On retrouve donc bien la relation donnée au début :

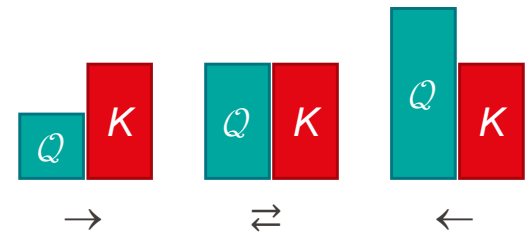
$$\Delta_r G^\circ = -R T \ln K$$

$$\Rightarrow K = \exp\left(\frac{-\Delta_r G^\circ}{R T}\right)$$

$\Delta_r G$ peut aussi être exprimée en fonction du rapport Q / K .

$$\Delta_r G = R T \ln \frac{Q}{K}$$

- Si $Q < K$, $\Delta_r G < 0$ (spontané dans le sens direct).
- Si $Q > K$, $\Delta_r G > 0$ (non-spontané dans le sens direct, spontané dans le sens inverse).
- Si $Q = K$, $\Delta_r G = 0$ (équilibre, pas de préférence entre direct et inverse).



Exemple : Constante d'équilibre

Soit la réaction suivante dans les conditions standard :



Trouver la constante d'équilibre à 298 K.

	$\Delta_f H^\circ_{298 \text{ K}} [\text{kJ mol}^{-1}]$	$S^\circ_{298 \text{ K}} [\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}]$
$\text{H}_2 (\text{g})$	0	130,7
$\text{I}_2 (\text{g})$	62,438	260,7
$\text{HI} (\text{g})$	26,480	206,6

$$\Delta_r H^\circ = 2 \cdot 26'480 - 62'438 = -9'478 \text{ J mol}^{-1}$$

$$\Delta_r S^\circ = 2 \cdot 206,6 - 260,7 - 130,7 = 21,8 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

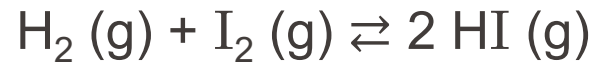
$$\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ = -9'478 - 298 \cdot 21,8 = -15'974,4 \text{ J mol}^{-1}$$

$$K = \exp\left(\frac{-\Delta_r G^\circ}{RT}\right) = \exp\left(\frac{15'974,4}{8,314 \cdot 298}\right) \cong \exp(6,4476) \cong \underline{631,19}$$



Iode gazeux

Exemple : Constante d'équilibre



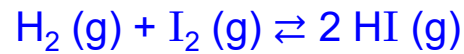
En partant d'un mélange de 1 mole de chaque réactif dans un volume de 50 L, quelles sont les pressions partielles de chaque gaz à l'équilibre (on suppose que tous les gaz sont des gaz parfaits) ?

$$pV = nRT \Rightarrow p_{\text{I}_2,0} = p_{\text{H}_2,0} = \frac{1 \cdot 8,314 \cdot 298}{50 \cdot 10^{-3}} \cong 49551 \text{ Pa} \cong 0,50 \text{ bar (pressions partielles initiales)}$$

$$\Rightarrow P = p_{\text{I}_2,0} + p_{\text{H}_2,0} = 1 \text{ bar (pression totale } P)$$

	n_i (initial) [mol]	n_i (équilibre) [mol]	Pression à l'équilibre [Pa]
$\text{H}_2 (\text{g})$	1	$1 - \xi$	$\frac{(1 - \xi) R T}{V}$
$\text{I}_2 (\text{g})$	1	$1 - \xi$	$\frac{(1 - \xi) R T}{V}$
$\text{HI} (\text{g})$	0	2ξ	$\frac{2 \xi R T}{V}$

Exemple : Constante d'équilibre



$$K \cong 631,19 = \frac{\left(\frac{p_{\text{HI}}}{p^\circ}\right)^2}{\left(\frac{p_{\text{I}_2}}{p^\circ}\right)^1 \left(\frac{p_{\text{H}_2}}{p^\circ}\right)^1} = \frac{\left(\frac{2 \xi R T}{V}\right)^2}{\left(\frac{(1-\xi) R T}{V}\right)^1 \left(\frac{(1-\xi) R T}{V}\right)^1} = \frac{(2 \xi)^2}{(1-\xi)^2}$$

$$\Rightarrow (K - 4)\xi^2 - 2 K \xi + K = 0 \quad a x^2 + b x + c = 0$$

$$\xi = \frac{2 K \pm \sqrt{4 K^2 - 4 K^2 + 16 K}}{2 K - 8}$$

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4 a c}}{2 a}$$

$$= \frac{2 K \pm 4\sqrt{K}}{2 K - 8} = \cancel{1,086} \text{ ou } \boxed{0,926}$$

Vérification K avec $p_{\text{éq}}$ trouvées
 $K = 631$

	n_i (équilibre) [mol]	Pression à l'équilibre [Pa]
$\text{H}_2 (\text{g})$	$1 - 0,926 \cong 0,074$	$\frac{0,074 R T}{V} \cong 3654 \text{ Pa}$
$\text{I}_2 (\text{g})$	$1 - 0,926 \cong 0,074$	$\frac{0,074 R T}{V} \cong 3654 \text{ Pa}$
$\text{HI} (\text{g})$	$2 \cdot 0,926 \cong 1,852$	$\frac{1,852 R T}{V} \cong 91795 \text{ Pa}$

Principe de Le Chatelier

Si on applique une contrainte (qui perturbe l'équilibre) à un système en équilibre dynamique, l'équilibre tend à se déplacer dans le sens qui **minimise l'effet de cette contrainte**.

Contraintes possibles :

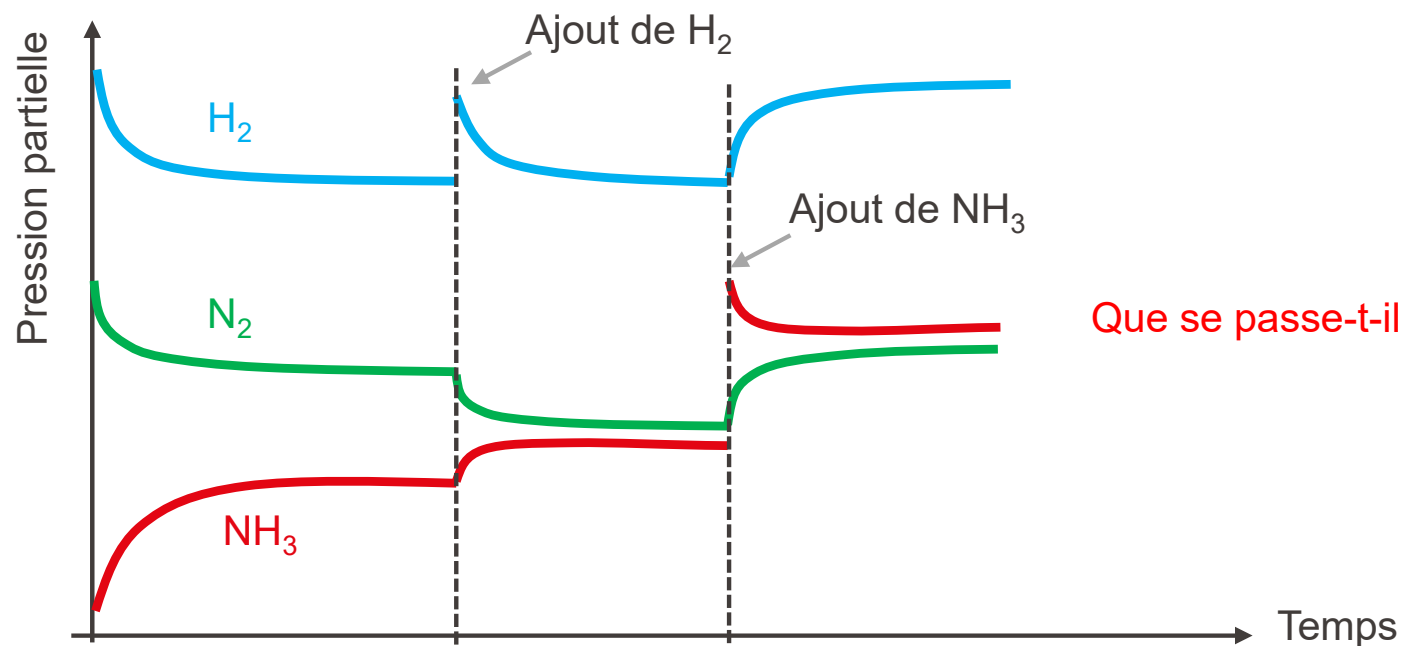
- changement de la **concentration** d'un produit ou d'un réactif
- changement de **volume** ou de **pression**
- changement de **température**

Le principe de le Chatelier donne une réponse **qualitative** indiquant comment l'équilibre va se déplacer.



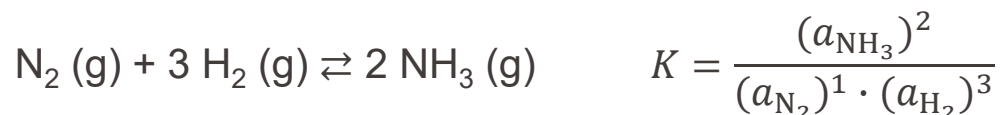
Henry Le Chatelier
(1850 - 1936)

Modification de l'équilibre : Concentration



Pendant un instant après la perturbation, le système n'est plus à l'équilibre, Q différent de K . Le système tend vers un nouvel équilibre (la constante d'équilibre est inchangée).

Déplacement de l'équilibre par addition ou soustraction de réactif



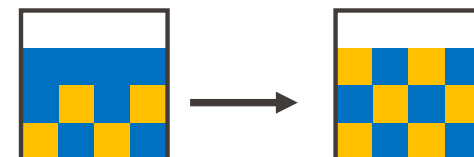
■ Ajout d'hydrogène gazeux

Le système est hors équilibre $Q < K \Rightarrow \Delta_r G < 0$

La réaction va évoluer dans le sens direct :



jusqu'à atteindre un nouvel équilibre répondant à la valeur de K .



Équilibre déplacé à droite

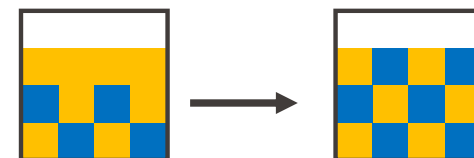
■ Ajout d'ammoniac gazeux

Le système est hors équilibre $Q > K \Rightarrow \Delta_r G > 0$

La réaction va évoluer dans le sens inverse :



jusqu'à atteindre un nouvel équilibre répondant à la valeur de K .



Équilibre déplacé à gauche

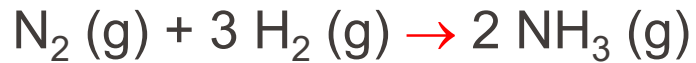
Compression d'un mélange réactionnel



$$K = \frac{(a_{\text{NH}_3})^2}{(a_{\text{N}_2})^1 \cdot (a_{\text{H}_2})^3}$$

- Compression du système (diminution du volume / augmentation de la pression)

Pour minimiser l'effet de la compression, l'évolution de la réaction vers la formation de NH_3 permet de diminuer le nombre de molécules en phase gazeuse pour atteindre un nouvel équilibre répondant à la valeur de K .



(équilibre déplacé à droite)

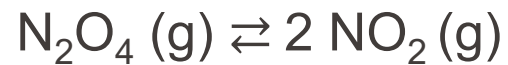
4 mol de gaz \rightarrow 2 mol de gaz

$\Rightarrow p$ diminue avec l'avancement de cette réaction

Synthèse de NH_3 selon Haber-Bosch :
 $p = 300 - 500 \text{ bar}$.



- Soit la réaction de dimérisation du NO_2 à une température T constante :



Comment varie la composition de la réaction à l'équilibre si on ajoute de l'argon **à volume constant** ? (la pression totale augmente)

- 1) Augmentation des réactifs
- 2) Augmentation des produits
- 3) Aucune variation



Smog

- Soit la réaction de dimérisation du NO_2 à une température T constante :



Comment varie la composition de la réaction à l'équilibre si on ajoute de l'argon à **pression constante** ? (le volume totale augmente)

- 1) Augmentation des réactifs
- 2) Augmentation des produits
- 3) Aucune variation

Si la quantité d'argon ajoutée entraîne un doublement du volume, les pressions partielles à l'équilibre de NO_2 et N_2O_4 vont être divisées par 2.



Smog

$$Q = \frac{(a_{\text{NO}_2})^2}{(a_{\text{N}_2\text{O}_4})^1} \Rightarrow Q = \frac{1}{2} K$$

EPFL Déplacement de l'équilibre par variation de température

- L'ajout de chaleur provoque une évolution de l'équilibre dans le sens qui absorbe cette chaleur \Rightarrow dans le sens endothermique de la réaction.

Réaction endothermique $\Delta_r H^\circ > 0$

Augmentation de T : Réactifs + chaleur \rightarrow produits

Réaction exothermique $\Delta_r H^\circ < 0$

Augmentation de T : Réactifs \leftarrow produits + chaleur

- Soit la réaction de dimérisation du NO_2 à une température T constante :



Comment varie la composition de la réaction à l'équilibre si on **augmente la température** ?

- 1) Augmentation des réactifs
- 2) Augmentation des produits
- 3) Aucune variation



$\text{NO}_2 (\text{g}) = \text{smog}$

Variation de K avec la température: Equation de Van't Hoff

La constante d'équilibre est une fonction de la température T .

A l'équilibre et à température T : $\Delta_r G^\circ = \Delta_r H^\circ - T \Delta_r S^\circ = -R T \ln[K(T)]$

Pour 2 températures T_1 et T_2 :

$$\frac{\Delta_r H^\circ}{T_1} - \Delta_r S^\circ = -R \ln[K(T_1)]$$

$$\frac{\Delta_r H^\circ}{T_2} - \Delta_r S^\circ = -R \ln[K(T_2)]$$

$$\Delta_r H^\circ \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) = R \{ \ln[K(T_2)] - \ln[K(T_1)] \}$$

Equation de Van't Hoff $\ln \left(\frac{K_2}{K_1} \right) = \frac{\Delta_r H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$



Jacobus van 't Hoff
(1852-1911)

Exemple : procédé Haber-Bosch



Estimer la valeur de K à 500°C , sachant que $K(298 \text{ K}) = 6,12 \cdot 10^5$

$$\ln \left(\frac{K_2}{K_1} \right) = \frac{\Delta_r H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

Réaction exothermique
 K diminue lorsque T augmente



On cherche K_2 à $T_2 = 500^\circ\text{C} = 773 \text{ K}$, connaissant K_1 à $T_1 = 298 \text{ K}$.

$$\left(\frac{K_2}{K_1} \right) = \exp \left[\frac{\Delta_r H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \right]$$

$$K_2 = K_1 \cdot \exp \left[\frac{\Delta_r H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \right]$$

$$K_2 = 6,12 \cdot 10^5 \cdot \exp \left[\frac{-92,22 \cdot 1000}{8,314} \left(\frac{1}{298} - \frac{1}{773} \right) \right] = 7,13 \cdot 10^{-5}$$

Ce qu'il faut savoir... (équilibres)

- Écrire une constante d'équilibre K à partir d'une équation chimique
- Calculer la constante d'équilibre K à partir de $\Delta_r G^\circ$
- Comprendre la différence entre $\Delta_r G$ et $\Delta_r G^\circ$
- Décrire le sens spontané d'une réaction réversible en comparant les valeurs du quotient réactionnel Q et de la constante d'équilibre K
- Utiliser l'avancement de la réaction, la composition du mélange initial et la constante d'équilibre pour décrire le mélange de réactifs et de produits à l'équilibre
- Décrire le sens d'une réaction à l'équilibre en réponse à une contrainte. (Comparaison entre Q et K , principe de Le Chatelier)
- Calculer la valeur de la constante d'équilibre à une certaine température en connaissant $\Delta_r H^\circ$ et la constante d'équilibre à une température de référence (loi de Van't Hoff)