Equilibre de Deacon

Le chlorure d'hydrogène et le dioxygène en présence d'un catalyseur donnent lieu à l'équilibre chimique en phase gazeuse :

$$4\ \mathrm{HCl} + \mathrm{O_2} = 2\ \mathrm{H_2O} + 2\ \mathrm{Cl_2}.$$

La phase gazeuse est assimilée à un gaz parfait, $R = 8,314\ J.K^{-1}.mol^{-1}$. La pression de référence de 1 bar est noté P^o.

L'enthalpie libre standard standard de cette réaction (exprimée en J/mol) est donnée par la relation suivante (T s'exprime en Kelvins) :

$$\Delta_r G^o = -115400 + 130,5T - 0,5.T.\ln(T).$$

1. Exprimer l'enthalpie standard $\Delta_r H^o$ et l'entropie standard $\Delta_r S^o$ de la réaction en fonction de T.

2. Calculer $\Delta_r H^o$ et $\Delta_r S^o$ à $T = 800$ K.

3. Calculer la constante d'équilibre K^o à cette même température $T = 800$ K.

   On mélange dans un réacteur, $n_0 = 3$ moles de constituants gazeux réparties en n_1 moles de HCl, n_2 moles de O_2, n_3 moles de H_2O, n_4 moles de Cl_2 sous une pression totale constante $P_{tot} = 1$ bar et à $T = 800$ K.

4. Calculer l'enthalpie libre de réaction initiale $\Delta_r G_{ini}$ de ce mélange dans les trois cas suivants :
   - Cas 1 : $n_1 = n_2 = 1$ et $n_3 = n_4 = 0,5$.
   - Cas 2 : $n_1 = n_2 = 0,5$ et $n_3 = n_4 = 1$.
   - Cas 3 : $n_1 = n_2 = 1,5$ et $n_3 = n_4 = 0$.

5. En déduire le sens d'évolution de chaque mélange.

6. Donner l'expression de la fraction molaire $x(O_2)$ du dioxygène en fonction de n_0, n_2 et de l'avancement ξ de la réaction.

7. Etablir la relation donnant l'avancement ξ_{eq} de la réaction en fonction de K^o, $x(O_2)_{eq}$, P^o, P_{tot}, n_1 et $n_3 = n_4$ lorsque l'équilibre est atteint.