



à  $t=0$   $\left\{ \begin{array}{l} C_{A0} = 100 \text{ mM} = 0,1 \text{ M} \\ C_{B0} = 200 \text{ mM} = 0,2 \text{ M} \\ C_{I0} = 100 \text{ mM} = 0,1 \text{ M} \end{array} \right.$

à  $t_f$   $C_A = 40 \text{ mM} = 0,04 \text{ M}.$

Determination de  $C_j$ ,  $X_A$  et  $X_B$ :

Pour un constituant  $j$ :  $C_j = \frac{n_j}{V}$   $\left\{ \begin{array}{l} n_j = n_{j0} + \nu_j n_0 X \\ V = V_0 f(1 + \epsilon X) \end{array} \right.$

avec  $n_0 = \sum_{j=1}^n n_{j0}$

$\left\{ \begin{array}{l} \beta = \frac{P_0 T}{P T_0} \text{ : Coef de dilatation physique} \\ \epsilon = \frac{\Delta \alpha}{1 + I} \text{ : facteur de dilatation chimique} \\ I = \frac{\sum \nu_j I_{j0}}{n_0} \text{ et } \Delta \alpha = (\sum \nu_j \text{Prod} - \sum \nu_j \text{Reac}) \text{ des gaz} \end{array} \right.$

Dans cet cas  $\left\{ \begin{array}{l} P_0 = P \\ T = T_0 \end{array} \right. \Rightarrow \beta = 1.$

$I$ : facteur des inertes

$\Delta \alpha = 6 - (1 + 3) = 2$  ;  $I = \frac{n_{I0}}{n_0} = \frac{C_{I0} \cdot V_0}{C_0 V_0} = \frac{C_{I0}}{C_0}$

avec  $C_0 = C_{A0} + C_{B0} = 100 + 200 = 300 \text{ mM} = 0,3 \text{ M}.$

$I = \frac{C_{I0}}{C_0} = \frac{100}{300} = \frac{1}{3} = I$

$\epsilon = \frac{\Delta \alpha}{1 + I} = \frac{2}{1 + 1/3} = \frac{2}{4/3} = \frac{3}{2} = \epsilon \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} V = V_0 \beta (1 + \epsilon X) \\ V = V_0 \cdot 1 \cdot (1 + \frac{3}{2} X) \end{array} \right.$

Le volume augmente suivant cette equation en fonction de l'avancement generalise de la reaction:

$V = V_0 (1 + \frac{3}{2} X)$

Le nombre de moles d'un constituant  $j$  evolue suivant  $X$  de la sorte:

$n_j = n_{j0} + \nu_j n_0 X$

Pour la concentration

(2)

$$c_j = \frac{n_j}{V} = \frac{n_{j0} + \nu_j n_0 X}{V_0 \beta (1 + \epsilon X)} = \frac{n_{j0} + \nu_j n_0 X}{V_0 (1 + \frac{3}{2} X)}$$

$$\Rightarrow c_j = \frac{(c_{j0} + \nu_j c_0 X)}{(1 + \frac{3}{2} X)}$$

Car  $\left\{ \begin{array}{l} \frac{n_{j0}}{V_0} = c_{j0} \\ \frac{n_0}{V_0} = c_0 \end{array} \right.$

$$c_0 = c_{A0} + c_{B0} = 3 c_{A0}$$

car  $\left\{ \begin{array}{l} c_{B0} = 2 c_{A0} \\ c_{I0} = 2 \cdot 100 \end{array} \right.$

Pour  $j=A \Rightarrow \nu_j = -1$

$$\Rightarrow c_A = \frac{c_{A0} - c_0 X}{1 + \frac{3}{2} X}$$

$\Rightarrow$  on met :  $c_A (1 + \frac{3}{2} X) = c_{A0} - c_0 X$

$$\Rightarrow X = \frac{c_{A0} - c_A}{c_0 + \frac{3}{2} c_A} = \frac{100 - 40}{300 + \frac{3}{2} \cdot 40} = \frac{1}{6} = X$$

L'avancement généralisé de la réaction X:  $X = \frac{1}{6}$

de (1): Pour  $j=B$ :  $c_B = \frac{c_{B0} - 3 c_0 X}{1 + \frac{3}{2} X}$

$$c_B = 40 \text{ mM}$$

Pour l'inerte  $n_I = n_0$

$$c_I = \frac{n_I}{V} = \frac{n_{I0}}{V_0 \beta (1 + \epsilon X)} = \frac{n_{I0}}{V_0 (1 + \frac{3}{2} X)} = \frac{c_{I0}}{(1 + \frac{3}{2} X)} = \frac{100}{(1 + \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{6})}$$

$$c_I = 80 \text{ mM}$$

\* Calcul du taux de conversion de A et de B

$$\left\{ \begin{array}{l} n_j = n_{j0} + \nu_j n_0 X \quad \text{I} \\ n_j = n_{j0} + \nu_j \frac{n_{A0} X_A}{- \nu_A} \quad \text{II} \\ n_j = n_{j0} + \nu_j \frac{n_{B0} X_B}{- \nu_B} \quad \text{III} \end{array} \right.$$

Pour  $X_A$ :  
on remplace j par A dans (I) et (II)

$$\begin{aligned}
 \text{I)} \quad n_A &= n_{A0} + \nu_A n_0 x \\
 \text{II)} \quad n_A &= n_{A0} + \frac{\nu_A n_{A0} x_A}{-\nu_A}
 \end{aligned}
 \Rightarrow
 \begin{cases}
 n_A = n_{A0} - n_0 x \\
 n_A = n_{A0} - n_{A0} x_A
 \end{cases}
 \Rightarrow n_0 x = n_{A0} x_A \quad (3)$$

$$\Rightarrow \boxed{x_A = \frac{n_0 x}{n_{A0}}}$$

$$x_A = \frac{n_0 / \nu_0 x}{\frac{n_{A0}}{\nu_0}} = \frac{C_0 x}{C_{A0}} = \frac{300 x}{100} = 3x \Rightarrow x_A = 3 \cdot \frac{1}{6} = 0,5$$

Le taux de Conversion de A:  $x_A = 0,5 = 50\%$

Pour le  $x_B$  / Le taux de Conversion de B  
 On remplace j par B dans I et III

$$\begin{aligned}
 \text{I)} \quad n_B &= n_{B0} + \nu_B n_0 x \\
 \text{III)} \quad n_B &= n_{B0} + \frac{\nu_B n_{B0} x_B}{-\nu_B}
 \end{aligned}
 \Rightarrow
 \begin{cases}
 n_B = n_{B0} - 3n_0 x \\
 n_B = n_{B0} - n_{B0} x_B
 \end{cases}
 \Rightarrow 3n_0 x = n_{B0} x_B$$

$$\Rightarrow x_B = \frac{3n_0 x}{n_{B0}} = \frac{3 \frac{n_0}{\nu_0} x}{\frac{n_{B0}}{\nu_0}} = \frac{3 C_0 x}{C_{B0}} = \frac{3 \cdot 300}{200} x$$

$$x_B = \frac{9}{2} x = \frac{9}{2} \left( \frac{1}{6} \right) = \frac{9}{12} x = \frac{3}{4} = 75\%$$

$$\boxed{x_B = 0,75 = 75\%}$$