

Étude de l'avancement d'une réaction chimique à l'aide d'un programme python

INTRODUCTION

Il peut être important de suivre l'évolution d'une réaction pas à pas. Pour ce faire il faut a priori faire des mesures régulières d'une ou plusieurs grandeurs observables et/ou mesurables. Avec le développement des méthodes numériques, il est également possible de modéliser l'évolution d'une réaction lorsque l'on connaît complètement les valeurs de départ et que l'on a un modèle performant. Nous allons ici, modéliser la réaction du diiode avec du thiosulfate. La solution jaune au départ devient alors transparente progressivement.

Ce TP comporte 3 Appels

Document 1.

La langage python permet de coder simplement (et gratuitement) tout type de programme. Il dispose de différentes instructions :

- L'instruction **`plt.plot(x, 2*x-3, color='blue', linestyle='solid', label='f(x)')`** trace la courbe représentative de la fonction $y = 2x - 3$. La courbe sera bleue, en trait plein, et sera étiquetée $f(x)$.
- L'instruction : **`x = np.linspace(start, stop, num)`** permet de faire varier x , entre la valeur $start$, et la valeur $stop$, num définit le nombre de valeur entre $start$ et $stop$.
- L'instruction **`min(a,b)`** renvoie la plus petite valeur entre a et b . a et b peuvent être remplacées par des expressions, par exemple : `min(a * 2, b/2+3)`.

On peut évidemment regrouper les deux fonctions :

Exemple : `x = np.linspace(-1, min(a * 2, b/2+3), 2)` Il suffit de 2 points pour tracer une droite, donc num vaut 2 ici.

Pour écrire correctement les formules des espèces chimiques (indice et exposant, on peut utiliser les codes unicode :

https://fr.wikipedia.org/wiki/Exposants_et_indices_Unicode.

Ainsi I_2 sera écrit : `\u2082` (`\u2082` codant le chiffre 2 en indice)

ALLER À LA PAGE SUIVANTE

Étude de l'avancement d'une réaction chimique à l'aide d'un programme python

Q1. Écrire l'équation de la réaction entre le diiode et le thiosulfate.

Document 2.

Quand on mélange du diiode I_2 (jaune en solution) et du thiosulfate $S_2O_3^{2-}$, on produit des ions iodure I^- et tetrathionate $S_4O_6^{2-}$. Quand le diiode a totalement réagi, la solution devient incolore.

Q2. Réaliser le protocole suivant :



Protocole 1.

- Aller dans le dossier math sur le bureau et ouvrir le logiciel Pyzo.
- Ouvrir le fichier, **evol_qdm_acompleter.py** (téléchargeable sur votre site préféré).
Le fichier ne fonctionne pas en l'état, il faut remplacer les, comme indiqué ci-dessous.
- Remplacer les des lignes 21 et 23 par les relations permettant de calculer les quantités initiales de réactifs.
- Remplacer les ... des lignes 39, 41, 43 et 45 par les équations des courbes, pour tracer l'évolution des quantités de matière des réactifs et des produits en fonction de l'avancement. (formules qui apparaissent dans le tableau d'avancement).
- Lancer le programme (Ctrl E) et, s'il n'y a pas d'erreur, observer le graphique.
- En modifiant les volumes de solution utilisés (variables V1 et V2) et en analysant le graphique, compléter les tableaux ci-dessous.

Expérience 1 : V1 = 10 mL ; V2 = 5 mL

Équation de réaction					
État du système	Avancement	Quantités de matière			
État initial	$x = 0$				
État intermédiaire	$x < x_{\max}$				
État final	$x = x_{\max} = \dots$				

Expérience 2 : V1 = 10 mL ; V2 = 30 mL

Équation de réaction					
État du système	Avancement	Quantités de matière			
État initial	$x = 0$				
État intermédiaire	$x < x_{\max}$				
État final	$x = x_{\max} = \dots$				

APPEL N°1 : **Compétences évaluées :** A/R App App App

ALLER À LA PAGE SUIVANTE

Étude de l'avancement d'une réaction chimique à l'aide d'un programme python

Q3. Réaliser le protocole suivant :

Protocole 2.

- Ouvrir le fichier **tableau_avancement_diode_thiosulfate_acompleter.py**.
Le fichier ne fonctionne pas en l'état, il faut remplacer les , comme indiqué dans les questions suivantes.
 - Remplacer les des lignes 26 et 27 par les relations permettant de calculer les quantités initiales de réactif.
 - Compléter les phrases suivantes par des expressions littérales :
 - Hypothèse 1 : Si le diode est le réactif limitant, alors il n'y en plus à la fin et :
$$n_i^1 - x_{\max} = 0, \text{ soit } x_{\max} = \dots$$
 - Hypothèse 2 : Si l'ion thiosulfate est le réactif limitant, alors il n'y a en a plus à la fin et :
$$n_i^2 - 2.x_{\max} = 0, \text{ soit } x_{\max} = \dots$$
- La valeur de $x_{\max}$ est la plus petite des deux valeurs précédentes.
- Remplacer les de la ligne 32 par les expressions trouvées précédemment, pour déterminer $x_{\max}$.
 - Remplacer les ... des lignes, 35 à 38 par les relations permettant de calculer les quantités finales, en fonction des quantités initiales et de $x_{\max}$.
 - On peut indiquer ligne 7, le nombre de chiffres significatifs à utiliser pour l'affichage dans le tableau.
 - Lancer le programme (Ctrl E) et vérifier si tout vous semble correct.
 - Afficher les tableaux d'avancements pour les expériences 1 et 2 vues à la page précédente.

APPEL N°2 : **Compétences évaluées : A/R A/R Réa Réa**

ALLER À LA PAGE SUIVANTE

Étude de l'avancement d'une réaction chimique à l'aide d'un programme python

Q4. Réaliser le protocole suivant :

Protocole 3.

- Ouvrir le fichier **tableau_avancement_general.py**.

Le fichier ne fonctionne pas en l'état, il faut remplacer les , comme indiqué dans les questions suivantes.

- Remplacer les des lignes 29, 31, 52 et 54 par les relations permettant de calculer les quantités initiales de réactifs.

- Compléter les phrases suivantes par des expressions littérales :

- Hypothèse 1 : Si le réactif 1 est le réactif limitant, alors il n'y en plus à la fin et :

$$n_{i,1} - N_{\text{stoechio},1} \cdot x_{\text{max}} = 0, \text{ soit } x_{\text{max}} = \dots$$

- Hypothèse 2 : Si le réactif 2 est le réactif limitant, alors il n'y a en a plus à la fin et :

$$n_{i,2} - N_{\text{stoechio},2} \cdot x_{\text{max}} = 0, \text{ soit } x_{\text{max}} = \dots$$

La valeur de x_{max} est la plus petite des deux valeurs précédentes.

- Remplacer les de la ligne 72 par les expressions trouvées précédemment.

- Remplacer les ... des lignes, 75 à 78 par les expressions permettant de calculer les quantités finales, en fonction des quantités initiales , des coefficients (nombres) stoechiométriques et de x_{max} .

- Utiliser le programme pour résoudre les exercices de la page suivante.

ALLER À LA PAGE SUIVANTE

Étude de l'avancement d'une réaction chimique à l'aide d'un programme python

Exercice 1 :

On verse dans un bécher $V = 20,0 \text{ mL}$ d'une solution de nitrate d'argent contenant des ions argent ($\text{Ag}^+_{(\text{aq})}$) et des ions nitrate ($\text{NO}_3^-_{(\text{aq})}$) tels que $[\text{Ag}^+] = [\text{NO}_3^-] = 0,15 \text{ mol.L}^{-1}$.

On y ajoute $0,127 \text{ g}$ de poudre cuivre. La solution initialement incolore devient bleue et il se forme un dépôt d'argent. Les ions nitrates n'interviennent pas dans la réaction.

- a) Écrire l'équation chimique modélisant la transformation.
- b) Compléter un tableau d'avancement, correspondant à la transformation.
- c) Déterminer la composition de l'état final du système en quantité de matière.
- d) Déterminer, à l'état final :
 - les concentrations molaires des ions en solution ;
 - les masses du (ou des) solide(s) présent(s).

Aide : ion nitrate : NO_3^- : $\text{NO}\text{O}3\text{B}2\text{O}7\text{B}$

ion argent (I) : Ag^+ : $\text{Ag}\text{O}7\text{A}$

ion cuivre (II) : Cu^{2+} : $\text{Cu}\text{O}0\text{B}2\text{O}7\text{A}$

Exercice 2 :

Dans un tube à essai, on introduit $0,60 \text{ g}$ d'aluminium en poudre et $6,0 \text{ mL}$ de solution d'acide chlorhydrique, $\text{H}^+_{(\text{aq})} + \text{Cl}^-_{(\text{aq})}$, de concentration $1,0 \text{ mol.L}^{-1}$ en ions H^+ . On observe un dégagement gazeux qui produit une légère détonation à l'approche d'une flamme.

Après quelques minutes, on filtre le mélange et on ajoute quelques gouttes de solution de soude au filtrat, on observe l'apparition d'un précipité blanc.

- a) Quelle est la nature du gaz émis ?
- b) Quel est l'ion mis en évidence par l'apparition du précipité ?
- c) Quelles sont les espèces affectées par la transformation ?
- d) Écrire l'équation de la réaction chimique modélisant la transformation.
- e) Calculer les quantités de réactifs mis en jeu.
- f) À l'aide d'un tableau d'avancement, déterminer l'avancement maximal et le réactif limitant.
- g) En déduire la quantité puis le volume de gaz dégagé.

Donnée : $V_m = 25 \text{ L.mol}^{-1}$

APPEL N°3 :	Compétences évaluées : A/R A/R Réa Réa
--------------------	---

NE PAS ALLER À LA PAGE SUIVANTE, IL N'Y EN A PLUS !