

Evolution d'une réaction chimique totale, en Python

Objectifs :

- Consolider la compréhension des tableaux d'avancement
- Utiliser le langage de programmation Python pour résoudre un problème simple en chimie, comprendre le code et l'adapter.

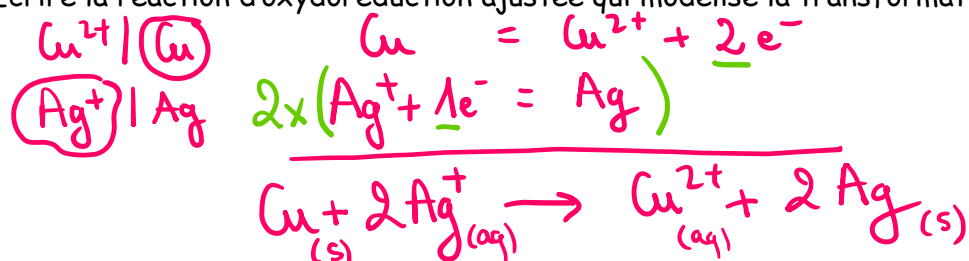
I) Etude chimique

On considère la transformation chimique présente lorsqu'on verse sur un fil de cuivre du nitrate d'argent (solution contenant des ions $\text{Ag}^+(\text{aq})$ et $\text{NO}_3^-(\text{aq})$). Cette réaction forme l'arbre de Diane (voir photo).



On donne les couples rédox suivants : $\text{Cu}^{2+}(\text{aq})/\text{Cu}(\text{s})$ et $\text{Ag}^+(\text{aq})/\text{Ag}(\text{s})$.

- 1) Quels sont les réactifs ? $\text{Cu}(\text{s})$ et $\text{Ag}^+(\text{aq})$
- 2) Quels sont les produits ? $\text{Cu}^{2+}(\text{aq})$ et $\text{Ag}(\text{s})$
- 3) Y-a-t-il des espèces spectatrices ? Si oui les nommer. Les ions nitrates $\text{NO}_3^-(\text{aq})$
- 4) Ecrire la réaction d'oxydoréduction ajustée qui modélise la transformation



Pour les mélanges suivants, on souhaite vérifier quel est le réactif limitant et aussi déterminer le bilan de matière à l'état final.

- mélange 1 : 0,02 mol de cuivre et 0,01 mol d'ions argent (à écrire en bleu)
- mélange 2 : 0,02 mol de cuivre et 0,04 mol d'ions argent (à écrire en vert)
- mélange 3 : 0,02 mol de cuivre et 0,06 mol d'ions argent (à écrire en rouge)

5) Compléter le tableau d'avancement de la réaction sachant qu'elle est totale et prévoir l'état final.

Équation		$\text{Cu}(\text{s}) + 2\text{Ag}^+(\text{aq}) = \text{Cu}^{2+}(\text{aq}) + 2\text{Ag}(\text{s})$			
État	Avancement	Quantités de matière (mol)			
Initial	0	0.02	0.01	0	0
		0.02	0.04	0	0
		0.02	0.06	0	0
En cours	x	0.02-x	0.01-2x	X	2x
		0.02-x	0.04-2x	X	2x
		0.02-x	0.06-2x	X	2x
Final	$X_{\text{max}}=0.005$	0.02-	0	0.005	$2 \times 0.005=0.01$
	$X_{\text{max}}=0.02$	$0.005=0.015$	0	0.02	$2 \times 0.02=0.04$
	$X_{\text{max}}=0.02$	0	0.06-	0.02	$2 \times 0.02=0.04$
		0	$2 \times 0.02=0.02$		

6) Comment choisir la valeur de l'avancement maximal et donc d'identifier le réactif limitant ?

On résout $0.02 - x_{\max} = 0$ et $0.01 - 2x_{\max} = 0$ et garde la solution la plus petite c'est-à-dire $x_{\max} = 0.005 \text{ mol}$. Donc Ag^+ est le réactif limitant

On résout $0.02 - x_{\max} = 0$ et $0.04 - 2x_{\max} = 0$ et garde la solution la plus petite. Ici on a deux fois la même solution, ce sont les proportions stœchiométriques.
 $x_{\max} = 0.02 \text{ mol}$

On résout $0.02 - x_{\max} = 0$ et $0.06 - 2x_{\max} = 0$ et garde la solution la plus petite c'est-à-dire $x_{\max} = 0.02 \text{ mol}$. Donc Cu est le réactif limitant

II) Modélisation à l'aide d'un langage de programmation

A partir du logiciel EduPython, ouvrir le programme « *avancement final eleve.py* »

Le script de ce programme n'est pas complet, et ne marche pas tel quel, il va falloir le modifier.

1. Présentation des objets de base utiles pour comprendre ce programme (voir fiche annexe)
2. Compréhension du code
Voici le programme utilisé :

```
#####
#                               Interaction avec l'utilisateur                               #
# L'utilisateur devra entrer au clavier les conditions exprimentales #
#####
print("On etudie une transformation chimique TOTALE du type a A + b B -> c C + d D")
A=input("Entrez la formule du réactif 1: ")
B=input("Entrez la formule du réactif 2: ")
C=input("Entrez la formule du produit 1: ")
D=input("Entrez la formule du produit 2: ")
a=float(input("Entrez le coefficient stoechiométrique de "+A+": "))
b=float(input("Entrez le coefficient stoechiométrique de "+B+": "))
c=float(input("Entrez le coefficient stoechiométrique de "+C+": "))
d=float(input("Entrez le coefficient stoechiométrique de "+D+": "))
n_Ai=float(input("Entrez la quantité de matière initiale de "+A+": "))
n_Bi=float(input("Entrez la quantité de matière initiale de "+B+": "))
n_Ci=float(input("Entrez la quantité de matière initiale de "+C+": "))
n_Di=float(input("Entrez la quantité de matière initiale de "+D+": "))
print()
```

```
#####
#                               Calcul de l'avancement maximal                               #
#####
xmax = 
print("L'avancement maximal vaut:",xmax)
print()
```

```
#####
#                               Calcul des quantites de matiere a l'etat final                               #
#####
n_Af = 
n_Bf = 
n_Cf = 
n_Df = 
```

```
#####
#      Test pour savoir si le melange est stoechiometrique      #
#####
if  == :
    print("Les proportions sont stoechiometriques !")
else:
    print("Les proportions ne sont pas stoechiometriques.")

print()

#####
#      Impression des resultats dans la console      #
#####
print("Reaction etudiee : " )
print(a, " ", "A," + ",b," "B," --> ",c," "C," + ",d," "D)
print()
print("n initiales en mol:")
print(n_Ai, " ", "n_Bi," "n_Ci," "n_Di," ")
print()
print("n finales en mol: ")
print()
print()
```

- Combien de réactifs sont pris en compte par ce programme ? **deux réactifs**
- Combien de produits sont pris en compte par ce programme ? **deux produits**
Est-il nécessaire de modifier le programme pour traiter notre problème ? **Non car dans ce problème on a aussi deux réactifs et deux produits**
- Comment sont nommées les variables représentant les coefficients stœchiométriques ?

Ils sont nommés a, b, c et d

- Pourra-t-on entrer des nombres décimaux pour ces coefficients ? **oui car il y a la fonction float**
- Comment sont nommées les variables des quantités initiales ?
Elles sont nommées n_Ai, n_Bi, n_Ci et n_Di
- A-t-on ici des quantités de matières initiales dans les produits ?
Oui, le programme le permet mais on inscrira 0 dans notre exemple.

3. Modification du code

- Compléter les lignes de code dans les rectangles qui permettent de calculer :
 - l'avancement maximal de la réaction
 - l'unité de l'avancement maximal

```
xmax = min(n_Ai/a,n_Bi/b)
print("L'avancement maximal vaut:",xmax)
print( "mol")
```

- les quantités de matière finales des espèces

```
n_Af =n_Ai-a*xmax
n_Bf =n_Bi-b*xmax
n_Cf =n_Ci+c*xmax
n_Df =n_Di+d*xmax
```

- la condition pour que le mélange soit stœchiométrique

```
if n_Ai/a==n_Bi/b:
```

- l'affichage des quantité de matières finales des espèces

```
print(n_Af," ",n_Bf," ",n_Cf," ",n_Df)
```

4. Test et utilisation du code

Si les résultats précédents sont validés par le programme, lui faire simuler les 3 mélanges demandés au début du TP, et dire dans chaque cas quel est le réactif limitant. Est-ce en accord avec vos calculs du I ?

```
L'avancement maximal vaut: 0.005
mol
Les proportions ne sont pas stoechiometriques.

Reaction etudiee :
1.0   Cu   +   2.0   Ag+   -->   1.0   Cu2+   +   2.0   Ag

n initiales en mol:
0.02      0.01      0.0      0.0

n finales en mol:
0.015      0.0      0.005      0.01
```

5. Représentation graphique des évolutions des quantités de matière des réactifs et des produits

- a) Ouvrir le programme « *Avancement final graphique eleve.py*. ». Le voici :

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
#fonctions-----
```

```
def courbes(a,b,c,d,n_Ai,n_Bi,n_Ci,n_Di,A,B,C,D):
```

```
    x=0
    n_A, n_B, n_C, n_D = n_Ai, n_Bi, n_Ci, n_Di
    dx=(min(n_A,n_B)/100)
    plt.ion()
    x_max=min(n_Ai/a,n_Bi/b)
    plt.xlim(0,1.2*x_max)
    plt.ylim(0,1.2*max(n_A,n_B))
    plt.xlabel('Avancement x (mol)')
    plt.ylabel('n (en mol)')
    plt.grid()
    plt.plot(x,n_A,'b.',label=A)
    plt.plot(x,n_B,'g+',label=B)
    plt.plot(x,n_C,'r.',label=C)
    plt.plot(x,n_D,'y+',label=D)
    plt.legend()
    while (n_A>0) and (n_B>0):
        plt.plot(x,n_A,'b.')
        plt.plot(x,n_B,'g+')
        plt.plot(x,n_C,'r.')
        plt.plot(x,n_D,'y+')
        plt.pause(0.01)
        x=x+dx
        n_A=n_Ai-a*x
        n_B=n_Bi-b*x
        n_C=n_Ci+c*x
        n_D=n_Di+d*x
```

```
def avancement_maximal(a,b,n_Ai,n_Bi):
```

```
    return min(n_Ai/a, n_Bi/b)
```

```
def stoechio(a,b,n_Ai,n_Bi):
```

```
    return n_Ai/a == n_Bi/b
```

```
# corps du programme #####
```

```
Continuer = True
```

```
while Continuer :
```

```
    print("On etudie une transformation chimique TOTALE du type a A + b B -> c C + d D")
    A=input("Entrez la formule du réactif 1: ")
    B=input("Entrez la formule du réactif 2: ")
    C=input("Entrez la formule du produit 1: ")
    D=input("Entrez la formule du produit 2: ")
    a=float(input("Entrez le coefficient stoechiométrique de "+A))
    b=float(input("Entrez le coefficient stoechiométrique de "+B))
    c=float(input("Entrez le coefficient stoechiométrique de "+C))
    d=float(input("Entrez le coefficient stoechiométrique de "+D))
    n_Ai=float(input("Entrez la quantité de matière initiale de "+A))
    n_Bi=float(input("Entrez la quantité de matière initiale de "+B))
    print()
    xmax = avancement_maximal(a,b,n_Ai,n_Bi)
    n_Af = n_Ai-a*xmax
    n_Bf = n_Bi-b*xmax
    n_Cf = c*xmax
    n_Df = d*xmax
    print("Réaction étudiée : ",a,A,"+",b,B,"-->",c,C,"+",d,D)
    print("Bilan si cette réaction est totale:")
    print("n initiales en mol:",n_Ai,"      ",n_Bi,"      ", "0.0      0.0")
    print("n finales en mol:  ",n_Af,"      ",n_Bf,"      ", "n_Cf,"      ",n_Df)
    print()
    print("L'avancement maximal vaut",xmax)
```

```

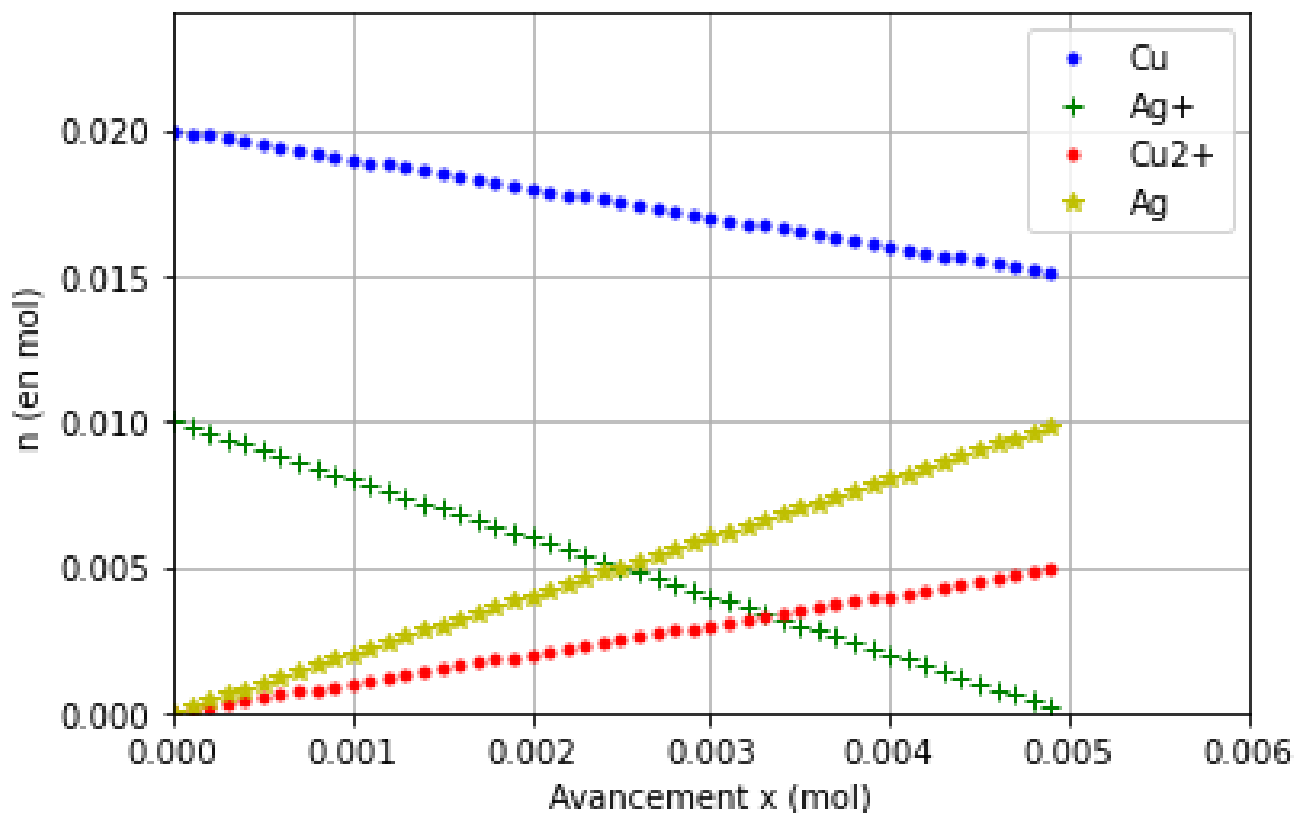
if stoechio(a,b,n_Ai,n_Bi)==True :
    print("Les proportions sont stoechiometriques !")

courbes(a,b,c,d,n_Ai,n_Bi,0,0,A,B,C,D)
plt.ioff()
plt.show()

rep=input("Voulez-vous faire un autre bilan ? Entrez ok")
if rep != "ok" and rep!="OK":
    Continuer=False
else:
    print("Au revoir.")

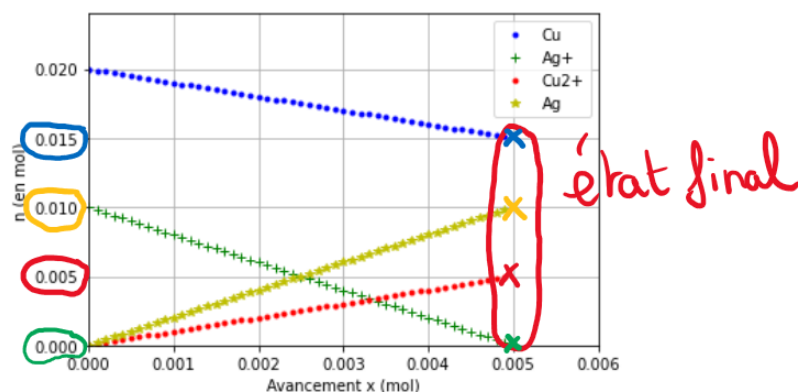
```

- b) Exécuter le programme pour observer le cas de l'évolution du mélange 1 (idem pour 2 et 3 si vous avez le temps). **Dans la suite tout est traité avec le cas BLEU**
- c) Que représentent les 4 courbes ? Dessiner l'allure de ces courbes sur votre copie (rapidement)



Ces courbes représentent l'évolution des quantités de matière de chaque espèce chimique de la réaction

- d) Comment repère-t-on le réactif limitant sur la courbe ? L'annoter sur la courbe
C'est celui qui atteint la valeur zéro en premier (Ag+ en vert sur la courbe)
- e) Où repère-t-on l'état final ? L'annoter sur la courbe.



f) Bonus : changer les couleurs des courbes sur le programme

6. Synthèse sur l'avancement chimique :

- **L'avancement** est une grandeur exprimée en moles qui décroît au cours de la réaction jusqu'à atteindre la valeur de zéro si la réaction est totale.
- La quantité de réactif en **défaut** décroît jusqu'à atteindre zéro
- La quantité de réactif en **excès** à la fin est non nulle
- La quantité d'un **produit** au cours de la réaction croît jusqu'à une valeur qui dépend de l'avancement