

TP 13

CAPACITÉS NUMÉRIQUES N° 2 (THERMODYNAMIQUE ET CINÉTIQUE)

	 fiche(s) TP à maîtriser	 	 à préparer en amont
2 h	compléments numériques		

PROGRAMME OFFICIEL :

Notions et contenus	Capacités exigibles
Représentation graphique d'un nuage de points. Représentation graphique d'une fonction.	Utiliser les fonctions de base de la bibliothèque matplotlib pour représenter un nuage de points et rendre le graphe exploitable (présence d'une légende, choix des échelles ?). Utiliser les fonctions de base de la bibliothèque matplotlib pour tracer la courbe représentative d'une fonction et rendre le graphe exploitable (présence d'une légende, choix des échelles).
Équations algébriques Résolution d'une équation algébrique ou d'une équation transcendante : méthode dichotomique.	Déterminer, en s'appuyant sur une représentation graphique, un intervalle adapté à la recherche numérique d'une racine par la méthode dichotomique. Écrire un programme mettant en œuvre la méthode dichotomique afin de résoudre une équation avec une précision donnée.

Le but de cette activité expérimentale est de déterminer l'enthalpie standard de dissolution d'un solide. Cela permet d'investir des notions de thermodynamique chimique.



Matériel à disposition :

- un ordinateur muni d'un logiciel Python

OBJECTIF(S) DU TP :

- Tracer des fonctions en Python.
- Maîtriser un algorithme de dichotomie.

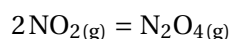
I. Tracé de la vitesse d'une réaction chimique

- **Fichier Python à récupérer :** TP13_ Python_ Exo1

Capacité numérique au programme

À partir de données expérimentales, tracer l'évolution temporelle d'une concentration, d'une vitesse volumique de formation ou de consommation, d'une vitesse de réaction et tester une loi de vitesse donnée.

Cette partie se base sur la réaction suivante :



de constante de vitesse $k = 0,1 \text{ min}^{-1}$ dont l'étude expérimentale a permis de déterminer la concentration de NO_2 (en $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$) au cours du temps (en min). La concentration initiale en NO_2 vaut $0,1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

Les résultats sont exportés sous Python et stockés dans deux listes nommées t et C_{NO_2} . Le but est de montrer numériquement que ces données sont compatibles avec une loi de vitesse de la forme $v = k[\text{NO}_2]^2$.

Question 1 - Exprimer la vitesse de la réaction en fonction de la dérivée de $[\text{NO}_2]$.

Question 2 -

- **Copier** sur votre ordinateur, **renommer** puis ouvrir le code Python du fichier `TP_Python2_Exo1`.
- Ajouter la donnée numérique manquante. Préciser son unité sous forme de commentaire.
- Compléter le code de sorte à tracer la concentration en NO_2 en fonction du temps.
- Compléter les variables `v_reaction`, `v_ordre1` et `v_ordre2` qui sont respectivement la liste des vitesses de la réaction exprimée comme une dérivée de la concentration (on utilisera la fonction `derive`) et les listes des vitesses dans l'hypothèse où la réaction est d'ordre 1 ou 2.
- Créer une liste `t_tronque` à partir de la liste `t` en enlevant le premier et le dernier élément.
- Tracer sur un même graphe `v_reaction`, `v_ordre1` et `v_ordre2` et fonction de `t_tronque`.

Question 3 - En déduire l'ordre de la réaction.

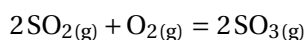
II. Taux d'avancement d'une réaction

• **Fichier Python à récupérer :** TP13_ Python_ Exo2

Capacité numérique au programme

☞ Tracer, à l'aide d'un langage de programmation, le taux d'avancement à l'équilibre en fonction de la température pour un système siège d'une transformation chimique modélisée par une seule réaction.

Le trioxyde de soufre est produit par oxydation du dioxyde de soufre par le dioxygène en présence d'un catalyseur. L'équation de la réaction modélisant cette transformation est la suivante :



La réaction est réalisée sous une pression totale $p = 1$ bar et partant d'un système initial constitué de 2 mol de dioxyde de soufre et 1 mol de dioxygène. La température est de 1100 K.

Données à 298 K : $\Delta_r H^\circ = -198 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ et $\Delta_r S^\circ = 188 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$

Question 4 - Exprimer la constante thermodynamique d'équilibre en fonction de la température T .

Question 5 - Établir un tableau d'avancement en notant n_0 la quantité de matière initiale en $\text{SO}_{2(g)}$ et en utilisant $\alpha = \frac{\xi}{\xi_{\max}} = \frac{\xi}{n_0}$ le taux d'avancement.

Question 6 - *Exprimer le quotient de réaction en fonction de l'avancement ξ .*

Question 7 - *Par application de la relation de GÜLDBERG et WAAGE, exprimons la constante thermodynamique d'équilibre en fonction du taux de conversion à l'équilibre $\alpha_{\text{éq}}$.*

Question 8 - *Compléter le programme Python afin d'effectuer le tracé entre 600 et 1400 K.*