

4 État final d'un système chimique

Script à compléter

L'objectif de cette activité est de déterminer la composition de l'état final d'un système siège d'une transformation chimique totale.

Fichiers Python

Script à compléter
Fiche d'accompagnement
hatier-clc.fr/pc1043

Prérequis théoriques

Stœchiométrie d'une réaction • Avancement d'une réaction •

Réactif limitant et avancement maximal d'une réaction • Mélange stœchiométrique

Les questions 1a, 1b et 2 n'impliquent que le réglage de la valeur de l'avancement final x_f (ligne 81 dans le script ci-dessous). À la question 1b, on constate qu'une valeur finale de quantité de matière est négative, ce qui n'a pas de sens du point de vue de la chimie. Cela signifie que le programme est incomplet. Cette incomplétude sera réglée à la question 3, lorsque l'avancement maximal sera calculé par le programme. Pour l'instant, on ne peut déterminer l'avancement maximal qu'en tâtonnant, comme demandé à la question 2.

À la question 3, il faut déterminer l'avancement maximal x_{\max} , puis fixer $x_f = x_{\max}$.

Dans le cours, on a appris que la détermination de l'avancement maximal x_{\max} d'une réaction se fait ainsi : pour chaque réactif de quantité de

matière initiale n et de coefficient stœchiométrique a , on calcule la valeur de x_{\max} que l'on obtient en supposant que ce réactif est limitant. Cela revient à résoudre $n - ax_{\max} = 0$. À chaque réactif correspond donc une valeur de x_{\max} . La bonne est la plus petite, qui ne peut être dépassée. À la question 3 (lignes 72 et suivantes du script ci-dessous), il faut procéder de la même manière, à l'aide d'une boucle pour passer en revue les réactifs.

La question 4 n'implique que la modification des données pour un changement de réaction étudiée.

Enfin, la question 5 demande de compléter le programme (lignes 94 et suivantes du script ci-dessous) pour tester si le mélange initial est stœchiométrique.

Script à compléter

```

1 print("")
2 print("*****")
3 print("*      Étude quantitative      *")
4 print("** d'une transformation chimique **")
5 print("*****")
6 print("")
7
8 #####
9 ### À modifier : données ###
10 #####
11 ### Listes des réactifs et de leurs nombres stoechiométriques
12 nom_reac=["MnO4-", "Fe2+", "H+"]
13 coef_reac=[1,5,8]
14 ### Listes des produits et de leurs nombres stoechiométriques
15 nom_prod=["Mn2+", "Fe3+", "H2O"]
16 coef_prod=[1,5,4]
17 ### Quantités de matière initiales des réactifs et produits, en moles
18 ### Écrire "nc" si l'espèce chimique est le solvant ou est en excès
19 n_reac=[0.1,0.1,"nc"]
20 n_prod=[0,0,"nc"]
21 ### Rappel des valeurs par défaut
22 #nom_reac=["MnO4-", "Fe2+", "H+"]
23 #coef_reac=[1,5,8]
24 #nom_prod=["Mn2+", "Fe3+", "H2O"]
25 #coef_prod=[1,5,4]
26 #n_reac=[0.1,0.1,"nc"]
27 #n_prod=[0,0,"nc"]
28
29 ### Affichage de l'équation de la réaction
30 print("Équation de la réaction :")
31 equation=""
32 for i in range(len(nom_reac)):
33     equation=equation+str(coef_reac[i])+" "+nom_reac[i]
34     if i<len(nom_reac)-1:
35         equation=equation+" + "
36     else:
37         equation=equation+" ---> "
38 for i in range(len(nom_prod)):
39     equation=equation+str(coef_prod[i])+" "+nom_prod[i]
40     if i<len(nom_prod)-1:
41         equation=equation+" + "
42 print(equation)
43 print("")
44
45 ### Création d'une grandeur vide pour xmax
46 xmax=None
47
48 ### Fonction : état du système pour un avancement x
49 def etat_systeme(x):
50     print("Réactifs :")
51     for i in range(len(nom_reac)):
52         if n_reac[i]=="nc":
53             print(" ",nom_reac[i],"est en excès")
54         else:
55             n_reac[i]=round(n_reac[i]-x*coef_reac[i],3)
56             print(" ",nom_reac[i],":",n_reac[i], " mol")
57     print("Produits :")
58     for i in range(len(nom_prod)):
59         if n_prod[i]!="nc":
60             n_prod[i]=round(n_prod[i]+x*coef_prod[i],3)
61             print(" ",nom_prod[i],":",n_prod[i], " mol")

```

Données

Les données sont d'une part, les noms et nombres stoechiométriques des réactifs et produits figurant dans l'équation de la réaction chimique, et d'autre part leurs quantités de matière apportées.

Les noms sont écrits sans formatage, comme des chaînes de caractères entre guillemets "", dans les listes `nom_reac` et `nom_prod`.

Les nombres stoechiométriques sont dans les listes `coef_reac` et `coef_prod`, dans le même ordre.

Les quantités de matière à l'état initial sont dans les listes `n_reac` et `n_prod`. Le séparateur décimal est le point. La mention "nc" (pour « non connu ») exclut l'espèce chimique concernée des calculs.

Équation de la réaction (ne pas modifier)

La chaîne de caractère `equation` est construite pour l'affichage de l'équation de la réaction. Les noms des espèces ne sont pas mis en forme.

La chaîne est ensuite affichée.

Fonction affichant l'état du système chimique pour un avancement x (ne pas modifier)

Cette fonction prend en argument un avancement x en moles. Pour chaque réactif i de quantité de matière `n_reac[i]`, la fonction remplace cette quantité de matière par sa valeur pour un avancement x , puis l'affiche.

Elle fait de même avec les produits (avec un + au lieu d'un -).

Les valeurs sont arrondies à trois chiffres après la virgule (fonction `round`).

```

62
63 ### Affichage de l'état initial
64 print("Quantités de matière à l'état initial")
65 etat_systeme(0)
66 print("")
67
68 #####
69 ##### À modifier : question 3 #####
70 ### Fonction qui calcule l'avancement maximal ###
71 #####
72
73
74
75
76
77 #####
78 ##### À modifier : question 1 puis 3 #####
79 ### Valeur de l'avancement final en moles ###
80 #####
81 xf=xmax
82
83 ### Affichage de l'état pour l'avancement xf
84 if xf==xmax:
85     print("Quantités de matière pour l'avancement maximal xmax =",xmax,"mol")
86 else:
87     print("Quantités de matière pour l'avancement xf =",xf,"mol")
88 etat_systeme(xf)
89
90 #####
91 ##### À modifier : question 5 #####
92 ### Test du mélange stœchiométrique ###
93 #####
94
95
96
97
98
99
100 print("")
101

```

Affichage de l'état initial (ne pas modifier)

La fonction `etat_systeme` est appelée pour $x = 0$.

Avancement final (questions 1 et 3)

Aux questions 1 et 2, l'avancement final est fixé manuellement.

La question 3 demande de compléter le programme pour déterminer l'avancement maximal x_{\max} . On peut faire une boucle `for` parcourant les réactifs et calculant, pour chacun de ceux où c'est possible, x_{\max} si l'on suppose le réactif limitant.

On peut stocker ces valeurs dans une liste (fonction `liste.append`).

La plus petite valeur de x_{\max} est la bonne (utiliser la fonction `min`).

Une fois x_{\max} calculé, on peut régler $x_f = x_{\max}$.

Mélange stœchiométrique (question 5)

Un test déterminant si le mélange est stœchiométrique peut être conçu ainsi :

- définir une variable de test et la fixer à `True` ;
- à l'aide d'une boucle `for`, passer en revue les réactifs ; si leur quantité de matière est non nulle pour l'avancement maximal, alors passer la variable de test à `False` ;
- après la fin de la boucle, afficher « Le mélange est stœchiométrique » si la variable de test est toujours à `True`.