


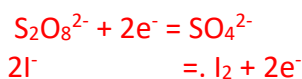
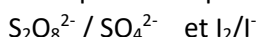
Terminale Spécialité Physique-Chimie	Thème : Constitution et transformations de la matière	M.KUNST-MEDICA	
Chapitre 11 : Modélisation macroscopique de l'évolution d'un système.			
Feuille d'évaluation à rendre obligatoirement avec la copie			
<u>Correction activité expérimentale n°11.2 : Suivi temporel d'une transformation chimique - l'informatique au service du chimiste</u> (inspiré du travail de Marieke Bonnaffé-Moity / Marie-Anne Dejoan)			

Partie 1 : Préparation du programme informatique de modélisation : (40min)

Ouvrir le programme Python : Suivi_cinetique.py

Ce programme est incomplet, il faut renseigner les informations de la réaction étudiée :

- 1) **Écrire** l'équation de la réaction qui a lieu sachant que les couples oxydants réducteurs mis en jeu sont :



- 2) **Déterminer** la concentration initiale en ions peroxodisulfate dans le mélange et **entrer** sa valeur dans le programme Python (ligne 20).

Attention à l'effet de dilution lorsqu'on mélange les deux solutions.

$$[S_2O_8^{2-}] = \frac{n_{introduit}}{V_{total}} = \frac{c_2 \times V_2}{V_1 + V_2 + V_3} = \frac{8,0 \cdot 10^{-3} \times 20}{20 + 20 + 0,5} = 4,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$$

- 3) **Établir** la relation entre l'absorbance et la concentration en diiode.

Le diiode I_2 est l'espèce colorée ici, d'après la loi de Beer-Lambert : $A = L \times \epsilon [I_2]$

D'où $[I_2] = A / (L \times \epsilon)$

- 4) **Compléter** le tableau d'avancement ci-dessous et **établir** l'expression de la concentration en ions peroxodisulfate en fonction de de l'absorbance. **Compléter** le programme Python (ligne 31).

(mol/L)	$S_2O_8^{2-} +$	$2I^-$	\rightarrow	I_2	$+ 2SO_4^{2-}$
État initial (x = 0)	$[S_2O_8^{2-}]_0$	$[I^-]_0$	0	0	0
État intermédiaire (x)	$[S_2O_8^{2-}]_0 - x$	$[I^-]_0 - x$		x	x

D'après le tableau d'avancement, on voit que à tout instant de la réaction, l'avancement de la réaction est égale à la concentration en diiode. $x = [I_2]$

On cherche ici à exprimer la concentration en ion péroxodisulfate à tout instant de la réaction. D'après le tableau d'avancement, cette concentration est égale à :

$$[S_2O_8^{2-}] = [S_2O_8^{2-}]_0 - x = [S_2O_8^{2-}]_0 - [I_2]$$

En utilisant la question 3 : $[S_2O_8^{2-}] = [S_2O_8^{2-}]_0 - A / (L \times \epsilon)$

(Dans le programme, inscrire : $C = C_0 - \text{Absorbance}[i] / (\epsilon \times l)$)

- 5) On peut définir la vitesse de réaction comme la dérivée de l'avancement x par rapport au temps. **Établir** l'expression de la vitesse de réaction v en fonction de la concentration en ion peroxydisulfate. **Dégriser** et **relever** les 2 lignes d'instruction réalisant ce calcul dans le programme Python.

Dans le programme $[S_2O_8^{2-}]_0$ est noté c_0 et $[S_2O_8^{2-}]$ est noté c . D'après le tableau d'avancement : $x = c_0 - c$

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{d(c_0 - c)}{dt} = \frac{dc_0}{dt} - \frac{dc}{dt} = - \frac{dc}{dt}$$

(c_0 étant une constante, sa dérivée est nulle)

Dans le programme, ce calcul est effectué par les lignes de code : `dt = Temps[2]-Temps[1]`
`v_mmol = -gradient(C_mmol,dt)`

Partie 2 : Acquisition des données expérimentales (45 min)

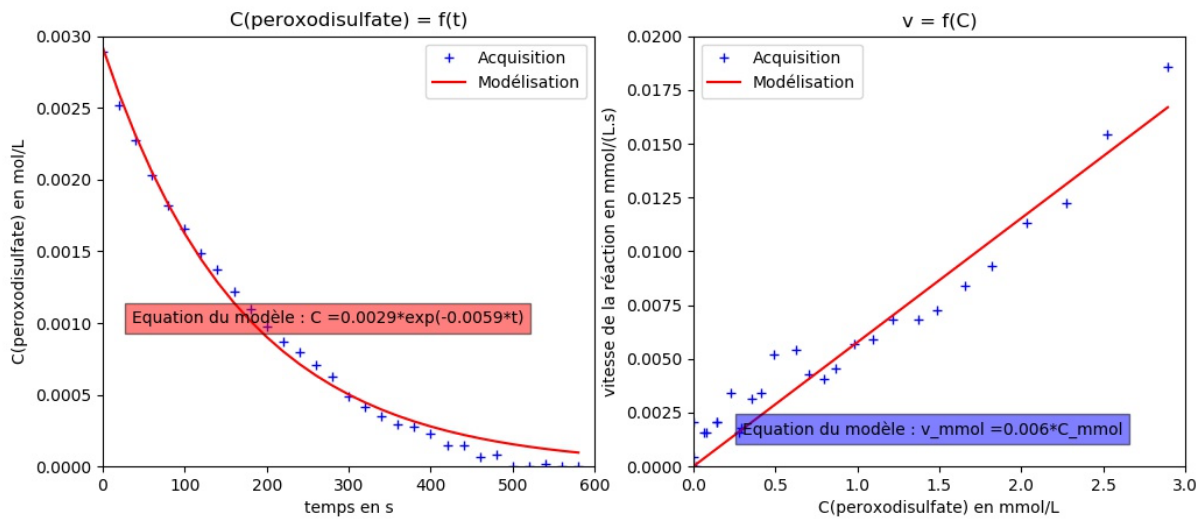
Résultats :

- **Créer** un fichier CSV contenant les données de l'acquisition en utilisant la méthode donnée p 36 du cahier Python : enregistrer votre fichier sous le nom : « Abs_Temps_catalyseur.csv »

abs_temps_catalyseur

0.104273505159654	0	0.337606840475928	320
0.139316240500193	20	0.343589746509679	340
0.162393163773231	40	0.349572652543429	360
0.185470087046269	60	0.350427353405394	380
0.20512820687145	80	0.35555555857718	400
0.220512822386809	100	0.363247866334859	420
0.236752138764132	120	0.363247866334859	440
0.247863249969669	140	0.370940174092539	460
0.262393164623063	160	0.36923077236861	480
0.2735042758286	180	0.376923080126289	500
0.284615387034137	200	0.376923080126289	520
0.294871797377709	220	0.375213678402361	540
0.301709404273424	240	0.376923080126289	560
0.310256412893068	260	0.376923080126289	580
0.317948720650747	280		
0.330769233580213	300		

- **Exécuter** le programme et **reproduire** ci-dessous les courbes obtenues en notant les équations des modélisations associées.



Partie 3 : Confrontation des données expérimentales avec le modèle théorique (15min)

Compléter le rapport à rendre à votre supérieur pour répondre aux objectifs énoncés dans son mail :

Rapport : d'oxydoréduction entre les ions iodures I^- et les ions péroxodisulfate $S_2O_8^{2-}$.

Par Dr Maëlle FOSCO

1) Efficacité des ions Fe^{2+} comme catalyseurs :

Les ions Fe^{2+} permettent bien de catalyser la réaction car en l'absence de Fe^{2+} , le temps de demi-réaction est de 360s alors qu'en présence du catalyseur il est de 115s.

2) Ordre de la réaction :

- La réaction est bien d'ordre 1 par rapport aux ions peroxodisulfate car :
 - ➔ L'évolution de la concentration en fonction du temps est de type exponentielle décroissante
 - ➔ La vitesse est proportionnelle à la concentration.

3) Mécanisme de la réaction :

La confrontation entre les résultats expérimentaux et les lois de vitesse prévues par les différentes options du mécanisme permet d'affirmer que

-Le mécanisme proposé est valide et l'étape 1 impose sa vitesse (Option 1)