

## Activité numérique : Détermination d'une composition finale d'un système par un outil numérique

Il existe plusieurs façons de déterminer la composition finale d'un système suite d'une transformation chimique considérée comme totale à partir de la connaissance de son état initial.

### DOC. 1 Préparation d'une feuille de calcul

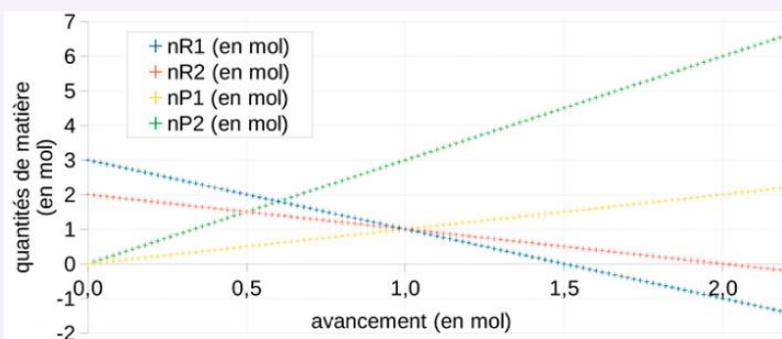
La capture d'écran ci-dessous propose une façon de déterminer la composition finale d'un système suite d'une transformation chimique totale à l'aide d'un tableur-grapheur.

« R<sub>1</sub> » et « R<sub>2</sub> » sont deux réactifs, et « P<sub>1</sub> » et « P<sub>2</sub> » sont deux produits d'une transformation donnée.

Les cellules des colonnes A à E et des lignes au-delà de la ligne 3 reproduisent les formules des cellules de la ligne 3.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	x (en mol)	n <sub>R1</sub> (en mol)	n <sub>R2</sub> (en mol)	n <sub>P1</sub> (en mol)	n <sub>P2</sub> (en mol)			
2	0	3,00	2,00	0	0			
3	=A2+H\$3	=B\$2-H\$4*A3	=C\$2-H\$5*A3	=D\$2+H\$6*A3	=E\$2+H\$7*A3		Δx (mol) = ...	
4	0,02	2,96	1,98	0,02	0,06		a1 = ...	
5	0,03	2,94	1,97	0,03	0,09		a2 = ...	
6	0,04	2,92	1,96	0,04	0,12		b1 = ...	
7	0,05	2,90	1,95	0,05	0,15		b2 = ...	
8	0,06	2,88	1,94	0,06	0,18			
9	0,07	2,86	1,93	0,07	0,21			

### DOC. 2 Évolution des quantités de réactifs et de produits en fonction de l'avancement



1/ Identifier les grandeurs figurant dans les colonnes A, B, C, D et E du document 1.

2/ Identifier à quoi correspondent les nombres dans la ligne 2.

3/ En colonne H figurent les valeurs numériques de paramètres caractéristiques nécessaires pour les calculs des quantités de réactifs et de produits pour chaque état d'avancement de la transformation.

**a/** Retrouver à partir des valeurs numériques dans les cellules de la colonne A, la valeur de l'intervalle d'avancement Δx choisi entre deux états d'avancement donnés (valeur à placer dans la cellule H3).

**b/** Déterminer, à partir des valeurs numériques contenues dans les cellules B4, C4, D4 et E4, les valeurs des nombres stoechiométriques relatifs à la transformation étudiée (valeurs à placer dans les cellules H4 à H7)

**c/** Etablir le tableau d'avancement associé à la transformation étudiée.

4/ A l'aide du document 2 :

**a/** Déterminer graphiquement le réactif limitant et la valeur de l'avancement maximal.

**b/** Préciser la composition du système à l'état final si la transformation est considérée comme totale.

5/ Compléter le programme python fourni par le professeur afin de déterminer la composition dans l'état final du même système subissant la même transformation chimique, considérée comme totale.

```

# Affectation de La liste des nombres stoechiométriques associés aux réactifs :
a=[...à compléter...]
# Affectation de La liste des nombres stoechiométriques associés aux produits :
b=[...à compléter...]

# Affectation de La liste des quantités initiales des réactifs :
nR=[...à compléter...]
# Affectation de La liste des quantités initiales des produits :
nP=[...à compléter...]

# Initialisation de l'avancement :
x=0
# Affectation de l'intervalle d'avancement :
dx=[...à compléter...]

# Boucle simulant l'avancement progressif de la transformation,
# tant que les quantités des deux réactifs restent positives :
while nR[0]>0 and nR[1]>0:
    x+=dx # augmentation de l'avancement de dx
    nR[0]-=a[0]*dx # diminution de n(R1)
    nR[1]-=a[1]*dx # diminution de n(R2)
    nP[0]+=...à compléter...*dx # augmentation de n(P1)
    nP[1]+=...à compléter...*dx # augmentation de n(P2)

# Affichage de la valeur de l'avancement final, maximal :
print("Si la réaction est totale, alors xf = xmax =", '{:.2f}'.format(x), "mol.")

# Affichage des quantités restantes à l'EF en chacun des réactifs (avec boucle) :
for i in range(2):
    print("La quantité finale du réactif R"+str(i+1)+" vaut :", '{:.2f}'.format(nR[i]), "mol")

# Affichage des quantités formées à l'EF en chacun des produits (sans boucle) :
print("La quantité finale du produit P1 vaut :", '{:.2f}'.format(nP[0]), "mol")
print("La quantité finale du produit P2 vaut :", '{:.2f}'.format(nP[1]), "mol")

```

6/ Exécuter le programme Python et le valider en comparant la composition finale du système déterminée à celle obtenue à la question 4.b.