C4 AE 13

CHIMIE PROGRAMMATION ! ACTIVITE EXPERIMENTALE
AVANCEMENT et CODE PYTHON

Mais au fait… pourquoi Python ?

Aujourd'hui, l'objectif est de réutiliser un tableau d'avancement (encore, oui !) mais d'optimiser son utilisation pour gagner en vitesse de résolution avec –carrément – un **script Python** !

REA /5 — ANA /5 — RESPON. /5

OBJECTIF : Pourquoi et comment **des métaux peuvent-ils réagir par oxydoréduction**

A. Activité préparatoire (REA)

On considère la réaction entre les ions cuivre (II), Cu^{2+} et le métal aluminium Al. Elle peut être modélisée par l'équation :

$$2\ Al_{(s)} + 3\ Cu^{2+}_{(aq)} \rightarrow 2\ Al^{3+}_{(aq)} + 3\ Cu_{(s)}$$

On verse $V = 100\ mL$ de sulfate de cuivre (II), de concentration en quantité de matière en ions cuivre (II) (Cu^{2+}) $C = 4{,}0 \times 10^{-1}\ mol \cdot L^{-1}$ sur une masse de poudre d'aluminium $m_{Al} = 0{,}54\ g$.

Masses molaires atomiques : $M(Al) = 27{,}0\ g \cdot mol^{-1}$ $M(Cu) = 63{,}5\ g \cdot mol^{-1}$

Q1. Déterminer les quantités de matières initiales de chaque réactif et produit de la réaction.

Q2. Compléter le tableau et, après avoir déterminé x_{max} et réactif limitant, compléter **numériquement** la dernière ligne.

		$2\ Al_{(s)}$ +	$3\ Cu^{2+}_{(aq)}$ →	$2\ Al^{3+}_{(aq)}$ +	$3\ Cu_{(s)}$
État du système	**Avancement**	**Quantités de matière en mol**			
État initial					
En cours					
État final					

B. Comment automatiser le raisonnement ? (ANA)

Q3. Analyser la démarche : que compare-t-on lorsque l'on recherche le réactif limitant ?

C. Analyse d'un programme (ANA)

On dispose d'un script python (d'après l'exercice 23 p. 62), permettant de résoudre le problème pour l'équation étudiée :

```
1  ## Bilan de matière
2  print("Equation  de la réaction : 2 Al + 3 Cu2+ -> 2 Al3+ + 3 Cu\nDétermination de l'état final.")
3  a,b,c,d = 2,3,2,3
4  nA,nB = 2.0e-2,4.0e-2
5  print("\nQuantités de matière initiales des réactifs Al et Cu2+ :")
6  print("ni(Al) = {} mol\nni(Cu2+) = {} mol\n".format(nA, nB))
7  xmaxA, xmaxB = nA / a, nB / b
8  if xmaxA == xmaxB:
9      print("Le mélange est stoechiométrique")
10     xmax = xmaxA
11 elif xmaxA < xmaxB:
12     print("Al est le réactif limitant.")
13     xmax = xmaxA
14 else:
15     print("Cu2+ est le réactif limitant.")
16     xmax = xmaxB
17 print("xmax =", round(xmax,2), "mol")
18 nfA, nfB= round(nA - a * xmax,2), round(nB - b * xmax,2)
19 nfC, nfD = round(c * xmax,2), round(d * xmax,2)
20 print("\nQuantités de matière à l'état final :")
21 print("Quantités de matière de réactifs restants à l'état final :")
22 print("nf(Al) = {} mol\nnf(Cu2+) = {} mol".format(nfA, nfB))
23 print("Quantités de matière de produits formés à l'état final :")
24 print("nf(Al3+) = {} mol\nnf(Cu) = {} mol\n".format( nfC, nfD))
```

Q4. **a.** Que fait le script à la ligne 2 ?
b. Aux lignes 3 et 4 ?
c. Aux lignes 5 et 6 ?

Q5. Justifier que les lignes 7 à 17 effectuent le travail de comparaison décrit à la question **Q3**.

Q6. Donner l'utilité de la ligne 17.

Q7. Expliquer le rôle des lignes 18 à 24.

D. Utilisation du programme

Q8. Tester le programme avec les valeurs de l'exercice d'introduction.

Q9. On désire maintenant exécuter ce programme avec une autre réaction modélisée par une autre équation chimique. Indiquer les lignes où il faut faire des modifications pour cela (si tu as le temps, teste sur un des exercices du manuel).