

But de l'activité : Pour une réaction du type  $a.A + b.B \longrightarrow c.C + d.D$ , écrire un algorithme permettant de déterminer le réactif limitant et le traduire en langage Python pour déterminer l'état final du milieu réactionnel.

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

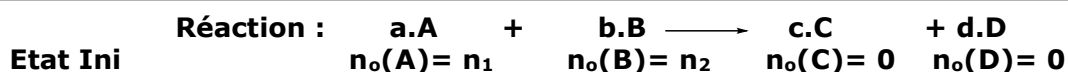


Dans un bécher, on verse  $V = 100 \text{ mL}$  d'une solution de sulfate de cuivre de concentration  $C = 4,0 \cdot 10^{-1} \text{ mol.L}^{-1}$  en ions  $\text{Cu}^{2+}(\text{aq})$  puis on ajoute une masse  $m = 0,54 \text{ g}$  de poudre d'aluminium

Masse molaire :  $M(\text{Al}) = 27,0 \text{ g.mol}^{-1}$

### Document 1 : L'avancement maximal $x_{\text{max}}$ d'une transformation totale

#### TRANSFORMATION TOTALE : $X_f = x_{\text{max}}$



#### REACTIF LIMITANT

Si le réactif A est limitant alors :

$$n_1 - a x_{\text{max}} = 0$$

$$\text{Soit } x_{\text{max}} = n_1/a$$

Si le réactif B est limitant alors :

$$n_2 - b x_{\text{max}} = 0$$

$$\text{Soit } x_{\text{max}} = n_2/b$$

La plus petite des deux valeurs est celle de  $x_{\text{max}}$   
Le réactif associé est le réactif limitant

La connaissance de  $x_{\text{max}}$  permet de faire un bilan de quantité de matière

La connaissance de  $x_{\text{max}}$  permet de compléter le tableau d'avancement et de retrouver les quantités de matières finales pour les réactifs et les produits

### I. Travail préliminaire (à la maison)

- Déterminer les quantités de matières **initiales** de chaque réactif et produit de la réaction.
- Compléter le tableau d'avancement suivant et, après avoir déterminé  $x_{\text{max}}$  et le réactif limitant compléter le tableau d'avancement ci-dessous.

Equation-bilan :	$2\text{Al(s)}$	+	$3\text{Cu}^{2+}(\text{aq})$	$\longrightarrow$	$2\text{Al}^{3+}(\text{aq})$	+	$3\text{Cu(s)}$
Etat initial $x=0$							
Etat intermédiaire $x$							
Etat final $x=x_f=x_{\max}$ (Expression littérale)							
Etat final $x_f = x_{\max} = \dots\dots$ (Ecriture chiffrée)							

## II. Traduction d'un algorithme en langage Python :

1. Ouvrir l'éditeur EduPython et ouvrir le programme « **1ere\_Chimie\_Etat\_final\_reaction.py** »

Dans ce programme, pour chaque espèce, 4 variables sont associées. Par exemple pour le réactif 1 :

Contenu de la variable	Nom de la variable	Type
Formule du réactif 1	r1	Texte (string)
Quantité de matière initiale	n1_ini	Réel (float)
nombre stœchiométrique	stoechio1	Entier (int)
Quantité de matière finale	n1_fin	Réel (float)

Il en est de même pour le réactif 2, le produit 1 et le produit 2

2. **TRAVAIL 1:** Dans la partie «**Formules des réactifs et produits**», saisir la formule (sans respect de mise en forme) de chaque réactif et produit (bien les mettre entre guillemets car il s'agit de textes).

REA :

3. **TRAVAIL 2:** Dans la partie «**Quantités de matière initiales**», saisir les quantités de matière initiales calculées au I1.

- ⚠ Pour taper un nombre à virgule, il faut utiliser le caractère point car c'est un langage anglais :
- ⚠ Pour saisir une puissance de 10 en python, il faut taper « e ». Exemple :  $2,5 \cdot 10^{-3}$  se tape: **2e-3**

REA :

4. **TRAVAIL 3:** Dans la partie «**Nombres stœchiométriques**», saisir le nombre stœchiométrique de chaque réactif et produit en utilisant l'équation de la réaction.

REA :

**5. TRAVAIL 3:** Dans la partie «**Recherche du réactif limitant et de  $x_{\max}$** », compléter, en vous aidant éventuellement du doc.2, le code pour déterminer la valeur de  $x_{\max}$  et le nom du réactif limitant.

**Document 2 : Correspondances entre le langage naturel et le langage Python :**

Langage algorithmique naturel	Langage Python
Si $A > B$ alors : Exécuter l'instruction 1 Exécuter l'instruction 2 Sinon Exécuter l'instruction 3 Exécuter l'instruction 4 Fin du si et du sinon	<b>if <math>A &gt; B</math> :</b> <b>instruction 1</b> <b>instruction 2</b> <b>else :</b> <b>instruction 3</b> <b>instruction 4</b>
La variable « n » prend la valeur « $n_{\text{ini}} - 2x_{\max}$ »	<b>n = <math>n_{\text{ini}} - 2 * x_{\max}</math></b>

Ne pas oublier les deux points qui indiquent le début du bloc « if »

Les instructions du bloc « if » doivent être alignées l'une sous l'autre et décalées par rapport au « if » (on appelle cela **indentées**)

Ne pas oublier les deux points qui indiquent le début du bloc « else »

**Remarque :** "%.1e"%**1** veut dire 1 chiffre après la virgule et **e** veut dire en écriture scientifique donc cela signifie 2CS

REA :

**6. TRAVAIL 4:** Dans la partie «**Calcul des quantités de matière finales**», suivre les consignes du programme écrites en rose : il faut écrire le code assignant aux variables de quantités de matière finales leur valeur en fonction des quantités de matières initiales, de l'avancement et des coefficients stœchiométriques.

ATTENTION : Il faut respecter la syntaxe du programme

REA :

**7.** Tester le programme. L'état final est affiché dans la console (en bas de la fenêtre). Le noter  
Vérifier que l'état final affiché est bien en accord avec l'état final calculé dans le I.

A la fin de la séance je dois savoir :	A	PA	NA
<ul style="list-style-type: none"> <li>-Savoir-faire un tableau d'avancement</li> <li>-Retrouver le réactif limitant et la valeur de <math>x_{\max}</math></li> <li>-A partir de <math>x_{\max}</math> calculer la quantité de matière des produits et des réactifs en fin de réaction.</li> <li>-Compléter un programme python afin déterminer : le réactif limitant, les quantités de matière à l'état final des réactifs et des produits</li> </ul>			