

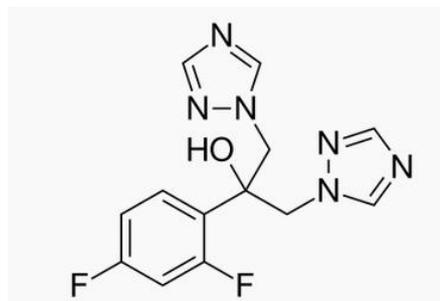
fluconazole

Question simple

Exprimer le temps de demi-réaction à partir de la loi de vitesse d'ordre 0 ou 1 ou 2 au choix (1 réactif)

Question ouverte

De nombreuses impuretés, dues à leur biodégradation incomplète dans les stations d'épuration, sont souvent détectées dans les eaux de surface. C'est le cas notamment du fluconazole, médicament antifongique systémique, apparenté à la famille des triazolés indiqué dans le traitement des candidoses cutanéomuqueuses et dans les mycoses liées au SIDA. Il est commercialisé en France sous le nom de *Triflucan*.



On s'intéresse à deux méthodes de destruction du fluconazole dans l'eau :

- par traitement UV (générateur avec lampe UV de 150W)
- par traitement UV avec utilisation d'un composé chimique (PER : persulfate de sodium $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$) (générateur avec lampe UV de 150W)

Calculer le coût des deux méthodes pour la destruction de la moitié du fluconazole dans un litre d'eau à la concentration initiale de 10 mmol.L^{-1}

Données

Cout du kilowattheure : 0.202 €/kWh

Cout du PER: 35€/Kg

Masses molaires atomiques en g.mol^{-1}

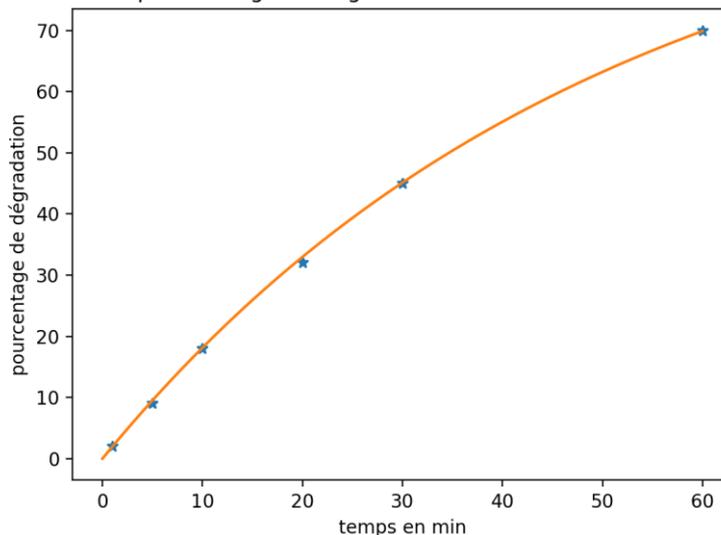
O : 16 S : 32 Na : 23

Document 1 : suivi de la dégradation du fluconazole au cours du temps par deux méthodes

- dégradation par traitement UV

Temps (min)	1	5	10	20	30	60
% dégradation du fluconazol	2	9	18	32	45	70

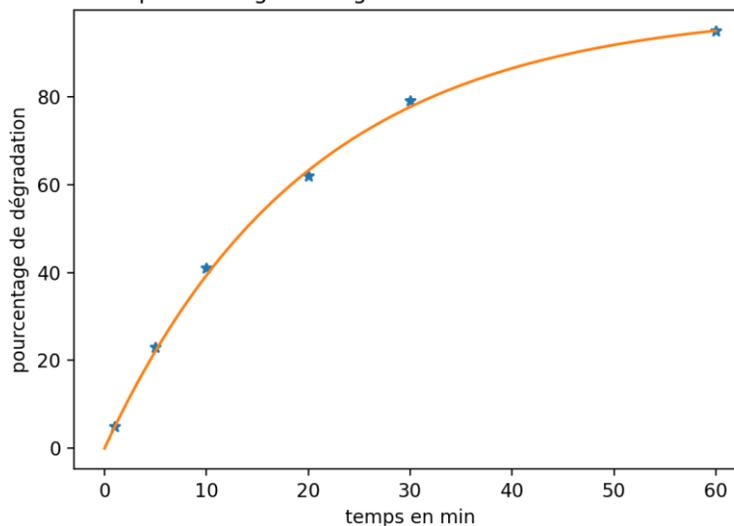
évolution du pourcentage de dégradation du fluconazol sous UV sans PER



- dégradation par traitement UV avec utilisation d'un composé chimique (PER : persulfate de sodium $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$, concentration initiale $1,0 \text{ mmol.L}^{-1}$)

Temps (min)	1	5	10	20	30	60
% dégradation du fluconazol	5	23	41	65	79	95

évolution du pourcentage de dégradation du fluconazol sous UV avec PER



Document 2 (à donner pendant la présentation)

Le script incomplet suivant permet de tester le modèle de l'ordre 1. Compléter les lignes 8, 12 et 13.

```
1 import matplotlib.pyplot as plt
2 import numpy as np
3
4 #entrée des valeurs :
5 tps=np.array([1,5,10,20,30,60])      # temps en minutes
6 p_degrad=np.array([2,9,18,32,45,70]) # pourcentage de dégradation
7
8 a,b=np.polyfit(# A COMPLETER)
9
10 #Tracé du nuage de points et de la droite modèle
11 plt.figure(1)
12 plt.plot(# A COMPLETER)      # tracé du nuage de points
13 plt.plot(# A COMPLETER)      # tracé de la droite modèle
14 plt.title('modèle ordre 1')
15 plt.xlabel('temps en minutes')
16 plt.grid()
17 plt.show()
18 print(p[0])
19
20 #Calcul et affichage des résidus
21 plt.figure(2)
22 plt.scatter(tps,np.log(100-p_degrad)-(a*tps+b),c='r')
23 plt.title("Résidus")
24 plt.xlabel('temps en minutes')
25 plt.axhline()
26 plt.grid()
27 plt.show()
```

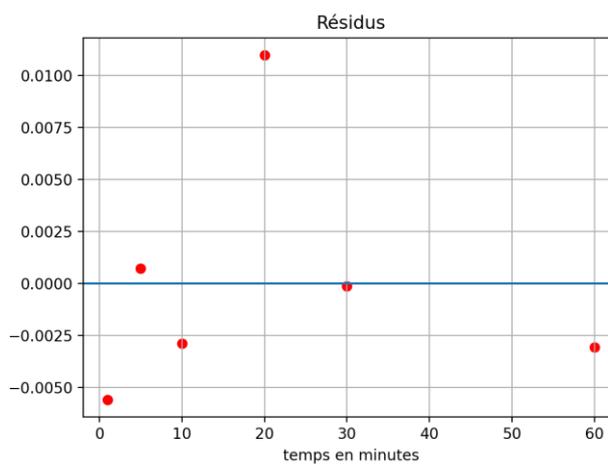
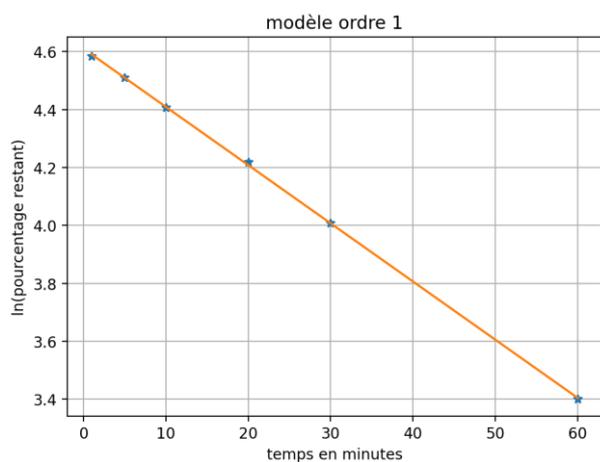
`Polyfit` est une fonction de la bibliothèque `numpy` qui permet, comme son nom l'indique, d'obtenir les paramètres de **modélisations polynomiales**.

Dans le cas d'une loi linéaire la modélisation polynomiale est d'ordre 1 : `np.polyfit(X, Y, 1)` renvoie une liste avec les deux paramètres (pente et ordonnée à l'origine) pour le modèle affine entre les données en abscisse notées X et elles en ordonnée Y.

EDocument 3 (à donner pendant la présentation)

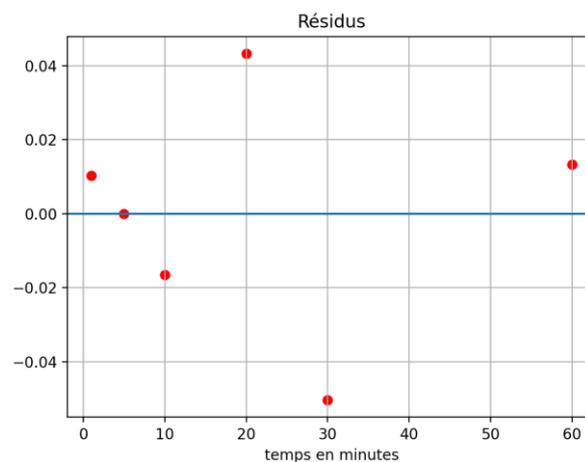
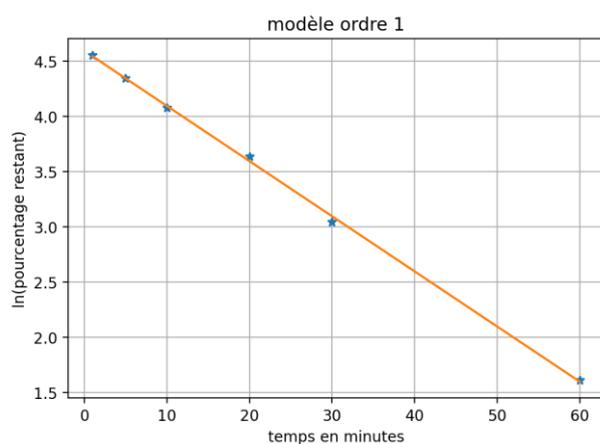
Le script du document 2 appliqué aux résultats expérimentaux du document 1 renvoie les résultats suivants

- dégradation par traitement UV



```
>>> (executing file "fluconazole UV.py")  
-0.020106648970944378
```

- dégradation par traitement UV avec utilisation d'un composé chimique (PER : persulfate de sodium $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$, concentration initiale $1,0 \text{ mmol.L}^{-1}$)



```
>>> (executing file "fluconazole UV-PER.py")  
-0.049958042899125345
```

Correction : fluconazole

Question simple : modèle $A \xrightarrow{k} B$

• ordre 0 : $\frac{d[A]}{dt} = -k \Rightarrow [A] = [A]_0 - kt \Rightarrow t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k}$

• ordre 1 : $\frac{d[A]}{dt} = -k[A] \Rightarrow [A] = [A]_0 e^{-kt} \Rightarrow t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$

• ordre 2 : $\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^2 \Rightarrow \frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt \Rightarrow t_{1/2} = \frac{1}{k[A]_0}$

Question ouverte

doc 1 : Des $t_{1/2}$ pour 50% de dégradation peuvent être évalués approximativement pdt le $t_{1/2}$ de préparation pour mener le calcul mais l'exploitation des docs 2 et 3 permet d'être plus précis.

doc 2 : soit p -degrad le % de dégradatⁿ

$$p\text{-degrad} = \frac{[A]_0 - [A]}{[A]_0} \stackrel{\text{① ordre 1}}{=} \frac{[A]_0 - [A]_0 e^{-kt}}{[A]_0} = 1 - e^{-kt}$$

$$\Rightarrow 1 - p\text{-degrad} = e^{-kt} \Rightarrow \ln(1 - p\text{-degrad}) = -kt$$

Régné 8 : a, b = mp. polyfit (éps, mp. log(100 - p-degrad), 1)

Régné 12 : plt. plot (éps, mp. log(100 - p-degrad))

Régné 13 : plt. plot (éps, a * éps + b)

doc 3 : pour chaque expérience les graphes confirment l'hypothèse de l'ordre 1

exp UV : $R = +0,020 \text{ min}^{-1} \Rightarrow t_{1/2} = 34,7 \text{ min}$

Soit C_{uv} le coût de la destruction de la moitié du glucanazole :

$$C_{uv} = P \times t_{1/2} \times PE^-$$

puissance de la pompe prix du kWh

AN : $C_{uv} = 0,15 \times \frac{34,7}{60} \times 0,202 = 0,018 \text{ euro}$

exp UV + PER : $R = +0,050 \text{ min}^{-1} \Rightarrow t_{1/2} = 13,9 \text{ min}$

Soit C_{uv-PER} le coût de la destruction de la moitié du glucanazole :

$$C_{uv-PER} = P \times t_{1/2} \times PE^- + m_{PER} \times PPS$$

↳ prix du persulfate

$$\text{avec } m_{PER} = [PER] \times V \times \frac{1}{PE^-}$$

AN : $C_{uv-PER} = 0,15 \times \frac{13,9}{60} \times 0,202 + 10^{-3} \times 1 \times 0,238 \times 35$

$$C_{uv-PER} = 0,015 \text{ euro}$$