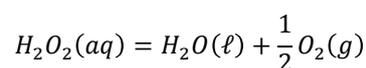


Capacité numérique 1 : Tracer, à l'aide d'un langage de programmation, l'évolution temporelle de la température pour un système siège d'une transformation adiabatique modélisée par une seule réaction chimique dont les caractéristiques cinétiques et l'enthalpie standard de réaction sont données.

Jupyternote book à télécharger sur cahier de prépa :capacite_numerique1_eleve

On considère la dismutation du peroxyde d'hydrogène. Cette transformation est modélisée par la réaction d'équation :



L'objectif est de prévoir l'évolution de la température au cours du temps dans un calorimètre de capacité thermique négligeable lors de la dismutation du peroxyde d'hydrogène, catalysée par les ions iodure.

Le protocole expérimental consiste mélanger, à l'instant $t = 0$:

- 30 mL d'une solution de peroxyde d'hydrogène à $3,5 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$
- et 4 mL d'une solution d'iodure de potassium à $0,10 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$.

Données recueillies lors d'une étude expérimentale¹ :

À 24 °C, la constante de vitesse vaut $k_{297K} = 5 \cdot 10^{-2} \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

L'énergie d'activation vaut $E_a = 56 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

L'enthalpie standard de réaction vaut $\Delta_r H^\circ = -98 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

La loi de vitesse volumique est de la forme : $v = k [H_2O_2][I^-]$

Données :

$R = 8,31 \text{ J/K/mol}$

$C_{eau} = 4,2 \text{ J/K/g}$

$\rho_{eau} = 1E3 \text{ g/L}$

1. Montrer que :

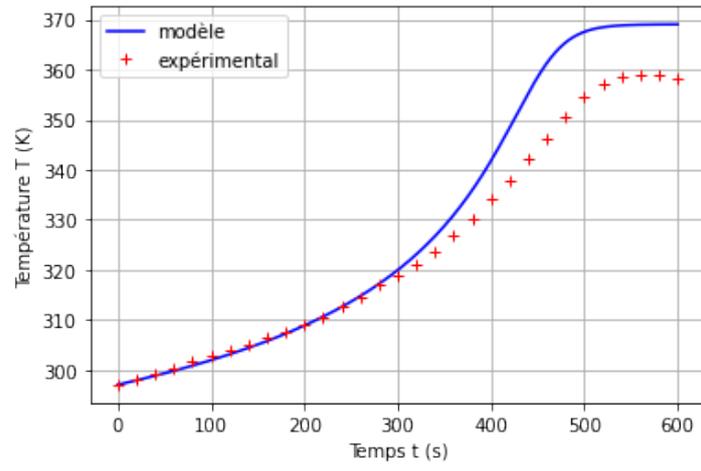
$$\frac{d\xi}{dt} \approx \frac{\Delta\xi}{\Delta t} = k(T)[H_2O_2][I^-]V_{tot}$$

où ξ est l'avancement de la réaction.

En déduire l'expression de $d\xi$ en fonction de dt .

2. Établir à l'aide d'un bilan enthalpique, une relation permettant de calculer la température du milieu réactionnel pour une valeur d'avancement ξ . Préciser les hypothèses simplificatrices mises en œuvre.
3. Écrire la fonction $k(\text{Temp})$ qui renvoie la valeur numérique de la valeur de k en fonction de la température.
4. Compléter le script reproduit ci-après en mettant en œuvre la méthode d'intégration d'Euler pour calculer numériquement la température du système au cours du temps.
5. Comparer les résultats expérimentaux et ceux obtenus par le modèle théorique. Proposer des explications aux différences observées.

¹ Efficient Method for the Determination of the Activation Energy of the Iodide-Catalyzed Decomposition of Hydrogen Peroxide, William Sweeney, James Lee, Nauman Abid and Stephen DeMeo, *J. Chem. Educ.* 2014, 91, 8, 1216–1219



Résultats théoriques et expérimentaux superposés :

```
[ ]: #IMPORTATION DES BIBLIOTHEQUES
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
```

```
[ ]: #DONNES NUMERIQUES
R = 8.31          #constante des gaz parfaits en J/K/mol
c_eau = 4.2       #capacité thermique massique de l'eau en J/K/g
rho_eau = 1E3     #masse volumique de l'eau en g/L
Ea = 56E3         #énergie d'activation en J/mol
DrHo = -98E3     #enthalpie standard de réaction en J/mol
delta_t = 1E-1   #pas de temps pour la méthode d'Euler en s
```

```
[ ]: #DONNEES RELATIVES AU PROTOCOLE EXPERIMENTAL
T0 = 297         #température initiale en K
k0 = 5E-2        #valeur de la constante de vitesse à T0 en L/mol/s
C_H2O2_s = 3.5   #concentration en H2O2 dans solution stock en mol/L
V_H2O2 = .03     #volume introduit d'eau oxygénée en L
C_KI_s = 0.1     #concentration en KI dans la solution stock en mol/L
V_KI = 4E-3      #volume intro de solution d'iodure de potassium en L
```

```
[ ]: #CALCULS SUR L'ETAT INITIAL
Vtot = V_H2O2 + V_KI          #volume total supposé constant
n0 = C_H2O2_s * V_H2O2       #quantité de matière initiale H2O2
CKI = C_KI_s * V_KI / Vtot   #concentration I- dans le mélange (cte)
Capa = rho_eau * Vtot * c_eau #capacité thermique du milieu (cte)
```

```
[ ]: #DEFINITION DE FONCTIONS
def k(Temp) :

    #calcule la valeur de la constante de vitesse à la température Temp

def Temp(avct) :

    #calcule la valeur de la température pour un avancement avct en mol
```

```
[ ]: #CREATION DE LISTES
t = [0]          #Liste des temps
```

```
ksi = [0]        #Liste des avancements en mol
CH2O2 = [n0 / Vtot] #Liste des concentrations en H2O2
T = [T0]         #Liste des températures
```

```
[ ]: #BOUCLE D'INTEGRATION
while t[-1] < 600 and CH2O2[-1]>0 :
    new_ksi =
    ksi.append(new_ksi)
    CH2O2.append( (n0 - new_ksi) / Vtot )
    T.append(Temp(new_ksi))
    t.append(t[-1] + delta_t)
```

```
[ ]: # Tracé de la courbe T = f(t)
plt.plot(t,T)
plt.title('T = f(t)')
plt.ylabel('T/(K)')
plt.xlabel('t/(s)')
plt.show()
```

```
[ ]:
```