

CCS2 cinétique chimique

1 Cinétique d'ordre 1

On considère une réaction en milieu aqueux $2A = 3B + C$ se faisant dans un réacteur de température T constante. On suppose que la réaction admet un ordre égal à 1. On note k la constante de vitesse.

1. Etablir l'évolution temporelle de la concentration $[A](t)$ en notant C_0 la concentration initiale.

Réponse :

$$v = -\frac{1}{2} \frac{d[A]}{dt} = k[A](t)$$

On résout l'équation différentielle :

$$[A](t) = C_0 \exp(-2kt)$$

2. En déduire l'expression du temps de demi-réaction $t_{1/2}$. Quel est le lien avec la concentration initiale ?

Réponse :

Elle est indépendante de la concentration initiale.

$$t_{1/2} = \frac{\ln(2)}{2k}$$

3. Pour une concentration initiale $C_0 = 0,055 \text{ mol L}^{-1}$, on obtient le tableau de valeurs expérimentales suivant :

t en s	0	200	400	600	800	1000	1200
$[A](t)$ en $1 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$	55,0	23,0	9,80	4,10	1,70	0,75	0,31

Ecrire un programme Python permettant de déterminer k à l'aide d'une régression linéaire et de calculer le temps de demi-réaction.

Réponse :

On trace $\ln([A]) = f(t)$. Voir programme corrigé. Les points sont alignés.

La modélisation donne

$$\ln([A]) = -4,31 \times 10^{-3}t - 2,91$$

On en déduit $k = 2,15 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, soit $t_{1/2} = 161 \text{ s}$.

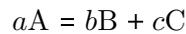
On constate que cette valeur est cohérente par rapport au tableau, puisqu'à 200 s, la concentration est légèrement inférieure à la concentration initiale divisée par 2.

4. L'expérience a été répétée avec $[A](t = 0) = 0,11 \text{ mol L}^{-1}$ à la même température. On obtient $k = 2,0 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. L'hypothèse d'une réaction d'ordre 1 est-elle correcte ?

Réponse :

Si la réaction admet un ordre 1, alors la constante de vitesse est indépendante de la concentration initiale. Elle ne dépend que de la température. Ici l'écart est de 5%. Le modèle d'ordre 1 fonctionne donc convenablement.

On considère une réaction chimique sous la forme :



qui est d'ordre n .

5. Montrer que la concentration de A vérifie l'équation différentielle :

$$\frac{d[A]}{dt} + ka ([A](t))^n = 0.$$

Réponse :

On utilise les 2 expressions de la vitesse :

$$v = k[A](t)^n = \frac{-1}{a} \frac{d[A]}{dt}$$

La méthode d'Euler permet alors de calculer la concentration $[A](t + dt)$ connaissant la concentration $[A](t)$ grâce à la relation suivante :

$$[A](t + dt) = [A](t) - ka ([A](t))^n dt.$$

6. Compléter alors le script Python nommé euler_cinetique_chimique.py afin de tracer, en fonction du temps, la concentration calculée lors de la question 3.

Réponse :

Aide python :

```
import numpy as np # bibliothèque scientifique
np.log(x) # logarithme népérien du nombre x
x = np.array([1,2,3]) # exemple de syntaxe tableau numpy
a,b = np.polyfit(x,y,1) # calcul des coefficients a et b tels que y=ax+b par régression linéaire.
x et y sont des tableaux numpy
```