

7.E8 - Modélisation d'une cinétique (python)

On mélange une solution contenant des ions peroxodisulfate $S_2O_8^{2-}(aq)$ avec une solution contenant les ions iodure $I^-(aq)$. Les concentrations initiales une fois le mélange réalisé sont : $[S_2O_8^{2-}]_0 = 0,017 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ et $[I^-]_0 = 0,200 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$.

La réaction qui se produit est : $S_2O_8^{2-}(aq) + 2 I^-(aq) \rightarrow 2 SO_4^{2-}(aq) + I_2(aq)$.

La concentration en diiode au cours du temps est donnée dans le tableau ci-dessous :

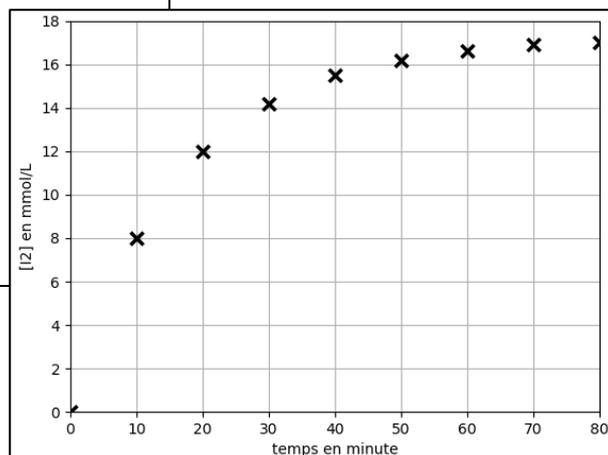
| t (en min) | 0 | 10 | 20 | 30 | 40 | 50 | 60 | 70 | 80 |
|--|---|-----|------|------|------|------|------|------|----|
| [I ₂] (en mmol·L ⁻¹) | 0 | 8,0 | 12,0 | 14,2 | 15,5 | 16,2 | 16,6 | 16,9 | 17 |

1. Afin de tracer le graphique, on écrit le programme ci-dessous, et on obtient de graphique suivant.

```

1 import matplotlib.pyplot as plt
2 tab_t_min = [0,10,20,30,40,50,60,70,80]
3 tab_C = [0,8,12,14.2,15.5,16.2,16.6,16.9,17]
4 plt.plot(tab_t_min, tab_C, 'kx ', ms=8, mew=2.5)
5 plt.axis([0, 80, 0,18])
6 plt.grid()
7 plt.xlabel ("temps en minute")
8 plt.ylabel ("[I2] en mmol/L")
9 plt.show()

```



1.1. Expliquer le rôle des lignes 2 et 3.

1.2. Quelle est la valeur de la concentration en diiode [I₂] lorsque la transformation est terminée ?

1.3. En explicitant votre raisonnement, indiquer le réactif limitant de la transformation.

2. On souhaite que l'unité du temps soit la seconde. Pour cela on ajoute le code incomplet suivant entre les lignes 3 et 4 :

```

4 tab_t_s = [          for t in t_min]

```

2.1. Compléter ce code.

2.2. Indiquer les deux autres modifier à apporter au programme.

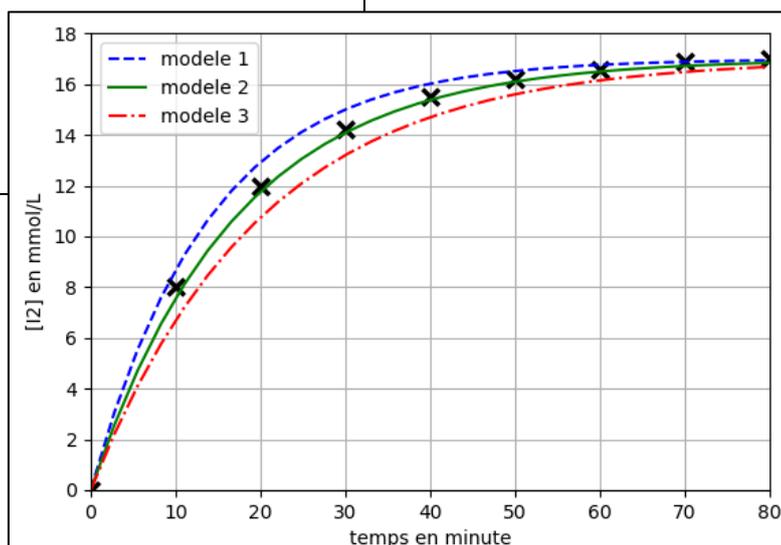
3. On souhaite modéliser les résultats expérimentaux pas une fonction exponentielle.

Pour cela, on complète le programme initial et on obtient le graphique ci-après.

```

1 from math import exp
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 tab_t_min = [0,10,20,30,40,50,60,70,80]
4 tab_C = [0,8,12,14.2,15.5,16.2,16.6,16.9,17]
5 tab_t2 = range(0,81,2)
6 tab_C_modele1 = [17*(1-exp(-t/14)) for t in tab_t2]
7 tab_C_modele2 = [17*(1-exp(-t/17)) for t in tab_t2]
8 tab_C_modele3 = [17*(1-exp(-t/20)) for t in tab_t2]
9 plt.plot(tab_t_min, tab_C, 'kx ', ms=8, mew=2.5)
10 plt.plot(tab_t2, tab_C_modele1, 'b--', label='modele 1')
11 plt.plot(tab_t2, tab_C_modele2, 'g-', label='modele 2')
12 plt.plot(tab_t2, tab_C_modele3, 'r-.', label='modele 3')
13 plt.axis([0, 80, 0,18])
14 plt.grid()
15 plt.xlabel ("temps en minute")
16 plt.ylabel ("[I2] en mmol/L")
17 plt.legend()
18 plt.show()

```



3.1. Le modèle exponentiel est-il approprié ? Peut-on dire que la cinétique est d'ordre 1 ?

3.2. En déduire une relation entre C et t en précisant les unités des différentes valeurs numériques et littérales.