

AD. 4A

Tracé du suivi cinétique d'une réaction

Tracé de suivi cinétique, test d'ordre 1

L'étude cinétique expérimentale d'une réaction chimique en solution produit un tableau donnant une concentration c en fonction du temps t . Un programme Python permet de faciliter l'exploitation graphique et numérique de ce tableau.

Objectif Effectuer le tracé d'une courbe à partir d'un tableau de valeurs, tester l'hypothèse d'une réaction d'ordre 1.

Fichiers Python

Fiches d'accompagnement
Programmes à compléter

hatier-clic.fr/pct120

+ prof

Tableaux de valeurs
supplémentaires

1 Programme Python de tracé de courbe de suivi cinétique

```
from math import *
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from scipy.stats import linregress
listet=[0.0,10.0,20.0,30.0,60.0,90.0]
listec=[124.0,92.0,68.0,50.0,20.0, 8.0]
# première ligne à compléter
plt.plot(listet,listec,color="blue")
# seconde ligne à compléter
plt.title("concentration c (en mmol/L) en
fonction de t(en min)")
plt.show()
```

Le tableau de valeurs est importé au clavier dans le programme :
- listet est la liste des dates, séparées par des virgules
- listec est la liste des concentrations mesurées aux dates correspondantes, séparées par des virgules.

L'exécution du programme génère le graphique donnant c en fonction de t .

2 Extrait du programme Python de test d'ordre 1

```
for i in range(0,6):
    listelnc[i]=np.log(listec[i])
plt.plot(listet,listelnc,"*",color="red")
(a,b,rho,_,_) = linregress(listet,listelnc)
print("ln(c)=",a,"t+",b,"coef. de corr. =",rho)
for i in range(0,6):
    modelelinY[i]=a*listet[i]+b
plt.plot(listet,modelelinY,color="blue")
```

Calcul automatique des valeurs du logarithme de la concentration ($\ln(c)$) dans la liste listelnc.

Tracé de la courbe (en rouge) de $\ln(c)$ en fonction de t .

Régression linéaire : $\ln(c) = at + b$
Affichage (en bleu) de la droite de régression sur le même graphique.

1 Travail sur les valeurs entrées par défaut

a. Lancer le programme *tracecinétique.py* (doc. 1). Imprimer le graphique obtenu.

b. Déterminer graphiquement la vitesse volumique de disparition de l'espèce de concentration c aux instants $t = 0, 10 \text{ min}, 30 \text{ min}$.

c. La valeur de la concentration initiale est égale à la première valeur de la liste listec :
 $c_0 = \text{listec}[0]$.

Compéter le programme Python en ajoutant :

- « première ligne à compléter » : une instruction permettant de remplir une liste $c_0\text{sur}2$ dont tous les termes valent $c_0/2$;
- « deuxième ligne à compléter » : une instruction permettant de tracer une ligne horizontale d'équation $c = c_0/2$.

Relancer le programme et déterminer graphiquement la valeur du temps de demi-réaction $t_{1/2}$.

► Fiche 11 p. 608

d. Si la réaction est d'ordre 1, alors $c = c_0 e^{-kt}$. En déduire que $\ln(c) = \ln(c_0) - kt$.

e. Lancer le programme *cinetiqueordre1.py* (doc. 2).

Par comparaison entre la droite de régression et la courbe $\ln(c)$ en fonction de t , expliquer pourquoi l'hypothèse d'une réaction d'ordre 1 peut être validée. Déduire des résultats de la régression linéaire la valeur de la constante de vitesse k .

f. Le coefficient de corrélation linéaire ρ est un indicateur numérique qui traduit l'alignement des points : plus il est proche de 1 en valeur absolue, plus l'écart entre la courbe et la droite de régression est correct. Pourquoi ρ est-il un bon indicateur permettant de valider l'ordre 1 d'une réaction ?

2 Travail avec un autre tableau de valeurs

t (en s)	0	50	100	150	200	250
c (en mmol·L ⁻¹)	1,80	1,75	1,60	1,04	0,31	0,10

a. Tracer la courbe c en fonction de t grâce au programme *tracecinétique.py* (doc. 1).

b. Grâce au programme *cinetiqueordre1.py* (doc. 2), déterminer si la réaction est d'ordre 1.

► Cours 5 p. 125