


T ^{ale} Spé	FORCE DES ACIDES ET DES BASES
Activité de chimie	Calcul d'un taux d'avancement avec Python

CAPACITES EXIGIBLES AU BACCALAUREAT

 **Capacité numérique** : Déterminer, à l'aide d'un langage de programmation, le taux d'avancement final d'une transformation, modélisée par la réaction d'un acide sur l'eau.

L'acide acétylsalicylique, de formule brute $C_9H_8O_4$, est l'acide du couple acide-base $C_9H_8O_4 / C_9H_7O_4^-$ dont le pK_A vaut 3,5. On réalise trois solutions d'acide acétylsalicylique par des dilutions successives : S_0 , S_1 et S_2 .

On cherche à calculer les pH de solutions S_0 , S_1 et S_2 . Ceci étant assez long puisqu'il faut le répéter trois fois, on va chercher à automatiser le calcul grâce à un script en Python.

1. A l'aide du tableau d'avancement du document 1, exprimer le K_A à partir de l'avancement final x_f , de la concentration en soluté apporté c et du volume V de la solution.
2. En déduire l'équation (1) à résoudre et écrite dans le document 1.

Document 1 : Équation du second degré et avancement final

Soit une solution d'un acide faible AH de concentration C , la solution contient initialement les espèces : H_2O et HA . Elle est donc le siège de la réaction :



Bilan de la réaction :

Bilan en mol	HA	+	H ₂ O	=	A ⁻	+	H ₃ O ⁺
État initial	CV		excès		0		≈ 0
État à l'équilibre	$CV - x_f$		excès		x_f		x_f

Expression de la constante d'acidité :
$$K_A = \frac{[A^-]_f [H_3O^+]_f}{[AH]_f}$$

On en déduit donc que : $x_f^2 + K_A \cdot V \cdot x_f - K_A \cdot C \cdot V^2 = 0$ **Équation (1)**

Pour calculer $[H_3O^+]_f$ par l'intermédiaire de l'avancement final x_f , il faut donc résoudre cette équation du second degré.

Dans le cas où il n'y a qu'une solution, l'avancement final x_f sera égale à cette solution.

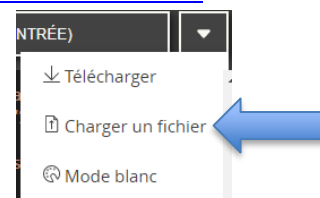
Dans le cas où il y a deux solutions réelles, on retiendra la plus petite des deux ou bien celle qui est positive.

Un script Python résout l'équation (1) et calcule x_{max} et x_f . Il est disponible sur pearltree à cette adresse :

<https://www.pearltrees.com/barriaux/ch5-force-des-acides-et-bases/id37752528/item336551836>

Le script peut être chargé sur la page : <https://www.livrescolaire.fr/outils/console-python>

Vous pouvez aussi bien sur utiliser aussi Spyder.



Document 2 : Tester le script.

Par exemple : Pour $V = 100$ mL d'une solution d'acide éthanóique de $pK_A = 4,75$ et de concentration $c = 0,05$ mol·L⁻¹.

À la ligne 50 du programme, rentrer la commande suivante : `50 resol(0.05,4.75,0.100)`

Cliquer sur  **VOIR LE RÉSULTAT (CTRL+ENTRÉE)** pour lancer le script.

Dans la console s'afficheront les valeurs de x_{max} et de x_f :

```
Soit une équation de la forme : xf**2 + Ka*V*xf-Ka*C*V**2 = 0
L'équation a deux solutions solutions.
Les solutions sont x1 = -9.518753640193927e-05 et 9.34092569919
0036e-05
L'avancement final vaut 9.340925699190036e-05 mol
L'avancement maximal vaut 0.005000000000000001 mol
```

Rappel : Taux d'avancement d'une réaction (vu dans la synthèse 4-A)

Le taux d'avancement final de la réaction noté τ permet de déterminer si la transformation est totale ou limitée.

$$\tau = \frac{x_f}{x_{max}}$$

Le taux d'avancement final dépend de la constante d'équilibre associée à la réaction et de l'état initial du système.

Dans le cas de la réaction d'un acide sur l'eau :

Si $\tau = 1$, alors $x_f = x_{max}$ et la réaction est totale, l'acide se comporte comme un acide fort.

Si $\tau < 1$, alors la réaction est limitée. Plus τ est proche de 1, plus l'acide est dissocié (plus fort). Plus τ est proche de 0 et moins il est dissocié, plus il est faible.

Dans le script python, les seules lignes à compléter seront les lignes 43, 44, 45 et 46.

3. Compléter la ligne 43 du programme écrit en Python pour permettre également de calculer le taux d'avancement final.

4. Compléter la ligne 45 pour calculer la valeur du pH de la solution à l'état final (la fonction log s'écrit `math.log10`).

Rendre les lignes 43, 44, 45 et 46 active, supprimer le #.

5. Tester les conditions initiales (C, pKa et V) correspondant aux solutions S₀, S₁ et S₂ de l'AE 5-A. Noter pour chacune de ces situations, la valeur de x_{max} , x_f , τ , et du pH. Présenter vos résultats dans le tableau suivant :

Solution	Concentration initiale C en acide acétylsalicylique	Volume V de solution (en L)	x_f	x_{max}	Taux d'avancement τ	Valeur du pH
S ₀	$1,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$	0,250				
S ₁	$1,0 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$	0,100				
S ₂	$1,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$	0,100				

6. Commenter la phrase suivante en utilisant le taux d'avancement τ : « Lorsqu'on dilue un acide faible, celui-ci se comporte davantage comme un acide fort ».