

ACTIVITE PYTHON : COMPOSITION D'UN SYSTEME AU COURS D'UN TITRAGE

A l'aide d'un langage de programme, on se propose de simuler :

- l'évolution des quantités de matières des espèces chimiques lors d'un titrage,
- la courbe de titrage suivi par conductimétrie.

Document 1 : Programme principal

1 Définir le système à simuler

2 Déterminer l'évolution des quantités de matière des espèces présentes dans le bécher

3 Calculer la conductivité pour tout volume V versé

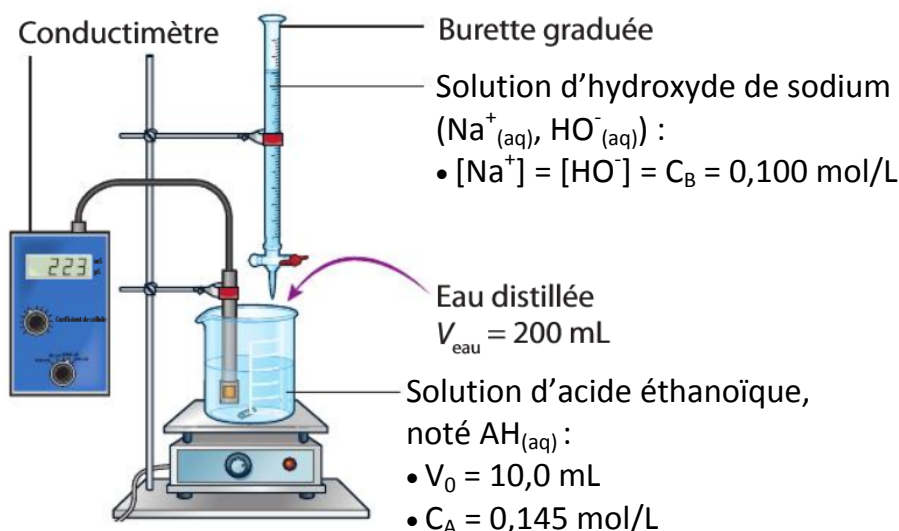
4 Afficher l'évolution des quantités de matière et de la conductivité

```
1 import matplotlib.pyplot as plt
2 import numpy as np
...
18 VE = 14.5 #saisie du volume équivalent en mL
19 Veau = 200 #saisie du volume d'eau ajouté en mL
20 n_AH, n_HO, n_Na, n_A, V = [], [], [], [], [] # initialisation de 5 listes
21 for i in range(0,26,1) :
22     if i <= VE :
23         #appelle une fonction qui calcule les quantités avant et à l'équivalence
24         calcul_quantites_avant_et_a_equivalence(i)
25     else :
26         #appelle une fonction qui calcule les quantités après l'équivalence
27         calcul_quantites_apres_equivalence(i)
28 #Expression de la conductivité
29 Conduct = (20*np.array(n_HO)+5.0*np.array(n_Na)+4.1*np.array(n_A)) \
30 / (Veau*1E-3+1E-3*np.array(V)+0.010)
31 #affichage des courbes
32 plt.subplot(121) #subplot permet d'afficher deux graphes
33 plt.plot(V,n_AH,'bx-',linewidth=0.5,label="n_AH")
34
...
36 plt.legend()
37 plt.subplot(122)
38 plt.scatter(V, Conduct, label="Conductivité en $\mathrm{mS\cdot m^{-1}}$")
39 plt.legend()
40 plt.show()
```

Document 2 : Fonction auxiliaire appelée dans le programme principal

```
4 def calcul_quantites_avant_et_a_equivalence(i):
5     V.append(i)
6     #append ajoute une valeur à la fin d'une liste
7     n_AH.append((0.145*10-0.10*i)*0.001)
8     n_HO.append(0)
9     n_Na.append(0.10*i*0.001)
10    n_A.append(0.10*i*0.001)
```

Document 3 : Dispositif expérimental du titrage



I. Travail

- 1) Ecrire l'équation de la réaction acide-base mise en jeu lors du titrage sachant que les couples sont : $\text{AH}_{(\text{aq})} / \text{A}^{-}_{(\text{aq})}$ et $\text{H}_2\text{O}_{(\text{l})} / \text{HO}^{-}_{(\text{aq})}$. Préciser le réactif titré et le réactif titrant.
- 2) Justifier par un calcul la valeur du volume équivalent indiqué dans le programme à la ligne 18.
- 3) Etude du titrage **avant** l'équivalence :
 - a. Indiquer quel est le réactif limitant
 - b. Réaliser un tableau d'avancement avant l'équivalence avec les indications suivantes
 - c. Exprimer les quantités de matière initiale en fonction de C_B , C_A , V_0 et V (le volume versé de solution titrante)
 - d. Exprimer x_f en fonction de C_B , C_A , V_0 et V .
 - e. En déduire l'expression littérale de la quantité de matière dans l'état final de chaque espèce chimique du tableau $n(\text{AH})$, $n(\text{HO}^{-})$, $n(\text{A}^{-})$ et $n(\text{Na}^{+})$.
 - f. Remplacer chaque grandeur C_B , C_A , V_0 par sa valeur numérique (sans chercher à calculer !). **Attention**, le volume V (=volume versé de solution titrante) devra représenter un volume **en millilitres** !
 - g. Vérifier la cohérence de vos expressions avec le programme du document 2. Préciser ce que représente la lettre « i » qui apparaît dans les lignes 7 à 10 et dans la boucle qui commence à la ligne 21 ?
- 4) Etude du titrage **après** l'équivalence :
 - a. Indiquer quel est le réactif limitant
 - b. Réaliser un tableau d'avancement avant l'équivalence avec les indications suivantes
 - c. Exprimer les quantités de matière initiale en fonction de C_B , C_A , V_0 et V (le volume versé de solution titrante)
 - d. Exprimer x_f en fonction de C_B , C_A , V_0 et V .
 - e. En déduire l'expression littérale de la quantité de matière dans l'état final de chaque espèce chimique du tableau $n(\text{AH})$, $n(\text{HO}^{-})$, $n(\text{A}^{-})$ et $n(\text{Na}^{+})$.
 - f. Remplacer chaque grandeur C_B , C_A , V_0 par sa valeur numérique (sans chercher à calculer !). **Attention**, le volume V (=volume versé de solution titrante) devra représenter un volume **en millilitres** !
 - g. En s'inspirant du script du document 2, écrire une fonction « calcul_quantites_apres_equivalence » afin de déterminer l'évolution des quantités de matière des espèces chimiques après l'équivalence.
- 5) Que faut-il écrire aux lignes 33, 34, 35 du programme pour afficher l'évolution des quantités de matière des espèces chimiques présentes dans le bécher en fonction du volume V versé de solution d'hydroxyde de sodium ?

II. Programmation python

Le document 1 présente le programme principal qu'il est nécessaire de compléter pour tracer les courbes souhaitées. Ce programme correspond au fichier « simulation_courbe_titrage (élève).py » disponible dans l'activité de l'ENT.

- 1) Compléter **soigneusement** le programme avec vos réponses du travail I. ligne 12,13,14,15,16 et 33,34,35
- 2) Vérifier le bon fonctionnement du programme
- 3) Vérifier la cohérence du tracé avec le titrage étudié. : repérer l'équivalence, interpréter la différence de pente entre les 2 courbes du 2eme graphe
- 4) Lors du titrage, un volume d'eau a été ajouté initialement dans le bécher. Modifier le programme pour indiquer l'influence du volume d'eau introduit sur les courbes tracées.
- 5) En déduire pourquoi faut-il ajouter les 200 mL d'eau.