

1ere Spé	<b>Physique Chimie</b>	Date :
Partie : constitution et transfo. de la matière	<b>Chapitre 2 modélisation d'une transformation</b>	<b>Activité</b>

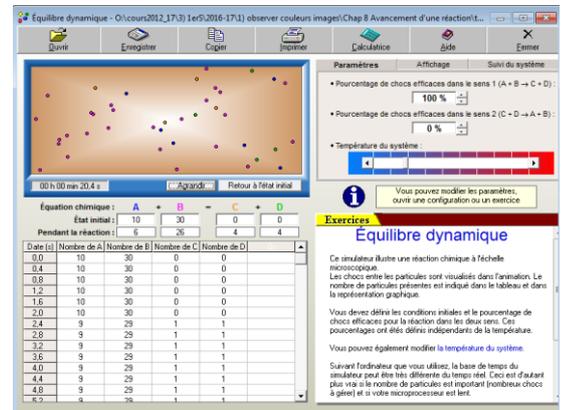
### I. Prise en main du simulateur

Le simulateur représente des particules de différentes couleurs en mouvement. Lancer le simulateur « *Equilibre dynamique* » puis ouvrir le fichier « 2Simulation\_11.C11 ». Cliquer sur « *Retour à l'état initial* » puis « *Agrandir* » et suivre des yeux une particule bleue.

- Faire la liste de tout ce qui peut arriver à la particule bleue.
- Indiquer dans la liste les cas de chocs qui modifient la couleur des particules.

Dans quel(s) cas observe-t-on des chocs qui ne modifient pas la couleur des particules ?

- Quelles sont les couleurs des particules obtenues après un choc entre une particule (A) et une particule (B) ?
- Dans « paramètres », vérifier que le pourcentage de chocs efficaces est bien 100% dans le sens 1 et 0% dans le sens 2.
  - Que veut dire l'expression « chocs efficaces » ?
  - Pour la simulation visualisée, entre quelles particules peut-on considérer que les chocs sont efficaces ?



### II. Tableau d'avancement et simulation

On se place dans le cas où avant la simulation, on a  $n_{i(A)} = 10$  particules A et  $n_{i(B)} = 30$  particules B. L'indice  $i$  indique qu'il s'agit d'un état initial du système simulé.

- Prévoir** (sans regarder le simulateur) les nombres de particules A, B, C et D après le premier choc efficace (appelé état intermédiaire n° 1 du système simulé).
- Même question après le 5<sup>ème</sup> choc efficace (appelé état intermédiaire n° 2 du système simulé).
- Même question dans l'état final du système simulé.
- Vérifier les réponses à ces trois questions à l'aide de la simulation et du tableau de valeurs.

On appelle tableau d'avancement le tableau qui donne le nombre de chaque particule dans certains états particuliers. Il est constitué dans ce cas de 6 colonnes :

		A + B → C + D			
État du système	avancement	nombre de A	nombre de B	nombre de C	nombre de D
	$x$	$n_{(A)}$	$n_{(B)}$	$n_{(C)}$	$n_{(D)}$
Etat initial					
Etat intermédiaire 1					
Etat intermédiaire 2					
Etat intermédiaire quelconque					
Etat final					

- Pour l'instant on ne s'occupe ni de la colonne « avancement », ni de la ligne "Etat intermédiaire quelconque".** Remplir les lignes relatives à « l'état initial », « l'état intermédiaire 1 », « l'état intermédiaire 2 » et « l'état final » du tableau ci-dessus.

**On appelle avancement la grandeur notée  $x$  qui correspond au nombre de particules C (ou D) formé.**

- Compléter la colonne avancement du tableau (sauf pour l'état intermédiaire quelconque).
- A l'aide de quelques valeurs numériques du tableau, vérifier que le nombre de particules A dans un état intermédiaire quelconque (caractérisé par l'avancement  $x$ ) peut s'exprimer par la relation  $n_{(A)} = n_{i(A)} - x$ .
- Exprimer en fonction de  $x$  les nombres de particules B, C et D dans un état intermédiaire quelconque. Compléter alors la ligne « Etat intermédiaire quelconque » du tableau d'avancement ci-dessus.
- Trouver un état initial qui correspond à l'état final :  $n_{f(A)} = 8$  ;  $n_{f(B)} = 0$  ;  $n_{f(C)} = n_{f(D)} = 13$ . Vérifier avec le simulateur.
- Proposer un état initial pour lequel il ne reste ni particules A ni particules B à l'état final. Vérifier avec le simulateur. (Cet état initial est dit dans les proportions stœchiométriques)

1ere Spé	<b>Physique Chimie</b>	Date :
Partie : constitution et transfo. de la matière	<b>Chapitre 2 modélisation d'une transformation</b>	<b>Activité</b>

### Exercice 1

On étudie la réaction entre le méthane  $\text{CH}_4$  et le dichlore  $\text{Cl}_2$  d'équation :  $\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl}$   
 Les conditions initiales sont :  $n_i(\text{CH}_4) = 8.10^{-2}$  mol       $n_i(\text{Cl}_2) = 5.10^{-2}$  mol       $n_i(\text{CH}_3\text{Cl}) = n_i(\text{HCl}) = 0$  mol

Le tableau d'avancement de cette réaction est :

		$\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{Cl} + \text{HCl}$			
		$n(\text{CH}_4)$	$n(\text{Cl}_2)$	$n(\text{CH}_3\text{Cl})$	$n(\text{HCl})$
1. Par analogie avec celle donnée dans la partie II, proposer une définition et une unité pour la grandeur avancement dans le cas d'une réaction chimique.	Etat du système	avancement			
	Etat initial	$x = 0$	$8.10^{-2}$	$5.10^{-2}$	0
	Etat intermédiaire	$x = 2.10^{-2}$			
	Etat intermédiaire quelconque	$x$			
	État final	$x_{\text{max}} =$			

2. Compléter le tableau d'avancement, et préciser la valeur de  $x_{\text{max}}$ .

### Exercice 2

On étudie maintenant la réaction entre le dihydrogène  $\text{H}_2$  et le dioxygène  $\text{O}_2$  ; on obtient de l'eau.  
 Les conditions initiales sont :  $n_i(\text{H}_2) = 8.10^{-2}$  mol       $n_i(\text{O}_2) = 5.10^{-2}$  mol       $n_i(\text{H}_2\text{O}) = 0$  mol

- Écrire l'équation correspondante en ajustant les nombres stœchiométriques.
- Pour tenir compte de la stœchiométrie de la réaction, il faut écrire le tableau d'avancement sous la forme suivante :

		$\dots \text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \dots \text{H}_2\text{O}$		
		$n(\text{H}_2)$	$n(\text{O}_2)$	$n(\text{H}_2\text{O})$
État initial	$x = 0$	$8.10^{-2}$	$5.10^{-2}$	0
État intermédiaire	$x$	$8.10^{-2} - 2x$	$5.10^{-2} - x$	$2x$
État final	$x_{\text{max}} =$			

On appelle réactif limitant (ou en défaut) le réactif dont la quantité de matière dans l'état final est nulle. On appelle réactif en excès le réactif dont la quantité de matière est non nulle dans l'état final.

- Pour les conditions initiales ci-dessus, déterminer le réactif limitant, en déduire la valeur de l'avancement maximal. Compléter le tableau d'avancement.
- Proposer des valeurs de  $n_i(\text{H}_2)$  et  $n_i(\text{O}_2)$  telles que le mélange initial soit dans les proportions stœchiométriques.