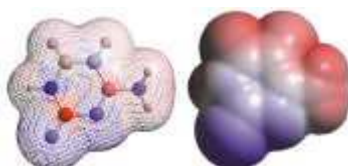


C5n – ÉTUDE SIMULÉE DE L'AVANCEMENT D'UNE RÉACTION CHIMIQUE

TI-Nspire™ CAS

Mots-clés : réaction chimique, stœchiométrie, quantité de matière, réactifs, produits.

Fichiers associés : simulation_reaction_chimique.tns



1. Objectifs

- Observer, puis expliquer, l'avancement d'une transformation chimique par les chocs efficaces aléatoires des molécules du réactif simulés par une population de dés dont on élimine ceux de valeur 6 à chaque lancer.
- Réaliser une simulation de la disparition progressive du réactif au cours du temps et trouver la fréquence des chocs aléatoires efficaces des molécules de réactifs dans l'expérience.

2. Énoncé

Réaliser la simulation d'une population de dés dont on élimine, à chaque lancer, ceux de résultat 6 et constituer une modélisation par une loi de probabilité prévisible.

La simulation proposée compare la diminution des réactifs à la diminution d'une population de dés dont on élimine après chaque tirage les six.

On sait, en mathématiques, aux fluctuations aléatoires près, que le nombre de dés de résultat 6 représentent en moyenne 1/6 de la population des dés mis en jeu.

La population remise en jeu au lancer suivant est donc $\frac{5}{6}$ de la population du lancer précédent.

La population restante après n lancers est donc : $N_n = \frac{5N_{n-1}}{6} = N_0 \times \left(\frac{5}{6}\right)^n$.

On prendra une population initiale $N_0 = 200$.

3. Conduite de l'activité

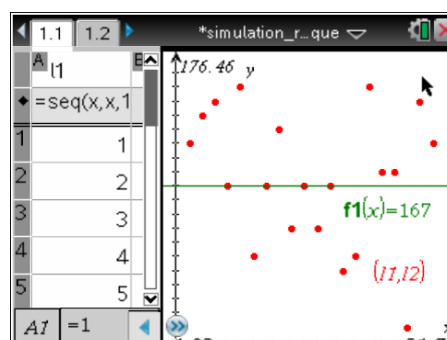
Ouvrir le fichier [simulation_reaction_chimique.tns](#).

- Mettre le pointeur dans une cellule du tableau
- Appuyer sur les touches **ctrl** **R** pour effectuer une autre simulation.

Sur la page 2 de l'activité,

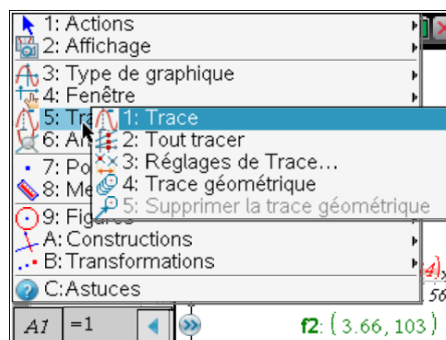
cliquer sur la représentation graphique ;
représenter graphiquement l'évolution du nombre N de dés en fonction du nombre de tirages n successifs.

$$f_1(x) = 200 \times \left(\frac{5}{6}\right)^x$$

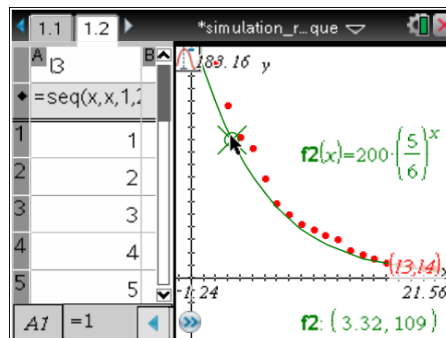


Utiliser l'outil Trace pour explorer la représentation graphique :

Touche **menu** puis **5 : Trace** et enfin **1 : Trace**.



Après combien de lancers n cette population a-t-elle diminué de moitié ?



Comparaison des demi-évolutions de la transformation chimique à la date $T_{1/2}$ et de la demi-évolution de la population de dés après $n_{1/2}$ tirages pour trouver la probabilité de rencontre efficace par seconde des molécules du réactif :

Si $n_{1/2}$ lancers de dés s'effectuent en $T_{1/2}$ seconde, la décroissance de la population des dés ressemblera au cours du temps à celles des réactifs initiaux.

La proportion des chocs efficaces des réactifs par seconde est : $p = \frac{T_{1/2}}{n_{1/2}}$ fois plus faible que la proportion des

dés sortis égale au $\frac{1}{6}$ de la population présente.

Les chocs efficaces des réactifs éliminés par seconde sont : $\frac{1}{6p}$ de la population des réactifs encore présents.

La décroissance de la population des réactifs suit donc une loi de probabilité de type :

$$N = N_0 \left(1 - \frac{1}{6p}\right)^t$$

$$N = N_0 \left(1 - \frac{1}{1050}\right)^t = 0,0176 \left(1 - \frac{1}{1050}\right)^t$$

Si 4 lancers de dés s'effectuent en 700 s, la décroissance de la population des dés ressemblera au cours du temps à celles des réactifs initiaux. La fréquence des chocs efficaces des réactifs est $p = \frac{700}{4} = 175$ fois.

Représenter graphiquement la fonction relative à la décomposition d'eau oxygénée déjà réalisée lors de l'étude expérimentale.

$$f_2(x) = 0.0088 \left(1 - \frac{1}{1050} \right)^x$$

Superposer la représentation graphique.

Ce modèle cadre-t-il assez bien avec l'expérience ?

Conclure sur les chocs microscopiques, qui provoquent l'avancement de la transformation de l'eau oxygénée.

Remarque :

L'eau oxygénée utilisée pour l'expérience provient d'un supermarché. Le dosage à 10 volumes n'est probablement pas très rigoureux.

