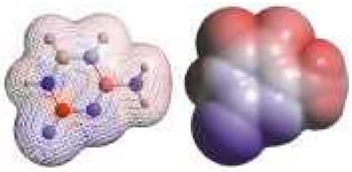
C5n – ÉTUDE SIMULÉE DE L'AVANCEMENT D'UNE RÉACTION CHIMIQUE

Auteur : Jean-Louis Balas

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.

• 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 : $N_n = \frac{5N_{n-1}}{6} = N_0 \times \left(\frac{5}{6}\right)^n$.

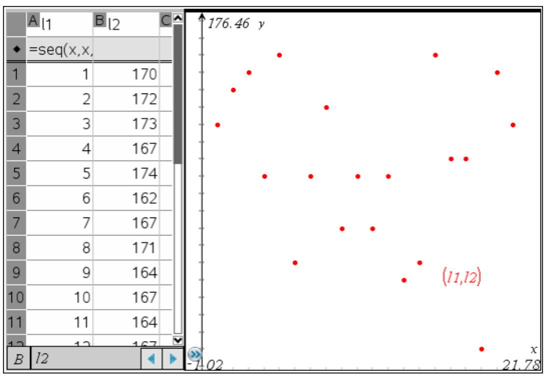
On prendra une population initiale $N_0 = 200$.

3. Conduite de l'activité

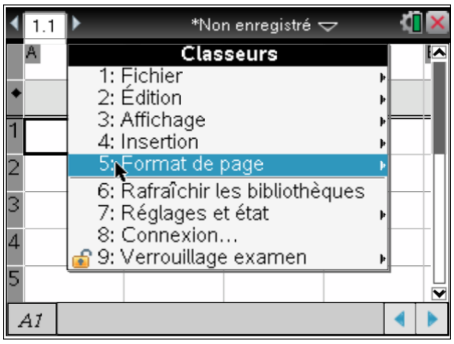
a) Caractère aléatoire des lancers de 200 dés
Population restante des dés après l'élimination de ceux dont le résultat est 6 ?

Le tirage aléatoire est simulé par la fonction **RandInt**.

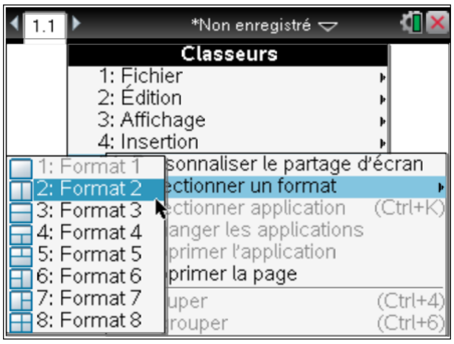
Si ce nombre est 6, l'instruction **Ipart** donne 1 comme résultat de la division entière par 6.
L'instruction somme ajoute 1 à la somme des dés de valeur 6 déjà trouvés, pendant la séquence des tirs individuels répétée 200 fois.
Cette somme de dés de résultat 6 est retranchée de la population initiale $N_0 = 200$.



Créer un nouveau classeur et appuyer sur la touche doc▾ puis sélectionner le menu **5 : Format de page**.



Choisir le second format qui permet de diviser la page en deux verticalement.



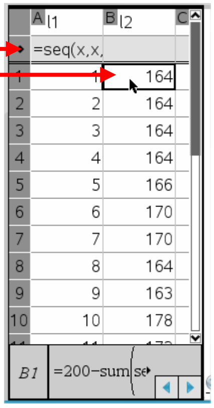
Insérer une application **Tableur & listes** dans la partie gauche et une application **Graphiques** dans la partie droite.

Dans le tableur, créer une liste l1 permettant de calculer une suite de 20 entiers :

l1:=seq(x,x,1,20)

Créer une liste l2 et inscrire dans la première cellule de la colonne concernée :

=200-sum(seq(ipart(((randint(1,6))/(6))),x,1,200))



Cette somme de dés de résultat 6 est retranchée de la population initiale $N = 200$.

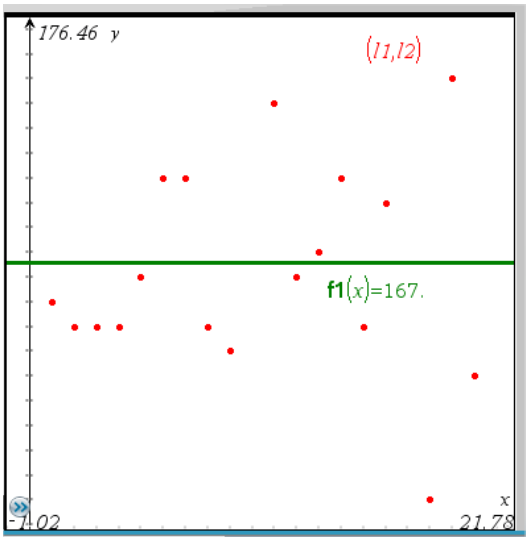
L'instruction est recopiée jusqu'au rang 20.

Les nombres trouvés varient aléatoirement, mais leur moyenne s'approche de la valeur attendue pour des dés cubiques à 6 faces :

$$N = N_0 - \frac{N_0}{6} = \frac{200 \times 5}{6} \text{ soit } N \approx 166{,}7.$$

Pour souligner l'aspect aléatoire, observer, après une vingtaine de lancers différents, le nuage de points représentatifs de tous les lancers effectués,

.



b) Diminution aléatoire d'une population de dés dont on élimine systématiquement ceux, qui ont déjà donné le bon résultat 6, avant un nouveau lancer

Insérer une nouvelle page, partager l'écran en deux parties verticalement avec une feuille du tableur à gauche et un graphique à droite.

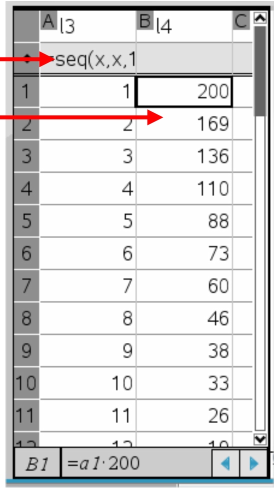
Dans le tableur,

- créer deux listes l3 et l4 telles que :

l3:=seq(x,x,1,20)

- placer 200 en l4(1),
- en l4(2) inscrire :

=b1-sum(seq(ipart(((randint(1,6))/(6))),x,1,b1))

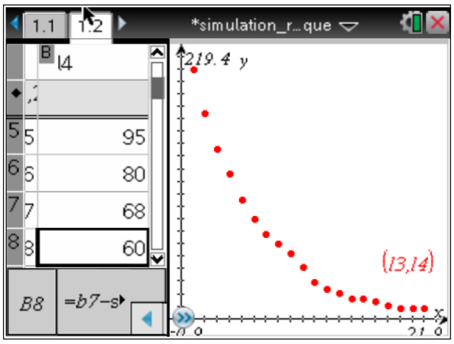


On effectue des lancers jusqu'à qu'il n'y ait plus de dés en jeu.

Le graphe de la population des dés encore en jeu après n lancers est à afficher dans la représentation graphique.

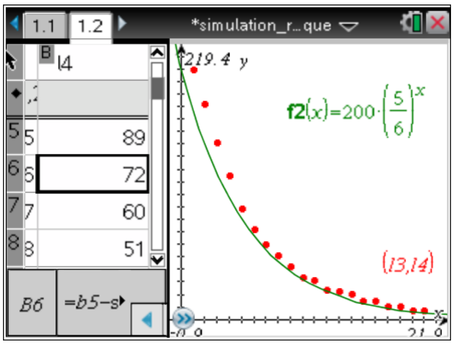
Cette population forme une suite géométrique prévisible de n éléments pour n tirages :

$$N_n = N_0\left(1-\frac{1}{6}\right)^n = N_0\left(\frac{5}{6}\right)^n.$$



Vérifier ce résultat en définissant la fonction f_2 :

$$f_2(x) = 200\times\left(\frac{5}{6}\right)^x.$$



Placer le pointeur dans le tableur, appuyer sur les touches ctrl R pour effectuer une autre simulation.

c) Comparons les demi-évolutions de la transformation chimique et de la population de dés pour trouver la fréquence relative des rencontres efficaces des molécules du réactif

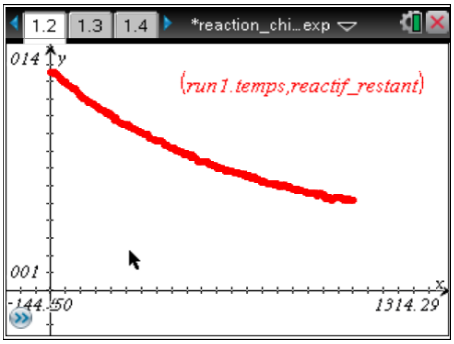
Si 4 lancers de dés s'effectuent en 700 s, la décroissance de la population des dés ressemblera au cours du temps à celles des réactifs initiaux. La fréquence des chocs efficaces des réactifs est $p = \frac{700}{4} = 175$ fois plus faible que la fréquence de sortie des dés de résultat 6 égale au $\frac{1}{6}$ de la population avant chaque lancer.

Les chocs efficaces des réactifs éliminés par seconde sont : $\frac{1}{175\times 6} = \frac{1}{1\,050}$ de la population des réactifs présents.

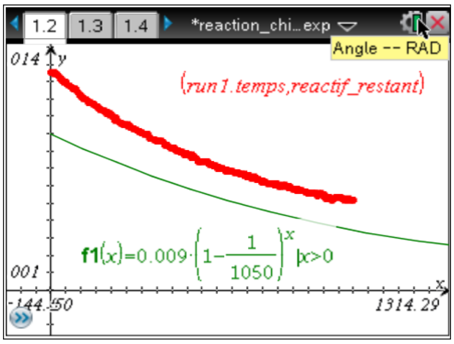
La décroissance de la population des réactifs suit donc une loi de type :

$$N = N_0\left(1-\frac{1}{1\,050}\right)^t = 0{,}0088\left(1-\frac{1}{1\,050}\right)^t.$$

Elle cadre relativement bien avec l'expérience réalisée avec l'eau oxygénée.



Le très faible écart peut s'expliquer par la qualité de l'eau oxygénée utilisée pour l'expérience. Celle-ci provient d'une vente de supermarché. Il est probablement préférable d'utiliser un produit pharmaceutique très probablement mieux dosé.



En règle générale, nous avons observé d'excellents résultats expérimentaux avec une eau oxygénée à 20 volumes.

Conclusion : vers une compréhension plus fine de la chimie !

La simulation microscopique des chocs aléatoires d'énergie suffisante pour rompre des molécules du milieu réactionnel par un simple jeu de dés modélise bien les lois macroscopiques d'évolution de la décomposition observée de l'eau oxygénée.
Elle peut servir de complément à tout programme de chimie de première et terminale S et peut être comparée plus tard à la loi de décroissance d'une matière radioactive.