

Spécialité physique -chimie en 1^{ère}

Python et chimie

Comment utiliser mon manuel ?	4
La démarche scientifique	6
L'approche par compétences	7

7 Structure des entités organiques	119
1 Nomenclature et groupes caractéristiques	
2 La spectroscopie infrarouge	
3 Identification de la géométrie d'une molécule	
8 Synthèse	137
1 Synthèse d'un solide	
2 Synthèse d'un liquide	
9 Réactions de combustion	155
1 Le pouvoir calorifique d'un combustible	


Constitution et transformations de la matière

	L'énergie : conversions et transferts
Apprendre à apprendre	Anticiper et préparer
Sur les chaînes vidéos	La Minute Scientifique Scilabus
	236
13 L'énergie des systèmes électriques	237

Extrait du sommaire du livre de 1^{ère} spécialité

1 Prélever une quantité de matière	
2 Dosage spectrophotométrique : principes et limites	
3 Dosage d'une espèce chimique colorée en solution	
2 Réactions d'oxydoréduction	33
1 Étudier une réaction d'oxydoréduction	
2 Les couples oxydant/réducteur	
3 Établir une équation d'oxydoréduction	
3 Tableau d'avancement	49
1 Avancement d'une réaction chimique	
2 Bilan de matière d'une transformation chimique	

	Mouvement et interactions
Apprendre à apprendre	S'enregistrer pour mémoriser
	172
Sur les chaînes vidéos	Alain Bernard Florence Porcel
	172
10 Interactions, forces et champs	173
1 Électrisation et charges électriques	
2 La clé des champs	

2 La conservation de l'énergie mécanique	
3 L'énergie mécanique et les frottements	
4 L'énergie mécanique en l'absence de frottements	
Exercices Tour de zombies	277
	Ondes et signaux
Apprendre à apprendre	une carte mentale
	280

Constitution et transformations de la matière



CHAPITRE **1** La mole

CHAPITRE **2** Réactions d'oxydoréduction

CHAPITRE **3** Tableau d'avancement

CHAPITRE **4** Titrages colorimétriques

CHAPITRE **5** De la structure à la polarité d'une entité chimique

CHAPITRE **6** Cohésion de la matière

CHAPITRE **7** Structure des entités organiques

CHAPITRE **8** Synthèse

CHAPITRE **9** Réactions de combustion



Pour programmer en python, vous pouvez utiliser le logiciel EDUPYTHON, présent sur le réseau du lycée dans les dossiers math_réseau et physique_réseau



Chapitre 3 : Tableau d'avancement

23



How to program the calculations of a material balance

Utiliser un langage de programmation ; pratiquer une langue étrangère.

We consider the Python program below:

```
1 print("Equation of the reaction : \n aA + bB -> cC + dD\n Enter values of stoichiometric \n numbers a, b, c and d")
2 a = float(input("a = "))
3 b = float(input("b = "))
4 c = float(input("c = "))
5 d = float(input("d = "))
6 print("Enter the initial quantities of reagents A \n and B in mol")
7 nA = float(input("n0 (A) = "))
8 nB = float(input("n0 (B) = "))
9 xmaxA, xmaxB = nA / a, nB / b
```

Pour permettre au programme d'écrire dans la console, en bas de la fenêtre d'EDUPYTHON :
`print(.....)`

Pour demander à l'utilisateur de rentrer une valeur décimale :
`float(input(...))`

Ligne 9 : pour écrire deux affectations en une ligne, équivalent à
`xmaxA = nA/a`
`xmaxB = nB/b`


```

10 if xmaxA == xmaxB:
11     print("The mixture is stoichiometric")
12     xmax = xmaxA
13 elif xmaxA < xmaxB:
14     print("A is the limiting reagent")
15     xmax = xmaxA
16 else:
17     print("B is the limiting reagent")
18     xmax = xmaxB
19 print("xmax =", xmax, "mol")
20 nfA, nfB = nA - a * xmax, nB - b * xmax
21 nfC, nfD = c * xmax, d * xmax
22 print("Material balance in the final state")
23 print("nf(A) = {} mol\nnf(B) = {} mol\n\
    nf(C) = {} mol\nnf(D) = {} mol\n\
    ".format(nfA, nfB, nfC, nfD))

```

• Copy the program and test it on exercise 9.

Structure conditionnelle
présentant 3 cas :
xmaxA = xmaxB (avec
un double égal en
python)
ou xmaxA < xmaxB
ou xmaxA > xmaxB
Quand l'une des
conditions est remplie, les
lignes décalées de 4
espaces qui suivent sont
exécutées

Ligne 23 : affichage des
nombres de moles finaux
pour chaque réactif A, B
et produit C, D.

Recopiez le programme
précédent sur EDUPYTHON
et répondez aux
questions de l'exercice 9



Déterminer la composition d'un système à l'état final

Utiliser un modèle.

En présence d'ions iodure $I^- (aq)$, les ions plomb (II) $Pb^{2+} (aq)$, forment un précipité jaune d'iodure de plomb (II) $PbI_2 (s)$ appelé « pluie d'or ». Le tableau d'avancement de la réaction étudiée, associée à une transformation totale, est donné ci-dessous :



Équation de la réaction		$Pb^{2+} (aq) + 2 I^- (aq) \rightarrow PbI_2 (s)$		
État du système	Avancement (en mmol)	Quantités de matière (en mmol)		
		$n(Pb^{2+})$	$n(I^-)$	$n(PbI_2)$
État initial	$x = 0$	5,0	5,0	0
État intermédiaire	x
État final	$x = x_f$

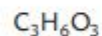
1. Reproduire et compléter le tableau d'avancement.
2. Déterminer la valeur de l'avancement maximal x_{max} .
3. En déduire la composition du système chimique dans l'état final.

Utiliser le réflexe 2

Chapitre 7 : Tableau d'avancement

1 Les familles de composés organiques

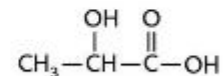
Formule brute



Modélisation d'une molécule

- Elle indique la nature et le nombre d'atomes dans la molécule.
- Elle peut représenter l'enchaînement des atomes dans la molécule.

Formule semi-développée



Groupes caractéristiques et familles de composés

Groupe caractéristique	Hydroxyle	Carbonyle		Carboxyle
Structure	$-\text{OH}$	$\overset{\text{O}}{\underset{\text{ }}{\text{C}}}-$		$\overset{\text{O}}{\underset{\text{ }}{\text{C}}}-\text{OH}$
Famille de composés	Alcool	$\text{H}-\overset{\text{O}}{\underset{\text{ }}{\text{C}}}-\text{H}$ ou $\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\text{ }}{\text{C}}}-\text{H}$ Aldéhyde	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\text{ }}{\text{C}}}-\text{R}'$ Cétone	Acide carboxylique

R et R' représentent des composés hydrocarbonés

2 Le nom et la formule semi-développée

indique la nature et la position
des substituants

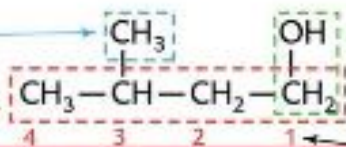
préfixe - racine - suffixe

désigne la famille de composés

donne le nombre d'atomes de carbone dans la chaîne principale

Exemple :

1 groupe méthyl comme substituant sur
l'atome de carbone n° 3 : « 3-méthyl- »



alcool : 1-ol

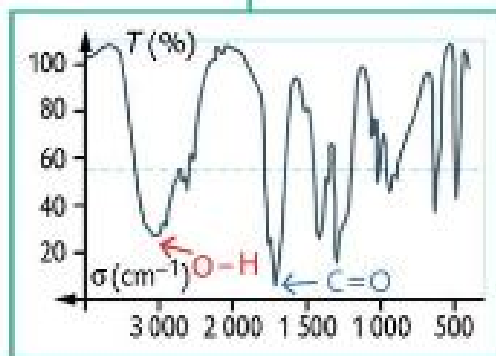
4 atomes de carbone dans
la chaîne principale : « butan- »

3-méthylbutan-1-ol

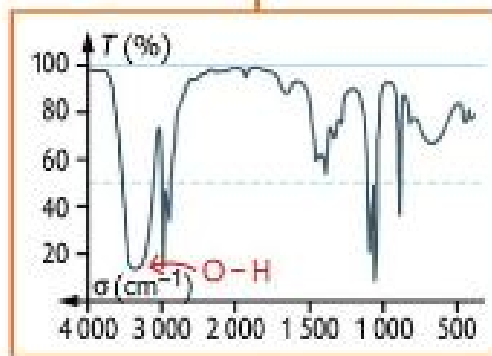
On numérote de façon
à ce que l'atome de carbone fonctionnel
ait le numéro le plus petit

3 La spectroscopie infrarouge

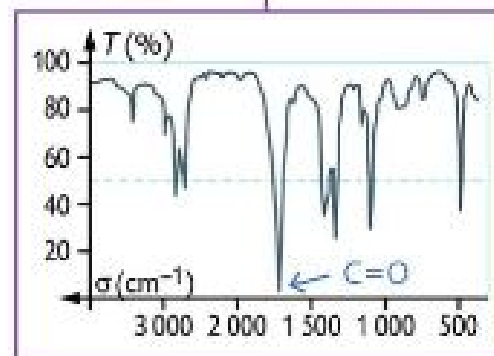
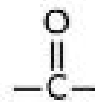
Groupe
carboxyle



Groupe
hydroxyle



Groupe
carbonyle



21 Identifier une famille de composés à l'aide d'un programme python

| Utiliser un langage de programmation.

Les lignes du code d'un programme en langage Python reproduit ci-dessous permettent d'établir la famille de composés à laquelle appartient une molécule dont on connaît le spectre infrarouge.

```
1 print(5*" ", "Détermination de la famille\nde composés", 5*" ")
2
3 def présence_du_groupe_CO() :
4     réponse_CO = str(input("Bande entre\
1700 et 1760 cm-1 ? "))
5     return réponse_CO
6
7 def présence_du_groupe_acide() :
8     réponse_acide = str(input("Bande large\
entre 3500 et 3000 cm-1 ? "))
9     return réponse_acide
10
```

def permet de définir une fonction pour organiser le code de manière plus lisible. Le nom de la fonction doit permettre de comprendre facilement son rôle. Ici chaque fonction demande à l'utilisateur si une bande d'absorption IR est présente sur le spectre. Il faut répondre oui ou non

str signifie chaîne de caractères (string en anglais) car les réponses attendues (oui ou non) sont des chaînes de caractères


```

10
11 def présence_du_groupe_alcool() :
12     réponse_alcool = str(input("Bande assez\
    large vers 3300 cm-1 ? "))
13     return réponse_alcool
14
15 if présence_du_groupe_CO() == "oui":
16     if présence_du_groupe_acide() == "oui" :
17         print("La molécule est un acide\
    carboxylique.")
18     else :
19         print("La molécule est une cétone\
    ou un aldéhyde.")
20 elif présence_du_groupe_alcool() == "oui" :
21     print("La molécule est un alcool.")

```

1. Copier le programme Python et l'appliquer à la détermination de la famille de fonctions de l'exercice **17**.

Structure conditionnelle
présentant 3 cas :

Si le groupe C=O est
présent, la molécule peut
être soit un acide soit un
aldéhyde ou une cétone

Si le groupe C=O n'est pas
présent et si le groupe OH
est présent, c'est un alcool

17 Connaître les critères de réussite

Valider un procédé de synthèse

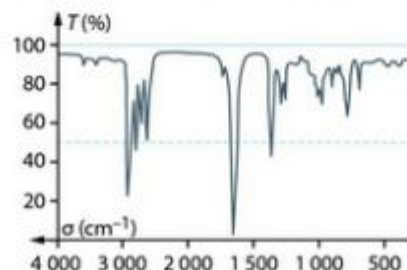
Exploiter des informations ; rédiger une argumentation.

Le 2-méthylpropan-1-ol est une espèce chimique présente dans la composition des peintures. Il améliore la glisse du rouleau lors de l'application de la peinture.



Une entreprise cherche à développer un procédé d'obtention du 2-méthylpropan-1-ol à partir de l'acide 2-méthylpropanoïque.

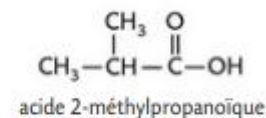
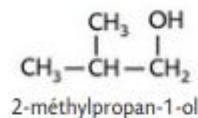
À la fin de la transformation, un technicien réalise une analyse par spectroscopie infrarouge sur le produit obtenu. Le spectre infrarouge est donné ci-dessous :



2. L'entreprise peut-elle utiliser ce procédé pour synthétiser le 2-méthylpropan-1-ol ?

Données

- Formules semi-développées :



- Bandes de vibration infrarouges : Rabat III

Critères de réussite



Justification des réponses

J'ai justifié les noms en analysant les formules semi-développées.

☐ ☐

J'ai utilisé les valeurs de référence pour conclure.

☐ ☐

Rédaction de la réponse

J'ai utilisé le vocabulaire spécifique (bandes de vibration, groupe caractéristique).

☐ ☐

Présentation

J'ai pris soin de l'orthographe.

☐ ☐

Pour aller plus loin

Chapitre 2- Evolution d'un système chimique

Activité numérique

État final d'un système chimique

Ouvrez le document

**1ere_chapitre2_python_systeme_chimique.odt et faites
l'exercice.**

```
import matplotlib.pyplot as plt  
import numpy as np
```

Importation de bibliothèques pour
tracer des courbes et manipuler des
tableaux