Réactions acido-basiques

Taux d'avancement final de la réaction d'un acide faible sur l'eau

```
HA_{(aq)} + H_2O_{(l)} 	o A_{(aq)}^- + H_3O^+
In [1]:

# Import des bibliothèques

import numpy as np # ou import math
```

In [2]:

```
# Première possibilité avec calcul des avancements final et maximal
def taux (Ca, pKa, V):
                               # solution d'acide faible de concentration Ca et de volume V
   Ka = 10**(-pKa)
    xmax = Ca*V # xmax = Ca*V
    # Equation du second degré : (xf/V)**2 + Ka*xf/V-Ka*Ca=0
   a = 1/(V**2)
   b = Ka/V
   c = -Ka*Ca
   delta = b**2-4*a*c
   xf1 = (-b-np.sqrt(delta))/(2*a)
   xf2 = (-b+np.sqrt(delta))/(2*a)
    if xf1<0:</pre>
        xf=xf2
    elif xf2<0:
       xf = xf1
    else :
       xf = min(xf1,xf2)
    taux = xf/xmax
    print("L'avancement final vaut ",xf," mol")
    print("L'avancement maximal vaut",xmax,"mol")
    print("et le taux d'avancement final vaut ", taux," soit ",taux*100,"%")
    return (xf,xmax,taux)
```

In [3]:

```
L'avancement final vaut 5.5513986042768204e-05 mol
L'avancement maximal vaut 0.002 mol
et le taux d'avancement final vaut 0.0277569930213841 soit 2.77569930213841 %

Out [3]:
(5.5513986042768204e-05, 0.002, 0.0277569930213841)

In [4]:
```

```
# Deuxième possibilité avec calcul de la concentration effective finale des ions oxonium
def taux (Ca, pKa):
                              # solution d'acide faible de concentration Ca
    Ka = 10**(-pKa)
    \# Equation du second degré : Coxonium**2 + Ka*Coxonium-Ka*Ca=0
    a = 1
    b = Ka
    c = -Ka*Ca
    delta = b**2-4*a*c
    Coxonium1 = (-b-np.sqrt(delta))/(2*a)
    Coxonium2 = (-b+np.sqrt(delta))/(2*a)
    if Coxonium1<0:</pre>
        Coxonium=Coxonium2
    elif Coxonium2<0:</pre>
        Coxonium = Coxonium1
    else :
        Coxonium = min(Coxonium1,Coxonium2)
    taux = Coxonium/Ca
    print (" La concentration effective finale des ions oxonium vaut ",Coxonium," mol.L-1
 \hookrightarrow \n''
           "et le taux d'avancement final vaut ", taux," soit ",taux*100,"%")
    return (Coxonium,taux)
```

In [5]:

```
Ca = 0.2 # concentration de la solution en acide faible apporté en mol/L
pKa = 3.8 # pKa du couple acide faible/base faible
taux (Ca,pKa)
```

La concentration effective finale des ions oxonium vaut 0.005551398604276821 mol.L-1 et le taux d'avancement final vaut 0.027756993021384103 soit 2.77569930213841 %

Out [5]:

(0.005551398604276821, 0.027756993021384103)

In []: