# Python et Equation d’une réaction chimique

## Objectif : Ecrire un programme en langage python qui calcule les nombres stœchiométriques des équations de réaction de combustion complète des dix premiers alcanes puis qui affiche ces équations.

**INFO 1: Equation de combustion complète des 4 premiers alcanes:**

CH4 +  **2** O2 🡪 CO2  + **2** H2O

**2** C2H6 + **7** O2 🡪 **4** CO2  + **6** H2O

C3H8 + **5** O2 🡪 **3** CO2  + **4** H2O

**2** C4H10 + **13** O2 🡪 **8** CO2  + **10** H2O

**INFO 2:**

Un alcane est un hydrocarbure, c’est-à-dire une molécule ne contenant que des atomes de carbone et d’hydrogène, liés entre eux par des liaisons simples.

 Ex : L’éthane **C2H6**

Leur formule brute est de la forme **CnH 2n+2**, **n** représentant le nombre d’atomes de carbone.



**INFO 3:**

* La combustion complète d’un hydrocarbure X avec le dioxygène O2(g) conduit uniquement à la formation de dioxyde de carbone CO2 (g) et d’eau (H20(g))
* L’équation de la réaction est alors de la forme :

 **a X** + **b** O2 🡪 **c** CO2  + **d** H2O

 a,b,c et d: nombres stœchiométriques

* L’équation de la réaction doit impérativement montrer la conservation des éléments chimiques et la conservation de l’ensemble des charges électriques. Ceci est réalisé par l’ajustement des coefficients stœchiométriques (a,b,c,d) placés DEVANT chaque espèce chimique.

 Par convention :

* On n’écrit pas le nombre stœchiométrique, s’il est égal à 1.
* En général, on s’arrange pour que les nombres stœchiométriques soient des nombres entiers.

**Votre travail:** En vous aidant des informations fournies, écrire un programme en langage python qui calcule les nombres stœchiométriques des équations de réaction de combustion complète des dix premiers alcanes puis qui affiche ces équations. Ce programme contiendra obligatoirement:

* une structure conditionnelle
* une structure de boucle
* une fonction *equation* recevant en paramètre le nombre d’atomes **n** de carbone de l’alcane considéré.

# Un peu d’aide ?

1. Sur une feuille, retrouver les équations équilibrées des 4 premiers alcanes afin de comprendre l’algorithme mis en œuvre pour calculer les nombres stœchiométriques en fonction du nombre n d’atomes de carbone.
2. Nom de variable conseillé :
* **n :** nombre d’atomes de carbone présents dans la molécule
* **nH:** nombre d’atomes d’hydrogène présents dans la molécule
* **a,b,c,d:** nombres stoechiométriques **a** CH4 + **b** O2 🡪 **c** CO2  + **d** H2O
1. Ecrire un programme qui **calcule** les nombres stoechiométriques (a,b,c,d) à partir du nombre d’atomes de carbone n , puis qui affiche ces nombres.
2. Faire évoluer le programme précédent de manière à faire apparaitre une fonction

*equation* recevant en paramètre le nombre d’atomes **n** de carbone de l’alcane considéré.

1. Faire évoluer le programme précédent, de sorte qu’il affiche les équations de combustion complète des dix premiers alcanes (n allant de 1 à 10).

# Syntaxe/Instructions Python

#  Rappels et compléments

### Exemple de structure conditionnelle



* Exemple de Boucle For



* Exemple de fonction
* L’instruction *r = a%b affecte à la variable* ***r*** *le reste de la division entière a/b.*
* L’instruction *print (2.5)* affiche 2.5 par contre l’instruction *print (int(2.5))* affiche 2.

De même, si a=2.5 l’instruction *print (int(a))* affiche 2