

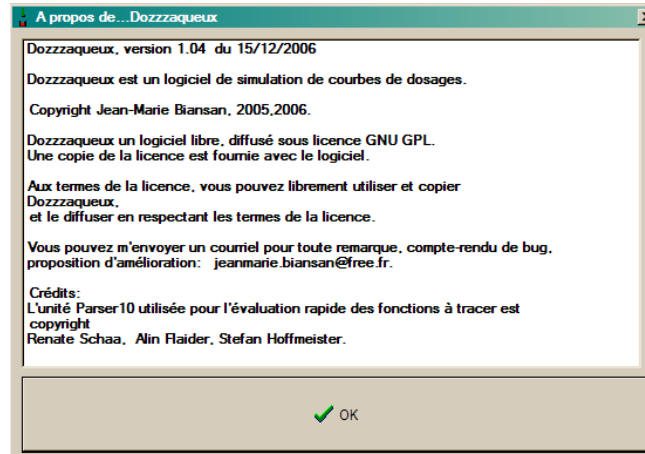
# Simulations et exploitation de courbes de titrages acido-basiques suivis par pH-métrie et conductimétrie. Utilisation des logiciels Dozzaqueux et Regressi

Version 2 du 24 septembre 2009

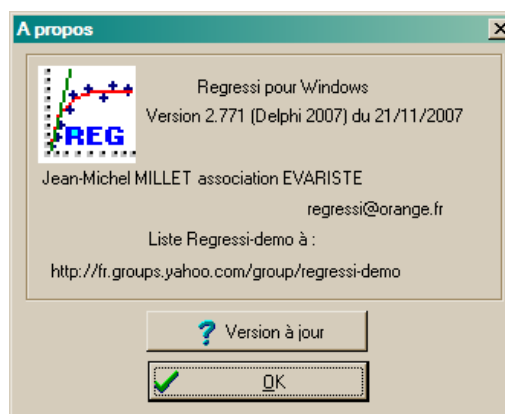
A. Prise en main du logiciel Dozzaqueux : titrage acide fort / base forte .....	3
1. Paramétrage du contenu du bécher.....	3
2. Paramétrage du contenu de la burette .....	5
3. Choix des produits et des réactions .....	6
4. Calculs.....	8
5. Représentation graphique.....	8
6. Exporter les données dans Regressi .....	12
B. Prise en main du logiciel Regressi.....	13
1. Paramétrage de la courbe sous Regressi – Indicateur colorés.....	14
2. Tracé de la courbe dérivée première .....	15
3. Tracé de la courbe dérivée seconde.....	17
4. Méthode des tangentes .....	18
C. Simulation d'un titrage suivi par conductimétrie avec Dozzaqueux .....	19
1. Linéarisation de la conductivité .....	20
2. Influence de la dilution.....	21
3. Export dans Regressi .....	22
D. Titration acide faible / base forte .....	25
1. Simulation du titrage .....	25
2. Evolution des concentrations des espèces.....	26
3. Export sur Regressi. Choix de l'indicateur coloré .....	27
4. Influence de la concentration sur l'allure des courbes de titrages.....	27
5. Influence du $pK_A$ sur l'allure des courbes de titrages .....	29
6. Titration base faible / acide fort.....	30
7. Influence du $pK_A$ des bases faibles sur la nature des courbes obtenues.....	32
E. Etude d'un mélange de chlorure d'ammonium et d'acide acétique.....	33
1. Simulations.....	33
2. Analyses sur Regressi.....	34

Les courbes sont simulées à l'aide du logiciel Dozzaqueux. Ce logiciel est distribué sous les termes de la GNU General Public License. Il est librement utilisable et téléchargeable sur :

<http://jeanmarie.biansan.free.fr/dozzaqueux.html><sup>1</sup>



Les courbes simulées seront exploitées à l'aide du logiciel Regressi, disponible à l'adresse : <http://pagesperso-orange.fr/jean-michel.millet/telechargement.htm><sup>2</sup> sous la forme d'une version de démonstration (installation, exécutable, aide, polices, exemples ; version 2.771 du 21 novembre 2007) sous trois formes selon les possibilités de votre système. Cette version n'est pas utilisable en classe ni dans tout cadre institutionnel, sauf si elle sert de mise à jour à une version Microlec déjà présente de moins de trois ans.



---

<sup>1</sup> Fichier dozzaqueux\_1.04\_windows\_installer.exe, 2 Mo (nov. 2007).

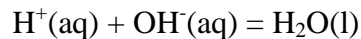
<sup>2</sup> Fichiers regressi.msi, 5,8 Mo pour la version 2.76 du 11 janvier 2007 et regexe.zip, 1,3 Mo pour la version 2.771 du 21 novembre 2007.

## A. Prise en main du logiciel Dozzaqueux : titrage acide fort / base forte

Lancer le logiciel.



La première réaction étudiée sera celle d'une base forte sur un acide fort, de l'acide chlorhydrique et de l'hydroxyde de sodium :  $(\text{Na}^+, \text{OH}^-) + (\text{H}^+, \text{Cl}^-)$  :



Une prise d'essai de 10 mL d'une solution d'acide chlorhydrique à  $100 \text{ mmol.L}^{-1}$  est titrée par une solution d'hydroxyde de sodium à  $100 \text{ mmol.L}^{-1}$ .

### 1. Paramétrage du contenu du bécher

**Base de réactifs:**

Identifiant	Conductivité (0,1 mS.m <sup>2</sup> /mol)	Synonyme	Formule
Ag[+]	61.9		
Ag[2+]	?		
Al[3+]	61		
Am[3+]	?		
Au[+]	?		
Au[3+]	?		
Ba[2+]	63.6		
Be[2+]	45		
Bi[3+]	?		
Ca[2+]	59.47		
Cd[2+]	54		
Ce[3+]	69.8		

Pour choisir le réactif, l'acide chlorhydrique, cliquer sur **RECHERCHER UNE ESPECE** puis **FORMULE BRUTE** :

Identif: Par formule brute  
Par identifiant ou synonyme

Rechercher une espèce

Taper **HCl** et valider :

Recherche dans la base

Entrez la formule brute. Puis cliquez sur "OK". Puis sélectionnez le réactif dans la liste ci-dessous.

Exemples: BaSO4 Ag[+] CrO4[2-] FeO3H3[3+]

mais pas: AGSO4 (respect majuscules/minuscules) ni Cu(NH3)4 (pas de parenthèses)

C O H N P S 2 3 [+][2+][3+][3-][2-][1-]

HCl

Type de comparaison:

- Exacte
- Mêmes atomes, en nombres inférieurs ou égaux:
- Mêmes atomes, en nombre supérieurs ou égaux:
- Mêmes atomes, en nombre quelconques:

Identifiant	Synonyme	Formule brute	M (g/mol)
HCl(aq)			36.461

OK

Fermer

Cliquer sur HCl(aq) afin de préciser la **CONCENTRATION MOLAIRES** (ou au choix la quantité de matière, la masse ou la concentration massique) :

Nombre de moles ?

Pour l'espèce HCl(aq), veuillez introduire:

la quantité de matière: [ ] mol

OU BIEN

la masse: [ ] g

OU BIEN

la quantité de matière par L de solution: [0.1] mol/L

OU BIEN

la masse par L de solution: [ ] g/L

OK Annuler

Attention à écrire les nombres décimaux avec un point et non une virgule : taper 0.1 et pas 0,1.

Dans **VOLUME INITIAL** préciser la prise d'essai de 10 mL :

Choix des réactifs: bécher | Choix des réactifs: burette | Espèce

Bécher Vider

Volume initial= 10 mL

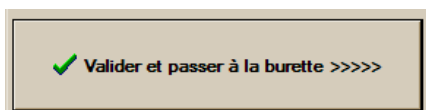
Température= 298 K

Réactifs choisis:

x10 /10

	Identifiant	Concentration (mol/L)
Supprimer	HCl(aq)	0.1

Puis **VALIDER ET PASSER A LA BURETTE** :



## 2. Paramétrage du contenu de la burette

Le volume proposé par défaut est de 20 mL. Nous garderons cette valeur.

Choix des réactifs: bécher | Choix des réactifs: burette | Espèces pré

**Burette** Vider

Volume maximal à verser:  mL

**Réactifs choisis:**

Identifiant	Concentration (mol/L)

? Rechercher une espèce

Pour choisir le réactif, la soude, cliquer sur **RECHERCHER UNE ESPECE** et taper **NaOH** puis **0.1 MOL.L<sup>-1</sup>** :

Recherche de **Nombre de moles ?**

Entrez la formule:  Pour l'espèce NaOH(aq), veuillez introduire:

Exemples: BaS  
mais pas: AGSC

Type de comparaison:

- Exacte
- Mêmes atomes
- Mêmes atomes
- Mêmes atomes

la quantité de matière:  mol

OU BIEN

la masse:  g

OU BIEN

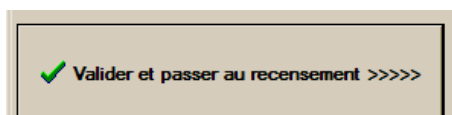
la quantité de matière par L de solution:  mol/L

OU BIEN

la masse par L de solution:  g/L

Identifiant	Synonyme	Formule brute	M (g/mol)
NaOH(aq)			39.997

Puis **VALIDER ET PASSER ET PASSER AU RECENSEMENT** :



### 3. Choix des produits et des réactions

Ici, la liste des produits de la réaction est proposée par le logiciel.

Dozzaqueux

Fichier Options Aide

Choix des réactifs:bécher Choix des réactifs:burette **Espèces présentes** Réactions et constantes Résultats Choix des courbes Tracé des courbes

Voici la liste des espèces susceptibles d'être présentes à l'équilibre.

Si vous pensez que certaines ne seront pas présentes (blocage cinétique par exemple), il suffit de les décocher.

Tout cocher Tout décocher

Pour obtenir la formule brute d'une espèce, sélectionnez la puis cliquez sur le bouton ci-contre: **Formule brute ?**

- Cl[-]
- H<sub>2</sub>O
- H[+]
- Na[+]
- HCl(aq)
- NaCl(aq)
- NaOH(aq)
- OH[-]
- Halite(s)
- Na<sub>2</sub>O(s)

Toutes les espèces ne seront pas gardées. En cliquant sur tout décocher, certaines espèces disparaissent de la sélection.

Tout cocher Tout décocher

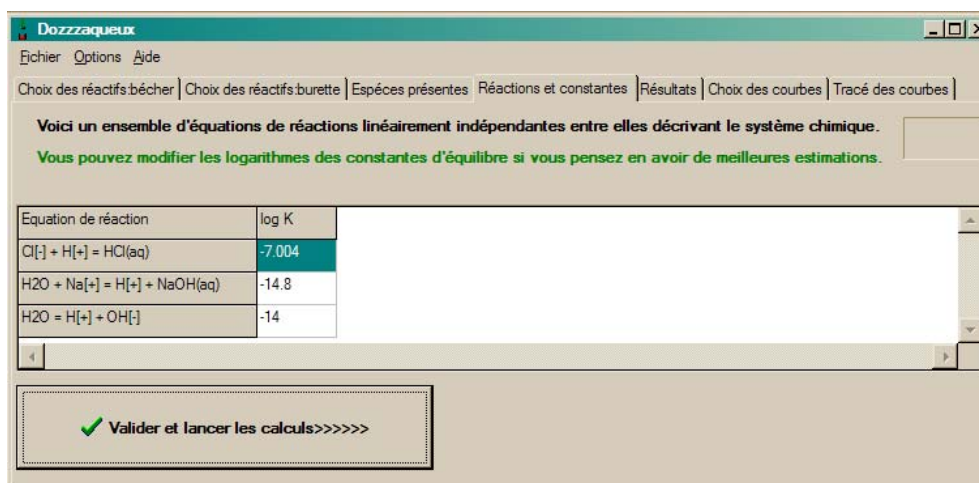
Pour obtenir la formule brute d'une espèce, sélectionnez la puis cliquez sur le bouton ci-contre: **Formule brute ?**

- Cl[-]
- H<sub>2</sub>O
- H[+]
- Na[+]
- HCl(aq)
- NaCl(aq)
- NaOH(aq)
- OH[-]
- Halite(s)
- Na<sub>2</sub>O(s)

Nous choisissons de ne pas tenir compte de NaCl(aq), de l'halite(s), du NaCl(s), et de Na<sub>2</sub>O(s) de façon à diminuer le temps de calcul, ces espèces n'ayant que une probabilité très faible de se former au cours de la réaction que nous analysons. Nous choisissons par contre de rajouter Cl<sup>-</sup>, Na<sup>+</sup> à la sélection ; pour cela, cliquer sur le nom de l'espèce.

- Cl[-]
- H<sub>2</sub>O
- H[+]
- Na[+]
- HCl(aq)
- NaCl(aq)
- NaOH(aq)
- OH[-]
- Halite(s)
- Na<sub>2</sub>O(s)

Après avoir validé, la liste des réactions retenues ainsi que les constantes de réaction correspondantes sont proposées :



The screenshot shows the 'Dozzaqueux' software interface. At the top, there is a menu bar with 'Fichier', 'Options', and 'Aide'. Below the menu bar is a navigation bar with tabs: 'Choix des réactifs: bécher', 'Choix des réactifs: burette', 'Espèces présentes', 'Réactions et constantes', 'Résultats', 'Choix des courbes', and 'Tracé des courbes'. The main area contains the following text:

Voici un ensemble d'équations de réactions linéairement indépendantes entre elles décrivant le système chimique.  
Vous pouvez modifier les logarithmes des constantes d'équilibre si vous pensez en avoir de meilleures estimations.

Equation de réaction	log K
$\text{Cl}^- + \text{H}^+ = \text{HCl(aq)}$	-7.004
$\text{H}_2\text{O} + \text{Na}^+ = \text{H}^+ + \text{NaOH(aq)}$	-14.8
$\text{H}_2\text{O} = \text{H}^+ + \text{OH}^-$	-14

At the bottom of the interface, there is a button with a green checkmark icon and the text 'Valider et lancer les calculs>>>>>>'.

En validant cette page, les calculs sont lancés (plus ou moins longs selon le nombre de réaction mis en jeu).

## 4. Calculs

Le tableau suivant apparaît :

Volume versé (mL)	Cl <sup>-</sup> (mol/L)	H <sup>+</sup> (mol/L)	Na <sup>+</sup> (mol/L)	HCl(aq) (mol/L)	NaOH(aq) (mol/L)	OH <sup>-</sup> (mol/L)
0	0.1	0.1	0	9.908E-0010	0	1E-0013
0.2	0.09901	0.09802	0.0009901	9.616E-0010	1.601E-0017	1.02E-0013
0.4	0.09804	0.09608	0.001961	9.333E-0010	3.234E-0017	1.041E-0013
0.6	0.09709	0.09417	0.002913	9.059E-0010	4.902E-0017	1.062E-0013
0.8	0.09615	0.09231	0.003846	8.794E-0010	6.604E-0017	1.083E-0013
1	0.09524	0.09048	0.004762	8.538E-0010	8.342E-0017	1.105E-0013
1.2	0.09434	0.08868	0.00566	8.289E-0010	1.012E-0016	1.128E-0013
1.4	0.09346	0.08692	0.006542	8.049E-0010	1.193E-0016	1.151E-0013
1.6	0.09259	0.08519	0.007407	7.815E-0010	1.378E-0016	1.174E-0013
1.8	0.09174	0.08349	0.008257	7.589E-0010	1.567E-0016	1.198E-0013
2	0.09091	0.08182	0.009091	7.37E-0010	1.761E-0016	1.222E-0013
2.2	0.09009	0.08018	0.00991	7.157E-0010	1.959E-0016	1.247E-0013
2.4	0.08929	0.07857	0.01071	6.951E-0010	2.161E-0016	1.273E-0013
2.6	0.0885	0.07699	0.0115	6.751E-0010	2.368E-0016	1.299E-0013

On opte pour le tracé des courbes : **CHOISIR LES COURBES A TRACER.**

## 5. Représentation graphique

La fenêtre est :

Définir la grandeur portée en abscisse

Tout supprimer

Ajouter une grandeur en ordonnée

Echelle horizontale

Automatique Xmin=  Xmax=

Manuelle

Echelle verticale gauche

Automatique Ymin=  Ymax=

Manuelle

Echelle verticale droite

Automatique Ymin=  Ymax=

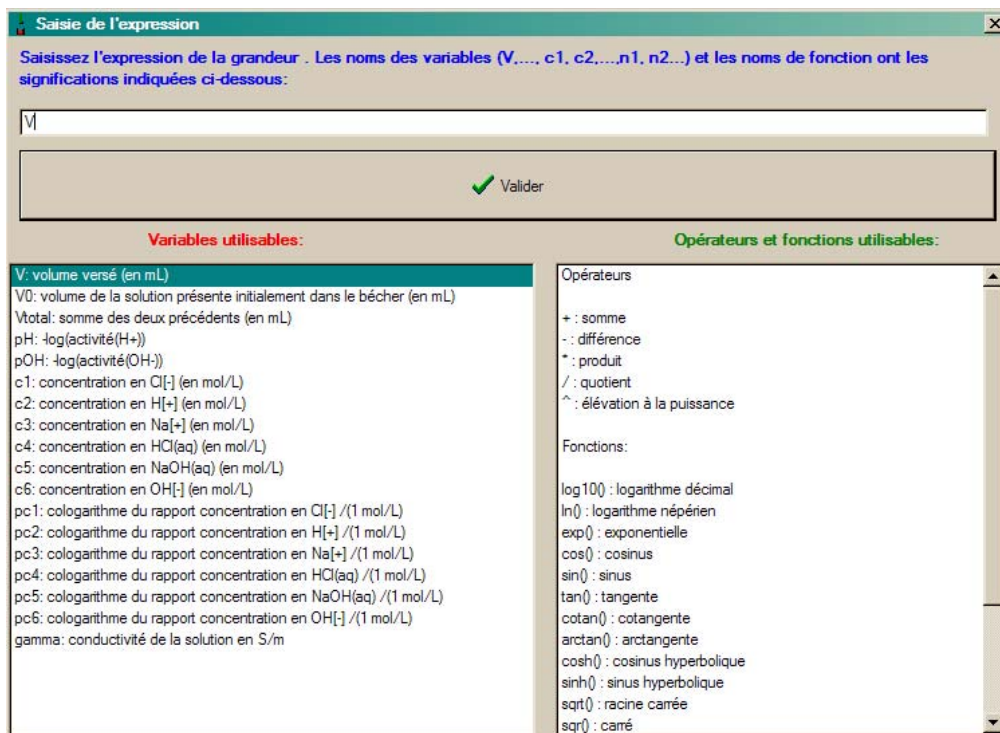
Manuelle

Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle

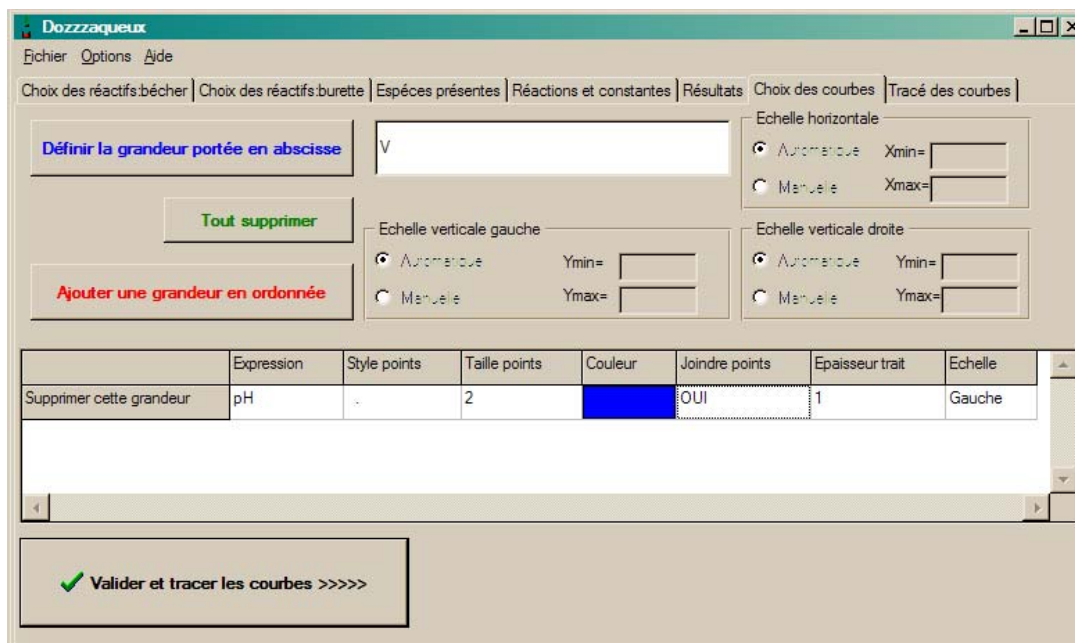
Valider et tracer les courbes >>>>>



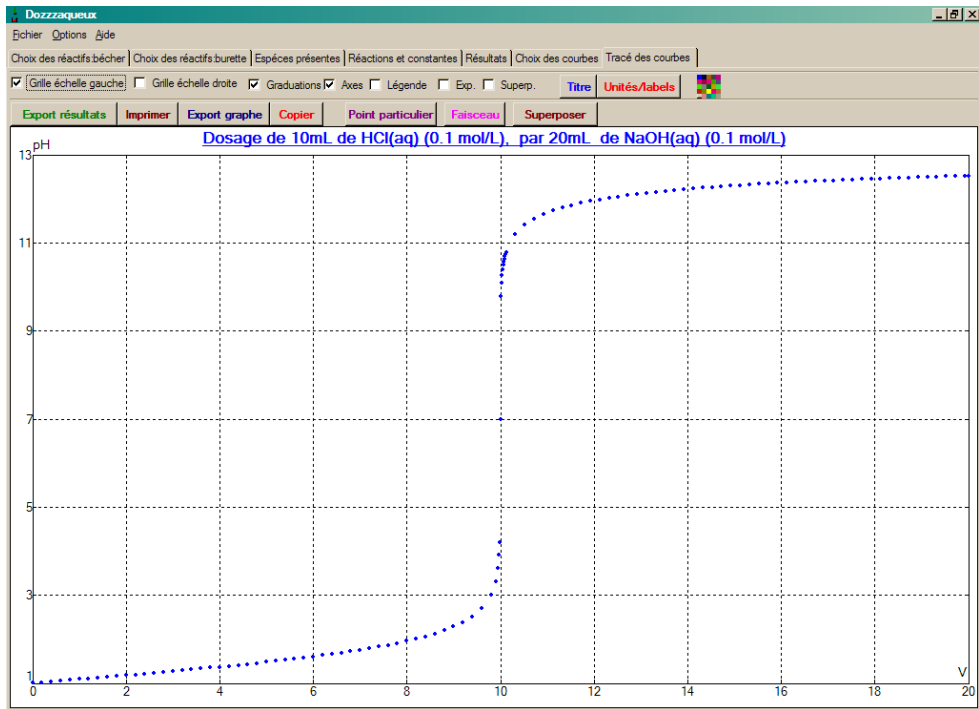
On commence par **DEFINIR LA GRANDEUR PORTEE EN ABSCISSE**, le volume, V :



Comme **GRANDEUR PORTEE EN ORDONNEE**, le pH :



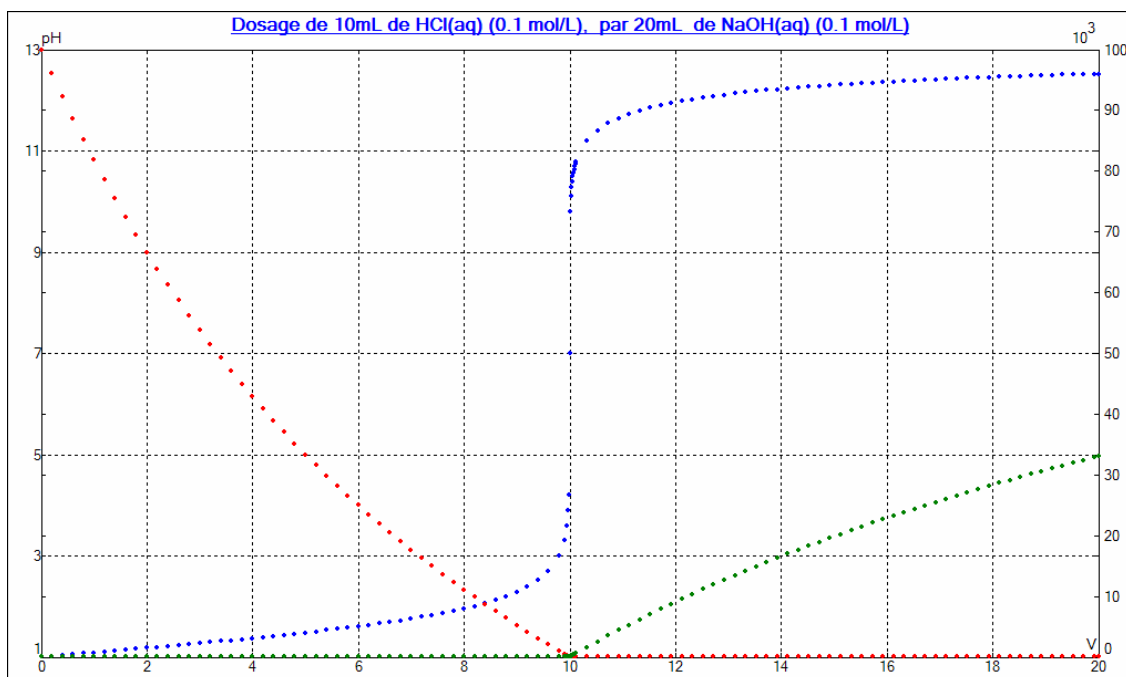
On garde par défaut les caractéristiques de la courbe : **TAILLE DES POINTS : 2**, **COULEUR** bleue, et on choisit de **JOINDRE LES POINTS**.



On peut ajouter l'évolution des concentrations. Par exemple celles de  $H^+$  et  $OH^-$ . Il suffit de revenir dans L'ONGLET **CHOIX DES COURBES** et d'ajouter :

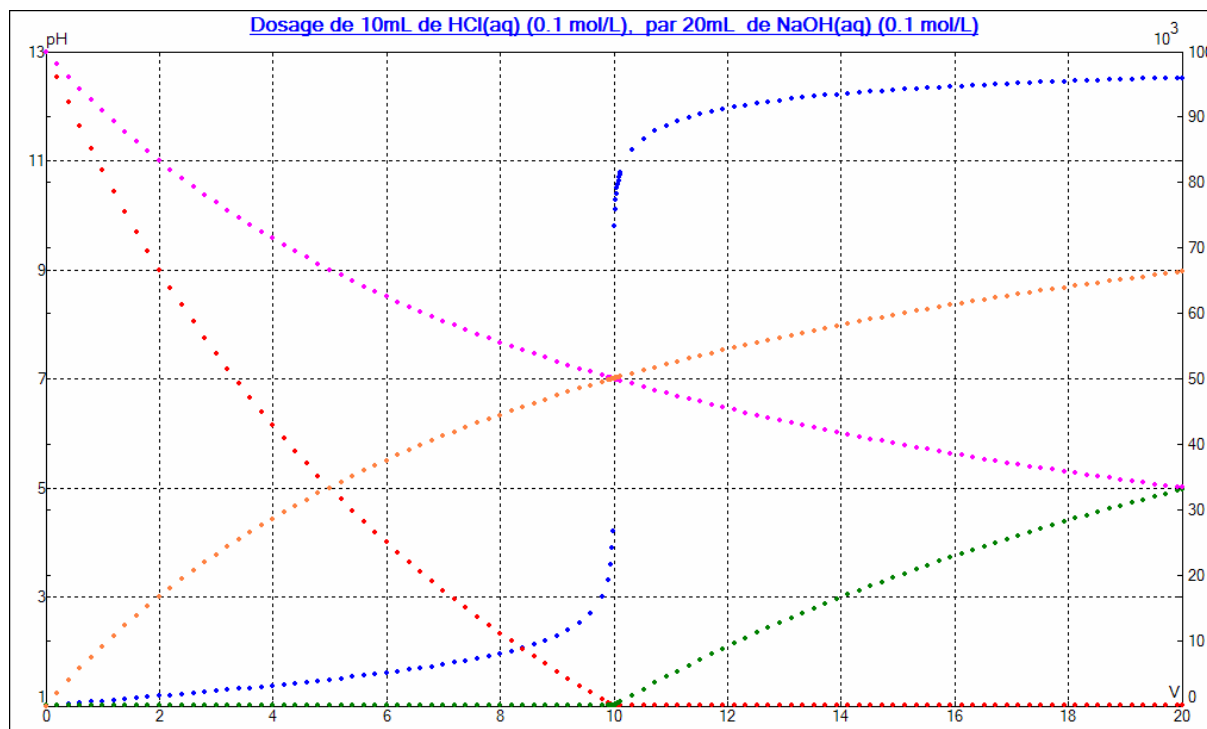
	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	pH	.	2	Blue	NON	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	$[H^+]$	.	2	Red	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	$[OH^-]$	.	2	Green	NON	1	Droite

Attention à bien mettre **DROITE** dans la **COLONNE ECHELLE** pour distinguer les échelles de pH et de concentration.



On peut également ajouter les contre-ions :

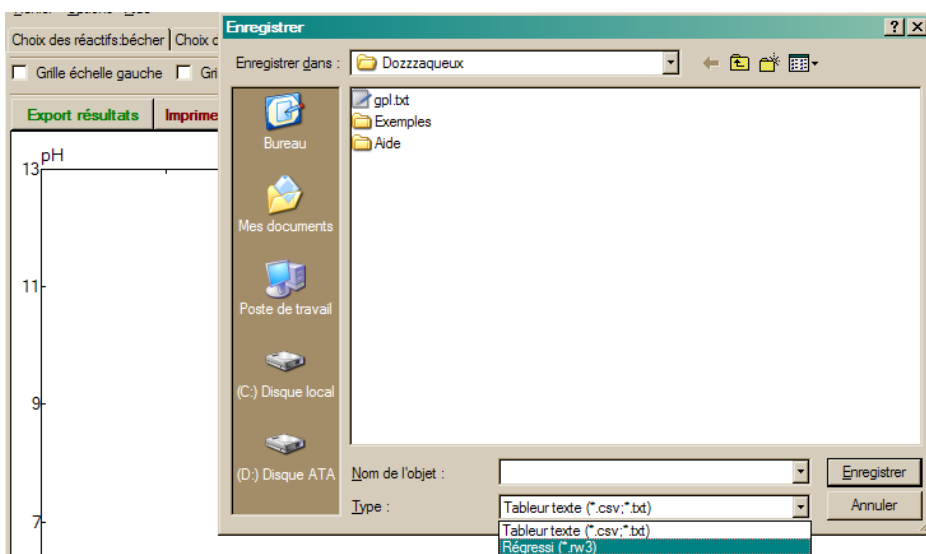
	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	pH	.	2	Blue	NON	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	[H <sup>+</sup> ]	.	2	Red	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[OH <sup>-</sup> ]	.	2	Green	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Cl <sup>-</sup> ]	.	2	Magenta	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Na <sup>+</sup> ]	.	2	Orange	NON	1	Droite



On visualise ainsi l'effet de dilution.

## 6. Exporter les données dans Regressi

Dans l'onglet **TRACE DES COURBES**, cliquer sur **EXPORT RESULTATS** :

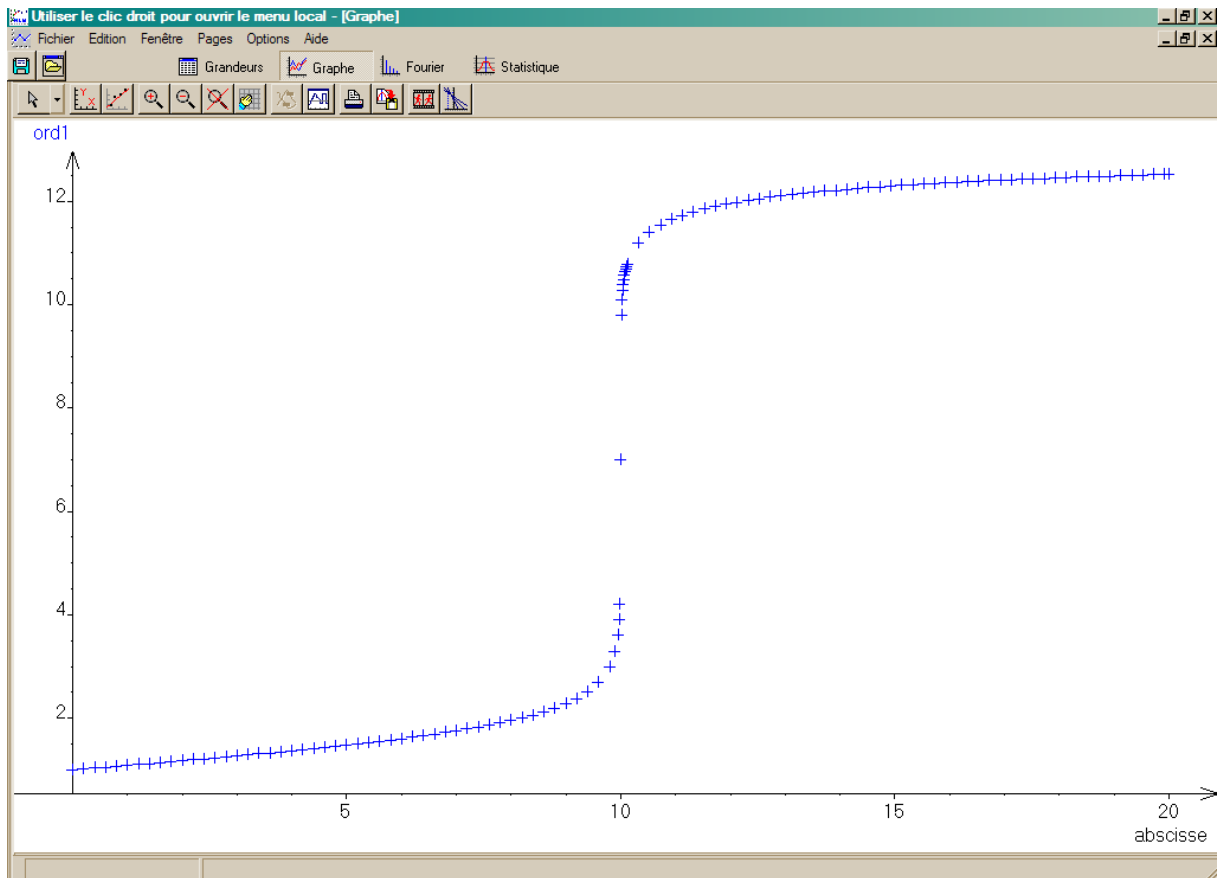


On peut, au choix, exporter au format texte (.txt), tabulé (.csv, exploitable sous un tableur de type Excel® ou OpenOffice) ou Regressi (.rw3). Exporter la simulation sous un nom évocateur, par exemple : *hcl\_naoh\_ph\_dzzz.rw3*. L'extension .rw3 est à taper dans le nom du fichier, attention : elle ne sera pas mise par défaut ! Le fichier rw3 a la structure suivante :

EVARISTE REGRESSI WINDOWS 1.0	0	5.8 1.57540779927384	11.725 11.8961348856403
£2 NOM VAR	0	6 1.60205999401043	11.925 11.9397685716916
abscisse	&2 ZERO	6.2 1.62973142057413	12.125 11.978725480949
ordl	0	6.4 1.6585413498952	12.325 12.0138542050067
£2 GENRE VAR	0	6.6 1.68862917357963	12.525 12.0457926772741
0	&5 OPTIONS	6.8 1.7201593059553	12.725 12.0750325648868
0	8	7 1.75332766917583	12.925 12.101960795825
£2 UNITE VAR	0	7.2 1.78837041805065	13.125 12.126887321243
0	1	7.4 1.82557590276526	13.325 12.150064249252
£2 INCERTITUDE	3	7.6 1.86530142852399	13.525 12.1716993807458
0	4	7.8 1.90799732387555	13.725 12.1919660044051
£1 PAGE COMMENT	£1 PAGE COMMENT	8 1.95424251179453	13.925 12.2110101267325
£1 TRIGO	&115 VALEUR VAR	8.2 2.00479888520141	14.125 12.2289559031481
0	0 1.00000000430269	8.4 2.06069784263442	14.325 12.2459097818778
£1 LOG	0.2 1.01737410028771	8.6 2.12338491077597	14.525 12.2619637102002
0	0.4 1.03476211039633	8.8 2.19497660539757	14.725 12.2771976466438
£2 MEMO GRANDEURS	0.6 1.05217801572407	9 2.27875360305968	14.925 12.2916815519489
'abscisse: V	0.8 1.06963593212517	9.2 2.38021124370077	15.125 12.3054769834064
'ordl: pH	1 1.08715017963019	9.4 2.50965048130717	15.325 12.3186383837518
£2 ACQUISITION	1.2 1.10473535436139	9.6 2.69019608117315	15.525 12.3312141322449
CLAVIER	1.4 1.12240640386681	9.8 2.99563519248094	15.725 12.3432474087112
0	1.6 1.1401787068738	9.9 3.29885306123798	15.925 12.354776909109
£0 GRAPHE VAR	1.8 1.15806815856823	9.95 3.60097282815708	16.125 12.3658374422183
&5 X	2 1.17609126264064	9.975 3.90254650202014	16.325 12.3764604303824
abscisse	2.2 1.19426523151036	9.9875 4.20384734670504	16.525 12.3866743322382
0	2.4 1.21260809635055	10 6.99828600749089	16.725 12.396505001573
0	2.6 1.2311388288005	10.0125 9.79217970369915	16.925 12.4059759935471
0	2.8 1.24987747657704	10.025 10.0929355818891	17.125 12.4151088272792
0	3 1.26884531560118	10.0375 10.268753580639	17.325 12.4239232120465
&5 Y	3.2 1.28806502175792	10.05 10.3934193298975	17.525 12.4324374249834
ordl	3.4 1.30756086603243	10.0625 10.4900565563204	17.725 12.440667571084
0	3.6 1.32735893754843	10.075 10.568965198566	17.925 12.4486295514492
0	3.8 1.34748740001903	10.0875 10.6356395608732	18.125 12.4563373730354
0	4 1.36797678836588	10.1 10.693359254247	18.325 12.4638041726049
0	4.2 1.38886035384788	10.1125 10.7442396953801	18.525 12.4710421351299
&5 MONDE	4.4 1.41017446807445	10.125 10.7897252760616	18.725 12.4780625825359
1	4.6 1.43195909890563	10.325 11.2003710981447	18.925 12.4848760523712
1	4.8 1.45425837466414	10.525 11.4043622293279	19.125 12.4914923677442
1	5 1.47712125758449	10.725 11.540297993184	19.325 12.4979206996627
1	5.2 1.50060235339581	10.925 11.6418998408241	19.525 12.5041696227466
1	5.4 1.52476289194423	11.125 11.7227490253911	19.725 12.5102471651383
&2 GRADUATION	5.6 1.5496719246212	11.325 11.789690284578	19.925 12.516160853214
		11.525 11.8466609185782	20 12.5183376986449

## B. Prise en main du logiciel Regressi

Ouvrir le fichier *hcl\_naoh\_ph\_dzzz.rw3* :



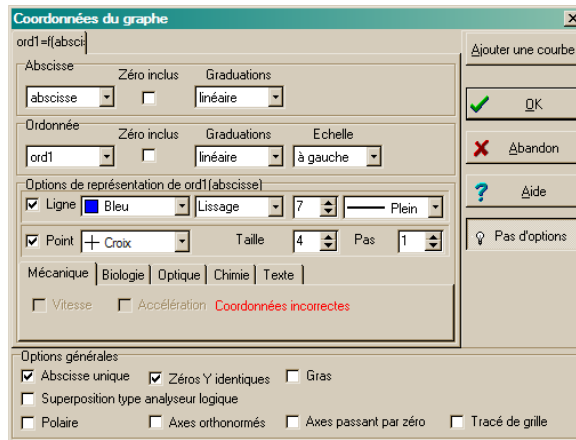
Les noms des abscisses et ordonnées peuvent être modifiés (par exemple dans le corps du fichier *.rw3*)<sup>3</sup> :

£2	NOM	VAR
	V	
	pH	

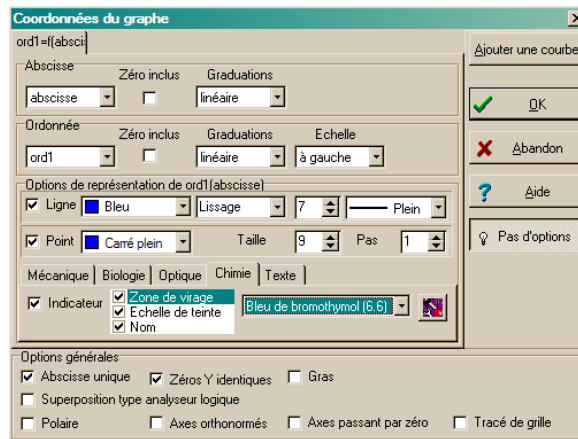
<sup>3</sup> Ouvrir avec / Bloc-Notes / modifier puis enregistrer.

# 1. Paramétrage de la courbe sous Regressi – Indicateur colorés

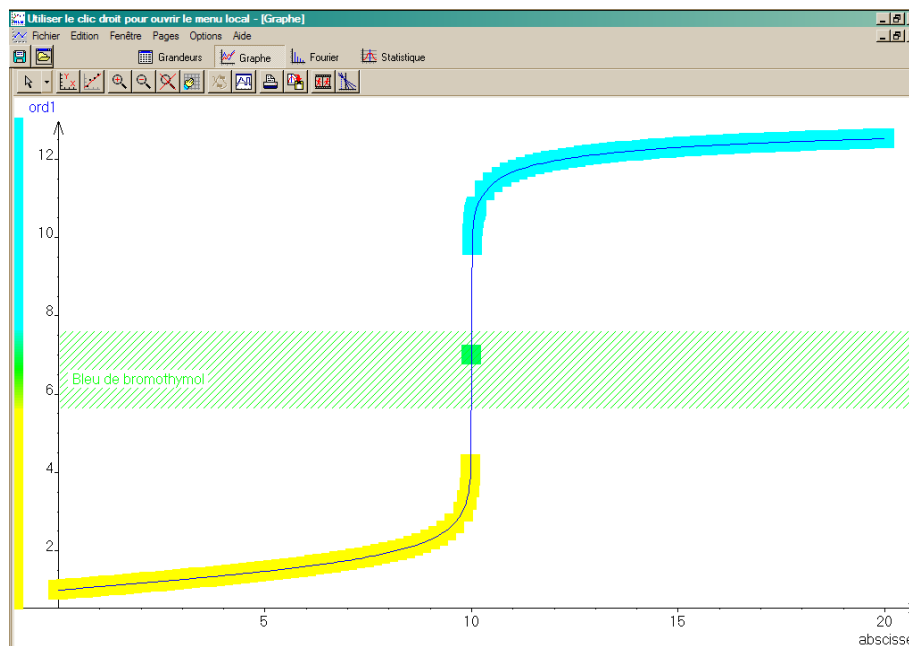
La courbe peut être paramétrée  (LISSAGE de niveau 7, POINTS de taille 4 etc.) :



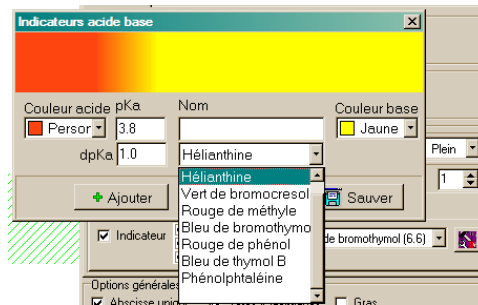
Il est possible, dans L'ONGLET CHIMIE de faire figurer des INDICATEURS COLORES :



Ce qui donne :

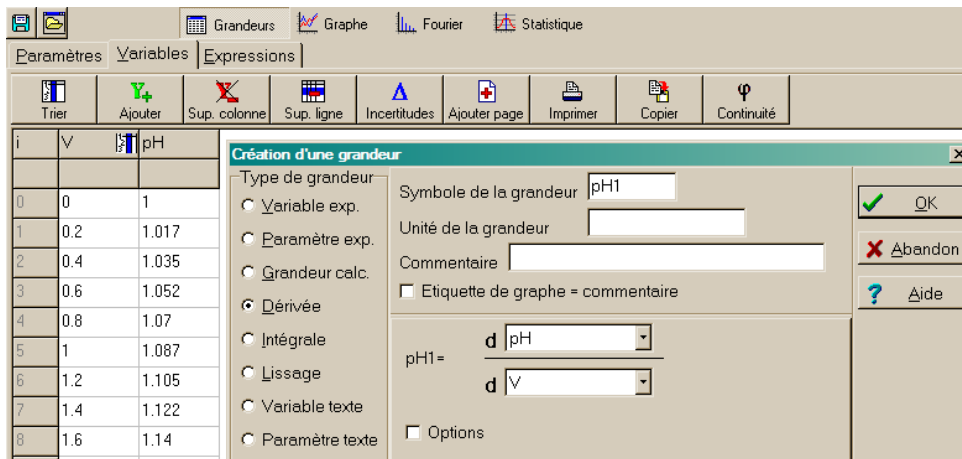


La liste des indicateurs, paramétrable, peut également être complétée :



## 2. Tracé de la courbe dérivée première

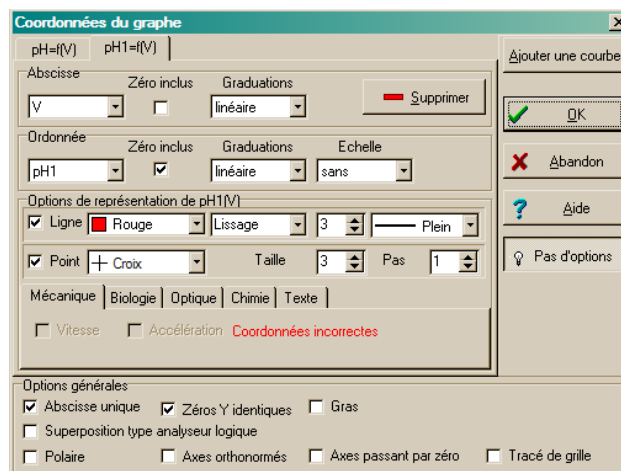
Sélectionner dans **GRANDEUR**, **AJOUTER UNE VARIABLE** :



Ajouter la courbe dérivée :




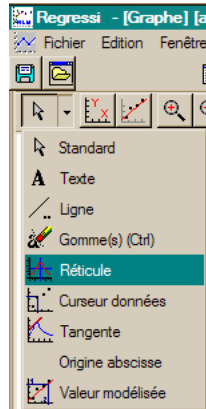
et la paramétrer :



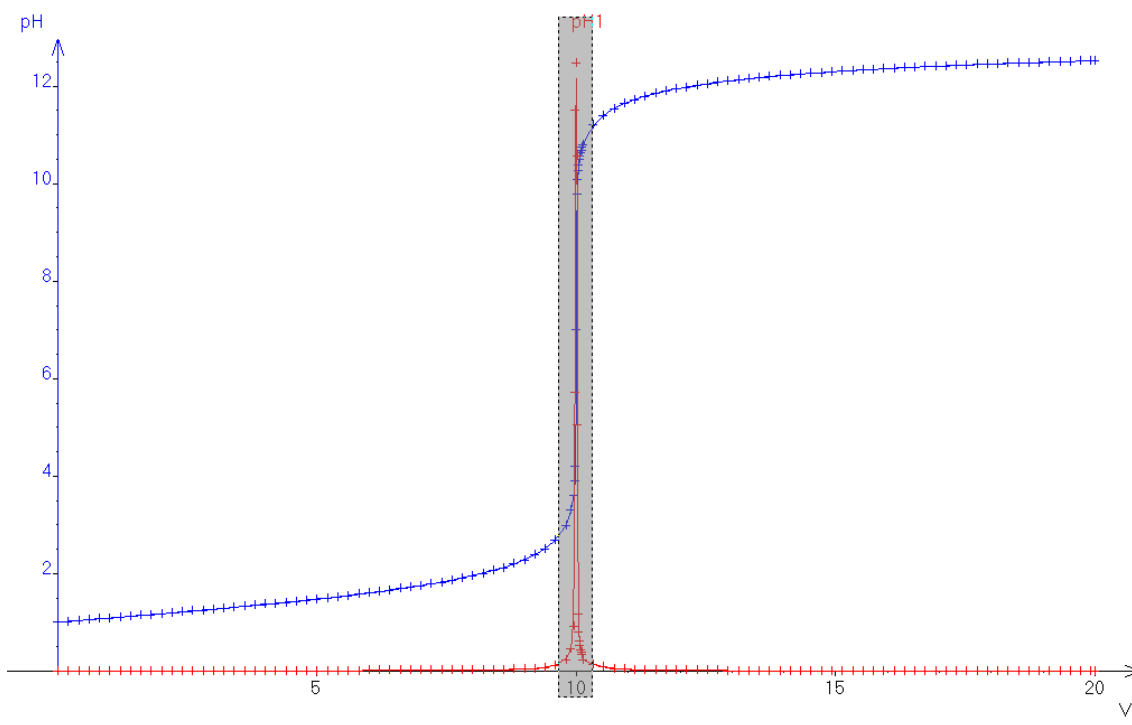
Il est nécessaire de découpler l'échelle de la courbe dérivée de la courbe de pH :



Regressi ne permet pas de déterminer l'extrémum de la dérivée autrement qu'en zoomant  et en utilisant le RETICULE :

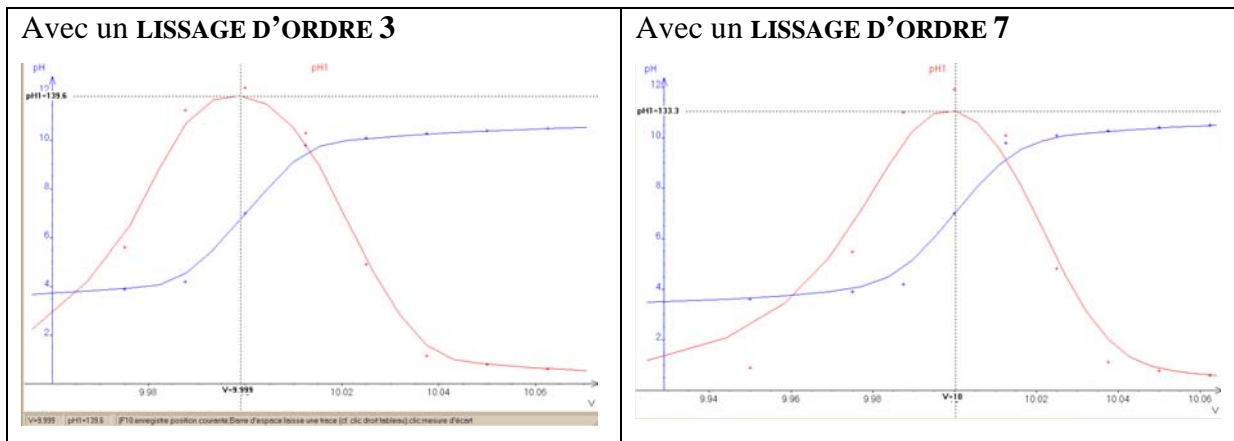


En zoomant sur la zone d'équivalence :





Ce qui donne :

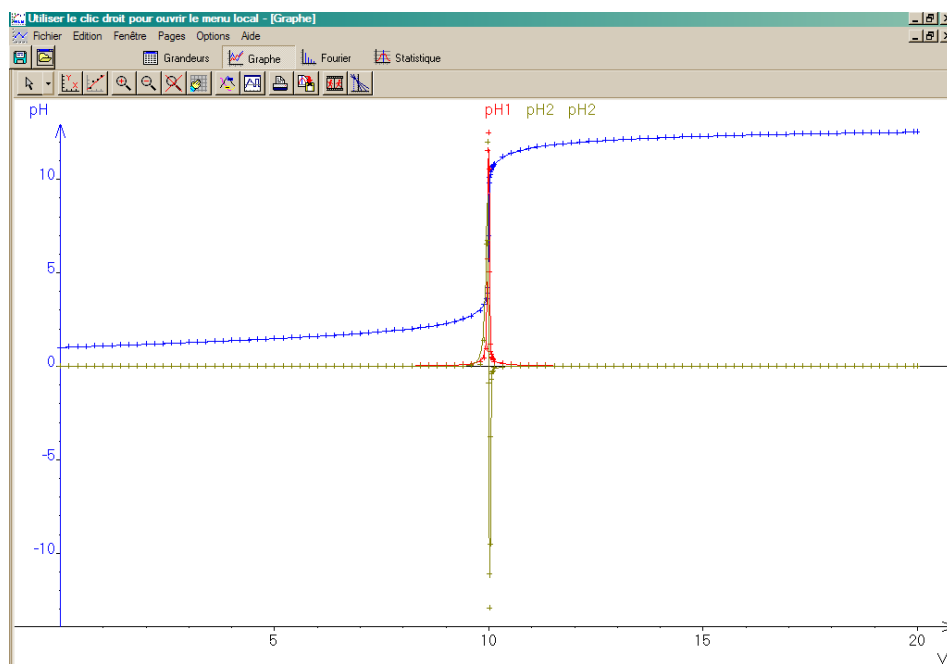


### 3. Tracé de la courbe dérivée seconde

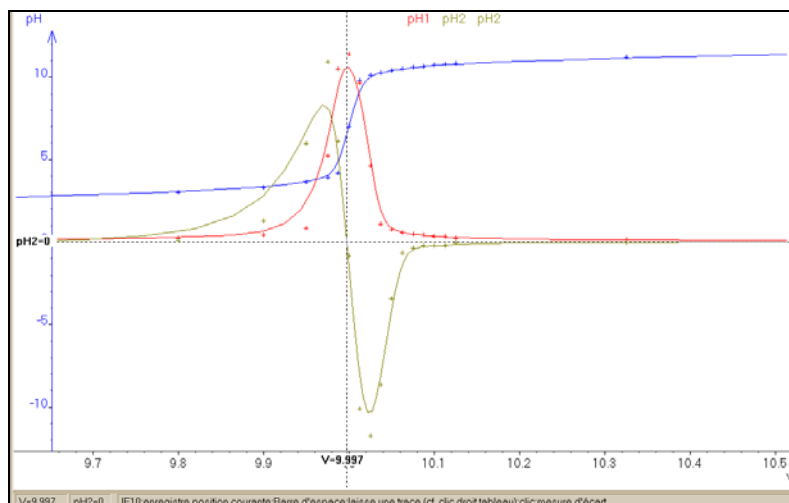
Création de la grandeur dérivée seconde :

pH	pH1
1.72	0.1622
1.753	0.1711
1.788	0.1813
1.826	0.1931
1.865	0.2071
1.908	0.2237
1.954	0.2438
2.005	0.2686
2.061	0.3
2.123	0.3411

En faisant figurer les trois courbes sur le même graphe :



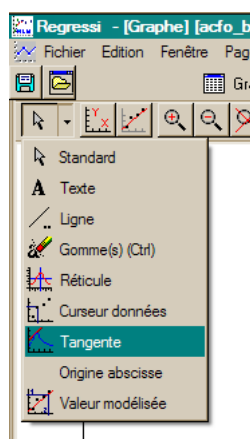
En zoomant :



Appuyer sur la barre d'espace afin de faire figurer sur le graphe les coordonnées du point équivalent.

#### 4. Méthode des tangentes

Activer le mode TANGENTES :

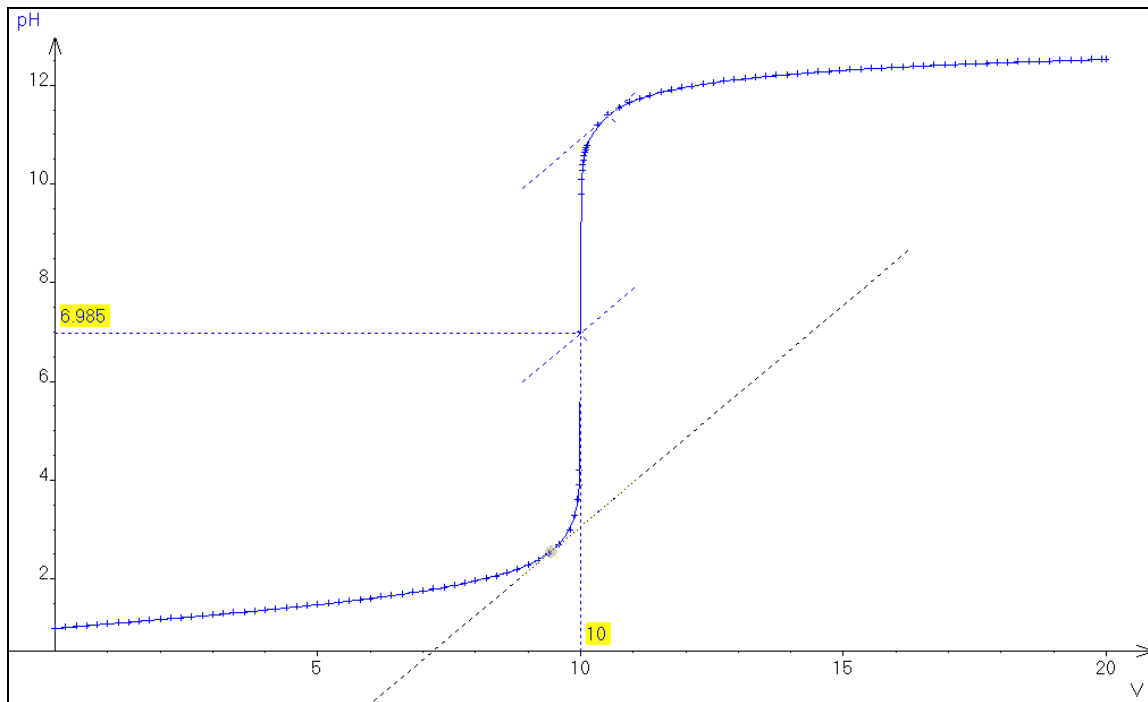


En cliquant sur la « petite lumière », il est possible de paramétrer la méthode des tangentes, dans le cas d'une stœchiométrie différente de 1:1<sup>4</sup>.



<sup>4</sup> Cas peu courant dans les réactions acido-basiques, mais plus courantes dans les réactions redox.

On obtient :



### C. Simulation d'un titrage suivi par conductimétrie avec Dozzaqueux

Revenons au A.5, dans l'onglet **CHOIX DE LA COURBE** de *Dozzaqueux*. Il suffit d'ajouter **GAMMA** en plus du pH pour la grandeur de l'ordonnée :

Saisie de l'expression

Saisissez l'expression de la grandeur. Les noms des variables (V, ..., c) significations indiquées ci-dessous:

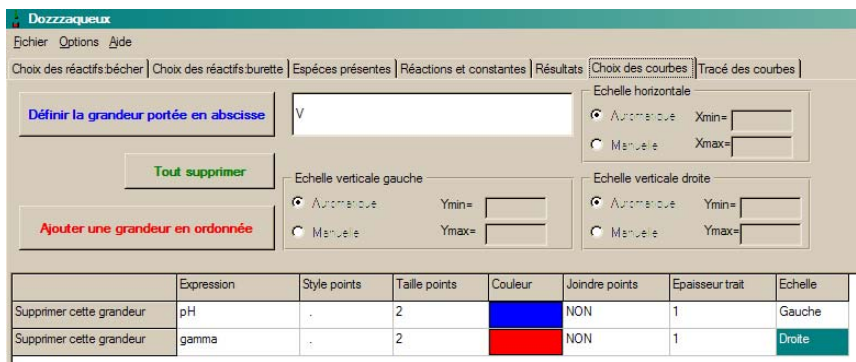
gamma

✓ Valider

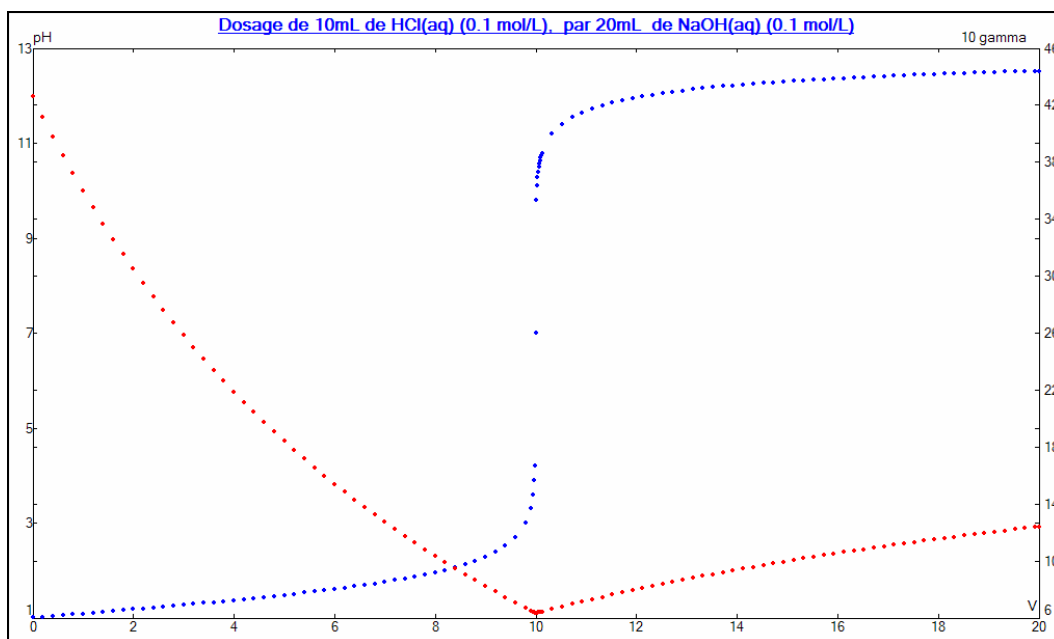
**Variables utilisables:**

V: volume versé (en mL)  
V0: volume de la solution présente initialement dans le bécher (en mL)  
Vtotal: somme des deux précédents (en mL)  
pH:  $-\log(\text{activité}(\text{H}^+))$   
pOH:  $-\log(\text{activité}(\text{OH}^-))$   
c1: concentration en  $\text{Cl}^-$  (en mol/L)  
c2: concentration en  $\text{H}^+$  (en mol/L)  
c3: concentration en  $\text{Na}^+$  (en mol/L)  
c4: concentration en  $\text{HCl}(\text{aq})$  (en mol/L)  
c5: concentration en  $\text{NaOH}(\text{aq})$  (en mol/L)  
c6: concentration en  $\text{OH}^-$  (en mol/L)  
pc1: cologarithme du rapport concentration en  $\text{Cl}^- / (1 \text{ mol/L})$   
pc2: cologarithme du rapport concentration en  $\text{H}^+ / (1 \text{ mol/L})$   
pc3: cologarithme du rapport concentration en  $\text{Na}^+ / (1 \text{ mol/L})$   
pc4: cologarithme du rapport concentration en  $\text{HCl}(\text{aq}) / (1 \text{ mol/L})$   
pc5: cologarithme du rapport concentration en  $\text{NaOH}(\text{aq}) / (1 \text{ mol/L})$   
pc6: cologarithme du rapport concentration en  $\text{OH}^- / (1 \text{ mol/L})$   
gamma: conductivité de la solution en S/m

Soit :

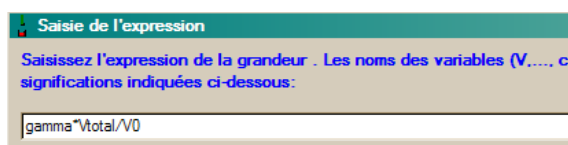


Attention à ce que l'échelle de la conductivité soit sur **DROITE**.

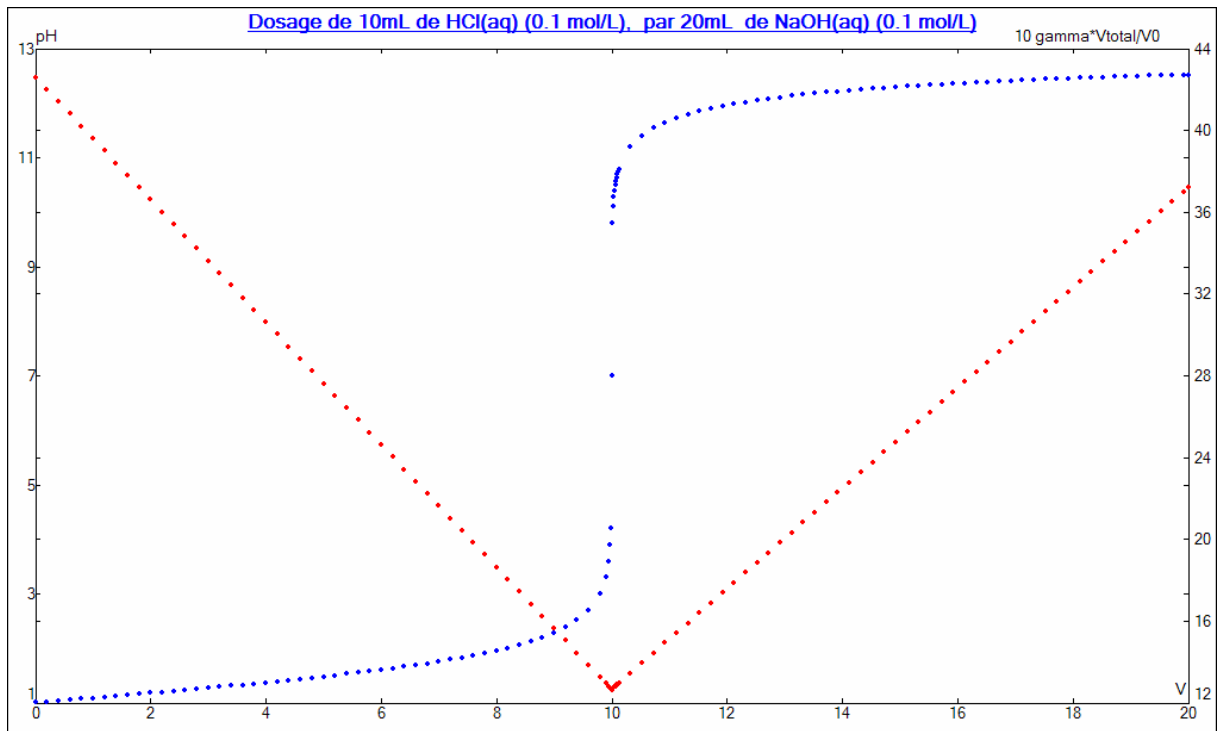


## 1. Linéarisation de la conductivité

De façon à linéariser la conductivité, on peut calculer la conductivité corrigée. Dans l'onglet **CHOIX DE LA COURBE**, cliquer sur **GAMMA** et taper **\*V<sub>TOTAL</sub>/V<sub>0</sub>** :



Ce qui donne :



## 2. Influence de la dilution

Expérimentalement, on ajoute de l'eau pour minimiser l'effet de la dilution. On simule la dilution sur Dozzaqueux en ajoutant, par exemple, 300 mL d'eau :

Recherche de : Nombre de moles ?

Entrez la formule Pour l'espèce H2O, veuillez introduire:

Exemples: BaSC  
mais pas: AGSC

C O

H2O

Type de compara

Exacte

Mêmes atome

Mêmes atome

Mêmes atome

la quantité de matière:  mol

OU BIEN

la masse:  g

OU BIEN

la quantité de matière par L de solution:  mol/L

OU BIEN

la masse par L de solution:  g/L

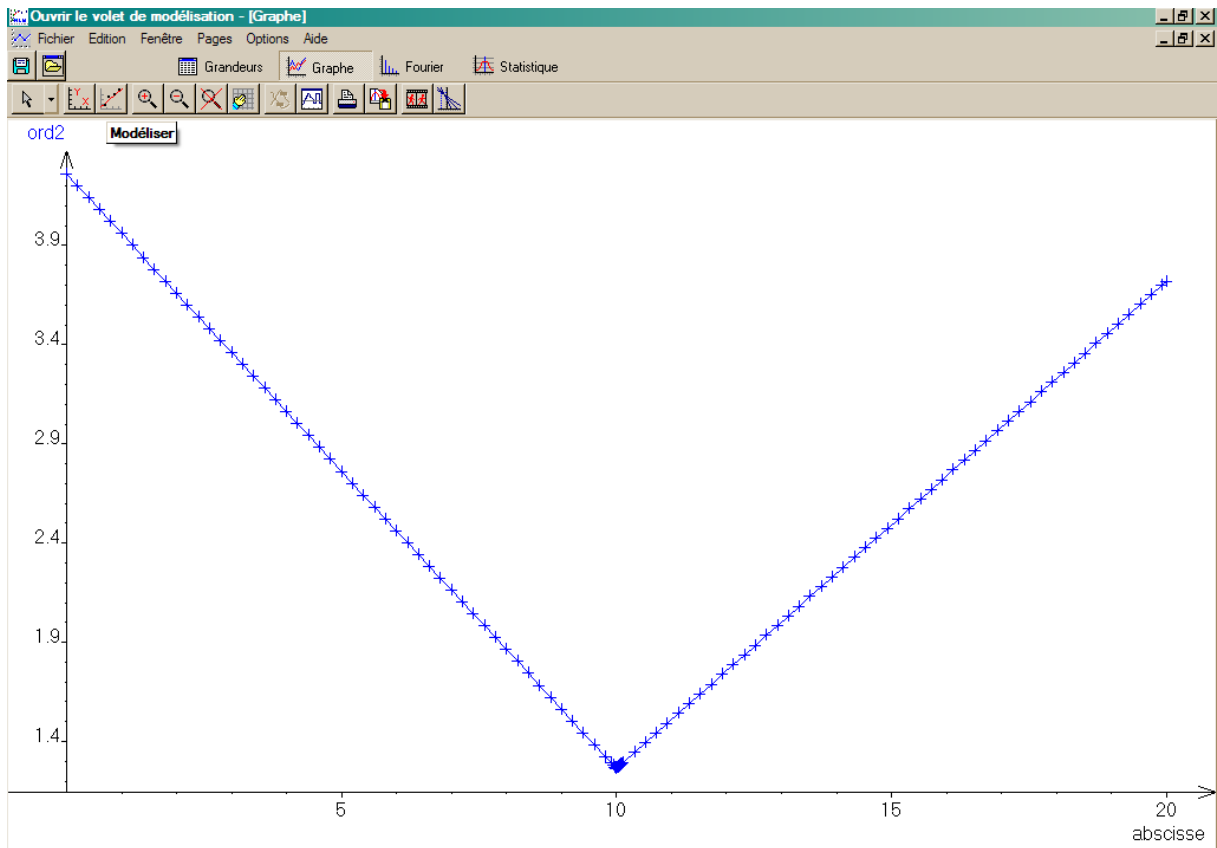
OK

Identifiant	Synonyme	Formule brute	M (g/mol)
H2O			18.015

OK

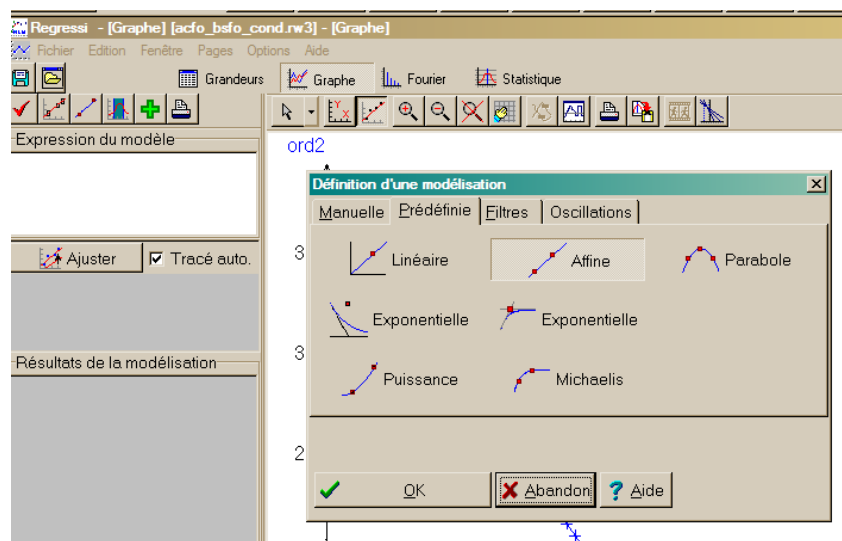
### 3. Export dans Regressi

On observe une courbe dont l'allure, idéalisée, est assez éloignée des courbes expérimentales :

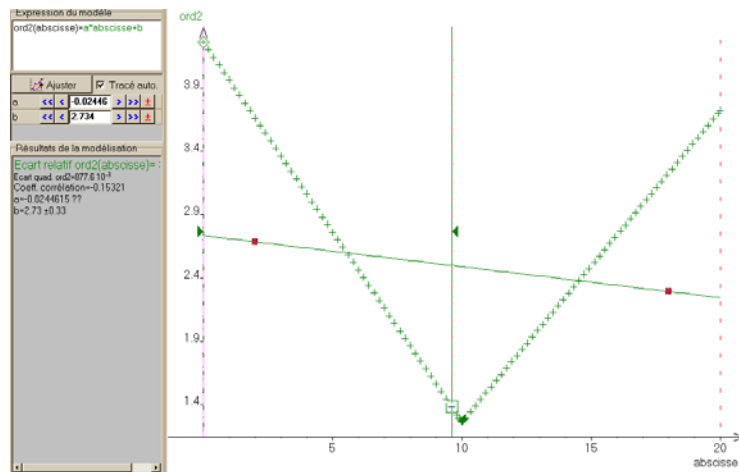


Afin de déterminer le volume d'équivalence, on réalise deux régressions linéaires.

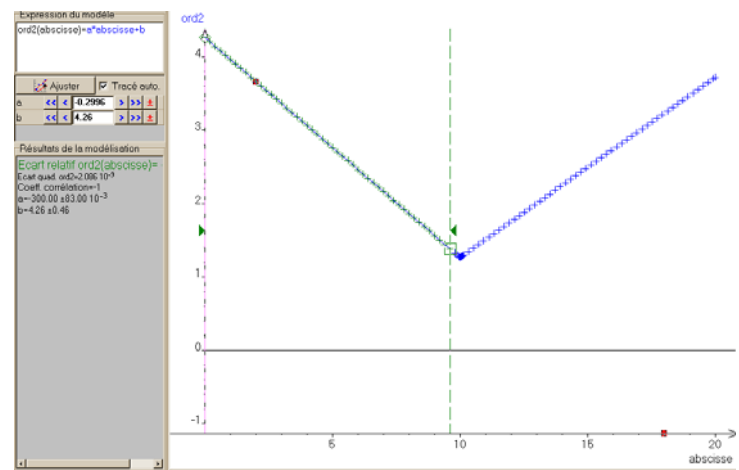
#### Première régression.



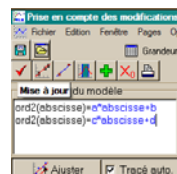
Soit :



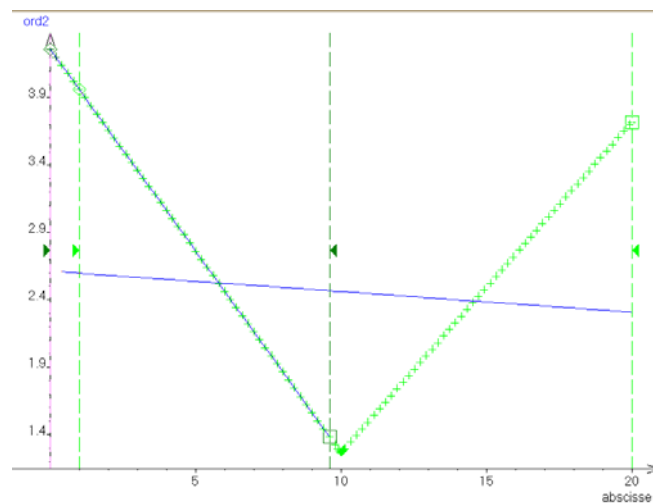
On repositionne les bornes pour  $V < V_E$  :



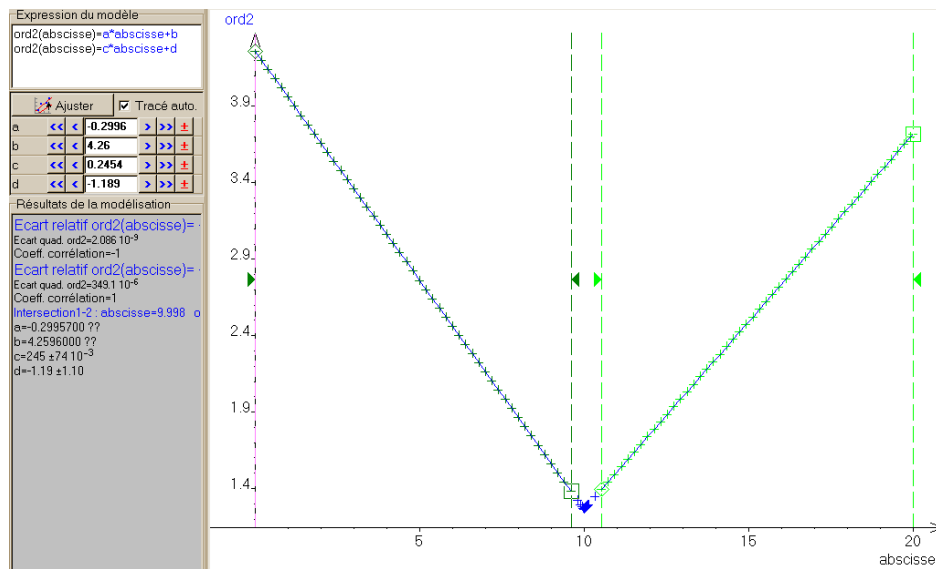
On crée une deuxième régression linéaire :



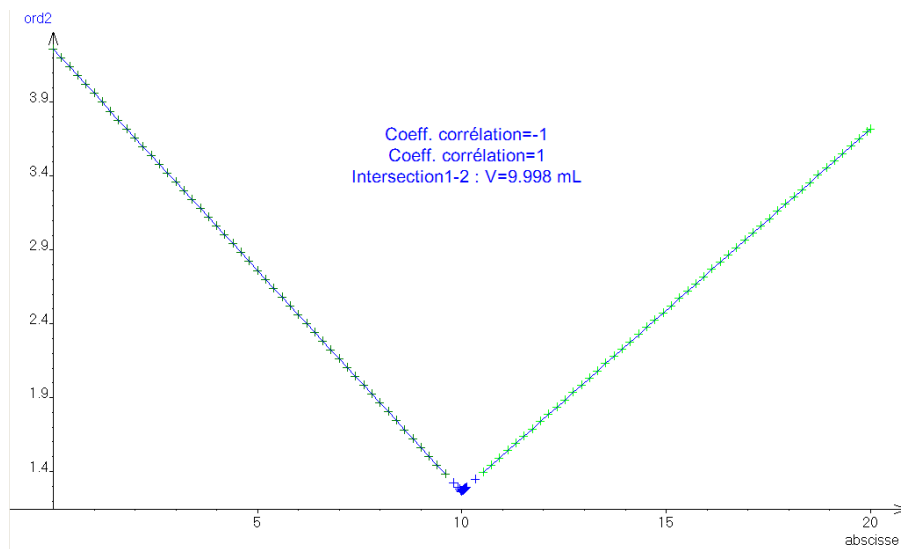
On repositionne les bornes pour  $V > V_E$  :



Dans la fenêtre **RESULTATS** figurent les coordonnées du point d'intersection :



Au final :

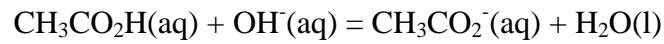




## D. Titration acid faible / base forte

### 1. Simulation du titrage

La réaction étudiée est celle de l'hydroxyde de sodium sur l'acide éthanóique :



Une prise d'essai de 10 mL d'une solution d'acide éthanóique à 100 mmol.L<sup>-1</sup> est titrée par une solution d'hydroxyde de sodium à 100 mmol.L<sup>-1</sup>.

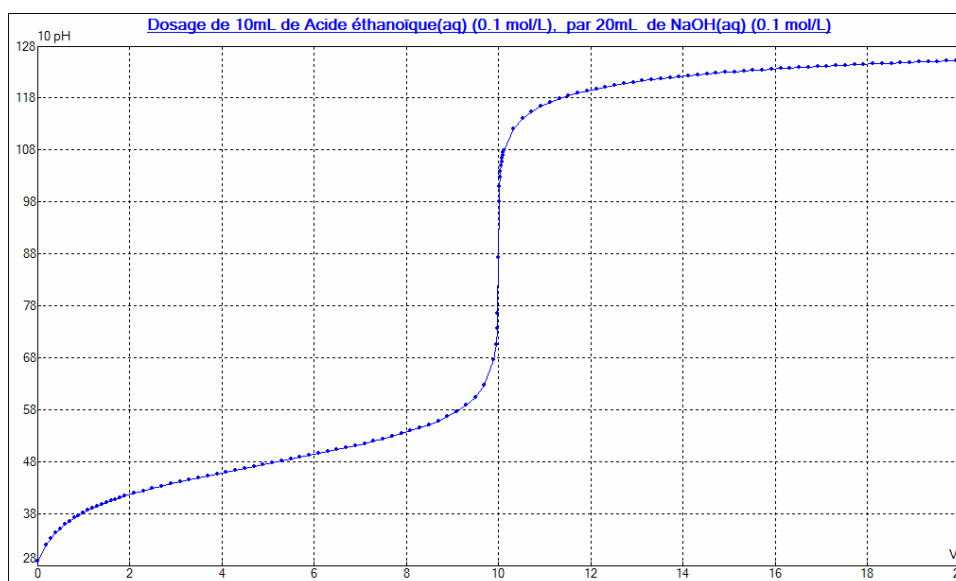
#### Paramétrage du Bêcher.

Identifiant	Synonyme	Formule brute	M (g/mol)
Acide éthanóique(aq)	Acide acétique	CH3COOH	60.052

#### Choix des réactions.

<input checked="" type="checkbox"/> H2O	<input checked="" type="checkbox"/> Na[+]	<input checked="" type="checkbox"/> OH[-]	<input checked="" type="checkbox"/> Ethanoate(aq)	<input type="checkbox"/> NaCH3COO(aq)
<input checked="" type="checkbox"/> H[+]	<input checked="" type="checkbox"/> NaOH(aq)	<input checked="" type="checkbox"/> Acide éthanóique(aq)	<input type="checkbox"/> Na(CH3COO)2[-]	<input type="checkbox"/> Na2O(s)

#### Courbe générée.

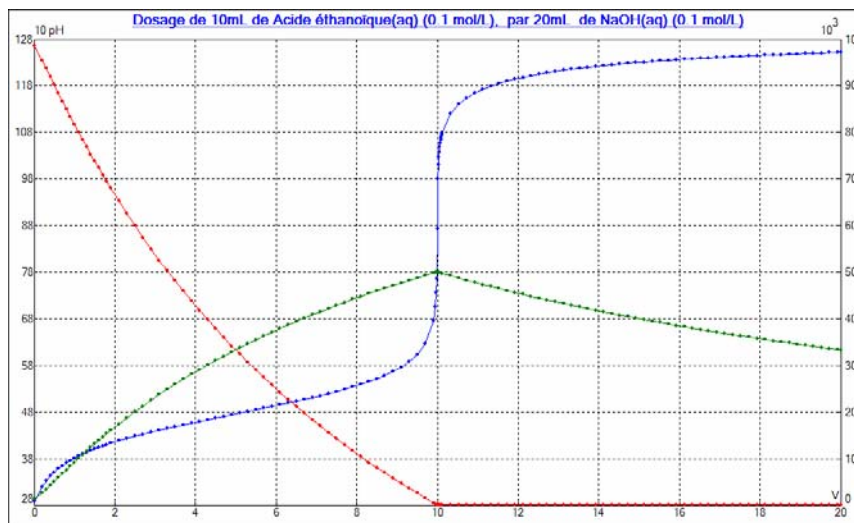


## 2. Evolution des concentrations des espèces

### Evolution des concentrations de l'acide éthanóïque et de l'ion éthanóate.

	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	pH	.	2	Blue	OUI	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	[Acide éthanóïque(aq)]	.	2	Red	OUI	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Ethanoate(aq)]	.	2	Green	OUI	1	Droite

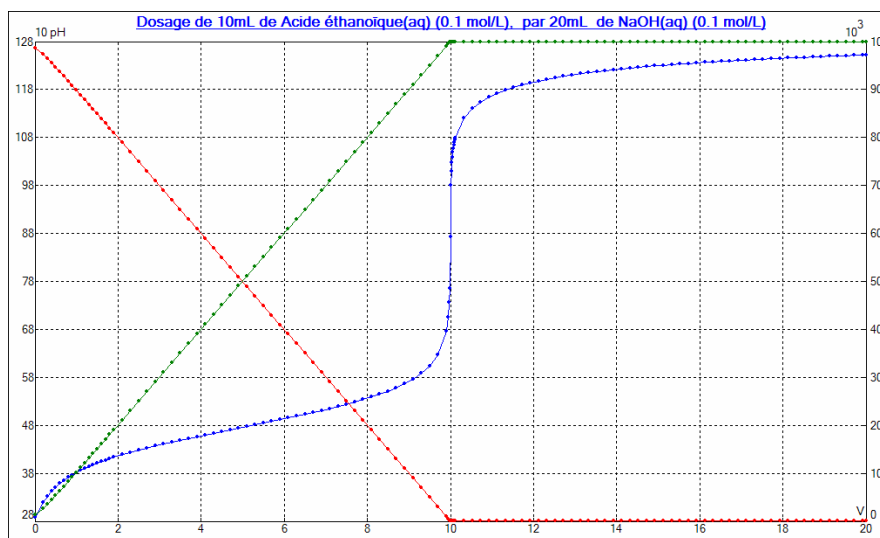
### Représentation.



### Correction de la dilution.

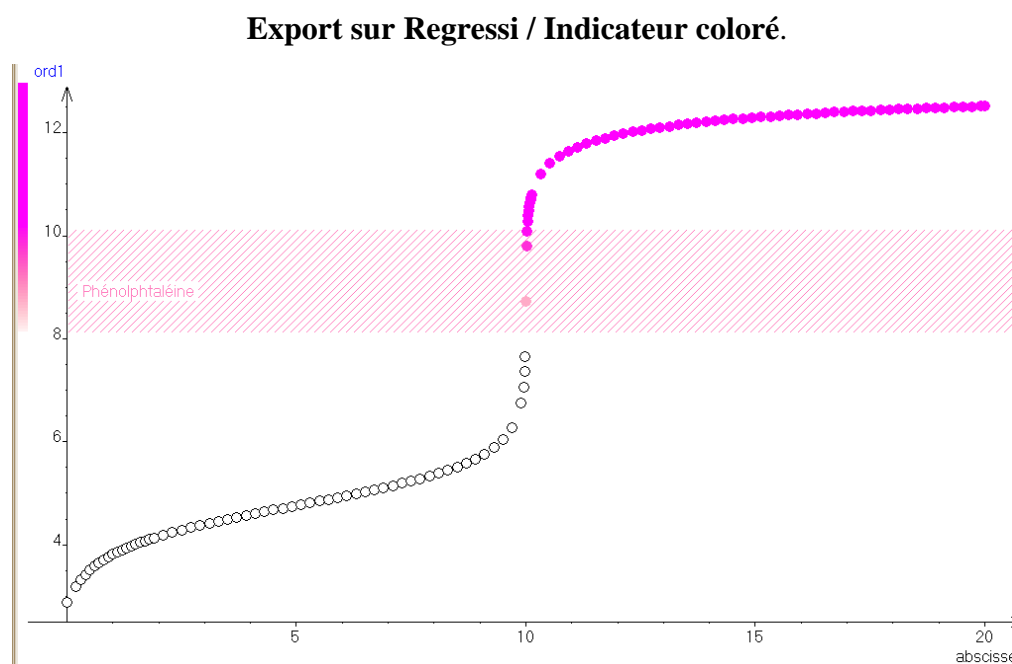
	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	pH	.	2	Blue	OUI	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	[Acide éthanóïque(aq)]*Vtotal/V0	.	2	Red	OUI	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Ethanoate(aq)]*Vtotal/V0	.	2	Green	OUI	1	Droite

### Courbe générée.



On vérifie qu'au point de concours des courbes d'évolution des concentrations de l'acide et de sa base conjuguée :  $\text{pH} = \text{pK}_A$ .

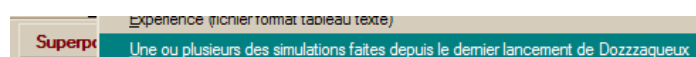
### 3. Export sur Regressi. Choix de l'indicateur coloré



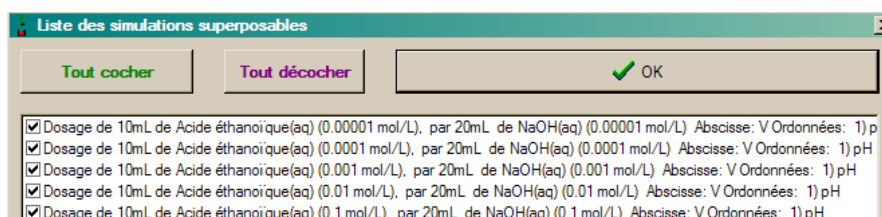
On choisit ici l'indicateur le plus adapté changeant de couleur une fois l'équivalence atteinte : ici la phénolphthaléine.

### 4. Influence de la concentration sur l'allure des courbes de titrages

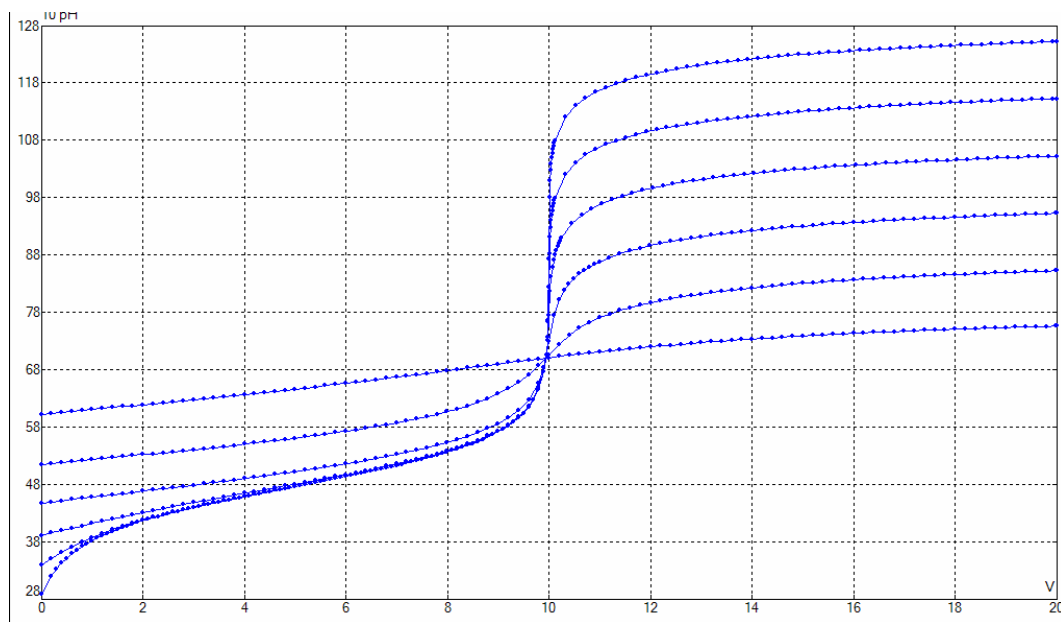
Le faisceau de courbes est créé par superposition. Fermer et relancer Dozzaqueux. Réaliser la simulation du titrage  $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H} / \text{NaOH}$  à  $10^{-1}$ , puis  $10^{-2}$ ,  $10^{-3}$ ,  $10^{-4}$ ,  $10^{-5}$  et  $10^{-6}$  mol.L<sup>-1</sup>, puis, sur l'onglet **TRACE DE COURBES**, sélectionner **SUPERPOSER** puis **UNE OU PLUSIEURS DES ... DOZZAQUEUX** :



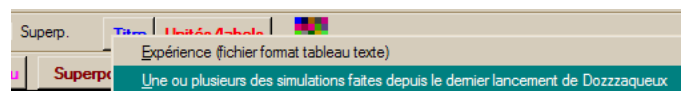
Cocher les courbes à superposer :



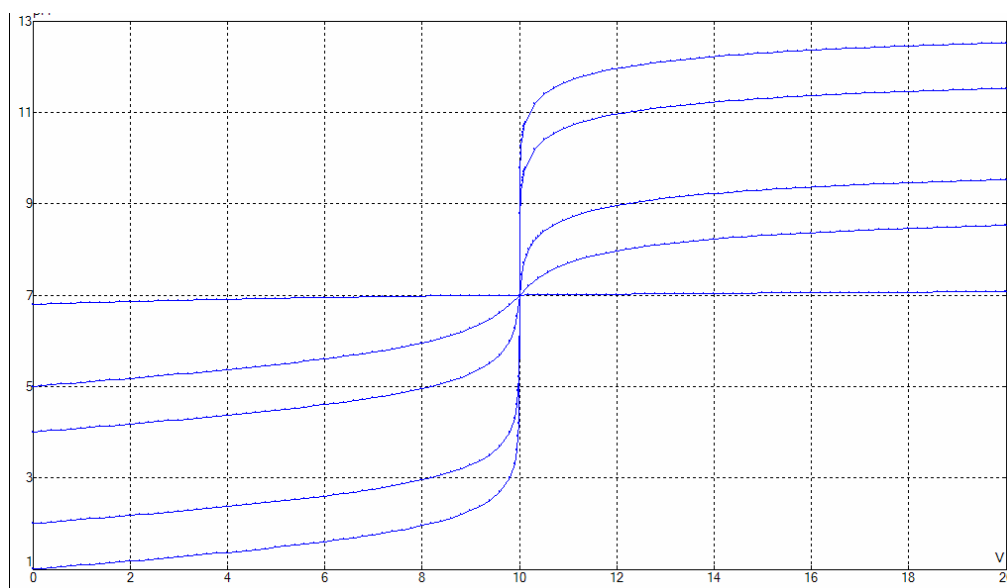
### Faisceau généré.



A titre de comparaison, on peut analyser l'influence de la concentration sur l'allure des courbes de titrage pH-métriques d'un dosage acide fort / base forte. Fermer et relancer Dozzaqueux. Réaliser la simulation du titrage HCl / NaOH à  $10^{-1}$ , puis  $10^{-2}$ ,  $10^{-4}$ ,  $10^{-5}$  et  $10^{-7}$  mol.L<sup>-1</sup>, puis, sur l'onglet **TRACE DE COURBES**, sélectionner **SUPERPOSER** puis **UNE OU PLUSIEURS DES ... DOZZAQUEUX** :



Le faisceau généré est :



Il met en évidence que la dilution ne modifie pas la position ( $V$ ,  $pH$ ) de l'équivalence, mais modifie considérablement l'intensité du saut de  $pH$ .

## 5. Influence du $pK_A$ sur l'allure des courbes de titrages

On génère le faisceau de courbes à l'aide du bouton **FAISCEAU** sur l'onglet **TRACE DE COURBES**.

Faisceau de courbes

Grandeur à faire varier pour obtenir le faisceau: Nombre de valeurs: 8

Volume bécher (mL)  
Volume maximal burette (mL)  
[Bécher] Acide éthanique(aq) (nombre de moles pour 1L)  
[Burette] NaOH(aq) (nombre de moles pour 1L)  
logK pour H2O = H[+] + OH[ ]  
logK pour H2O + Na[+] = H[+] + NaOH(aq)  
logK pour Acide éthanique(aq) = H[+] + Ethanoate(aq)

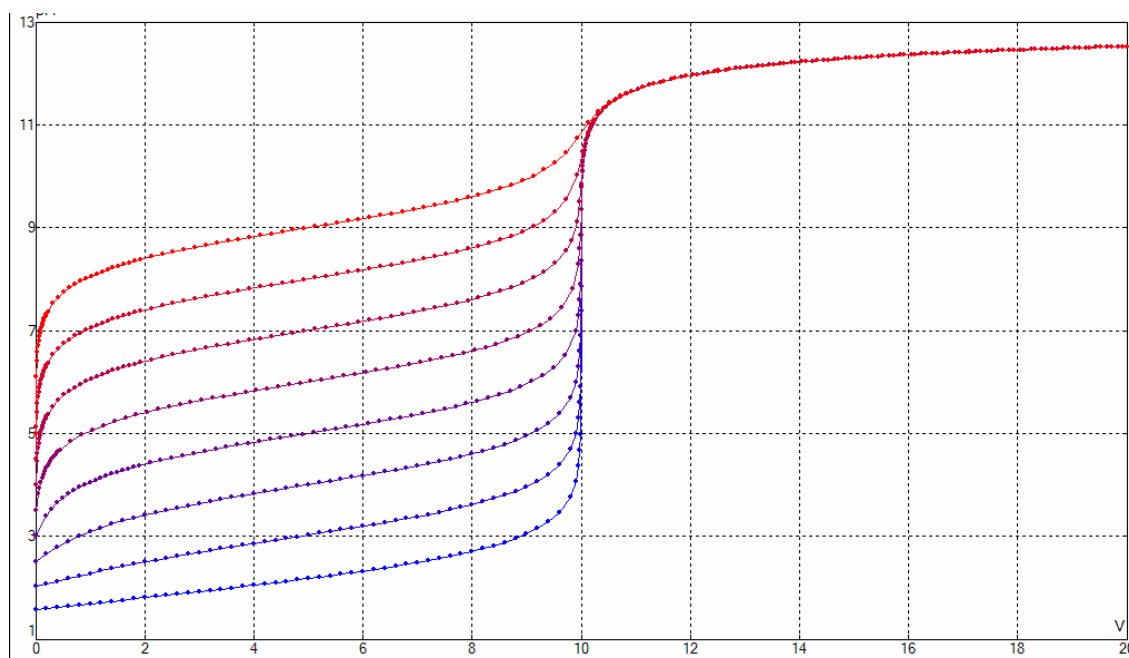
Type de suite de valeurs

Arithmétique Tère valeur: -2  
Incrément: -1

Géométrique Tère valeur:   
Pas:   
OK

Annuler

Les couleurs en dégradé des courbes tendront vers:  



## 6. Titrage base faible / acide fort

On étudie ici le titrage d'une solution d'ammoniac par une solution d'acide chlorhydrique.

### Contenu du bécher

Recherche dans la base de données

Nombre de moles ?

Entrez la formule brute

Exemples: BaSO4

mais pas: AGSO4 (fr)

C O H

NH3

Type de comparaison

Exacte

Mêmes atomes, en

Mêmes atomes, en

Mêmes atomes, en

Pour l'espèce NH3(aq), veuillez introduire:

la quantité de matière:  mol

OU BIEN

la masse:  g

OU BIEN

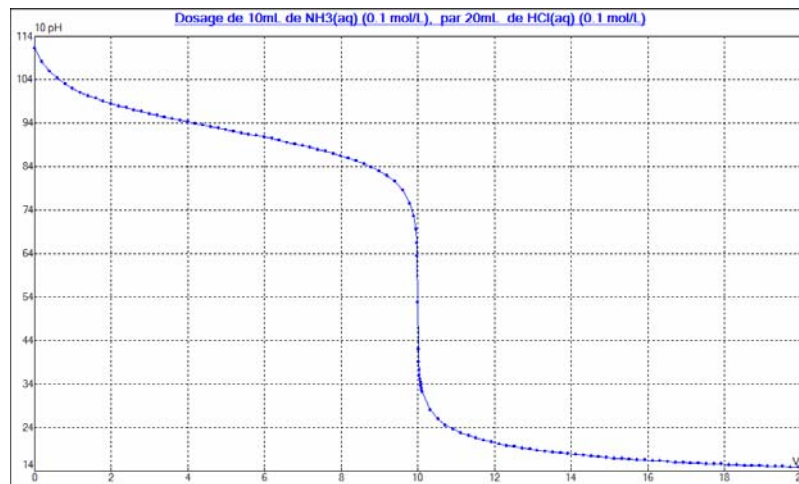
la quantité de matière par L de solution:  mol/L

OU BIEN

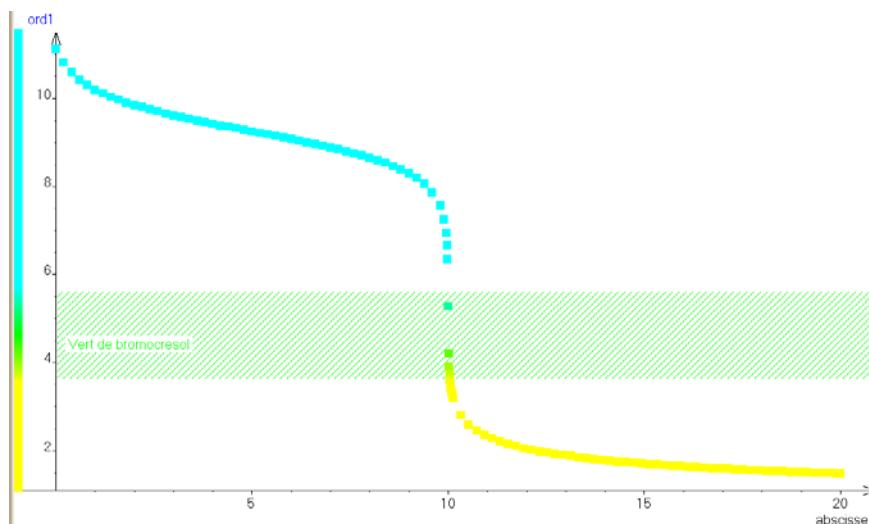
la masse par L de solution:  g/L

Identifiant	Synonyme	Formule brute	M (g/mol)
NH3(aq)	ammoniac		17.03

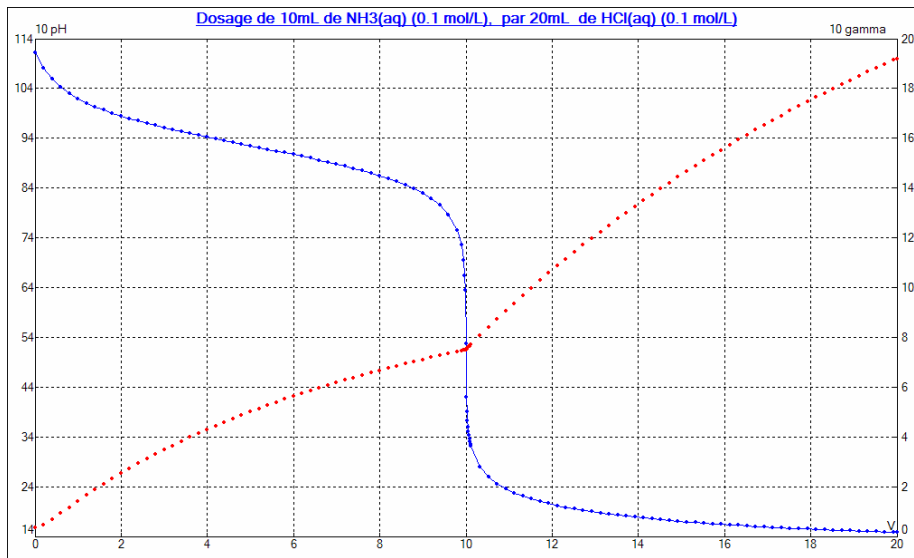
### Courbe générée



### Export vers Regressi

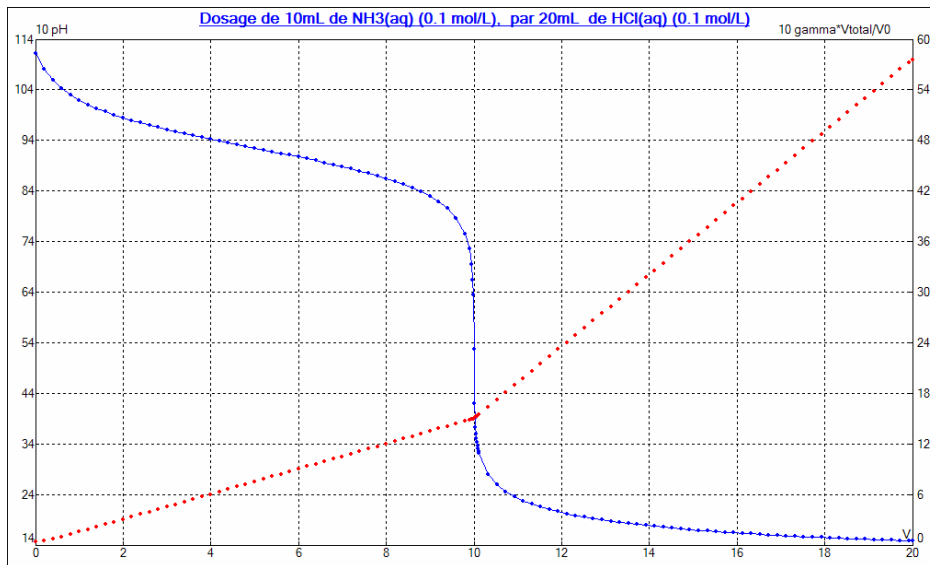


## Courbes pH-métriques et conductimétriques



### Conductivité corrigée

	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	pH	.	2	OUI	1	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	$\gamma_{\text{total}} \cdot V_{\text{total}} / V_0$	.	2	NON	1	1	Droite



## 7. Influence du $pK_A$ des bases faibles sur la nature des courbes obtenues

Copier Point particulier Faisceau Superposer

Faisceau de courbes

Grandeur à faire varier pour obtenir le faisceau: Nombre de valeurs: 8

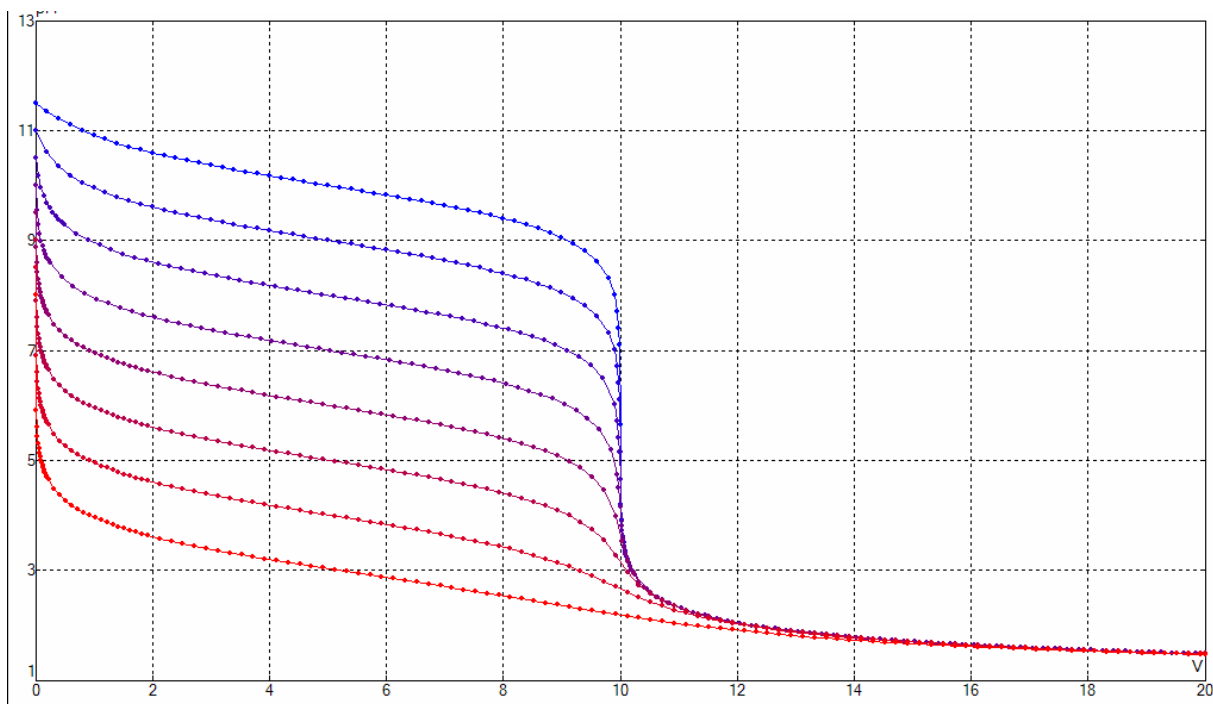
Volume béccher (mL)  
 Volume maximal burette (mL)  
 [Béccher] NH<sub>3</sub>(aq) (nombre de moles pour 1L)  
 [Burette] HCl(aq) (nombre de moles pour 1L)  
 logk pour Cl<sup>-</sup> + H<sup>+</sup> = HCl(aq)  
 logk pour H<sup>+</sup> + NH<sub>3</sub>(aq) = NH<sub>4</sub><sup>+</sup>  
 logk pour H<sub>2</sub>O = H<sup>+</sup> + OH<sup>-</sup>

Type de suite de valeurs

Arithmétique Tère valeur: 10  
 Incrément: -1

Géométrique Tère valeur:   
 Pas:   
 OK  
 Annuler

Les couleurs en dégradé des courbes tendront vers: ■



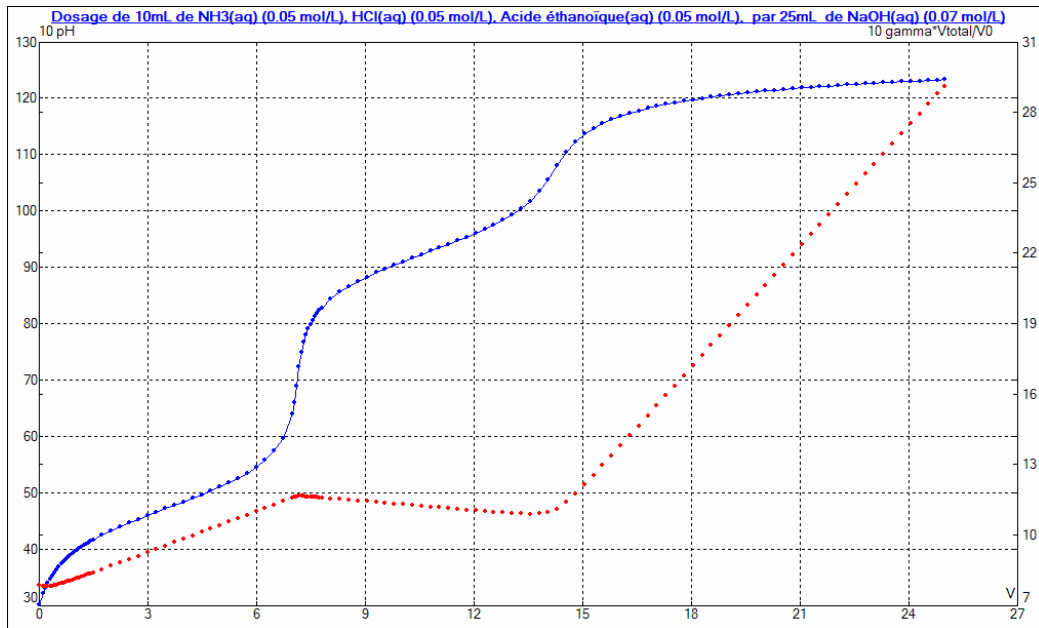
$$pK_{Ai} = \{10, 9, 8, 7, 6, 5, 4, 3\}$$



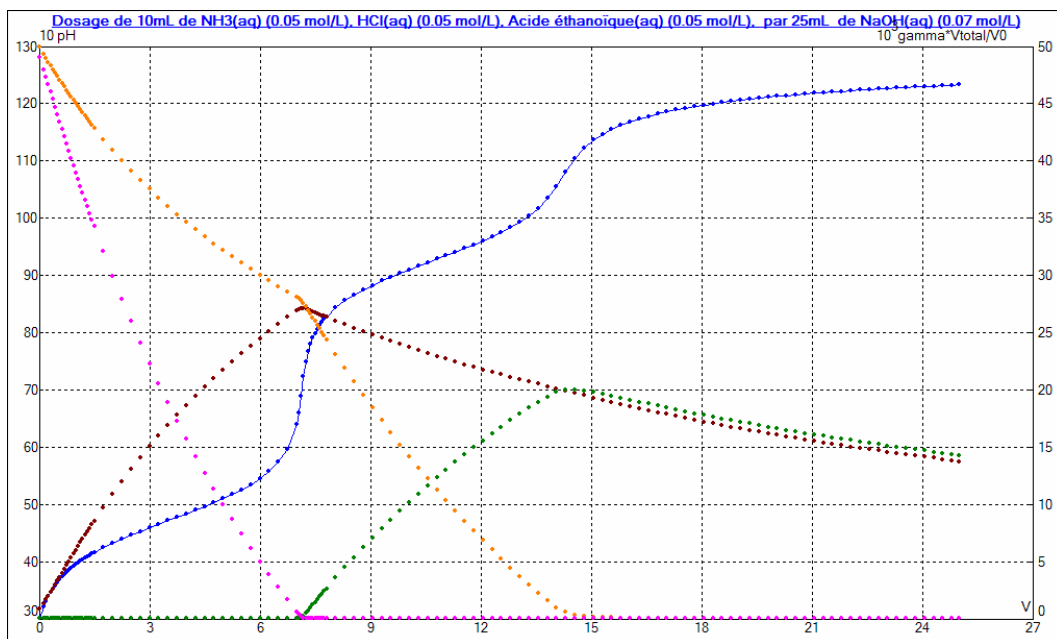
## E. Etude d'un mélange de chlorure d'ammonium et d'acide acétique

### 1. Simulations

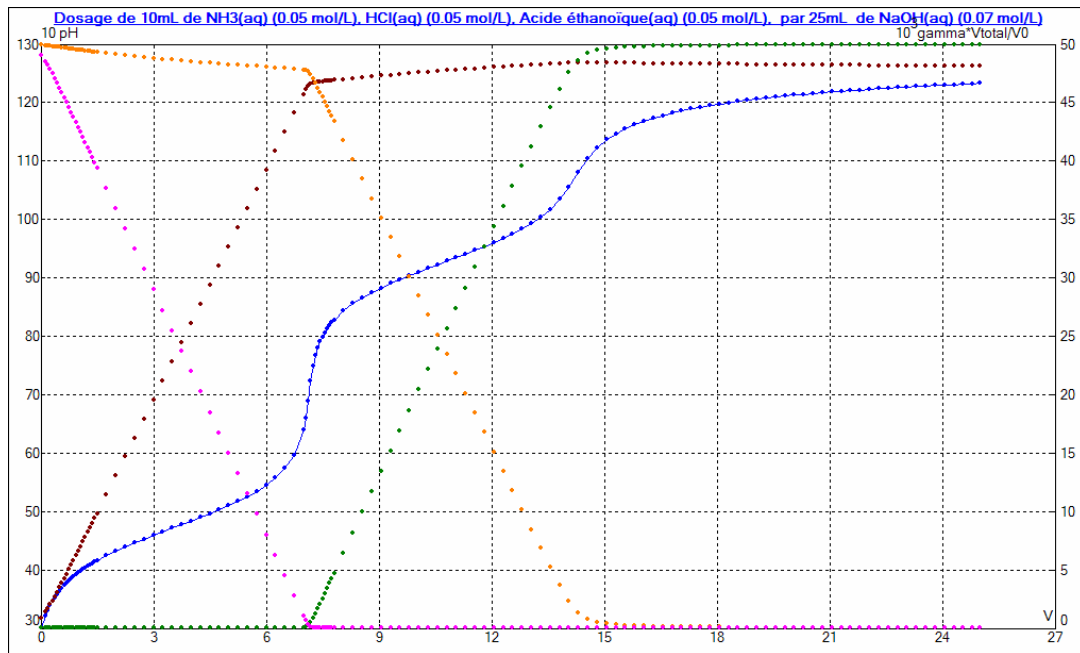
Sur Dozzaqueux, on simule les courbes de titrages pH-métriques et conductimétriques de 10 mL d'une solution à  $50 \text{ mmol.L}^{-1}$  en chlorure d'ammonium et  $50 \text{ mmol.L}^{-1}$  en acide éthanoïque par une solution de soude à  $70 \text{ mmol.L}^{-1}$ .



### Avec évolution des concentrations, sans correction de volume

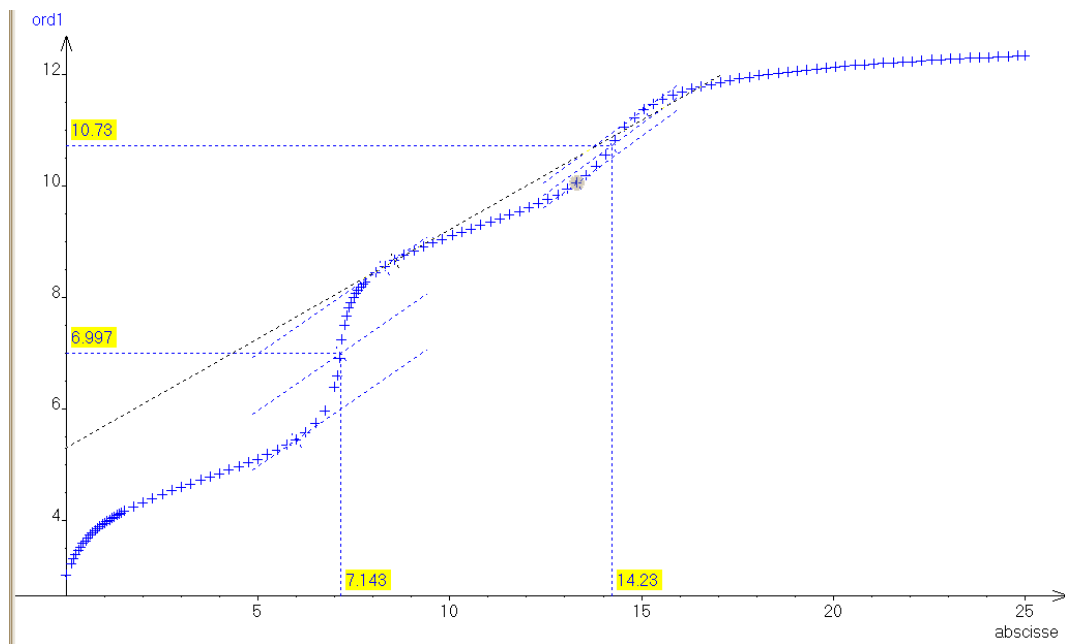


## Avec évolution des concentrations, avec correction de volume

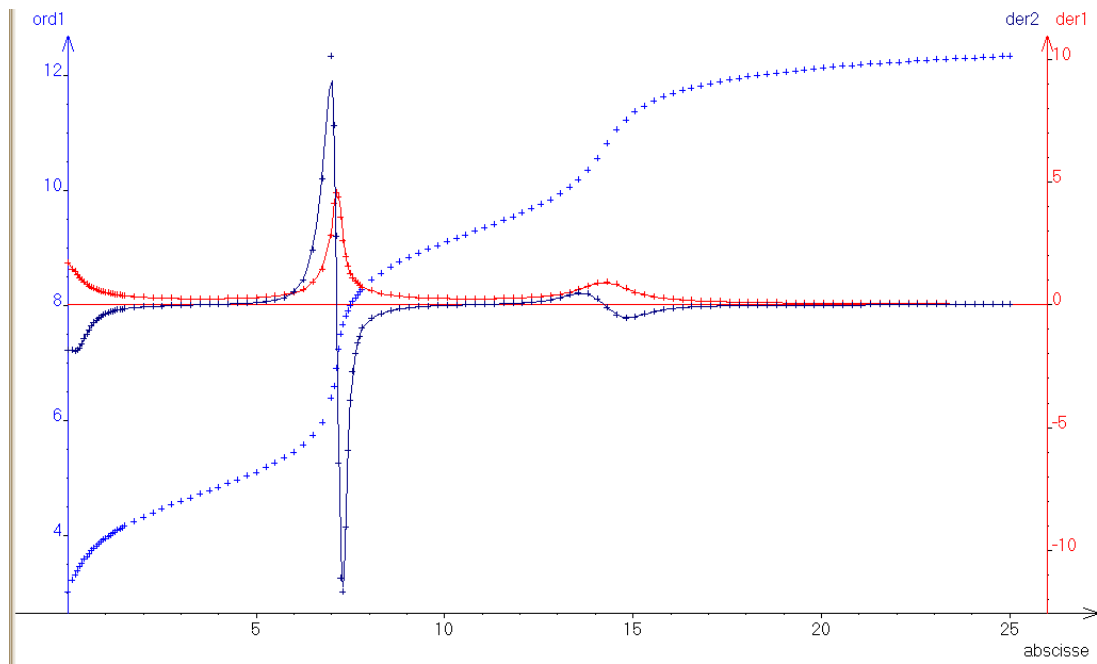


## 2. Analyses sur Regressi

### Méthode des tangentes



## Dérivées premières et secondes



## Analyse du titrage conductimétrique

