Logiciel Dozzzaqueux - Découverte

Plan de travail de la séance

Le logiciel	2
Prise en main : dosage acide fort / base forte	2
Remplir le bécher	2
Remplir la burette	3
Valider les constantes	3
Choix des grandeurs à faire apparaitre	4
Tracé de la courbe	4
Superposition / Faisceau de courbes	5
Exercices : autres dosages	6
Dosage d'acide faibles ou de bases faibles	6
Dosage de polyacides et de polybases	6
Dosage de mélanges d'acides et de mélanges de bases	6
Dosages redox suivis par potentiométrie	6

Lors de cette séance, un document word devra être réalisé : pour chaque courbe tracée (pour chaque simulation réalisée), il faudra copier le graphe, l'insérer dans le document avec un commentaire (interprétation, influence de tel ou tel paramètre, etc.) Ce document sera nommé Dozzzaqueux_Nom_Prenom.doc.

Le logiciel

Dozzzaqueux est un logiciel de simulation de dosage (acide/base et redox), permettant de prédire l'allure de courbes de dosage (pH = f(V), $\sigma = f(V)$, $\Delta E = f(V)$), ainsi que l'évolution des concentrations des différentes espèces présentes durant le dosage.

Le logiciel est téléchargeable gratuitement à l'adresse suivante : <u>http://jeanmarie.biansan.free.fr/dozzzaqueux.html</u>

Ce logiciel est très intuitif : il suffit de renseigner les espèces présentes dans le bécher et dans la burette, de sélectionner les constantes à utiliser et les calculs se font ensuite tous seuls.

Prise en main : dosage acide fort / base forte

Dans un premier temps, on souhaite simuler le dosage de 10 mL d'une solution d'acide chlorhydrique à $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$ par une solution de soude à $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$.

Remplir le bécher

Rechercher les ions H+, cliquer dessus et indiquer la concentration souhaitée.

Bécher Vider		Base de	e réactifs (clic en	tête de	e colonne
Volume initial= 10 mL	Inorganiques	Solides Organiques				
Température= 298 K	Cations simpl	es Anions simples Acides et	bases Complexe	es et divers	Ions	Atomes et mo
Réactifs choisis:	Identifiant	Conductivité (0,1 mS.m²/mol)	Synonyme	Formule	M (g/mol)	
v10 /10 Dilution	H[+]	349.65			1.008	
	OH[-]	198	ion hydroxyde		17.007	
Identifiant Concentration (mol/L)	AsO4[3-]	?			138.919	
	B(OH)3(aq)	0			61.833	
I	B2O(OH)5[-]	?			122.658	
	ReOH[+1	2			26.019	

Indiquer la concentration voulue, en mol.L⁻¹. Valider.

Nombre de moles ?			
Pour l'espéce H[+], veuillez introduire: au choix			
concentration (molaire):			
🔘 la quantité de matière:	mol/L	ok ∢	🗙 Annuler
🔘 la masse:			
© concentration massique:			

Lorsque l'on clique sur « Valider et passer à la burette », un message s'affiche alors :

✓ Valider et passer à la burette >>>>>	
L Electroneutralité	
La charge électrique totale est non nulle. Vous pouvez: au choix:	
💿 ajouter ou enlever des espèces	
passer outre (attention: calculs non garantis !!)	
neutraliser la charge automatiquement en ajoutant des CI[-]	
✓ <u>O</u> K	

Sélectionner « Neutraliser la charge avec Cl⁻», puis OK.

Remarque : il est possible d'ajouter un volume d'eau (correspondant par exemple au volume ajouté pour faire tremper les électrodes), en cliquant sur « Dilution ».

Remplir la burette

Le principe est le même.

Choisir ici les ions hydroxyde, à la concentration de $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$. Laisser le volume max de la chute de burette à 25 mL.

Lors de la validation, compléter les charges avec les ions Na⁺.

Valider les constantes

Un tableau apparait ensuite avec les espèces qui peuvent réagir :



En général, il y a plus d'espèces que ce dont on a besoin. Cliquer sur « Tout décocher », il reste :

✓ CI[-]
✓ H2O
✓ H[+]
✓ Na[+]
⊂ HCI(aq)
⊂ NaCI(aq)
⊂ NaOH(aq)
✓ OH[-]
⊂ Halite(s)
⊂ Na2O(s)

Il faut ensuite valider deux fois :

- > la première valide la valeur des constantes thermodynamiques utilisées pour les calculs,
- le second valide les pages de résultats de calcul (dans les options, il est possible de choisir le nombre de points de calculs).

Choix des grandeurs à faire apparaitre

La page suivante permet de choisir les grandeurs à faire apparaitre en abscisses et en ordonnées :

Définir la grandeur portée en abscisse	V	
Tout supprimer	Echelle verticale gauche	Ymin=
Ajouter une grandeur en ordonnée	C Manuelle	Ymax=

Choisir V pour la grandeur à faire apparaitre en abscisse.

Ajouter pH, pour faire pH = f(V)

Ajouter une grar	ndeur en or	donnée		lanuelle	75	Ymax	=
	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	pН		2		NON	1	Gauche

Tracé de la courbe

Valider et tracer la courbe. Vous pouvez relier les points ou non

Tester les différentes options proposées (certaines sont très utiles : unité, label, légende...)

Changer le titre

Essayer de faire apparaitre les indicateurs colorés

Il est possible d'exporter les points calculés :

- Exporter le résultat (fichier csv) : enregistrer sous le nom : HCl_NaOH_XX (avec XX : volume d'eau)

- Il aussi possible d'exporter en rw3, de manière à pouvoir traiter ensuite le fichier avec Regressi.

Il est possible d'enregistrer le graphe (en format image), ou encore de la copier (grâce au bouton copier) pour pouvoir l'insérer dans un document word par exemple.

Superposition / Faisceau de courbes

Retourner dans le menu « bécher », remettre 10 mL à $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$ et changer le volume d'eau (le faire 3 fois avec des volumes compris entre 20 150 mL d'eau).

Une fois les 5 courbes visualisées, cliquer sur « Superposer »:

nités/labels	Titre							
Superposer		Expérience (ficł	ier format tal	bleau texte o	ou Regressi)			
· · ·		Une ou plusieu	rs des simulat	ions faites d	lepuis le de	rnier lanceme	ent de Dozzzaqu	Jeux
I[+] (0.0090	9090	<u> </u>	moi/L), C	.1[-] (0.00	1909090	90909090	19 moi/L),	par zomL
		1			·			

Cocher toutes les courbes, puis OK.

Ne garder qu'une courbe (enlever la superposition), pour étudier l'influence de la concentration en HCl sur la courbe de dosage :

cliquer sur « Faisceau », changer la valeur de la concentration en ions H⁺, avec les éléments suivants

Faisceau de courbes		
Grandeur à faire varier pour o	obtenir le faisceau: 5	
Volume bécher (mL) Volume maximal burette (mL)		
[Bécher] H[+] (nombre de mole	s pour 1L)	
[Becher] CI[-] (nombre de mole [Burette] OH[-] (nombre de mol [Burette] Na[+] (nombre de mol logk pour H2O = H[+] + OH[-]	s pour 1L) les pour 1L) les pour 1L)	
Type de suite de valeurs	1ère valeur: 0.06	
Arithmétique	Incrément: 0.01	Sec. Sec. Sec. Sec. Sec. Sec. Sec. Sec.
	1ère valeur:	
Géométrique	Pas:	🔀 Annuler

Cliquer sur OK

En cliquant à nouveau sur « faisceau », tout disparait.

Faire apparaitre les concentrations en contre ions : on peut voir l'effet de la dilution lors du dosage. Pour contrecarrer cet effet de dilution, on peut faire apparaitre la concentration corrigée :

tracer
$$C_{CI^{-}} = f(V)$$
 et $C_{CI^{-}} x \frac{V_{total}}{V_0} = f(V)$. Comparer.

Exercices : autres dosages

Dosage d'acide faibles ou de bases faibles

Réaliser la simulation d'une solution d'acide faible (au choix) par une base forte. Regarder si l'on retrouve bien le pK_A du couple. Faire apparaître les pourcentages des différentes espèces du couple de l'acide dosé.

Ces dosages peuvent également être suivis par conductimétrie :

- $\succ \quad \text{tracer la courbe gamma} = f(V)$
- $\succ \ \ \ \ \ tracer \ la \ courbe \ \ gamma \ x \ \frac{V_{total}}{V_0} = f(V) \, .$

Faire la même chose avec le dosage d'une base faible par un acide fort.

Dosage de polyacides et de polybases

Réaliser la simulation de dosage d'une polybase par un acide fort, puis d'un polyacide par une base forte. A chaque fois, faire apparaitre les pourcentages des différentes espèces acido-basiques mises en jeu.

Dosage de mélanges d'acides et de mélanges de bases

Réaliser la simulation de deux dosages d'un mélange d'acides par une base forte :

- A dans le premier cas, choisir un $\Delta pK_A > 4$ entre les acides dosés,
- → dans le second cas, choisir un $\Delta pK_A < 4$.

Tracer à chaque fois la courbe pH = f(V), ainsi que les courbes des pourcentages des différentes espèces mises en jeu. Mettre en évidence le caractère simultané ou successif des réactions de dosage.

Il sera également possible de tester la « limite », avec des DpK_A de l'ordre de 3 ou 4.

Dosages redox suivis par potentiométrie

Le logiciel dozzzaqueux permet également de simuler des dosages redox, suivis par potentiométrie (tracé de $\Delta E = f(V)$).

Attention : il faut cependant activer une option (non activée par défaut) :

L Dozz	zaqueu	х												
Fichier	Optio	ns Aide												
Choix d		Nombre de points de calcul	tte	Espéce	s présentes	Réaction	ons et constantes	Résult	ats Cho	ix des courbe	s Tracé o	des courb	es	
Béc		Autoriser réactions redox							da ná	actife (el	ic on t	ôto de		
Value	- I	Utiliser Debye et Hückel					<u> </u>	base	ue re	acuis (ci	ic en t	ete de	<u>: colonne pou</u>	<u>ir mc</u>
volum		Calcul des dérivées			Inorganiq	ues So	lides Organique	5						
Tempé		Evnort tableur texte			Cations s	imples	Anions simples	Acides	et bases	Complexes	et divers	Ions	Atomes et molécules	
<u>R</u> (Identifian	t Cond	luctivité (0,1 mS.n	n²/mol)	Synony	me Formule	M (g/mo	I)		
x10	- Temporisation film			Ag[+]	61.9					107.868				
		Chiffres significatifs			Ag[2+]	?					107.86825	;		
		Indicateur coloré			AI[3+]	61					26.982	_		
					Am[3+]	?					243	_		
		Langue	•		Au[+]	?					196.966			
					Au[3+]	?					196.9665			
					Ba[2+]	63.6					137.327			
					Be[2+]	45					9.012			

Essayer de simuler le dosage :

- ➢ de E = 10 mL d'une solution de sulfate de fer(II) à 0,05 mol.L⁻¹ (acidifié avec de l'acide chlorhydrique à 0,1 mol.L⁻¹), par une solution de permanganate de potassium (KMnO₄) à 0,01 mol.L⁻¹.
- → de E = 10 mL d'une solution de sulfate de cérium (IV) à 0,01 mol.L⁻¹ (acidifié avec de l'acide chlorhydrique à 0,1 mol.L⁻¹), par une solution de sulfate de fer(II)à 0,01 mol.L⁻¹.

$$\label{eq:expectation} \begin{split} &Tracer \; E = f(V \; ou \; DE = f(V). \\ &E : \; potentiel \; de \; l'un \; des \; couples \; mis \; en \; jeu. \\ &\Delta E = E \; - \; E_{ECS}. \end{split}$$

Remarques :

- Il est également possible de réaliser des simulations de réactions de complexation ou de précipitation.

- Si vous ne trouvez pas une espèce donnée, il est possible de faire une recherche par formule brute ou par nom.