

Lancer le logiciel



I. PARAMÉTRAGE DU CONTENU DU BÉCHER

Dozzaqueux

Fichier Options Aide

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

Bécher Vider

Volume initial = mL

Température = K

Réactifs choisis:

x10	/10	Dilution

Identifiant Concentration (mol/L)

Identifiant	Concentration (mol/L)

? Rechercher une espèce

✓ Valider et passer à la burette >>>>

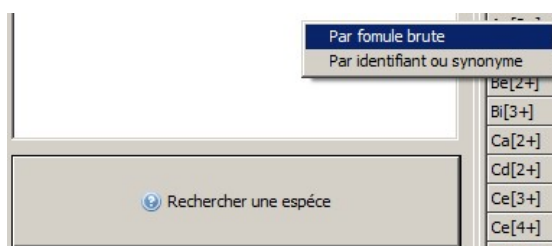
Base de réactifs (clic en)

Inorganiques | Solides | Organiques

Cations simples | Anions simples | Acides et bases | Complexes et divers

Identifiant	Conductivité (0,1 mS.m ² /mol)	Synonyme	Formule	M (g/mol)
Ag[+]	61.9			107.868
Ag[2+]	?			107.86825
Al[3+]	61			26.982
Am[3+]	?			243
Au[+]	?			196.966
Au[3+]	?			196.9665
Ba[2+]	63.6			137.327
Be[2+]	45			9.012
Bi[3+]	?			208.98
Ca[2+]	59.47			40.078
Cd[2+]	54			112.411
Ce[3+]	69.8			140.115
Ce[4+]	?			140.11525
Co[2+]	55			58.933
Co[3+]	?			58.93325
Cr[2+]	?			51.997
Cr[3+]	67			51.99725

- 1) Dans **Volume initial**, préciser la prise d'essai
- 2) Pour choisir le réactif, cliquer sur **Rechercher une espèce** puis **Par formule brute** :



- 3) Taper la formule brute 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-] [-]

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)

OK

Fermer

Attention : → respecter les minuscules et majuscules

Astuce : → pour gagner du temps et être sûr de trouver la bonne espèce, on peut ne mettre que certains atomes puis cocher **Mêmes atomes, en nombres quelconques**. Ex : OH pour OH⁻. Il reste à choisir l'espèce souhaitée dans la liste proposée.

4) Cliquer sur l'espèce désirée afin de préciser la **Concentration molaire** (ou au choix la quantité de matière, la masse ou la concentration massique)

Nombre de moles ?

Pour l'espèce OH⁻, veuillez introduire:

au choix:

☒ concentration (molaire):

☐ la quantité de matière:

☐ la masse:

☐ concentration massique:

mol/L

OK

Annuler

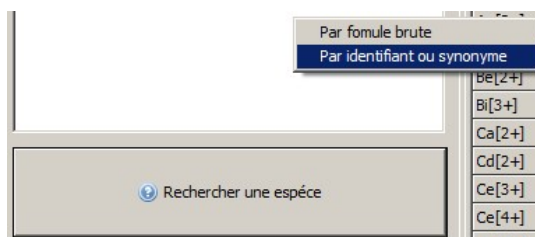
Attention: le volume de référence est ici celui du bûcher (ou de la burette si vous êtes en train de remplir la burette)
Ainsi, si le volume initial du bûcher (ou volume maximal à verser pour la burette) est de 100mL et que vous mettez 0.01 mol, la concentration dans le bûcher (respectivement la burette) sera de 0.1mol/L.
Si vous saisissez 0.2mol/L, la concentration sera de 0.2mol/L dans le bûcher (resp. la burette)

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

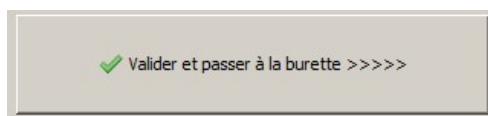
5) Recommencer les étapes 2) à 4) pour toutes les espèces à ajouter dans le bécher.

Attention : → ne pas oublier les contre-ions : pour une solution d'acide chlorhydrique, il faudra mettre des ions H^+ et des ions Cl^- à la même concentration, celle de la solution.

Astuce : → quand on connaît les espèces par leur nom, on peut choisir de cliquer sur **Rechercher une espèce** puis **Par identifiant ou synonyme**. Dans ce cas, faire attention aux accents, certaines molécules sont enregistrées avec les accents, d'autres non...

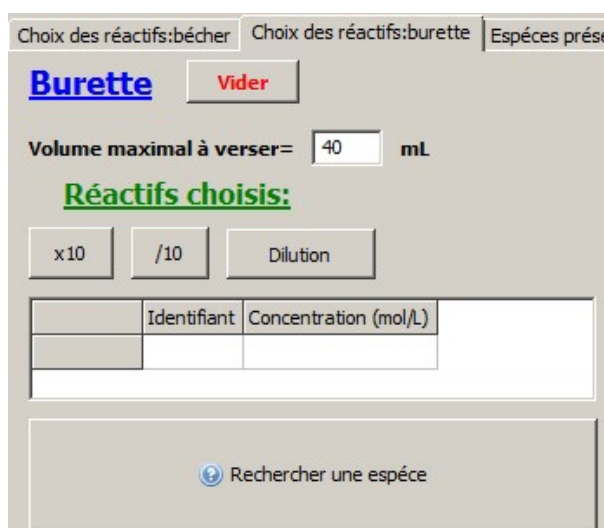


6) Valider et passer à la burette :



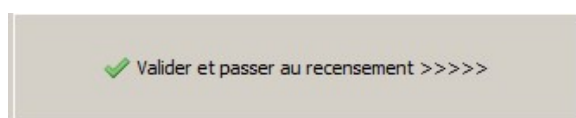
II. PARAMÉTRAGE DU CONTENU DE LA BURETTE

1) Préciser le **Volume maximal à verser** :



2) Introduire la solution titrante dans burette selon le même protocole que pour les réactifs dans le bécher.

3) Valider et passer au recensement :



III. CHOIX DES PRODUITS ET DES RÉACTIONS

La liste des produits de la réaction est proposée par le logiciel. Toutes les espèces ne doivent pas être gardées.

Exemple du titrage d'une solution d'acide chlorhydrique par de la soude.

- 1) Cliquer sur **Tout décocher**, certaines espèces disparaissent de la sélection.

The screenshot shows a software window with two buttons at the top: 'Tout cocher' (highlighted in red) and 'Tout décocher' (highlighted in pink). Below these buttons is a text prompt: 'Pour obtenir la formule brute d'une espèce, sélectionnez la puis cliquez sur le bouton ci-contre:'. To the right of this prompt is a green button labeled 'Formule brute ?'. Below the prompt is a list of chemical species with checkboxes: ☒ Cl⁻, ☒ H₂O, ☒ H⁺, ☒ Na⁺, ☐ HCl(aq), ☐ NaCl(aq), ☐ NaOH(aq), ☒ OH⁻, and ☐ Halite(s). A scrollbar is visible at the bottom of the list.

- 2) **Ajouter manuellement** les espèces présentes qui ont été retirées de la liste par l'opération précédente en cliquant sur l'espèce. Ici, aucune espèce n'est à ajouter.

Attention : → bien vérifier que toutes les espèces acido-basiques d'une famille sont bien présentes. Ex : solution d'acide sulfurique : vérifier la présence d'ions sulfate et hydrogénosulfate.

→ les espèces comme NaCl_(aq) ou HCl_(aq) ne doivent pas être cochées car on suppose, pour simplifier, que les sels sont totalement dissociés sous forme d'ions hydratés : Na⁺_(aq), Cl⁻_(aq), H⁺_(aq),...

Astuce : → en cas de doute face au nom d'un sel comme l'« halite », cliquer sur l'espèce puis sur **Formule brute ?**



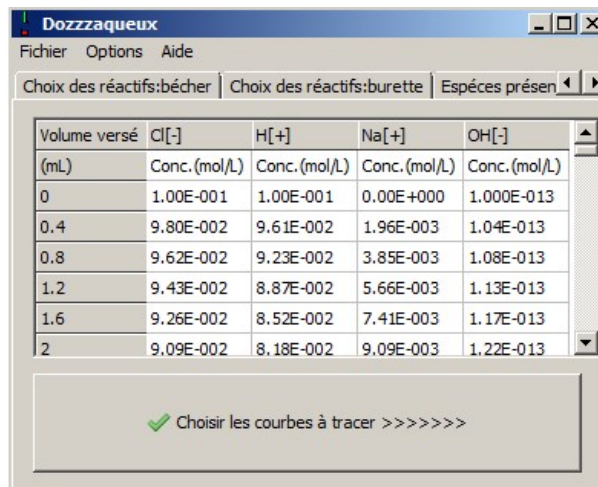
- 3) Après avoir **validé**, la liste des réactions retenues ainsi que les constantes de réaction correspondantes sont proposées. Elles peuvent être modifiées si nécessaire :

The screenshot shows the 'Dozzaqueux' software window. The 'Réactions et constantes' tab is selected. The window displays the 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.' Below this text is a table with two columns: 'Equation de réaction' and 'log K'. The first row shows the equation 'H2O = H[+] + OH[-]' with a value of '-14' in the 'log K' column. At the bottom of the window is a green checkmark icon and the text 'Valider et lancer les calculs>>>>>>'.

- 4) **Valider** cette page pour **lancer les calculs** (plus ou moins longs selon le nombre de réaction mis en jeu).

IV. CALCULS

Le tableau suivant apparaît :



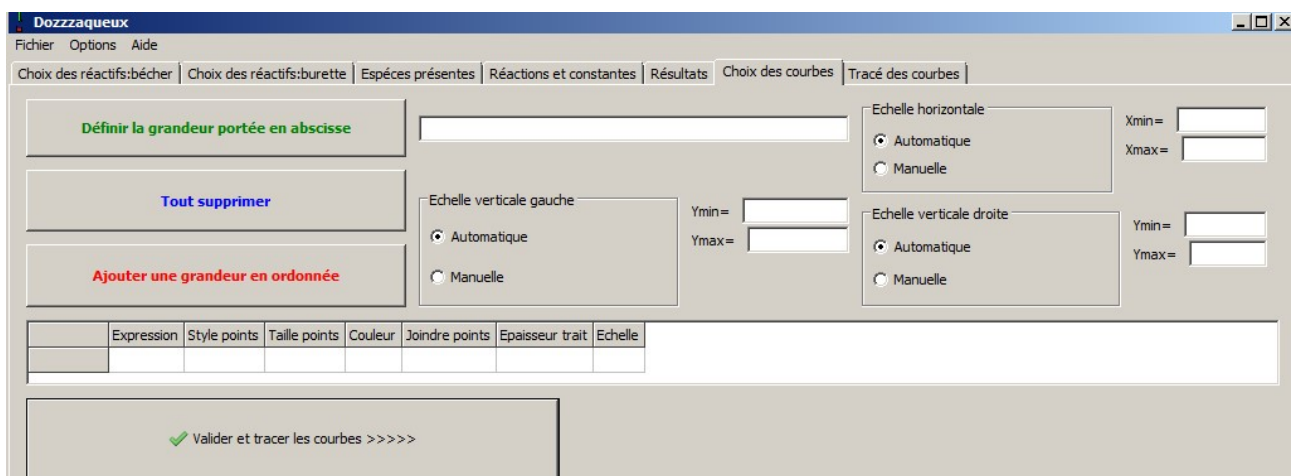
Volume versé (mL)	Cl[-] Conc. (mol/L)	H[+] Conc. (mol/L)	Na[+] Conc. (mol/L)	OH[-] Conc. (mol/L)
0	1.00E-001	1.00E-001	0.00E+000	1.00E-013
0.4	9.80E-002	9.61E-002	1.96E-003	1.04E-013
0.8	9.62E-002	9.23E-002	3.85E-003	1.08E-013
1.2	9.43E-002	8.87E-002	5.66E-003	1.13E-013
1.6	9.26E-002	8.52E-002	7.41E-003	1.17E-013
2	9.09E-002	8.18E-002	9.09E-003	1.22E-013

✓ Choisir les courbes à tracer >>>>>>

Exemple du titrage d'une solution d'acide chlorhydrique par de la soude.

On opte pour le tracé des courbes : **Choisir les courbes à tracer.**

V. REPRÉSENTATION GRAPHIQUE



Dozzaqueux
Fichier Options Aide

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

Définir la grandeur portée en abscisse

Tout supprimer

Ajouter une grandeur en ordonnée

Echelle horizontale
☒ Automatique
☐ Manuelle
 Xmin =
 Xmax =

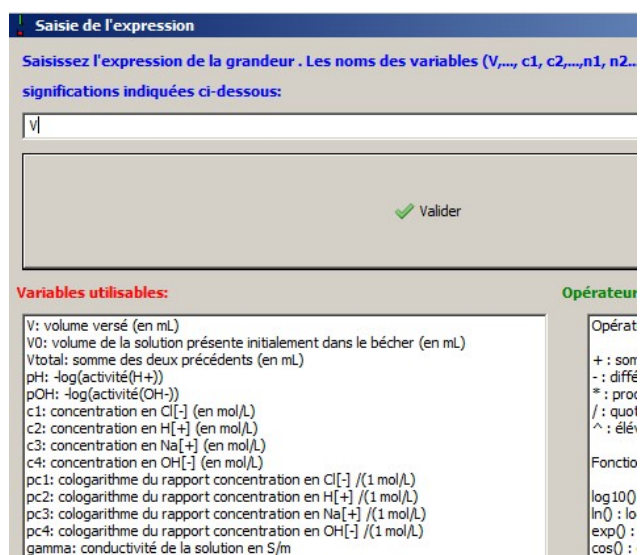
Echelle verticale gauche
☒ Automatique
☐ Manuelle
 Ymin =
 Ymax =

Echelle verticale droite
☒ Automatique
☐ Manuelle
 Ymin =
 Ymax =

	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle

✓ Valider et tracer les courbes >>>>>

- 1) **Définir la grandeur portée en abscisse**, le volume, V. On peut la taper ou la choisir dans la liste.



Saisie de l'expression

Saisissez l'expression de la grandeur. Les noms des variables (V,..., c1, c2,..., n1, n2,...) significations indiquées ci-dessous:

V

✓ Valider

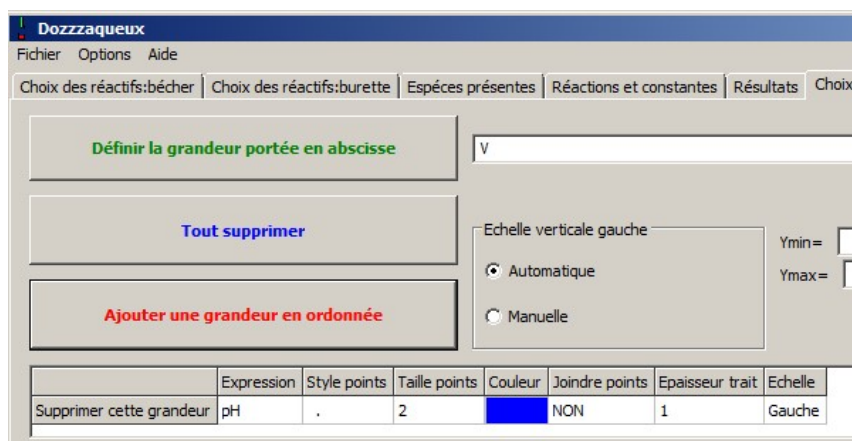
Variables utilisables:

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(activité(H+))
 pOH: -log(activité(OH-))
 c1: concentration en Cl[-] (en mol/L)
 c2: concentration en H[+] (en mol/L)
 c3: concentration en Na[+] (en mol/L)
 c4: concentration en OH[-] (en mol/L)
 pc1: cologarithme du rapport concentration en Cl[-] / (1 mol/L)
 pc2: cologarithme du rapport concentration en H[+] / (1 mol/L)
 pc3: cologarithme du rapport concentration en Na[+] / (1 mol/L)
 pc4: cologarithme du rapport concentration en OH[-] / (1 mol/L)
 gamma: conductivité de la solution en S/m

Opérateur

Opérat
 + : som
 - : diffé
 * : proc
 / : quot
 ^ : élév
 Fonctio
 log10()
 ln()
 exp()
 cos()
 sin()

2) Définir une **Grandeur en ordonnée**, le pH a priori :



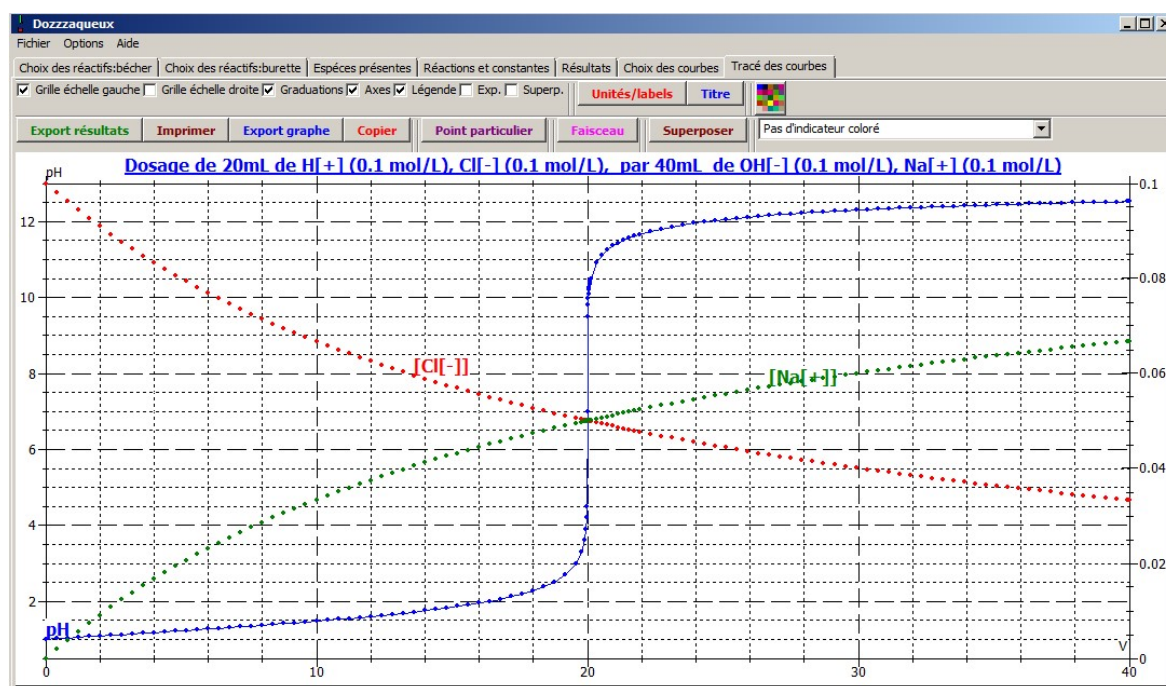
On peut modifier le style des points, leur taille, ... en cliquant dans la case adéquate. C'est rarement utile, le paramétrage par défaut étant suffisant.

3) Si nécessaire, ajouter d'autres grandeurs à porter en ordonnées, de la même façon que le pH.
Ex : concentrations, conductivité, pourcentages d'espèces... Certaines grandeurs sont dans la liste, les autres peuvent être construites en tapant la formule adaptée.

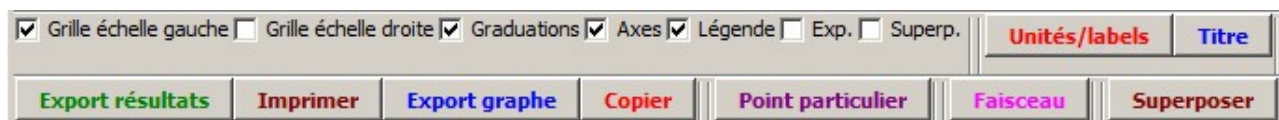
	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	pH	.	2	Blue	OUI	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	[Cl ⁻]	.	2	Red	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Na ⁺]	.	2	Green	NON	1	Droite

Attention : → bien mettre **Droite** dans la Colonne **Echelle** pour distinguer les échelles de pH et de concentration.

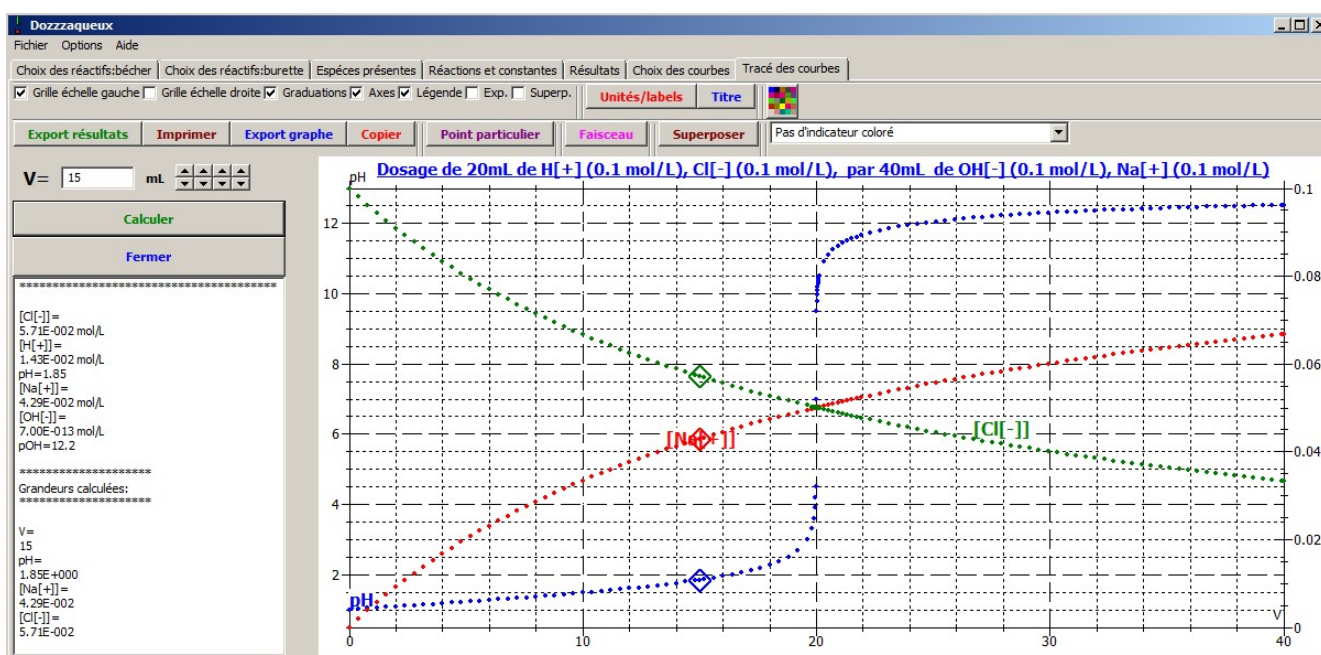
4) Valider et tracer les courbes.



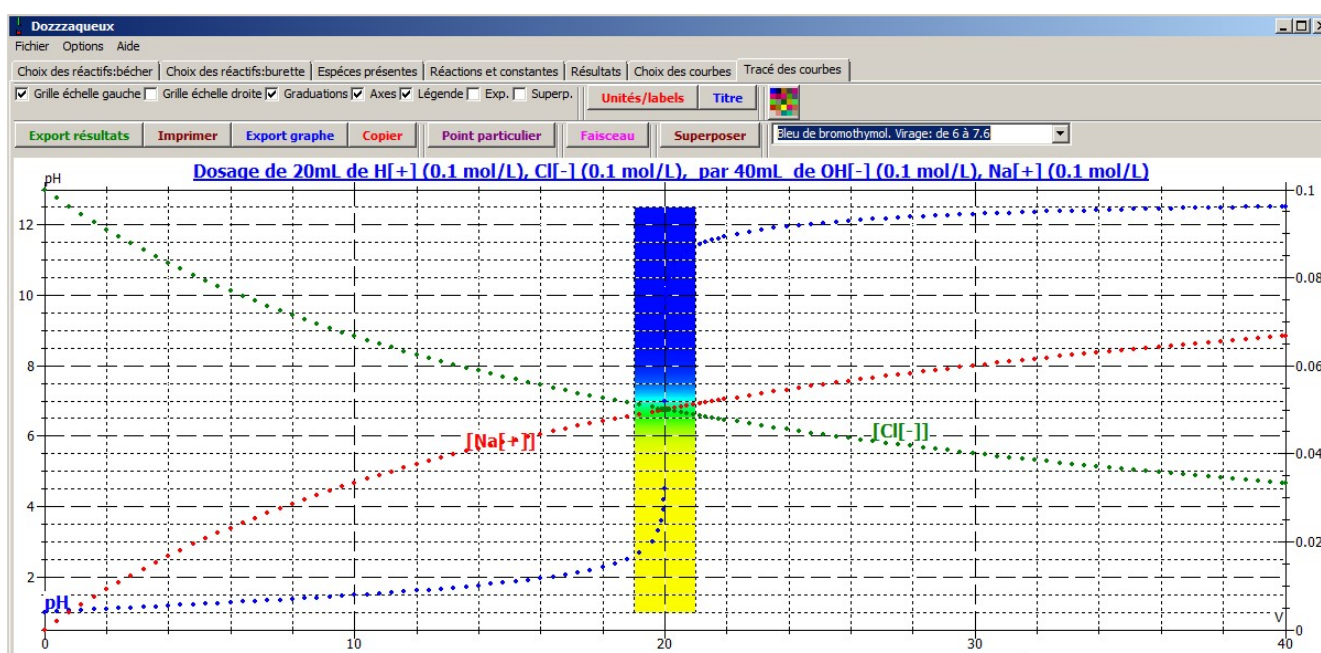
Astuces : → on peut faire apparaître la légende sur chaque courbe en cochant l'option adéquate



→ en cliquant sur **Point particulier**, on fait apparaître une fenêtre permettant d'accéder à toutes les grandeurs calculées par le logiciel, dont les concentrations. On peut choisir le **Volume** en le tapant dans le cadre adéquat ou en utilisant les curseurs pour se déplacer sur la courbe, puis en cliquant sur **Calculer**. Utile pour obtenir des concentrations au niveau d'un point anguleux par exemple.



→ On peut visualiser l'effet d'un **indicateur coloré** en le choisissant dans le menu déroulant :



CONCLUSION

Si vous maîtrisez le contenu de ce document, vous savez faire l'essentiel avec Dozzzaqueux. Il y a beaucoup d'autres options, à vous de les découvrir en vous entraînant !

Le logiciel est libre de droit et téléchargeable à l'adresse suivante :

<http://jeanmarie.biansan.free.fr/dozzzaqueux.html>

LU DANS LES RAPPORTS DU JURY...

« Les candidats disposent d'ordinateurs dans la salle pour traiter leurs résultats. Le logiciel gratuit *Regressi* est le tableur retenu pour le traitement des données. [...] Trois autres logiciels sont également à disposition des candidats :

- Un logiciel permettant d'exécuter des scripts informatiques en langage Python afin de réaliser des programmes de simulation Monte Carlo ou des régressions linéaires. Il est à noter que le jury propose aux candidats 3 programmes à compléter (régression linéaire, incertitude par la méthode de Monte Carlo dans le cas général et dans le cas d'un titrage). Les scripts doivent être montrés au jury avant toute éventuelle impression.
- Le logiciel *Gum MC* permettant d'estimer les incertitudes liées aux résultats expérimentaux obtenus.
- Le logiciel *Dozzzaqueux* permettant de simuler des courbes de titrage.

Le jury rappelle que ces logiciels sont librement accessibles en ligne, et encourage les candidats à s'y familiariser en amont de l'épreuve. **(Mines2023/2024)** »

« Pour la chimie des solutions, le logiciel de simulation dozzzaqueux est à la disposition des candidats. La maîtrise de ce logiciel n'est pas au programme. Certains sujets suggèrent son utilisation sous la forme « On pourra utiliser le logiciel dozzzaqueux... » pour rappeler aux candidats qu'il est à leur disposition. Ce n'est en aucun cas une exigence du jury et une nécessité, les sujets proposés pouvant être résolus avec une simple analyse qualitative des données fournies. Ce logiciel est une réelle aide quand il est bien maîtrisé par les candidats. En revanche, son utilisation pour simuler la courbe de titrage d'un acide faible par une base forte n'est peut-être pas pertinente. **(Centrale2022)** »