

UTILISER DOZZAQUEUX POUR SIMULER UN TITRAGE

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= 20 mL
Température= 298 K

Réactifs choisis:

x10 /10 Dilution

Identifiant	Concentration (mol/L)

Rechercher une espèce

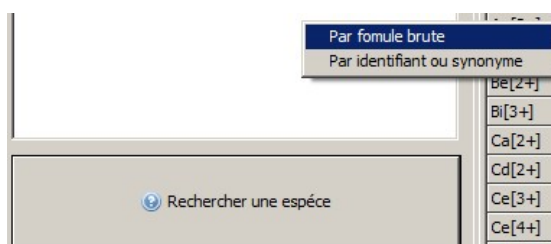
✓ Valider et passer à la burette >>>>>

Base de réactifs (cliquez sur l'onglet)

Inorganiques Solides Organiques

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

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.

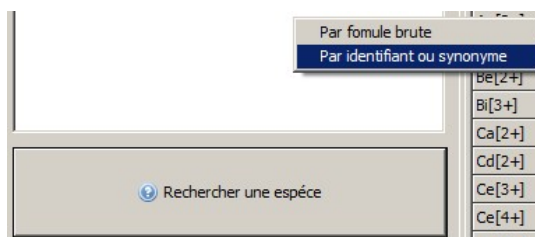
4) Cliquer sur l'espèce désirée afin de préciser la **Concentration molaire** (ou au choix la quantité de matière, la masse ou la concentration massique)

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

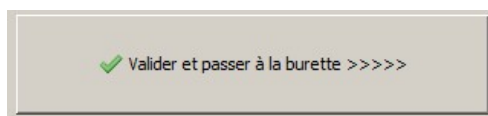
5) Recommencer les étapes 2) à 4) pour toutes les espèces à ajouter dans le bécher.

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...

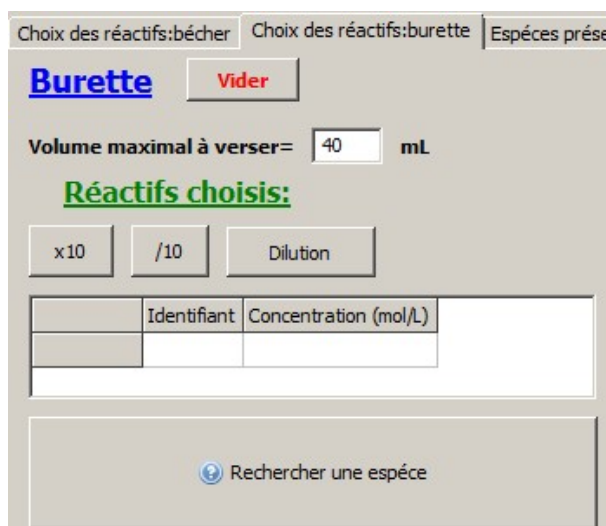


6) Valider et passer à la burette :



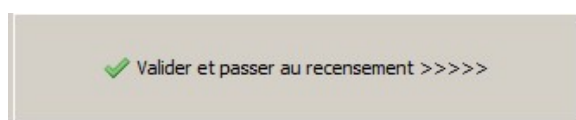
II. PARAMÉTRAGE DU CONTENU DE LA BURETTE

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.

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 hydrogènesulfate.

→ les espèces comme $\text{NaCl}_{(\text{aq})}$ ou $\text{HCl}_{(\text{aq})}$ ne doivent pas être cochées car on suppose, pour simplifier, que les sels sont totalement dissociés sous forme d'ions hydratés : $\text{Na}^+_{(\text{aq})}$, $\text{Cl}^-_{(\text{aq})}$, $\text{H}^+_{(\text{aq})}$,...

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 :

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

Chercher 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

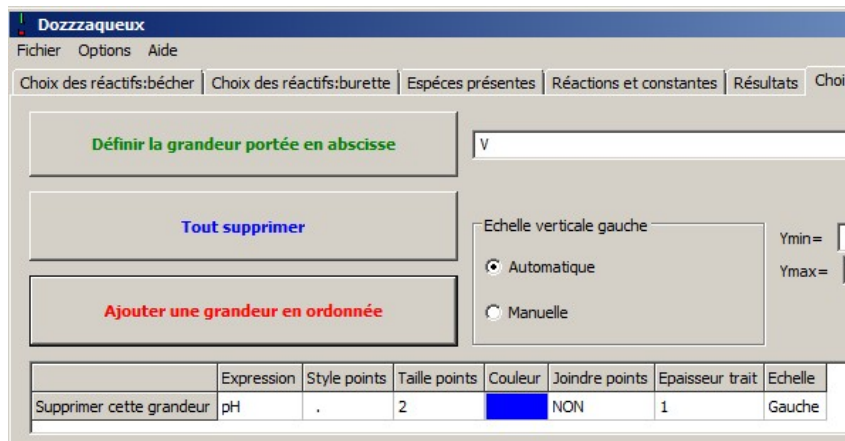
Opérat

+ : som
- : diffé
* : proc
/ : quot
^ : élév

Fonctio

log 10 ()
ln () : lo
exp () :
cos () :
sin () :

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



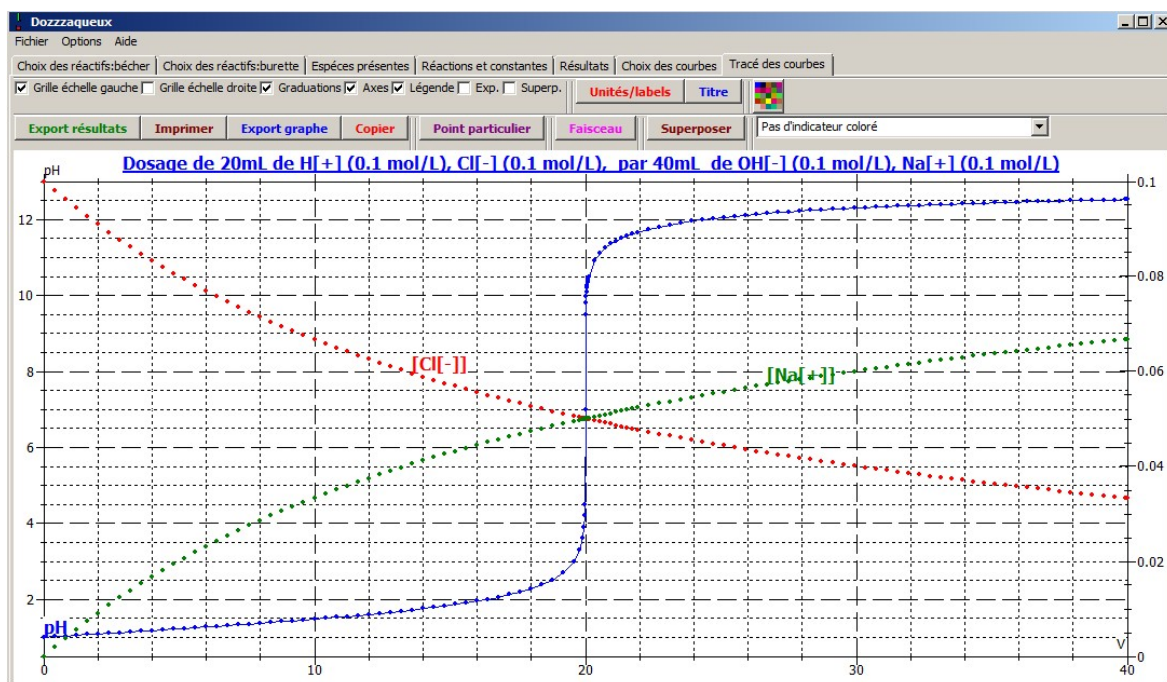
On peut modifier le style des points, leur taille, ... en cliquant dans la case adéquate. C'est rarement utile, le paramétrage par défaut étant suffisant.

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.

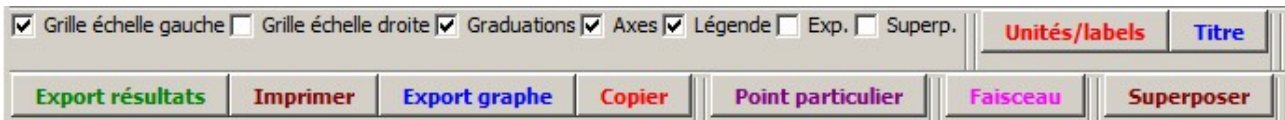
	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	pH	.	2	 	OUI	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	[Cl ⁻]	.	2	 	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Na ⁺]	.	2	 	NON	1	Droite

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

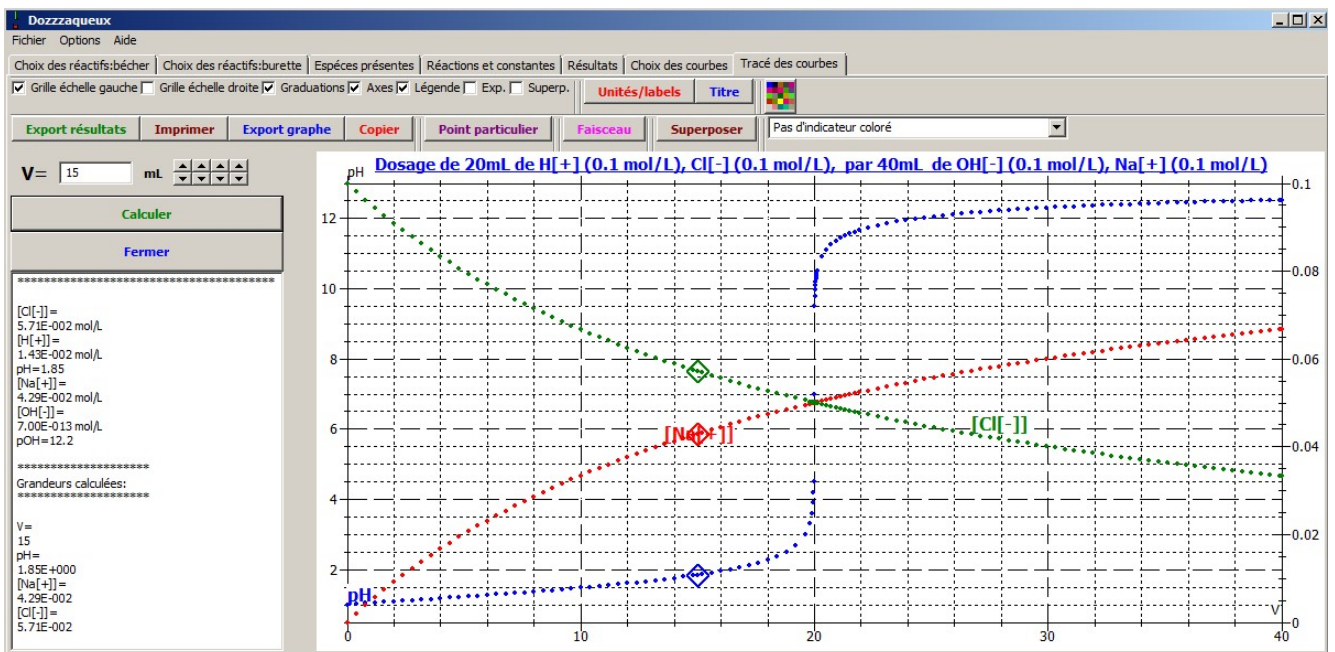
4) Valider et tracer les courbes.



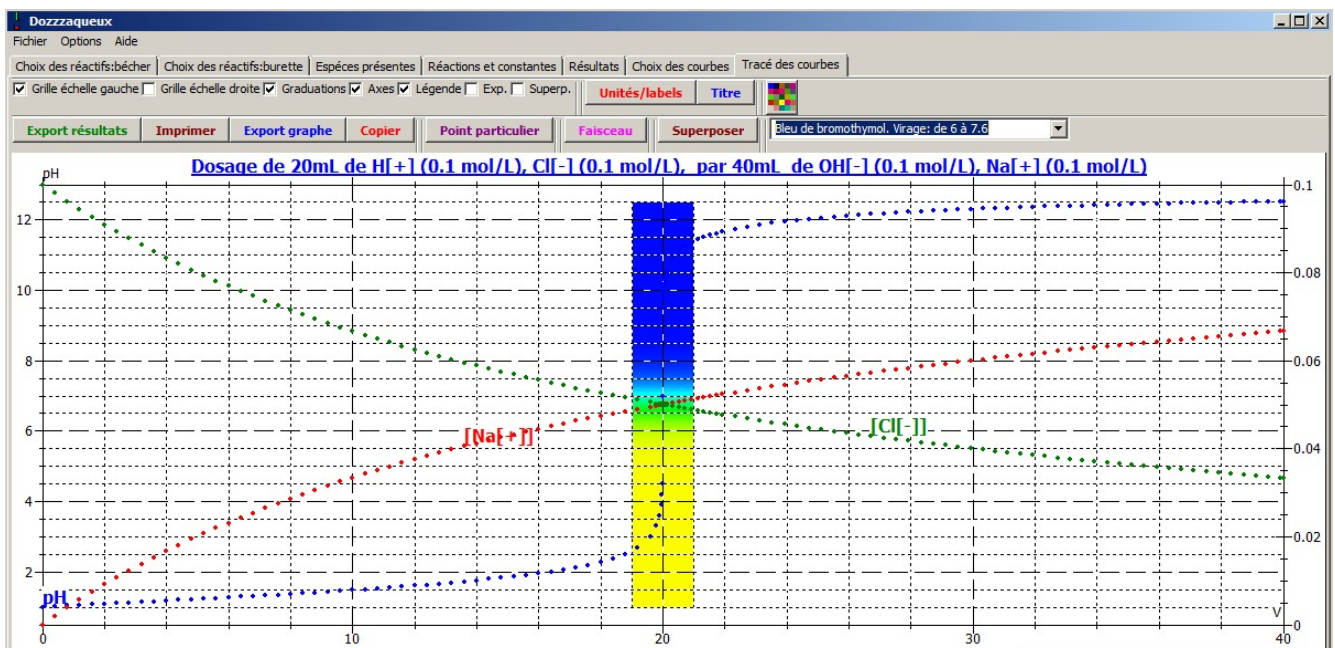
Astuces : → on peut faire apparaître la légende sur chaque courbe en cochant l'option adéquate



→ 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 Dozzaqueux. 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/dozzaqueux.html>

LU DANS LES RAPPORTS DU JURY...

« Trois logiciels sont 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 *Dozzaqueux* permettant de simuler des courbes de titrage. Le jury rappelle cependant que si les informations fournies dans le sujet sont insuffisantes (pK_a , concentration, ...) la simulation sur Dozzaqueux n'est pas toujours possible et conduit parfois à une perte de temps. Il est attendu une certaine autonomie dans l'utilisation de ce logiciel (notamment au niveau des espèces apparaissant au cours du 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. **(Mines2024/2025)** »

« Pour la chimie des solutions, le logiciel de simulation dozzaqueux 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 dozzaqueux... » 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)** »