

## Exercice 35 – Notice simplifiée du logiciel Dozzaqueux

Logiciel libre et gratuit de simulation de courbes de dosage en solution aqueuse.

### Présentation du logiciel

Dozzaqueux est un logiciel de simulation de courbes de dosage en solution aqueuse. Il est librement téléchargeable à l'adresse :

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

L'utilisateur sélectionne les réactifs présents dans le bécher et dans la burette. Dozzaqueux calcule, pour diverses valeurs du volume versé, les quantités de matière des espèces présentes à la fin de la réaction. Une fois les calculs faits, Dozzaqueux permet différents tracés dont les courbes de titrage conductimétrique ou pH-métrique.

### Construction pas à pas du dosage

La construction se fait par validation des onglets successifs. Vous pouvez toujours revenir sur un onglet antérieur en cliquant sur l'onglet voulu. Si vous faites des modifications, il faudra les revalider.

#### 1. Paramétrage du contenu du bécher

Base de réactifs (cliquez en tête de colonne pour modifier l'ordre de tri):

Identifiant	Conductivité (0.1 M, 25°C)	Synonyme	Formule	M (g/mol)
Ag[-1]	61.9			107.868
Ag[2+]	?			107.86825
Al[3+]	61			26.982
Am[3+]	?			243
Au[-1]	?			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
Cs[-1]	77.2			132.905
Cu[-1]	?			63.54575
Cu[2+]	53.6			63.546
Dy[2+]	?			162.49975
Dy[3+]	65.6			162.5
Er[2+]	?			167.25975
Er[3+]	65.9			167.26

**Ajout d'un réactif** : Pour rajouter une des espèces présentes dans le tableau de droite, il suffit de cliquer sur le nom de l'espèce. Dozzaqueux vous propose alors de choisir la quantité de l'espèce à introduire, au choix : nombre de moles, masse, concentration en quantité, concentration en masse.

**Suppression d'un réactif** : Cliquer sur la case « Supprimer » située à gauche du réactif déjà choisi.

**Modification d'une concentration** : Cliquer sur la concentration, une fenêtre s'ouvre, invitant à modifier la concentration.

**Volume de solution présent initialement dans le bécher** : Indiquer la valeur, en mL.

**Validation** : Cliquer sur le bouton en bas à gauche « Valider et passer à la burette ».

### **2. Paramétrage du contenu de la burette**

Le principe est exactement le même.

Ne pas oublier d'indiquer le volume total qui sera versé par la burette, en mL.

Valider vos choix en cliquant sur « Valider et passer au recensement ».

### **3. Choix des produits et des réactions**

La liste des produits de la réaction résulte de la recherche dans la base de données des espèces susceptibles de se former à partir des espèces que vous avez sélectionnées pour le bécher et la burette.

Cliquer sur tout décocher afin de désélectionner les espèces n'ayant qu'une probabilité très faible de se former au cours de la réaction étudiée ; cela permet de diminuer le temps de calcul.

Fichier Options Aide

Dozzaqueux

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[-]
- H2O
- H[+]
- Na[+]
- HCl(aq)
- NaCl(aq)
- NaOH(aq)
- OH[-]
- Halite(s)
- Na2O(s)

Validé et passer aux constantes de réaction >>>>>

Cliquer sur « Valider » et passer aux constantes de réaction.

Une liste des équations des réactions possibles est alors proposée (ainsi que la valeur d'une constante réaction correspondante dont nous ne nous préoccupons pas).

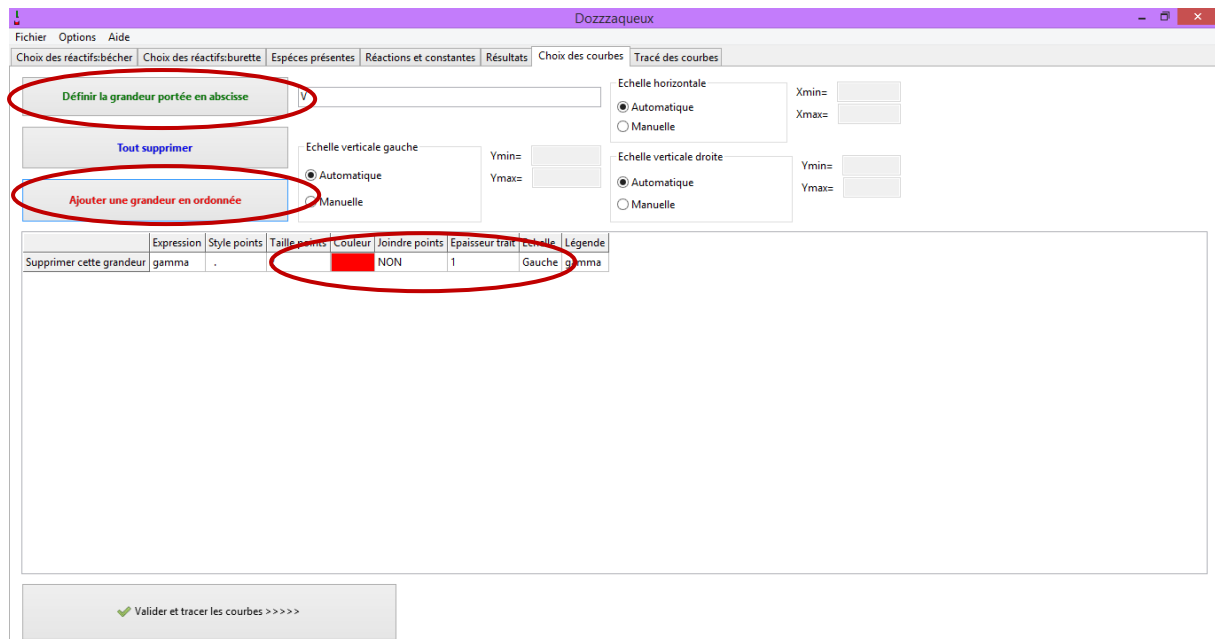
En validant cette page, les calculs sont lancés.

### **4. Calculs**

Un tableau de résultats est affiché ; opter pour le tracé de courbes en cliquant sur « Choisir les courbes à tracer ».

### **5. Représentation graphique**

Définir la grandeur portée en abscisse : volume  $V$ , et la grandeur portée en ordonnée, gamma (conductivité de la solution en S/m).



Choisir par un simple clic sur la case correspondante :

- la couleur de représentation des points de mesure
- de ne pas joindre les points

La courbe de titrage est obtenue en cliquant sur « Valider et tracer les courbes ».

### **6. Réalisation d'une nouvelle simulation**

Cliquer sur « Fichier » puis « Nouvelle simulation ».

Recommencer la procédure précédente pour la nouvelle simulation étudiée.

**Attention**, dans l'onglet « Choix des courbes », veiller à :

- changer la couleur des points expérimentaux pour la représentation graphique ;
- changer l'échelle de côté par rapport à la simulation précédente (elle est par défaut placée à gauche, donc choisir droite pour cette seconde simulation).

### **7. Superposition de courbes**

Il est possible de superposer des simulations effectuées depuis le dernier lancement de Dozzaqueux.

Dans la fenêtre d'affichage du graphique, cliquer sur « Superposer », puis « une ou plusieurs simulations faites depuis le dernier lancement de Dozzaqueux » et cocher les simulations à superposer à celle affichée. Valider en cliquant sur « OK ».