

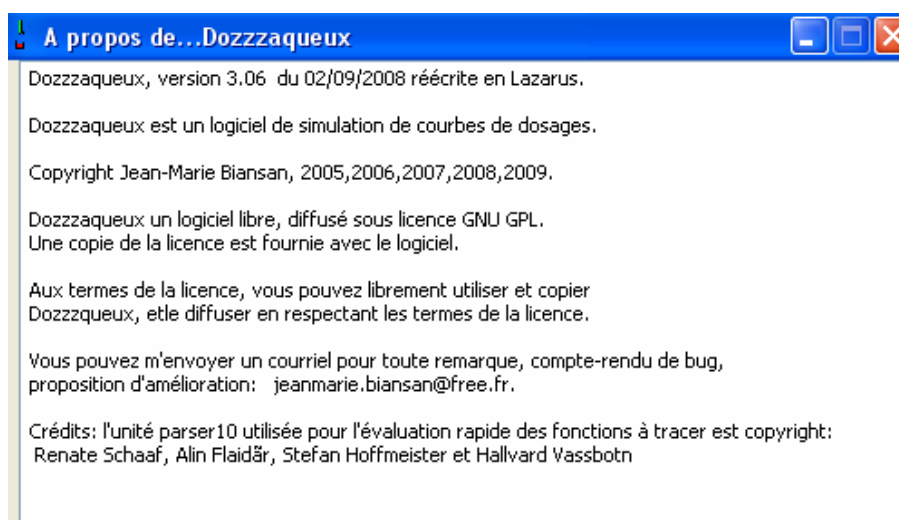
# Simulations et exploitation de courbes de titrages potentiométriques

## Utilisation des logiciels Dozzaqueux et Regressi

Version d'octobre 2009

A. PRISE EN MAIN DU LOGICIEL DOZZAQUEUX : TITRAGE SOLUTION DE FER(II) / SOLUTION DE CERIUM(IV) ....	2
1. Paramétrage du contenu du bécher .....	2
2. Paramétrage du contenu de la burette.....	4
3. Choix des produits et des réactions .....	4
4. Calculs .....	6
5. Représentation graphique.....	7
6. Exporter les données dans Regressi.....	11
7. Détermination de l'équivalence avec le logiciel Regressi .....	12
B. AUTRE EXEMPLE : TITRAGE D'UNE SOLUTION DE FER(II) PAR UNE SOLUTION DE PERMANGANATE DE POTASSIUM.....	15
1. Paramétrage du contenu du bécher .....	16
2. Paramétrage du contenu de la burette.....	16
3. Choix des produits et des réactions .....	16
4. Calculs .....	17
5. Représentation graphique.....	18
6. Exporter les données dans Regressi.....	19
7. Détermination de l'équivalence avec le logiciel Regressi .....	20

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>



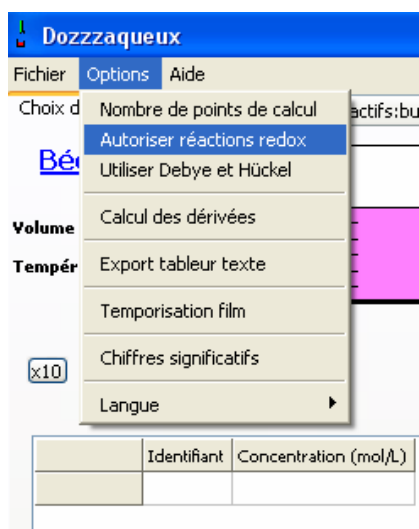
Les courbes simulées seront exploitées à l'aide du logiciel Regressi, disponible à l'adresse : <http://pagesperso-orange.fr/jean-michel.millet/telechargement.htm> ; version 2.95 du 02/09/2009.

## A. Prise en main du logiciel Dozzaqueux : titrage solution de fer(II) / solution de cérium(IV)

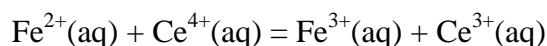
Lancer le logiciel.



Dans le menu options, sélectionner « Autoriser réactions redox » :



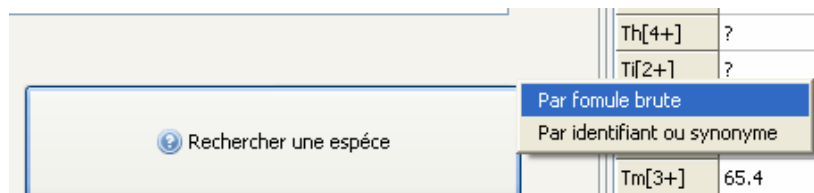
La réaction étudiée sera l'oxydation des ions fer(II) par les ions cérium(IV) :



Une prise d'essai de 10 mL d'une solution de sulfate de fer(II) à 100 mmol.L<sup>-1</sup> est titrée par une solution de sulfate de cérium(IV) à 100 mmol.L<sup>-1</sup>. On travaille en milieu sulfurique en rajoutant 20 mL d'acide sulfurique à 1 mol.L<sup>-1</sup>.

### 1. Paramétrage du contenu du bécher

On clique sur « Rechercher une espèce » puis formule brute :



et on tape FeSO4, on sélectionne alors FeSO<sub>4</sub>(aq).

**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-] [-]

FeSO4

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)
FeSO4(s)			151.91075
FeSO4(aq)			151.91075

OK

On ajoute 20 mL d'acide sulfurique à  $1 \text{ mol.L}^{-1}$  soit 0,02 mol en utilisant la base de réactifs, onglet **INORGANIQUES** et onglet **ACIDES ET BASES**.

**Base de réactifs:**

Inorganiques Solides Organiques

Cations simples Anions simples Acides et bases Complexes et divers Ions Atomes et molécules

Identifiant	Conductivité (0,1 mS.m <sup>2</sup> /mol)	Synonyme	Formule	M (g/mol)
H2S(aq)	0			34.082
H2S2O4(aq)	0			130.1465
H2SO3(aq)	0			82.0805
H2SO4(aq)	0			98.08

**Nombre de moles ?**

Pour l'espèce H2SO4(aq), veuillez introduire:

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

OU BIEN

la quantité de matière:  mol

OU BIEN

OK

Puis valider :

OK Valider et passer à la burette >>>>>

## 2. Paramétrage du contenu de la burette

On choisit de remplir la burette d'une solution de sulfate de cérium(IV) à  $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$  (attention à la stœchiométrie afin d'assurer l'électroneutralité de la solution).

	Identifiant	Concentration (mol/L)
Supprimer	Ce[4+]	0.1
Supprimer	SO4[2-]	0.2

## 3. Choix des produits et des réactions

L'ajout des réactions redox augmente considérablement la liste des espèces disponibles :

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 ?

<input checked="" type="checkbox"/> Ce[3+]	<input checked="" type="checkbox"/> H2O2[-]	<input checked="" type="checkbox"/> FeS(s)
<input checked="" type="checkbox"/> Fe[3+]	<input checked="" type="checkbox"/> HS2O3[-]	<input checked="" type="checkbox"/> FeSO4(s)
<input checked="" type="checkbox"/> H2O	<input checked="" type="checkbox"/> HS2O4[-]	<input checked="" type="checkbox"/> Melanterite(s)
<input checked="" type="checkbox"/> H[+]	<input checked="" type="checkbox"/> HSO3[-]	<input checked="" type="checkbox"/> Pyrite(s)
<input checked="" type="checkbox"/> O2(aq)	<input checked="" type="checkbox"/> HSO4[-]	<input checked="" type="checkbox"/> S(s)
<input checked="" type="checkbox"/> SO4[2-]	<input checked="" type="checkbox"/> HSO5[-]	
<input checked="" type="checkbox"/> Ce(OH)2[2+]	<input checked="" type="checkbox"/> HS[-]	
<input checked="" type="checkbox"/> Ce(SO4)2(aq)	<input checked="" type="checkbox"/> OH[-]	
<input checked="" type="checkbox"/> Ce(SO4)3[2-]	<input checked="" type="checkbox"/> S2O3[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> CeOH[2+]	<input checked="" type="checkbox"/> S2O4[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> CeOH[3+]	<input checked="" type="checkbox"/> S2O5[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> CeSO4[+]	<input checked="" type="checkbox"/> S2O6[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> CeSO4[2+]	<input checked="" type="checkbox"/> S2O8[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> Ce[2+]	<input checked="" type="checkbox"/> S2[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> Ce[4+]	<input checked="" type="checkbox"/> S3O6[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> Fe(OH)2[+]	<input checked="" type="checkbox"/> S3[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> Fe(SO4)2[-]	<input checked="" type="checkbox"/> S4O6[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> FeOH[+]	<input checked="" type="checkbox"/> S4[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> FeOH[2+]	<input checked="" type="checkbox"/> S5O6[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> FeS2O3(aq)	<input checked="" type="checkbox"/> S5[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> FeS2O3[+]	<input checked="" type="checkbox"/> SO2(aq)	
<input checked="" type="checkbox"/> FeSO4(aq)	<input checked="" type="checkbox"/> SO3[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> FeSO4[+]	<input checked="" type="checkbox"/> SO5[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> Fe[2+]	<input checked="" type="checkbox"/> S[2-]	
<input checked="" type="checkbox"/> H2(aq)	<input checked="" type="checkbox"/> Ce(OH)3(s)	
<input checked="" type="checkbox"/> H2O2(an)	<input checked="" type="checkbox"/> Ce(OH)4(s)	

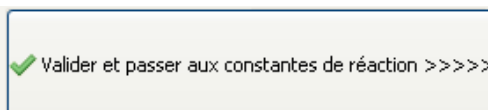
Il convient de choisir de tout décocher, le logiciel conserve alors certaines espèces :

- |   |   |   |
|---|---|---|
| <input type="checkbox"/> Ce[3+]               | <input type="checkbox"/> HO2[-]           | <input type="checkbox"/> FeS(s)         |
| <input checked="" type="checkbox"/> Fe[3+]    | <input type="checkbox"/> HS2O3[-]         | <input type="checkbox"/> FeSO4(s)       |
| <input checked="" type="checkbox"/> H2O       | <input type="checkbox"/> HS2O4[-]         | <input type="checkbox"/> Melanterite(s) |
| <input checked="" type="checkbox"/> H[+]      | <input type="checkbox"/> HSO3[-]          | <input type="checkbox"/> Pyrite(s)      |
| <input type="checkbox"/> O2(aq)               | <input type="checkbox"/> HSO4[-]          | <input type="checkbox"/> S(s)           |
| <input checked="" type="checkbox"/> SO4[2-]   | <input type="checkbox"/> HS05[-]          |   |
| <input type="checkbox"/> Ce(OH)2[2+]          | <input type="checkbox"/> HS[-]            |   |
| <input type="checkbox"/> Ce(SO4)2(aq)         | <input checked="" type="checkbox"/> OH[-] |   |
| <input type="checkbox"/> Ce(SO4)3[2-]         | <input type="checkbox"/> S2O3[2-]         |   |
| <input type="checkbox"/> CeOH[2+]             | <input type="checkbox"/> S2O4[2-]         |   |
| <input type="checkbox"/> CeOH[3+]             | <input type="checkbox"/> S2O5[2-]         |   |
| <input type="checkbox"/> CeSO4[+]             | <input type="checkbox"/> S2O6[2-]         |   |
| <input type="checkbox"/> CeSO4[2+]            | <input type="checkbox"/> S2O8[2-]         |   |
| <input type="checkbox"/> Ce[2+]               | <input type="checkbox"/> S2[2-]           |   |
| <input checked="" type="checkbox"/> Ce[4+]    | <input type="checkbox"/> S3O6[2-]         |   |
| <input type="checkbox"/> Fe(OH)2[+]           | <input type="checkbox"/> S3[2-]           |   |
| <input type="checkbox"/> Fe(SO4)2[-]          | <input type="checkbox"/> S4O6[2-]         |   |
| <input type="checkbox"/> FeOH[+]              | <input type="checkbox"/> S4[2-]           |   |
| <input type="checkbox"/> FeOH[2+]             | <input type="checkbox"/> S5O6[2-]         |   |
| <input type="checkbox"/> FeS2O3(aq)           | <input type="checkbox"/> S5[2-]           |   |
| <input type="checkbox"/> FeS2O3[+]            | <input type="checkbox"/> SO2(aq)          |   |
| <input checked="" type="checkbox"/> FeSO4(aq) | <input type="checkbox"/> SO3[2-]          |   |
| <input type="checkbox"/> FeSO4[+]             | <input type="checkbox"/> SO5[2-]          |   |
| <input type="checkbox"/> Fe[2+]               | <input type="checkbox"/> S[2-]            |   |
| <input type="checkbox"/> H2(aq)               | <input type="checkbox"/> Ce(OH)3(s)       |   |
| <input type="checkbox"/> H2O2(aq)             | <input type="checkbox"/> Ce(OH)4(s)       |   |
| <input type="checkbox"/> H2S(aq)              | <input type="checkbox"/> Ce(s)            |   |
| <input type="checkbox"/> H2S2O3(aq)           | <input type="checkbox"/> Fe(OH)2(s)       |   |
| <input type="checkbox"/> H2S2O4(aq)           | <input type="checkbox"/> Fe(OH)3(s)       |   |
| <input type="checkbox"/> H2SO3(aq)            | <input type="checkbox"/> Fe(s)            |   |
| <input checked="" type="checkbox"/> H2SO4(aq) | <input type="checkbox"/> Fe2(SO4)3(s)     |   |
| <input type="checkbox"/> H2SO5(aq)            | <input type="checkbox"/> Fe2S3(s)         |   |

On rajoute aux espèces conservées, les ions cérium(III), notés Ce[3+], les ions fer(III), notés Fe[3+] et les ions fer(II), Fe[2+], en cliquant sur leur nom dans la liste.

- |   |   |
|---|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> Ce[3+]    | <input type="checkbox"/> H2SO3(aq)            |
| <input checked="" type="checkbox"/> Fe[3+]    | <input checked="" type="checkbox"/> H2SO4(aq) |
| <input checked="" type="checkbox"/> H2O       | <input type="checkbox"/> H2SO5(aq)            |
| <input checked="" type="checkbox"/> H[+]      |   |
| <input type="checkbox"/> O2(aq)               | <input type="checkbox"/> HS[-]                |
| <input checked="" type="checkbox"/> SO4[2-]   | <input checked="" type="checkbox"/> OH[-]     |
| <input type="checkbox"/> Ce(OH)2[2+]          | <input type="checkbox"/> S2O3[2-]             |
| <input type="checkbox"/> Ce(SO4)2(aq)         |   |
| <input type="checkbox"/> Ce(SO4)3[2-]         |   |
| <input type="checkbox"/> CeOH[2+]             |   |
| <input type="checkbox"/> CeOH[3+]             |   |
| <input type="checkbox"/> CeSO4[+]             |   |
| <input type="checkbox"/> CeSO4[2+]            |   |
| <input type="checkbox"/> Ce[2+]               |   |
| <input checked="" type="checkbox"/> Ce[4+]    |   |
| <input type="checkbox"/> Fe(OH)2[+]           |   |
| <input type="checkbox"/> Fe(SO4)2[-]          |   |
| <input type="checkbox"/> FeOH[+]              |   |
| <input type="checkbox"/> FeOH[2+]             |   |
| <input type="checkbox"/> FeS2O3(aq)           |   |
| <input type="checkbox"/> FeS2O3[+]            |   |
| <input checked="" type="checkbox"/> FeSO4(aq) |   |
| <input type="checkbox"/> FeSO4[+]             |   |
| <input checked="" type="checkbox"/> Fe[2+]    |   |

Puis valider :



La liste des réactions retenues ainsi que les constantes de réaction correspondantes sont proposées :

**Dozzaqueux**

Fichier Options Aide


Choix des réactifs:bécher    Choix des réactifs:burette    Espèces présentes    Réactions et constantes

**Voici un ensemble d'équations de réactions linéairement indépendantes entre elles décrites ci-dessous.**  
**Vous pouvez modifier les logarithmes des constantes d'équilibre si vous pensez en avoir besoin.**

Equation de réaction	log K
$Ce[3+] + Fe[3+] + SO4[2-] = Ce[4+] + FeSO4(aq)$	-14.3
$Ce[3+] + Fe[3+] = Ce[4+] + Fe[2+]$	-16.5
$2 H[+] + SO4[2-] = H2SO4(aq)$	-1.02
$H2O = H[+] + OH[-]$	-14

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

✓ Valider et lancer les calculs >>>>>>

 52%

## 4. Calculs

Les résultats des calculs apparaissent sous forme d'un tableau :

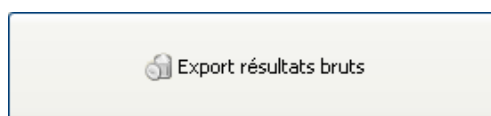
**Dozzaqueux**

Fichier Options Aide

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

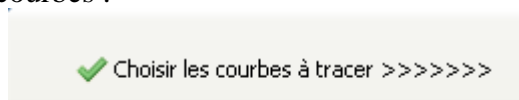
Volume versé (mL)	Ce[3+] Conc.(mol/L)	Fe[3+] Conc.(mol/L)	H[+] Conc.(mol/L)	SO4[2-] Conc.(mol/L)	Ce[4+] Conc.(mol/L)	FeSO4(aq) Conc.(mol/L)	Fe[2+] Conc.(mol/L)	H2SO4(aq) Conc.(mol/L)	OH[-] Conc.(mol/L)
0	0.00E+000	0.00E+000	2.50E+000	1.25E+000	0.00E+000	1.00E-001	0.00E+000	7.49E-001	4.00E-015
0.2	1.96E-003	1.96E-003	2.47E+000	1.24E+000	Traces	9.56E-002	4.86E-004	7.25E-001	4.05E-015
0.3	2.91E-003	2.91E-003	2.46E+000	1.24E+000	Traces	9.37E-002	4.78E-004	7.13E-001	4.07E-015
0.4	3.85E-003	3.85E-003	2.44E+000	1.23E+000	9.95E-019	9.18E-002	4.70E-004	7.02E-001	4.10E-015
0.5	4.76E-003	4.76E-003	2.43E+000	1.23E+000	1.55E-018	9.00E-002	4.62E-004	6.91E-001	4.12E-015
0.6	5.66E-003	5.66E-003	2.41E+000	1.22E+000	2.23E-018	8.82E-002	4.55E-004	6.80E-001	4.14E-015
0.7	6.54E-003	6.54E-003	2.40E+000	1.22E+000	3.02E-018	8.65E-002	4.47E-004	6.70E-001	4.17E-015
0.8	7.41E-003	7.41E-003	2.38E+000	1.21E+000	3.94E-018	8.47E-002	4.40E-004	6.60E-001	4.19E-015
0.9	8.26E-003	8.26E-003	2.37E+000	1.21E+000	4.98E-018	8.31E-002	4.33E-004	6.50E-001	4.22E-015
1	9.09E-003	9.09E-003	2.36E+000	1.21E+000	6.14E-018	8.14E-002	4.26E-004	6.40E-001	4.24E-015
1.1	9.91E-003	9.91E-003	2.34E+000	1.20E+000	7.42E-018	7.98E-002	4.19E-004	6.30E-001	4.27E-015
1.2	1.07E-002	1.07E-002	2.33E+000	1.20E+000	8.81E-018	7.82E-002	4.12E-004	6.21E-001	4.29E-015
1.3	1.15E-002	1.15E-002	2.32E+000	1.19E+000	1.03E-017	7.66E-002	4.05E-004	6.12E-001	4.32E-015
1.4	1.23E-002	1.23E-002	2.30E+000	1.19E+000	1.20E-017	7.50E-002	3.98E-004	6.03E-001	4.34E-015
1.5	1.30E-002	1.30E-002	2.29E+000	1.18E+000	1.37E-017	7.35E-002	3.92E-004	5.94E-001	4.37E-015
1.6	1.38E-002	1.38E-002	2.28E+000	1.18E+000	1.56E-017	7.20E-002	3.85E-004	5.85E-001	4.39E-015
1.7	1.45E-002	1.45E-002	2.27E+000	1.18E+000	1.76E-017	7.06E-002	3.78E-004	5.77E-001	4.41E-015
1.8	1.53E-002	1.53E-002	2.25E+000	1.17E+000	1.98E-017	6.91E-002	3.72E-004	5.68E-001	4.44E-015
2	1.67E-002	1.67E-002	2.23E+000	1.16E+000	2.45E-017	6.63E-002	3.59E-004	5.52E-001	4.49E-015

Les résultats peuvent être exportés :



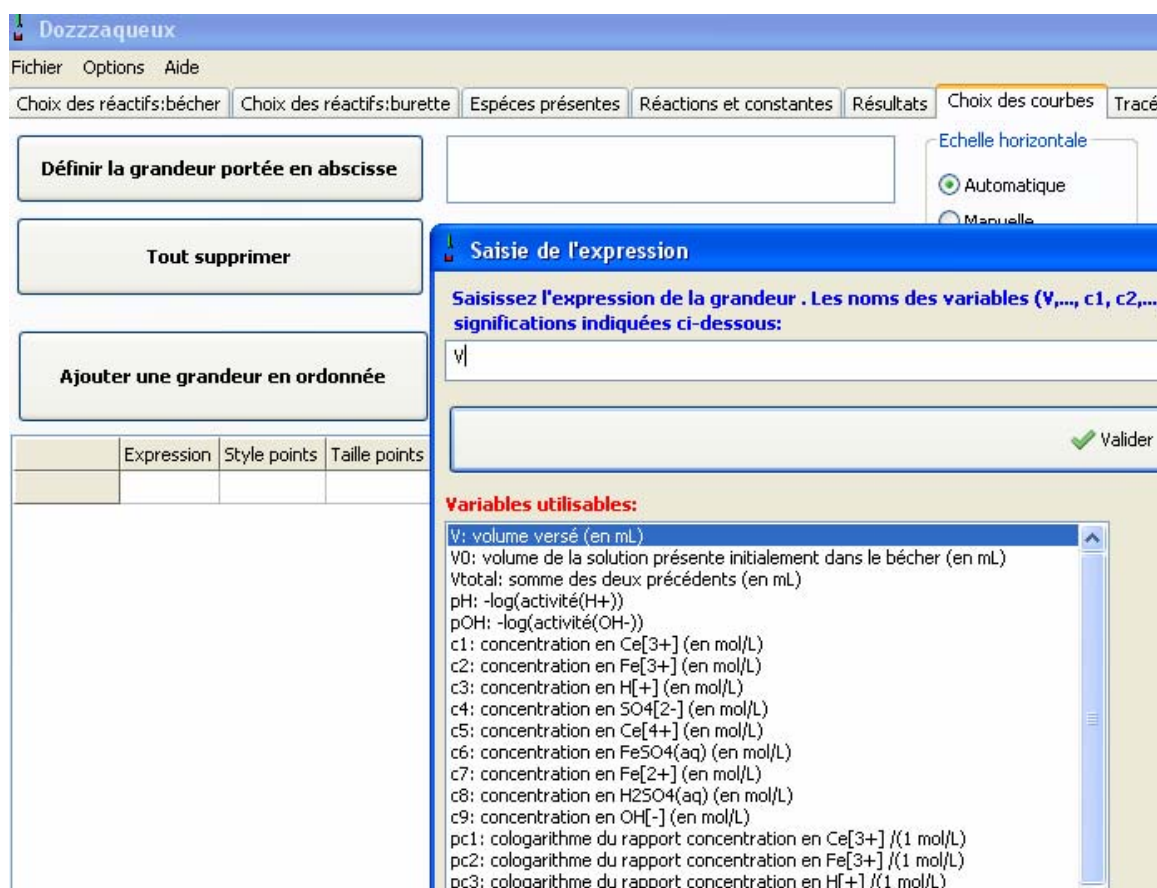
sous la forme d'un fichier texte (.txt) ou sous un fichier Regressi (.rw3)

Sélectionner le tracé de courbes :



## 5. Représentation graphique

On choisit le volume versé, noté  $V$ , comme grandeur en abscisse :

The screenshot shows the "Dozzaqueux" software interface. At the top, there is a menu bar with "Fichier", "Options", and "Aide". Below it is a toolbar with buttons for "Choix des réactifs:bécher", "Choix des réactifs:burette", "Espèces présentes", "Réactions et constantes", "Résultats", "Choix des courbes", and "Tracé". The "Choix des courbes" button is highlighted. On the left side, there are three buttons: "Définir la grandeur portée en abscisse", "Tout supprimer", and "Ajouter une grandeur en ordonnée". The main area is divided into two panels. The top panel, titled "Saisie de l'expression", contains a text input field with "V" entered and a "Valider" button with a green checkmark. Below this is a list of "Variables utilisables" with a scroll bar. The list includes: 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 Ce[3+] (en mol/L), c2: concentration en Fe[3+] (en mol/L), c3: concentration en H[+] (en mol/L), c4: concentration en SO4[2-] (en mol/L), c5: concentration en Ce[4+] (en mol/L), c6: concentration en FeSO4(aq) (en mol/L), c7: concentration en Fe[2+] (en mol/L), c8: concentration en H2SO4(aq) (en mol/L), c9: concentration en OH[-] (en mol/L), pc1: cologarithme du rapport concentration en Ce[3+] / (1 mol/L), pc2: cologarithme du rapport concentration en Fe[3+] / (1 mol/L), pc3: cologarithme du rapport concentration en H[+] / (1 mol/L). At the bottom left, there is a table with columns for "Expression", "Style points", and "Taille points".

Puis on ajoute la (ou les) grandeur(s) souhaitées en ordonnées. On choisit de prendre en ordonnée la différence entre le potentiel redox du couple du cérium, **Po1** et le potentiel de l'électrode au calomel, **ECS** (référence).

**Saisie de l'expression**

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

Po1-ECS

✓ Valider

**Variables utilisables:**

c2: concentration en Fe[3+] (en mol/L)  
 c3: concentration en H[+] (en mol/L)  
 c4: concentration en SO4[2-] (en mol/L)  
 c5: concentration en Ce[4+] (en mol/L)  
 c6: concentration en FeSO4(aq) (en mol/L)  
 c7: concentration en Fe[2+] (en mol/L)  
 c8: concentration en H2SO4(aq) (en mol/L)  
 c9: concentration en OH[-] (en mol/L)  
 pc1: cologarithme du rapport concentration en Ce[3+] /(1 mol/L)  
 pc2: cologarithme du rapport concentration en Fe[3+] /(1 mol/L)  
 pc3: cologarithme du rapport concentration en H[+] /(1 mol/L)  
 pc4: cologarithme du rapport concentration en SO4[2-] /(1 mol/L)  
 pc5: cologarithme du rapport concentration en Ce[4+] /(1 mol/L)  
 pc6: cologarithme du rapport concentration en FeSO4(aq) /(1 mol/L)  
 pc7: cologarithme du rapport concentration en Fe[2+] /(1 mol/L)  
 pc8: cologarithme du rapport concentration en H2SO4(aq) /(1 mol/L)  
 pc9: cologarithme du rapport concentration en OH[-] /(1 mol/L)  
 gamma: conductivité de la solution en S/m  
 Po1: potentiel redox du couple Ce[3+] / Ce[4+]  
 Po2: potentiel redox du couple Fe[2+] / Fe[3+]  
 ECS: potentiel électrode de référence au calomel saturé=0,246V

On peut choisir de modifier le style des points (croix), leur taille (3), leur couleur (bleu), on peut choisir de relier les points entre eux (cliquer sur NON pour le transformer en OUI) et de modifier l'épaisseur du trait (de 1 à 20).

	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	$E(\text{Ce}[3+]/\text{Ce}[4+])-\text{ECS}$	.	2		NON	1	Gauche

**Style des points**

Style

Disque

Croix (x)

Cercle

Croix (+)

OK

On choisit également de représenter la différence de potentiel entre le potentiel redox du couple Fe[2+] / Fe[3+] et le potentiel de l'électrode de calomel : **Po2-ECS**,

**Saisie de l'expression**

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

Po2-ECS

✓ Valider

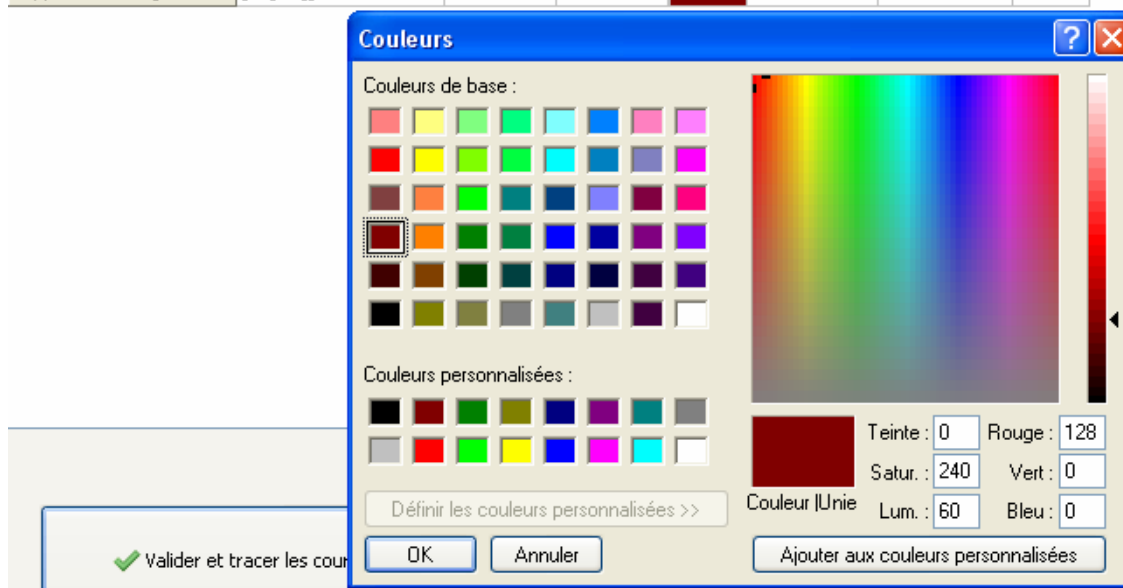
Po1: potentiel redox du couple Ce[3+] / Ce[4+]  
 Po2: potentiel redox du couple Fe[2+] / Fe[3+]  
 ECS: potentiel électrode de référence au calomel saturé=0,246V  
 ESM: potentiel électrode de référence au sulfate mercurieux=0,6513V

On choisit de joindre les points (courbe de couleur rouge) :

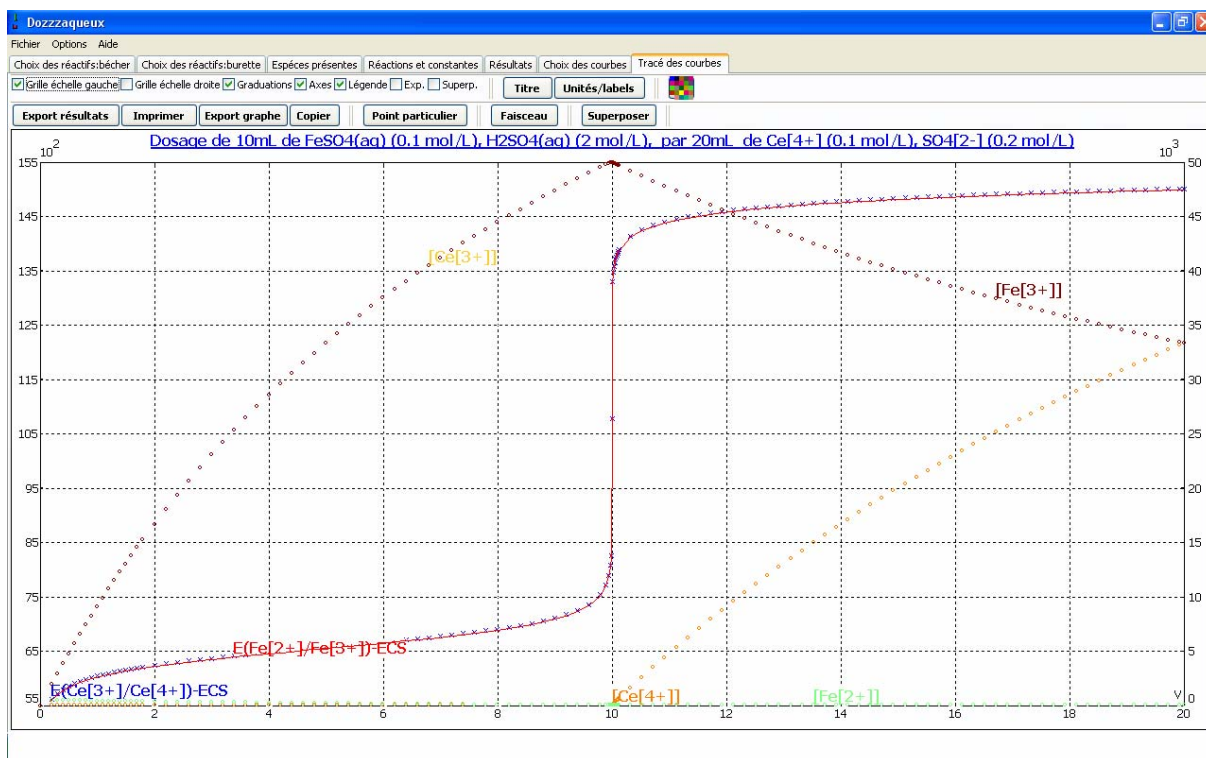
	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	E(Ce[3+]/Ce[4+])-ECS	x	3	Blue	NON	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	E(Fe[2+]/Fe[3+])-ECS	.	1	Red	OUI	1	Gauche

On complète le graphe avec les concentrations des réactifs et des produits de la réaction étudiée ; on choisit également de modifier les couleurs en cliquant sur la couleur choisie par défaut et en sélectionnant dans la palette la couleur souhaitée :

	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	E(Ce[3+]/Ce[4+])-ECS	x	3	Blue	NON	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	E(Fe[2+]/Fe[3+])-ECS	.	1	Red	OUI	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	[Ce[3+]]	o	2	Yellow	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Ce[4+]]	o	2	Orange	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Fe[2+]]	o	2	Light Green	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Fe[3+]]	o	2	Brown	NON	1	Droite



Attention à bien mettre **DROITE** dans la **COLONNE ECHELLE** pour distinguer les échelles de potentiel et de concentration. Cocher la case **LEGENDE** afin de pouvoir identifier facilement les espèces sur le graphe :

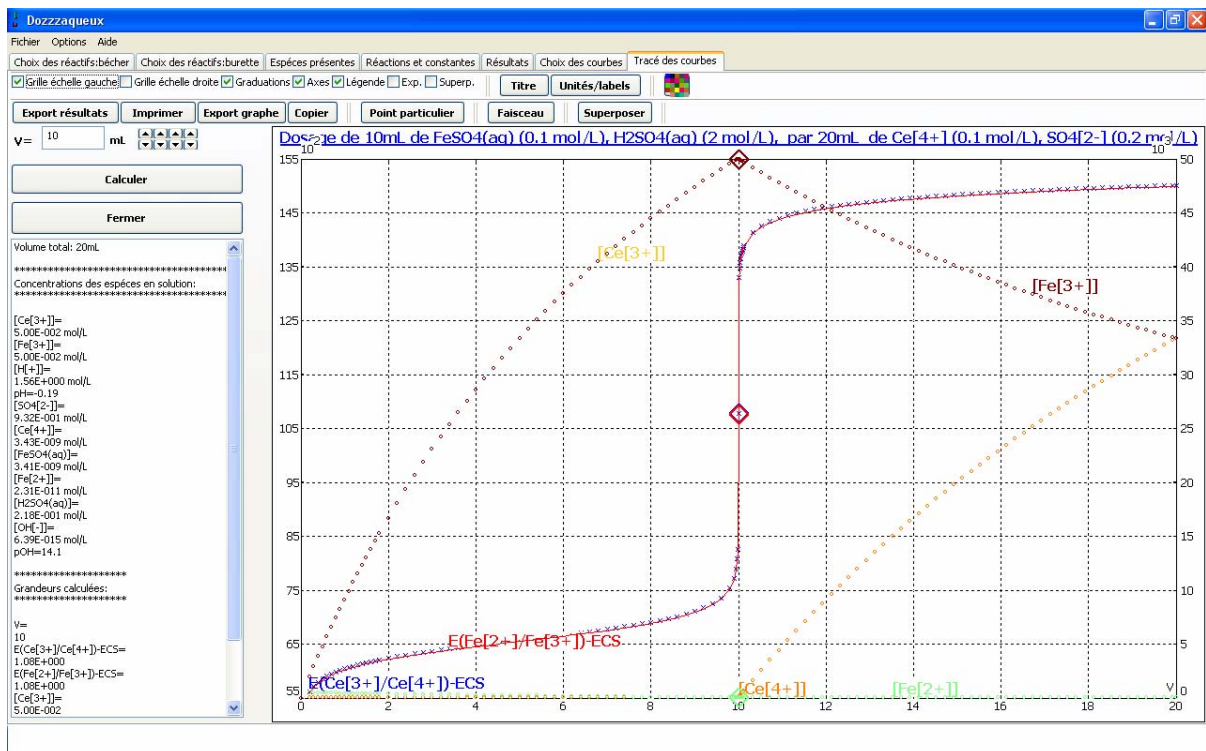


En cliquant sur :

**Point particulier**

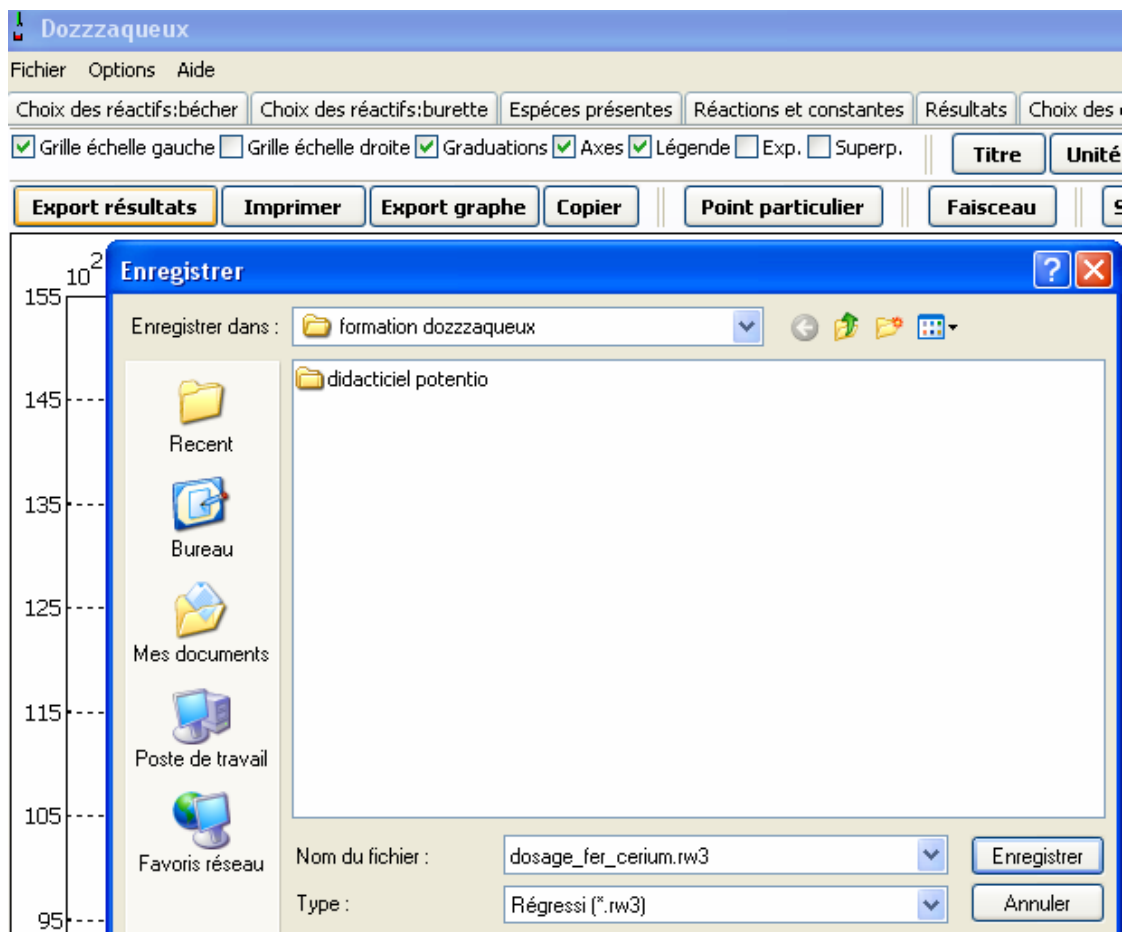
on peut obtenir les coordonnées de certains points sur le graphe, il est également possible d'obtenir les résultats de calculs pour n'importe quel volume V (demi équivalence par exemple avec V = 5 mL) à l'aide du bouton CALCULER :

V =  mL



## 6. Exporter les données dans Regressi

Cliquer sur Export résultats, enregistrer le fichier sous un nom explicite et ne pas oublier de taper l'extension .rw3 à la suite du nom choisi (ici dosage\_fer\_cerium.rw3).

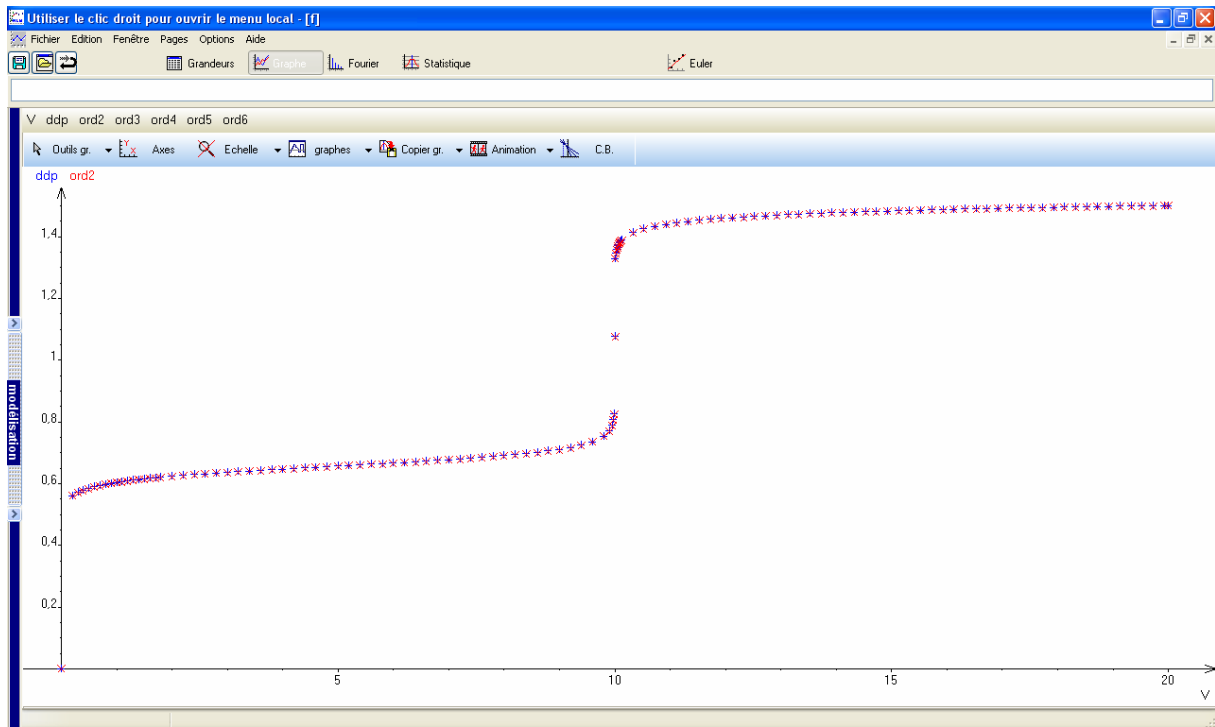


## 7. Détermination de l'équivalence avec le logiciel Regressi

Ouvrir le fichier dosage\_fer\_cerium.rw3 avec le bloc note afin de remplacer les noms de l'ordonnée (ordi) et de l'abscisse (abscisse) par ddp et V puis enregistrer le fichier.

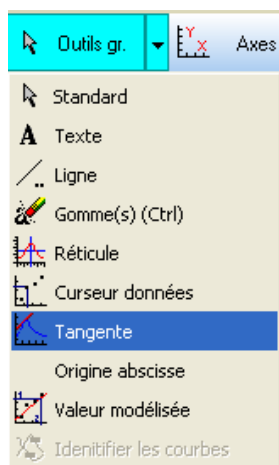
```
dosage_fer_cerium - Bloc-notes
Fichier Edition Format Affichage ?
EVARISTE REGRESSI WINDOWS 1.0
£7 NOM VAR
V
ddp
ord2
ord3
ord4
ord5
ord6
```


Ouvrir le fichier dosage\_fer\_cerium.rw3 avec le logiciel Regressi.

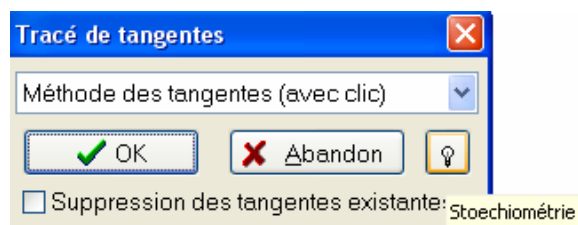


On ne retient que la courbe donnant l'évolution de la différence de potentiel (ddp) en fonction du volume versé V. Pour cela, cliquer sur **AXES**, sélectionner l'onglet **ord2=f(V)** et cliquer sur supprimer.

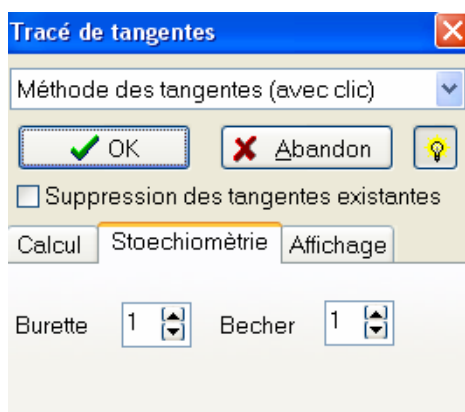
On choisit la méthode des tangentes pour déterminer le point équivalent :



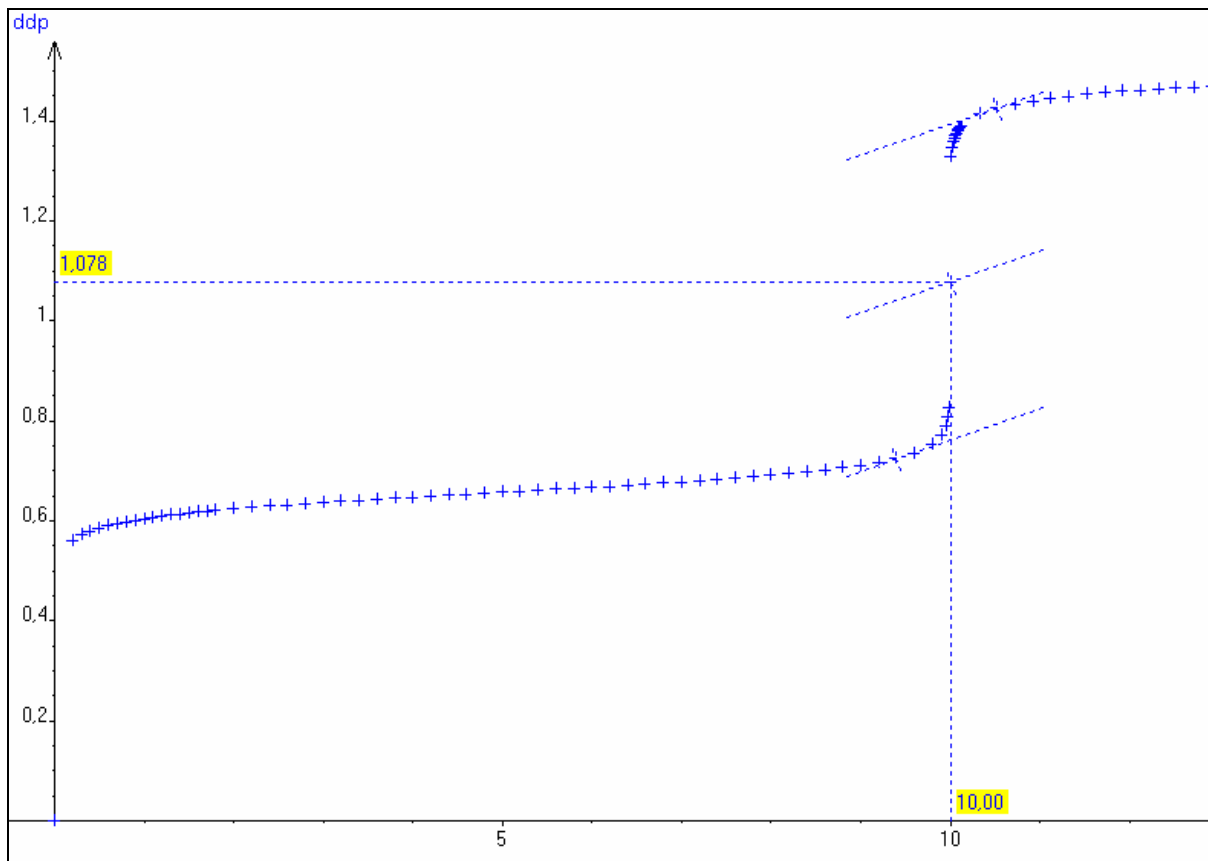
Cliquer sur le bouton stœchiométrie  :



La réaction suivie est  $\text{Fe}^{2+}(\text{aq}) + \text{Ce}^{4+}(\text{aq}) = \text{Fe}^{3+}(\text{aq}) + \text{Ce}^{3+}(\text{aq})$ , d'où le coefficient 1 pour burette (stœchiométrie pour  $\text{Ce}^{4+}$ ) et 1 pour bécher (stœchiométrie pour  $\text{Fe}^{2+}$ ) :

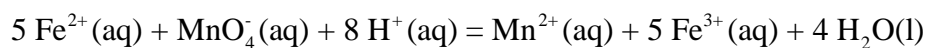


Le résultat obtenu est le suivant :



## ***B. Autre exemple : titrage d'une solution de fer(II) par une solution de permanganate de potassium***

La réaction étudiée sera l'oxydation des ions fer(II) par les ions permanganate :



Une prise d'essai de 10 mL d'une solution de sulfate de fer(II) à  $50 \text{ mmol.L}^{-1}$  est titrée par une solution de permanganate de potassium à  $10 \text{ mmol.L}^{-1}$ . On travaille en milieu sulfurique en rajoutant 20 mL d'acide sulfurique à  $1 \text{ mol.L}^{-1}$ .

Pour le paramétrage, on procède de la même manière qu'au A.

## 1. Paramétrage du contenu du bécher

Dozzaqueux

Fichier Options Aide

Choix des réactifs: bécher Choix des réactifs: burette Esp

**Bécher**

Volume initial= 10 mL

Température= 298 K

**Réactifs choisis:**

	Identifiant	Concentration (mol/L)
Supprimer	H2SO4(aq)	2
Supprimer	FeSO4(aq)	0.05

## 2. Paramétrage du contenu de la burette

Dozzaqueux

Fichier Options Aide

Choix des réactifs: bécher Choix des réactifs: burette

**Burette**

Volume maximal à verser:= 20 mL

**Réactifs choisis:**

	Identifiant	Concentration (mol/L)
Supprimer	MnO4[-]	0.01
Supprimer	K[+]	0.01
Supprimer	H2SO4(aq)	1

## 3. Choix des produits et des réactions

Les espèces retenues sont les suivantes :

- Fe[3+]
- H2O
- H[+]
- K[+]
- Mn[2+]
- O2(aq)
- SO4[2-]
- Fe(OH)2[+]
- Fe(SO4)2[-]
- FeOH[+]
- FeOH[2+]
- FeS2O3(aq)
- FeS2O3[+]
- FeSO4(aq)
- FeSO4[+]
- Fe[2+]
- H2(aq)
- H2O2(aq)
- H2SO4(aq)
- HSO4[-]
- MnO4[-]
- OH[-]

Les équations des réactions retenues pour les calculs sont :

Equation de réaction	log K
$2 \text{H}^{+} + \text{FeSO}_4(\text{aq}) = \text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{SO}_4(\text{aq})$	-3.22
$\text{H}^{+} + \text{FeSO}_4(\text{aq}) = \text{Fe}^{2+} + \text{HSO}_4^{-}$	-0.2
$5 \text{Fe}^{3+} + 4 \text{H}_2\text{O} + \text{Mn}^{2+} = 8 \text{H}^{+} + 5 \text{Fe}^{2+} + \text{MnO}_4^{-}$	-62.7
$\text{H}_2\text{O} = \text{H}^{+} + \text{OH}^{-}$	-14

## 4. Calculs

**Dozzaqueux**

Fichier Options Aide

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

Volume versé (mL)	Fe[3+] Conc.(mol/L)	H[+] Conc.(mol/L)	K[+] Conc.(mol/L)	Mn[2+] Conc.(mol/L)	FeSO4(aq) Conc.(mol/L)	Fe[2+] Conc.(mol/L)	H2SO4(aq) Conc.(mol/L)	HSO4[-] Conc.(mol/L)	MnO4[-] Conc.(mol/L)	OH[-] Conc.(mol/L)
0	0.00E+000	1.98E+000	0.00E+000	0.00E+000	3.09E-002	1.91E-002	3.81E-003	2.02E+000	0.00E+000	5.06E-015
0.2	9.80E-004	1.96E+000	1.96E-004	1.96E-004	2.97E-002	1.84E-002	3.73E-003	2.0E+000	Traces	5.11E-015
0.4	1.92E-003	1.94E+000	3.85E-004	3.85E-004	2.85E-002	1.76E-002	3.65E-003	1.98E+000	Traces	5.17E-015
0.6	2.83E-003	1.92E+000	5.66E-004	5.66E-004	2.74E-002	1.69E-002	3.58E-003	1.96E+000	Traces	5.22E-015
0.8	3.70E-003	1.90E+000	7.41E-004	7.41E-004	2.64E-002	1.62E-002	3.52E-003	1.94E+000	Traces	5.27E-015
1	4.55E-003	1.88E+000	9.09E-004	9.09E-004	2.53E-002	1.56E-002	3.45E-003	1.93E+000	Traces	5.32E-015
1.2	5.36E-003	1.86E+000	1.07E-003	1.07E-003	2.43E-002	1.50E-002	3.39E-003	1.91E+000	Traces	5.37E-015
1.4	6.14E-003	1.84E+000	1.23E-003	1.23E-003	2.34E-002	1.43E-002	3.34E-003	1.89E+000	Traces	5.42E-015
1.6	6.90E-003	1.83E+000	1.38E-003	1.38E-003	2.24E-002	1.38E-002	3.28E-003	1.88E+000	Traces	5.47E-015
1.8	7.63E-003	1.81E+000	1.53E-003	1.53E-003	2.15E-002	1.32E-002	3.23E-003	1.87E+000	Traces	5.52E-015
2	8.33E-003	1.80E+000	1.67E-003	1.67E-003	2.07E-002	1.27E-002	3.17E-003	1.85E+000	Traces	5.57E-015
2.2	9.02E-003	1.78E+000	1.80E-003	1.80E-003	1.98E-002	1.21E-002	3.13E-003	1.84E+000	Traces	5.61E-015
2.4	9.68E-003	1.77E+000	1.94E-003	1.94E-003	1.90E-002	1.16E-002	3.08E-003	1.82E+000	Traces	5.66E-015
2.6	1.03E-002	1.75E+000	2.06E-003	2.06E-003	1.82E-002	1.11E-002	3.03E-003	1.81E+000	Traces	5.71E-015
2.8	1.09E-002	1.74E+000	2.19E-003	2.19E-003	1.75E-002	1.07E-002	2.99E-003	1.80E+000	Traces	5.75E-015
3	1.15E-002	1.73E+000	2.31E-003	2.31E-003	1.67E-002	1.02E-002	2.95E-003	1.79E+000	Traces	5.79E-015
3.2	1.21E-002	1.71E+000	2.42E-003	2.42E-003	1.60E-002	9.74E-003	2.91E-003	1.78E+000	Traces	5.84E-015
3.4	1.27E-002	1.70E+000	2.54E-003	2.54E-003	1.53E-002	9.31E-003	2.87E-003	1.77E+000	Traces	5.88E-015

## 5. Représentation graphique

**Dozzaqueux**

Fichier Options Aide

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

**Définir la grandeur portée en abscisse**    V

**Tout supprimer**

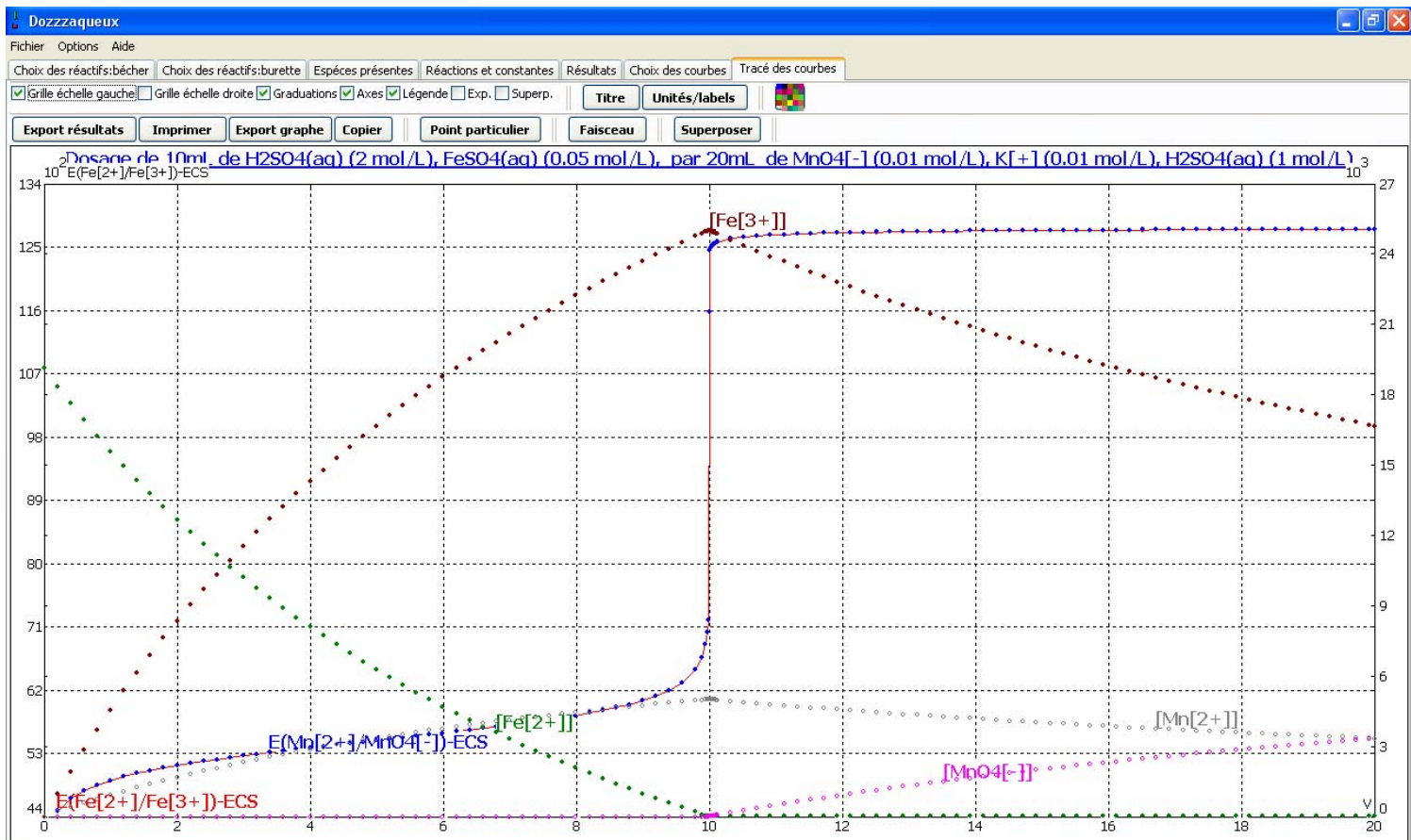
**Ajouter une grandeur en ordonnée**

Echelle horizontale  
 Automatique  
 Manuelle

Echelle verticale gauche  
 Automatique  
 Manuelle    Ymin:=  
 Ymax:=

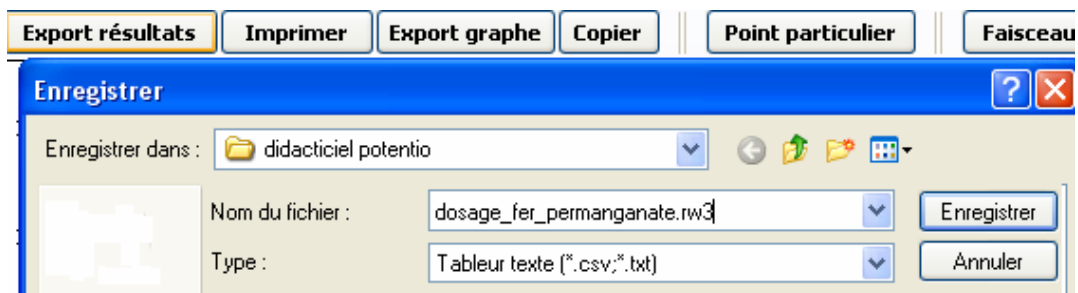
Echelle verticale droit  
 Automatique  
 Manuelle

	Expression	Style points	Taille points	Couleur	Joindre points	Epaisseur trait	Echelle
Supprimer cette grandeur	E(Fe[2+]/Fe[3+])-ECS	.	2	Red	OUI	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	E(Mn[2+]/MnO4[-])-ECS	.	2	Blue	NON	1	Gauche
Supprimer cette grandeur	[Fe[2+]]	.	2	Green	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Fe[3+]]	.	2	Brown	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[MnO4[-]]	o	2	Magenta	NON	1	Droite
Supprimer cette grandeur	[Mn[2+]]	o	2	Grey	NON	1	Droite



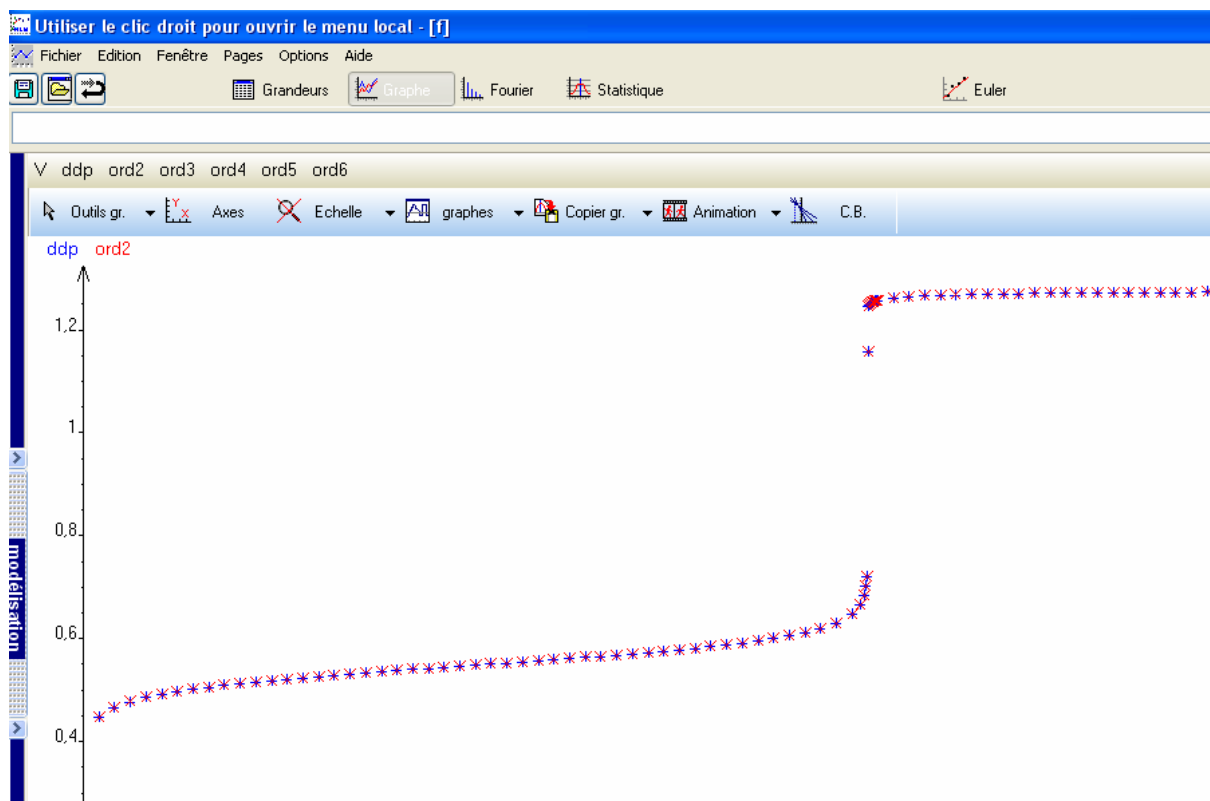
## 6. Exporter les données dans Regressi

Enregistrement du fichier à exporter

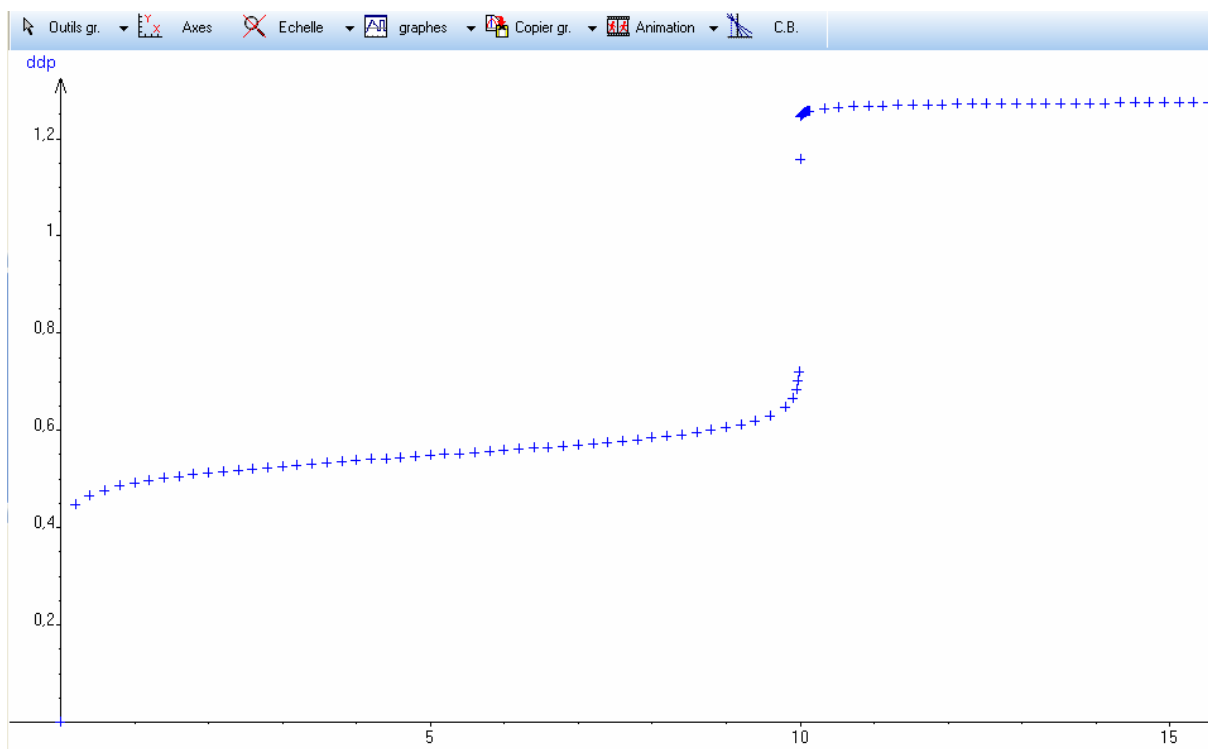


Modification du nom de l'ordonnée et de l'abscisse du graphe exporté : l'abscisse devient **V** et **ord1** devient **ddp**.

```
dosage_fer_permanganate - Bloc-notes
Fichier Edition Format Affichage ?
EVARISTE REGRESSI WINDOWS 1.0
£7 NOM VAR
V
ddp
ord2
ord3
ord4
ord5
ord6
£7 GENRE VAR
```

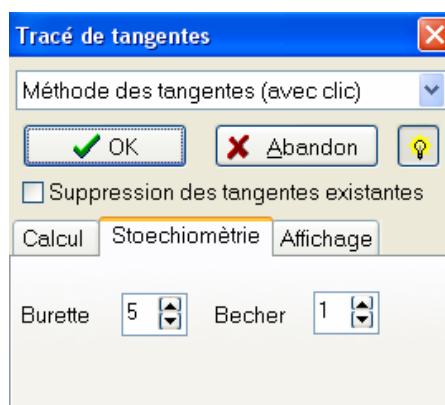


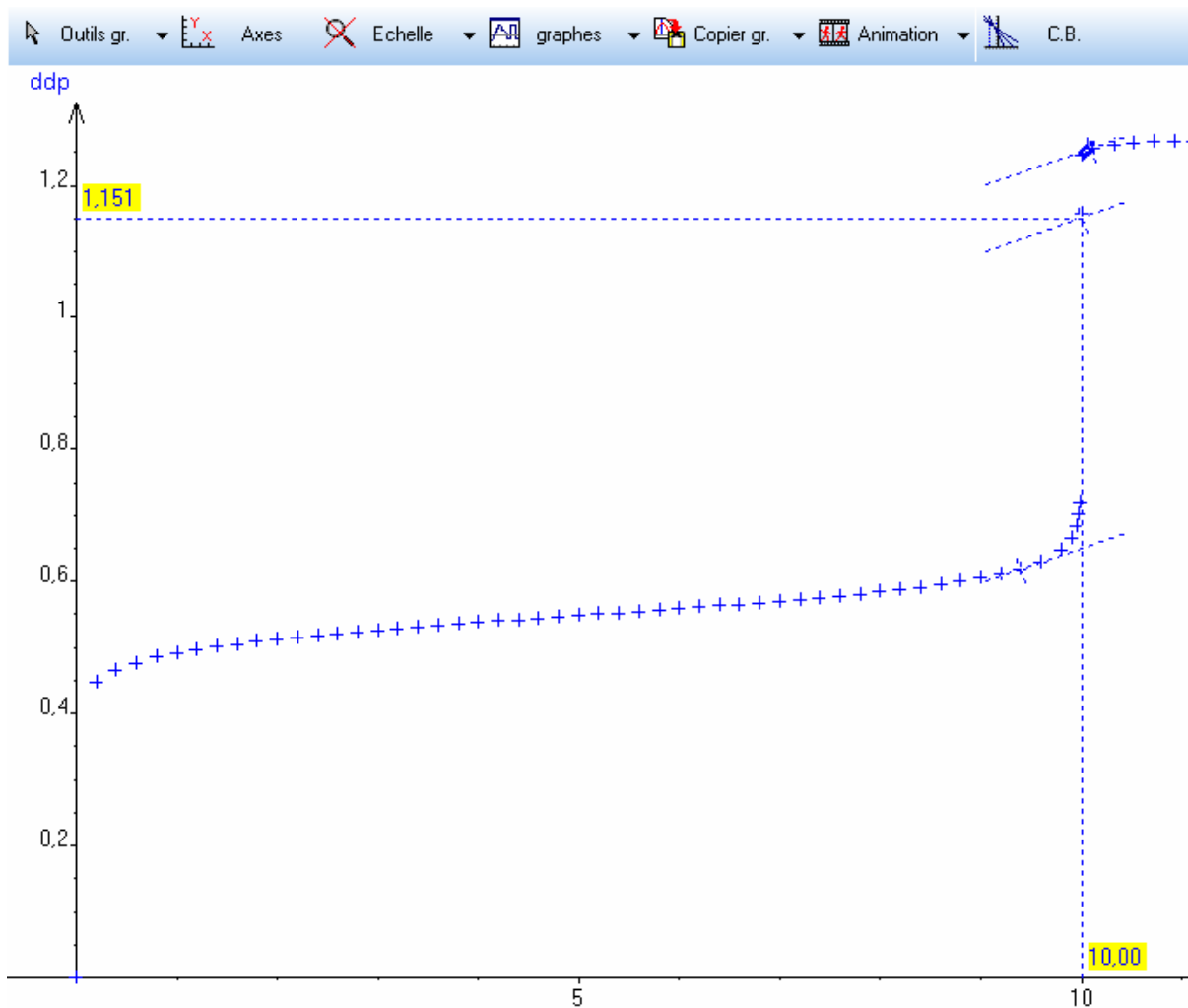
Après suppression de la courbe ord2 = f(V), on obtient :



## 7. Détermination de l'équivalence avec le logiciel Regressi

Utilisation de la méthode des tangentes en tenant compte du nombre d'électrons échangé par chaque réactif : burette ( $\text{MnO}_4^-$ ) : 5, bécher ( $\text{Fe}^{2+}$ ) : 1.





Les coordonnées du point équivalent sont :

- $V = 10,0 \text{ mL}$
- $\text{ddp} = 1,151 \text{ V}$

Ces valeurs correspondent bien au point particulier identifié sous Dozzaqueux.

V= 10 mL

Calculer

Fermer

Volume total: 20mL  
\*\*\*\*\*  
Concentrations des espèces en solution:  
\*\*\*\*\*  
[Fe[3+]]=  
2.50E-002 mol/L  
[H[+]]=  
1.43E+000 mol/L  
pH=-0.15  
[K[+]]=  
5.00E-003 mol/L  
[Mn[2+]]=  
5.00E-003 mol/L  
[FeSO4(aq)]=  
7.84E-013 mol/L  
[Fe[2+]]=  
4.66E-013 mol/L  
[H2SO4(aq)]=  
2.08E-003 mol/L  
[HSO4[-]]=  
1.52E+000 mol/L  
[MnO4[-]]=  
2.50E-013 mol/L  
[OH[-]]=  
6.98E-015 mol/L  
pOH=14.1  
\*\*\*\*\*  
Grandeurs calculées:  
\*\*\*\*\*  
V=  
10  
E(Fe[2+]/Fe[3+])-ECS=  
1.16E+000  
E(Mn[2+]/MnO4[-])-ECS=  
1.16E+000

