

# Utilisation d'un tableur dans l'exploitation des courbes de dosage spectrophotométrique.

A METHODE DE LA GAMME D'ETALONNAGE.....	1
1. Saisie des valeurs .....	1
2. Tracé de la gamme d'étalonnage .....	2
3. Modélisation de la courbe : régression linéaire .....	6
4. Utilisation de la gamme d'étalonnage pour déterminer la concentration de la solution à doser.....	9
B METHODE DES AJOUTS DOSES .....	13

## A. METHODE DE LA GAMME D'ETALONNAGE

### 1. Saisie des valeurs

#### CONSEIL

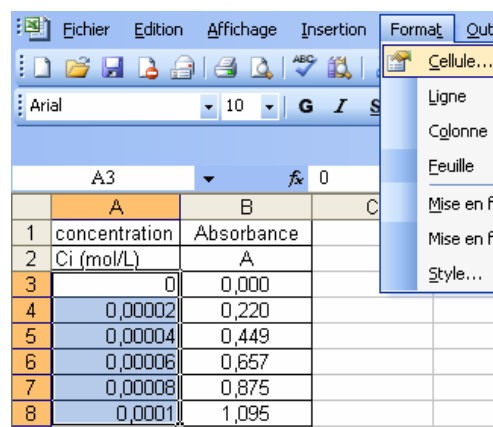
*Les valeurs de  $C_i$  doivent être calculées pendant la réalisation de la manipulation afin d'exploiter les résultats expérimentaux immédiatement après la réalisation des mesures. Cela permet de refaire une fiole sans trop de perte de temps si cela s'avère nécessaire.*

Construire un tableau de valeurs en mentionnant la nature des grandeurs et leurs unités

#### ATTENTION !

- Penser à gérer correctement le mode d'affichage des nombres saisis.
- Sélectionner les valeurs de concentration et choisir le format scientifique avec 2 décimales.
- Sélectionner les valeurs des absorbances et choisir le format Nombre avec 3 décimales.

Sélectionner les valeurs et cliquer sur la commande **FORMAT / CELLULE**.

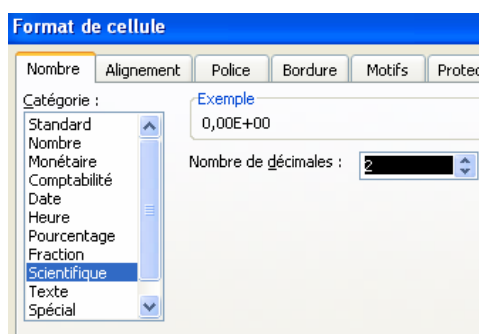


The screenshot shows a spreadsheet with the following data:

	A	B	C
1	concentration	Absorbance	
2	$C_i$ (mol/L)	A	
3	0	0,000	
4	0,00002	0,220	
5	0,00004	0,449	
6	0,00006	0,657	
7	0,00008	0,875	
8	0,0001	1,095	

The context menu is open over the 'Absorbance' column, showing options: Ligne, Colonne, Feuille, Mise en f, Mise en f, Style...

Sélectionner **SCIENTIFIQUE** et ajuster le **nombre de décimales à 2**.




De même choisir **NOMBRE** et **3 DECIMALES** pour les valeurs des absorbances. On obtient alors le tableau suivant :

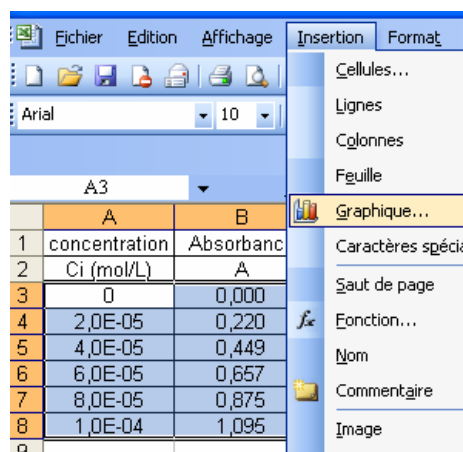
	A	B
1	concentration	Absorbance
2	Ci (mol/L)	A
3	0,0E+00	0,000
4	2,0E-05	0,220
5	4,0E-05	0,449
6	6,0E-05	0,657
7	8,0E-05	0,875
8	1,0E-04	1,095
9		
18		

## 2. Tracé de la gamme d'étalonnage

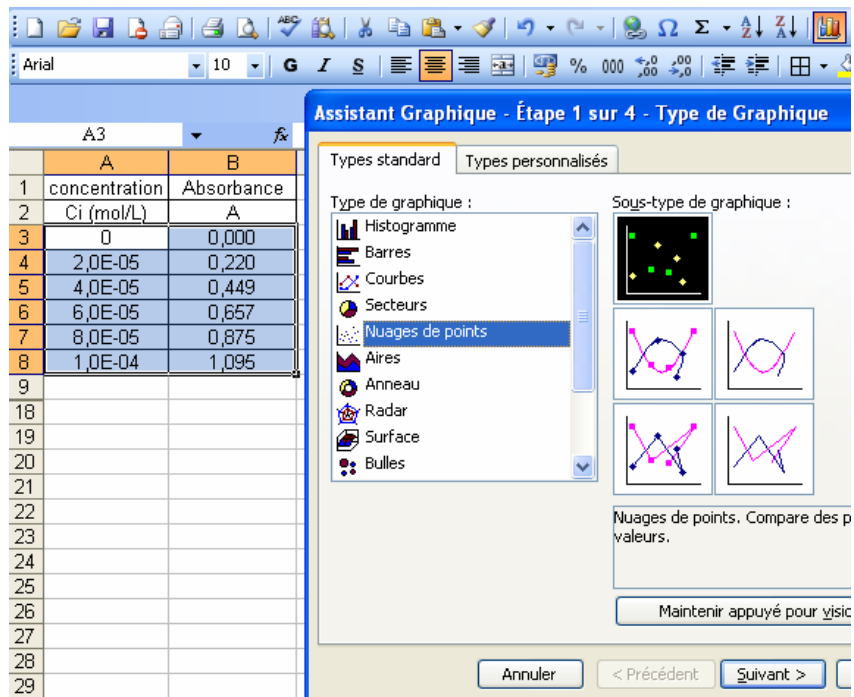
Sélectionner les valeurs expérimentales dans le tableau.

	A	B
1	concentration	Absorbance
2	Ci (mol/L)	A
3	0	0,000
4	2,0E-05	0,220
5	4,0E-05	0,449
6	6,0E-05	0,657
7	8,0E-05	0,875
8	1,0E-04	1,095
9		

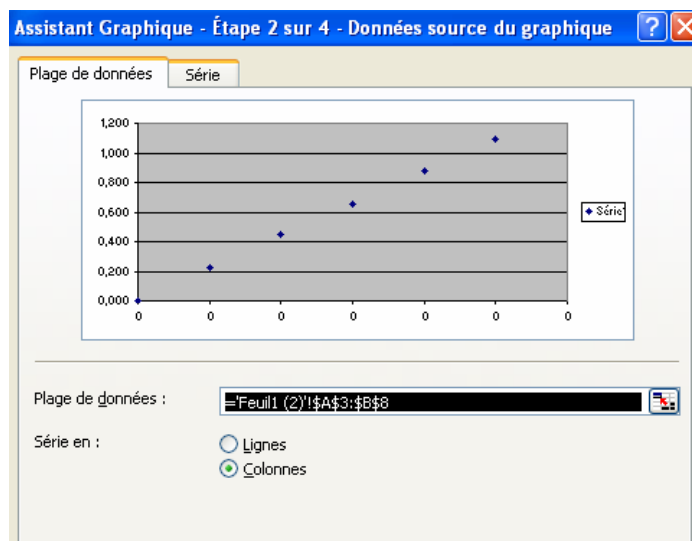
Lancer l'**assistant graphique** avec le bouton  ou par la commande **INSERTION / GRAPHIQUE**.



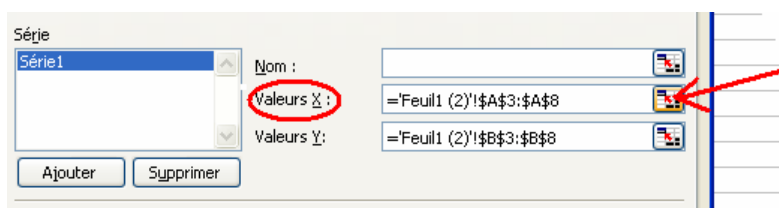
La boîte de dialogue ci-dessous apparaît. Choisir le type de graphique **NUAGES DE POINTS**, et le sous-type **POINTS NON RELIES**.




Cliquer sur le bouton **SUIVANT**.

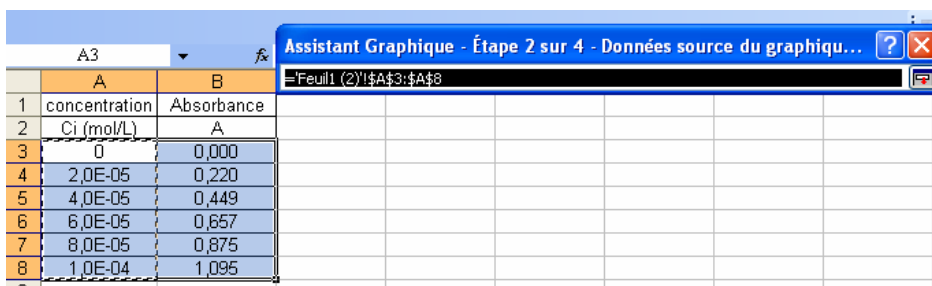


Choisir **L'ONGLET SERIE** afin de pouvoir vérifier les adresses des grandeurs prises pour abscisse et ordonnée.




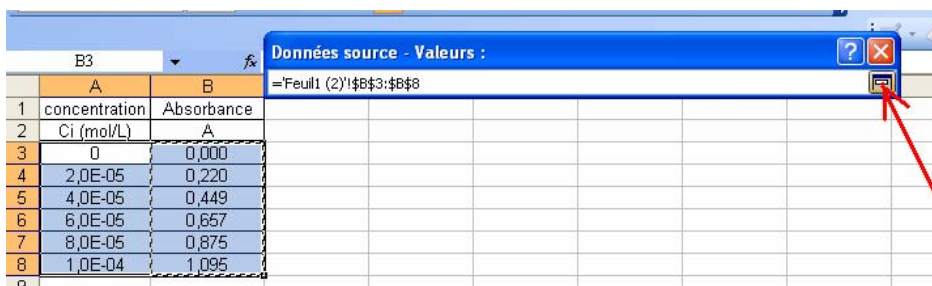
**VALEURS X** = sont les valeurs mises en abscisses. Ici ce sont les valeurs dont les cellules sont comprises entre A3 et A8. En cliquant sur le bouton , on vérifie que les valeurs prises pour abscisses sont les valeurs de concentration  $C_i$ .

Si les adresses sélectionnées doivent être modifiées, il suffit de sélectionner celles souhaitées avec la souris (la sélection nouvelle apparaît en pointillé et les adresses figurent dans le cadre **ASSISTANT GRAPHIQUE – Etape 2 sur 4**).

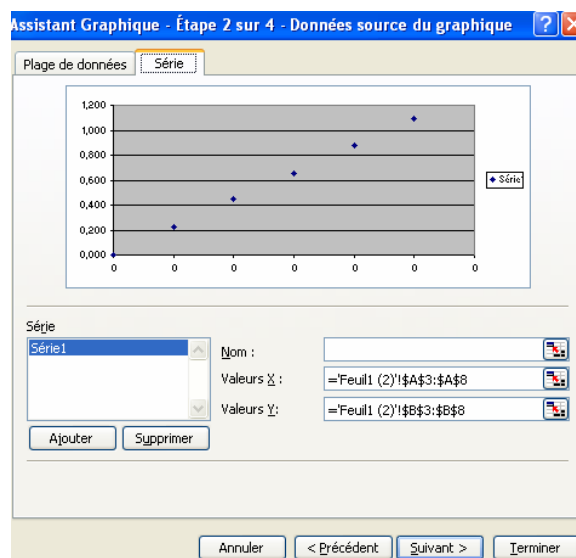


	A	B
1	concentration	Absorbance
2	$C_i$ (mol/L)	A
3	0	0,000
4	2,0E-05	0,220
5	4,0E-05	0,449
6	6,0E-05	0,657
7	8,0E-05	0,875
8	1,0E-04	1,095

On réitère l'opération pour les **VALEURS Y** = valeurs prises pour ordonnée. Pour valider son choix et retourner dans l'onglet **SERIE**, il suffit de cliquer sur le bouton  situé en bout de ligne du cadre **ASSISTANT GRAPHIQUE – Etape 2 sur 4**.



Dans l'onglet **SERIE**, cliquer sur suivant.



Plage de données : Série

Série

Nom :

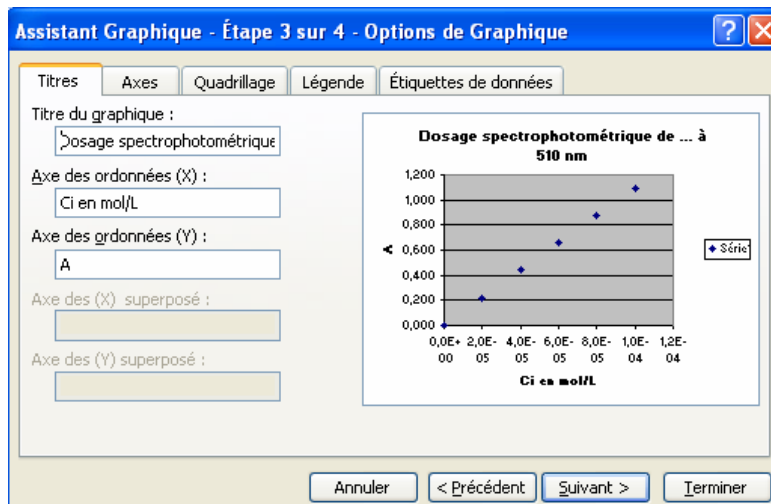
Valeurs X : '=Feuil1 (2)!\$A\$3:\$A\$8'

Valeurs Y : '=Feuil1 (2)!\$B\$3:\$B\$8'

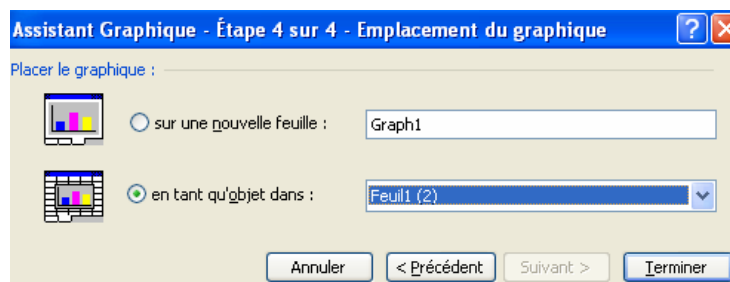
Ajouter Supprimer

Annuler < Précédent Suivant > Terminer

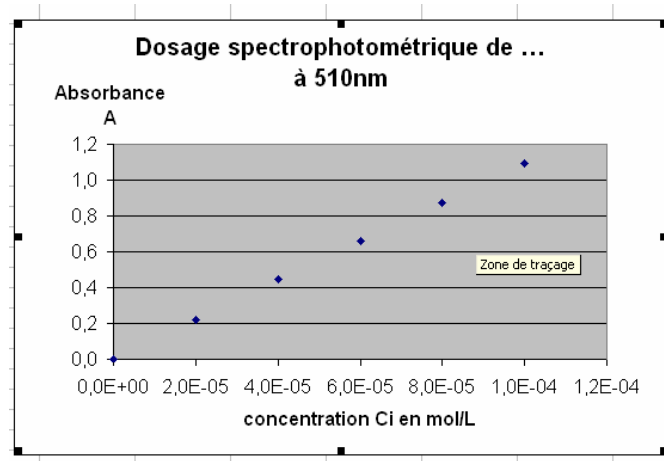
Une nouvelle boîte de dialogue apparaît (Etape 3 sur 4). Compléter le titre du graphique et les noms et unités des grandeurs sur les axes. *Attention à mentionner la longueur d'onde de travail ! Ici 510 nm.*



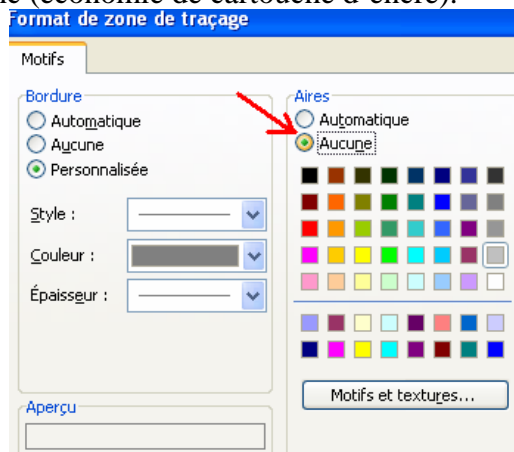
Cliquer sur *SUIVANT* puis choisir dans *l'Etape 4 sur 4* de placer le graphique en tant qu'*objet* dans la feuille de calcul de travail.



On obtient alors le graphique suivant :

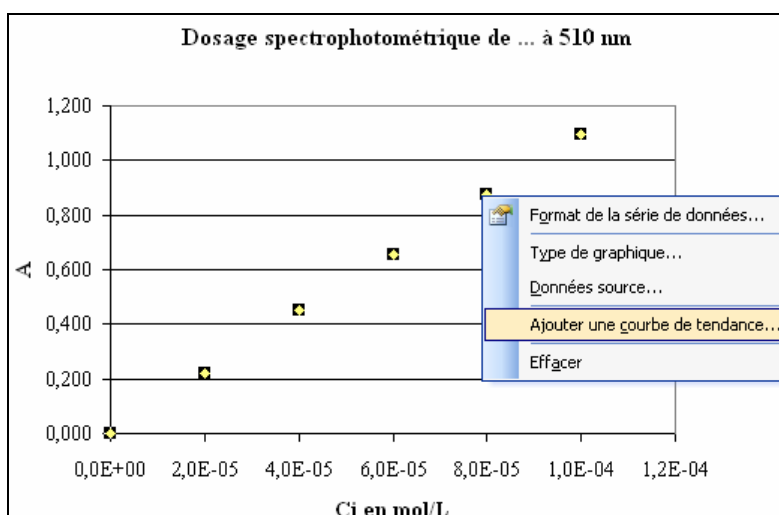


« Double cliquer » dans la **ZONE DE TRAÇAGE** afin de remplacer le fond gris du graphique par un fond blanc (économie de cartouche d'encre).

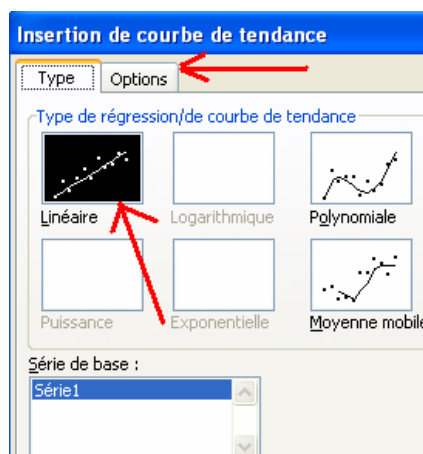


### 3. Modélisation de la courbe : régression linéaire

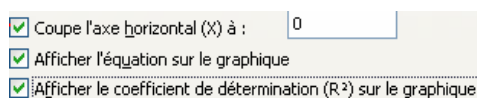
Effectuer un « clic droit » sur l'un des points expérimentaux puis sélectionner **AJOUTER UNE COURBE DE TENDANCE**.



Dans la boîte **INSERTION** de courbe de tendance, choisir **LINEAIRE** puis cliquer sur l'onglet **OPTIONS**.

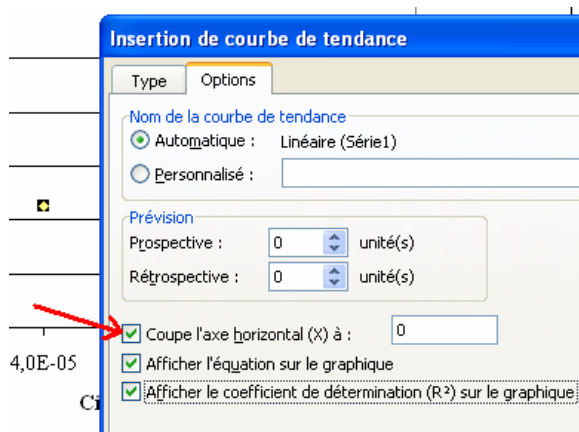


Dans les Options de la courbe de tendance, cocher les trois cases.

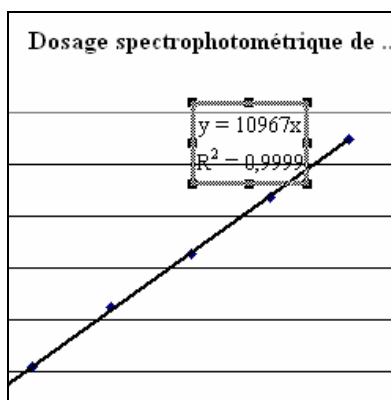


**ATTENTION !**

Ne cocher la première case (COUPE L'AXE HORIZONTAL (X) A 0) que si l'équation recherchée est du type  $Y = aX$  c'est-à-dire que la droite passe par l'origine (0;0). Si cette case n'est pas cochée, la régression linéaire sera du type  $Y = aX + b$ . Dans le cas de la méthode à gamme étalonnage, la fiole F0 fait office de blanc, elle permet de régler le zéro de l'appareil et le point (0;0) constitue un point expérimental.

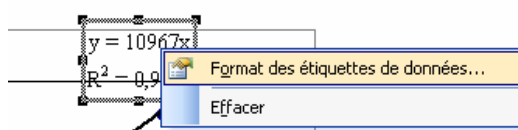


Valider en cliquant sur OK. Il est possible de déplacer l'équation de la droite obtenue : faire apparaître le cadre et « cliquer glisser ».

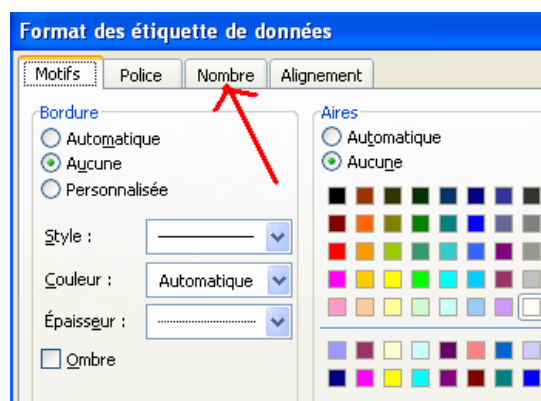


**ATTENTION !**

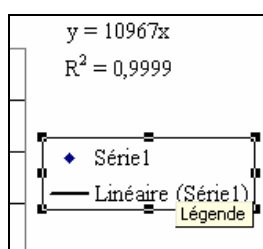
Là encore penser à gérer le mode d'affichage des nombres. Faire apparaître le cadre puis clic droit **FORMAT DES ÉTIQUETTES DE DONNÉES**.



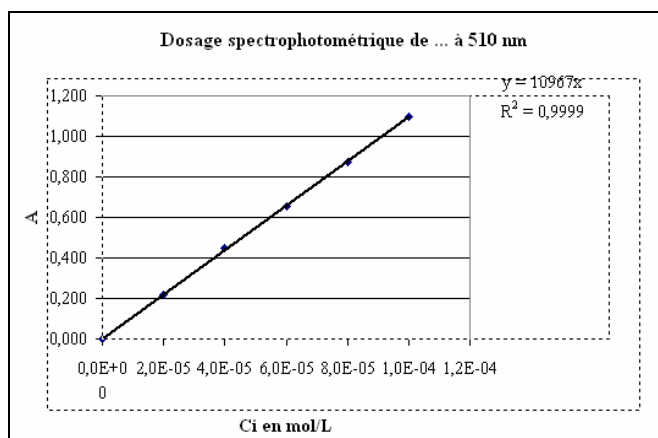
Sélectionner l'ONGLET NOMBRE et procéder comme au 1.



Supprimer la légende puisque ici il n'y a qu'une courbe tracée.

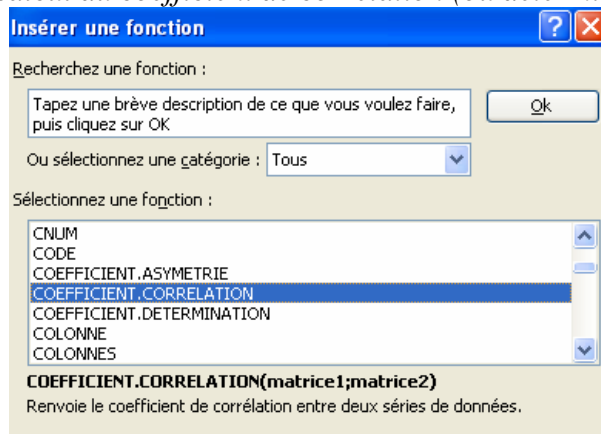


Redimensionner la courbe par un cliquer glisser sur la zone graphique.



## Calcul du coefficient de corrélation $r$ ou du coefficient de détermination $r^2$

Dans la cellule B11, TAPER = puis cliquer sur « fx » et chercher la syntaxe de la fonction permettant le calcul du coefficient de corrélation (ou détermination).



Sélectionner les séries de données A3:A8 et B3:B8.

	A	B	C	D	E
1	concentration	Absorbance			
2	C <sub>i</sub> (mol/L)	A			
3	0,00E+00	0,000			
4	2,0E-05	0,220			
5	4,0E-05	0,449			
6	6,0E-05	0,657			
7	8,0E-05	0,875			
8	1,0E-04	1,095			
9					
10	coefficient de corrélation				
11	r =	0,99994			
12					

Absorbance	
A	
1,2	_____
1,0	_____
0,8	_____

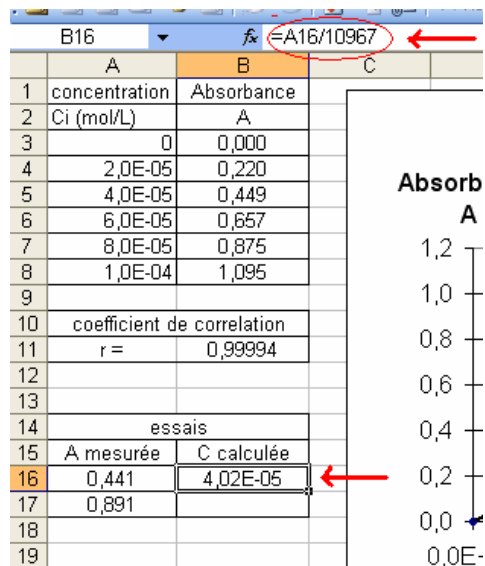
## 4. Utilisation de la gamme d'étalonnage pour déterminer la concentration de la solution à doser

Préparer un tableau pour les essais effectués. Remplir le tableau avec les valeurs des absorbances mesurées pour les essais 1 et 2.

	essais	
	A mesurée	C calculée
17	0,441	
18	0,891	

Il ne reste plus qu'à utiliser l'équation de la droite d'étalonnage pour calculer les valeurs des concentrations C<sub>i</sub> dans chacune des fioles correspondant aux essais 1 et 2.

D'après l'équation de la droite d'étalonnage :  $A = 10967 \times C_i$ . Pour chaque essai, on a mesuré A, on programme donc le calcul de C pour chaque essai par la formule  $C = A/10967$ . Dans la cellule B16, taper = A16/10967, le tableur exécute le calcul et fournit la valeur de C pour l'essai1 (5,16E-06), là encore il convient de gérer au mieux le format d'affichage du nombre (scientifique/2 décimales ici).



Il ne reste plus qu'à tenir compte des éventuelles dilutions et de la fraction X/volume de la fiole où X désigne la prise d'essai de l'essai pour déterminer la concentration cherchée.

Afin de se familiariser avec les calculs à effectuer, on propose d'illustrer l'exploitation des résultats précédents.

**Protocole du dosage des ions ferreux d'une solution de chlorure de ferII (sujet 1 BTS1998)**

**Mode opératoire**

La solution de chlorure ferreux S est environ à  $0,02 \text{ mol.L}^{-1}$

- Préparation d'une solution D à partir de S

Préparer une solution de chlorure de fer D en diluant exactement 10 fois la solution de chlorure de fer S à doser.

- Préparation de la gamme d'étalonnage et de deux échantillons à doser

On dispose d'une solution étalon E en ions fer (II) de concentration voisine de  $1,00 \cdot 10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$  (valeur exacte fournie par le centre d'examen). Conformément au tableau ci-dessous, réaliser une gamme d'étalonnage et deux échantillons à partir de D dans des fioles jaugées de 100 mL.

Fiole	0	1	2	3	4	5	X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>
Solution étalon E (mL)	0	2	4	6	8	10	X <sub>1</sub> =	X <sub>2</sub> =
Solution de chlorure d'hydroxylammonium (mL)	20	20	20	20	20	20	20	20
Solution d'éthanoate de sodium (mL)	20	20	20	20	20	20	20	20
Orthophénantroline (mL)	5	5	5	5	5	5	5	5
Eau déminéralisée	QSP 100 mL							

Mesurer l'absorbance A de chaque solution à 510 nm, en faisant le blanc avec la fiole 0.

Calcul des concentrations C<sub>i</sub> :

$$C_i = \frac{2 \times i \times 1,00 \cdot 10^{-3}}{100} = i \times 2 \cdot 10^{-5} \text{ avec } i = 1, 2, 3, 4 \text{ et } 5.$$

Détermination des volumes X<sub>1</sub> et X<sub>2</sub> des essais :

Les volumes doivent être tels que les concentrations obtenues dans les fioles préparées soient comprises entre C<sub>2</sub> et C<sub>4</sub> (milieu de la gamme) :

$$4 \cdot 10^{-5} \leq \frac{\frac{1}{10} \cdot 0,02 \times X \text{ (mL)}}{100} \leq 8 \cdot 10^{-5} ,$$

la solution (S) ayant une concentration d'environ  $0,02 \text{ mol.L}^{-1}$ . On trouve donc :

$$2 \leq X \text{ (mL)} \leq 4$$

L'étudiant a choisi X<sub>1</sub> = 2,00 mL et X<sub>2</sub> = 4,00 mL.

D16		=B16*100/C16*10			
	A	B	C	D	E
1	concentration	Absorbance			
2	Ci (mol/L)	A			
3	0	0,000			
4	2,0E-05	0,220			
5	4,0E-05	0,449			
6	6,0E-05	0,657			
7	8,0E-05	0,875			
8	1,0E-04	1,095			
9					
10	coefficient de corrélation				
11	r =	0,99994			
12					
13					
14	essais				
15	A mesurée	C calculée	X (mL)	C <sub>s</sub>	
16	0,441	4,02E-05	2	2,011E-02	
17	0,891	8,12E-05	4	2,031E-02	

Précision  $P = 1,5\%$  ; on a donc  $C_s = (0,0202 \pm 0,0003) \text{ mol / L}$

## B. METHODE DES AJOUTS DOSES

### ***Dosage des ions nickel(II) par spectrophotométrie d'absorption moléculaire : méthode des ajouts dosés (sujet 2 BTS 2001).***

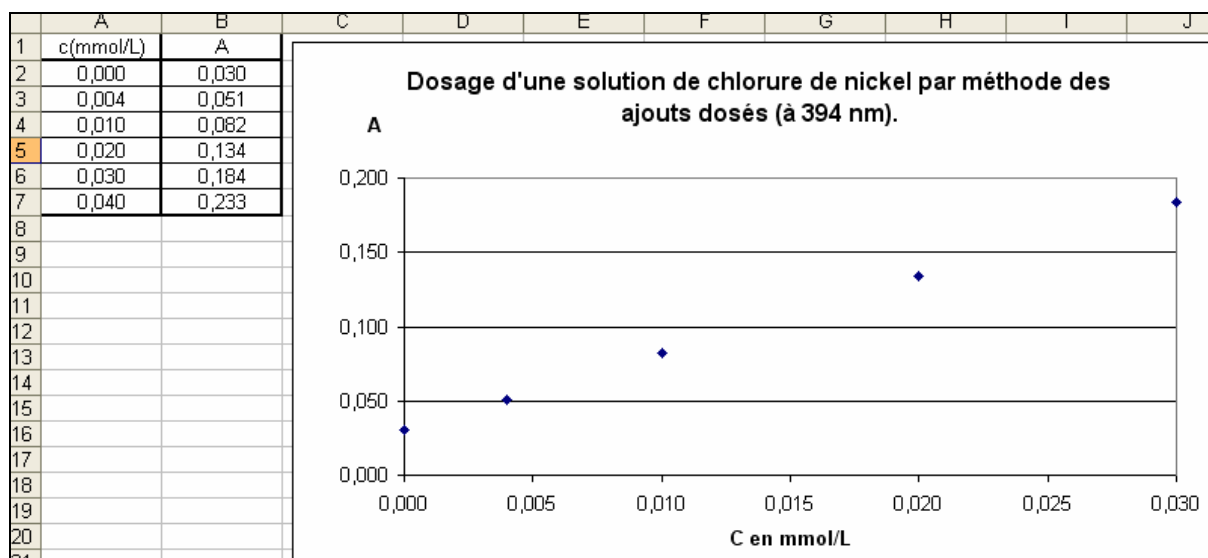
On dispose d'une solution étalon (E) de chlorure de nickel(II) de concentration exacte  $C_E = 0,100 \text{ mol.L}^{-1}$ . Dans une série de six fioles jaugées de 50 mL, introduire :

Numéro de la fiole	1	2	3	4	5	6
Volume de solution étalon (E) en mL	0	2	5	10	15	20
Volume de solution (S) en mL	20	20	20	20	20	20
Volume d'eau	Compléter à 50 mL					

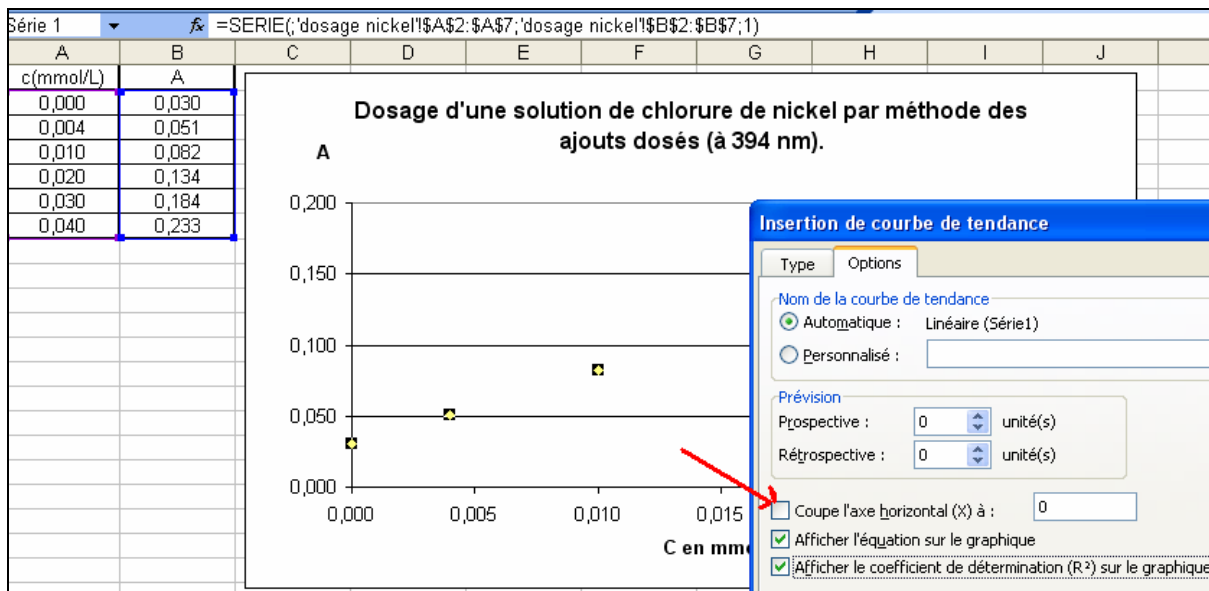
- Se placer à la longueur d'onde  $\lambda = 394 \text{ nm}$ .
- Faire le zéro sur de l'eau distillée.
- Effectuer les mesures d'absorbance A des différentes fioles.
- Calculer la concentration  $C_i$  en ions nickel (II) provenant de la solution (E) par

$$C_i = \frac{0,100 \times E}{50}$$

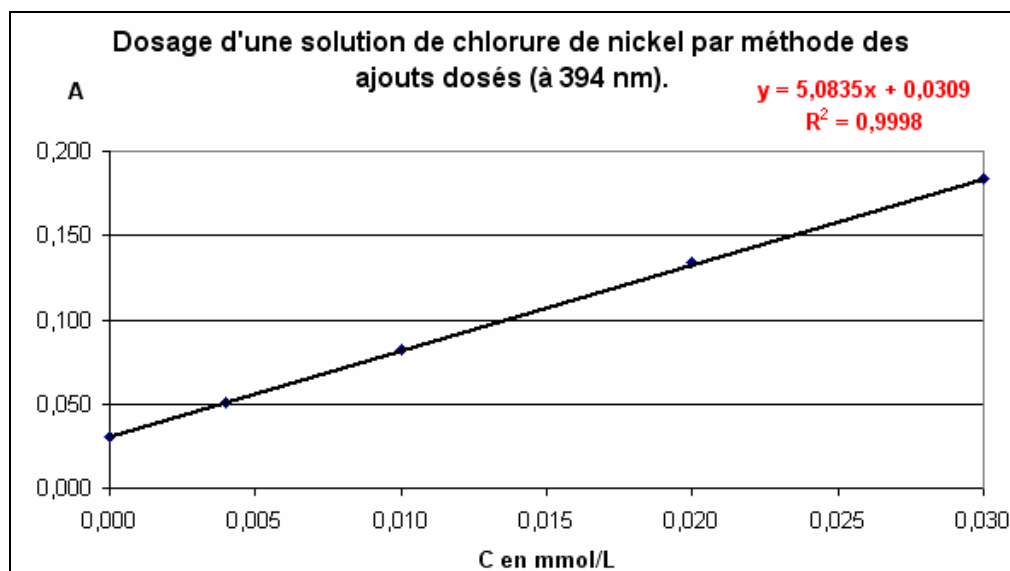
- Construire le tableau de valeurs et le graphe suivant :



- Effectuer la régression linéaire du type  $A = a \times C_i + b$ . Ne pas cocher la case « coupe l'axe horizontal (X) à »



On obtient l'équation  $A = 5,0835 \times C_i + 0,0309$



D'après la loi de Beer-Lambert :  $A = \varepsilon.l.(C_i + C_{Ni})$ .

La concentration en ions nickel (II) provenant de la solution (S) est donnée par :  $C_{Ni} = \frac{b}{a}$ .

Numériquement, on trouve  $C_{Ni} = \frac{b}{a} = 6,078.10^{-3} \text{ mol} / L$ .

La concentration en ions nickel (II) de la solution (S) est donnée par  $C_S = C_{Ni} \times \frac{50}{20} = \frac{50.b}{20.a}$ .

Numériquement, on trouve  $C_S = 0,0152 \text{ mol} / L$ .