

Ressources pour les leçons de chimie

Thibault Hiron-Bédiée

Simulations d'un dosage : Dozzaqueux (a priori installé sur les PCs de chimie du lycée)

Dosages acide-base : programme python <https://www.astrolabe-science.fr/courbes-titrage-acido-basiques>

Pour les dosages acides-base, le programme a aussi été réécrit par mes soins pour être adapté aux réactions entre acides et bases faibles. On les trouvera sur le GitHub.

On lit les fichiers de cristallographie à l'aide du logiciel VESTA.

Visualisation de molécules et de cristaux possibles avec le site molview.org

Il est également possible d'utiliser la base de données du CCDC : <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/>
?

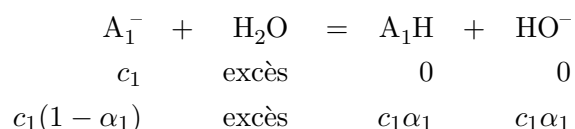
1 Réaction entre deux couples A/B faibles

On considère les couples A_1H/A_1^- de pK_{a_1} et A_2H/A_2^- de pK_{a_2} et on étudie le dosage de la base 1 par l'acide 2.

On écrira dans cet exercice c_1 et c_2 les concentrations considérées.

1.1 Calcul du pH de la solution initiale

On considère dans un premier temps la solution à titrer seule. Elle est sujette à l'équilibre et au tableau d'avancement suivant :



On a à l'équilibre :

$$K_{b_1} = \frac{[A_1H][HO^-]}{[A_1^-]} = \frac{\alpha_1^2 c_1^2}{c_1(1 - \alpha_1)}$$

On en déduit donc l'équation du second degré sur α_1 que l'on peut résoudre, puis implifier en constatant que $K_{b_1} \ll c_1$ (ce qui est équivalent au fait de dire que la base est peu dismutée donc $\alpha_1 \ll 1$). Ainsi :

$$\alpha_1 \simeq \sqrt{\frac{K_{b_1}}{c_1}} \quad \text{d'où} \quad \omega = \alpha c_1 = \sqrt{K_{b_1} c_1}$$

On peut également calculer directement la valeur de la concentration en ions HO^- , ω :

$$K_{b_1} = \frac{\omega^2}{c_1 - \omega} \quad \text{d'où} \quad \omega = \frac{1}{2} \left(-K_{b_1} + \sqrt{4K_{b_1} c_1 + K_{b_1}^2} \right) \simeq \sqrt{K_{b_1} c_1}$$

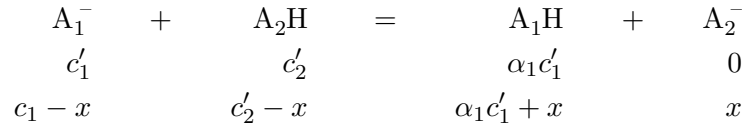
On retrouve bien la même valeur pour les deux calculs, ce qui est plutôt rassurant !

On peut en déduire l'expression du pH de la solution d'origine :

$$\begin{aligned} \text{pH} &= pK_e - pOH \\ &= pK_e - \frac{1}{2} (-\log K_{b_1} - \log c_1) \\ &= \frac{1}{2} (pK_e + pK_{a_1} + \log c_1) \end{aligned}$$

1.2 Calcul du pH de la solution en cours de dosage

On réalise maintenant le dosage de A_1^- par A_2H



Et on peut écrire la constante d'équilibre pour ce dosage :

$$K = \frac{[A_1H][A_2^-]}{[A_1^-][A_2H]} = \frac{K_{a2}}{K_{a1}} = \frac{x^2 + \alpha_1 c_1' x}{(c_1' - x)(c_2' - x)}$$

On en déduit une équation du second degré pour x en fonction de la constante d'équilibre, du coefficient α_1 et des concentrations diluées et on choisit la racine positive.

D'autre part, l'équilibre pour le couple 1 est toujours valide, on a donc :

$$K_{b1} = \frac{[A_1H][HO^-]}{[A_1^-]} = \frac{(\alpha_1 c_1' + x)\omega}{c_1' - x} \quad \text{d'où} \quad \omega = K_{b1} \frac{c_1' - x}{(\alpha_1 c_1' + x)}$$

Il ne reste plus qu'à écrire que $\omega h = K_e$ et que $K_{b1} K_{a1} = K_e$ et on obtient l'expression du pH quelle que soit le volume de solution titrante versé :

$$h = K_{a1} \frac{\alpha_1 c_1' + x}{c_1' - x}$$