

Cours de Chimie - Informatique

Titration acide/base

M.-F. Couvreur - Y. Mairesse
ISND - Anderlecht

17 avril 2013

Résumé

Simulation d'un titrage acide / base à l'aide d'un tableur. Réalisation du graphique de l'évolution du pH en fonction du volume de réactif introduit.

1 Titration d'un acide fort par une base forte

1.1 Données

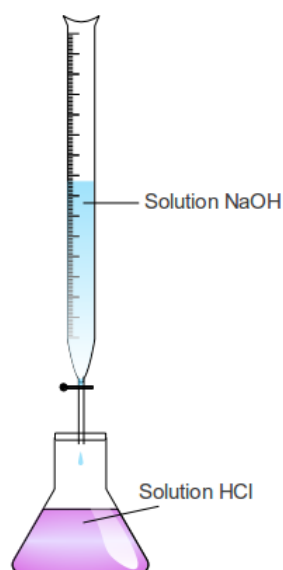


FIGURE 1 – Le matériel pour le titrage

Une burette graduée¹ contient une solution de NaOH de titre connu : 0,100M. Le volume suffisant de cette solution sera progressivement délivré dans un er-

1. image <http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/4/44/Titration.svg>

lenmeyer contenant 20 mL d'une solution 0,150M en HCl. Le but est d'obtenir la neutralisation de l'acide².

Expérimentalement, cette étape est marquée par le changement de couleur d'un indicateur coloré. Dans le cas du titrage d'un acide fort par une base forte, un bon indicateur pourrait être la phénolphtaléine (incolore en milieu acide, la phénolphthaléine prend une couleur rose intense en milieu basique) ou le Bleu de bromothymol (jaune en milieu acide et bleu en milieu basique).

On poursuit ensuite l'ajout de la solution NaOH jusqu'à 2x le volume nécessaire pour la neutralisation, afin de visualiser l'évolution du pH du milieu réactionnel.

L'objectif est de présenter une courbe de l'évolution du pH en fonction du volume total du mélange réactionnel, tout au long du titrage.

1.2 Rappels

Le pH d'une solution est défini comme une fonction de sa concentration en ions H_3O^+ .

Dans l'eau pure ou dans les solutions diluées,

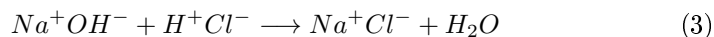
$$pH = -\log_{10}[H_3O^+] \quad (1)$$

Le produit ionique de l'eau s'écrit :

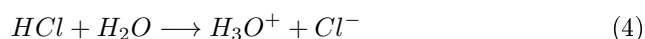
$$K_w = [H_3O^+].[OH^-] = 10^{-14} \quad (2)$$

Dans l'eau *pure*, $[H_3O^+] = 10^{-7}$ M. Par conséquence, $[OH^-] = 10^{-7}$ M également.

La réaction chimique entre NaOH et HCl peut être notée, en indiquant les ions qui interviennent :



Dans l'eau, l'acide HCl, comme tous les acides forts, est entièrement ionisé.



1.3 Calculs des quantités exprimées en mol

Dans une feuille de calculs du tableur, introduis les en-têtes des colonnes dans lesquelles figureront les calculs (voir la Figure 7). Dans les colonnes K, L

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Vol NaOH ajouté (mL)	OH- ajouté (mol)	OH- accumulé (mol)	H3O+ (mol)	Volume total (mL)	C H3O+	C OH-	pH

FIGURE 2 – En-têtes des colonnes

et M, introduis les données (voir la Figure 3). Indique

1. le volume de la solution HCl
2. la concentration de la solution HCl
3. la concentration de la solution titrante NaOH

K	L	M
Vol HCl	20 mL	
C HCl	0,150 M	
C NaOH	0,100 M	

FIGURE 3 – Les données du problème

La neutralisation de l'acide est obtenue quand le nombre de moles de base NaOH ajouté est égal au nombre de moles d'acide HCl. La réaction se fait 1 mol HCl pour 1 mol NaOH. Voir l'équation 3.

On peut déterminer la quantité de NaOH (en mol) qu'il faudra ajouter. À partir de là, calculer le volume de la solution NaOH à ajouter pour obtenir la neutralité.

Il est indispensable d'obtenir le résultat de ce calcul avant de poursuivre. Si nécessaire, utiliser une calculatrice.

Dans l'exemple pris ici, le nombre de moles H_3O^+ initial = 0.003 mol (voir le calcul dans le tableau 1).

1000 mL	de solution HCl contiennent	0.150 mol
1 mL	de solution HCl contient	$\frac{0.150 \text{ mol}}{1000}$
20 mL	de solution HCl contient	$\frac{0.150 \text{ mol} \cdot 20}{1000} = 0.003 \text{ mol}$

TABLE 1 – Calcul du nombre de moles HCl dans la solution titrée

Le volume de solution NaOH à ajouter pour atteindre la neutralité est donc aisément calculable (voir le calcul dans le tableau 2).

0.100 mol NaOH	sont contenues dans	1000 mL de solution NaOH
1 mol NaOH	est contenue dans	$\frac{1000 \text{ mL}}{0.100}$
0.003 mol NaOH	sont contenues dans	$\frac{1000 \text{ mL} \cdot 0.003}{0.100} = 30 \text{ mL}$

TABLE 2 – Calcul du nombre de moles HCl dans la solution titrée

1.3.1 Première ligne

Pour faciliter l'écriture puis la lecture des formules, il serait bon de nommer certaines cellules.

Nous limiterons la taille de la zone nommée *VolAjout* à 50 lignes. Voir la Table 3 pour une convention qui sera utilisée dans ces notes.

1. Au départ, on n'a pas encore ajouté de solution NaOH. Le volume ajouté est donc 0 mL. À reporter dans la cellule A2.

2. La neutralisation sera encore nommée « équivalence » dans ces notes. Il y a bien « équivalence », égalité, entre le nombre de moles d'acide et le nombre de moles de base quand survient la neutralisation

Cellules	Nom	Signification
L1	VolHCl	Volume HCl
L2	CiHCl	Concentration initiale en HCl
A1:A50	VolAjout	Volume de solution NaOH ajouté

TABLE 3 – Noms de cellules pour la première ligne de calculs

- De même, le nombre de moles OH^- ajouté et le nombre de moles OH^- accumulé est toujours 0. Ce qui sera indiqué en *B2*.
- La quantité d'ions OH^- est forcément égale à 0 aussi. À reporter dans la cellule *C2*.
- Le nombre de moles H_3O^+ est égal au nombre de moles HCl (entièrement ionisé) de la solution à titrer. Le calcul de ce nombre de moles en *D2* est une simple règle de trois. Ne pas oublier d'utiliser les noms de cellules ou de plages.
- En *E2*, le volume total résultant de l'ajout de la solution titrante peut être calculé par une formule utilisant les noms définis jusqu'ici. Cette formule peut être recopiée dans l'ensemble de la colonne E.
- En *F2*, la concentration en H_3O^+ dépend du volume total et du nombre de moles H_3O^+ calculé avant.
- Laissons les colonnes *G* et *H* vides pour l'instant.

1.3.2 La deuxième ligne

- Nous aurons besoin de nommer³ de nouvelles cellules. Voir la Table 4.

Cellules	Nom	Signification
L4	CNaOH	Concentration de la solution NaOH
L2	H30plusInitial	Concentration initiale en H_3O^+
E2	VolInitial	Volume initial au moment où l'on commence le titrage
B1:B50	OHmoinsAjoute	Nombre de moles OH^- ajoutées (et peut-être consommées)

TABLE 4 – Noms de cellules pour la deuxième ligne de calculs

- En *A3*, indiquons l'ajout de 1 mL de solution NaOH.
- En *B3*, la quantité de NaOH (en mol) se calcule facilement.
- Le réactif NaOH est immédiatement consommé lors de la réaction avec HCl. Il ne s'accumule pas. En *C3*, on peut indiquer que cette quantité accumulée reste à 0 mol.
- En *D3*, on calcule la quantité de HCl restant : c'est la quantité initiale (en mol) - le nombre de moles NaOH ajoutées. Veiller à utiliser les noms de cellules et de plages.
- La colonne *E* est déjà remplie.

3. Le signe + ne peut pas être utilisé dans un nom de cellule. On notera donc le mot 'plus' en toutes lettres dans le nom de la cellule qui contient la concentration en H_3O^+

7. En $F3$, la concentration en H_3O^+ dépend du nombre de moles restant et du volume $TOTAL$.
8. Les colonnes G et H restent encore vides.

1.3.3 Lignes suivantes jusqu'à la neutralisation

À partir de la ligne 3, on peut avancer assez lentement jusqu'à approcher de la neutralisation. Le volume de solution de NaOH à ajouter pour arriver à la neutralisation a été calculé plus haut au paragraphe 16.

A	
1	Vol NaOH ajouté (mL)
2	0
3	3
4	6
5	9
6	12
7	15
8	17
9	19
10	21
11	23
12	25
13	27
14	29
15	29,5
16	29,8
17	29,9
18	29,99
19	30

FIGURE 4 – Progression jusqu'à l'équivalence

Il peut être intéressant de progresser par pas de 2mL ou 3mL jusqu'à 1mL de l'équivalence. Les pas suivants seront plus petits jusqu'à devenir très petits. Voir l'illustration à la figure 4.

Les formules de l'ensemble de la ligne 3 peuvent être recopiées dans toutes les cellules jusqu'à la ligne correspondant à l'équivalence. Attention au fait que, dans la colonne C, il n'y a toujours pas d'accumulation de OH^- . La valeur reste 0.

1.3.4 Après la neutralisation

Il est, à nouveau, intéressant de progresser à très petits pas dans l'ajout de NaOH juste après le point de neutralisation.

1. Dans la colonne B , le nombre total de moles NaOH ajouté continue de progresser : la formule peut donc être reportée vers le bas.
2. Dans la colonne C , on va maintenant accumuler NaOH qui n'est plus consommé par l'acide. Il faut donc soustraire la quantité consommée (égale à ce qui se trouve dans la cellule nommée $H30plusInitial$) de la quantité totale NaOH ajoutée.
3. Dans la colonne D , la $C_{H^3O^+}$ est quasi nulle⁴. On peut approximer à 0 dans les cellules suivantes vers le bas.
4. La colonne E peut conserver la formule correspondant à la somme des volumes.

4. Elle n'est pas vraiment = 0, mais c'est une approximation assez correcte puisque tout l'acide fort HCl est maintenant épuisé.

5. Dans la colonne *F*, la formule supérieure peut être reportée. Mais la $C_{H_3O^+}$ est fixée à la valeur 0⁵.
6. Il y a maintenant un sens à calculer la C_{OH^-} dans la colonne *G*. Pour faire le calcul, il est intéressant de nommer la colonne *C* et la colonne *G*. Le calcul de la concentration en OH^- utilise la quantité d'ions OH^- (en mol) et le volume *TOTAL* du milieu réactionnel.

Cellules	Nom	Signification
<i>C1 : C50</i>	molOHmoins	nombre de moles OH^- accumulées
<i>G1 : G50</i>	COHmoins	Concentration en ions OH^-

TABLE 5 – Noms de cellules pour le calcul de la concentration en OH^-

1.4 Calcul du pH du milieu réactionnel

1.4.1 Avant la neutralisation

Avant la neutralisation, le calcul du pH tient compte uniquement de l'acide fort présent.

$$pH = -\log_{10}([H_3O^+]) \quad (5)$$

On écrit souvent plus simplement

$$pH = -\log([H_3O^+]) \quad (6)$$

Dans le tableur, la fonction pour calculer le logarithme en base 10 d'un nombre « n » s'écrit $=\log(n; 10)$ ou $\log(n)$ (la base « 10 » est prise par défaut).

On peut compléter la colonne *H* pour toutes les cellules avant la neutralisation.

1.4.2 À la neutralisation

Au point d'équivalence, le milieu n'est ni acide, ni basique. Il n'y a plus d'acide et aucune base ne s'est encore accumulée. Le pH a donc la valeur 7 (soit $-\log(10^{-7})$), comme le pH de l'eau pure.

1.4.3 Après la neutralisation

Après la neutralisation, la base NaOH s'accumule dans le milieu. La C_{OH^-} augmente progressivement.

La réaction est très rapide et l'équilibre est atteint rapidement. On peut considérer que $[OH^-] = C_{OH^-}$ et que $[H_3O^+] = C_{H_3O^+}$.

La $C_{H_3O^+}$ est liée à la C_{OH^-} par le produit ionique de l'eau.

La formule⁶ pour le calcul du pH en milieu « base forte » est

$$pH = 14 + \log C_{OH^-} \quad (7)$$

Les cellules de la colonne *H*, après l'équivalence, peuvent être remplies à l'aide de cette formule.

5. Ce qui n'est toujours pas exactement correct ; mais nous corrigerons plus loin.

6. Justifiée au cours de chimie

1.4.4 Les concentrations H_3O^+ et OH^-

Nous avons indiqué que les valeurs de la concentration OH^- sont = 0 avant l'équivalence. Ce n'est pas tout à fait exact.

La C_{OH^-} est liée à $C_{H_3O^+}$ par le produit ionique de l'eau. On peut maintenant calculer les valeurs considérées comme = 0 précédemment.

Avant la neutralisation, on calcule la valeur de C_{OH^-} sur la base de $C_{H_3O^+}$

$$C_{OH^-} = \frac{10^{-14}}{C_{H_3O^+}} \quad (8)$$

Après la neutralisation, on calcule la valeur de $C_{H_3O^+}$ sur la base de la valeur de C_{OH^-}

$$C_{H_3O^+} = \frac{10^{-14}}{C_{OH^-}} \quad (9)$$

1.5 Graphique

Le tracé du graphique de l'évolution du pH en fonction du volume de solution NaOH ajoutée ne doit poser aucun problème. Choisir le type « Nuage de points XY » ; sélectionner les deux séries de données en maintenant une touche *Ctrl* appuyée.

Son allure est très caractéristique. Voir la figure 5.

1.6 Liste des plages nommées

Pour rappel, les noms des plages ne peuvent contenir les signes « + » ou de signe « - ».

Nom	Signification	Plage
CiHCl	Concentration initiale HCl	L2
CNaOH	Concentration de la solution NaOH	L4
COHmoins	Concentration en ions OH^-	G1:G50
H30plusInitial	Nombre mol H_3O^+ initial	D2
molH30plus	Nombre mol H_3O^+	D1:D50
VolAjout	Volume de solution NaOH ajouté	A1:A50
OHmoinsAjoute	Nombre de mol OH^- ajoutées	B1:B50
molOHmoins	Nombre de mol OH^- accumulées	C1:C50
VolHCl	Volume de solution HCl à titrer	L1
VolInitial	Volume de mélange avant titrage	L1
VolumeTotal	Volume du mélange réactionnel	E1:E50

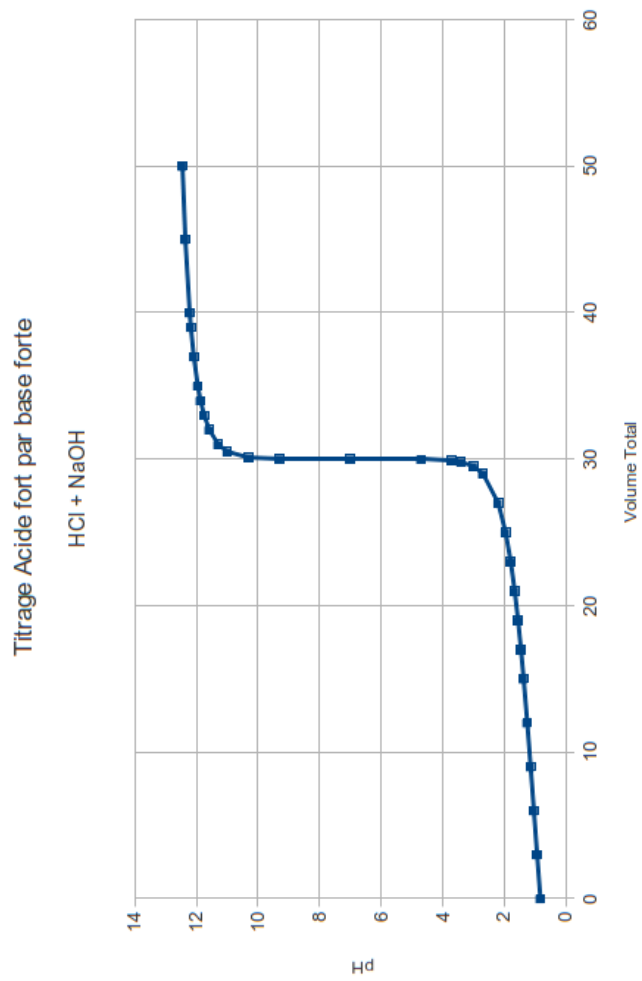


FIGURE 5 – Courbe de titrage d'un acide fort par une base forte

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
	Vol NaOH ajouté (mL)	OH- ajouté (mol)	OH- accumulé (mol)	H3O+ (mol)	Volume total (mL)	C. H3O+	C. OH-	pH			Vol HCl C HCl	20 mL 0,150 M	
1	0	0	0	0	20	0,15	6,67E-014	0,823908741					
2	3	0,0003	0	0,0027000	23	0,117391304	8,52E-014	0,930364072					
3	6	0,0006	0	0,0024000	26	0,092307692	1,08E-013	1,034762106					
4	9	0,0009	0	0,0021000	29	0,072413793	1,38E-013	1,140178703					
5	12	0,0012	0	0,0018000	32	0,05625	1,78E-013	1,249877473					
6	15	0,0015	0	0,0015000	35	0,042857143	2,33E-013	1,367976785					
7	17	0,0017	0	0,0013000	37	0,035135135	2,85E-013	1,454258372					
8	19	0,0019	0	0,0011000	39	0,028205128	3,55E-013	1,549671922					
9	21	0,0021	0	0,0009000	41	0,02195122	4,96E-013	1,658541347					
10	23	0,0023	0	0,0007000	43	0,01627907	6,14E-013	1,788370416					
11	25	0,0025	0	0,0005000	45	0,011111111	9,00E-013	1,954242509					
12	27	0,0027	0	0,0003000	47	0,006382979	1,57E-012	2,194976603					
13	29	0,0029	0	0,0001000	49	0,002040816	4,90E-012	2,69019608					
14	29,5	0,00295	0	0,0000500	49,5	0,001010101	9,90E-012	2,995635195					
15	29,8	0,00298	0	0,0000200	49,8	0,000401606	2,49E-011	3,396199347					
16	29,9	0,00299	0	0,0000100	49,9	0,000200401	4,99E-011	3,698100546					
17	29,99	0,002999	0	0,0000010	49,99	0,000020004	5,00E-010	4,698883137					
18	30	0,003	0	0,0000000	50	0	0,00E+000	7					
19	30,01	0,003001	0,000001	6,07E-016	50,01	1,2137E-014	2,00E-005	9,300943145					
20	30,1	0,00301	0,00001	5,38E-016	50,1	1,0748E-014	2,00E-004	10,30016227					
21	30,5	0,00305	0,00005	4,88E-016	50,5	9,6641E-015	9,90E-004	10,99567863					
22	31	0,0031	0,0001	4,47E-016	51	8,7708E-015	1,96E-003	11,29242982					
23	32	0,0032	0,0002	4,16E-016	52	8,0008E-015	3,85E-003	11,58502665					
24	33	0,0033	0,0003	3,87E-016	53	7,3101E-015	5,66E-003	11,75284539					
25	34	0,0034	0,0004	3,71E-016	54	6,8764E-015	7,41E-003	11,86966623					
26	35	0,0035	0,0005	3,55E-016	55	6,4530E-015	9,09E-003	11,95860731					
27	37	0,0037	0,0007	3,44E-016	57	6,0294E-015	1,23E-002	12,08922318					
28	39	0,0039	0,0009	3,30E-016	59	5,5917E-015	1,53E-002	12,1833905					
29	40	0,004	0,001	3,07E-016	60	5,1171E-015	1,67E-002	12,22184875					
30	45	0,0045	0,0015	2,96E-016	65	4,5559E-015	2,31E-002	12,3631779					
31	50	0,005	0,002	2,60E-016	70	3,7172E-015	2,86E-002	12,45593196					
32													
33													
34													

FIGURE 6 – Calculs pour la courbe de titrage

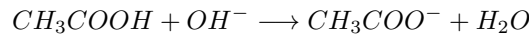
2 Titrage d'un acide faible par une base forte

2.1 Principe de la manipulation

Un récipient contient 20 mL d'une solution de titre 0,135M en CH_3COOH (l'acide acétique, un acide faible). À l'aide d'une burette graduée, on ajoute progressivement une solution de $NaOH$ (une base forte) de titre 0,225M.

Nous allons calculer la valeur du pH du mélange réactionnel tout au long de la réaction jusqu'au-delà de l'équivalence.

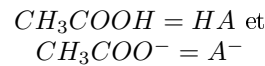
La réaction se fait mole pour mole selon l'équation



2.2 Théorie du pH

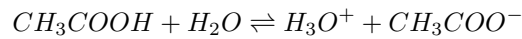
2.2.1 Convention

Dans la suite de ces pages, nous utiliserons généralement les conventions suivantes :

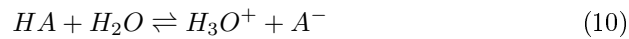


2.2.2 pH d'une solution d'acide faible

Le pH d'une solution d'acide faible comme CH_3COOH se calcule d'après la constante d'équilibre de la réaction avec l'eau.



que nous écrirons donc



La constante d'acidité s'exprime sous la forme

$$K_a = \frac{[H_3O^+] \cdot [CH_3COO^-]}{[CH_3COOH]} \quad (11)$$

que nous écrirons

$$K_a = \frac{[H_3O^+] \cdot [A^-]}{[HA]} \quad (12)$$

On peut introduire deux simplifications dans cette équation.

1. Dans une solution pure d'un acide faible, $[H_3O^+] = [A^-]$ puisque ces deux espèces sont formées simultanément, dans la réaction 10.
2. Puisqu'il s'agit d'un acide faible, on peut considérer que $[HA] \approx C_{HA}$: très peu de l'acide faible introduit est ionisé.

Il vient que

$$K_a = \frac{[H_3O^+]^2}{C_{HA}}$$

$$\begin{aligned}
[H_3O^+]^2 &= K_a \cdot C_{HA} \\
[H_3O^+] &= (K_a \cdot C_{HA})^{\frac{1}{2}} \\
-\log([H_3O^+]) &= -\frac{1}{2} \log(K_a \cdot C_{HA}) \\
-\log([H_3O^+]) &= -\frac{1}{2} (\log K_a + \log C_{HA}) \\
pH &= \frac{1}{2} (pK_a - \log C_{HA}) \tag{13}
\end{aligned}$$

2.2.3 pH à l'équivalence

Au point d'équivalence, le pH se calcule selon la formule qui sera éventuellement démontrée au cours de chimie.

$$pH = 7 + \frac{1}{2} pK_a + \frac{1}{2} \log C_{A^-} \tag{14}$$

2.2.4 pH au-delà de l'équivalence

Au-delà de l'équivalence, on considère que le pH est entièrement gouverné par la base forte OH^- qui s'accumule dans le milieu. L'influence de la base conjuguée A^- de l'acide faible HA est négligeable.

$$pH = 14 + \log(C_{OH^-}) \tag{15}$$

2.3 Détermination du point d'équivalence

Puisque la réaction se fait mole à mole, l'équivalence est atteinte lorsque le nombre de moles OH^- ajoutées est égale au nombre de moles CH_3COOH présentes au départ.

On peut utiliser la relation simple $C_A \cdot V_A = C_B \cdot V_B$ et

$$V_B = \frac{C_A \cdot V_A}{C_B} = \frac{0,135M/L \cdot 0,020L}{0,225M/L} = 0,012L = 12mL \tag{16}$$

2.4 Les zones remarquables de la courbe de titrage

Pour réaliser les calculs, il faut distinguer plusieurs zones dans la courbe de titrage. Se référer au diagramme de la figure 7.

2.4.1 Le pH de la solution initiale d'acide faible CH_3COOH

Le pH d'une solution d'acide faible se calcule selon la formule 13.

Dans le cadre de l'exemple choisi ici, le pH calculé est donc

$$pH = \frac{1}{2} (4,75 - \log(0,135)) = 2,81$$

Durant l'ajout des premières fractions de la base forte, on peut considérer que le pH est entièrement dirigé par l'acide présent ; c'est l'espèce très majoritaire.

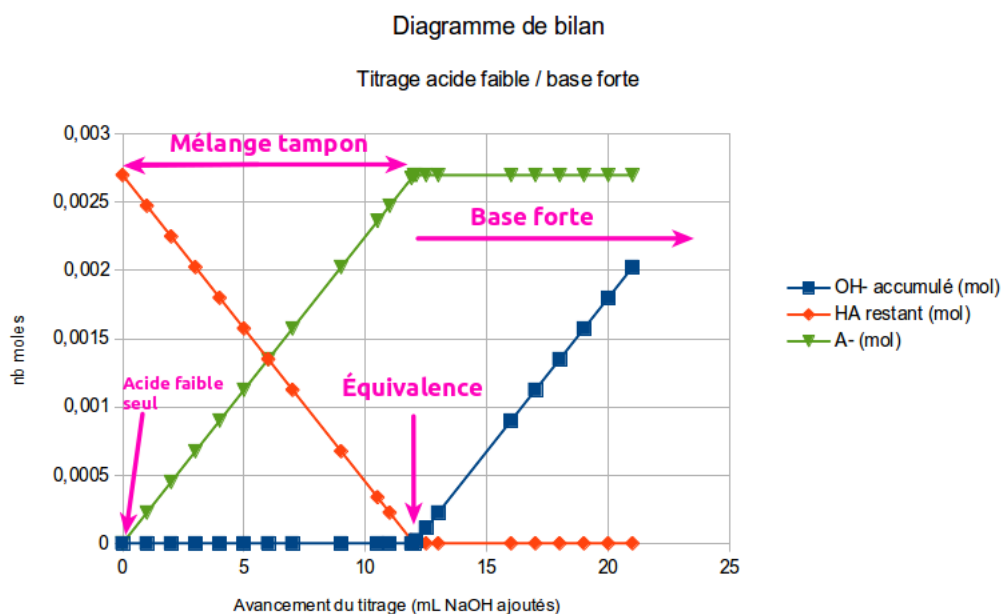


FIGURE 7 – Diagramme de bilan Acide faible / Base forte

2.4.2 Le pH à la moitié de l'équivalence

On démontre, au cours de chimie, que le pH à la moitié de l'équivalence est égal au pK_a de l'acide faible engagé.

2.4.3 Le pH de la zone du tampon en général

Les concentrations des espèces dans le mélange réactionnel sont gouvernées par la constante d'acidité de l'acide faible (voir l'équation 12).

Si l'on connaît le pK_a , la $[A^-]$ et la $[HA]$, on peut calculer $[H_3O^+]$.

De l'équation 12, on tire

$$[H_3O^+] = \frac{K_a \cdot [HA]}{[A^-]}$$

$$-\log [H_3O^+] = -\log \left(\frac{K_a \cdot [HA]}{[A^-]} \right)$$

$$-\log [H_3O^+] = -\log K_a - \log \left(\frac{[HA]}{[A^-]} \right)$$

$$-\log [H_3O^+] = -\log K_a + \log \left(\frac{[A^-]}{[HA]} \right)$$

$$pH = pK_a + \log \left(\frac{[A^-]}{[HA]} \right) \quad (17)$$

2.4.4 Le pH à l'équivalence

On démontrera éventuellement, au cours de chimie, que le pH à l'équivalence peut se calculer selon la formule 14 à la page 11.

2.4.5 Le pH au-delà de l'équivalence

Le pH est entièrement gouverné par la base forte qui s'accumule.

Le pH d'une solution de base forte se calcule par la formule connue

$$pH = 14 + \log[OH^-] \quad (18)$$

2.5 Traitement informatique

2.5.1 En-têtes des colonnes

Dans la feuille de calculs, nous allons prévoir un certain nombre de colonnes comme illustré à la figure 8.

1. Colonne A : volume de solution titrante NaOH ajouté
2. Colonne B : nombre de moles OH^- ajoutées
3. Colonne C : nombre de moles OH^- accumulées
4. Colonne D : volume total du mélange réactionnel
5. Colonne E : quantité d'acide faible restant suite à la réaction
6. Colonne F : concentration en acide faible restant
7. Colonne G : quantité d'ions A^- formés
8. Colonne H : concentration en ions A^-
9. Colonne I : concentration en ions OH^-
10. Colonne J : quotient $[A^-]/[HA]$

2.5.2 Données

Nous placerons les données dans les colonnes N, O et P, comme illustré dans la figure 9

2.5.3 Donner des noms aux plages de cellules

Pour faciliter l'écriture et la lecture des formules, il est intéressant de nommer des plages de cellules. Nous prendrons la convention indiquée dans le tableau 6

Nous n'aurons sans doute pas besoin de 50 lignes...

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Vol NaOH ajouté (mL)	OH- ajouté (mol)	OH- accumulé (mol)	Volume total (mL)	HA restant (mol)	CHA (mol/L)	A- (mol)	C_A- (mol/L)	C_OH-	[A-]/[HA]

FIGURE 8 – En-têtes des colonnes pour le titrage de l'acide faible par une base forte

N	O	P
Vol HA	20 mL	
C HA	0,135 M	
C NaOH	0,225 M	
pKa	4,75	
Qte Init HA		mol
Equivalence		mL

FIGURE 9 – Les données

Noms des plages	Plages	Signification
VolInitialAcide	O1	Volume de la solution d'acide à titrer
CInitAcide	O2	Concentration initiale en acide
CNaOH	O4	Concentration de la solution de NaOH titrante
pKa	O6	pK de l'acide
HAInit	O8	Quantité d'acide à titrer
VolAjout	A1:A49	Volume de solution titrante ajoutée (en mL)
OHmoinsAjoute	B1:B49	Quantité d' OH^- ajoutée (en mol)
OHmoinsAccumule	C1:C49	Quantité d' OH^- accumulée (en mol)
VolTotal	D1:D49	Volume total du mélange réactionnel (en mL)
HArestant	E1:E49	Quantité d'acide restant (en mol)
CHA	F1:F50	Concentration en acide HA (en mol/L)
Amoins	G1:G49	Quantité de base conjuguée A^- (en mol)
CAmoins	H1:H49	Concentration de la base conjuguée (en mol/L)
COHmoins	I1:I50	Concentration en ions OH^-

TABLE 6 – Cellules nommées pour le titrage acide faible / base forte

2.5.4 Calcul des données

Certaines valeurs importantes peuvent être facilement calculées dans la zone des données.

1. La quantité initiale d'acide à titrer. Dans la cellule *O8*, la formule à introduire est

$$= VolInitialAcide * CInitAcide / 1000$$
2. Le point d'équivalence peut être calculé dans la cellule *O9* selon la formule 16. La formule à introduire est donc

$$= VolInitialAcide * CInitAcide / CNaOH$$

2.5.5 Colonne A : Les volumes de titrant NaOH ajoutés

Dans la colonne *A*, nous indiquons les volumes de solution titrante ajoutés. Il est intéressant de progresser régulièrement jusqu'à proximité de l'équivalence (mL par mL, par exemple), puis très progressivement autour de celle-ci (par 0,5mL ou même 0,1mL).

2.5.6 Colonne B : Les quantités de OH^- ajoutées

Dans la colonne B, nous calculons les quantités de OH^- ajoutées, correspondant aux volumes de titrant NaOH versé.

La formule à introduire est $= VolAjout * CNaOH/1000$

2.5.7 Colonne C : Les quantités de OH^- accumulées

Jusqu'à l'équivalence, la quantité de OH^- accumulée reste = 0.

Après l'équivalence, OH^- commence à s'accumuler. La formule à utiliser, à partir de ce point est $= OHmoinsAjoute - HAIinit$.

2.5.8 Colonne D : Le volume total

À tout moment, le volume total du mélange réactionnel est la somme du volume initial (en solution d'acide) et du volume de titrant ajouté. La formule à utiliser est $= OHmoinsAjoute - HAIinit$.

2.5.9 Colonne E : Les quantités de HA restantes

Jusqu'à l'équivalence, la quantité d'acide résiduel est calculée par la différence entre la quantité d'acide initiale et la quantité de base ajoutée. La formule est $= OHmoinsAjoute - HAIinit$.

À partir de l'équivalence, la quantité de HA restant est = 0.

2.5.10 Colonne F : Les concentrations en HA

La concentration en HA est toujours le quotient entre la quantité de HA et le volume total du mélange réactionnel. La formule à utiliser est $= HArestant/VolTotal$.

2.5.11 Colonne G : Les quantités d'ions A^-

Jusqu'à l'équivalence, la quantité d'ions A^- est égale à la quantité d' OH^- introduits : chaque ion OH^- produit un ion A^- . La formule, jusqu'à l'équivalence est $= OHmoinsAjoute$.

À partir de l'équivalence, la quantité de A^- reste constante et est égale à $= HAIinit$ (tout l'acide a été transformé en ions A^-).

2.5.12 Colonne H : Les concentrations en ions A^-

La concentration en ions A^- se calcule simplement par le quotient entre la quantité d'ions A^- et le volume total du milieu réactionnel. La formule est partout $= Amoins * 1000/VolTotal$

2.5.13 Colonne I : Les concentrations en ions OH^-

La concentration en ions OH^- reste = 0 jusqu'à l'équivalence⁷.

À partir de l'équivalence, la concentration en OH^- dépend de la quantité de OH^- accumulée et du volume total du milieu. Soit $= OHmoinsAccumule/VolTotal * 1000$.

⁷. Ceci est une approximation assez correcte; cette concentration régie par le produit ionique de l'eau est extrêmement faible

2.5.14 Colonne J : Le rapport $[A^-]/[HA]$

Le quotient $[A^-]/[HA]$ est utile pour calculer la valeur du pH en milieu tampon (voir la formule 17). Le calcul a du sens tant que l'équivalence n'est pas atteinte. Au-delà, on considère que la quantité de HA résiduel⁸ = 0. Le calcul ne peut donc plus être réalisé (et il n'a plus d'intérêt) à partir de ce point.

La formule à utiliser est donc $= C_{A\text{moins}}/CHA$ jusqu'à l'équivalence.

2.5.15 Colonne L : Le pH

Le mode de calcul de la valeur du pH dépend de la zone dans laquelle on l'évalue.

1. Dans le milieu acide faible pur, avant le titrage. La formule à utiliser est $= (pKa - LOG(C_{InitAcide}))/2$ (voir la formule 13).
2. Dans le milieu tamponné, la formule à utiliser est $= pKa + LOG(J3)$.
3. À l'équivalence, il ne subsiste que les ions A^- , base conjuguée de l'acide HA . Le calcul est alors $= 7 + pKa/2 + LOG(C_{InitAcide})/2$.
4. Au-delà de l'équivalence, le pH est déterminé par la quantité d' OH^- en excès. La formule est $= 14 + LOG(C_{OH\text{moins}})$

2.6 Diagrammes**2.6.1 Diagramme de bilan**

Lorsque les valeurs des quantités des différentes espèces sont connues, il est facile d'établir un diagramme de bilan tout au long de la réaction. Il faut établir un diagramme des différentes espèces en fonction du volume de solution $NaOH$ ajoutée. Le diagramme à obtenir est du type de la figure 7.

2.6.2 Évolution du pH

Le diagramme de l'évolution du pH tout au long du titrage est du type de la figure 10.

2.7 Tableau des valeurs calculées

Un exemple de tableau des valeurs calculées tout au long de cette application peut être consulté à la figure 11.

8. Toujours en première approximation. Lorsque la valeur du pH sera calculée, on pourra évaluer la valeur de la quantité de HA . Dans notre exemple, on calculera que $[HA] < 10^{-5} \text{ mol/L}$

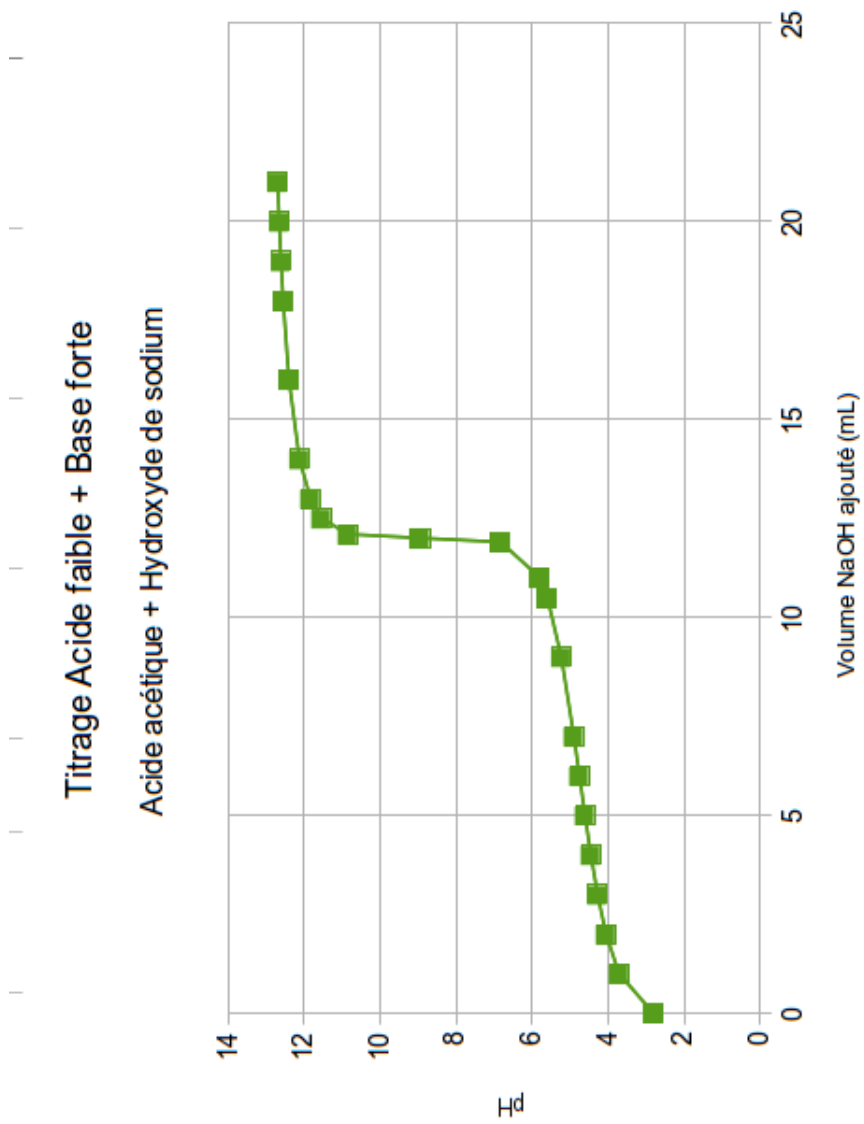


FIGURE 10 – Courbe de l'évolution du pH lors du titrage d'un acide faible par une base forte

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
1	Vol NaOH ajouté (mL)	OH- ajouté (md)	OH- accumulé (mol)	Volume total (mL)	HA restant (mol)	CHA (mol/L)	A- (mol)	C _{A-} (md/L)	C _{OH-}	[A-]/[HA]		pH		Vol HA C HA	20 mL 0,135M	
2	0,0	0,00000	0,000000	20,0	0,00270	0,000135	0,00000	0,000	0	0,000		2,81				
3	1,0	0,00023	0,000000	21,0	0,00248	0,000118	0,00023	0,011	0	0,091		3,71				
4	2,0	0,00045	0,000000	22,0	0,00225	0,000102	0,00045	0,020	0	0,200		4,05		C NaOH	0,225M	
5	3,0	0,00068	0,000000	23,0	0,00203	0,000088	0,00068	0,029	0	0,333		4,27				
6	4,0	0,00090	0,000000	24,0	0,00180	0,000075	0,00090	0,038	0	0,500		4,45		pKa	4,75	
7	5,0	0,00113	0,000000	25,0	0,00158	0,000063	0,00113	0,045	0	0,714		4,60				
8	6,0	0,00135	0,000000	26,0	0,00135	0,000052	0,00135	0,052	0	1,000		4,75		Qte Init HA	0,0027 mol	
9	7,0	0,00158	0,000000	27,0	0,00113	0,000042	0,00158	0,058	0	1,400		4,90		Equivalence	12 mL	
10	9,0	0,00203	0,000000	29,0	0,00068	0,000023	0,00203	0,070	0	3,000		5,23				
11	10,5	0,00236	0,000000	30,5	0,00034	0,000011	0,00236	0,077	0	7,000		5,60				
12	11,0	0,00248	0,000000	31,0	0,00023	0,000007	0,00248	0,080	0	11,000		5,79				
13	11,9	0,00268	0,000000	31,9	0,00002	0,000001	0,00268	0,084	0	119,000		6,83				
14	12,0	0,00270	0,000000	32,0	0,00000	0,000000	0,00270	0,084	0	-		8,94				
15	12,1	0,00272	0,000023	32,1	0,00000	0,000000	0,00270	0,084	0,0007	-		10,85				
16	12,5	0,00281	0,000113	32,5	0,00000	0,000000	0,00270	0,083	0,0035	-		11,54				
17	13,0	0,00293	0,000225	33,0	0,00000	0,000000	0,00270	0,082	0,0068	-		11,83				
18	14,0	0,00315	0,000450	34,0	0,00000	0,000000	0,00270	0,079	0,0132	-		12,12				
19	16,0	0,00360	0,000900	36,0	0,00000	0,000000	0,00270	0,075	0,025	-		12,40				
20	18,0	0,00405	0,001350	38,0	0,00000	0,000000	0,00270	0,071	0,0355	-		12,55				
21	19,0	0,00428	0,001575	39,0	0,00000	0,000000	0,00270	0,069	0,0404	-		12,61				
22	20,0	0,00450	0,001800	40,0	0,00000	0,000000	0,00270	0,068	0,045	-		12,65				
23	21,0	0,00473	0,002025	41,0	0,00000	0,000000	0,00270	0,066	0,0494	-		12,69				

FIGURE 11 – Tableau des valeurs calculées pour le titrage d'un acide faible par une base forte

Table des matières

1	Titration d'un acide fort par une base forte	1
1.1	Données	1
1.2	Rappels	2
1.3	Calculs des quantités exprimées en mol	2
1.3.1	Première ligne	3
1.3.2	La deuxième ligne	4
1.3.3	Lignes suivantes jusqu'à la neutralisation	5
1.3.4	Après la neutralisation	5
1.4	Calcul du pH du milieu réactionnel	6
1.4.1	Avant la neutralisation	6
1.4.2	À la neutralisation	6
1.4.3	Après la neutralisation	6
1.4.4	Les concentrations H_3O^+ et OH^-	7
1.5	Graphique	7
1.6	Liste des plages nommées	7
2	Titration d'un acide faible par une base forte	10
2.1	Principe de la manipulation	10
2.2	Théorie du pH	10
2.2.1	Convention	10
2.2.2	pH d'une solution d'acide faible	10
2.2.3	pH à l'équivalence	11
2.2.4	pH au-delà de l'équivalence	11
2.3	Détermination du point d'équivalence	11
2.4	Les zones remarquables de la courbe de titration	11
2.4.1	Le pH de la solution initiale d'acide faible CH_3COOH	11
2.4.2	Le pH à la moitié de l'équivalence	12
2.4.3	Le pH de la zone du tampon en général	12
2.4.4	Le pH à l'équivalence	13
2.4.5	Le pH au-delà de l'équivalence	13
2.5	Traitement informatique	13
2.5.1	En-têtes des colonnes	13
2.5.2	Données	13
2.5.3	Donner des noms aux plages de cellules	13
2.5.4	Calcul des données	14
2.5.5	Colonne A : Les volumes de titrant $NaOH$ ajoutés	14
2.5.6	Colonne B : Les quantités de OH^- ajoutées	15
2.5.7	Colonne C : Les quantités de OH^- accumulées	15
2.5.8	Colonne D : Le volume total	15
2.5.9	Colonne E : Les quantités de HA restantes	15
2.5.10	Colonne F : Les concentrations en HA	15
2.5.11	Colonne G : Les quantités d'ions A^-	15
2.5.12	Colonne H : Les concentrations en ions A^-	15
2.5.13	Colonne I : Les concentrations en ions OH^-	15
2.5.14	Colonne J : Le rapport $[A^-]/[HA]$	16
2.5.15	Colonne L : Le pH	16
2.6	Diagrammes	16
2.6.1	Diagramme de bilan	16

2.6.2 Évolution du pH	16
2.7 Tableau des valeurs calculées	16



Vous êtes libre de :

- partager — reproduire, distribuer et communiquer l'œuvre
- remixer — adapter l'œuvre
- d'utiliser cette œuvre à des fins commerciales

Selon les conditions suivantes :

- Attribution — Vous devez attribuer l'œuvre de la manière indiquée par l'auteur de l'œuvre ou le titulaire des droits (mais pas d'une manière qui suggérerait qu'ils vous approuvent, vous ou votre utilisation de l'œuvre).
- Partage dans les Mêmes Conditions — Si vous modifiez, transformez ou adaptez cette œuvre, vous n'avez le droit de distribuer votre création que sous une licence identique ou similaire à celle-ci.