

DESENVOLVIMENTO DE PROGRAMA PARA COMPUTADORES COMPATÍVEIS
IBM-PC SIMULANDO CURVAS DE TITULAÇÃO EM SISTEMAS DE
PRECIPITAÇÃO

Mauro Korn¹, Andre G. A. Esteves²

¹ Departamento de Química - CETEBA - Universidade do Estado da
Bahia
Estrada das Barreiras, s/n - Narandiba - Cabula - CEP: 41200

² Instituto de Química - Universidade Federal da Bahia

ABSTRACTS

In this work we report on a new computer program, developed to personal computers, which permits the study of all aspects related to precipitation volumetry. The main goal of this program is the teaching of analytical chemistry to the undergraduates students.

FUNDAMENTOS

A utilização de recursos de informática para favorecer no ensino de química analítica tem sido empregado com grande frequência nos últimos anos, propiciando maior agilidade no reconhecimento de alguns sistemas comuns nas atividades inerentes aos laboratórios.

Atualmente são raros os laboratórios que não utilizam a informática para:

- retenção de dados;
- tratamento de dados;
- criação de dados;
- simulações;
- modelagens.

Tendo como objetivo auxiliar no aprendizado da química analítica, as simulações de sistemas, bem como o estudo do comportamento de determinadas espécies reativas, são instrumentos fundamentais que possibilitam uma mais perfeita caracterização de fenômenos químicos. O ensino assim se permite mais dinâmica e eficiente.

- * DINÂMICA * Permite testar várias situações para definir um comportamento.
- * EFICIENTE * Possibilita confrontos sistemáticos com situações reais.

O PROGRAMA

A linguagem escolhida para a programação foi a Advanced Basic, devido ao fácil acesso e a simplicidade no uso da mesma¹. Outra vantagem definida é a de armazenar os dados obtidos e/ou calculados no formato ASCII, o que garante a importação destes dados para:

- tratamentos estatísticos e,
- criação de gráficos,

para a maioria dos utilitários encontrados no mercado.

A rotina desenvolvida permite o cálculo e a visualização no monitor das curvas de titulação em volumetria de precipitação², baseando-se na determinação de volume para valores de pX, a partir da equação geral:

$$V = -V_0 \frac{[X^-]^2 - [X^-].C_0 - K_{ps}}{[X^-]^2 + [X^-].C - K_{ps}}$$

onde C₀ representa a concentração do ânion a ser titulado; C a concentração do titulante; V₀ e V os valores de volume do analito e do titulante, respectivamente; e K_{ps} é a constante de solubilidade.

Desta forma a idealização partiu da utilização de matrizes criadas a partir de um valor inicial de pX e da precisão (pr) desejada, como apresentado a seguir:

$$pX = pX + pr,$$

seguindo a opção por operadores que executam os cálculos em batelada para todos os dados das matrizes previamente dimensionadas.

Os dados necessários para a inicialização do sistema além de pX e precisão são os valores de pK_{ps}, concentração do titulante e o volume a ser titulado.

O ALCANCE

Introduzidos os dados a rotina gera no monitor curvas de titulação que podem ser estudadas com maiores detalhes, através de mudança de coloração (para monitores coloridos) ou pelo aumento da definição (para monitores monocromáticos), para regiões definidas. Ainda é possível determinar e visualizar na curva de titulação o erro existente caso se aplique o método de Mohr para uma concentração definida de cromato adicionado, sendo traçadas retas unindo a curva ao eixo onde é apresentado o volume do titulante adicionado.

Outra possibilidade é a geração de curvas que dimensionam a variação da força iônica com o volume do titulante, bem como a quantidades de moles do precipitado formado e a influência do valor do pK_{ps} nestas curvas.

Ainda foram introduzidas formas para a obtenção de curvas superpostas para soluções com a mesma concentração e volume inicial do analito variando a constante de solubilidade, definindo limites para a aplicação da volumetria de precipitação. Pode-se, também, obter curvas superpostas para diferentes concentrações do analito e titulante, o que possibilita avaliar os limites analíticos de determinação de uma espécie através desta volumetria.

Devem ser ressaltadas as opções das curvas de primeira derivada de pX em relação ao volume de titulante, como também o inverso desta. Tal sistema objetiva demonstrar métodos mais ágeis de determinação do ponto de equivalência.

BIBLIOGRAFIA

- 1- "IBM - BASIC, Version 3.30, language reference". 5th ed.. IBM (1987).
- 2- Christian, G. D., "Analytical Chemistry". 3th ed.. John Willey & Sons (1980).