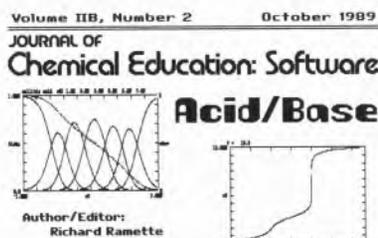


# Análise do Programa Acid/Base

J. P. LEAL \*  
M. J. MATOS \*\*



O programa a analisar faz parte de uma série editada desde há alguns anos pelo *Journal of Chemical Education: Software* e que pretende utilizar as potencialidades dos computadores pessoais no ensino da Química.

"The Acid-Base Package" aborda vários problemas relacionados com medidas de pH, titulações ácido-base e equilíbrios de pares ácido-base ou metal-complexos em solução. Permite:

- traçar curvas de titulação,
- calcular a composição de soluções tampão com determinado pH,
- calcular o pH de soluções,
- efectuar diagramas de equilíbrio entre as várias espécies ácido-base ou metal-ligando.

O programa é fornecido em disquete de 5"1/4 de baixa densidade (360 kb) e a sua instalação é bastante fácil. As instruções para a instalação permitem até que se instale o programa sem conhecimentos de MS-DOS pois ensina inclusive a formatar as diskettes a usar. A instalação pode ser feita em diskettes de 5"1/4 (360 kb ou 1.2 Mb), 3"1/2 (720 kb ou 1.44 Mb) ou no disco rígido. Para computadores sem drive de 5"1/4 há que proceder apenas à cópia da disquete fornecida para uma disquete de 3"1/2 e instalar o programa de seguida a partir desta disquete. Juntamente com o programa são fornecidas as etiquetas "oficiais" para as cópias permitidas: cinco na versão normal, vinte na versão multi-utilizador (esta versão permite também a instalação em rede).

O programa é composto por vários módulos, cada um com uma função específica, e que podem ser usados individualmente ou através do programa principal que chama cada módulo

quando é necessário. Uma breve descrição de cada um dos módulos é apresentada em seguida.

## FABTIC

O módulo intitulado FABTIC (Final Acid-Base Titration Curve) calcula os pontos de uma curva de titulação, para uma qualquer mistura inicial a ser titulada com um ácido ou base forte. O utilizador especifica qual a mistura inicial (escolhendo os componentes e respectivas concentrações) e se pretende titular com um ácido ou uma base. Pode ainda escolher o pH inicial e final, o intervalo (em unidades de pH) entre os pontos a calcular, o volume da solução, a concentração do titulante e se pretende ou não ter em conta o efeito da força iónica da solução. Uma vez fornecidos estes dados o programa gera uma tabela de valores de pH em função do volume de titulante adicionado que é guardada num ficheiro especificado pelo utilizador para o posterior traçado da curva de titulação.

Este módulo permite ainda calcular o pH e a força iónica de uma mistura de ácidos e bases, sendo os dados fornecidos pelo utilizador idênticos aos fornecidos no caso de uma titulação.

Os dados para os ácidos e bases utilizados nos cálculos estão compilados num ficheiro (ACIDBASE.LIB) que contém os nomes dos reagentes, os valores dos vários pK, o peso molecular e a fórmula. Quando um dos reagentes escolhidos pelo utilizador não constar da biblioteca o programa pede ao utilizador para completar os dados e pergunta-lhe se quer adicionar o novo reagente ao ficheiro. Uma das limitações encontradas prende-se com o facto de se ter que utilizar o nome inglês para seleccionar um reagente (p.ex. "Hydrochloric acid") não aceitando o programa que a escolha se faça pela fórmula. Este facto levanta algumas dificuldades pois nem sempre, para um aluno de liceu, é fácil a escrita correcta dos nomes em inglês. Este problema pode ser ultrapassado pois é possível editar o ficheiro ACIDBASE.LIB (através de um processador de texto) e acrescentar o nome em português, uma vez que o programa aceita a existência de vários sinónimos para uma mesma substância.

## CURVPLLOT

Este módulo, tal como o nome indica, permite o traçado das curvas de titulação ácido-base que foram calculadas pelo FABTIC ou outros ficheiros experimentais desde que estejam escritos em formato ASCII, com os pontos de

ACID-BASE: A Collection of Useful Programs for proton-transfer and metal-ligand complex systems	
copyright 1989 JCE Software Version Oct. 1989	author: R. W. Ramette Carleton College

0. QUIT Exit to DOS
1. FABTIC Calculate titration curves for AMI acid-base mixture.
  2. CURVPLLOT Plot titration curves or other I-T data.
  3. BUFFPREP Prepare buffers of specified pH and ionic strength.
  4. ALPHA Plot alpha diagrams for acid-base or metal-ligand systems.
  5. PICAL Standard pH calculations for simple solutions.
- Please tap the digit for your choice:

Fig. 1 - Menu inicial do programa.

pH e volume separados por vírgulas. O utilizador especifica quais os ficheiros que quer traçar podendo ser incluídos vários ficheiros e sendo portanto fácil a comparação entre curvas de titulação. Podem escolher-se os limites do gráfico, as marcas dos pontos (sendo possível escolher o símbolo e a dimensão), se se pretende incluir ou não a derivada da curva de titulação e a capacidade de tampão da solução (muito útil). Os gráficos são simples e claros, existindo a possibilidade de deslocar um cursor em forma de cruz pelo écran e que vai proporcionando a leitura do volume e do pH onde se encontra. Podem ainda incluir-se comentários no gráfico e nos eixos, colocar e retirar uma grelha e marcar os cantos opostos de uma zona que se pretende ver ampliada. Esta última possibilidade é de muito fácil utilização, sendo o único senão a dificuldade de voltar ao gráfico original (tem que se definir de novo os limites do gráfico).

Para que se possa correr este módulo, exige-se que o computador disponha de uma placa CGA, EGA ou VGA. Para imprimir é necessário ter corrido o comando GRAPHICS antes de entrar no módulo. Basta então fazer **Shift+PrintScreen**. Se a resolução utilizada for CGA tudo corre bem. Se for EGA ou VGA a impressão efectua-se, mas o que se encontrava a cores no écran (p. ex. a derivada da curva de titulação) pode não aparecer impresso. Deve-se então, sempre que se pretenda imprimir gráficos, optar por não incluir curvas coloridas.

```

105.9
C6H5CH2CHN2COOH
*
phosphoric acid (nomes admitidos)
orthophosphoric acid (número de prótons)
3, 0 (valores de pKa)
2.12, 7.21, 12.32 (peso molecular)
98.00 (fórmula)
H3PO4
*
phthalic acid

```

Fig. 2 - Extracto da base de dados ACIDBASE.LIB mostrando-se a sombreado a informação correspondente ao ácido fosfórico. À direita identifica-se cada um dos parâmetros.

## BUFFPREP

Este módulo responde à pergunta "Como posso preparar uma solução tampão com um pH e uma força iónica específicos?". O utilizador escolhe o pH e a força iónica pretendida. Poderá também escolher qual o ácido/base fraco(a) a utilizar ou então pedir ao programa que faça uma sugestão. O programa calculará como preparar o tampão a partir da substância seleccionada e de NaOH ou HCl. Calculará ainda a quantidade de um sal que é necessário adicionar para se obter a força iónica requerida. Quando as especificações do utilizador forem irrealistas o programa tenta mesmo assim calcular a "receita" do tampão, mas avisa que aquele será um mau tampão.

## ALPHA

Quer em sistemas ácido-base quer em sistemas metal-ligando é extremamente importante saber que fracção de uma dada espécie existe em determinadas condições. Este módulo calcula a fracção de cada uma das espécies em função do pH (ácido-base) ou em função da concentração de ligando (metal-ligando). Os dados para os equilíbrios ácido-base estão no ficheiro ACID-BASE.LIB e os dados para os equilíbrios metal-ligando no ficheiro METAL-LIG.LIB. Para além dos problemas já referidos no acesso à biblioteca ACID-BASE, no acesso ao ficheiro METALLIG os problemas avolumam-se, pois este ficheiro não permite a inclusão de sinónimos, logo todos os nomes têm que ser introduzidos em inglês. À parte estes problemas, o programa é bom, pois permite uma fácil visualização dos equilíbrios. O gráfico pode ser facilmente impresso, tal como no módulo CURV-PLOT, sendo aconselhável recorrer à opção monocromática. É ainda útil a indicação de  $\bar{n}$  (n bar) no gráfico, pois dá-nos uma indicação do grau de protonação ou de complexação em cada momento.

## PHCAL

Trata de soluções com apenas um sistema ácido-base. Bastante simples permite com facilidade o estudo de sistemas hipotéticos e verificar a influência de vários factores (p. ex.: força iónica) nas curvas de titulação.

## XYFILE

Permite construir um ficheiro que será posteriormente usado pelo módulo CURVLOT. Muito útil para construir um ficheiro com dados experimentais, é de fácil utilização.

## SEARCH

Este utilitário permite efectuar uma busca no ficheiro ACIDBASE.LIB. O utilizador pode especificar como pretende efectuar a busca: pelo nome, pelo pKa, pelo peso molecular, por um dos elementos existentes na fórmula, etc. (útil para saber o que se tem, não permite alterar o ficheiro).

## COMENTÁRIO FINAL

Como comentário final poder-se-á dizer que se trata de um programa muito bom a nível de cálculo embora pudesse ser um pouco melhor a nível de impressão.

Na interacção com o utilizador, o programa tem algumas particularidades que não nos agradaram, nomeadamente o facto de se terminar alguns quadros de entrada de dados e parâmetros com a tecla **Escape**. Esta tecla é usada em grande número de programas para abortar a acção em curso. A escolha das opções por números também pode causar alguns problemas pois em sistemas de diskettes o programa demora algum tempo a ler a diskette e o utilizador, por intuição carrega novamente na tecla correspondente ao item a seleccionar. Tal é interpretado pelo programa como tendo carregado duas vezes em determinada tecla e pode conduzir o utilizador a outro módulo que não o pretendido, ou mesmo a sair do programa. Este facto foi particularmente notado em alunos mais apressados (ou ansiosos de resposta por parte do computador) e nos menos habituados a trabalhar com computadores. Ambas as particularidades enumeradas são perfeitamente assimiláveis depois de uma primeira utilização.

O manual é muito bom, apresentando os vários módulos de maneira clara e é completado com tópicos explicativos sobre curvas de titulação e coeficientes de actividade. Apresenta ainda alguns conselhos sobre a utilização de aparelhos de pH e sugere exercícios para serem usados em conjunto com o programa.

Pensamos que o programa é, no seu todo, adequado aos alunos do ensino superior e mesmo a todos os técnicos que trabalhem com técnicas em que seja necessário medir pH, efectuar titulações ou preparar soluções tampão. Os módulos que calculam e traçam as curvas de titulação (FABTIC e CURVLOT) são adequados para utilização no ensino secundário.

Quaisquer questões poderão ser enviadas para a Sociedade Portuguesa de Química (SPQ) ao cuidado dos autores desta análise. O programa ACID/

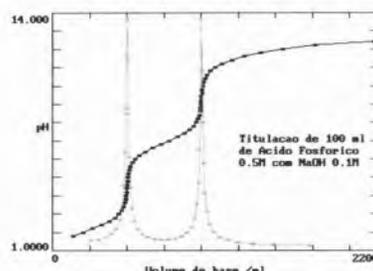


Fig. 3 - Exemplo de curva de titulação (a negro) mostrando-se também a derivada (a cinzento) e o comentário introduzido no gráfico.

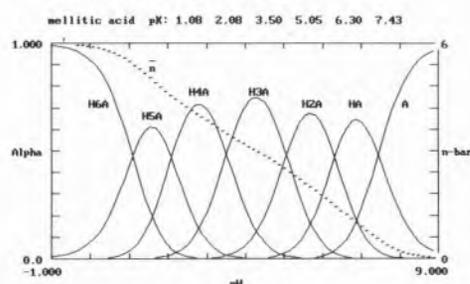


Fig. 4 - Diagrama de equilíbrio ácido-base para o ácido melítico (ácido benzohexacarboxílico).

BASE foi adquirido pela SPQ, e está à disposição dos sócios que o pretendem consultar antes de o adquirirem.

## A NOSSA CLASSIFICAÇÃO:

Cálculo	4
Gráficos	3
Impressão	3
Interacção com o utilizador	3
Manual	4

1-Mau, 2-Sofrível, 3-Razoável, 4-Bom, 5-Muito bom

## Necessidades de Hardware:

IBM PC ou compatível com placa gráfica CGA, EGA ou VGA. Necessita apenas de uma drive de baixa densidade de (5<sup>1</sup>/<sub>4</sub> ou 3<sup>1</sup>/<sub>2</sub>). A existência de disco rígido facilita em termos de rapidez as operações. Para a impressão dos gráficos é necessário impressora que faça cópia do ecrã utilizando a tecla PRINT SCREEN.

## Fornecedor:

Journal of Chemical Education: Software, Department of Chemistry, University of Wisconsin-Madison, Madison, WI 53706 USA

Preço: 60 Dólares.

\* Dep. Química, ICEN-INETI

\*\* Dep. Química, ISEL (Instituto Superior de Engenharia de Lisboa) e Dep. Química, ICEN-INETI



A Melhor Alternativa  
ao Método Kjeldahl

**FISONS**  
Instruments

NA 2000 ANALISADOR  
DE AZOTO e PROTEÍNA



O analisador de azoto e proteína NA 2000 é o primeiro instrumento que utiliza a técnica de Combustão Instantânea Dinâmica para a determinação de azoto e proteína numa grande quantidade de amostra. É uma alternativa ideal ao método clássico de Kjeldahl para proteínas, e que satisfaz os requisitos da norma AOAC 990.03.

Um processador de dados específico integra o pico cromatográfico do azoto e dá origem a uma informação incluindo a cromatograma, assim como as percentagens de azoto e proteína.

Poderá ser ligada uma balança ao NA 2000 possibilitando assim o envio directo do peso da amostra.

#### GRANDE DIMENSÃO DA AMOSTRA

Peso até 500 mg com pouca ou nenhuma preparação da amostra.

#### PROCESSO LIMPO E SEGURO

Ao contrário do método de Kjeldahl não utiliza ácidos nem produtos químicos tóxicos.

#### GRANDE CAPACIDADE DE AMOSTRAGEM

Análise automática até 125 amostras.

#### AUMENTO DE PRODUTIVIDADE

Análise completa azoto/proteína em 3 minutos.

#### BAIXO CUSTO POR ANÁLISE

Custo típico por análise inferior a 150\$00.

REPRESENTANTE :



**DIAS DE SOUSA**

Quinta da Piedade, Lote 15 - r/c  
2625 Póvoa de Sta. Iria  
Telefs. 959 23 16 - 959 24 09  
Fax 959 08 13