

# APLICACIÓN DEL SOFTWARE FREEMAT 4.1.1 EN LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE EQUILIBRIO Y VOLUMETRÍA ACIDO-BASE

Bicego, Franco – Chalvo, Gonzalo – Ciardelli, Sofía – Morea, Pilar

Tutor: Mg. Mónica Guerrero

*Cátedra: Matemática Superior Aplicada. Carrera de Ing. Química. Facultad Regional Villa María, Universidad Tecnológica Nacional. Av. Universidad 450. X5900GLB. Villa María, Córdoba, Argentina, tel. 0353-4537500.*

## Resumen

En este trabajo se ha aplicado el software libre Freemath 4.1.1 con el propósito de desarrollar un algoritmo de aplicación para el cálculo de procesos tales como: equilibrio ácido-base, titulación y cálculo de fracciones molares de las especies presentes. El mismo se constituirá en una herramienta válida para el análisis de distintos sistemas de equilibrio. Se analizaron diversos casos presentados en la bibliografía específica y se comparan con los resultados de su aplicación, observándose desviaciones menores al 1,5%.

## Introducción

El mundo de las reacciones químicas es inconmensurable. Pese a ello el transcurso de las mismas no es caprichoso, tiene un lineamiento. El dominio de los caminos de las reacciones químicas permite el avance tecnológico y en ese dominio está involucrada la medición. El proceso de medición, con todo lo que éste implica, es la forma en que la Química Analítica participa.

La Química Analítica es una de las ramas más importantes de la Química moderna, estando relacionada con una amplia gama de otras disciplinas, tales como física, ingeniería, medicina y agricultura entre otras. Comprende la separación, identificación y determinación de la composición de un material o muestra, mediante diferentes métodos. Éstos pueden clasificarse de acuerdo a su origen, en químicos y físico-químicos.

El análisis por volumetría ácido-base es el más utilizado dentro de los métodos químicos, dado que no requiere del uso de instrumentos complejos. Su origen está basado en el equilibrio químico, estado en el que las concentraciones de los reactivos y los productos no tienen ningún cambio neto en el tiempo [1].

## Desarrollo e implementación

Es de suma importancia contar con herramientas que permitan realizar cálculos rápidos y fiables, con el fin de obtener resultados para el análisis y comprensión de diversos sistemas. En este trabajo se han integrado herramientas utilizadas en las cátedras de Química Analítica y Matemática Superior Aplicada. La propuesta presentada, es el desarrollo de un algoritmo de aplicación para contribuir a una mayor comprensión de los procesos involucrados en la resolución de problemas relacionados con equilibrios ácido-base, haciendo uso para este propósito de un software específico.

Se utilizará como herramienta Freemath 4.1.1 que es un entorno de aplicación en el procesamiento de datos y modelado de procesos de ingeniería. Este es similar a sistemas de características comerciales como Matlab de Mathworks e IDL de Investigación de Sistemas, pero en código abierto. Término con el que se conoce al software distribuido y desarrollado libremente. La utilización de un software libre, presenta la ventaja de ser accesible a todas las personas que así lo deseen, constituyéndose en una herramienta de trabajo de costo nulo, siendo a la vez tan eficaz como un software propietario [2] [3].

El algoritmo desarrollado presenta un menú de selección permitiendo al usuario la elección del proceso deseado (equilibrio ácido-base, titulación o cálculo de fracciones molares). A su vez cada uno de ellos despliega diferentes opciones para optar por ácidos o bases, fuertes, débiles, etc., [4]. La secuencia continúa solicitando el ingreso de datos para su posterior procesamiento y obtención de resultados y gráficos correspondientes que son visualizados en pantalla o bien en salida impresa.

Los sistemas considerados en el desarrollo del mismo incluye: ácido fuerte, ácido monoprótico débil, ácido diprótico débil, base débil, base fuerte, como así también titulación de ácido fuerte con base fuerte y de ácido débil con base fuerte. Por último se añadió el cálculo de las fracciones molares vinculadas en la titulación [5] [6].

## Resultados

Para el estudio de la confiabilidad en la aplicación del algoritmo desarrollado, se analizaron diferentes modelos de la bibliografía específica, realizando cálculos manuales. Estos últimos fueron comparados con los obtenidos por el algoritmo realizado en FreeMat. En todos los casos las desviaciones resultan insignificantes.

La Tabla N° 1 muestra los resultados obtenidos en la determinación del pH de diferentes soluciones de ácidos y bases débiles.

Tabla N° 1: Determinación del pH de distintas soluciones

Tipo	Concentración	pH Analítico	pH con software	Desviación[%]
H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	1.35 x 10 <sup>-5</sup> M	5.610	5.608	0.035
NH <sub>3</sub>	NH <sub>3</sub> 0.01 M	10.620	10.620	0.000

En las Tablas N° 2 y 3 se presentan cálculos de pH en procesos de titulación de ácidos fuertes y débiles, con bases fuertes. Como puede observarse las desviaciones son inferiores al 0.1 % con excepción del segundo ejemplo que tiene una desviación del orden del 1.5 %.

Tabla N° 2: Titulación de ácido fuerte con base fuerte

Tipo	Volumen	Concentración	pH Analítico	pH con software	Desviación[%]
HCl NaOH	25 ml 10 ml	0.1 M 0.1 M	1.367	1.368	0.073
HCl NaOH	50 ml 40ml	0.1 M 0.15 M	12.045	12.046	0.008

Tabla N° 3: Titulación de ácido débil con base fuerte

Tipo	Volumen	Concentración	pH analítico	pH con software	Desviación[%]
CH <sub>3</sub> COOH NaOH	40 ml 10 ml	0.100 M 0.100 M	4.280	4.284	0.093
H <sub>2</sub> A KOH	25 ml 15.14 ml	0.173 M 0.200 M	2.840	2.882	1.478

Tabla N° 4: Titulación de tres ácidos monoproticos débiles con una base fuerte

Ácido	Volumen	Concentración	Constante de disociación
CH <sub>3</sub> COOH NaOH	25 ml Vb2	0.100 M 0.100 M	$K_A = 1.73 \times 10^{-5}$
H <sub>3</sub> BO <sub>3</sub> NaOH	25 ml Vb2	0.100 M 0.100 M	$K_B = 5.88 \times 10^{-10}$
HCOOH NaOH	25 ml Vb2	0.100 M 0.100 M	$K_C = 1.7 \times 10^{-4}$

La Tabla 4 muestra los ácidos y bases empleados en el proceso de titulación, sus volúmenes, concentraciones y las constantes de disociación de cada uno de ellos.

En la Fig. 1 se grafica el volumen de base utilizada en la titulación vs. pH. En la misma puede analizarse la influencia del valor de la constante de disociación y su concentración en la titulación de un ácido débil con una base fuerte. Al disminuir la fuerza de un ácido, se produce un aumento del pH inicial y una disminución del intervalo de cambio, no existiendo indicador que nos permita visualizar el punto de neutralización para el ácido bórico. Se puede decir que para obtener resultados más exactos es conveniente utilizar ácidos cuyas constantes de disociación sean significantes, es decir, el producto de la concentración analítica del ácido y la constante de disociación debe ser mayor que  $10^{-8}$ , con lo cual se produce un cambio apreciable de pH permitiendo una fácil medición del mismo. En este ejemplo también podemos distinguir que la grafica cambia de concavidad a pH igual al pK de cada uno de los ácidos.

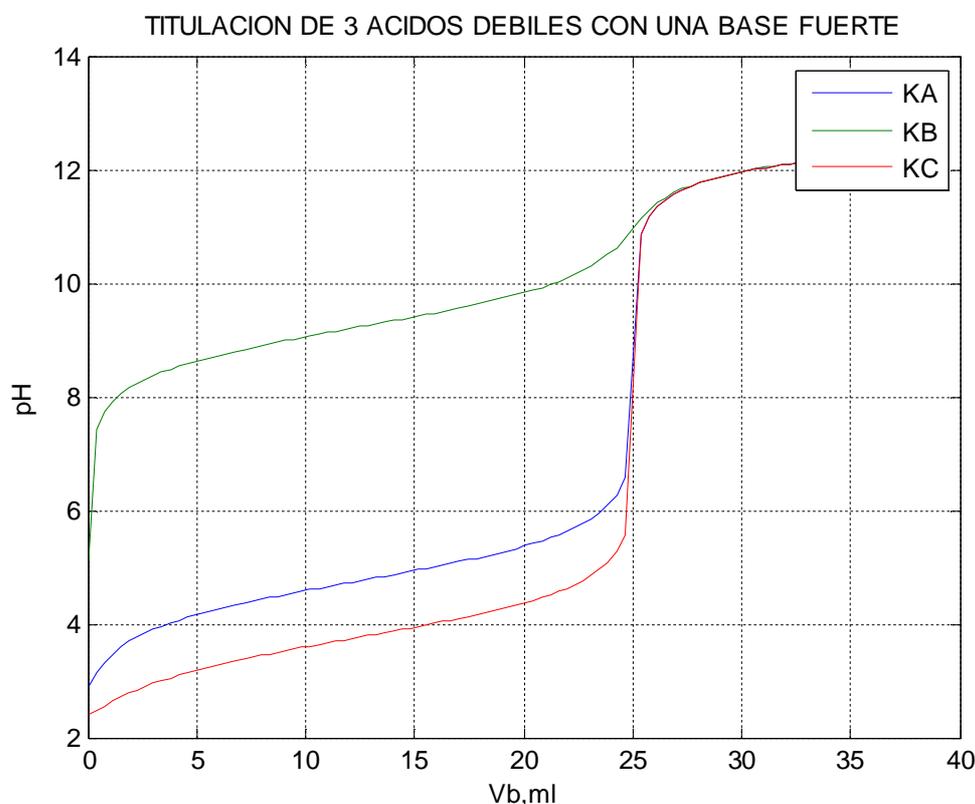


Fig. 1: Titulación de ácidos monoproticos débiles con base fuerte

La Tabla N° 5 muestra el cálculo de las fracciones molares en forma analítica y por aplicación de FreeMat, observándose desviaciones menores al 1%.

Tabla N° 5: Cálculo de las fracciones molares de las especies vinculadas

Tipo de Ácido	Cálculo Analítico	Cálculo con software	Desviación[%]
Ácido acético [HAc] en pH 7	[HAc] = $5.710 \times 10^{-3}$ [Ac <sup>-</sup> ] = $9.940 \times 10^{-1}$	[HAc] = $5.700 \times 10^{-3}$ [Ac <sup>-</sup> ] = $9.943 \times 10^{-1}$	0.175 0.031
Ácido oxálico [H <sub>2</sub> Ox] en pH 7	[H <sub>2</sub> Ox] = $3.380 \times 10^{-9}$ [HOx <sup>-</sup> ] = $1.900 \times 10^{-3}$ [Ox <sup>2-</sup> ] = $9.980 \times 10^{-1}$	[H <sub>2</sub> Ox] = $3.383 \times 10^{-9}$ [HOx <sup>-</sup> ] = $1.900 \times 10^{-3}$ [Ox <sup>2-</sup> ] = $9.981 \times 10^{-1}$	0.089 0.000 0.010

## Conclusión

A partir de los resultados observados se pueden obtener las siguientes conclusiones:

- i) la desviación entre los valores calculados analíticamente y mediante la aplicación del algoritmo propuesto en este trabajo, presentan desviaciones menores al 1.5%,
- ii) dada la simplicidad del algoritmo, asociado con una sólida base de conocimientos teórico-práctico, lo convierten en una herramienta de aplicación para la resolución de problemas en cátedras específicas, tales como, química analítica, química analítica aplicada, entre otras,
- iii) los resultados se consideran válidos para el cálculo de pH a lo largo de toda la curva de titulación; para ácidos y bases débiles y fuertes,
- iv) el presente trabajo constituye una base sólida sobre la cual pueden proyectarse ampliaciones en cuanto a los temas que incluye y optimizarse los ya desarrollados.

## Referencias

- [1] Gilbert H. Ayres, *Análisis químico cuantitativo*, 3º Edición (1970).
- [2] *Fundamentación del uso de software libre en la universidad pública. Enseñando Matemática con herramientas alternativas* – Jornadas de Enseñanza e Investigación Educativa en el campo de las Ciencias Exactas y Naturales (2007).
- [3] FSF Free Software Foundation; <http://www.fsf.org>
- [4] Ruben Dario Osorio Giraldo; *Métodos numéricos en química con matlab*, 1º Edición (2007).
- [5] I.M.kolthoff, E.B.Sandell, E.J.Meehan, Stanley Bruckenstein. *Análisis químico cuantitativo*, 5º Edición (1972).
- [6] Leicester F.Hamilton,S.B, Stephen G.Simpson,Ph.D., David W.Ellis Ph.D. *Cálculos de química analítica*, 7º Edición (1992).