

UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
CURSO DE QUÍMICA LICENCIATURA

MARA ANTONIA SOUSA OLIVEIRA

**ESTUDO DA DETERMINAÇÃO DE PH DE SOLUÇÕES AQUOSAS DE UM ÁCIDO
MONOPRÓTICO FRACO: CORRELAÇÕES DE VALORES EXPERIMENTAIS E
TEÓRICOS**

São Luís
2018

MARA ANTONIA SOUSA OLIVEIRA

**ESTUDO DA DETERMINAÇÃO DE PH DE SOLUÇÕES AQUOSAS DE UM ÁCIDO
MONOPRÓTICO FRACO: CORRELAÇÕES DE VALORES EXPERIMENTAIS E
TEÓRICOS**

Monografia apresentada ao Curso de Química
Licenciatura da Universidade Federal do
Maranhão, para obtenção do grau de
licenciatura em Química.

Orientador: Prof. Dr. Joacy Batista de Lima

São Luís

2018

Ficha gerada por meio do SIGAA/Biblioteca com dados fornecidos pelo(a) autor(a).
Núcleo Integrado de Bibliotecas/UFMA

Oliveira, Mara Antonia Sousa.

Estudo da determinação de ph de soluções aquosas de um ácido monoprotico fraco: correlações de valores experimentais e teóricos / Mara Antonia Sousa Oliveira. - 2018.

39 p.

Orientador(a): Joacy Batista de Lima.

Monografia (Graduação) - Curso de Química, Universidade Federal do Maranhão, São Luís - MA, 2018.

1. Ácidos Fracos. 2. Equilíbrio químico. 3. Medidas de pH. I. Lima, Joacy Batista de. II. Título.

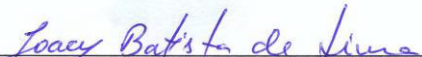
MARA ANTONIA SOUSA OLIVEIRA

ESTUDO DA DETERMINAÇÃO DE PH DE SOLUÇÕES AQUOSAS DE UM ÁCIDO
MONOPRÓTICO FRACO: CORRELAÇÕES DE VALORES EXPERIMENTAIS E
TEÓRICOS

Monografia apresentada ao Curso de
Química Licenciatura da
Universidade Federal do Maranhão
para obtenção de grau de
Licenciada em Química.

Aprovada em: 13/12/2018

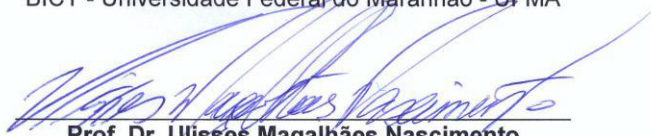
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Joacy Batista de Lima (Orientador)
DEQUI - Universidade Federal do Maranhão - UFMA



Prof. Dra. Janyeid Karla Castro Sousa
BICT - Universidade Federal do Maranhão - UFMA



Prof. Dr. Ulisses Magalhães Nascimento
DETQUI - Universidade Federal do Maranhão - UFMA

Deus sabe o final da minha história, pois,
ele é o meu escritor.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço ao meu Deus, que sempre sonhou além de mim para que eu pudesse chegar até aqui. Sem Ele nada disso seria possível. Agradeço a minha família, especialmente, ao meu pai Manoel Mateus de Oliveira que sempre me apoiou e nunca me deixou desistir, sempre acreditou no meu potencial, à minha mãe Juciara de Sousa e Sousa e à minha irmã Luciane Sousa Oliveira dos Santos que me ajudou diretamente a concluir este trabalho, que mesmo sem ter conhecimento sobre o conteúdo, ela se dedicou a me ajudar para que eu pudesse concluir. Ao professor Joacy Batista Lima por nortear minha pesquisa e me orientar. A todos aqueles amigos que contribuíram de alguma forma para que eu pudesse concluir o ensino superior e que acreditaram que eu seria uma ótima profissional e me motivou a começar e a concluir tudo isso, em especial ao meu amigo Igor Carvalho, que sempre me incentivou e me ajudou muito a concluir essa etapa na minha vida, à minha amiga Larissa Silva Costa, que sempre esteve disposta a me ajudar em qualquer situação e à minha amiga Suzi Morais Aires, que me incentivou, foi minha parceira em todas as disciplinas e aguentou tudo junto comigo.

RESUMO

A presente pesquisa teve como objetivo correlacionar os valores experimentais de pH de soluções aquosas de ácido acético em diferentes forças iônicas com os valores teóricos das deduções de fórmulas e identificar os possíveis erros cometidos ao realizar os experimentos, além de construir um aplicativo que possa auxiliar nos cálculos de equilíbrio das espécies em solução aquosa de um ácido fraco. Trata-se de um estudo analítico de uma série de experimentos simples, tendo como abordagem a análise de dados de forma quantitativa. Os dados foram coletados de agosto a novembro de 2018 onde foram preparadas quatro soluções de ácido acético e três soluções de cloreto de potássio em diferentes concentrações. De acordo com os dados obtidos, os valores de pH's medidos experimentalmente através de um peagômetro foram concordantes com os valores teóricos obtidos através das equações de equilíbrio das espécies envolvidas do ácido acético com um erro menor que 3 %.

Palavras-Chave: Medidas de pH. Equilíbrio químico. Ácidos fracos.

ABSTRACT

The aim of the present research was to correlate the experimental values of pH of aqueous solutions of acetic acid in different ionic strengths with the theoretical values of the deductions of formulas and to identify the possible errors made during the experiments, as well as to build an application that can help us equilibrium calculations of species in aqueous solution of a weak acid. This is an analytical study of a series of simple experiments, with the approach of quantitative data analysis. The data were collected from August to November 2018 where four solutions of acetic acid and three solutions of potassium chloride in different concentrations were prepared. According to the data obtained, the values of pH's measured experimentally through a peagometer were concordant with the theoretical values obtained through the equilibrium equations of the involved acetic acid species with an error of less than 3%.

Keywords: pH measurements. Chemical equilibrium. Weak acids.

LISTA DE TABELA

Tabela 1-	Características físicas da água.....	16
Tabela 2-	Constantes de ionização em termos das concentrações do ácido acético a 25°C.....	19
Tabela 3-	Condutância equivalente do cloreto de potássio a 25°C.....	19
Tabela 4-	Reações que fazem transferências de prótons, tendo como solvente, água.....	a 25
Tabela 5-	Produto iônico da água a várias temperaturas conforme Harned e Robinson.....	26
Tabela 6-	Características de alguns solventes.	28
Tabela 7-	Ácidos e bases fortes comuns.....	29
Tabela 8-	Concentrações do ácido e do eletrólito.....	33
Tabela 9-	Mistura de soluções de ácido a 0,002 mol/L com o eletrólito em diferentes concentrações.....	34
Tabela 10-	Mistura de soluções de ácido a 0,02 mol/L com o eletrólito em diferentes concentrações.....	34
Tabela 11-	Mistura de soluções de ácido a 0,2 mol/L com o eletrólito em diferentes concentrações.....	34
Tabela 12-	Mistura de soluções de ácido a 2 mol/L com o eletrólito em diferentes concentrações.....	35
Tabela 13-	Valores experimentais e teóricos quando $C = 0$ e $K = 0$	37

LISTA DE FIGURA

Figura 1 – Estrutura do íon hidrônio	23
Figura 2 - Par ácido-base conjugado.....	24
Figura 3 - Planilha desenvolvida para a determinação do pH de um ácido fraco utilizando cálculo numérico através do método de Newton-Raphson	36

SUMÁRIO

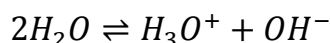
1	INTRODUÇÃO	11
2	OBJETIVOS	13
2.1	Geral.....	13
2.2	Específicos.....	13
3	REFERENCIAL TEÓRICO	14
3.1	Constantes de Equilíbrio.....	14
3.1.1	Força Iônica.....	15
3.1.2	Água como solvente ionizante.....	15
3.1.2.1	<i>Propriedades da molécula da água, H₂O</i>	15
3.1.3	Teorias das soluções iônicas.....	18
3.1.3.1	<i>Teorias da dissociação eletrolítica</i>	18
3.1.3.2	<i>Teoria da atração interiônica</i>	20
3.2	Coeficiente de Atividade.....	21
3.3	Ácidos e Bases.....	22
3.3.1	Conceitos fundamentais de ácidos e bases.....	22
3.3.2	Ácidos e bases conjugados.....	24
3.3.3	Dissociação da Água.....	25
3.3.3.1	<i>Equilíbrio de transferência de próton em água</i>	27
3.3.4	Equilíbrio ácido-base em solventes não aquosos.....	27
3.3.5	Força dos ácidos e bases.....	29
3.3.6	Constantes de ionização de ácidos e bases fracos.....	30
4	METODOLOGIA	33
4.1	Tipo de Estudo.....	33
4.2	Local e período da Pesquisa.....	33
4.3	Amostragem.....	33
4.4	Variáveis do estudo e análise de dados.....	35
4.5	Validação de dados	35
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	36
6	CONCLUSÃO	38
	REFERÊNCIAS	39

1 INTRODUÇÃO

Os ácidos e bases são classificados de acordo com as reações químicas específicas que podem provocar. Em grande parte, as reações químicas entre ácidos e bases têm uma aplicação geral, no entanto podem ocorrer situações particulares de aplicações restritas.

De acordo com Bronsted e Lowry (1923), os ácidos são definidos como aqueles que doam prótons e as bases são aceitadores de prótons (SHRIVER; ATKINS, 2003, p. 167).

A ionização da água acontece em uma extensão diminuta, que envolve a transferência de um próton entre uma molécula a outra. A autoionização, chamada também de autoprotólise é representada pela equação:



Como afirma a teoria de Bronsted e Lowry, para um ácido ou uma base ser forte ou fraco, vai depender da quantidade de prótons que ele é capaz de doar ao solvente (ATKINS, 2003, p. 462).

“Todos os ácidos fracos, representados por HA, reagem com a água doando um próton para o H₂O:” (HENRY, 2011, p. 158).

“Força iônica, μ , é uma medida da concentração total de íons em solução. Quanto mais concentrado e carregado for um íon, maior será a sua participação no cálculo da força iônica” (HARRIS, 2011, p. 238).

Para que uma reação química chegue em seu ponto de equilíbrio a mesma precisa ser reversível. Isso acontece quando a reação ocorre em extensão apreciável, podendo ser tanto na direção direta como na direção inversa. Desta forma, “uma transformação posterior na composição do sistema, com o decorrer do tempo, suposto que não haja variações de temperatura e pressão, já não é observável”. Sendo que ocorre um processamento com iguais velocidades, simultaneamente, entre as reações direta e inversa (OHLWEILER, 1976, p. 20).

A água como solvente ionizante tem grande importância para que as propriedades potenciais dos eletrólitos sejam manifestadas, sendo que o solvente, diante da movimentação do soluto, não é um simples provedor do espaço.

É evidente que o coeficiente de atividade, sendo de uma determinada espécie iônica, pode servir como uma eficiente medida de equilíbrio do qual ele está inserido. “Em soluções não demasiadamente concentradas, o coeficiente de

atividade de um dado íon independe da natureza do eletrólito e depende apenas da força iônica” (OHLWEILER, 1976, p. 31).

É importante para a determinação de pH que o eletrodo de pH esteja em bom estado de conservação, que o peagômetro tenha a compensação da temperatura e uma boa precisão nas medidas para que possamos diminuir os erros cometidos no laboratório na medição de pH de soluções aquosas.

Este trabalho é de grande importância, pois na determinação do pH é necessário levar em consideração todos os parâmetros do equilíbrio químico e para isso foi preciso a elaboração de um aplicativo para auxiliar os cálculos, para que assim os valores experimentais se aproximem dos valores teóricos.

2 OBJETIVOS

2.1 Geral

Realizar um estudo analítico na determinação do pH de soluções aquosas de um ácido monoprótico fraco (ácido acético) em diferentes forças iônicas e comparar os resultados com os valores teóricos obtidos por dedução de uma equação levando em consideração todos os parâmetros envolvidos no equilíbrio.

2.2 Específicos

- Construir um aplicativo que possa auxiliar nos cálculos de equilíbrio das espécies em solução aquosa de um ácido fraco;
- Correlacionar os valores experimentais de pH com os valores teóricos das deduções de fórmulas;
- Encontrar o melhor valor dos parâmetros empíricos na equação para que o valor do pH teórico se aproxime do valor experimental;
- Descrever os erros encontrados nas medidas experimentais;

3 REFERENCIAL TEÓRICO

3.1 Constantes de Equilíbrio

Para que uma reação química chegue em seu ponto de equilíbrio ela precisa ser reversível. Isso acontece quando a reação ocorre em extensão apreciável, podendo ser tanto na direção direta como na direção inversa. Desta forma, “uma transformação posterior na composição do sistema, com o decorrer do tempo, suposto que não haja variações de temperatura e pressão, já não é observável” Sendo que ocorre um processamento com iguais velocidades, simultaneamente, entre as reações direta e inversa. (OHLWEILER, 1976, p. 20).

Guldberg e Waage formularam a lei da ação das massas. Diante dessa lei é possível perceber que “a velocidade de reação é proporcional às concentrações molares dos reagentes.” Ou seja, quando a reação reversível é: $A + B \rightleftharpoons C + D$, a velocidade da reação direta ocorre como: $V_1 = k_1 [A] [B]$ e a velocidade da reação inversa como: $V_2 = k_2 [C] [D]$ (OHLWEILER, 1976, p. 20).

Tendo-se na condição de equilíbrio $V_1 = V_2$, ou seja, $k_1 [A] [B] = k_2 [C] [D]$. Fazendo $K_1/K_2 = K_c$, onde

$$K_c = \frac{[C][D]}{[A][B]} \quad \text{eq. 01}$$

O k_c é a constante de equilíbrio. Essa constante é expressa em termos de concentrações molares.

A reação geral: $aA + bB \rightleftharpoons gG + hH$ tem como constante de equilíbrio:

$$K_c = \frac{[G]^g [H]^h}{[A]^a [B]^b} \quad \text{eq. 02}$$

A lei do equilíbrio químico é uma das mais importantes generalizações da química. No caso de sistemas gasosos, usa-se o termo de pressões parciais, onde a pressão parcial de um gás é proporcionalmente a sua concentração na fase gasosa. Daí então temos a equação:

$$K_p = \frac{P_G^g \cdot P_H^h}{P_A^a \cdot P_B^b} \quad \text{eq. 03}$$

A verdadeira constante de equilíbrio é dada pelo quociente das atividades dos componentes:

$$Kp = \frac{aG^g \cdot aH^h}{aA^a \cdot aB^b} \quad \text{eq. 04}$$

3.1.1 Força Iônica

“Força iônica, μ , é uma medida da concentração total de íons em solução. Quanto mais concentrado e carregado for um íon, maior será a sua participação no cálculo da força iônica” (HARRIS, 2011, p. 238).

Força iônica:

$$\mu = \frac{1}{2} (C_1 \cdot Z_1^2 + C_2 \cdot Z_2^2 + \dots) = \frac{1}{2} \sum_i C_i \cdot Z_i^2 \quad \text{eq. 05}$$

- C = concentração das i-ésimas espécies
- Z = carga

3.1.2 Água como solvente ionizante

A água como solvente ionizante tem grande importância para que as propriedades potenciais dos eletrólitos sejam manifestadas, sendo que o solvente, diante da movimentação do soluto, não é um simples provedor do espaço.

O solvente “exerce um papel ativo na produção, a partir do cristal eletricamente inerte, líquido ou gás, das partículas carregadas móveis no seio da solução”. Por isso é necessário conhecer a estrutura da água e suas propriedades para que seja possível compreender qualquer comportamento que possa ocorrer com as soluções iônicas. (OHLWEILER, 1976, p. 22).

3.1.2.1 Propriedades da molécula da água, H₂O:

- Molécula angular;
- Fortemente polar;
- Não tem existência discreta a não ser em estado de vapor;
- Altamente associada nos estados líquido e sólido (presença de ligações de hidrogênio);
 - No gelo ordinário, as moléculas se dispõem e o átomo de uma dada molécula se une através de ligações de hidrogênio.

Cada átomo na coordenação tetraédrica dos átomos de oxigênio na rede de gelo originário encontra-se rodeado por quatro outros átomos de oxigênio a 2,76 Å, sendo que os átomos de hidrogênio estão localizados entre os átomos de oxigênio. (OHLWEILER, 1976, p. 22).

➤ Parâmetros estruturais da água: $d(H-O) = 0,96 \text{ \AA}$ e $\angle H-O-H = 104^{\circ}40'$.

“A magnitude do ângulo de interligação encontra sua explicação na hibridização sp^3 , com dois pares isolados de elétrons ocupando duas das quatro posições tetraédricas” (OHLWEILER, 1976, p. 22).

Tabela 1. Características físicas da água

Ponto de congelação, °C	0,000
Ponto de ebulição, °C	100,000
Densidade da água (livre de ar), g/ml a 25°C	0,99707
Tensão superficial a 20°C (em contato com ar úmido), dinas/cm	72,7
Viscosidade, centipoise a 25°C	0,8903
Constante dielétrica a 25°C	78,303
Condutância elétrica específica, $\text{ohm}^{-1} \text{cm}^{-1}$ a 18°C	$0,04 \times 10^{-6}$
Momento dipolar, unidades cgs $\times 10^{18}$ (D)	1,85

(OHLWEILER, 1976, p. 23).

Muitos eletrólitos se relacionam com a natureza polar da água e também à presença de seus dois pares eletrônicos livre, isso porque esse solvente tem uma elevada constante dielétrica. Sendo que a molécula H_2O pode ser doadora em ligações coordenadas.

Na presença de compostos iônicos ocorre a separação de íons preexistentes, um processo que ocorre devido a dissolução de eletrólitos. Essa dissolução na água é considerada a separação de íons preexistentes no soluto.

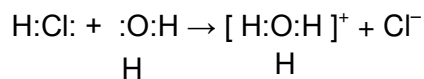
Para separar dois íons com cargas opostas a força necessária é tanto menor como mais elevada a constante dielétrica do meio. “A constante dielétrica da água é 78,3 a 25°C, isso significa que duas cargas elétricas opostas se atraem, na água,

com uma força tantas vezes menor do que se fosse no vácuo” (OHLWEILER, 1976, p. 24).

A hidratação dos íons também é considerada outro fator que atua na dissolução dos compostos iônicos em água. Pois, devido a facilidade garantida pelas moléculas dipolares da água, ocorre mais rápida a passagem dos íons para o meio do solvente.

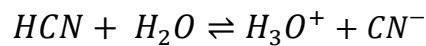
Para que cada íon positivo seja cercado de um certo número de moléculas de água, as extremidades negativas das moléculas de água circunvizinhas devem ser atraídas pelos íons positivos. A mesma situação ocorre para com os íons negativos (OHLWEILER, 1976, p. 25).

- Processo da dissolução do cloreto de hidrogênio em água



A formação de íon hidrônio, H_3O^+ , e íon cloreto, Cl^- , é o resultado desse processo.

- Ionização do cianeto de hidrogênio. Ionização parcial em solução aquosa.



A ionização se dá na proporção de 0,01 em solução 0,1 M.

3.1.3 Teorias das soluções iônicas

3.1.3.1 Teoria da dissociação eletrolítica

Essa teoria foi desenvolvida por Arrhenius com o objetivo de explicar as propriedades coligativas dos eletrólitos e a condutividade elétrica das soluções iônicas. (OHLWEILER, 1976, p. 26).

A teoria da dissociação aponta os seguintes temas:

- a) Alguns elementos quando dissolvidos em água, com por exemplo, os ácidos, as bases e os sais, tendem a se ionizar espontaneamente;
- b) A solução permanece totalmente eletricamente neutra, pois a carga total dos cátions é igual à dos ânions;
- c) Para se ter um grau de dissociação é necessário saber o valor da concentração, sendo que aumenta com a diluição;
- d) A condutividade da solução tem relação com a fração ionizada.

Essa teoria também vai abranger as soluções de eletrólitos fracos, permitindo, “determinar as constantes de ionizações de ácidos e bases fracas através de medidas da condutividade” (OHLWEILER, 1976, p. 26).

A ionização parcial de um eletrólito fraco uni-univalente AB pode ser representada pela seguinte fórmula: $AB \rightleftharpoons A^+ + B^-$.

A equação para a lei do equilíbrio químico é:

$$K_c = \frac{[A^+][B^-]}{[AB]} = \frac{(C\alpha)(C\alpha)}{C(1-\alpha)} \quad \text{eq. 06}$$

- K_c = Constante de ionização em termos das concentrações
- C = Concentração molar total do eletrólito dissolvido
- α = Fração ionizada

Essa equação ficou conhecida como a lei da diluição de Ostwald, “foi usada para avaliar a constante de ionização de eletrólitos fracos em função da concentração molar e do grau de ionização”. É utilizado a condutância equivalente Λ para calcular o grau de ionização do eletrólito, tendo a concentração específica para a diluição infinita Λ_0 . Onde, a condutância equivalente em diluição infinita do eletrólito AB é dada por: $\Lambda_0 = \lambda_+^0 + \lambda_-^0$ (OHLWEILER, 1976, p. 27), assim como mostra a tabela 2.

Tabela 2. Constantes de ionização em termos das concentrações do ácido acético a 25°C

$C \times 10^3$	Λ (Observado)	$\alpha = \Lambda/\Lambda_0$	$K_c \times 10^5$
0,02801	210,38	0,5384	1,768
0,11135	127,75	0,3270	1,779
0,21844	96,49	0,2470	1,791
1,28031	48,15	0,1232	1,797
2,41400	32,22	0,08247	1,809
5,91153	20,96	0,05364	1,823
9,8421	16,37	0,04189	1,832
20,000	11,57	0,02961	1,840

(OHLWEILER, 1976, p. 28).

A teoria da dissociação eletrolítica não explica os pequenos desvios que foram aludidos, como mostra a tabela acima, tabela 2, mas explica as soluções dos eletrólitos fracos com boa precisão.

Tabela 3. Condutância equivalente do cloreto de potássio a 25°C

C	A
0,05	115,69
0,01	122,37
0,005	124,34
0,001	127,27
0,0005	128,04
0,0001	129,00
(Diluição Infinita)	$\Lambda_0 = 129,85$

(OHLWEILER, 1976, p. 28).

A ionização gradual do eletrólito não influencia a condutância equivalente das soluções dos eletrólitos fortes como mostra a tabela 3, sendo que essa aumenta devido a diluição, onde vai depender do número de íons e da mobilidade. Já “o aumento da condutância equivalente das soluções dos eletrólitos fracos com a diluição, resulta, de fato, de um aumento do grau de ionização.” (OHLWEILER, 1976, p. 29).

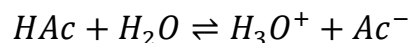
3.1.3.2 Teoria da atração interiônica

Os criadores dessa teoria foram Debye e Huckel com o objetivo de explicar as soluções dos eletrólitos fortes de acordo com a atração interiônica.

Ao redor de cada íon negativo há mais íons positivos do que negativos e vice-versa. Isso acontece devido a atração eletrostática entre os íons positivos e negativos. “A força iônica é uma medida do campo elétrico devido aos íons existentes na solução como mostra a equação 1 ” (OHLWEILER, 1976, p. 29).

Além da teoria interiônica explicar sobre o comportamento das soluções dos eletrólitos fortes, explica o comportamento dos cátions e ânions que participam de um equilíbrio químico, onde é muito influenciado pela força iônica do meio. “Com o aumento da força iônica do meio uma dada espécie iônica torna-se menos eficiente na determinação da posição do equilíbrio químico. ” (OHLWEILER, 1976, p. 30).

Em relação ao ácido acético, é de grande importância a presença do eletrólito forte, pois ele tem um papel muito significativo.



O efeito da força iônica sobre o equilíbrio químico é definido por:

$$a_i = M_i \gamma_i \quad \text{eq. 07}$$

- a_i = atividade do íon
- M_i = concentração molar
- γ_i = coeficiente da atividade

3.2 Coeficiente de atividade

O coeficiente de atividade de uma espécie iônica pode servir como uma eficiente medida do equilíbrio ao qual ele está inserido. “Em soluções não demasiadamente concentradas, o coeficiente de atividade de um dado íon independe da natureza do eletrólito e depende apenas da força iônica” (OHLWEILER, 1976, p. 31).

Quanto maior é a carga do íon, o coeficiente de atividade tende a se afastar da unidade, rapidamente, de uma espécie iônica. Se são espécies moleculares neutras, a aproximação é igual à unidade, não importando a intensidade da força iônica. No entanto para esses íons de carga idêntica existem algumas pequenas diferenças que podem ser observadas devido ao diâmetro efetivo dos íons hidratados (OHLWEILER, 1976, p. 31).

A constante de equilíbrio para a reação $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$, apresenta-se na forma de $K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$, sendo que, nas reações químicas, através dessa equação se terá qualquer efeito de força iônica.

Atividade de C: $a_C = [C] \gamma_C$

- a_C = atividade de C
- $[C]$ = concentração molar de C
- γ_C = coeficiente de atividade de C

“O coeficiente de atividade depende da força iônica. Se não existisse nenhum efeito da força iônica sobre a reação química o coeficiente da atividade seria 1” (HARRIS, 2011, p. 239).

A fórmula geral da constante de equilíbrio para a reação:

$$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD \quad \text{é:} \quad K = \frac{A_C^c A_D^d}{A_A^a A_B^b} = \frac{[C]^c \gamma_C^c [D]^d \gamma_D^d}{[A]^a \gamma_A^a [B]^b \gamma_B^b} \quad \text{eq. 08}$$

Não é possível fazer experimentos laboratoriais de uma única espécie iônica para determinar o coeficiente de atividade, pois há o envolvimento de muitas espécies na solução de um eletrólito.

Existirá a seguinte relação de um eletrólito uni-univalente entre a atividade “a” do soluto:

$$a = a_+ \cdot a_- = a_{\pm}^2 \quad \text{eq. 09}$$

- a_+ e a_- = atividades do cátion e do ânion
- a = atividade iônica média

3.3 Ácidos e bases

Alguns autores classificaram os ácidos e as bases de acordo com suas teorias, tais como a teoria de Arrhenius (1884), Bronsted-Lowry (1923) ou de Lewis (1923) e Pearson (1963).

3.3.1 Conceitos fundamentais de ácidos e bases

De acordo com Bronsted e Lowry (1923), os ácidos são definidos como aqueles que doam prótons e as bases são aceitadores de prótons. (SHRIVER; ATKINS, 2003, p. 167).

- Ácido de Bronsted e Lowry: doador de prótons
- Base de Bronsted e Lowry: receptor de prótons

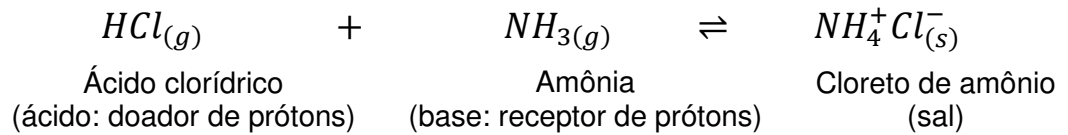
Um próton faz referência ao íon de hidrogênio (H^+), sendo que um átomo de hidrogênio ácido só poderá ser transferido para uma outra espécie que age como base se estiver em forma de núcleo, o próton. E mesmo que uma substância seja ácida na ausência de uma base, somente poderá agir na presença de uma base que possa aceitar os prótons que são ácidos (ATKINS, 2003, p. 461).

Existem alguns exemplos de ácidos e bases de Bronsted, tal como o fluoreto de hidrogênio, HF. Esse ácido é considerado como doador de um próton a uma outra molécula, como por exemplo a água. Já um exemplo de base de Bronsted é a amônia, NH_3 , que pode aceitar um próton de um doador próton (SHRIVER; ATKINS, 2003, p. 168).

Outro ácido de Bronsted é o ácido clorídrico, HCl, que na fase de gás permanece intacto. No entanto, quando entra em contato com a água, o cloreto de hidrogênio é dissolvido, formando uma “ligação de hidrogênio com o átomo de oxigênio de uma molécula H_2O vizinho e o próton migra para a molécula de água, que aqui age como base” Desta forma, podemos dizer que a molécula de HCl fica desprotonada. (ATKINS, 2003, p. 462).

- Fluoreto de hidrogênio: $HF_{(g)} + H_2O_{(l)} \rightarrow H_3O^+_{(aq)} + F^-_{(aq)}$
- Amônia: $NH_{3(aq)} + H_2O_{(l)} \rightarrow NH^+_{4(aq)} + OH^-_{(aq)}$
- Ácido clorídrico desprotonado: $HCl_{(aq)} + H_2O_{(l)} \rightarrow H_3O^+_{(aq)} + Cl^-_{(aq)}$

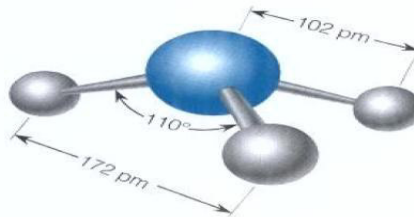
“A definição de Bronsted e Lowry pode ser estendida a solventes não gasosos e para a fase gasosa” (HARRIS, 2011, p. 155).



O cloreto de amônio é um sal sólido iônico, podendo ser considerado o produto de uma reação ácido-base. Quando essa reação acontece estequiometricamente podemos dizer que o ácido e a base se neutralizaram. Sendo que a maioria dos sais são considerados eletrólitos fortes como o HCl, pois quando são dissolvidos em água, se dissociam quase completamente nos íons que os compõem, onde, o cloreto de amônio se transforma nos íons NH_4^+ e Cl^- (HARRIS, 2011, p. 156).

A concentração de H_3O^+ (íon hidrônio) aumenta quando a substância ácida é colocada em meio aquoso. Mas quando a base é adicionada à água a concentração de H_3O^+ diminui, exigindo um aumento na concentração de OH^- . Desta forma, a base é considerada também uma substância que aumenta a concentração de OH^- em solução aquosa. (HARRIS, 2011, p. 155).

Figura 1 – Estrutura do íon hidrônio



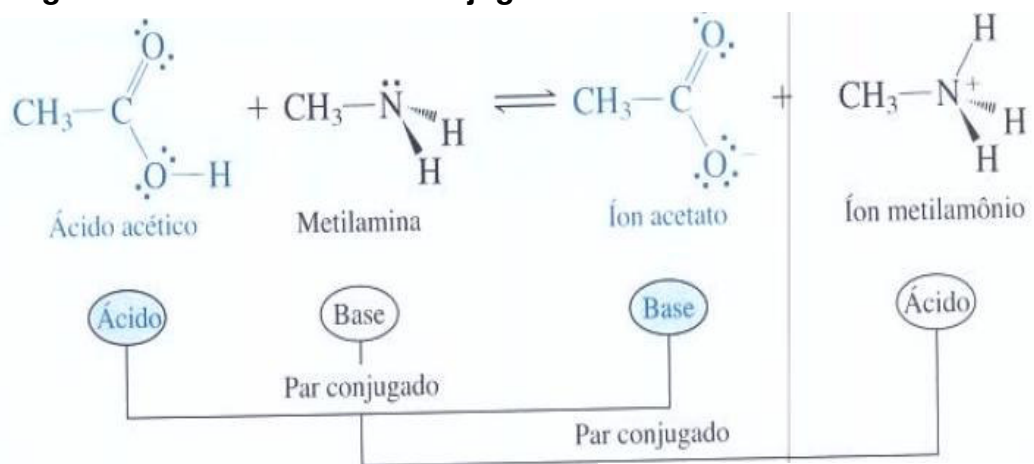
Fonte: (HARRIS, 2011, p. 155).

3.3.2 Ácidos e bases conjugados

Quando ocorre a doação de prótons de um ácido ou de uma base, há a formação de um par de ácido-base conjugado. Desta forma, as espécies HCl , NH_4^+ e HSO_4^- são considerados como ácidos que tem como bases conjugadas as espécies Cl^- , NH_3 e SO_4^{2-} , respectivamente. (OHLWEILER, 1976, p. 39).

“Os produtos de uma reação entre um ácido e uma base também são ácidos e bases.” (HARRIS, 2011, p. 156).

Figura 2 – Par ácido-base conjugado



Fonte: (HARRIS, 2011 p.156)

Pelo ganho ou pela perda de um H^+ , os ácidos e as bases conjugadas estão inter-relacionados. Neste caso, pelo fato do íon acetato poder aceitar um próton e formar o ácido acético, é considerado uma base. Por outro lado, o íon metilamônio pode doar um próton que forma a metilamina, assim sendo, este íon é um ácido. É possível perceber que o ácido acético e o íon acetato formam um par conjugado de ácido-base. Sendo que a metilamina e o íon metilamônio também são um par conjugado. (HARRIS, 2011, p. 156).

“As reações entre um ácido e uma base sempre envolvem dois pares ácidos-bases conjugados, o primeiro transferindo prótons ao segundo” (OHLWEILER, 1976, p. 40).

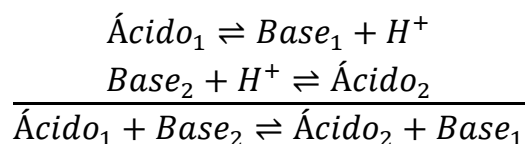
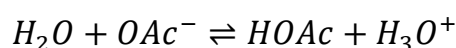


Tabela 4. Reações que fazem transferências de prótons, tendo como solvente, a água.

Ácido ₁	Base ₂	Ácido ₂	Base ₁
HCl	H ₂ O	H ₃ O ⁺	Cl ⁻
HSO ₄	H ₂ O	H ₃ O ⁺	SO ₄ ²⁻
NH ₄ ⁺	H ₂ O	H ₃ O ⁺	NH ₃
H ₂ SO ₃	H ₂ O	H ₃ O ⁺	HSO ₃ ⁻
HSO ₃ ⁻	H ₂ O	H ₃ O ⁺	SO ₃ ²⁻
H ₂ O	CN ⁻	HCN	OH ⁻
H ₂ O	S ²⁻	HS ⁻	OH ⁻

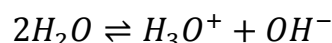
(OHLWEILER, 1976, p. 40).

A teoria protônica unifica alguns processos ácido-base onde a hidrólise não é tratada como um caso especial. “A hidrólise de um sal como acetato de sódio é simplesmente uma reação entre a água funcionando como ácido e íon acetato como base.” (OHLWEILER, 1976, p. 40).



3.3.3 Dissociação da água

A ionização da água acontece em uma extensão diminuta, que envolve a transferência de um próton entre uma molécula a outra. A auto ionização, chamada também de autoprotólise é representada pela equação:



“O íon positivo formado é chamado íon hidrônio: o próton transferido se acha ligado à molécula de água através de uma ligação covalente envolvendo um dos pares de elétrons não compartilhados do átomo de oxigênio.” (OHLWEILER, 1976, p. 37).

Ionização da lei da ação das massas da água:

$$K = \frac{a_{H_3O^+} \times a_{OH^-}}{a_{H_2O}^2} \quad \text{eq. 10}$$

A atividade da água é constante devido a ionização ser diminuta, por isso toma a forma como:

$$\text{➤ } K_w = a_{H_3O^+} \cdot a_{OH^-} \quad \text{eq. 11}$$

➤ K_w = constante do produto iônico da água

O produto iônico da água em termos da concentração é representado por essa equação. Desta forma teremos:

$$K_w' = [H_3O^+] \cdot [OH^-] \quad \text{eq. 12}$$

“A ionização da água é um processo endotérmico, cuja extensão, por conseguinte, aumenta com a elevação da temperatura.” (OHLWEILER, 1976, p. 38).

Tabela 5. Produto iônico da água a várias temperaturas conforme Harned e Robinson

Temp., °C	$K_w \times 10^{14}$	pK _w	Temp., °C	$K_w \times 10^{14}$	pK _w
0	0,114	14,944	35	2,088	13,680
5	0,185	14,734	40	2,917	13,535
10	0,292	14,535	45	4,018	13,396
15	0,450	14,346	50	5,419	13,262
20	0,681	14,167	55	5,474	13,137
25	1,008	13,997	60	9,615	13,017
30	1,469	13,833			

(OHLWEILER, 1976, p. 38).

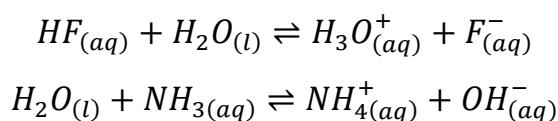
“Na água pura, as concentrações dos íons H_3O^+ e OH^- são iguais e, portanto, a concentração de cada um é igual à raiz quadrada do produto iônico da água” (OHLWEILER, 1976, p. 39).

$$H_3O^+ = OH^- = \sqrt{K_w}. \quad \text{eq. 13}$$

3.3.3.1 Equilíbrio de transferência de próton em água

A água é uma substância anfiprótica, pois pode atuar com o ácido ou a base de Bronsted. (SHRIVER; ATKINS, 2003, p. 168).

É atingido de forma rápida a transferência de prótons entre ácido-base em ambas as direções, ocorrendo um equilíbrio dinâmico que demonstra de forma completa o comportamento do ácido HF e da base NH₃ em água do que somente a reação direta. (SHRIVER; ATKINS, 2003, p. 168).



3.3.4 Equilíbrio ácido-base em solventes não aquosos

Além da água, existem vários outros tipos de solventes. Alguns desses são os solventes apróticos que tem como exemplo o benzeno e o tetracloreto de carbono. Esses não exibem nenhum caráter ácido ou básico. Também existem os solventes anfipróticos que agem tanto para os receptores como para os doadores de prótons. Esses solventes podem ser predominantemente ácidos como o ácido acético glacial, ou predominantemente básicos como a amônia líquida. No entanto, todos esses solventes anfipróticos sofrem auto ionização. (OHLWEILER, 1976, p. 41).

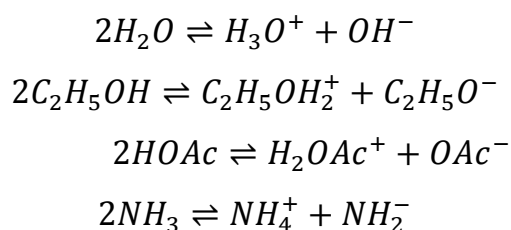


Tabela 6. Características de alguns solventes

Classificação geral	Subclassificação	Nome	Constante dielétrica (Debye)	pK
Apróticos		Acetona	20,7	
		Acetonitrila	37,5	
		Clorebenzeno	5,8	
		Clorofórmio	4,8	
		1,4 – Dioxano	2,2	
		Metiletilcetona	18,5	
Anfipróticos	Protogênicos	Ácido acético	6,4	14,45
		Ácido fórmico	58,0	6,2
	Intermediários	Água	78,3	14,0
		Etanol	24,2	19,1
		Etilenoglicol	37,7	
		Isopropanol	18,3	
		Metanol	31,0	16,7
	Protofílicos	Amônia	17,0	
		Anilina	6,9	
		Dimetilformamida	34,8	
		Etilenodiamina	14,2	
Piridina		12,3		

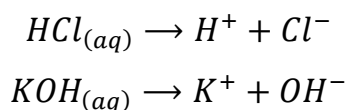
(OHLWEILER, 1976, p. 41).

3.3.5 Força dos Ácidos e bases

Como afirma a teoria de Bronsted e Lowry, para um ácido ou uma base ser forte ou fraco, vai depender da quantidade de prótons que ele é capaz de doar ao solvente. (ATKINS, 2003, p. 462).

- Ácido e base forte: completamente em solução aquosa
- Ácido e base fraco: parcialmente em solução aquosa

Quando o ácido ou a base é forte as constantes de equilíbrio para as reações são muito grandes, sendo que “o HCl e KOH não dissociados praticamente não existem em solução aquosa.” (HARRIS, 2011, p. 158).



“Todos os ácidos fracos, representados por HA, reagem com a água doando um próton para o H₂O:” (HARRIS, 2011, p. 158).

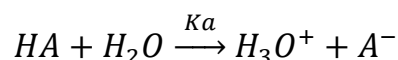


Tabela 7. Ácidos e bases fortes comuns

Fórmula	Nome
Ácidos	
HCl	Ácido clorídrico (cloreto de hidrogênio)
HBr	Ácido bromídrico (brometo de hidrogênio)
HI	Ácido iodídrico (iodeto de hidrogênio)
H ₂ SO ₄	Ácido sulfúrico
HNO ₃	Ácido nítrico
HClO ₄	Ácido perclórico
Bases	
LiOH	Hidróxido de lítio
NaOH	Hidróxido de sódio
KOH	Hidróxido de potássio
RbOH	Hidróxido de rubídio
CsOH	Hidróxido de céσιο
R ₄ NOH	Hidróxido quaternário de amônio

(HARRIS, 2011, p. 158).

3.3.6 Constantes de ionização de ácidos e bases fracas

As forças dos ácidos e das bases fracas pode ser observado de acordo com o valor de cada constante de ionização. “O princípio da constante de equilíbrio não se aplica aos eletrólitos fortes, pois esses em solução aquosa se encontram completamente ionizados.” (OHLWEILER, 1976, p. 44).

➤ Ácidos monoproticos: $HA + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + A^-$

A constante de equilíbrio termodinâmica é:

$$K_a = \frac{a_{H_3O^+} \cdot a_{A^-}}{a_{HA}} \quad \text{eq. 14}$$

Essa é a verdadeira constante de ionização do ácido monoprotico HA e será utilizada na dedução de uma equação para a determinação do pH de qualquer ácido monoprotico fraco em solução aquosa:

$$HA \rightleftharpoons H^+ + A^- \quad K_a = \frac{[H^+] \gamma_{H^+} [A^-] \gamma_{A^-}}{[HA] \gamma_{HA}} \Rightarrow [HA] = \frac{[H^+] \gamma_{H^+} [A^-] \gamma_{A^-}}{K_a \gamma_{HA}} \quad \text{eq. 15}$$

$$H_2O \rightleftharpoons H^+ + OH^- \quad K_w = [H^+] \gamma_{H^+} [OH^-] \gamma_{OH^-} \Rightarrow [OH^-] = \frac{K_w}{[H^+] \gamma_{H^+} \gamma_{OH^-}} \quad \text{eq. 16}$$

$$\text{Balanço de massa: } M_a = [HA] + [A^-] \quad \text{eq. 17}$$

$$\text{Substituindo a eq. 1 na eq. 3, temos: } M_a = \left(\frac{[H^+] \gamma_{H^+} \gamma_{A^-}}{K_a \gamma_{HA}} + 1 \right) [A^-] \quad \text{eq. 18}$$

$$\text{Balanço de cargas: } [H^+] = [OH^-] + [A^-] \quad \text{eq. 19}$$

$$\text{Substituindo a eq. 2 na eq. 5, temos: } [A^-] = \left([H^+] - \frac{K_w}{[H^+] \gamma_{H^+} \gamma_{OH^-}} \right) \quad \text{eq. 20}$$

Substituindo a eq. 20 na eq. 18, temos:

$$\left(\frac{[H^+] \gamma_{H^+} \gamma_{A^-}}{K_a \gamma_{HA}} + 1 \right) \left([H^+] - \frac{K_w}{[H^+] \gamma_{H^+} \gamma_{OH^-}} \right) - M_a = 0 \quad \text{eq. 21}$$

$$\gamma_i = 10^{\left[C_i - \frac{A \sqrt{I}}{1 + B d_i \sqrt{I}} \right]} \quad \text{eq. 22}$$

$$\gamma_{HA} = 10^{KI} \quad \text{eq. 23}$$

$$\left(\frac{[H^+] 10^{\left[CI - \frac{A\sqrt{I}}{1+Bd_{H^+}\sqrt{I}} \right]} 10^{\left[CI - \frac{A\sqrt{I}}{1+Bd_{A^-}\sqrt{I}} \right]}}{K_a 10^{KI}} + 1 \right) \left([H^+] - \frac{K_w}{[H^+] 10^{\left[CI - \frac{A\sqrt{I}}{1+Bd_{H^+}\sqrt{I}} \right]} 10^{\left[CI - \frac{A\sqrt{I}}{1+Bd_{OH^-}\sqrt{I}} \right]}} \right) - M_a = 0 \quad eq.24$$

Força iônica: $I = M_e + [H^+] \quad eq.25$

Substituindo a eq. 25 na eq. 24, temos:

$$\left(\frac{[H^+] 10^{\left[C(M_e+[H^+]) - \frac{A\sqrt{M_e+[H^+]}}{1+Bd_{H^+}\sqrt{M_e+[H^+]}} \right]} 10^{\left[C(M_e+[H^+]) - \frac{A\sqrt{M_e+[H^+]}}{1+Bd_{A^-}\sqrt{M_e+[H^+]}} \right]}}{K_a 10^{K(M_e+[H^+])}} + 1 \right) \left([H^+] - \frac{K_w}{[H^+] 10^{\left[C(M_e+[H^+]) - \frac{A\sqrt{M_e+[H^+]}}{1+Bd_{H^+}\sqrt{M_e+[H^+]}} \right]} 10^{\left[C(M_e+[H^+]) - \frac{A\sqrt{M_e+[H^+]}}{1+Bd_{OH^-}\sqrt{M_e+[H^+]}} \right]}} \right) - M_a = 0 \quad eq.26$$

Onde:

a = atividade

γ = coeficiente de atividade

I = força iônica

K_w = constante de ionização da água

K_a = constante de ionização do ácido

M_a = concentração molar do ácido

M_e = concentração molar do eletrólito do tipo 1:1 (MX)

A = constante de Debye-Hückel

B = constante relacionada com a temperatura e a constante dielétrica do solvente

C = parâmetro ajustável

d = diâmetro do íon hidratado

K = coeficiente de salinização

$[H^+]$ = concentração molar do íon hidrônio

$[A^-]$ = concentração molar do íon A^-

$[HA]$ = concentração molar da espécie HA

$[OH^-]$ = concentração molar do íon hidroxila

4 METODOLOGIA

4.1 Tipo de Estudo

Trata-se de um estudo analítico de uma série de experimentos simples, tendo como abordagem a análise de dados de forma quantitativa.

4.2 Local e período da Pesquisa

O desenvolvimento do trabalho foi realizado no município de São Luís – MA no laboratório de Química Geral no Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal do Maranhão e no laboratório de pesquisas em química inorgânica e analítica anexo ao Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal do Maranhão.

O estudo foi conduzido no período de agosto a novembro de 2018.

4.3 Amostragem

A amostra foi composta de vários experimentos simples, ou seja, foram preparadas quatro soluções de ácido acético e três soluções de cloreto de potássio com concentrações diferentes em balões de 250 mL, descrito na tabela 8.

Tabela 8. Concentrações do ácido e do eletrólito

Reagentes	Concentrações			
Ácido acético	0,002 mol/L	0,02 mol/L	0,2 mol/L	2,0 mol/L
Cloreto de potássio	0,2 mol/L	1,0 mol/L	2,0 mol/L	

Ao terminar de preparar todas as soluções, houve a mistura de soluções de ácido acético com cloreto de potássio totalizando sempre uma solução de volume igual a 50 mL, conforme mostram as tabelas 9, 10, 11 e 12.

Tabela 9. Mistura de soluções de ácido a 0,002 mol/L com o eletrólito em diferentes concentrações

HA 0,002 mol/L	H ₂ O	KCl 0,2 mol/L	KCl 1,0 mol/L	KCl 2,0 mol/L
25 mL	25 mL			
25 mL		25 mL		
25 mL			25 mL	
25 mL				25 mL

Tabela 10. Mistura de soluções de ácido a 0,02 mol/L com o eletrólito em diferentes concentrações

HA 0,02 mol/L	H ₂ O	KCl 0,2 mol/L	KCl 1,0 mol/L	KCl 2,0 mol/L
25 mL	25 mL			
25 mL		25 mL		
25 mL			25 mL	
25 mL				25 mL

Tabela 11. Mistura de soluções de ácido a 0,2 mol/L com o eletrólito em diferentes concentrações

HA 0,2 mol/L	H ₂ O	KCl 0,2 mol/L	KCl 1,0 mol/L	KCl 2,0 mol/L
25 mL	25 mL			
25 mL		25 mL		
25 mL			25 mL	
25 mL				25 mL

Tabela 12. Mistura de soluções de ácido a 2,0 mol/L com o eletrólito em diferentes concentrações

HA 2,0 mol/L	H ₂ O	KCl 0,2 mol/L	KCl 1,0 mol/L	KCl 2,0 mol/L
25 mL	25 mL			
25 mL		25 mL		
25 mL			25 mL	
25 mL				25 mL

4.4 Variáveis do estudo e análise de dados

As soluções obtidas foram utilizadas para a determinação do pH em função da concentração do ácido monoprótico fraco (ácido acético) e do eletrólito suporte (cloreto de potássio) e, em seguida, correlacionar os valores dos pH's medidos com os valores teóricos obtido das deduções das equações.

4.5 Validação dos dados

Utilizaremos para efeito de validação dos dados, a diferença de no máximo 3 % entre os valores teóricos e experimentais.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A equação obtida para determinar o pH de uma solução de um ácido fraco utilizando todos os parâmetros dos equilíbrios químicos das espécies envolvidas é de difícil resolução por métodos analíticos. Portanto, foi elaborada uma planilha no Excel para resolver a equação utilizando cálculo numérico através do método de Newton-Raphson, figura 2.

Figura 3. Planilha desenvolvida para a determinação do pH de um ácido fraco utilizando cálculo numérico através do método de Newton-Raphson.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	EQUILÍBRIO ÁCIDO-BASE				ÁCIDO MONOPRÓTICO - HA						
2	ENTRADA DE DADOS				CÁLCULO ITERATIVO				VALORES CALCULADO		
3	Ka =	1,790E-05			0,000423066	-0,00448	25,0897		γ_h =	0,7646007	
4	Kw =	1,008E-14			0,000601626	0,00091	35,2544		γ_{oh} =	0,6327452	
5	Ma =	0,0099992	mol/L		0,000575883	1,9E-05	33,7891		γ_a =	0,6665297	
6	Me =	0,4999613	mol/L		0,000575325	8,9E-09	33,7574		γ_{ha} =	1	
7	dh =	9,000E+00	A		0,000575325	2E-15	33,7573		[H ⁺] =	5,7532E-04	mol/L
8	doh =	3,500E+00	A		0,000575325	0	33,7573		[OH ⁻] =	3,6215E-11	mol/L
9	da =	4,500E+00	A		0,000575325	0	33,7573		[A ⁻] =	5,7532E-04	mol/L
10	A =	5,097E-01			0,000575325	0	33,7573		[HA] =	9,4238E-03	mol/L
11	B =	3,288E-01			0,000575325	0	33,7573		I =	5,0054E-01	mol/L
12	C =	0,000E+00			0,000575325	0	33,7573		pH =	3,357	
13	K =	0,000E+00			0,000575325	0	33,7573				
14											

Não encontramos na literatura o valor do coeficiente de salinidade, K, para o ácido acético. No entanto, esse valor pode ser ajustado na equação através do método dos mínimos quadrados para que ocorra um menor erro entre os valores experimentais e teóricos.

O parâmetro C também é um parâmetro de ajuste da equação de forma empírica para adequação aos valores experimentais. Observou-se que esse parâmetro pouco afeta o valor de pH.

Os valores dos parâmetros C e K que melhor se adequaram aos valores medidos de pH foram iguais a zero (0).

As concentrações reais das soluções de ácido acético e do eletrólito suporte, bem como, os valores de pH dessas soluções medidos experimentalmente através de um peagômetro e os calculados teoricamente estão descritos na tabela 13.

Tabela 13. Valores experimentais e teóricos quando C=0 e K=0

C = 0		K = 0		
[HA] mol/L	[E] mol/L	pH _(exp)	pH _(teo)	(pH _(exp) -pH _(teo)) ²
9,99915457E-04	0	3,57	3,90	1,11E-01
	0,099995976	3,99	3,90	8,73E-03
	0,499961288	3,90	3,88	2,42E-04
	1,000044748	3,80	3,88	6,05E-03
9,99915457E-03	0	3,40	3,38	2,94E-04
	0,099995976	3,38	3,37	6,79E-05
	0,499961288	3,36	3,36	1,12E-05
	1,000044748	3,34	3,35	7,52E-05
9,99915457E-02	0	2,95	2,88	5,45E-03
	0,099995976	2,88	2,86	2,62E-04
	0,499961288	2,86	2,85	1,48E-04
	1,000044748	2,84	2,84	3,28E-07
9,99915457E-01	0	2,43	2,37	3,22E-03
	0,099995976	2,40	2,36	1,52E-03
	0,499961288	2,37	2,34	6,28E-04
	1,000044748	2,33	2,34	4,17E-05
soma =				0,1376

Onde:

E = eletrólito e HA = ácido

Ao analisar os valores da tabela 13, percebe-se que os valores encontrados teoricamente foram satisfatórios, ou seja, estão bem próximos dos valores experimentais e apresentaram uma diferença menor que 3 %, com exceção da solução mais diluída sem eletrólito. Isso pode ter acontecido devido a demora na estabilização da leitura do peagômetro.

Observamos também que as medidas sem eletrólito suporte foram menos precisas do que utilizando eletrólito. Isso pode ser explicado através da força iônica da solução. Sem o eletrólito suporte, a força iônica da solução fica igual a concentração molar de íons hidrônio. Como a concentração molar de íons hidrônio é muito pequena (10^{-4} a 10^{-3}) devido a constante de ionização do ácido acético também ser pequena ($1,79 \times 10^{-5}$) leva a uma instabilidade na leitura do pH.

6 CONCLUSÃO

O presente estudo mostra a aplicação da dedução de uma equação envolvendo todos os equilíbrios das espécies em solução de um ácido fraco com a construção de uma planilha de cálculos para a determinação do pH, bem como, as concentrações de todas as espécies envolvidas nos equilíbrios.

Os valores teóricos de pH's foram comparados com os experimentais e observou-se uma concordância muito boa entre esses valores dentro de um limite de erro menor que 3 %.

Observou-se também que o parâmetro ajustável C não altera significativamente os valores de pH.

A constante de salinidade, $K = 0$, para o ácido acético obtido através dos cálculos, significa que a atividade da espécie HA é igual a sua concentração molar.

O aplicativo desenvolvido para a solução da equação envolvendo os equilíbrios de um ácido monoprótico fraco é extremamente rápido e apresenta uma precisão de 14 casas decimais.

Considerando a análise do estudo, observou-se que os objetivos propostos foram alcançados, comprovando que a equação deduzida é eficaz na determinação do pH e que os erros cometidos podem ser solucionados aumentando a força iônica da solução.

REFERÊNCIAS

HARRIS, Daniel C. – Explorando a Química Analítica - Ed. LTC, 4^a. Edição, 2011 - Rio de Janeiro – RJ

OHLWEILER, Otto Alcides. Química Analítica Quantitativa. 2a ed. RJ. Livros Técnicos e Científicos. 1976.

SHRIVER, D. F., ATKINS, P. W., Química Inorgânica, 3^a Ed. Bookman: Porto Alegre, 2003.