Desenvolvimento e uso de um software para simulação de curvas de distribuição de equilíbrio ácido-base para o ensino em química analítica.

Rosebelly N. Marques^{1,2*} (PQ), Ademir G. C. Costalonga³ (PQ). rosebelly@ig.com.br

1-Instituto de Química-Unesp Araraquara-SP, 2 –Faculdades Integradas do Vale do Ribeira/Scelisul-Registro-SP; 3 – Universidade de São Paulo, FFCLRP- Ribeirão Preto –SP

Palavras Chave: *Ensino de Química, Simulação, Equilíbrio.*

Introdução

A simulação computacional é um recurso didático muito interessante e cuja frequência de utilização vem aumentando. A simulação proporciona um ambiente novo para se observar situações e fenômenos, a partir dos quais podemos propor modelos explicativos ou demonstrar o que ocorre a partir de modelos existentes.

Para promover um melhor entendimento sobre o tema equilíbrio ácido-base na disciplina de química analítica, foi criado um software para simulação de curvas de distribuição de espécies para ácidos e bases. Este recurso fez parte das aulas de química analítica das turmas do 3º semestre do Curso de Química da Scelisul, na cidade de Registro. Nesse trabalho foi utilizado o uso de constantes de equilíbrio de ácidos e bases para simular a distribuição das espécies. O software pode simular a distribuição para ácido mono, di, tri e tetrapróticos ou mistura de até quatro ácidos diferentes, o mesmo pode ser usado para bases.

Resultados e Discussão

O programa foi desenvolvido em VisualBasic para o sistema operacional Windows da Microsoft utilizando-se da linguagem BASIC. O programa foi desenvolvido para que possa se escolher com qual quantidade de ácidos ou qual a quantidade de hidrogênios ionizáveis se quer trabalhar. Com a escolha da quantidade, deve-se introduzir o valor correspondente da constante de ionização do ácido para simular a curva. Esse valor pode ser variado escolhendo-se um valor para variação da constante, o qual pode ser acrescido ou retirado do valor inicial da constante gerando novamente uma nova distribuição a cada momento. O incremento ou diminuição do valor é feito com o uso do “mouse”. Na tela é gerado a cada momento um curva com distribuição da quantidade da espécie em função do pH da solução.

Para um ácido monoprotico são geradas duas curvas uma para a espécie não-ionizada e uma para a espécie ionizada, com colorações diferentes. Com a opção do mouse pode-se aumentar ou diminuir a

29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

constante de ionização e observar o que ocorre com a distribuição das espécies em função do meio.

O software pode também ser inserido durante as aulas de química analítica para demonstrar o que ocorre em cada momento quando se calcula as quantidades das espécies presentes na solução em cada valor de pH.

Com o software pode-se demonstrar o que ocorre quando dois ácidos monoproticos estão presentes na mesma solução, podendo simular qual a variação da constante de ionização dos ácidos para que haja uma separação suficiente entre as espécies para que estas possam ser determinadas quantitativamente.

Conclusões

O software é interessante, pois facilita a visualização da curva de distribuição, associado à aprendizagem e uso das constantes de equilíbrio, facilita para o aluno entender o que está ocorrendo dentro da solução com a variação de pH. Com a possibilidade de o aluno poder variar as constantes e obter um resultado visual rápido, há um estímulo para que ele próprio busque interpretações para o que está ocorrendo. Como a simulação pode ser inserida durante as aulas de química analítica, isto gerou um melhor entendimento do que ocorre durante uma titulação volumétrica de um ácido por uma base, conceito. A simulação, usando dois ácidos monoproticos, demonstrou o que significa, realmente, o termo “separação quantitativa”, o qual é muito utilizado em química analítica. Devemos ressaltar que o software deve ser utilizado para verificação e entendimento do comportamento de ácidos e bases.

Agradecimentos