

Novo CURTIPOT para Excel® com regressão linear multiparamétrica para análise e simulação de curvas de titulação ácido-base

Ivano G. R. Gutz (PQ). E-mail: gutz@iq.usp.br

Instituto de Química – USP – www2.iq.usp.br/docente/gutz

Palavras Chave: pH, potenciometria, quimiometria.

Introdução

O programa CURTIPOT (acrônimo de CURvas de Titulação POTenciométrica) para simulação e análise de dados de titulações ácido-base foi apresentado em 1992 na 15ª RASBQ¹ e demonstrado nas aulas práticas do 1º curso oferecido numa reunião anual da SBQ. Bastante difundido desde então, o programa escrito em Turbo-Basic para DOS mantém-se compatível com os sistemas operacionais lançados pela Microsoft, mas é pouco amigável pelos padrões atuais por não reconhecer o mouse (só teclas de atalho) e devido à trabalhosa gravação e impressão de resultados e gráficos.

No novo CURTIPOT 3.0 para Excel® estes arcaísmos foram superados, um eficiente módulo de análise de dados de titulações por regressão não-linear multiparamétrica (RNLMP) foi adicionado, enquanto outros recursos foram aprimorados, por exemplo, a “macro” de interpolação e alisamento de dados localiza automaticamente as inflexões das curvas.

Resultados e Discussão

O programa se assenta em métodos conhecidos de estudo de equilíbrio químico e de cálculo numérico, sendo original a integração de todos os recursos numa planilha Excel® assistida por macros programadas em Visual Basic for Applications, VBA. A opção pela plataforma do Excel®, familiar à maioria dos usuários, o que acelera a curva de aprendizado pelo usuário. As equações usadas e os resultados em cada coluna das planilhas podem ser observados e modificados. Sub-rotinas (macros) escritas em VBA aceleram o cálculo iterativo de pH, filtram (alisam) e interpolam os dados por *cubic splines* e geram diagramas de distribuição.

A equação geral de cálculo iterativo de pH nos módulos de simulação e de análise por RNLMP envolve a somatória do produto das concentrações totais de cada base (conjugada) pelo número médio de protonação. Os módulos (planilhas) do programa são: Simulador (gera conjuntos de dados, com ou sem dispersão, a partir de pKs, concentrações e volumes); Gráficos; Distribuição (conc. relativa vs. pH e vs. volume); Análise Inicial (derivadas com interpolação); Análise (RNLMP, Fig. 1); Exemplos; e Constantes (listagem de pKs).



Figura 1. Módulo de análise por RNLMP com auxílio da macro Solver do Excel®

A figura 1 exemplifica a determinação correta das concentrações de ácidos cítrico (3 protonações) 0,0500 mol L⁻¹ e ascórbico (2 protonações) 0,0300 mol L⁻¹ em mistura, para curva com somente uma inflexão nítida. Este novo módulo de análise requer prévia instalação do suplemento Solver disponível no disco de instalação do Microsoft Windows.

O módulo Análise funciona para amostras muito diluídas como água de chuva, fornecendo resultados similares aos obtidos em estudos anteriores² com auxílio do programa Origin®, da Microcal, menos popular, mais caro, com gráficos mais perfeitos e planilhas de utilização mais demorada e difícil que as do Excel® para a aplicação considerada.

Conclusões

O novo programa atualiza e adiciona recursos sofisticados de análise de dados reais ao CURTIPOT original (de cunho didático e mais voltado para a simulação), especialmente úteis para titulação de traços de ácidos e bases, múltiplos componentes com curvas sem inflexões não nítidas e determinação de valores de pK_a. O programa CURTIPOT 3.0 pode ser copiado gratuitamente da página do autor, www2.iq.usp.br/docente/gutz.

Agradecimentos

Ao CNPq pela bolsa de produtividade.

¹ Gutz, I.G.R. *Resumos da 15ª RA-SBQ*, Caxambú, 1992, QA-061..

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

² Coelho, L.H.G.; Gutz, I.G.R. *Resumos do XI Encontro Nacional de Química Analítica*, Campinas, 2001, EQ-54.