

## Um experimento de quimiometria para cursos de graduação: estimando o pKa de um indicador na presença de interferente por MCR-ALS.

Iraci Pereira dos Santos\*<sup>1</sup> (IC), Rosylane Elaine Costa Lopes<sup>1</sup> (IC), Jez Willian Batista Braga<sup>1</sup> (PQ).  
\*iracipsantos@gmail.com

<sup>1</sup>Laboratório de Química Analítica e Ambiental – Instituto de Química, UnB, Campus Universitário Darcy Ribeiro, Brasília-DF, CEP: 70910-900.

Palavras Chave: Quimiometria, MCR-ALS, indicador ácido-base.

### Introdução

A Quimiometria é uma das sub-áreas mais recentes da Química, a qual tem se mostrado de grande importância na interpretação e análise de dados obtidos pelos diversos métodos instrumentais disponíveis hoje no laboratório. Contudo, poucas universidades possuem disciplinas de Quimiometria a nível de graduação, além de ser relativamente pequeno o número de experimentos que ilustram métodos quimiométricos para os alunos. Com base na necessidade de introduzir conceitos e exemplos de aplicações de quimiometria para alunos dos cursos de química e áreas afins, o presente trabalho tem como objetivo propor um experimento para ilustrar um dos métodos quimiométricos mais aplicado para a resolução de sinais, a resolução multivariada de curvas pelo algoritmo de mínimos quadrados alternantes (MCR-ALS)<sup>1</sup>.

A partir de um tampão preparado com: ácido cítrico, hidrogenofosfato de potássio, tetraborato de sódio e cloreto de potássio, todos em 0,1 mol/L, e HCl ou NaOH, ambos 0,4 mol/L, para ajuste de pH, preparou-se 15 soluções tampão variando o pH de 2,0 à 7,6, com intervalos de 0,4. Em cada tampão foram adicionados os indicadores verde de bromocresol, o qual se pretendia determinar o pKa, e vermelho congo, que atuaria como espécie interferente, ambos na concentração de 10 mg/L. Foram feitas as leituras dos espectros na região do visível e os espectros obtidos exportados para o Matlab para a deconvolução com o MCR-ALS. Após a deconvolução o perfil relacionado ao pH, estimado com o MCR-ALS, foi analisado no programa Origin e determinado o pKa.

### Resultados e Discussão

A Figura 1 apresenta os espectros das formas ácidas e básicas do verde de bromocresol (HA e A<sup>-</sup>) e do vermelho congo utilizado como interferente (HInt e Int<sup>-</sup>). Observa-se que em uma mistura dos indicadores não é possível a determinação do pKa do verde de bromocresol devido a sobreposição espectral, necessitando da aplicação do MCR-ALS. A Figura 1 também apresenta os espectros obtidos pelo MCR-ALS para HA e A<sup>-</sup>, os quais se aproximam dos perfis experimentais.

A Figura 2 apresenta os perfis de concentração obtidos e as curvas sigmóides estimadas. Tomando a metade da altura em cada um dos perfis e projetando esse ponto no eixo de pH obtém-se os valores de pKa do indicador, estimados como 4,5 e 4,6 para a espécie ácida (HA) e básica (A<sup>-</sup>), respectivamente. O valor médio para o pKa foi de 4,55, que é próximo do valor tabelado de 4,7<sup>2</sup>.

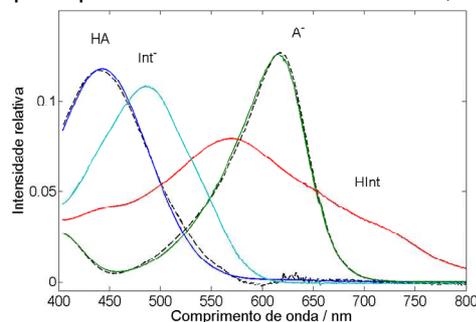


Figura 1. Perfis espectrais (—) experimentais e (--) estimados para o indicador analisado (HA e A<sup>-</sup>) e interferente (HInt e Int<sup>-</sup>).

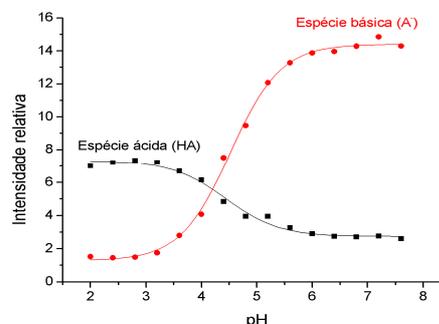


Figura 2. Perfis de concentração de cada espécie em função do pH obtidos para o verde de bromocresol com MCR-ALS.

### Conclusões

O experimento proposto apresenta resultados que possibilitam sua aplicação em cursos de graduação. A prática ilustra a utilização do MCR-ALS em situações de interferência de sinais e pode ser realizada em uma prática de 4 horas.

### Agradecimentos

Programa de bolsas REUNI e UnB.

<sup>1</sup> Tauler, R.; Smilde, A. e Kowalski, B.R. J. *Chemom.*, 1995, 9, 31.

<sup>2</sup> Vogel, A.I. *Análise Química Quantitativa*. LTC, Rio de Janeiro, 2008.