

Programa de valoracions Àcid - Base

Josep Maria Frigola i Serra

Programa d'Informàtica Educativa, 1991.

1 Característiques generals

- 1.1 Títol
- 1.2 Autor i referència
- 1.3 Assignatura i nivell escolar
- 1.4 Temàtica
- 1.5 Coneixements previs
- 1.6 Nom dels fitxers

2 Instruccions de funcionament

- 2.1 Posada en marcha
- 2.2 Pantalla inicial i opcions
- 2.3 Opció exemple. Descripció
- 2.4 Opció començament. Descripció

3 Aspectes pedagògics

- 3.1 Objectius
- 3.2 Metodologia d'ús
- 3.3 Exemples d'ús i avaluació

1. CARACTERÍSTIQUES GENERALS

1.1 TÍTOL

VALORAC

(Programa de valoracions ÀCID-BASE)

1.2 AUTOR I REFERÈNCIA

Autor: Josep Maria Frigola i Serra

Referència:

El programa valorac té el seu fonament teòric en els treballs següents:

- A) Representación semilogarítmica de las curvas de valoración ácido-base.
Revista de bachillerato Número 19 (1981) Madrid.
- B) Curvas de valoración ácido-base: la representación semilogarítmica como un nuevo método de simulación y programación de valoraciones.

1.3 ASSIGNATURA I NIVELL ESCOLAR

Assignatura: Física i química

Nivell: Ensenyament secundari (BUP i FP)

COU de química

1.4 TEMÀTICA

El programa permet la simulació i programació de diferents valoracions àcid-base, i l'estudi de la valoració dels casos típics:

ÀCID DÈBIL - BASE FORTA (ADBF)

ÀCID DÈBIL - BASE DÈBIL (ADBD)

ÀCID FORT - BASE FORTA (AFBF)

ÀCID FORT - BASE DÈBIL (AFBD)

El programa ofereix la possibilitat d'escollir entre diverses opcions a partir de les dades introduïdes, entre les quals citem les següents:

- simulació visual tipus laboratori,
- representació gràfica del volum i ph,
- estudi local de la gràfica per una i o més valoracions,
- simulació de valors a l'entorn del punt d'equivalència
- esquema de la valoració realitzada,
- llista de valors en pantalla i en impressora tipus dbase

Els resultats de la valoració no són fixos ni preestablerts, sinó que és el programa general qui realitza els càlculs segons les molaritats i els volums dels reactius.

Les constants K_a dels àcids també poden modificar-se. El programa permet l'estudi i la relació entre les diferents etapes o fases que tenen lloc en una valoració.

L'estudi d'aquestes etapes o fases (dissolucions reguladores o també, hidròlisi i excés d' OH^-) té especial interès didàctic per als alumnes.

1.5 CONEIXEMENTS PREVIS

És aconsellable tenir coneixements previs sobre àcids i bases, així com de reaccions químiques de neutralització. És necessari conèixer el concepte químic de PH.

1.6 NOM DELS FITXERS

Els fitxers o arxius que acompanyen el programa són:

VALORAC.EXE

VACBA.EXE

HLP.EXE	ARXIER.EXE
EXEM1.EXE	LLEGIUME.EXE
EXEM2.EXE	MOUSE.EXE
EXEM3.EXE	VACBARAT.EXE
AJUDA*.SRC	ME*.SRC
HLP*.SRC	RATVACBA.MNU
PORTADA.BIN	

Tots els arxius del subdirectori valorac estan relacionats entre ells, de manera que no són independents.

Dintre del subdirectori valorac, l'execució del programa es realitza a partir del fitxer VALORAC.EXE

2. INSTRUCCIONS DE FUNCIONAMENT

2.1 POSADA EN MARXA

Per utilitzar el programa és necessari instal·lar-lo prèviament al disc dur. El programa no es pot executar directament des del disquet ja que bé compactat.

Per instal·lar-lo al disc dur cal indicar com a unitat activa la unitat on es troba el disquet, teclejar

INSTAL ↵

i seguir les instruccions del programa instal·lador.

Per executar-lo, una vegada ja instal·lat, cal teclejar

VALORAC ↵

des del subdirectori on es trobi el programa.

2.2 PANTALLA INICIAL I OPCIONS

2.2.1 PANTALLA INICIAL

En posar en marxa el programa, apareix una pantalla inicial que inclou el títol i l'autor del programa. En prémer la tecla F10 apareix el menú d'opcions següents:

INFORMACIÓ
EXEMPLE
COMENÇAMENT
SORTIR

Amb la tecla ESC desapareix aquest menú, i amb la tecla F10 torna a sortir-hi. Amb les fletxes de desplaçament amunt i avall s'elegeix l'opció, mentre que amb la tecla ↵ s'executa.

2.2.2 OPCIO PRESENTACIÓ

L'opció informació inclou els tres menús següents:

PRESENTACIÓ
TEMÀTICA
OBJECTIUS

Amb la tecla ↵ és operativa l'opció desitjada.

Amb la tecla ESC es torna al menú anterior.

- L'opció PRESENTACIÓ fa referència a l'autor i al treball associat al programa.
- L'opció TEMÀTICA fa referència als tipus de valoracions que controla el programa i les simulacions que n'ofereix.
- L'opció OBJECTIUS fa referència a les utilitats didàctiques que ofereix el programa tant per als alumnes com per al professor que vulgui comprovar el valor del PH d'una determinada valoració.

Dins de cada opció:

- Amb la tecla barra espaiadora es passa a la pantalla següent.
- Amb la tecla ESC es retrocedeix a la pantalla anterior.

VALORACIONS ÀCID - BASE Versió 3.0 J.Mª FRIGOLA		
<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin: 0 auto; width: 80%;"> VALORACIONS ÀCID - BASE Per Josep Maria Frigola Serra I.B. Ramon Muntaner (Figueres) </div>		
<div style="border: 1px solid black; padding: 2px;"> INFORMACIÓ EXEMPLE COMENÇAMENT SORTIR </div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 2px;"> PRESENTACIÓ TEMÀTICA OBJECTIUS </div>	
Selecciona amb els cursors ↑ ↓ ESC per cancel·lar Confirma ←		

2.2.3 OPCIÓ EXEMPLE

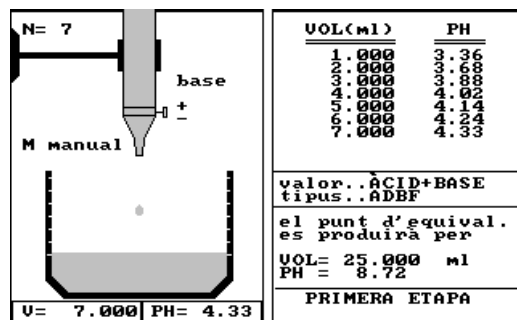
La primera vegada que s'utilitza el programa és necessari passar a l'opció EXEMPLE abans de passar l'opció COMENÇAMENT.

En aquest apartat s'estudia un cas concret que correspon a la valoració d'un àcid dèbil amb una base forta (ADBF).

En la descripció de l'exemple s'inclouen les fases següents:

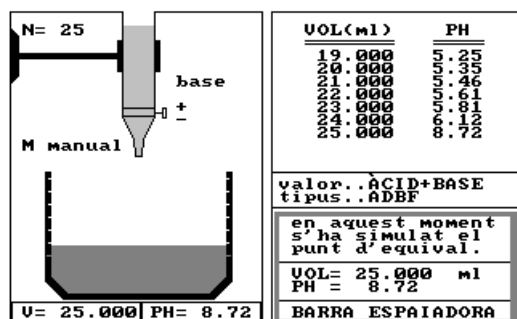
- Valors de les dades de la valoració que s'han entrat.
- Quadre resum de la valoració escollida.
- Resultats de la valoració amb indicació del V, PH.
- Simulació visual tipus laboratori.
- Representació gràfica (V,PH).
- Estudi local de la gràfica.

1ª Fase



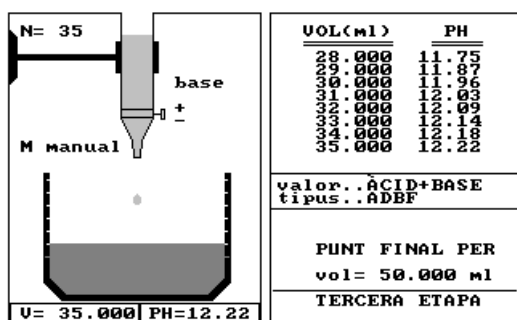
Simulació abans del punt d'equivalència.

2ª Fase



Simulació del punt d'equivalència

3ª Fase



Simulació després del punt d'equivalència

2.2.4 OPCIO COMENÇAMENT

L'opció COMENÇAMENT és pròpiament la part operativa del programa.

En iniciar, apareix el menú següent:

VALORACIÓ ÀCID DÈBIL - BASE FORTA (ADBF)
VALORACIÓ ÀCID DÈBIL - BASE DÈBIL (ADBD)
VALORACIÓ ÀCID FORT - BASE FORTA (AFBF)
VALORACIÓ ÀCID FORT - BASE DÈBIL (AFBD)

En aquest menú es presenten els diferents tipus de valoracions. Una vegada se n'ha escollit una, apareix un altre menú en el qual se'ns demana si volem realitzar una valoració

ÀCID+ BASE o bé BASE + ÀCID

El programa també ens demana si volem confirmar el valor tipus de les constants K_a i K_b o bé desitgem canviar-les.

Els valors que s'introdueixen per preparar la valoració són els referents a:

- Molaritats de l'àcid i la base.
- Volum de l'àcid o la base.
- Volum inicial, final i increment de volum del reactiu (àcid o base).

Una vegada s'han introduït les dades, tenim informació sobre:

- pH inicial de l'àcid o base.
- pH en el punt d'equivalència.
- Volum de reactiu per produir el punt d'equivalència.
Possibilitat de centrar la gràfica respecte al punt d'equivalència entre 5 i 50 valors.
- Esquema de valoració.

Els resultats de la valoració es mostren en columna:

VOL = xx.xx ml PH = yy.yy

Després dels resultats, tenim la possibilitat d'escollir entre diferents simulacions i opcions, a continuació en citem les següents:

- Simulació visual tipus laboratori.
- Simulació gràfica i estudi local.
- Simulació de valors pròxims al punt d'equivalència en dècimes, centèsimes o mil·lèsimes.
- Possibilitat de centrar la gràfica.
- Possibilitat de realitzar altres valoracions del mateix o de diferent tipus, en la mateixa o diferent gràfica, per realitzar comparacions globals i locals.

2.2.5 OPCIO SORTIR

L'opció SORTIR és l'única opció per abandonar el programa. Abans de sortir ens demana confirmació (S/N)

2.3 OPCIO EXEMPLE. DESCRIPCIO

En aquest apartat hem escollit el cas típic:

Valoració	ÀCID DÈBIL	- BASE FORTA
Tipus	CH ₃ -COOH (AcOH) (àcid acètic)	- NaOH (hidròxid de sodi)

La valoració que descrivim en aquest exemple és:

ÀCID+ BASE (afegir base a l'àcid)

Els valors de les dades que hem entrat són els següents:

MOLARITAT	ÀCID = 0.1 M	MOLARITAT BASE	= 0.1 M
VOLUM	ÀCID = 25 ml	VOLUM INICIAL BAS E	= 1 ml
VOLUM	BASE = 1 ml	VOLUM FINAL BASE	= 50 ml

Per a aquesta valoració, el pH inicial i en el punt d'equivalència (PEQ) són:

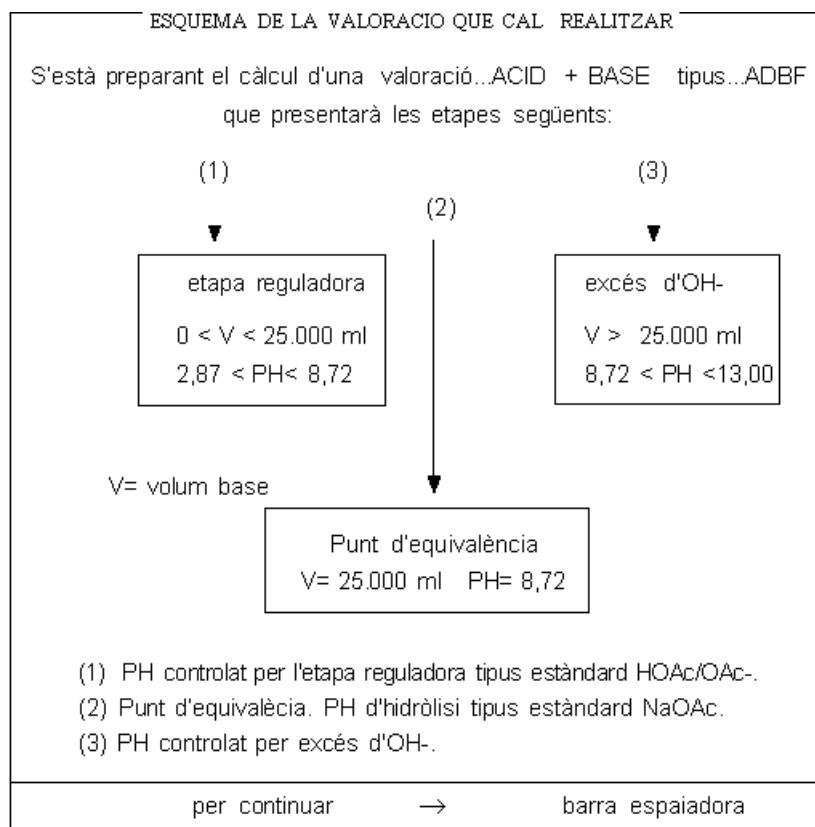
pH inicial àcid dèbil..... = 2.87

pH en el PEQ..... = 8.72

Volum base en el PEQ = 25 ml

La descripció de les parts que s'inclouen en aquest exemple són:

- Primerament, un quadre resum de la valoració citada.



Esquema de la valoració ÀCID + BASE tipus ADBF

- En segon lloc, els resultats de la valoració segons les dades que hem entrat.

DADES VALORACIÓ							
Valoració..... ÀCID + BASE							
Tipus..... ADBF							
Volum àcid		= 25.000 ml	Molaritat àcid		=	0,100 M	
Volum inicial base		= 1.000 ml	Molaritat base		=	0,100 M	
Variació volum base		= 1.000 ml	Volum final base ...		=	50.000 ml	
RESULTATS VALORACIÓ							
PH inicial ÀCID DÈBIL				2.872			
PH al punt d'equivalència				8.722			
Volum per produir el punt d'equivalència				25.000 ml			
vol(ml)	PH	vol(ml)	PH	vol(ml)	PH	vol(ml)	PH
1.000	3,36	14.000	4,85	27.000	11,59	40.000	12,36
2.000	3,68	15.000	4,92	28.000	11,75	41.000	12,38
3.000	3,88	16.000	4,99	29.000	11,87	42.000	12,40
4.000	4,02	17.000	5,07	30.000	11,96	43.000	12,42
5.000	4,14	18.000	5,15	31.000	12,03	44.000	12,44
6.000	4,24	19.000	5,25	32.000	12,09	45.000	12,46
7.000	4,33	20.000	5,35	33.000	12,14	46.000	12,47
8.000	4,42	21.000	5,46	34.000	12,18	47.000	12,49
9.000	4,49	22.000	5,61	35.000	12,22	48.000	12,50
10.000	4,57	23.000	5,81	36.000	12,26	49.000	12,51
11.000	4,64	24.000	6,12	37.000	12,29	50.000	12,52
12.000	4,71	25.000	8,72	38.000	12,31	*****	*****
13.000	4,78	26.000	11,29	39.000	12,34	*****	*****

Sortida de resultats per impressora

- En tercer lloc, una simulació tipus laboratori en la qual es pot controlar manualment la rapidesa de la valoració.
- I, per últim, la representació gràfica VOLUM-PH, que inclou la possibilitat d'estudiar localment la corba de valoració i de fer aproximacions als punts d'aquesta amb $\delta = 0.1$ i $\delta = 0.01$

Tant en la simulació visual com en la representació gràfica, la valoració es pot parar manualment amb la tecla (M) o bé amb la barra espaiadora. Anàlogament, es torna a accedir a la valoració pulsant qualsevol d'aquestes dues tecles.

2.4 OPCIO COMENÇAMENT. DESCRIPCIÓ

En entrar en l'apartat COMENÇAMENT, apareix un menú general de valoracions àcid-base que inclou les opcions següents:

VALORACIÓ ÀCID DÈBIL - BASE FORTA (ADBF)
VALORACIÓ ÀCID DÈBIL - BASE DÈBIL (ADBD)
VALORACIÓ ÀCID FORT - BASE FORTA (AFBF)
VALORACIÓ ÀCID FORT - BASE DÈBIL (AFBD)

Després de confirmar una opció, tenim la possibilitat de fer una valoració:

ACIDO + BASE (afegir base a l'àcid)
BASE + ACIDO (afegir àcid a la base)

Una vegada feta aquesta elecció, que posteriorment podrem canviar, tenim la possibilitat de confirmar el valor de la cte K_a o K_b típica, o bé modificar-lo.

Abans de la introducció de dades, apareix un altre menú que ens indica la modalitat de la valoració:

CÀLCUL PH DE TOTA O PART D'UNA VALORACIÓ
GRÀFIQUES PER A DIFERENTS VALORS DE LES MOLARITATS
CÀLCUL DEL PH ASSOCIAT A UN DETERMINAT VOLUM
TORNAR AL MENÚ PRINCIPAL

Tenim diferents possibilitats d'introducció de dades segons la modalitat de l'elecció.

Si la valoració és ÀCID + BASE i el càlcul es refereix a tota una valoració (és a dir, l'obtenció de valors del pH abans i després del punt d'equivalència), els valors de les dades que s'han d'introduir són:

- Molaritat de l'àcid
- Molaritat de la base
- Increment del volum de la base
- Volum de l'àcid
- Volum inicial de la base
- Volum final de la base

Per contra, si la valoració és BASE + ÀCID els valors que s'han d'introduir són:

- Molaritat de la base
- Molaritat de l'àcid
- Increment del volum de l'àcid
- Volum de la base
- Volum inicial de l'àcid
- Volum final de l'àcid

Si la modalitat de l'elecció són gràfiques, les dades que s'han d'introduir són:

Per a l'opció de valoració ÀCID + BASE

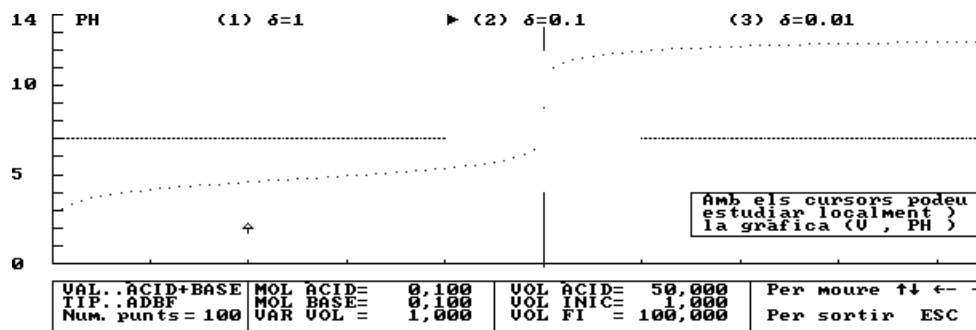
- Molaritat de l'àcid
- Molaritat de la base

- Volum de l'àcid

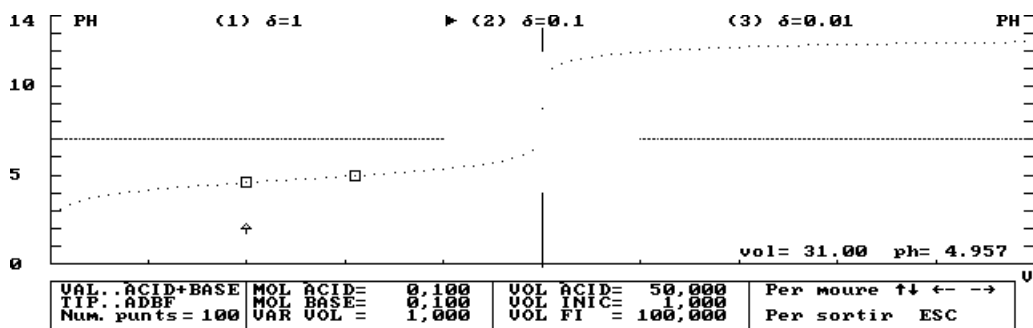
Per a l'opció de valoració BASE + ÀCID

- Molaritat de la base
- Molaritat de l'àcid
- Volum de la base

En amb dues opcions, l'increment de volum el genera el programa, de manera que inclogui cinquanta punts abans i després del punt d'equivalència.



Gràfica corba valoració ÀCID + BASE tipus ADBF (100 punts)



Estudi local de la gràfica de la figura.

En totes les opcions, sempre tenim la possibilitat de centrar simètricament la gràfica respecte del seu punt d'equivalència des de 5 fins a 50 valors.

La modalitat Càlcul del pH associat a un determinat volum permet poder de calcular ràpidament el pH si es coneixen les molaritats i el volum dels reactius.

Després de la introducció de dades, el programa genera una primera informació referent a:

PH inicial de l'ÀCID o la BASE
PH en el punt d'equivalència (PEQ)
VOLUM ÀCID O BASE per produir el PEQ

Després d'aquesta informació tenim la possibilitat de tornar a canviar les dades, o bé de centrar simètricament aquests valors respecte al PEQ.

Abans de donar els resultats de la valoració, el programa visualitza esquemàticament la valoració que es realitzarà. Aquest esquema inclou les tres fases típiques d'una corba de valoració.

En l'opció d'una valoració ADBF (ÀCID + BASE) i amb les dades d'entrada que es donen en l'apartat EXEMPLE, les etapes que figuren en l'esquema són:

primera etapa : etapa reguladora(2.87 < PH < 8.72)
	(0 < V < 25 ml)
segona etapa : PEQ	(PH = 8.72)
	(V = 25 ml)
Tercera etapa : excés d'OH-	(8.72 < PH < 14)
	(V > 25 ml)

Lògicament, si la valoració és del mateix tipus però BASE + ÀCID, aleshores la primera etapa és un excés d'OH i la tercera correspon a una fase reguladora o també.

El programa genera automàticament un esquema per a cada tipus de valoració.

Una vegada s'ha visualitzat l'esquema, el programa realitza el càlcul de la valoració. Els resultats es mostren en forma de columna o taula, indicant el valor del pH per a cada increment de volum.

Després del càlcul, apareix un menú nou referent a simulacions i altres opcions:

MENÚ DE SIMULACIONS I ALTRES OPCIONS. ¿QUÈ VOLS FER?

SIMULACIÓ VISUAL DE LES DADES OBTINGUDES
SIMULACIÓ GRÀFICA DE LA CORBA DE VALORACIÓ
SIMULACIÓ DE VALORS PRÓXIMS AL PEQ
LLISTAR RESULTATS PER IMPRESSORA
TORNAR A VEURE ELS RESULTATS PER PANTALLA
TORNAR A VEURE L'ESQUEMA DE LA VALORACIÓ
REALITZAR UNA ALTRA VALORACIÓ DEL MATEIX TIPUS
REALITZAR UNA ALTRA VALORACIÓ DE DIFERENT TIPUS

En l'opció EXEMPLE s'explica amb detall les possibilitats que es presenten en les simulacions següents:

SIMULACIÓ VISUAL

SIMULACIÓ GRÀFICA

En ambdues simulacions tenim la possibilitat de controlar localment i manualment la valoració.

En la SIMULACIÓ DE VALORS PROPERS AL PEQ es presenten tres possibilitats:

- Simulació en dècimes de ml.
- Simulació en centèsimes de ml.
- Simulació en mil·lèsimes de ml.

DADES VALORACIÓ

Valoració..... ÀCID + BASE

Tipus..... ADBF

Volum àcid=25.000 ml Molaritat àcid= 0,100 M

Volum inicial base=23.000 ml Molaritat base= 0,100 M

Variació volum base= 0.100 ml Volum final base ...= 27,000 ml

RESULTATS VALORACIÓ

PH inicial ÀCID DÈBIL 2.872

PH al punt d'equivalència 8.722

Volum per produir el punt d'equivalència 25.000 ml

vol(ml)	PH	vol(ml)	PH	vol(ml)	PH	vol(ml)	PH
23.000	5,81	24.100	6,17	25.200	10,60	26.300	11,40
23.100	5,83	24.200	6,23	25.300	10,78	26.400	11,44
23.200	5,85	24.300	6,29	25.400	10,90	26.500	11,46
23.300	5,88	24.400	6,35	25.500	11,00	26.600	11,49
23.400	5,91	24.500	6,43	25.600	11,07	26.700	11,52
23.500	5,94	24.600	6,53	25.700	11,14	26.800	11,54
23.600	5,97	24.700	6,66	25.800	11,20	26.900	11,56
23.700	6,01	24.800	6,84	25.900	11,25	27.000	11,59
23.800	6,04	24.900	7,14	26.000	11,29	*****	*****
23.900	6,08	25.000	8,72	26.100	11,33	*****	*****
24.000	6,12	25.100	10,30	26.200	11,37	*****	*****

Simulació a l'entorn del punt d'equivalència en dècimes de ml. ($\delta = 0.1\text{ml}$)

<u>DADES VALORACIÓ</u>							
Valoració..... ÀCID + BASE							
Tipus..... ADBF							
Volum àcid=25.000 ml		Molaritat àcid= 0,100 M					
Volum inicial base=24.800 ml		Molaritat base= 0,100 M					
Variació volum base= 0.010 ml		Volum final base ...= 25,200 ml					
<u>RESULTATS VALORACIÓ</u>							
PH inicial ÀCID DÉBIL		2.872					
PH al punt d'equivalència		8.722					
Volum per produir el punt d'equivalència		25.000 ml					
vol(ml)	PH	vol(ml)	PH	vol(ml)	PH	vol(ml)	PH
24.800	6,84	24.910	7,19	25.020	9,60	25.130	10,41
24.810	6,86	24.920	7,24	25.030	9,78	25.140	10,45
24.820	6,88	24.930	7,30	25.040	9,90	25.150	10,48
24.830	6,91	24.940	7,36	25.050	10,00	25.160	10,50
24.840	6,94	24.950	7,44	25.060	10,08	25.170	10,53
24.850	6,96	24.960	7,54	25.070	10,15	25.180	10,55
24.860	6,99	24.970	7,67	25.080	10,20	25.190	10,58
24.870	7,03	24.980	7,84	25.090	10,25	25.200	10,60
24.880	7,06	24.990	8,14	25.100	10,30	*****	*****
24.890	7,10	25.000	8,72	25.110	10,34	*****	*****
24.900	7,14	25.010	9,30	25.120	10,38	*****	*****

Simulació a l'entorn del punt d'equivalència en centèsimes de ml ($\delta=0,01$ ml)

DADES VALORACIÓ							
Valoració..... ÀCID + BASE							
Tipus..... ADBF							
Volum àcid		= 25.000 ml		Molaritat àcid		= 0,100 M	
Volum inicial base		= 24.980 ml		Molaritat base		= 0,100 M	
Variació volum base		= 0.001 ml		Volum final base		= 25,020 ml	
RESULTATS VALORACIÓ							
PH inicial ÀCID DÈBIL		2.872					
PH al punt d'equivalència		8.722					
Volum per produir el punt d'equivalència		25.000 ml					

vol(ml)	PH	vol(ml)	PH	vol(ml)	PH	vol(ml)	PH
24.980	7,84	24.991	8,19	25.002	*****	25.013	9,41
24.981	7,86	24.992	8,24	25.003	8,78	25.014	9,45
24.982	7,89	24.993	8,30	25.004	8,90	25.015	9,48
24.983	7,91	24.994	8,36	25.005	9,00	25.016	9,50
24.984	7,94	24.995	8,44	25.006	9,08	25.017	9,53
24.985	7,97	24.996	8,54	25.007	9,15	25.018	9,56
24.986	8,00	24.997	8,66	25.008	9,20	25.019	9,58
24.987	8,03	24.998	*****	25.009	9,25	25.020	9,60
24.988	8,06	24.999	*****	25.010	9,30	25.021	9,62
24.989	8,10	25.000	8,72	25.011	9,34	*****	*****
24.990	8,14	25.001	*****	25.012	9,38	*****	*****

Simulació a l'entorn del punt d'equivalència en mil·lèsimes de ml ($\delta=0,001$ ml)

Amb això podem fer un estudi local del grau de quantitativitat de la valoració.

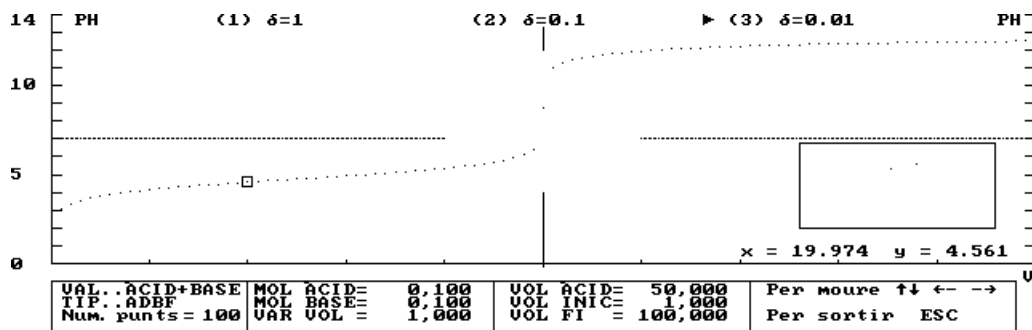
Després de la simulació gràfica apareix un menú nou:

MENÚ D'OPCIONS DESPRÉS DE LA SIMULACIÓ GRÀFICA

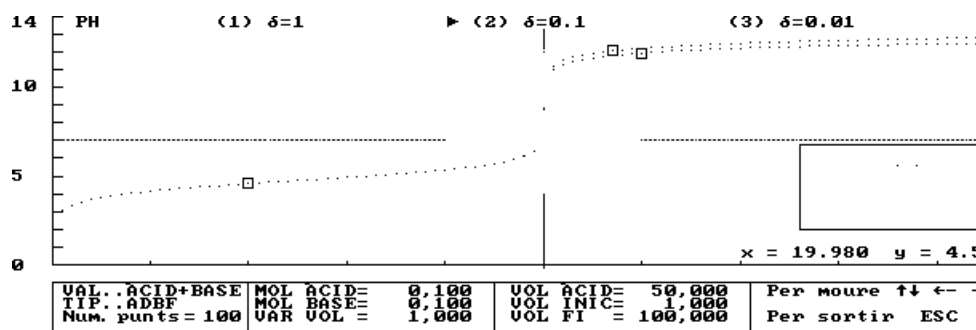
ALTRA VALORACIÓ MATEIX TIPUS - MATEIXA GRÀFICA
ALTRA VALORACIÓ MATEIX TIPUS - DIFERENT GRÀFICA
ALTRA VALORACIÓ DIFERENT TIPUS - MATEIXA GRÀFICA
ALTRA VALORACIÓ

En aquests apartats tenim la possibilitat d'estudiar diferents valoracions en una mateixa gràfica i de poder fer estudis comparatius entre:

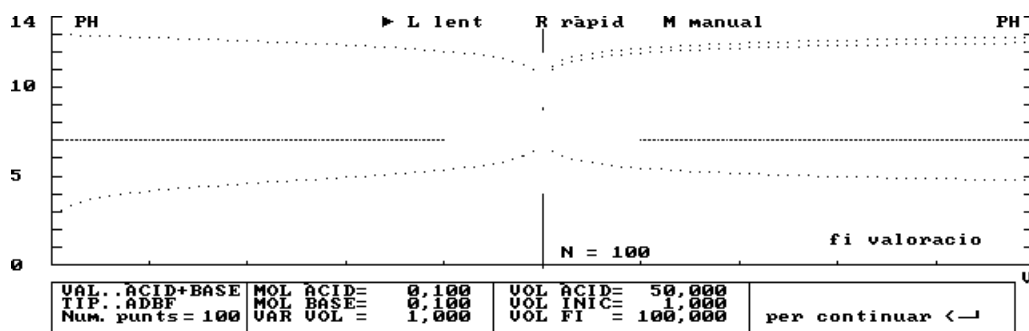
- Valoracions del mateix o de diferent tipus.
- Valoracions de la mateixa o de diferent modalitat.
- Valoracions amb diferents constants K_a i K_b .
- Salts relatius del pH en les tres etapes.
- Desviacions del pH en les etapes reguladores i d'excés d' OH^- en funció de les molaritats dels reactius.
- Etc.



Estudi local corba valoració (Aproximacions amb $\delta=0,01$)



Estudi local de dos valoracions mateix tipus i molaritats diferents



Estudi local de tres valoracions (una és base + àcid).

3. ASPECTES PEDAGÒGICS

3.1 OBJECTIUS

Entre els objectius bàsics del programa hem de citar els següents:

- A) Amb aquest programa es pretén que l'alumne que ha realitzat, pràctiques en el laboratori sobre valoracions àcid-base, en tingui un millor coneixement.
- B) L'alumne podrà relacionar, per a diferents àcids i base, les diferents fases que tenen lloc durant una neutralització, és a dir, haurà de relacionar les diverses dissolucions reguladores o tampó que apareixen en les valoracions estàndard del tipus àcid fort i dèbil amb base forta i dèbil respectivament.
- C) El salt brusc del pH a l'entorn del punt d'equivalència és difícil de quantificar quantitativament amb la utilització d'indicadors en el laboratori. És per això que l'estudi local del pH a l'entorn del punt d'equivalència, utilitzant una de les opcions que ofereix el programa, pot ser d'especial interès didàctic per als alumnes.
- D) La superposició de diferents gràfics d'un mateix tipus per a diferents molaritats dels reactius i, fins i tot, amb variacions en la constant K_a i K_b , és també una altra de les característiques que pot trobar l'alumne.
- E) La possibilitat d'estudiar les corbes de valoració en punts concrets, obtinguts desplaçant el cursor pel gràfic, i la possibilitat de comparar per a un mateix volum, els diferents valors del pH, segons les molaritats del reactius.

3.2 METODOLOGIA D'ÚS

Abans de començar a usar el programa hem de remarcar les pautes que cal seguir:

- 1) Visualitzeu detalladament l'EXEMPLE i poseu especial atenció en les seves parts.
- 2) Feu un estudi de l'ADBF per a molaritats iguals a les proposades en el exemple i després compareu-ne els resultats amb una altra valoració amb molaritat de l'àcid igual a 0.1 M i molaritat de la base igual a 0.2 M.
- 3) Repetiu el mateix estudi per a una valoració base + àcid.
- 4) Completeu l'estudi per als altres tipus de valoracions i compareu-les.
- 5) En un principi heu d'intentar introduir dades senzilles, de tal manera que l'esquema o els resultats de la valoració ja siguin coneguts abans de visualitzar-los. (Per exemple, introduïu pocs punts de la corba a fi que siguin fàcilment recognoscibles gràficament.)
- 6) Després de la pràctica amb exemples típics i amb dades d'entrada senzilles, és quan podeu passar a realitzar valoracions amb molaritats no usuals (per exemple, molaritat de l'àcid de 0.23 M molaritat de la base de 0.089 M i volum d'àcid de 34.6 ml). En tots els casos el programa sempre intentarà

centrar els valors respecte al punt d'equivalència.

- 7) Fins i tot al final podeu fer un estudi d'una valoració en què canvieu la cte Ka. Per exemple: com es modifica el PH en el PEQ canviant $k_a = 0.000018$ per $k_a = 0.000010$ o per $k_a = 0.000030$.

3.3 EXEMPLES D'ÚS I AVALUACIÓ

En aquest apartat proposarem alguns exemples d'utilització d'aquest programa:

E1) Valoració..... ÀCID + BASE

Tipus..... els quatre tipus ADBF, ADBD, AFBF, AFBD

Dades:

Molaritat àcid (MA) = 0.1 M

Molaritat base (MB) = 0.1 M

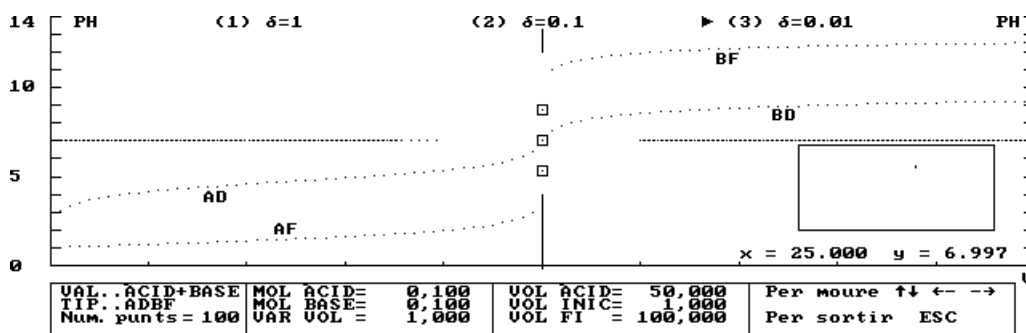
Volum àcid (VA) = 25 ml

Volum inicial base (VIB) = 0.5 ml

Increment volum base (IVB) = 0.5 ml

Volum final base (VFB) = 50 ml

Feu en un mateix gràfic els quatre tipus i poseu una atenció especial en les etapes reguladores i l'excés d'OH-, així com en els punts d'equivalència.



Estudi local de les quatre valoracions ADBF, ADBD, AFBF, AFBD (Tipus Àcid + Base)

E2) Repetiu les valoracions de l'apartat 1, però amb MA = 0.5 i MB = 0.5

E3) Realitzeu una valoració BASE + ÀCID amb les mateixes dades que en l'apartat 1 i després com MA = 0.5 i MB = 0.5, per comparar valors.

E4) Valoració.....ÀCID + BASE

Tipus.....ADBF i ADBD

Dades:

Realitzeu en un mateix gràfic la valoració corresponent als dos grups de dades

a)

MA = 0.2 M MB = 0.1 M VA = 25 ml
VIB = 1 ml IVB = 1 ml VFB = 50 ml

b)

MA = 0.1 M MB = 0.2 M VB = 25 ml
VIB = 1 ml IVB = 1 ml VBF = 50 ml

Compareu el pH en els punts d'equivalència i els volums necessaris per produir-los.

Noteu que en aquests casos el gràfic no està centrat simètricament respecte al PEQ.

E5) Repetiu les valoracions de l'apartat 4 amb els tipus AFBF i AFBD.

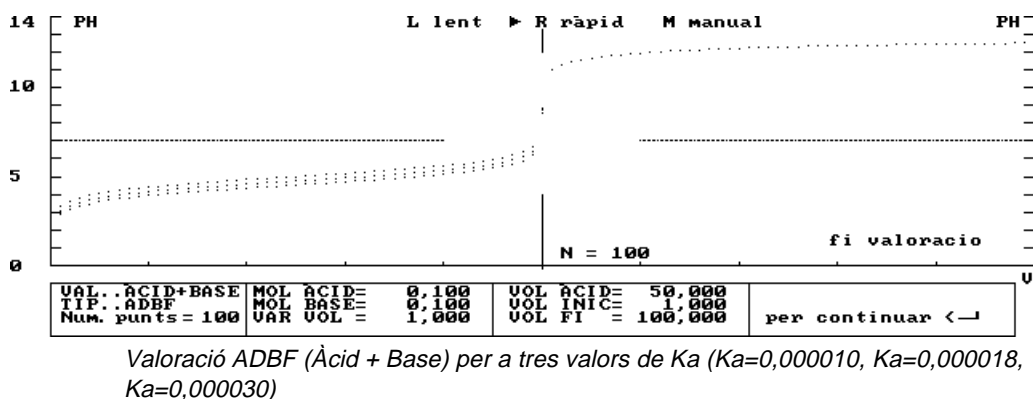
E6) Analitzeu les valoracions dels apartats 4 i 5, però suposant que és BASE + ÀCID.

E7) Feu un estudi de la valoració ADBF, tant per al cas d'ÀCID + BASE com BASE + ÀCID, tenint en compte tres supòsits diferents de la constant Ka:

- a) Ka = 0.000018
- b) Ka = 0.000010
- c) Ka = 0.000030

Compareu-ho en els tres supòsits següents:

- El pH inicial de l'àcid dèbil.
- El pH en el punt d'equivalència.
- L'evolució del pH en les etapes reguladora i excés de d'OH.



Com a cloenda, proposem alguns exemples típics d'autoavaluació:

P1) ¿Quin és el pH que s'obté en valorar 30 ml d'AD (tipus $\text{CH}_3\text{-COOH}$) 0.5M amb 5 ml de BF (tipus NaOH) 0.2 M.?

Si afegim 5 ml més de BF, ¿quin és ara el PH ?

¿Quin és el pH en el punt d'equivalència d'aquesta valoració i quin és el volum de base forta per produir-lo?

P2) Analitzeu la qüestió anterior suposant que la molaritat de l'àcid és 0.2 M, la de la base 0.5 M i mantenint les altres dades.

P3) Analitzeu la qüestió P1) en el cas AF (HCL) i BD (NH_3).

P4) ¿És el mateix el pH en el punt d'equivalència d'una valoració ÀCID + BASE que BASE + ÀCID?

Analitzeu els casos ADBF, ADBD, AFBF, AFBD.

Suposeu les dades de l'exemple E1.

P5) ¿A quina valoració i tipus corresponen les següents etapes?:

Primera etapa: etapa reguladora $\text{NH}_3\text{-NH}_4$

Segona etapa : hidròlisi tipus AcONH_4

Tercera etapa: etapa reguladora HOAc-OAc-

P6) Feu un esquema global dels quatre tipus de valoracions, incloent-hi els casos ÀCID + BASE i BASE + ACID, així com els gràfics corresponents.

En l'esquema, s'hi han d'incloure totes les fases o etapes que tenen lloc i la seva naturalesa. (Per exemple; etapa primera: pH controlat per dissolució

reguladora tipus $\text{NH}_3\text{-NH}_4^+$; segona etapa: etc.)

RP1 :

	PH Inicial	AD	=	2.52
VB	= 5 ml	PH	=	3.60
VB	= 10 ml	PH	=	3.93
VB	= 75 ml	PH	=	8.95 (PEQ)

RP2 :

	PH Inicial	AD	=	2.72
VB	= 5 ml	PH	=	4.60
VB	= 10 ml	PH	=	5.44
VB	= 12 ml	PH	=	8.95 (PEQ)

RP3 :

	PH Inicial	AF	=	0.30
VB = 5 ml	PH	=	0.40	
VB = 10 ml	PH	=	0.49	
VB = 75 ml	PH	=	5.05 (PEQ)	

Per realitzar els exemples que proposem abans cal preparar un full d'entrada de dades.

Un model de FITXA d'ENTRADA de DADES que hem utilitzat en pràctiques de laboratori és:

FITXA D'ENTRADA DE DADES		FITXA Núm.		
<div style="display: flex; justify-content: space-between; align-items: flex-start;"> <div style="width: 45%;"> <p style="text-align: center; margin-bottom: 10px;">VALORACIÓ</p> <hr style="width: 100%;"/> <div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 45%;"> <p>ÀCID + BASE <input style="width: 40px;" type="text"/></p> <p>MA = M</p> <p>MB = M</p> <p>VA = ml</p> <p>VIB = ml</p> <p>IVB = ml</p> <p>VFB = ml</p> </div> <div style="width: 45%;"> <p>BASE + ÀCID <input style="width: 40px;" type="text"/></p> <p>MB = M</p> <p>MA = M</p> <p>VB = ml</p> <p>VIA = ml</p> <p>IVA = ml</p> <p>VFA = ml</p> </div> </div> </div> <div style="width: 50%; margin-top: 10px;"> <div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 45%;"> <p>ADBF <input style="width: 40px;" type="text"/></p> <p>ADBD <input style="width: 40px;" type="text"/></p> <p>AFBF <input style="width: 40px;" type="text"/></p> <p>AFBD <input style="width: 40px;" type="text"/></p> </div> </div> </div> </div>				
ETAPES VALORACIÓ				
<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%; border-right: 1px solid black; padding: 5px;"> <p>1a ETAPA</p> <p>2a ETAPA</p> <p>3a ETAPA</p> </td> <td style="width: 50%; padding: 5px;"> <p>1a ETAPA</p> <p>2a ETAPA</p> <p>3a ETAPA</p> </td> </tr> </table>			<p>1a ETAPA</p> <p>2a ETAPA</p> <p>3a ETAPA</p>	<p>1a ETAPA</p> <p>2a ETAPA</p> <p>3a ETAPA</p>
<p>1a ETAPA</p> <p>2a ETAPA</p> <p>3a ETAPA</p>	<p>1a ETAPA</p> <p>2a ETAPA</p> <p>3a ETAPA</p>			
<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%; border-right: 1px solid black; padding: 5px;"> <p>PH INICIAL ÀCID =</p> <p>PH en el PEQ =</p> <p>VB en el PEQ = ml</p> </td> <td style="width: 50%; padding: 5px;"> <p>PH INICIAL BASE =</p> <p>PH en el PEQ =</p> <p>VB en el PEQ = ml</p> </td> </tr> </table>			<p>PH INICIAL ÀCID =</p> <p>PH en el PEQ =</p> <p>VB en el PEQ = ml</p>	<p>PH INICIAL BASE =</p> <p>PH en el PEQ =</p> <p>VB en el PEQ = ml</p>
<p>PH INICIAL ÀCID =</p> <p>PH en el PEQ =</p> <p>VB en el PEQ = ml</p>	<p>PH INICIAL BASE =</p> <p>PH en el PEQ =</p> <p>VB en el PEQ = ml</p>			
<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%; border-right: 1px solid black; padding: 5px;"> <p>MA = molaritat àcid</p> <p>VA = volum àcid</p> <p>VIA = volum inicial àcid</p> <p>IVA = increment volum àcid</p> <p>VFA = volum final àcid</p> </td> <td style="width: 50%; padding: 5px;"> <p>MB = molaritat base</p> <p>VB = volum base</p> <p>VIB = volum inicial base</p> <p>IVB = increment volum base</p> <p>VFB = volum final base</p> </td> </tr> </table>			<p>MA = molaritat àcid</p> <p>VA = volum àcid</p> <p>VIA = volum inicial àcid</p> <p>IVA = increment volum àcid</p> <p>VFA = volum final àcid</p>	<p>MB = molaritat base</p> <p>VB = volum base</p> <p>VIB = volum inicial base</p> <p>IVB = increment volum base</p> <p>VFB = volum final base</p>
<p>MA = molaritat àcid</p> <p>VA = volum àcid</p> <p>VIA = volum inicial àcid</p> <p>IVA = increment volum àcid</p> <p>VFA = volum final àcid</p>	<p>MB = molaritat base</p> <p>VB = volum base</p> <p>VIB = volum inicial base</p> <p>IVB = increment volum base</p> <p>VFB = volum final base</p>			