# Química Analítica Quantitativa

## Volumetria de Neutralização Titulação de Ácido Acético com Hidróxido de Sódio

Rogério Ribeiro Macêdo 20 de junho de 2024

# 1 Objetivo

O presente trabalho foi realizado objetivando aplicar a sequência de cálculos necessários à titulação do ácido acético (titulado) com hidróxido de sódio (titulante) e consequentemente gerar a curva de titulação. Lembrando que, para tal, por se tratar de um ácido fraco faz-se necessário a utilização da constante de dissociação do ácido (Ka).

A curva de titulação será construída relacionando o volume adicionado de NaOH com o valor do pH associado.

## 2 Etapas da titulação

Antes de iniciar vale lembrar que o processo envolve basicamente 4 etapas e em cada uma delas o cálculo do pH é realizado considerando o contexto da titulação:

### Etapa 1 : antes de iniciar a titulação

Neste ponto a solução contém apenas ácido acético. Portanto, o valor do pH é determinado pela dissociação do ácido.

#### **Etapa 2**: antes de atingir o ponto de equivalência

Ainda há ácido para reagir, assim, o pH é determinado pelo sistema tampão.

#### Etapa 3: no ponto de equivalência

O ponto de equivalência é o ponto onde todo o ácido reagiu com a base. O volume da base para isso é aquele que será determinado pelo volume de equivalência. O pH é determinado pela hidrólise do sal formado.

### Etapa 4 : depois do ponto de equivalência

Há excesso de base. O pH é determinado através desse excesso. A hidrólise do sal contribui pouco nesse ponto, pois o excesso de base reprime esta reação.

## 3 Dados para titulação

	Ácido Acético	Hidróxido de sódio
Volume Concentração Ka	50,00  mL $0,100 \text{ mol} \cdot L^{-1}$ $1,75 \times 10^{-5}$	$0,100\ mol\cdot L^{-1}$

## 4 Volume de equivalência

O volume de equivalência é o volume necessário de titulante que irá reagir completamente com o titulado. No caso, o volume de NaOH necessário para reagir completamente com o ácido acético. O cálculo é realizado usando a expressão<sup>1</sup>:

$$V_{titulante} \times C_{titulante} = V_{titulado} \times C_{titulado}$$

Portanto, o volume necessário de NaOH que será necessário para neutralizar todo o ácido acético será de:

$$V_{titulante} \times C_{titulante} = V_{titulado} \times C_{titulado}$$
  
 $V_{titulante} \times 0, 100 = 50, 00 \times 0, 100$   
 $V_{titulante} = 50, 00 \text{ mL}$ 

## 5 Cálculos

A partir deste ponto realizaremos os cálculos da titulação. Como o objetivo é construir a curva de titulação, os volumes que usaremos de NaOH serão pontuais. O conjunto de dados que será utilizado para a construção da curva pode ser encontrado no link: https://github.com/rogerioribeiromacedo/Chemistry<sup>2</sup>

## 5.1 No ponto inicial (sem adição de NaOH)

O valor do Ka é considerado para a realização do cálculo, e este é calculado usando a expressão abaixo:

$$Ka = \frac{[H_3O^+] \times [Ac^-]}{[HAc]}$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>C: concentração; V: volume

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>https://github.com/rogerioribeiromacedo/Chemistry

$$Ka = \frac{x \times x}{[HAc]}$$

$$Ka = \frac{x^2}{[HAc]}$$

$$x^2 = Ka \times [HAc]$$

$$x = \sqrt{Ka \times [HAc]}$$

$$x = [H_3O^+] = \sqrt{(1,75 \times 10^{-5}) \times 0,100}$$

$$x = [H_3O^+] = 1,32 \times 10^{-3}$$
O valor do pH:
$$nH = -\log[H_2O^+]$$

$$pH = -\log[H_3O^+]$$
  
 $pH = -\log 1, 32 \times 10^{-3}$   
 $pH = 2,88$ 

#### 5.2Antes do ponto de equivalência

O cálculo do pH antes do ponto de equivalência faz uso da **Equação de Henderson-**Hasselbalch. Esta equação faz o relacionamento do pH de uma solução tampão, com o pKa, as concentrações da forma ácida (HAc) e da base conjugada ( $Ac^{-}$ ). Abaixo a equação a ser utilizada:

$$pH = pKa + \frac{[Ac^{-}]}{[HAc]}$$

Portanto, precisamos do pKa do ácido acético:

$$pKa = -log[Ka]$$
  

$$pKa = -log(1,75 \times 10^{-5})$$
  

$$pka = 4,757$$

#### 5.3 Após adição de 0,05 mL (0,00005 L) de NaOH

Esse volume representa o volume de uma única gota de NaOH adicionada na solução do titulante.

$$[Ac^{-}] = \frac{V_{NaOH} \times C_{NaOH}}{V_{HAc} + V_{NaOH}} = \frac{0,00005 \times 0,1}{0,05 + 0,00005}$$

$$[Ac^-] = 0,0001 \ mol \times L^{-1}$$

$$[HAc] = \frac{(C_{HAc} \times V_{HAc}) - (C_{NaOH} \times V_{NaOH})}{(V_{HAc} + V_{NaOH})} = \frac{(0, 1 \times 0, 05) - (0, 1 \times 0, 00005)}{(0, 05 + 0, 00005)}$$

$$[\mathrm{HAc}] = 0,0998 \; \mathrm{mol} imes \mathrm{L}^{-1}$$

$$pH = pKa + \log \frac{[Ac^{-}]}{[HAc]} = 4,757 + \log \frac{0,0001}{0,0998}$$

$$\mathrm{pH}=1{,}758$$

## 5.4 Após adição de 0,1 mL (0,0001 L) de NaOH

$$[Ac^{-}] = \frac{V_{NaOH} \times C_{NaOH}}{V_{HAc} + V_{NaOH}} = \frac{0,0001 \times 0,1}{0,05 + 0,0001}$$

 $[Ac^-] = 0,0001996 \ mol \times L^{-1}$ 

$$[HAc] = \frac{(C_{HAc} \times V_{HAc}) - (C_{NaOH} \times V_{NaOH})}{(V_{HAc} + V_{NaOH})} = \frac{(0, 1 \times 0, 05) - (0, 1 \times 0, 0001)}{(0, 05 + 0, 0001)}$$

 $[HAc] = 0,0996 \ mol \times L^{-1}$ 

$$pH = pKa + \log\frac{[Ac^{-}]}{[HAc]} = 4,757 + \log\frac{0,0001996}{0,0996}$$

pH = 2,0589

### 5.5 Após adição de 10,00 mL (0,0001 L) de NaOH

$$[Ac^{-}] = \frac{V_{NaOH} \times C_{NaOH}}{V_{HAc} + V_{NaOH}} = \frac{0, 1 \times 0, 01}{0, 05 + 0, 01}$$

$$[Ac^-] = 1,67 \times 10^{-2} \ mol \times L^{-1}$$

$$[HAc] = \frac{(C_{HAc} \times V_{HAc}) - (C_{NaOH} \times V_{NaOH})}{(V_{HAc} + V_{NaOH})} = \frac{(0, 1 \times 0, 05) - (0, 1 \times 0, 01)}{(0, 05 + 0, 01)}$$

$$[HAc]=6,67\times 10^{-2}\ mol\times L^{-1}$$

$$pH = pKa + \log \frac{[Ac^{-}]}{[HAc]} = 4,757 + \log \frac{1,67 \times 10^{-2}}{6,67 \times 10^{-2}}$$

pH = 4,156

# 5.6~ Após adição de $25{,}00~\mathrm{mL}$ $(0{,}025~\mathrm{L})$ de NaOH

Esse volume corresponde à metade do volume de equivalência, portanto, nesse ponto, o valor do pH corresponde ao valor do pKa. Assim:

$$pH = pKa = 4,757$$

## 6 Curva de titulação

A curva de titulação é resultado de programa escrito em Python, que, utilizando os passos descritos na seção **Etapas de titulação**, produziu os dados necessários para sua construção.

O programa toma como referência os dados para titulação da seção 3 e calcula o pH considerando a variação de volume do NaOH de 0,00 mL até 120 mL. Abaixo, podemos ver os primeiros e últimos valores deste cálculo:

pH	Volume (L)
2.87848000000	0.00000000000
1.75740000000	0.00005000000
2.05886000000	0.00010000000
2.23539000000	0.00015000000
2.36076000000	0.00020000000
12.61556000000	0.12025000000
12.61574000000	0.12030000000
12.61592000000	0.12035000000
12.61610000000	0.12040000000
12.61628000000	0.12045000000

# 7 Gráfico

### Curvas de titulação

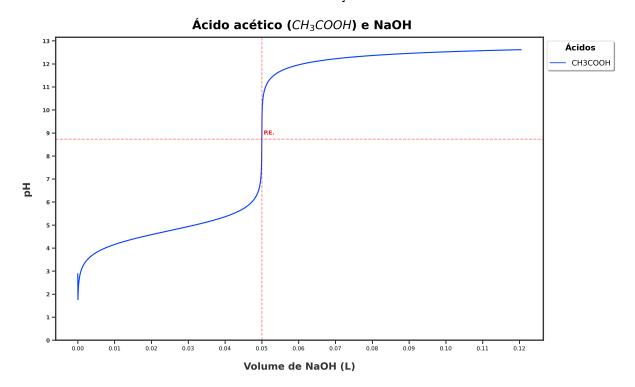


Figura 1