

QUÍMICA ANALÍTICA 1.

Complemento al tema curvas de concentración. Uso de primera y segunda derivada para obtener el punto de equivalencia

Elaboró. M. en C. Everardo Tapia Mendoza

El apunte aquí mostrado fue tomado del libro, Harris, Daniel. Análisis químico cuantitativo. (El libro se encuentra en la biblioteca, para el tema de titulaciones ácido-base, y la introducción al análisis químico lo recomiendo).

En el Skoog. Química Analítica. (También con existencia en la biblioteca) se encuentra un capítulo dedicado a excel aplicado a Química Analítica, valdría la pena que realizaran una lectura a dicho capítulo, los que crean conveniente revisar un poco de esto.

En el Skoog, capítulo 12, es el libro que maneja también el tema de curvas de valoración y su aplicación.

CRITERIO DE LA PRIMERA DERIVADA Y SEGUNDA

Como se puede observar en la tabla, la primera columna es el volumen que se añadió en microlitros, en este ejemplo se realizó una microtitulación, pero se puede realizar con mililitros; y la segunda columna es el pH medido con el potenciómetro (son los datos que ustedes tienen)

Tabla 12.3 Cálculo de la primera y segunda derivadas de una curva de valoración

$\mu\text{L NaOH}$	pH	Primera derivada		Segunda derivada	
		μL	$\frac{\Delta\text{pH}}{\Delta\mu\text{L}}$	μL	$\frac{\Delta(\Delta\text{pH}/\Delta\mu\text{L})}{\Delta\mu\text{L}}$
85.0	4.245				
86.0	4.400	85.5	0.155	86.0	0.071 0
87.0	4.626	86.5	0.226	87.0	0.081 0
88.0	4.933	87.5	0.307	88.0	0.033 0
89.0	5.273	88.5	0.340	89.0	-0.083 0
90.0	5.530	89.5	0.257	90.0	-0.068 0
91.0	5.719	90.5	0.189	91.25	-0.039 0
93.0	5.980	92.0	0.130		

Para obtener la primera derivada: Se realiza la diferencia de pH, restando el segundo valor – el primer valor, siempre por parejas. Y para obtener la diferencia de volumen primero se calcula el promedio de volúmenes de cada par; y se hace la resta de los promedios de los volúmenes, restando el segundo valor – el primer valor. Finalmente la primera derivada es el cociente de las diferencias de pH entre la diferencia de los promedios de los volúmenes. Por último se grafica en x los volúmenes de cada par y en “y” el cociente. El gráfico obtenido será la primera derivada. Los máximos o mínimos serán los puntos finales.

Para la segunda derivada: Se realizan las diferencias de la primera derivada. Recuerda el segundo – el primer valor. Se realiza el cociente de las diferencias de la diferencia de la primera derivada entre la diferencia de los promedios de los volúmenes. Esta razón de cambio será la segunda derivada. Para graficar en “x” se colocan los volúmenes y en “y” la segunda derivada. Donde intersecte con cero será el punto final.

EL punto final obtenido con primera y segunda derivada es el mismo o muy similar. En caso de dar un poco diferente. Promediar y usar un único valor.

Espero que esta guía les ayude a completar la obtención de los puntos de equivalencia. Nos vemos el miércoles.