

Simulacions d'alguns experiments químics

Guillem de Vera i Almenar

Departament d'Enginyeria de la Construcció

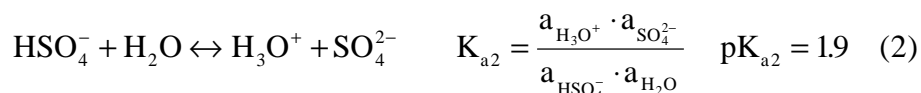
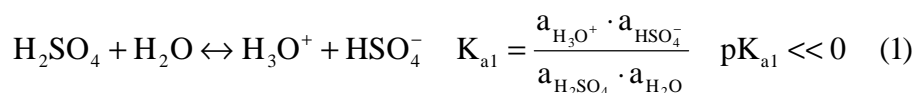
EPS, Universitat d'Alacant

S'han desenvolupat programes que simulen els experiments següents, i fan els càlculs adients:

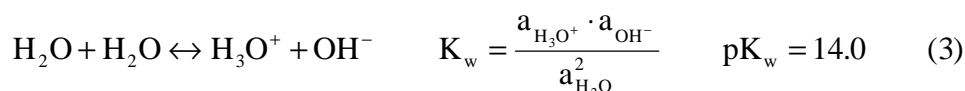
1. Valoració $K_2SO_4 + Ba^{2+}$
2. Valoració $NaOH + TiSO_4$
3. Experiment d'Evans (l'experiment de la gota d'aigua)

Càlcul de la corba de valoració de $NaOH$ amb H_2SO_4

A un volum v_b de dissolució de $NaOH$ de concentració c_b anem afegint H_2SO_4 de concentració c_a . Volem conèixer les concentracions de totes les espècies presents en la dissolució en funció del volum d'àcid afegit, v_a . El H_2SO_4 és un àcid dipròtic:



A més a més, com que estem en dissolució aquosa, tindrem l'equilibri de dissociació de l'aigua:



Farem les aproximacions següents:

- 1.- $[H_2SO_4] = 0$. Açò es justifica amb el fet de que $pK_{a1} \ll 0$; tot el sulfúric afegit es trobarà a la dissolució en forma de sulfat i bisulfat.
- 2.- $a_{H_2O} = 1$. L'aigua és el dissolvent i, en trobar-se en molta més quantitat que la resta d'espècies químiques, la seua concentració variarà poc.
- 3.- Els coeficients d'activitat a_i els calculem mitjançant la fórmula de Davies. Sol aproximar-se $a_i = 1$ (comportament ideal) per simplificar els càlculs, però constitueix una simplificació massa forta en dissolucions d'electròlits i, de fet, pot no ser acceptable, fins i tot a baixes concentracions.

Es fan tres balanços corresponents (balanç de sodi, balanç de sulfúric, balanç de càrregues).

S'obté un sistema de tres equacions amb tres incògnites que resollem amb un esquema iteratiu.