



ISBN - 978-85-8263-068-6

DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE PARA AQUISIÇÃO DE DADOS SERIAIS DE INSTRUMENTOS ANALÍTICOS

Renato Nunes de Andrade¹, Ernesto Correa Ferreira²

¹ Instituto Federal do Espírito Santo, renatoandrade@gmail.com.

² Universidade Estadual de Campinas, ernesto.ferreira@ifes.edu.br.

Resumo - Neste trabalho, foi desenvolvido um aplicativo para aquisição de dados digitais seriais para instrumentos analíticos de laboratório com o intuito de mudar aulas tradicionais de laboratório, que utilizam papel e caneta, para um experimento utilizando um microcomputador. O aplicativo, desenvolvido em linguagem JAVA, foi utilizado como ferramenta de aquisição e tratamento de dados de um pHmetro comercial em titulações potenciométricas em aulas experimentais na disciplina de Química Analítica Quantitativa do curso de Licenciatura em Química, cujos objetivos eram construir curvas de titulação e determinar o teor de acidez em refrigerantes de cola e guaraná. Seus recursos de construção de gráficos, curvas de titulação e derivadas, foram utilizados com sucesso para dinamizar a aquisição e tratamento de dados. E, a partir da avaliação qualitativa realizada pelos discentes, foi constatado que aplicativo desenvolvido é intuitivo e de fácil manuseio. Por fim, conclui-se que o aplicativo desenvolvido é uma alternativa viável ao método tradicional, pois não demanda tempo extraclasse dos alunos e minimiza os erros sistemáticos para tratamento de dados e confecção de gráficos.

Palavras-chaves: Química. Desenvolvimento de Softwares. Java. RS-232. Titulações Potenciométricas.

Abstract - In this paper, an application for the acquisition of serial digital data for laboratory analytical instruments was developed, aiming to change traditional laboratory classes from using pen and paper to an experiment with a computer. Developed in JAVA language, the application was used as a tool for the acquisition and data treatment for a commercial pH Meter in potentiometric titrations during experimental classes on the subject of Quantitative Chemical Analysis in the Graduation in Applied Chemistry program. It aimed to draw curves of titration and determine the acidity content in cola and guaraná soft drinks. Their graphic, titration curves and derivatives drawing resources were successfully used to advance the acquisition and treatment of data. From the qualitative evaluation performed by the students, it was observed that the application is intuitive and easily operated. Finally, the conclusion was that the developed application is a viable alternative to the traditional method since it doesn't demand from the students any time outside the classroom and minimizes the systematic mistakes in data treatment and graphic production.

Keywords: Chemistry. Software Development. Java. RS-232. Potentiometric Titrations.



ISBN - 978-85-8263-068-6

CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Esse trabalho apresenta um software que foi desenvolvido para adquirir dados digitais de instrumentos que possuem portas seriais, os quais serão tratados para de gerar gráficos (relatórios) e atingir o objetivo específico de uma prática de potenciometria, que é determinar o teor de ácido fosfórico ou cítrico numa amostra de refrigerante comercial. O aplicativo foi escrito em JAVA e sua utilização foi com alunos da licenciatura em química do Instituto Federal do Espírito Santo campus Vila Velha (IFES). Buscou-se utilizar este método diferente para melhorar a eficiência das aulas experimentais com dinamismo na coleta e tratamento dos dados, evitando erros sistemáticos de operação e retrabalhos de digitalização e construção de gráficos.

A ideia nasceu no IFES Vila Velha, onde neste campus não possui um aplicativo próprio que pudesse ser utilizado nas disciplinas de análise instrumental, o que motivou a criação desse software. Além disso, nosso questionamento se deu por: será viável modificar as aulas que já são ministradas secularmente pelo IFES campus Vila Velha que utiliza caneta e papel para implantação de um método com aplicativo e computador? Se levarmos em conta que foi possível a produção e utilização desse software nas dependências do instituto e as plataformas (notebooks) que a população de alunos estudada no campus possui, então a viabilidade somente será uma questão de adaptação.

OBJETIVO GERAL

Desenvolver um aplicativo para adquirir dados digitais, através das portas seriais de instrumentos analíticos.

Objetivos Específicos

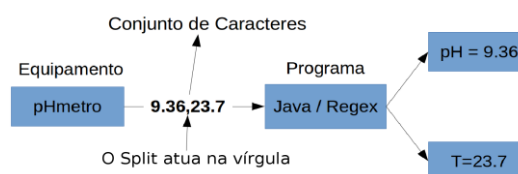
- Aplicar a aula experimental para coleta de informações pertinentes a eficiência do software;
- Verificar a estabilidade do software durante uma aula experimental;
- Determinar o teor de ácido fosfórico e cítrico na amostra de refrigerante de cola e guaraná respectivamente.

REFERENCIAL TEÓRICO

Para este projeto foi utilizado a linguagem de programação Java pois apresenta um conjunto de ferramentas; dentre elas: compilador, bibliotecas, IDE e Virtual Machine; que facilita sua utilização em diversos sistemas operacionais e plataformas diferentes evitando assim que um programador tenha que reescrever todos códigos se ele mudasse de um computador que possui o SO Windows para um que utiliza o SO Linux por exemplo (CAELUM, 2004; CESTA, 1996). Segundo a (Oracle, 2011): “Java é a base de praticamente todos os tipos de aplicativos em rede, e é o padrão global para desenvolvimento e fornecimento de aplicativos para celular, jogos, conteúdo on-line e software corporativo”.

O Java foi utilizado para criar uma aplicação para adquirir dados por meio de uma porta *Recommended Standard Number 232 (RS-232)* que aparelhos de laboratórios, no nosso caso um pHmetro, utilizam para se comunicar, por exemplo, com um computador (RUSSO; ECHOLS, 1999). Os pHmetros do IFES enviam as informações de pH e temperatura, como na Figura 1, em uma sequência de caracteres que precisam ser divididas utilizando o método *split*¹(dividir) da classe *Regex*² do Java mais as Expressões Regulares, que são uma sequência de caracteres e símbolos que tem por função procurar um texto (JARGAS, 2009; ORACLE, 2015).

Figura 1 - Informação do pHmetro.



O programador deverá construir a aplicação de forma que quando o método *Split* percorrer a informação (9.36,23.7), quando achar um vírgula, a qual é a expressão regular, o método separe as informações. Por padrão a informação enviada pelo pHmetro mostra primeiro o pH (9.36), uma vírgula e depois a temperatura (23.7).

A determinação de ácidos em uma amostra pode é feita utilizando a volumetria de neutralização que utiliza as técnicas de Titulação de Neutralização e Titulação Potenciométricas. Nessas técnicas o objetivo é determinar o ponto final da reação, que é um efeito físico³ correlacionado com ponto de equivalência, o qual é quando a quantidade de reagente padrão⁴ adicionado se equivale a quantidade de analito.

A Titulação de neutralização utiliza indicadores⁵ que mudam de cor que quando mudam de cor indicam o ponto final da reação, ou seja, essa técnica é completamente dependente do indicador, os quais se tornam menos eficientes quando se trabalha com soluções coloridas ou turvas (SKOOG et al., 2014, p.321).

Diferentemente das titulações de neutralização, as potenciométricas utilizam um potenciômetro (pHmetro) para medir Potencial Hidrogeniônico (pH) na amostra, não necessitando de nenhum indicador. A técnica consiste em medir a atividade dos íons Hidrogênio em solução por diferença de potencial (ddp), no qual se utiliza um eletrodo que possui um potencial constante na redução e oxidação (Eletrodo de

¹ Este método percorre uma sequência de caracteres e onde ele acha um caractere específico informado pelo programador ele divide a informação.

² Classe que possui métodos, dentre eles o *split*, que utilizam as expressões regulares para procurar um texto.

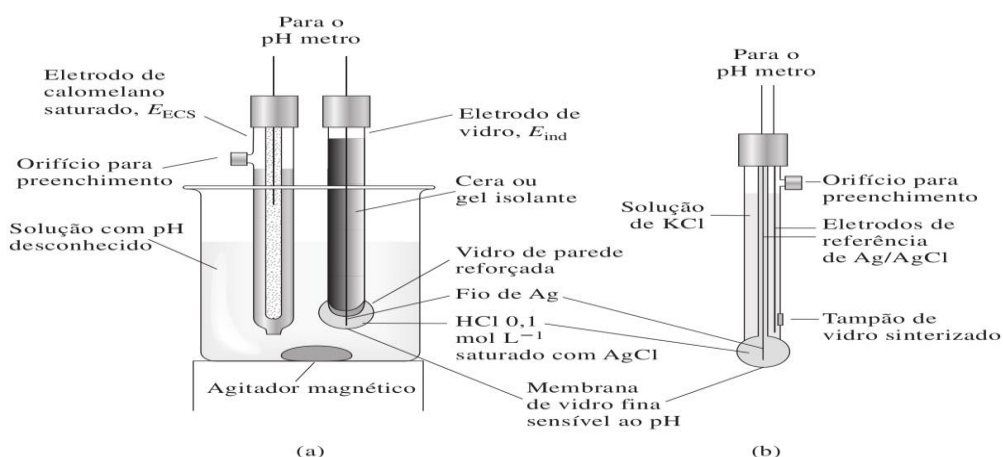
³ Mudança de cor por exemplo.

⁴ Reagente Padrão é uma solução que possui um ácido/base fortes para reagir completamente com analito para gerar um ponto final nítido. Os mais utilizados: Ácido Clorídrico (HCl), Ácido Sulfúrico (H₂SO₄), Ácido Perclórico (HClO₄), Hidróxido de Sódio (NaOH) e Hidróxido de Potássio (KOH).

⁵ São ácidos ou bases orgânicos fracos que mudam de cor próximo ao ponto de equivalência.

referência) e outro que é sensível a quantidade dos cátions de hidrogênio em solução (Eletrodo de indicador) (BACCAN et al., 2001; SKOOG et al., 2014, p.321; VOGEL 1981). A mostra os eletrodos de referência e indicador:

Figura 2 - Sistema típico de eletrodo para medida de pH



Fonte: (SKOOG et al., 2014, p.536)

Para melhor visualização em (a) mostra os eletrodos separados. O eletrodo indicador possui uma membrana de vidro que permite a passagem de cargas devido à diferença de concentração de íons Hidrogênio internamente (o qual é constante), e externamente, depende da concentração da amostra, promovendo uma ddp, o qual é comparado com eletrodo de referência. Em (b) temos uma sonda combinada, que é a junção dos dois eletrodos, o indicador está na parte mais interna da Figura 2, na parte intermediária está o eletrodo referência e externamente está a solução da amostra.

Segundo os padrões de qualidade e identidade de bebidas do Ministério da Agricultura amostras de refrigerantes devem possuir 0,06% de ácido fosfórico para cola e 0,47% de ácido cítrico para demais sabores (MINISTÉRIO DA AGRICULTURA, 2010).

METODOLOGIA

Condições Experimentais.

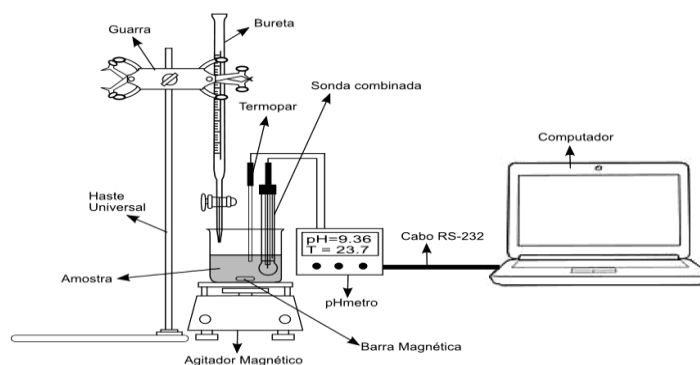
Para a aplicação de uma aula teste foi necessário que a etapa de criação do programa já estivesse com um protótipo estável para aquisição e tratamento dos dados, assim como a geração de relatórios por meio de gráficos.

Procedimentos

Aplicou-se duas aulas experimentais nos dias 13 de Março de 2015 e 17 de Março de 2015. Os alunos de ambos os dias se agruparam em bancadas por títulos I, II, Capela, Geladeira. Separou-se as amostras de 300 mL de refrigerante guaraná e cola das marcas Coroa, Ice-Cola e Coca-Cola comprados nas proximidades do IFES

Vila Velha. A amostra foi submetido, em um béquer de 500 mL, a um banho na lavadora ultrassônica marca SoniClean 2, 220V, 40 kHz e 70W por 15 minutos para remoção de gases ácidos em solução no refrigerante. Em Sequência, calibrou-se o pHmetro da marca MS Tecnopon Instrumentação modelo MPA-210P com saída digital RS-232, medindo faixas entre -2,000 à 20,000 (resolução de $\pm 0,001$) para o pH e -20 °C à 120 °C para a temperatura, alimentação de 120V, solução de enchimento do eletrodo de vidro com KCl 3 M saturado com AgCl, configuração da porta serial: 9600 Bits por segundo, 8 Bits de dados, 1 Bit de Parada e nenhum controle de fluxo; com as soluções tampões de pHs 4,00 $\pm 0,02$ e 7,00 $\pm 0,02$ à 25 °C fornecidas pelo fabricante. Mediu-se com uma pipeta de 100 mL a amostra de refrigerante desgaseificado e verteu-se para um béquer de 300 mL, o qual foi levado a um agitador magnético da Novalnstruments, modelo NI 1108, com faixa de rotação entre 100 à 2000 rpm, alimentação 220V, 660W, operando em 25 °C e agitação branda utilizando barra magnética. Conectou-se os cabos RS-232 e abriu-se as portas seriais no Linux. Executou-se o aplicativo do IFES em dois *notebooks*: o primeiro foi um Toshiba, modelo Satellite L655, tela de 15,6", processador Pentium P6100 64 btis, com 3 GB RAM; Sistema Operacional Linux Ubuntu 14.10 32 bits; e o outro foi um Acer, modelo Aspire 5630, tela de 15", processador Pentium core-2-duo 32 bits, com 2 GB de RAM e com 120 GB de disco rígido utilizando o Sistema Operacional Linux Ubuntu 14.10 32 bits. Inseriu-se os eletrodos de vidro e termopares nas amostras e adquiriu-se o pH e temperatura em volume igual a zero. Após, titulou-se de 05 em 05 mL com uma bureta de 50 mL preenchida com a solução padronizada de NaOH até que o pH fosse igual a 10. Determinou-se o teor de ácido na amostra. A Figura 3 mostra o aparato montão pelos alunos:

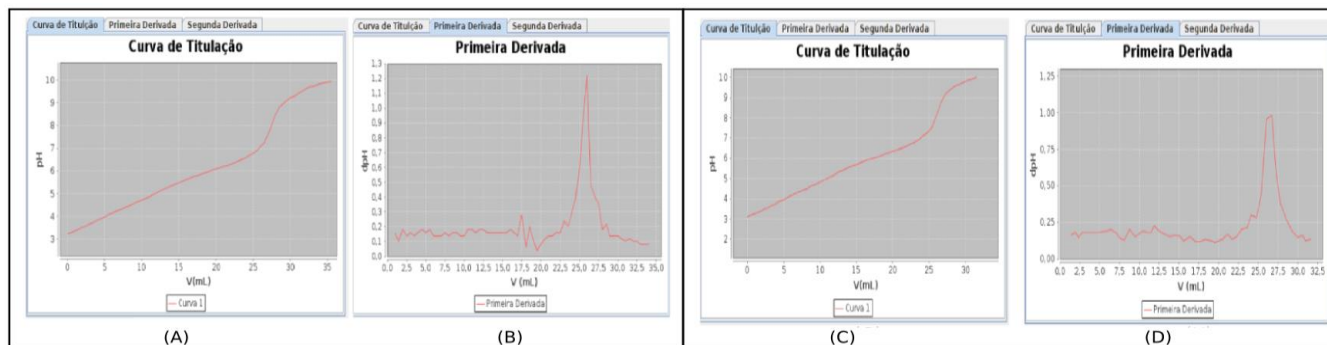
Figura 3 - Aparato para titulações potenciométricas.



RESULTADOS E DISCUSSÃO

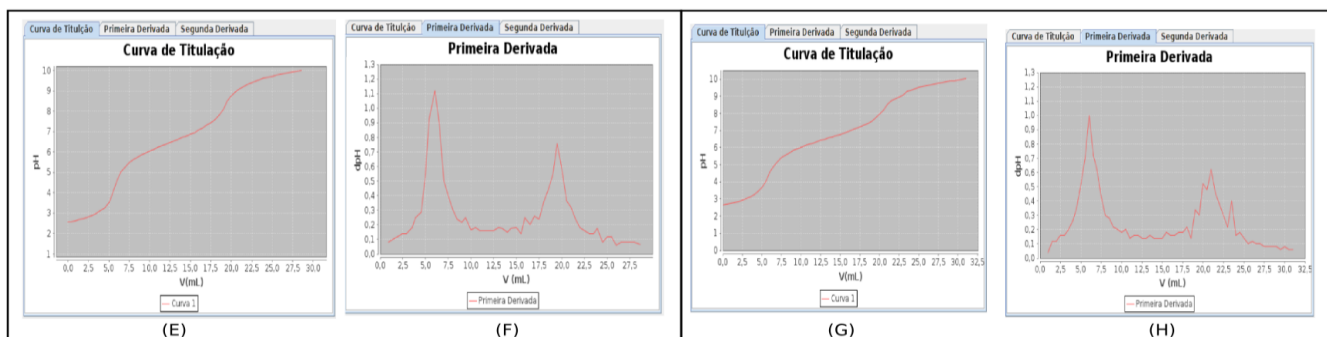
Os resultados dos gráficos produzidos pelos dados dos alunos utilizando o programa estão dispostos nas Figuras 4 e 5:

Figura 4 - Gráficos gerados pelos dados das Bancadas I (A e B) e II (C e D).



As curvas de titulação produzida pelo programa para o ácido cítrico estão mostradas em (A) e (C). Já os volumes da primeira derivada, gráficos (A) e (D), encontrado pela bancada I e II foram de 26,00 mL de NaOH 0,1 mol/L.

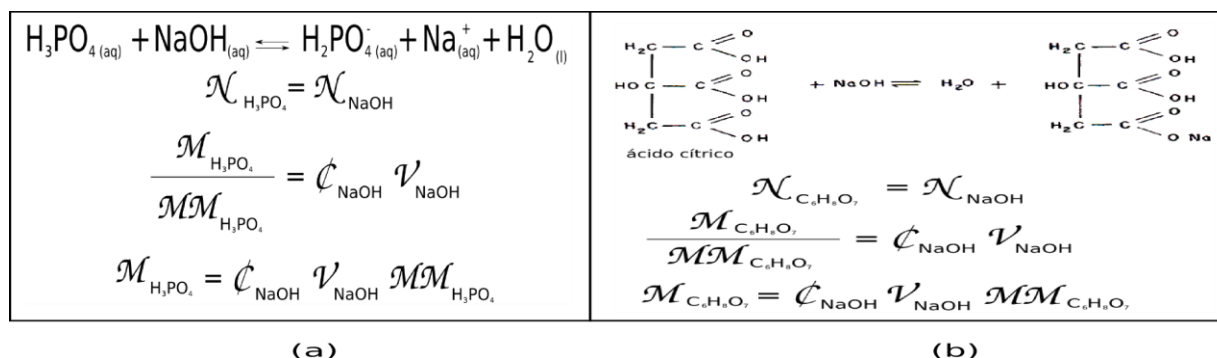
Figura 5 - Gráficos gerados pelos dados das Bancadas Capela (E e F) e Geladeira (G e H).



As curvas de titulação produzida pelo programa para o ácido fosfórico estão mostradas em (E) e (G). Já os volumes da primeira derivada, gráficos (F) e (H), encontrado pela bancada Capela e Geladeira foram de 6,00 mL de NaOH 0,1 mol/L.

Esses volumes foram utilizados para calcular os teores de ácido fosfórico e cítrico das amostras de refrigerantes de cola e guaraná respectivamente. Para determinar da quantidade de ácido nos refrigerantes consideraram-se as seguintes representações mostradas pela Figura 6, em que (a) são a reação e as equações estequiométricas para o ácido fosfórico, (b) são a reação e as equações estequiométricas para o ácido cítrico:

Figura 6 - Reações dos ácidos das amostras com NaOH 0,1 mol L⁻¹ e equações estequiométricas.



Em (a) $N_{\text{H}_3\text{PO}_4}$ é o número de mols do ácido fosfórico, N_{NaOH} é o número de mols hidróxido de sódio, $M_{\text{H}_3\text{PO}_4}$ é a massa do ácido fosfórico que se deseja encontrar, $MM_{\text{H}_3\text{PO}_4}$ é a massa molar do ácido fosfórico, ζ_{NaOH} é a concentração de hidróxido de sódio e V_{NaOH} o volume gasto na bureta para se chegar ao máximo da 1ª derivada. Já em (b), $N_{\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7}$ é o número de mols do ácido cítrico, $M_{\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7}$ é a massa do ácido cítrico que se deseja encontrar, $MM_{\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7}$ é a massa molar do ácido cítrico. Com os volumes obtidos na primeira derivada, Massa Molar dos ácidos (fosfórico = 98,00 g mol⁻¹ e cítrico = 192,12 g mol⁻¹) e a contração de NaOH foi possível determinar o teor da amostra. A Tabela 1 mostra os resultados obtidos na determinação dos teores por bancada:

Tabela 1 - Teor de Ácido Fosfórico e Cítrico em amostras de refrigerantes de cola e guaraná respectivamente.

BANCADA	AMOSTRA	Volume da Primeira Derivada (L)	% (m/v) de ácido na amostra
I	Guaraná	0,026	0,46
II	Guaraná	0,026	0,46
GELADEIRA	Ice-Cola	0,006	0,06
CAPELA	Coca-Cola	0,006	0,06

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O Quadro 1 comparativo mostra os pontos positivos e negativos de se utilizar aplicação em relação à utilizar caneta e papel:



ISBN - 978-85-8263-068-6

Quadro 1 - Prós e contras da utilização do software .

TAREFA	APLICATIVO	MANUAL
AQUISIÇÃO DE DADOS	✓ VOLUME	✗ pH E VOLUME
RETRABALHO	✓ NÃO	✗ SIM
CALCULA PRIMEIRA DERIVADA	✓ SIM	✗ NÃO
GERA RELATÓRIOS NA AULA	✓ SIM	✗ NÃO
DETERMINA TEOR DO ANLITO NA AMOSTRA NA AULA	✓ SIM	✗ NÃO
CAPACITAÇÃO EM ALGUM OFFICE	✓ NÃO	✗ SIM
NECESSIDADE DE APRENDER A TRABALHAR COM O APLICATIVO	✗ SIM	✓ NÃO
NECESSIDADE DE PLATAFORMA	✗ SIM	✓ NÃO
CABOS RS-232	✗ SIM	✓ NÃO

O quadro acima sugere que existem mais vantagens (6) à que desvantagens (3) e de fato facilidades de adquirir dados, ausência de retrabalho e cálculos efetuados pela aplicação podem ser determinantes na escolha de um analista ao se proceder com uma titulação potenciométrica. Porém, a dependência de computadores (plataformas) e Cabos RS-232 pode incapacitar a utilização do software.

Programa foi desenvolvido, foi testado e aplicado com os alunos e se manteve estável, não gerando travamentos durante a execução e aquisição de dados. Por não terem o trabalho de digitalizarem os dados em outro software, no Excel se tivessem feito o experimento utilizando caneta e papel para anotar os dos por exemplo, a determinação dos teores dos ácidos foi feita no laboratório, poupando o tempo de trabalho extraclasse.

Por fim, os teores de ácido fosfórico (0,06%) e cítrico (0,46%) se mantiveram dentro dos padrões propostos pelo Ministério da Agricultura.

REFERÊNCIAS

- BACCAN, N. et al. **Química Analítica Quantitativa Elementar**. 1. ed. Campinas: Unicamp, 2001. 250 p.
- CAELUM. FJ-11 *Java e Orientação a Objetos*. São Paulo, 2004. 251 p.
- CESTA, A. A. **Tutorial: “A linguagem de Programação Java e Orientação a Objetos”**. Campinas, 1996. 131p.
- JARGAS, A. M. **Expressões Regular: uma abordagem divertida**. 3. ed. São Paulo: Novatec Editora Ltda, 2009. 207 p.
- MINISTÉRIO DA AGRICULTURA. **Normas de padrões de identidade e qualidade para bebidas**. Brasília, 2010.



ISBN - 978-85-8263-068-6

ORACLE. **Por que Java?** San Mateo, CA: Oracle, 2011. Disponível em:

<<http://www.oracle.com/br/technologies/java/overview/index.html>>. Acesso em: 01 Jan. 2015.

_____. **Using Regular Expressions with Oracle Database: Overview.** San Mateo, CA:

Oracle, 2015. Disponível em:

<http://docs.oracle.com/cd/B19306_01/appdev.102/b14251/adfn_regexp.htm>. Acesso em: 15 de Março de 2015.

SKOOG, D. A. et al. **Fundamentos de Química Analítica.** 9. ed. São Paulo: Cengage

Learning, 2014. 950 p. ISBN 978-85-221-1660-7.

VOGEL, A. I. **Química Analítica Quanti.** 5. ed. Londres: E. Mestre Jou, 1981. 665 p.

ISBN 9788587068019.