

**UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE QUÍMICA
CENTRO DE EQUILIBRIOS EN SOLUCIÓN**



**ESTUDIO DE LOS COMPLEJOS DE VANADIO (V) Y EL ACIDO ASPÁRTICO POR
MEDIO DE MEDIDAS DE FUERZAS ELECTROMOTRICES (25 °C, KCl 3.0 M)**

Trabajo Especial de Grado
presentado ante la ilustre
Universidad Central de Venezuela
por el Br. Manuel Antonio Peña, para
optar al título de Licenciado en Química

Caracas, Abril 2009

Drs. Mary Lorena Araujo Freschi y Felipe Brito Rodríguez, Profesores e Investigadores Titulares del Centro de Equilibrio en Solución (CES) de la Universidad Central de Venezuela (UCV).

CERTIFICAMOS: Que el presente Trabajo Especial de Grado, titulado:

ESTUDIO DE LOS COMPLEJOS DE VANADIO (V) Y EL ACIDO ASPÁRTICO POR MEDIO DE MEDIDAS DE FUERZAS ELECTROMOTRICES (25 °C, KCl 3.0 M)

que presenta el Br. **Manuel Peña**, para aspirar al Título de Licenciado en Química, ha sido realizado en los laboratorios del CES bajo nuestra dirección durante el año 2008-2009 y con esta fecha autorizamos su presentación.

Caracas, Abril 2009

Dra. Mary Lorena Araujo Freschi (Tutor)

Dr. Felipe Brito Rodríguez (Tutor)

Los abajo firmantes designados por la Universidad Central de Venezuela, como integrantes del jurado examinador del Seminario de Investigación titulado

ESTUDIO DE LOS COMPLEJOS DE VANADIO (V) Y EL ACIDO ASPÁRTICO POR MEDIO DE MEDIDAS DE FUERZAS ELECTROMOTRICES (25 °C, KCl 3.0 M)

Presentado por la Br. Manuel Antonio Peña Zapata, C.I. 14.518.890, certificamos que este trabajo cumple con los requisitos exigidos por el Reglamento vigente de Trabajo Especial de Grado de la Escuela de Química.

Dra. Mary Lorena Araujo

(Tutor)

Dr. Felipe Brito

(Tutor)

Vito Lubes

(Jurado)

Manuel Caetano

(Jurado)

AGRADECIMIENTOS

A Dios por darme fortaleza, sabiduría y las herramientas necesarias para poder seguir adelante cada día, y no permitir que la apatía, la flojera y el pesimismo me vencieran en estos 8 años.

A mi familia por brindarme su apoyo desde lejos y su amor incondicional, por darme alientos cuando lo necesite y por confiar en mi persona y como hijo.

A la Dra. Lorena Araujo y al Prof. José Daniel Martínez y por ende al Ces; por darme La oportunidad de desarrollar mi TEG en sus instalaciones, por brindarme el apoyo y las herramientas necesarias, tanto físicas como intelectuales, para poder cumplir con este proyecto; y también por haberme brindado su amistad incondicional.

A mis padres, mis hermanos y a mi novia Ana Gabriela que tanto me apoyo y me ayudó en este largo trabajo.

A mis amigas María Alejandra Camero, Fabiola Gil, y Janeth Mendoza por brindarme su apoyo y su amistad en los últimos semestres de la carrera. A Karla Carbonell, Mary Carmen Bullón por haberme soportado en el laboratorio sin ellas no hubiera podido seguir adelante.

Finalmente, a la Ilustre Universidad Central de Venezuela por abrirme las puertas de sus aulas, por darme luz y sabiduría, por permitirme vencer las sombras de la ignorancia, por haberme permitido convertirme en el profesional que soy ahora y darme las guías y herramientas necesarias para forjar mi futuro y el de este país. Gracias a la casa que vence las sombras por otorgarme mi título de Licenciado en Química.

RESUMEN

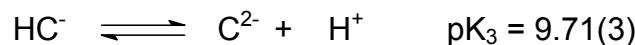
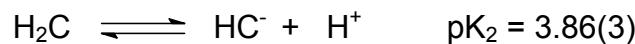
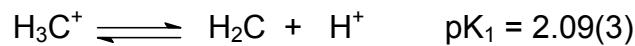
En el presente trabajo se estudiaron los sistemas:



por medio de medidas de fuerzas electromotrices, $\text{emf}(H)$, a 25°C y en KCl 3.0 M como medio iónico inerte.

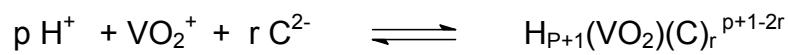
El análisis de los datos experimentales se realizó por medio del programa de mínimos cuadrados generalizados LETAGROP, obteniéndose los siguientes valores de pK_{ai} para el ácido aspártico y las constantes de estabilidad de los complejos de V(V) – ácido aspártico β_{pqr} , según las siguientes reacciones:

- **Sistema $\text{H}^+ - \text{ácido aspártico}$**



$$s(\theta_c) = 0.06_3$$

- Sistema $\text{H}^+ - \text{VO}_2^+$ - ácido aspártico



Species	Log β_{pqr}				
$[\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}]^+$	17.40(9)	17.2(2)	17.1(2)	17.0(2)	17.2(2)
$[\text{HVO}_2\text{C}]$	15.40(9)	15.5(1)	15.4(1)	15.3(2)	15.45(8)
$[\text{VO}_2\text{C}]^-$	12.78(6)	12.8(1)	12.8(1)	12.77(9)	12.78(7)
$s(\theta_c)$	0.03 ₇				
$s(\theta_B)$		0.207			
$s(\theta_{Bf})$			0.199		
$s(\theta_{cf})$				0.193	
$s(E)$					2.8 mV

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Generalidades del vanadio	2
1.2 Química del vanadio (V).....	5
1.3. Química de los aminoácidos	7
1.3.1 Sistema H^+ - ácido aspártico (H_2C).....	11
1.3.2. Complejos de V(V) – ácido aspártico.....	14
2. OBJETIVOS	15
3. FUNDAMENTO TEÓRICO.....	17
3.1. Ley de acción de masas	18
3.2. Escala de actividades	18
3.3. Niveles de referencia	20
3.3.1. Sistema H^+ - ácido aspártico (H_2C).....	20
3.3.2. Sistema H^+ - V(V) – ácido aspártico	20
3.4. Tratamiento de los datos	21
4. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL	23
4.1. Reactivos y disoluciones	24
4.2. Medidas de emf(H).....	25
4.3. Instrumentos de medida.....	26
4.4. Procedimiento de medida	27
5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	28
5.1. Determinación de los parámetros de E_0 y J	29
5.2. Sistema H^+ - ácido Aspartico	31

5.3 Sistema H ⁺ - V(V) – ácido aspártico.....	35
6. MODELIZACIÓN MOLECULAR	41
7. CONCLUSIONES.....	55
8. RECOMENDACIONES	57
9. BIBLIOGRAFIA	59
10. APÉNDICE.....	63

SÍMBOLOS

H, B, C	Concentraciones totales (analíticas) de H ⁺ , vanadio(V), ácido aspártico (H ₂ C)
<i>h, b, c</i>	Concentraciones en equilibrio de H ⁺ , VO ₂ ⁺ , C ²⁻
β_{pqr}	Constante de estabilidad de un complejo H _p (VO ₂) _q C _r ^{p+q-r} , brevemente (p,q,r)
c_{pqr}	Concentración en equilibrio de un complejo (p, q, r)
<i>Emf(H)</i>	Medidas de fuerzas electromotrices (EV), pila REF // S / EV
E	Potencial (mV) , pila REF // S / EV
E _o	Potencial <i>estándar</i> (mV), pila REF // S / EV
EV	Electrodo de vidrio, pila REF // S / EV
{H}	Disolución <i>madre</i> de ácido fuerte (K, H)Cl 3.0 M
{mi}	Medio iónico KCl 3.0 M
{OH}	Disolución <i>madre</i> de base fuerte K(Cl,OH) 3.0 M
{V}	Disolución <i>madre</i> de vanadio(V)
J	Parámetro relacionado con el potencial de difusión en la unión líquida //, pila REF // S / EV
M	Moles / L
mM	Milimoles / L
ns	n° de experimentos
np	n° de puntos en un experimento
nk	n° de complejos
<i>pH</i>	-log <i>h</i>

REF	Semipila de referencia, pila REF // S / EV
S	Disolución problema en el reactor, pila REF // S / EV
T	Disolución <i>titulante</i>
U	Suma de mínimos cuadrados
θ_B	Nº medio de H ⁺ asociados / mol de V(V)
θ_C	Nº medio de H ⁺ asociados / mol de ácido aspártico.
ζ	Carga por átomo de vanadio

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Generalidades del vanadio

El vanadio es el elemento químico número 23, situado en el grupo 5 de la tabla periódica. El vanadio no se encuentra en estado nativo, sino está presente en unos 65 minerales diferentes entre los que destacan: la patronita, VS_4 ; la vanadita $Pb_5(VO_4)_3Cl$ y la carnotita, $K_2(UO_2)_2(VO_4)_2 \cdot 3H_2O$, **figura 1**. También se encuentran en la bauxita, así como en minas de carbón, crudos pesados y alquitrán. Es un metal dúctil y blando que se emplea en algunas aleaciones.¹



Figura 1. Minerales del vanadio: a) Vanadinita; b) Carnotita y c) Patronita.¹

El vanadio fue descubierto en 1801 por el mineralogista español Andrés Manuel del Río en un mineral de plomo mexicano. Primero lo denominó *pancromo* por el color de sus sales que eran parecidos a las del cromo y luego *eritronio* debido al color de éstas pues se volvían rojas al calentarse. Sin embargo, el químico francés H. Collet-Descotils cuestionó este descubrimiento diciendo que realmente se trataba de cromo impuro, lo que provocó que Andrés Manuel del Río se retractara de su descubrimiento. En 1830 el químico sueco N. Sefstrom lo redescubrió en un óxido que encontró mientras trabajaba en unas menas de hierro y le dio el nombre con el que hoy se

conoce, en honor a la diosa de la mitología escandinava Vanadis. Pero en 1831, F. Wöhler concluyó que se trataba del mismo elemento descubierto en 1801 por Andrés Manuel del Río. El metal no se preparó hasta el año de 1867 por H. Roscoe mediante la reducción de VCl_3 con hidrógeno.¹

Este metal de transición presenta una alta resistencia a las bases, al H_2SO_4 y al HCl.

Puede obtenerse de la recuperación de V_2O_5 a partir de cenizas procedentes de procesos de combustión de crudos pesados. Tiene algunas aplicaciones nucleares y es un elemento esencial en algunos seres vivos.

Aproximadamente, el 80% del vanadio producido se emplea como ferro-vanadio o como aditivo en aceros, especialmente en aceros inoxidables usados en instrumentos quirúrgicos y herramientas; en aceros resistentes a la corrosión y mezclado con aluminio en aleaciones de titanio empleadas en motores de reacción; en aceros empleados en ejes de ruedas y cigüeñas, así como engranajes y otros componentes críticos. Se emplea además en algunos componentes de reactores nucleares y forma parte de algunos imanes superconductores.

Algunos compuestos de vanadio, por ejemplo V_2O_5 , se utilizan como catalizadores en la producción de anhídrido maléico y H_2SO_4 .^{1,2}

El vanadio presenta variados estados de oxidación, siendo los más comunes en disolución +2, +3, +4 y +5.³

El vanadio es un elemento esencial en algunos organismos. En los seres humanos no está demostrada su esencialidad, aunque existen compuestos de vanadio que imitan y potencian la actividad de la *insulina*. Se encuentra en algunas enzimas en distintos seres vivos. Por ejemplo en las *haloperoxidases* de algunas algas, que reducen los peróxidos y a la vez halogenan sustratos orgánicos. Las *ascidias* (unos organismos marinos de la familia de los *tunicados*) almacenan altas concentraciones de vanadio, alrededor de un millón de veces más altas que en el agua que les rodea, encontrándose en una molécula llamada *hemovanadina*. En estos organismos el vanadio se almacena en unas células llamadas *vanadocitos*. También acumula altas concentraciones de vanadio el hongo *amanita muscaria*; se forma un complejo con un ligando ionóforo llamado *amavadin*.²

En la naturaleza predomina el isotopo estable ^{51}V . Se han caracterizado quince radioisótopos, siendo los más estables el ^{50}V , con una vida media de $1,4 \times 10^{17}$ años; el ^{49}V , de 330 días y el ^{48}V , de 15,9735 días. El resto tienen vidas medias de menos de una hora, siendo la mayoría de menos de diez segundos.²

El vanadio presenta una química muy variada en todos sus estados de oxidación, **tabla 1**, cada uno de los cuales exhibe características y propiedades diferentes.^{3,4}

Tabla 1. Características generales del vanadio en disolución acuosa.³

Valencia	Coloración	Condiciones	Especies
+2	Violeta	pH < 2	V^{2+} , VOH^+
+3	Azul-verdoso(*)	pH < 2.5	$\text{V}_2(\text{OH})_3^{3+}$ (*)
	Marrón		VOH^{2+} , $\text{V}_2(\text{OH})_2^{4+}$, V^{3+}
+4	Azul marino	pH < 3	VO^{2+} , VOOH^+ , $\text{VO}_2(\text{OH})_2^{2+}$
	Gris	4 < pH < 10	$\text{VO}(\text{OH})_2(\text{s})$
	Marrón		$\text{V}_8\text{O}_{42}^{12-}$
+5	Amarillo claro	1 < pH < 4	VO_2^+
	Azul verdoso		VO_2OH
	Anaranjada	5 < pH < 7	$\text{H}_n\text{V}_{10}\text{O}_{28}^{n-6}$; (n = 3-0)
	Incolora	8 < pH < 10	VO_3^- , $\text{V}_2\text{O}_6^{2-}$, $\text{HV}_4\text{O}_{13}^{5-}$, $\text{HV}_2\text{O}_7^{3-}$ $\text{V}_4\text{O}_{13}^{6-}$, HVO_4^{2-} , $\text{V}_2\text{O}_7^{2-}$
		10 < pH < 14	HVO_4^{2-} , $\text{V}_2\text{O}_7^{4-}$ VO_4^{3-}

1.2 Química del vanadio (V)

Las disoluciones de vanadio(V) generalmente se preparan disolviendo V_2O_5 en medio ácido o alcalino, pues este óxido es poco soluble en agua. En disoluciones muy diluidas ligeramente ácidas predominan el catión $\text{VO}_2(\text{H}_5\text{O})_4^+$, brevemente VO_2^+ ($\text{pK}_a = 3.30$, NaClO_4 0.5 M), la molécula neutra HVO_3 ($\text{pK}_a = 7.00$, NaClO_4 0.5 M)⁵ y el ion metavanadato VO_3^- ($\text{pK}_a = 7.7$, NaCl 0.5 M).^{5,6}

Sin embargo, en disoluciones más concentradas, figura 2,^{7,8} donde se representa la carga por átomo de vanadio, ζ , en función del pH para distintas concentraciones totales de metal **B**, se observan tres regiones bien diferenciadas, dos de equilibrios rápidos en medio ácido y alcalino respectivamente, separadas por una tercera de equilibrios lentos entre $0,6 < \zeta < 1,0$, que se denomina *región de inestabilidad*.⁶⁻⁹ Se forman una serie de *decavanadatos* $H_nV_{10}O_{28}^{n-6}$ ($n = 0 - 3$) de color anaranjado intenso y en medio alcalino otros vanadatos de diferente nuclearidad, dependiendo del pH y **B**.^{10,11}

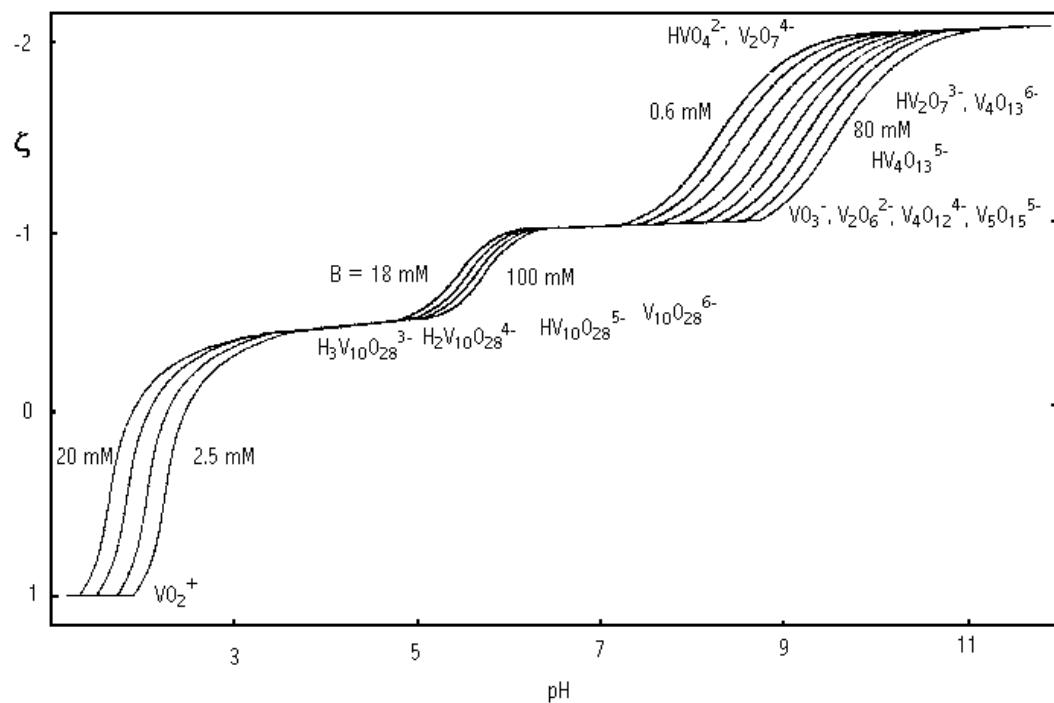


Figura 2. Carga por átomo de vanadio, ζ , en función del pH y la concentración total de V (V).¹¹

Por desplazamiento de moléculas de agua el ion VO_2^+ forma complejos con diferentes tipos de ligandos y geometrías como las mostradas en la **figura 3**, por ejemplo, $\text{VO}_2(\text{EDTA})^{3-}$, $\text{VO}_2(\text{ox})_2^{3-}$, $\text{VO}_2(\text{NTA})_2^{3-}$ etc.¹

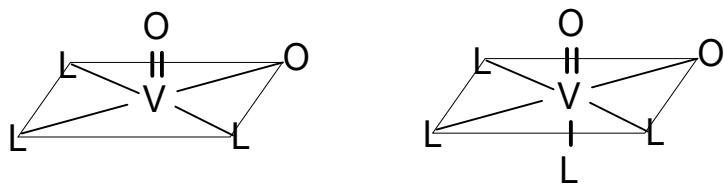


Figura 3. Geometrías del ion vanadilo(V).¹

1.3. Química de los aminoácidos

Los aminoácidos son las unidades estructurales básicas de las proteínas. Un aminoácido consta de un grupo amino ($-\text{NH}_2$), un grupo carboxilo ($-\text{COOH}$), un átomo de hidrógeno y un grupo distintivo R (cadena lateral), enlazados a un mismo átomo de carbono denominado carbono α , **figura 4**.

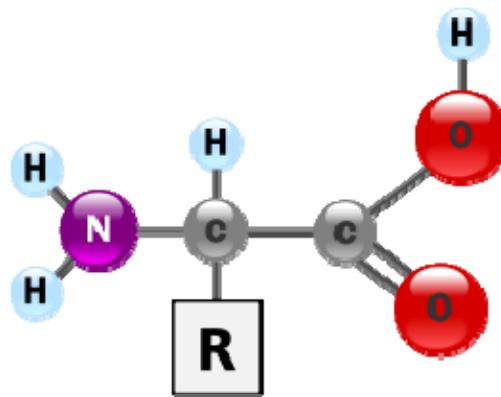
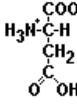
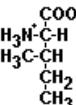
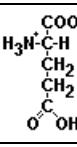
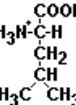
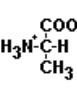
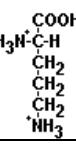
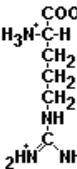
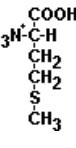
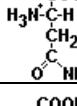
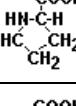
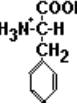
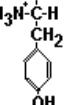
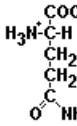
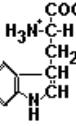
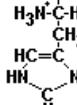
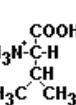


Figura 4. Estructura general de los aminoácidos.

Los aminoácidos son moléculas anfóteras, es decir, pueden actuar como ácido o como base. Los aminoácidos poseen varias funciones biológicas importantes, además de su función primaria como componentes de las proteínas. Para comodidad, los aminoácidos se dividen en cuatro clases con base en la polaridad y la acidez de los grupos presentes en las cadenas laterales: hidrofóbicos, hidrofílicos, ácidos y básicos. En la **tabla 2** se muestran los 20 aminoácidos que se encuentran comúnmente en las proteínas de los seres vivos.^{12, 13}

Tabla 2. Estructura y simbología de los α -aminoácidos

Aminoácido	Símbolo	Estructura	Aminoácido	Símbolo	Estructura
Ácido Aspártico	Asp		Isoleucina*	Ile	
<u>Ácido Glutámico</u>	Glu		Leucina*	Leu	
Alanina	Ala		Lisina*	Lys	
Arginina*	Arg		Metionina*	Met	
Asparagina	Asn		Prolina	Pro	
Cisteína	Cys		Serina	Ser	
Fenilalanina*	Phe		Tirosina	Tyr	
Glicina	Gly		Treonina*	Thr	
Glutamina	Gln		Triptófano*	Trp	
Histidina*	His		Valina*	Val	

*Aminoácido esencial

Los aminoácidos son compuestos sólidos, incoloros, cristalizables, de elevado punto de fusión (habitualmente por encima de los 200 °C), solubles en agua, con actividad óptica y con un comportamiento anfótero.

La actividad óptica se manifiesta por la capacidad de desviar el plano de luz polarizada que atraviesa una disolución de aminoácidos, y es debida a la asimetría del carbono α ya que se halla unido, excepto en la glicina, a cuatro radicales diferentes. Esta propiedad hace clasificar a los aminoácidos en dextrógiros (+) si desvían el plano de luz polarizada hacia la derecha, y levógiro (-) si lo desvían hacia la izquierda.

El comportamiento anfótero se refiere a que, en disolución acuosa, los aminoácidos son capaces de ionizarse, dependiendo del pH, como un ácido (cuando el pH es básico), como una base (cuando el pH es ácido) o como un ácido y una base a la vez (cuando el pH es neutro). En este caso adoptan un estado dipolar iónico conocido como zwitterion, **figura 5**.

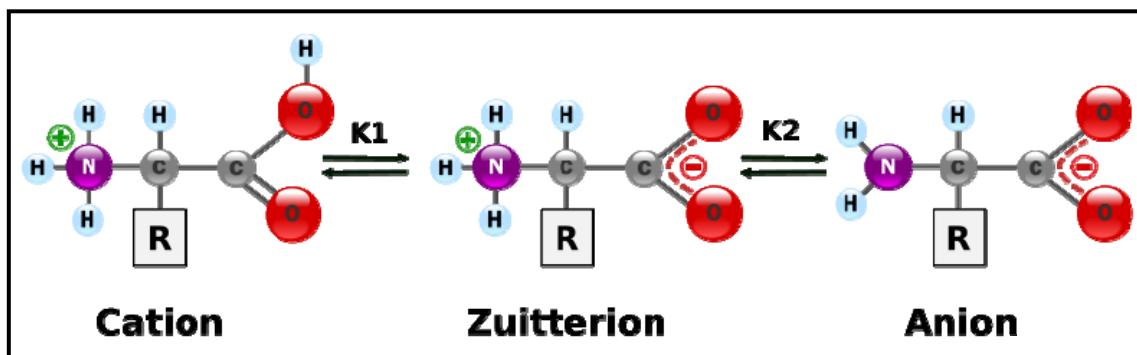


Figura 5. Esquema del equilibrio de un aminoácido.¹³

1.3.1 Sistema H⁺ - ácido aspártico (H₂C)

El ácido aspártico (H₂C) es el aminoácido quiral (s) ácido-2-aminobutanoico, HO₂CCH(NH₂)CH₂CO₂H, uno de los 20 aminoácidos con los que las células forman las proteínas, **figura 6**. Presenta dos grupos carboxilos (-COOH) y un grupo amino (-NH₃⁺).

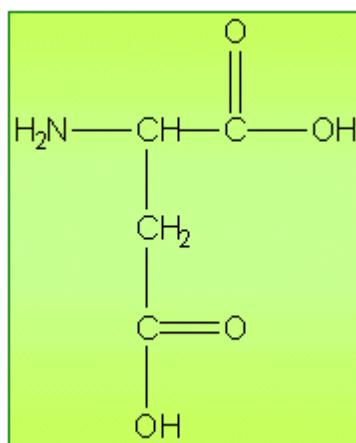


Figura 6. Estructura del ácido aspártico.¹³

Existen en los aminoácidos una categoría de comportamiento en cuanto a esenciales y no esenciales. Los esenciales en los seres vivos son la isoleucina, la leucina, la treonina, la valina, la metionina la fenilalanina y el triptófano.

Estos compuestos han de ser suministrados necesariamente en la dieta, ya que el organismo no puede sintetizarlos. Los restantes llamados no esenciales, (ácido aspártico) se forman en el cuerpo del individuo y no requieren de un aporte externo, por lo que su interés dietético es menor.

La unión de los aminoácidos se verifican por el denominado enlace peptídico, establecido entre el grupo -CO del radical ácido de un aminoácido y el grupo -NH del

radical amino de otro distinto. Este enlace es resistente pero puede sufrir fraccionamiento en medio acuoso, reacción que se denomina hidrólisis. La unión de dos aminoácidos forma lo que se llama un dipéptido. Si son tres se le llama tripéptido y así sucesivamente.

El ácido aspártico es fundamental para la formación de numerosas enzimas, la sangre y el sistema digestivo. Facilita el trabajo del hígado actuando como reforzador de la función hepática en la creación de otros aminoácidos no esenciales destinados a cubrir las necesidades del cuerpo para la regeneración de tejidos; colabora en su desintoxicación y se combina con otros aminoácidos formando moléculas capaces de absorber toxinas de la corriente sanguínea, mostrándose además beneficioso para problemas con hepatitis crónica. El ácido aspártico juega su papel en el ciclo de energía del organismo, es un valioso suplemento para aumentar la resistencia a la fatiga. Pues proporciona energía convirtiéndose en glucosa.

Otra función importante es como neurotransmisor cerebral, estando involucrando en procesos tan diversos como la epilepsia, las lesiones cerebrales *isquémicas* y el aprendizaje influyendo en el desarrollo de las conexiones sinápticas normales del cerebro, lo que le llevaría a jugar un papel importante en las grandes degeneraciones neurológicas como el *Alzheimer*.¹³

Existe una extensa bibliografía acerca de la determinación de las constantes de acidez del ácido aspártico, en diferentes medios iónicos y temperaturas, la **tabla 3** reúne un conjunto de de valores de pK_a , obtenidos en medios iónicos contenido KCl y a diferentes temperaturas, **tabla 3**.

Tabla 2. Valores de pK_a reportados en la bibliografía.

Medio iónico / temperatura	pK _{a1} $\text{H}_3\text{C}^+ - \text{H}_2\text{C}$	pK _{a2} $\text{H}_2\text{C} - \text{HC}^-$	pK _{a3} $\text{HC}^- - \text{C}^{2-}$	Ref.
0.1 M / 20 °C	1.88		9.60	14
0.10 M / 25 °C			9.78	15
0.10 M / 25 °C			9.78	16
0.10 M / 25 °C			9.87	17
0.10 M / 25 °C	1.94		9.62	18
0.10 M / 30 °C			9.63	19
0.10 M / 30 °C			9.63	20
0.10 M / 30 °C			9.46	21
0.20M / 25 °C	1.94		9.62	22
0.20M / 25 °C	1.95		9.63	23
0.20 M / 20 °C	2.01		9.78	24
1.0 M/ 20°C			9.56	25
3.0 M / 25 °C	2.28	4.99	10.01	26a
3.0 M / 25 °C	2.17	3.90	9.90	26b

Se observa que los valores de pK_a, son muy similares entre sí a pesar de haberse empleado diferentes escalas de actividades y temperaturas. Se ve además que solamente hay dos referencias,^{26a y 26b} donde se reporta el pK_{a2} para este ligando, con ordenes de magnitud diferentes, atribuido posiblemente a la naturaleza del ligando y a los errores experimentales indeterminados.

1.3.2. Complejos de V(V) – ácido aspártico

Después de una revisión bibliográfica, no se halló ninguna información sobre los complejos de vanadio(V) y el ácido aspártico, lo que motivó la realización de este Trabajo Especial de Grado para completar sendas investigaciones previas sobre los complejos de V(III) y V(IV) con este ligando, llevadas a cabo en el CES, en las mismas condiciones experimentales (KCl 3.0 M, 25 °C), **tabla 4**.

Tabla 4. Complejos y constantes de estabilidad β_{pqr} de los sistemas $H^+ - V^{3+}$ - ácido aspártico ^{26a} y $H^+ - VO^{2+}$ - ácido aspártico ^{26b} (KCl 3.0 M, 25 °C).

Log β_{pqr}			
V(III)		V(IV)	
$[HVC]^{2+}$	19.75(2)	$[H_2VOC]^{2+}$	13.7(3)
$[VC]^+$	16.14(5)	$[HVOC]^+$	12.4(4)
OHVC	15.34(4)	VOC	8.43(4)
$[(OH)_2VC]^-$	6.58(7)	H_2VOC_2	24.12(7)
$[H_2VC_2]^+$	32.78(6)	$[HVOC_2]^-$	17.8(<19.1)
HVC_2	29.17(8)	$[VOC_2]^{2-}$	11.5(< 12.4)
$[VC_2]^-$	24.85(6)		
Ref.	26a	Ref.	26b

Se observa que en ambos sistemas los complejos son fuertes, sus constantes de estabilidad son relativamente altas, en comparación a complejos formados con éstos estados de oxidación y otros aminoácidos más simples, como la α -alanina, β -alanina, serina, treonina etc.²⁷

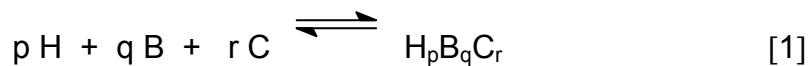
2. OBJETIVOS

En el presente trabajo se realizó el estudio de los sistemas H^+ - ácido aspártico y H^+ - V(V) - ácido aspártico por medio de medidas de fuerzas electromotrices, $\text{emf}(\text{H})$, a 25 °C, utilizando como medio iónico KCl 3.0 M, como parte de un proyecto que se está llevando a cabo en el CES, sobre la formación de complejos entre el V(III), V(IV), V(V) y valencia mixta con distintos aminoácidos.

3. FUNDAMENTO TEÓRICO

3.1. Ley de acción de masas

En una disolución acuosa la interacción de varios reactivos H, B y C para formar uno o varios complejos $H_pB_qC_r$, brevemente (p, q, r), según el esquema general de reacciones [1], se cuantifica en el equilibrio para cada uno de ellos por la Ley de



acción de masas (LAM) [2], donde h , b y c son las concentraciones en equilibrio de

$$c_{pqr} = \phi_{pqr} \beta_{pqr} h^p b^q c^r \quad [2]$$

los reactivos H, B y C y c_{pqr} , β_{pqr} y ϕ_{pqr} representan respectivamente la concentración, la constante de equilibrio del complejo y el producto de los coeficientes de actividad de las especies involucradas (p,q,r). ²⁸

3.2. Escala de actividades

Desde los años cincuenta se ha impuesto el uso del método del medio iónico en el estudio de equilibrios de disolución, es decir, en lugar de usar agua como disolvente, utilizar una disolución concentrada de una sal inerte, como KCl 3.0 M y mantener la concentración de las especies reaccionantes, por ejemplo, H^+ , VO_2^+ , H_2C y productos (p, q, r) mucho más baja que la de los iones del medio, es decir, K^+ y Cl^- ; entonces es

possible emplear concentraciones en lugar de actividades en expresiones termodinámicas como la ley de acción de masas, la ecuación de Nernst, etc.²⁹

Aunque parezca incorrecto, esto es tan valido como lo tradicional, ya que la única diferencia radica en que se está utilizando una escala de actividades diferente. Similarmente al caso clásico del agua como disolvente, la escala de actividades del medio iónico se define considerando que los coeficientes de actividad se acercan a la unidad, conforme la composición de la disolución se acerca a la del medio iónico en cuestión.³⁰

Además, se ha demostrado experimentalmente que los coeficientes de actividad permanecen constantes e iguales a la unidad, dentro de los errores experimentales, siempre que las concentraciones de los reactivos y productos se mantengan a un nivel inferior a un 20 % de la concentración de los iones del medio.³⁰

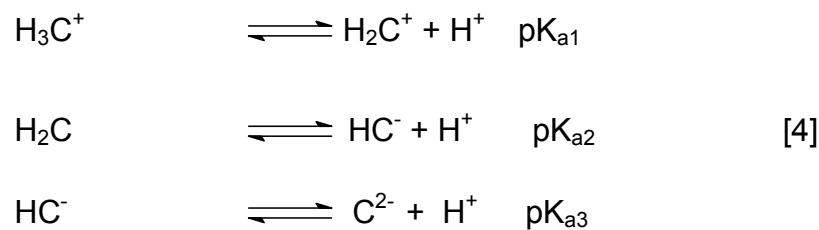
En consecuencia, en la LAM [2] se tiene que $\phi_{pqr} = 1$ y análogamente al caso del agua como disolvente, las constantes de equilibrio β_{pqr} pueden considerarse como constantes termodinámicas en el medio iónico elegido, por ejemplo, KCl 3.0 M y por tanto, la concentración en equilibrio de un determinado complejo (p, q, r) viene dada por la expresión [3].²⁸

$$c_{pqr} = \beta_{pqr} h^p b^q c^r \quad [3]$$

3.3. Niveles de referencia

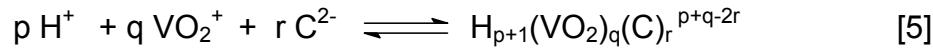
3.3.1. Sistema H^+ - ácido aspártico (H_2C)

Para determinar las constantes de acidez del ácido aspártico se empleará el esquema de reacciones [4].



3.3.2. Sistema H^+ - V(V) – ácido aspártico

En el caso de las constantes de formación de los complejos β_{pqr} del sistema $\text{H}^+ - \text{VO}_2^+ -$ ácido aspártico, se empleará la reacción general [5].



3.4. Tratamiento de los datos

Los datos experimentales $[H, B, C, E_o, J, (v, E)_{np}]_{ns}$ ($ns = n^o$ de experimentos, $np = n^o$ de puntos en cada experimento) fueron tratados utilizando el programa de mínimos cuadrados generalizados LETAGROP.³¹ Los experimentos fueron realizados en dos etapas.

En la *etapa 1* se minimizó la función [6] para obtener valores definitivos de E_o y J de la pila [8].

$$U_1 = \sum (h - H)^2 \quad [6]$$

Los datos de la etapa 2 se analizaron minimizando las funciones [7] - [9], donde

$$U_3 = \sum (\theta_B - \theta_B^*)^2 \quad [7]$$

$$U_2 = \sum (\theta_C - \theta_C^*)^2 \quad [8]$$

$$U_3 = \sum (E - E^*)^2 \quad [9]$$

θ_B y θ_C representan el n^o medio de iones H^+ asociados por mol de metal y ligando, respectivamente.

Los datos también fueron analizados con el programa LETAGROP/FONDO.³² Este tipo de análisis consiste en separar las contribuciones de reacciones conocidas que ocurren en el sistema y que consumen o liberan protones, por ejemplo, las reacciones ácido-base del ligando y las reacciones de hidrólisis del metal, considerando entonces sólo las reacciones de formación de los complejos vanadio(V) - ácido aspártico, de acuerdo [10] y [11]. Esto lo ejecuta el programa minimizando la suma de

$$\theta_{Bf} = (\mathbf{H} - h - (\sum_p c_{po1} + \sum_p c_{pqo})) / (\mathbf{B} - \sum c_{po1}) \quad [10]$$

$$\theta_{Cf} = (\mathbf{H} - h - (\sum_p c_{po1} + \sum_p c_{pqo})) / (\mathbf{C} - \sum c_{po1}) \quad [11]$$

mínimos cuadrados [12] y [13].³⁶ Las variables θ_B^* , θ_C^* , θ_{Bf}^* , θ_{Cf}^* y $\theta(E^*)$ representan los

$$U_6 = \sum (\theta_{Bf} - \theta_{Bf}^*)^2 \quad [12]$$

$$U_7 = \sum (\theta_{Cf} - \theta_{Cf}^*)^2 \quad [13]$$

respectivos valores calculados.

4. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

4.1. Reactivos y disoluciones

- a. Calibración del material volumétrico
- b. Se utilizaron los siguientes reactivos:
 - ampolla de HCl, Fixanal Riedel-de Haën 0.100 M
 - ampolla de KOH, Fixanal Riedel-de Haën 0.100 M
 - KCl Merck p.a.
 - V₂O₅ Merck p.a.
 - Ácido aspártico Merck p.a.
 - N₂ libre de CO₂
 - Agua tridestilada

A partir de los cuales se prepararon las siguientes disoluciones:

- ❖ {mi} ≡ KCl 3.0 M. Se preparó por pesada de KCl, dilución y aforo en atmósfera de N₂.
- ❖ {H} ≡ (K, H) Cl 3.0 M. Se preparó por pesada de KCl, adición de una ampolla de HCl, dilución y aforo en atmósfera de N₂. Fue normalizada frente a la disolución {OH}.
- ❖ {OH} ≡ K(OH, Cl) 3.0 M, igualmente se preparó por pesada de KCl, dilución y aforo en atmósfera de N₂. Fue normalizada frente a KHC₈H₄O₄.
- ❖ {V(V)} ≡ disolución de *metavanadato* ($\zeta \geq 1.01$, **figura 2**). Se preparó por pesada de V₂O₅, el cual se disolvió en una alícuota de la disolución {OH}, dilución y aforo en atmósfera de N₂. Se normalizó con una disolución de Fe(II)

en H_2SO_4 1.0 M, la cual se valoró vs. KMnO_4 0.1 N, a su vez normalizado vs. $\text{Na}_2\text{C}_2\text{O}_4$.³³

- ❖ El ácido aspártico se empleo por pesada del producto comercial seco.

4.2. Medidas de $\text{emf}(\text{H})$

La medida de $\text{emf}(\text{H})$ es el método más conveniente para la determinación de constantes de estabilidad debido a que permite medir al menos una de las concentraciones en equilibrio de las especies iónicas en disolución con gran exactitud y sin suposiciones. La concentración los iones H^+ en equilibrio, h , se determinó mediante la pila [15], donde $\text{REF} = \text{KCl}$ 3.0 M / KCl 3.0 M, Hg_2Cl_2 / Hg , Pt.

$\text{REF} // \text{S} / \text{EV}$ [15]

S = disolución problema en equilibrio

EV = electrodo de vidrio.

A 25 °C el potencial (mV) de la pila [15] viene dado por la ecuación [16], siendo E_0 el potencial normal y J , una constante relacionada con el potencial de la unión líquida //.³⁴

$$E = E_0 + J h + 59.16 \log h \quad [16]$$

Ahora bien, en disoluciones que sólo contengan ácido o base fuerte, se cumple el balance de H^+ [17].³⁵

$$h = \text{H} + K_W h^{-1} \quad [17]$$

A $pH < 7$ se tiene que $h = \text{H}$ y la ecuación [16] se transforma en la [18].

$$E - 59.16 \log H = E_O + J H$$

[18]

En consecuencia, se puede comprobar el funcionamiento correcto de la pila [15], valorando una alícuota de la solución $\{H\}$ por adiciones sucesivas de la disolución $\{OH\}$, hasta alcanzar el punto de equivalencia ($pH \approx 6.5$).

4.3. Instrumentos de medida

- ✓ Electrodo de vidrio con referencia interna Radiometer pHC2401-8.
- ✓ Potenciómetro Orion 420A.
- ✓ Baño - Termostato de agua fabricado en el CES.
- ✓ Reactor de vidrio Metrohm EA 876-5.
- ✓ Material volumétrico calibrado.

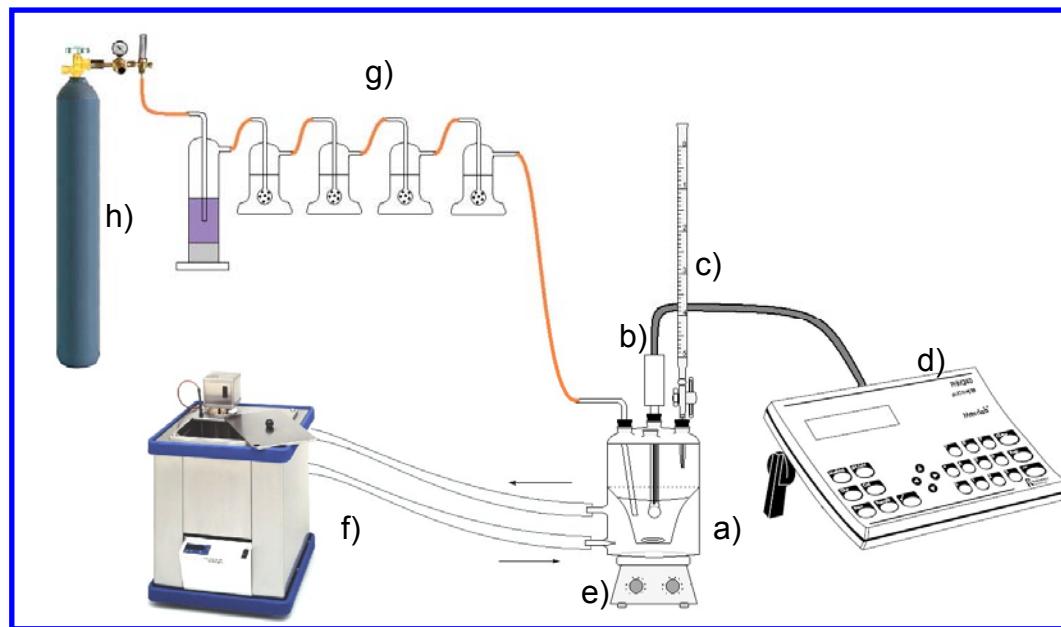


Figura 7. Esquema del equipo empleado: a) Celda de reacción. b) Electrodo de vidrio con referencia interna. Bureta. d) pHmetro. e) Sistema de agitación. Termostato de agua. g) Vasos lavadores. h) Bombona de gas.³⁶

4.4. Procedimiento de medida

Las medidas de $\text{emf}(\text{H})$, se llevaron a cabo valorando una disolución **S** contenida en el reactor, con alícuotas sucesivas de una disolución **T** añadidas desde una bureta. Se utilizó un reactor de vidrio Pyrex de paredes dobles, termostatizado a 25.0 (1) °C, haciendo bombear agua desde un termostato a 25.0 (1)°C. El reactor está provisto de una tapa con varias bocas disponibles, en las cuáles se colocaron el electrodo de vidrio, la bureta, la entrada y la salida de gases, **figura 7**.

La disolución del reactor se mantuvo agitada magnéticamente bajo atmósfera de N_2 , burbujeando el gas a través de una serie de frascos lavadores que contenían disoluciones de V(II) en medio ácido y en presencia de Zn(Hg), HCl 0.1 M, KOH 0.1 M y KCl 3.0 M, con el fin de eliminar O_2 , impurezas básicas, impurezas ácidas y mantener la presión de vapor del medio iónico, respectivamente. Tanto el equipo, como el operador se mantendrán en un ambiente termostatizado a 25.0(1) °C.

Se realizaron varios experimentos, cada uno de los cuales comprendió dos etapas. La *etapa 1*, una titulación ácido-base fuerte, que permitió determinar los parámetros E_\circ y J de la pila [15]. En el estudio del sistema $\text{H}^+ - \text{V(V)} -$ ácido aspártico, después de culminar la *etapa 1*, en la *etapa 2* se agrego una cantidad pesada del ligando y al disolverse éste completamente, se agrego un volumen de disolución de V(V), añadiendo entonces desde una bureta porciones de la disolución $\{\text{H}\}$ ó bien de $\{\text{OH}\}$ según convino, con la finalidad de determinar la estequiométría (p , q , r) y las constantes de estabilidad β_{pqr} de las especies formadas.

Se utilizaron varias relaciones ligando: metal **R**.

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.1. Determinación de los parámetros de E_0 y J

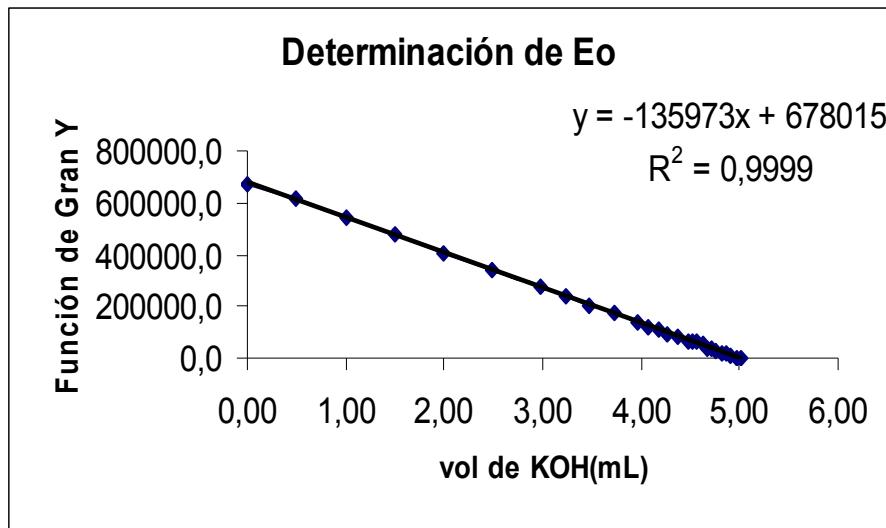
En la **tabla 5** se muestra un experimento tipo, donde se determinan los parámetros E_0 y J de la pila [15].

Tabla 5. Datos de un experimento típico: $v_o = 4.99(1)$ mL de disolución $\{H\}$ 100.0(1) mM vs. v mL de disolución $\{OH\}$ 99.60(1) mM.

v / mL	E / mV	v / mL	E / mV
0.00	257.5	4.17	207.3
0.50	254.6	4.27	204.0
1.00	251.1	4.37	200.3
1.49	247.3	4.47	195.2
1.99	243.0	4.52	193.4
2.49	238.0	4.57	191.8
2.98	231.9	4.62	188.7
3.23	228.3	4.67	181.6
3.48	224.1	4.72	177.7
3.73	219.2	4.77	172.4
3.97	213.6	4.82	164.9
4.07	210.4	4.87	157.9
		4.92	141.0
		4.97	120.6

Se valoraron v_o mL de la disolución $\{H\}$ H_o mM por adiciones sucesivas (v mL) de la disolución básica $\{OH\}$ $-H_T$ mM. Primero, los datos $E(v)$ fueron tratados utilizando la función de Gran [19], ³⁵ suponiendo $J = 0$, **figura 8**.

$$Y [= (v_o + v)10^{(E - J)/59.16}] = 10^{E_o / 59.16} (v_o H_o - H_T v) \quad [19]$$



$$E_0 = 340.4 \text{ mV} \text{ (valor preliminar)}$$

Figura 8. Función de Gran ^{35}Y vs. v mL de disolución $\{\text{OH}\}$ 99.6 mM.

A partir de la pendiente de la recta, se obtuvo un valor preliminar de E_0 , el cual junto con J fueron seguidamente ajustados mediante el programa de mínimos cuadrados generalizados LETAGROP, minimizando la función [6].

$$E_0 = 340.27 \quad J = 50.35 \text{ (valores ajustados por LETAGROP)}$$

5.2. Sistema H^+ - ácido Aspartico

En la **figura 9** se representan los datos experimentales $[\text{H}, \text{C}, E_0, J, (v, E)_{\text{np}}]_{\text{ns}}$ para el sistema H^+ -ácido aspártico en términos de $\theta_C(pH)$ y la **tabla 5** contiene los resultados de su tratamiento por LETAGROP (3 experimentos, 78 puntos) empleando el nivel de reacciones [4], mostrando los valores de pK_a de este ligando.

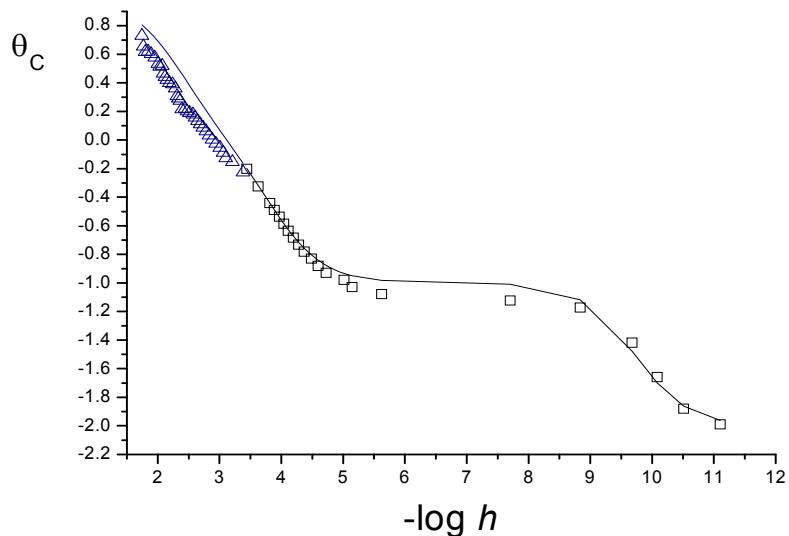


Figura 9. Datos $\theta_C(pH)$ del sistema H^+ - ácido aspártico.

Como es usual, los puntos de la figura representan los datos experimentales y la curva de trazo continuo fue construida suponiendo los valores de pK_a de la **tabla 6**.

En tabla 6 se resume los valores de las constantes de acidez (pK_a) del sistema H^+ - ácido aspártico (H_2C) (KCl 3.0 M, 25 °C) obtenidas en este trabajo comparadas con las reportadas por otros autores en las mismas condiciones.

Tabla 6. Valores de las constantes de acidez (pK_a) del sistema H^+ - ácido aspártico (H_2C) (KCl 3.0 M, 25 °C) obtenidas en este trabajo comparadas con las reportadas por otros autores en las mismas condiciones.

reacción	pK_a		
$H_3C^+ \rightleftharpoons H_2C + H^+$	2.09(3)	2.28(1)	2.17(2)
$H_2C \rightleftharpoons HC^- + H^+$	3.86(3)	4.99(1)	3.90(1)
$HC^- \rightleftharpoons C^{2-} + H^+$	9.71(3)	10.01(1)	9.90(3)
$s(\theta_c)$	0.063	0.012	0.013
Ref.	Este trabajo	26a	26b

Los valores de pK_a obtenidos son del mismo orden que los reportados por Kenbaz^{26b} (columna 4 de la **tabla 6**), difieren ligeramente de los dados por Nielsen^{26a} en las mismas condiciones experimentales (KCl 3.0 M, 25 °C).

Finalmente, la **figura 10** representa el diagrama de distribución de especies c_{p01} ($\log h$).

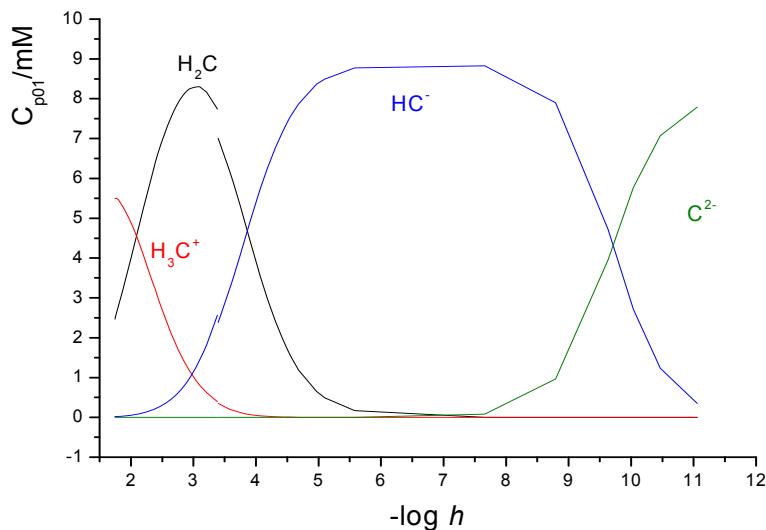


Figura 10. Diagrama de distribución de especies para el sistema H^+ - ácido aspártico.

A $\text{pH} \leq 2.5$ predomina el catión H_3C^+ , que se desprotona dando lugar a la especie H_2C (en equilibrio con el zwiterion H_2C^\pm), la cual por pérdida de otro H^+ produce el anión HC^- , predominante en el amplio intervalo $5 \leq \text{pH} \leq 9$. En fin, HC^- al perder el último protón da lugar al anión básico C^{2-} dominante a $\text{pH} \geq 10$.

A modo comparativo en la **tabla 7**, se presentan los pK_{ai} del ácido glutámico ³⁷ y del ácido aspártico obtenidos en este trabajo.

Tabla 7. pK_{ai} del ácido glutámico³⁷ y del ácido aspártico (KCl 3.0 M, 25 °C).

especies	ácido glutámico	ácido aspártico
$[\text{H}_3\text{C}]^+$	2.59(1)	2.09(3)
H_2C	4.49(2)	3.86(3)
$[\text{HC}]^-$	9.75(3)	9.71(3)
Ref.	37	Este trabajo

Se observa que los pK_{ai} son aproximadamente del mismo orden de magnitud, como era de esperar, ya que las estructuras del ácido glutámico y del ácido aspártico son muy similares, pues solamente se diferencian en el longitud de la cadena carbonada, **figura 11**.

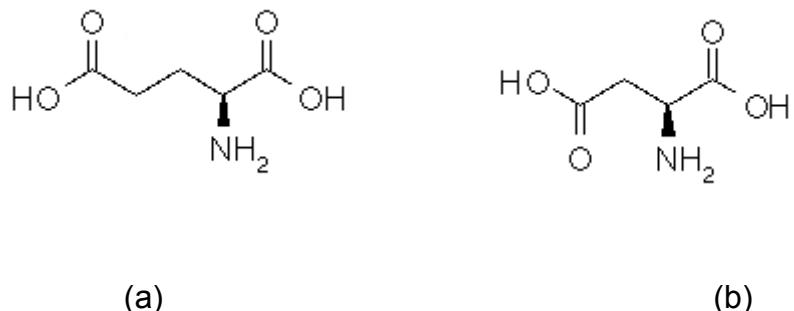
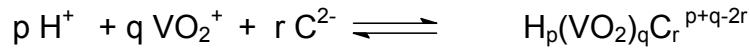


Figura 11. (a) Estructura del ácido glutámico. (b) Estructura del ácido aspártico.

5.3 Sistema H^+ - V(V) – ácido aspártico

En las **figuras 11 y 12** se representan los datos experimentales del sistema H^+ - V(V) – ácido aspártico en términos de $E(v)$ y $\theta_c(\log h)$ para varios valores de R . Como es usual, los puntos de la figuras representan los datos experimentales y las curvas de trazo continuo fueron construida suponiendo los valores de β_{pqr} de la **tabla 8**, en la cual se presenta el modelo que mejor ajustó los datos, formado por las especies $[H_2VO_2C]^+$, HVO_2C y $[VO_2C]^-$.

Tabla 8. Constantes de equilibrio β_{pqr} de los complejos (p, q, r) del sistema $H^+ - VO_2^+ - C^{2-}$ obtenidas en KCl 3.0 M a 25 °C, según las reacciones



Especies	Log β_{pqr}				
$[H_2VO_2C]^+$	17.40(9)	17.2(2)	17.1(2)	17.0(2)	17.2(2)
$[HVO_2C]$	15.40(9)	15.5(1)	15.4(1)	15.3(2)	15.45(8)
$[VO_2C]^-$	12.78(6)	12.8(1)	12.8(1)	12.77(9)	12.78(7)
$s(\theta_c)$	0.037				
$s(\theta_B)$		0.207			
$s(\theta_{Bf})$			0.199		
$s(\theta_{cf})$				0.193	
$s(E)$					2.8 mV

Se observa que la menor dispersión se obtuvo cuando se minimiza la función de formación θ_c .

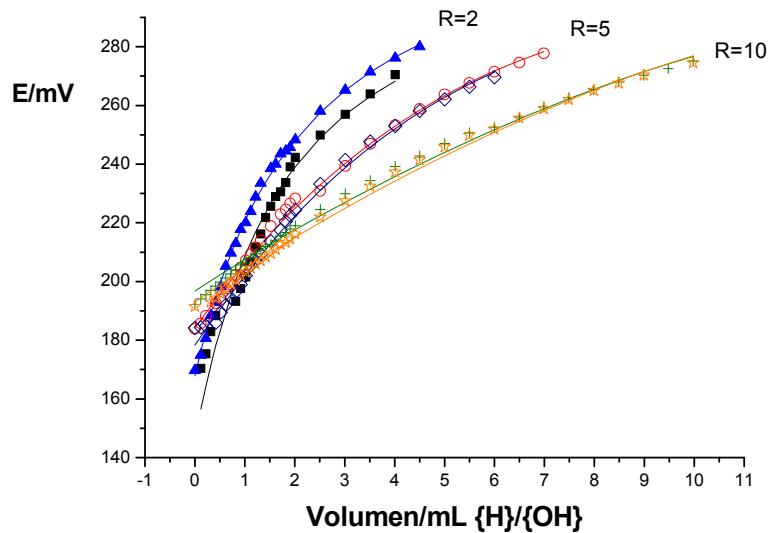


Figura 12. Datos $E(v)$ del sistema $\text{H}^+ - \text{VO}_2^+ - \text{ácido aspártico}$ (KCl 3.0 M, 25 °C), $R = 2, 5$ y 10 .

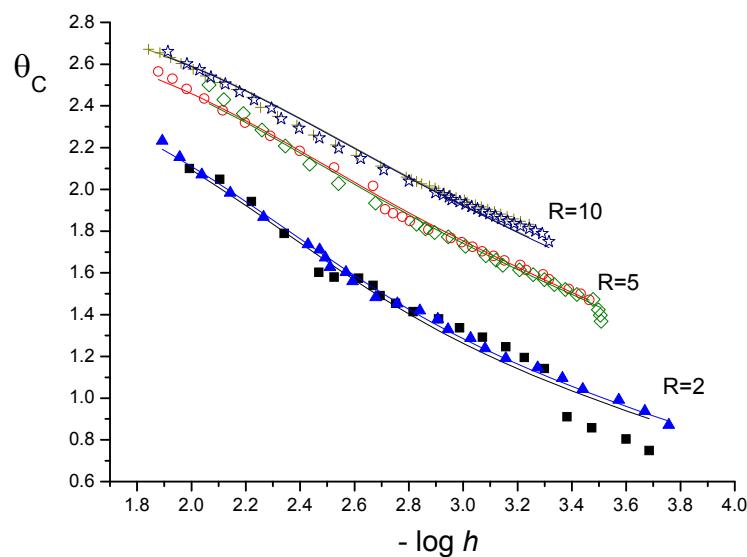


Figura 13. Datos $\theta_C(\log h)$ del sistema $\text{H}^+ - \text{VO}_2^+ - \text{ácido aspártico}$ (KCl 3.0 M, 25 °C), $R = 2, 5$ y 10 .

En dichas figuras, las curvas teóricas se ajustan bien a los datos experimentales para valores de $R > 2$ y a medida que la relación ligando metal aumenta, mejora el ajuste. Esto puede atribuirse a que para $R = 2$ posiblemente interfieran pequeñas cantidades de *decavanadatos* en equilibrios lentos dentro de la *región de inestabilidad* (**figura 2**).⁸

En la **figura 14** se observa la predominancia de los decavanadatos en toda la región de pH empleada en este trabajo, lo que hace suponer una gran competencia de los mismos, con la formación de complejos VO_2^+ -ácido aspártico cuando son empleadas bajas relaciones R .

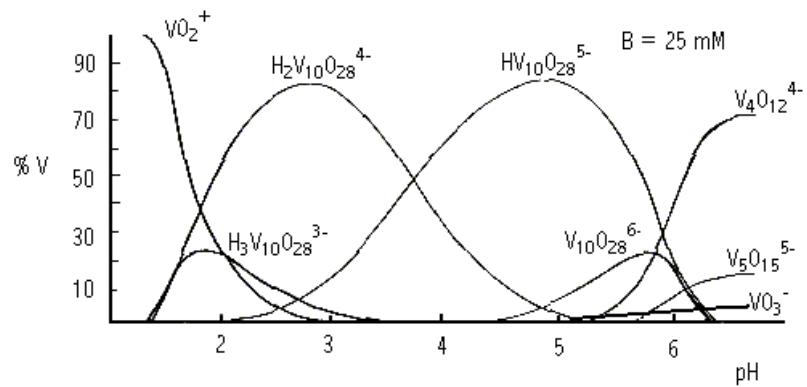


Figura 14. Diagrama de distribución de especies de los vanadatos(V) en medio ácido.

Finalmente, en las **figuras 15 - 17** se presentan los diagramas de distribución de especies para $R = 2, 5$ y 10 .

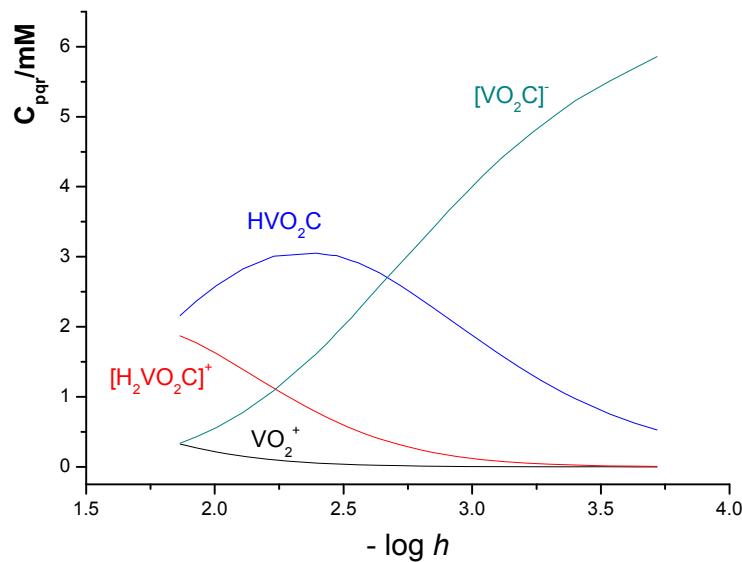


Figura 15. Diagrama de distribución de especies en función del pH para $\mathbf{R} = 2$.

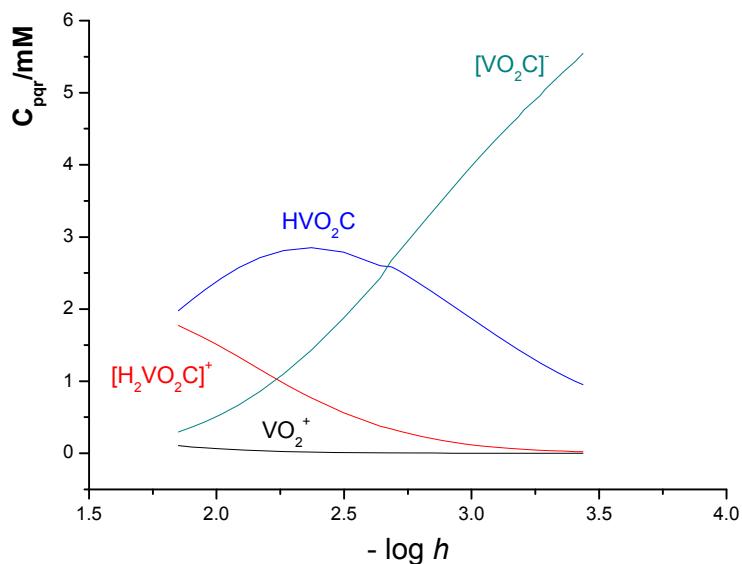


Figura 16. Diagrama de distribución de especies en función del pH para $\mathbf{R} = 5$.

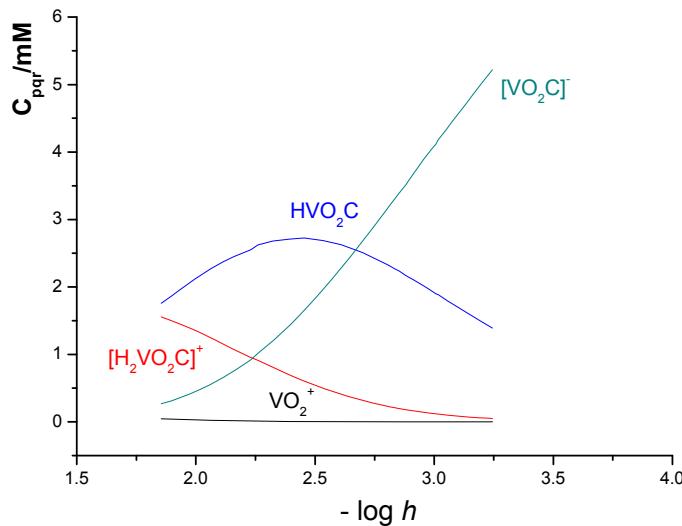


Figura 17. Diagrama de distribución de especies en función del pH para $\mathbf{R} = 10$.

Se observa que el complejo más abundante es $[\text{VO}_2\text{C}]^-$, independientemente del valor de \mathbf{R} y predomina a $\text{pH} \geq 3.5$. La especie HVO_2C es abundante en menor proporción, predominando en el intervalo $2 \leq \text{pH} \leq 2.5$. Finalmente, el complejo $[\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}]^+$ es menos abundante y predomina a $\text{pH} \leq 2$. En todos los casos se observa que la cantidad de VO_2^+ es casi despreciable a medida que se aumenta \mathbf{R} .

A modo comparativo en la **tabla 9**, se presentan las constantes estabilidad β_{pqr} de los complejos del sistema $\text{H}^+ - \text{V(V)} - \text{ácido glutámico}^{37}$ y del sistema $\text{H}^+ - \text{V(V)} - \text{ácido aspártico}$ obtenidas en este trabajo.

Tabla 9. Constantes de estabilidad β_{pqr} de los complejos de los sistemas $\text{H}^+ \cdot \text{VO}_2^+$ - ácido glutámico y $\text{H}^+ \cdot \text{VO}_2^+$ - ácido aspártico (KCl 3.0 M, 25 °C).

especies	ácido glutámico	ácido aspártico
$[\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}]^+$	17.5(1)	17.40(9)
HVO_2C	15.6(1)	15.40(9)
$[\text{VO}_2\text{C}]^-$	11.9(1)	12.78(6)
$[\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}_2]^-$	28.8(2)	
$[\text{H}_3\text{VO}_2\text{C}_2]$	31.7(2)	
ref.	37	Este trabajo

Se observa que la estabilidad de las especies comunes en ambos casos, $[\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}]^+$, HVO_2C y $[\text{VO}_2\text{C}]^-$, es del mismo orden de magnitud, como era de esperarse, ya que las estructuras del ácido glutámico y del ácido aspártico son similares, **figura 11**.

6. MODELIZACIÓN MOLECULAR

El estudio de propiedades características de materiales y su explicación fundamentada en las teorías y leyes físicas es un tópico de mucho interés actual, básicamente porque las investigaciones en esta área están orientadas hacia la búsqueda de un modelo universal que permita la simulación de nuevos materiales, sin caer en los gastos excesivos que representa la experimentación. En este sentido los cálculos tradicionales y muy puntuales tienden a ser sustituidos por otros menos empíricos y de mayor alcance como son los cálculos *ab initio* de dichas propiedades. Estos, fundamentados en las leyes de la mecánica cuántica, son cada vez más factibles debido al vertiginoso auge de la computación. Los principales tipos de métodos usados son mecánica molecular y mecánica cuántica. A su vez, los métodos de mecánica cuántica incluyen métodos *semi-empíricos* y métodos *ab initio*.^{38,39}

Los métodos *ab initio*, son los cálculos que se realizan aplicando las fórmulas de la Termodinámica Estadística y de la Mecánica Cuántica (leyes primeras o principios), las cuales constan de tres etapas:

1. la aproximación a la estructura molecular
2. la optimización para encontrar la geometría de energía mínima
3. y el cálculo de frecuencias de vibración, para determinar cómo se almacena la energía

En la primera etapa se puede hacer uso de distintas técnicas semiempíricas.

En la segunda y en la tercera se debe trabajar con el mismo modelo (método+conjunto base).^{41,42}

En primer lugar se estudió las especies del ácido aspártico calculadas por medio de métodos *ab initio*, empleando el programa HyperChem 7.5.⁴⁰ En las **figuras 18-29** se presentan como las estructuras más probables, de las distintas formas: el ion vanadilo(V) y del ácido aspártico.

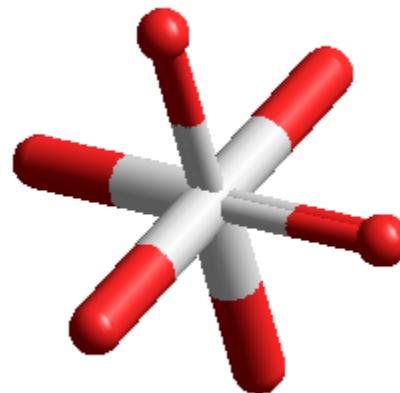


Figura 18. Estructura propuesta para el ion vanadilo(V) $\text{VO}_2\text{H}_2\text{O}_5^+$.

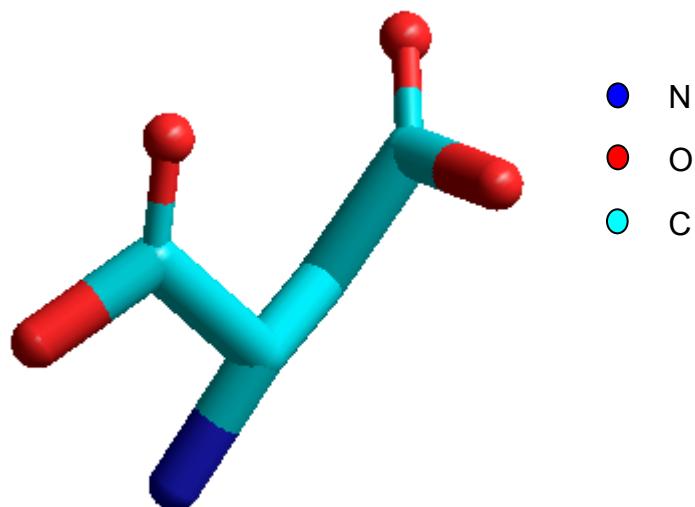


Figura 19. Estructura propuesta para el ligando en la forma protonada H_3C^+ .

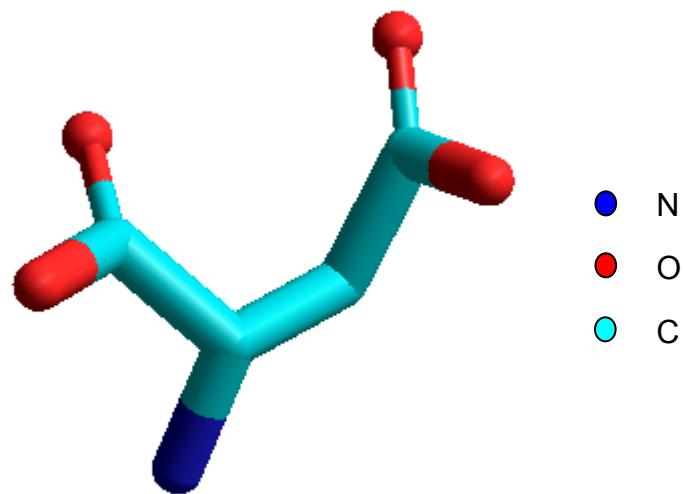


Figura 20. Estructura propuesta para el ligando en la forma H_2C .

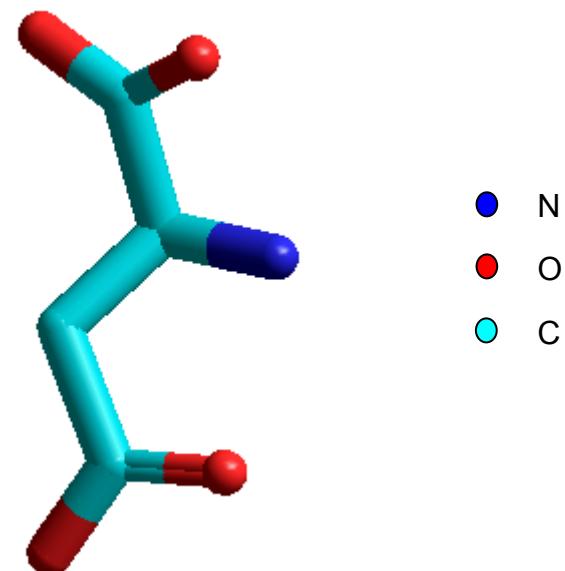


Figura 21. Estructura propuesta para el ligando en la forma HC^- .

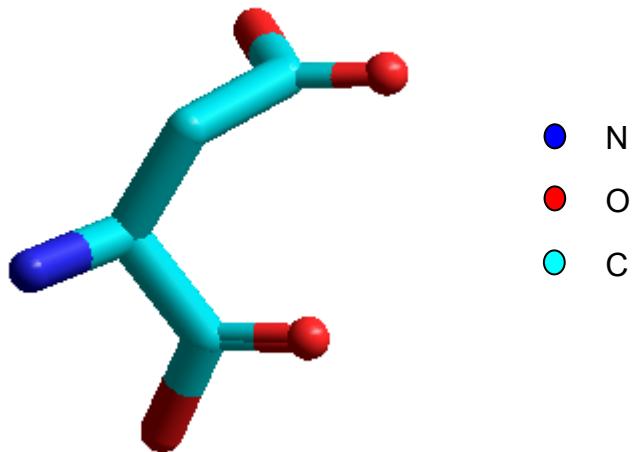


Figura 22. Estructura propuesta para el ligando en la forma C^{2-} .

La **tabla 10** reúne los resultados considerando cada ion, tanto en el vacío como en una caja de agua de 216 moléculas, empleando (STO-3G y caja 216 H_2O) con el programa HyperChem 7.5.⁴⁰

Tabla 10. Resultados cálculos Hyper75 (STO-3G y caja 216 H₂O).

Especies		E_T u.a STO-3G	caja
H ₃ C ⁺	HOOC ----- COOH NH ₃ ⁺	-315771.19(1)	-4123.26(1)
H ₂ C	HOOC ----- COOH NH ₂	-315493.70(1)	-4064.09(1)
H ₂ C [±]	HOOC ----- COO ⁻ NH ₃ ⁺	-315493.25(1)	-4174.16(1)
HC ⁻ on N	^OOC ----- COO ⁻ HNH ₂	-315444.05(1)	-4192.08(1)
HC ⁻ on O	HOOC ----- COO ⁻ NH ₂	-315062.51(1)	-4121.54(1)
C ²⁻	^OOC ----- COO ⁻ NH ₂	-314489.55(1)	-4201.19(1)

Similarmente al caso anterior se hicieron calculos *ab-initio* para los complejos $[H_2VO_2C^+]$, $[HVO_2C]$ y $[VO_2C^-]$, la **tabla 11** incluye los valores de la energía total E_T calculada por el método *ab initio* STO-3G y los complejos inmersos en la caja 216 H_2O .

Tabla resultados cálculos Hyper75 (STO-3G y caja 216 H_2O)

Especies		STO-3G	caja
$H_2VO_2C^+$ coord. O (no quelatado)	HOOC ----- COO- VO_2 NH_3^+	-1135103.3(1)	-3993.6(1)
HVO_2C coord. O (no quelatado)	HOOC ----- COO- VO_2 NH_2	-1134796.7(1)	-4038.5(1)
HVO_2C coord. N (no quelatado)	HOOC ----- COO ⁻ $\text{H}_2\text{N}-\text{VO}_2$	-1134796.3(1)	-3973.5(1)
HVO_2C coord. O y N (quelatado)	HOOC ----- COO ⁻ H_2N $\rangle \text{VO}_2$	-1087724.4(1)	-4006.5(1)
VO_2C^- coord. O (no quelatado)	$\text{OOC}-----\text{COO}-\text{VO}_2$ NH_2	-1134394.7(1)	-3915.6(1)
VO_2C^- coord. O (quelatado)	$\text{OOC}-----\text{COO}$ H_2N $\rangle \text{VO}_2$	-1087355.6(1)	-3890.0(1)

Se observa que la coordinación del metal sobre el O del grupo carboxilo o bien sobre el N del grupo amino, son similarmente probables (en términos de energía, **tabla 11**, columna 3) para el complejo $[HVO_2C]$, cuando éste se encuentra en el vacío, **figura 23**.

Ahora bien, si se compara la energía obtenida para el complejo $[HVO_2C]$, en las mismas condiciones (**tabla 11**, columna 3) cuando el ligando esta en forma monodentada y cuando se encuentra quelatado al centro metálico, se observa que la forma del complejo más probable es la no quelatada, **figura 23**.

Cuando se supone la especie contenida en la caja con 216 H_2O (en términos de energía, **tabla 11**, columna 4), , se observa que la coordinación del metal sobre el O del grupo carboxilo es preferencial comparada con la coordinación del metal sobre el N del grupo amino, para el complejo $[HVO_2C]$. Si se compara ahora, la energía de ésta conformación monodentada por el oxígeno del grupo carboxílico con la quelatada (**tabla 11**, columna 4), la menor energía la muestra la no quelatada, contradictoriamente a lo que debía esperarse para la estabilidad de complejos de coordinación; similarmente ocurre para el complejo $[VO_2C^-]$ **figura 24**.

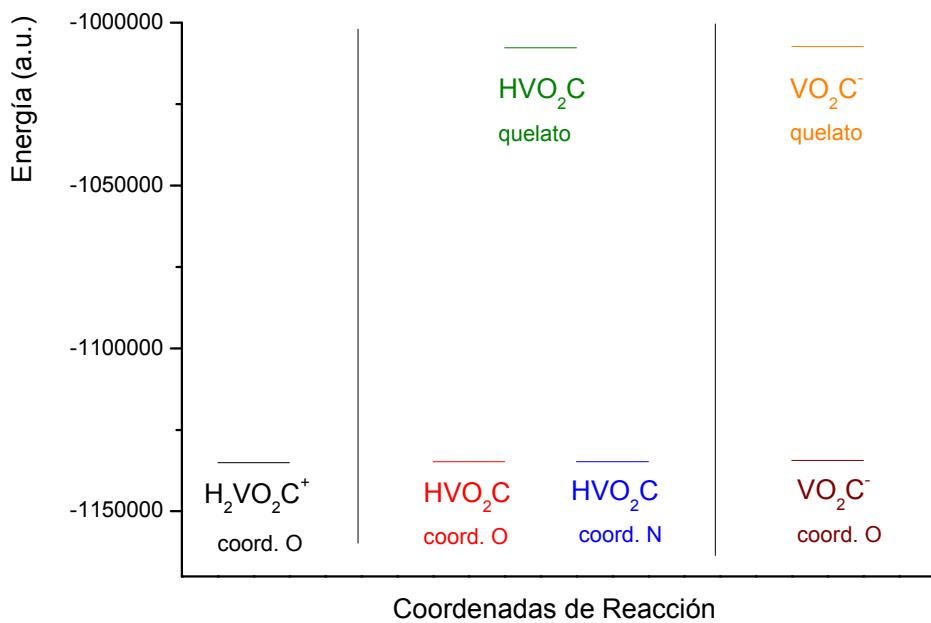


Figura 23. Perfil de energía total para las reacciones de formación de las especies $[\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}]^+$, $[\text{HVO}_2\text{C}]$ y $[\text{VO}_2\text{C}]^-$. Las líneas sólidas corresponden a energías electrónicas, según los cálculos *ab-initio* (STO-3G).⁴⁰

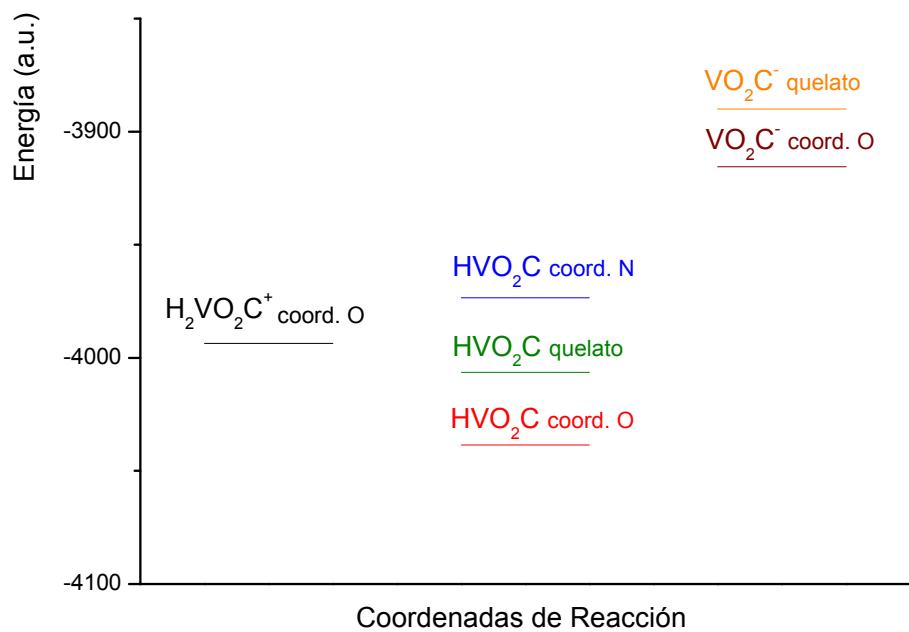


Figura 24. Perfil de energía total para las reacciones de formación de las especies $[\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}]^+$, $[\text{HVO}_2\text{C}]$ y $[\text{VO}_2\text{C}]^-$. Las líneas sólidas corresponden a energías electrónicas, según los cálculos *ab-initio* (STO-3G).⁴⁰

Las **figuras 25 a 31**, muestras las estructuras de los complejos obtenidos.

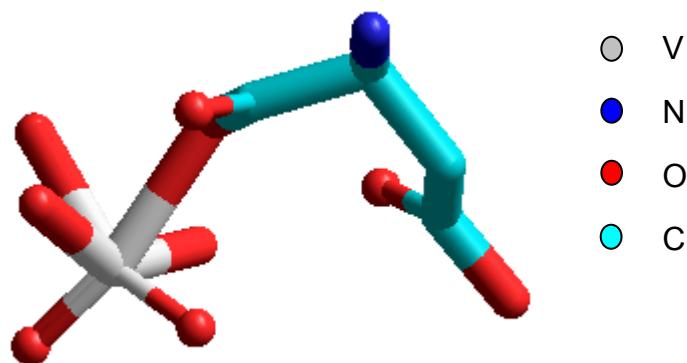


Figura 25. Estructura propuesta para el complejo $\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}$ donde no se forma un anillo quelato.

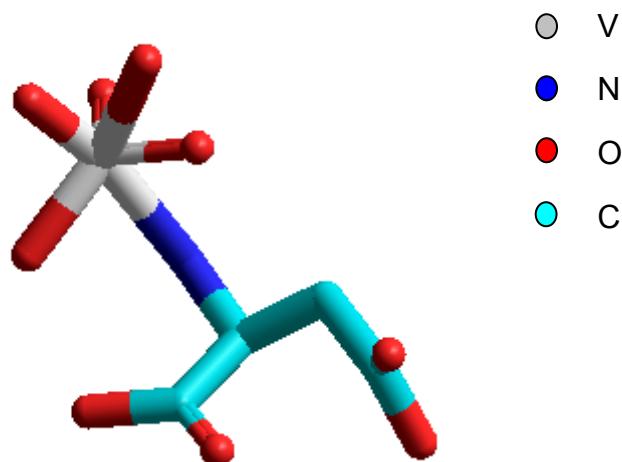


Figura 26. Estructura propuesta para el complejo HVO₂C donde el átomo de nitrógeno se encuentra coordinado al centro metálico.

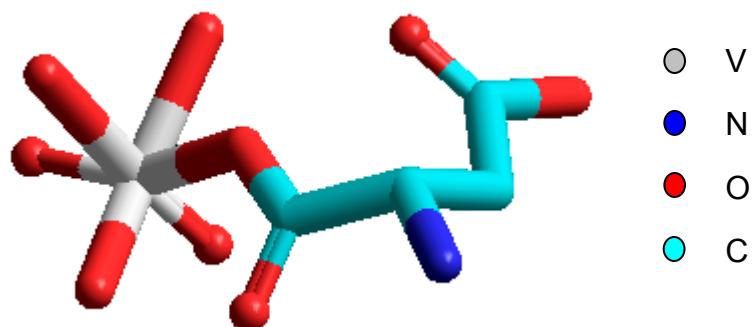


Figura 27. Estructura propuesta para el complejo HVO₂C donde no se forma un anillo quelato.

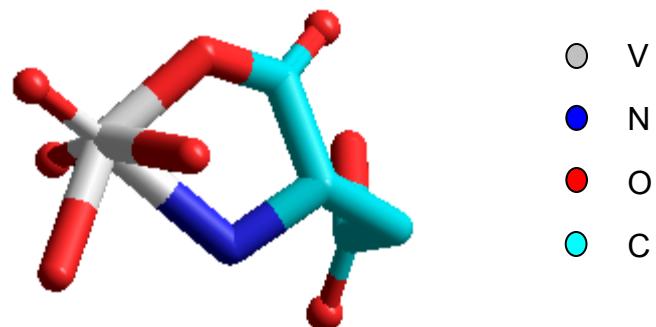


Figura 28. Estructura propuesta para el complejo HVO₂C donde se forma un anillo quelato a través del átomo de N y el O del carboxílo.

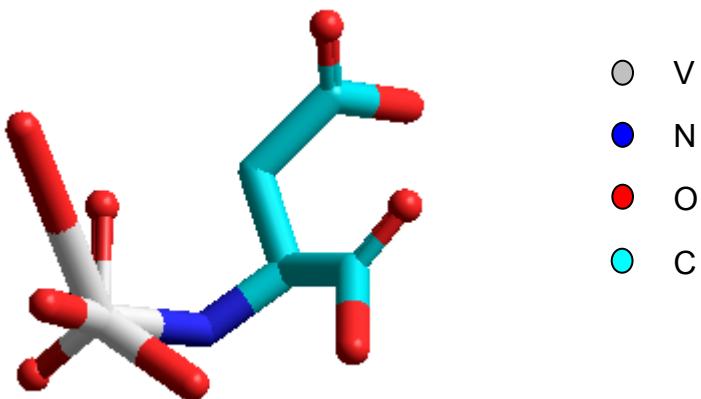


Figura 29. Estructura propuesta para el complejo VO_2C^- donde el átomo de nitrógeno se encuentra coordinado al centro metálico.

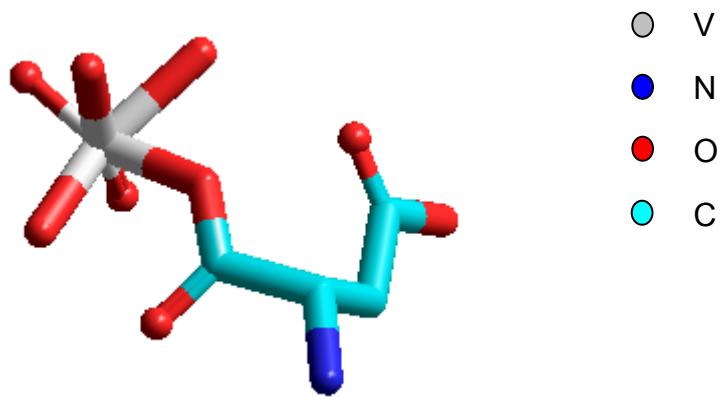


Figura 30. Estructura propuesta para el complejo VO_2C^- donde el átomo de oxígeno se encuentra coordinado al centro metálico.

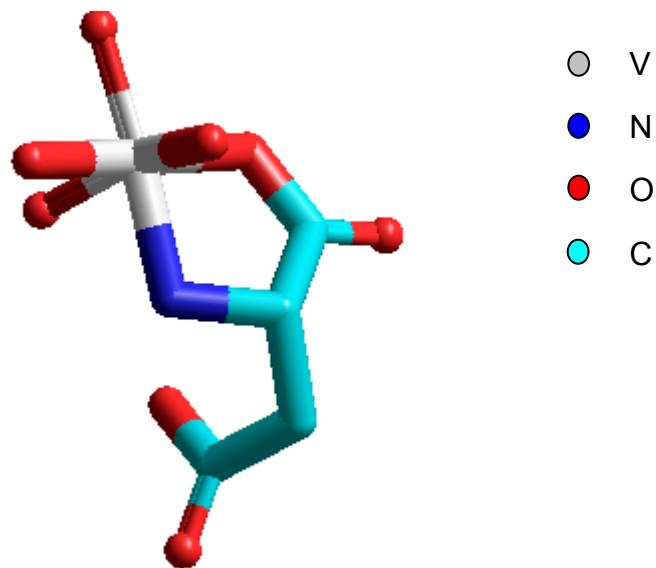


Figura 31. Estructura propuesta para el complejo VO_2C^- donde se forma un anillo quelato a través del átomo de N y el O del carboxílo.

7. CONCLUSIONES

1. Se determinaron las constantes de acidez del ácido aspártico mediante medidas de $\text{emf}(\text{H})$, en KCl 3.0 M como medio iónico y a 25 °C. El análisis de los datos por medio de LETAGROP dió los siguientes valores de $\text{pK}_{\text{H}_3\text{C}}^+ = 2.09(3)$, $\text{pK}_{\text{HC}}^- = 3.86(3)$ y $\text{pK}_{\text{C}}^{2-} = 9.71(3)$, los cuales son valores muy similares a los encontrados en la bibliografía.
2. Se estudió el sistema $\text{H}^+ - \text{VO}_2^+$ - ácido aspártico por medio de medidas $\text{emf}(\text{H})$ en KCl 3.0 M y a 25 °C. El análisis de los datos mediante LETAGROP indica la presencia de las especies $[\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}]^+$, HVO_2C y $[\text{VO}_2\text{C}]^-$ con las respectivas constantes de estabilidad siguientes: $10^{17.40(9)}$, $10^{15.40(9)}$ y $10^{12.78(6)}$.
3. Existe una gran similitud en la estequiometría y estabilidad las especies comunes encontradas en los sistemas $\text{H}^+ - \text{VO}_2^+$ - ácido aspártico y $\text{H}^+ - \text{VO}_2^+$ - ácido glutámico.
4. Se determinó que las especies monodentadas $[\text{H}_2\text{VO}_2\text{C}]^+$, HVO_2C y $[\text{VO}_2\text{C}]^-$ son más probables con respecto a las especies quelatadas.

8. RECOMENDACIONES

Realizar un estudio de la posible formación de complejos ternarios entre el V(V) y los ácidos aspártico y glutámico, a fin ver que tipo de especies pudieran ser favorecidas.

9. BIBLIOGRAFIA

1. F. Cotton, G. Wilkinson, Advanced Inorganic Chemistry 5th. Edition, Interscience Pub. (1988).
2. L. V. Boas, J. C. Peso, Vanadium, en G. Wilkinson (Ed.), *Comprehensive Coordination Chemistry*, vol. 3 (1987), p. 487.
3. Ch. Baes, R. Mesmer, *The Hydrolysis of cations*, Jhon Willey & Sons, Nueva York (1976), p. 199.
4. D. Richens,C. Chem, *The Chemistry of Aqua Ions*, Jhon Willey & Sons, Toronto (1976), p 235.
5. D. Dyrsen y T. Sekine, *Acta Chem. Scand.*, 15, 399 (1961).
6. F. Brito y N. Ingri, *An. Fis. Quim.*, 56B, 165 (1959).
7. F. Rossotti y H. Rossotti: *Acta Chem. Scand.*, 10, 957 (1956).
8. F. Brito, *An. Fis. Quim.* (Madrid), 62B, 123 (1966).
9. N. Ingri y F. Brito, *Acta Chem. Scand*, 13, 1971-1996 (1959).
10. L. Patterson, B. Hedman, I. Andersson y N. Ingri, *Chemica Scripta*, 22, 1254 (1983).
11. M.L. Araujo, Termoquímica del Vanadio (V) en Solución, Tesis Doctoral, Facultad de Ciencias, UCV (1991).
12. T. McKee y J. R. McKee, Bioquímica La Base Molecular De La Vida, 3^{ra} Ed., Mc GrawHill- Interamericana (2003).
13. L. Lehninger. Bioquímica Las Bases Moleculares De La Estructura y Función Celular, Ed. Omega Casanova, Barcelona (1973).
14. H. Kroll. *J.Am.Chem.Soc.*, 74, 2034 (1952).
15. R. Munze, A. Guthert, H. Matthes. *Zhur. Phys. Chem.*, 241,240 (1969).
16. R. Dreyer, J. Redlich, R. Syhre. *Z. Phys. Chem.*, 238,417 (1968).
17. I. Batgaeu, S. Larionov, V. Shulman. *Zhur. Neorg. Khim.*, 6,75 (1961).
18. R. Lumb, A. Martell. *J. Phys. Chem.*, 57,690 (1953).
19. D. Shelke, D. Jahagirdar. *J. Inorg. Nucl. Chem.*, 41,1635 (1979).

- 20.** M. Cefola, A. Tompa, A. Celiano, P. Gentile. *Inorg. Chem.*, 1,290 (1962).
- 21.** S. Chaberek, A. Martell. *J. Am. Chem. Soc.*, 74, 6021 (1952).
- 22.** T. Kiss, I. Sovago, I. Toth. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 1967 (1997).
- 23.** I Nagypal, A. Gergely, E. Farkas. *J. Inorg. Nucl. Chem.*, 36,699 (1974).
- 24.** D. Kovala, M. Demertzis. *Bull. Soc. Chim. Fr.*, II,793 (1988).
- 25.** D. Perrin. *J.Chem.Soc.*, 290 (1959).
- 26.** a) N. Zambrano, Complejos de V(III) con los aminoácidos α -alanina, β -alanina y ácido aspártico mediante medidas de fuerzas electromotrices (KCl 3.0 M),TEG, Facultad de Ciencias, UCV (2004). b) M. Kenbaz. Estudio de los complejos de vanadio(IV) y el ácido aspártico mediante medidas de fuerzas electromotrices (KCl 3.0 m, 25°C), TEG, Facultad de Ciencias, UCV (2006).
- 27.** M.L. Araujo, Contribución al estudio de complejos de Vanadio y aminoácidos en solución acuosa. Trabajo de Ascenso a la categoría de Prof. Titular. Fac. de Ciencias. CES, UCV (2007).
- 28.** L.G. Sillén. *Master Variables and Activity Scales*, en *Advances in Inorganic Chemistry Series*, 65 (3), 45 (1967).
- 29.** D. Richens y C. Chem., The Chemistry of Aqua Ions, John Willey & Sons, Toronto (1976), p. 235.
- 30.** N. Ingri y F. Brito. *Acta Chem. Scand.*, 13, 197 (1959).
- 31.** L.G. Sillén y O. Warquist. *Arkiv. Kemi*, 31, 315 (1962).
- 32.** F. Brito, M.L. Araujo, V. Lubes, A. D'Ascoli, A. Mederos, A. Gili, S. Dominguez, E. Chinea, R. Hernandez, M.T. Armas, E. Baran, *J. Coord. Chem.*, 58, 501, (2005).
- 33.** G. Charlot. Química Analítica Cuantitativa Mineral, Masson et C^{IE} Éditeurs, Paris (1961).
- 34.** G. Biederman y L. Sillén. *Arkiv. Kemi.*, 5, p. 425 (1952).
- 35.** G. Gran, *Analyst.*, 77, 661 (1952).
- 36.** J. Matos. Complejos de vanadio(IV) y aminoácidos. Sistema VO^{2+} -valina (KCl 3.0 M, 25°C). Trabajo Especial de Grado,Facultad de Ciencias, UCV (2008).

- 37.** R. Espinoza. Complejos de vanadio(V) y aminoácidos. Sistema VO_2^+ -ácido glutámico (KCl 3.0 M, 25°C), Trabajo Especial de Grado, Facultad de Ciencias. UCV (2007).
- 38.** W. Hehre, L. Radon, P. Schleyer y J. Pople, Ab initio Molecular Orbital Theory, J. Wiley & Sons, Nueva York (1986).
- 39.** P. Gili, Introducción a la Química Computacional, Departamento de Química Inorgánica, ULL, Tenerife (2002).
- 40.** HyperChem, Tools for Molecular Modelling, Hypercube Inc, Nueva York (2004).
- 41.** G. Schwarzembach: *Helv. Chim. Acta*, **35**, 2344 (1952).
- 42.** A. Adamson: *J. Am. Chem. Soc.*, **76**, 1578 (1954).

10. APÉNDICE

Apéndice 1. Tabla de los datos para el sistema H^+ - acido aspártico.

Experimento 1

$\text{Hs}=-0.00160\text{M}$ $\text{Ht}=-0.09960\text{M}$ $\text{Cs}=0.00974\text{M}$ $\text{Vo}=20.37\text{mL}$ $\text{Eo}=340.27$ $\text{J}=50.35$

V_{KOH} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θc	θc*	error
0	136.8	3.44	-0.2016	-0.1985	0.0031
0.27	125.8	3.62	-0.3245	-0.3186	0.0059
0.52	114.5	3.81	-0.4414	-0.4442	-0.0028
0.62	110.4	3.88	-0.4893	-0.4891	0.0001
0.72	105.5	3.96	-0.5371	-0.5416	-0.0044
0.82	101.3	4.04	-0.5857	-0.5849	0.0008
0.92	97.1	4.11	-0.6344	-0.6264	0.0081
1.02	92.2	4.19	-0.6832	-0.6719	0.0113
1.12	87.1	4.28	-0.7322	-0.7156	0.0166
1.22	81.7	4.37	-0.7813	-0.7575	0.0238
1.32	74.9	4.48	-0.8305	-0.8037	0.0268
1.42	68.4	4.59	-0.8799	-0.8411	0.0388
1.52	60.6	4.72	-0.9294	-0.878	0.0513
1.62	43.6	5.01	-0.9786	-0.9334	0.0452
1.72	35.8	5.14	-1.0285	-0.9501	0.0785
1.82	7.5	5.62	-1.0782	-0.9829	0.0952
1.91	-115.5	7.70	-1.123	-1.0095	0.1136
2.01	-182.6	8.83	-1.1724	-1.117	0.0554
2.51	-232.2	9.67	-1.4177	-1.4773	-0.0596
3.01	-256.1	10.08	-1.6583	-1.6984	-0.0401
3.51	-281.5	10.51	-1.8795	-1.8615	0.0179
4.01	-316.5	11.10	-1.9906	-1.9605	0.0301

Experimento 2

Hs=-0.0012M Ht=-0.0996M Cs=0.00937M Vo=20.27mL Eo=336.81 J=51.5

V_{KOH}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θc	θc*	error
0	139.5	3.33	-0.1774	-0.1333	0.0441
0.27	126.0	3.56	-0.2992	-0.2782	0.021
0.52	113.9	3.76	-0.4194	-0.4125	0.0069
0.62	108.8	3.85	-0.4686	-0.4688	-0.0003
0.72	104.3	3.93	-0.5186	-0.5176	0.001
0.82	99.5	4.01	-0.5689	-0.568	0.0009
0.92	94.5	4.09	-0.6195	-0.618	0.0014
1.02	89.1	4.18	-0.6702	-0.6687	0.0016
1.12	83.7	4.27	-0.7213	-0.7151	0.0062
1.22	75.2	4.42	-0.7721	-0.7791	-0.007
1.32	67.9	4.54	-0.8235	-0.8249	-0.0014
1.42	63.0	4.62	-0.8754	-0.8511	0.0243
1.52	46.9	4.90	-0.9266	-0.915	0.0116
1.62	29.7	5.19	-0.9783	-0.9547	0.0236
1.72	15.9	5.42	-1.0305	-0.9731	0.0574
1.82	-38.8	6.35	-1.0825	-0.9972	0.0854
1.91	-171.8	8.59	-1.1291	-1.0706	0.0585
2.01	-191.1	8.92	-1.1809	-1.1388	0.0421
2.51	-229.6	9.57	-1.4389	-1.419	0.0199
3.01	-250.6	9.93	-1.694	-1.6203	0.0737

Experimento 3

Hs=-0.002 M Ht=0.1M Cs=0.0107M Vo=10.27mL Eo=367.10 J=-29.80

V_{KOH}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θc	θc*	error
0	167.0	3.38	-0.2256	-0.1626	0.063
0.1	177.2	3.21	-0.1541	-0.0565	0.0976
0.15	183.6	3.10	-0.1254	0.009	0.1344
0.2	185.9	3.06	-0.0873	0.0325	0.1198
0.25	189.3	3.00	-0.0539	0.0674	0.1213
0.3	193.3	2.93	-0.0249	0.1088	0.1336
0.35	196.6	2.88	0.0048	0.1432	0.1384
0.4	199.7	2.83	0.0334	0.176	0.1426
0.45	202.5	2.78	0.0616	0.2059	0.1443
0.5	205.4	2.73	0.0867	0.2378	0.1511
0.55	208.2	2.68	0.1103	0.2684	0.1581
0.6	210.6	2.64	0.1348	0.2949	0.1601
0.65	212.9	2.60	0.1581	0.3204	0.1623
0.7	215.1	2.56	0.1803	0.3449	0.1646
0.75	218.1	2.51	0.1908	0.3784	0.1876
0.8	220.7	2.47	0.2022	0.4075	0.2053

0.85	222.6	2.44	0.22	0.4287	0.2087
0.9	225.7	2.38	0.2164	0.463	0.2467
1	227.3	2.36	0.2765	0.4806	0.2041
1.05	228.9	2.33	0.2911	0.4981	0.207
1.1	230.3	2.31	0.3075	0.5133	0.2058
1.2	231.8	2.28	0.3631	0.5294	0.1663
1.3	234.4	2.24	0.3908	0.5568	0.1661
1.4	237.4	2.18	0.4003	0.5878	0.1874
1.5	239.6	2.15	0.423	0.6098	0.1868
1.6	241.7	2.11	0.4422	0.6304	0.1882
1.7	243.5	2.08	0.4651	0.6475	0.1824
1.8	244.3	2.07	0.5198	0.655	0.1352
1.9	246.6	2.03	0.5142	0.676	0.1618
2	248.1	2.00	0.5338	0.6893	0.1556
2.25	251.5	1.94	0.5781	0.7182	0.1401
2.5	254.7	1.894	0.6039	0.7438	0.1399
2.75	257.6	1.844	0.6186	0.7656	0.147
3	260.3	1.798	0.6184	0.7846	0.1663
3.25	262.2	1.765	0.6561	0.7973	0.1412
3.5	263.5	1.742	0.7304	0.8057	0.0753

Apéndice 1^a. Datos para el diagrama de distribución H⁺- Ácido aspártico.

pH±0.05	b	2	3	4
3.39	7.01	0.35	2.39	0.00
3.58	6.18	0.20	3.23	0.00
3.77	5.18	0.11	4.21	0.00
3.84	4.80	0.09	4.57	0.00
3.92	4.34	0.06	5.00	0.00
3.99	3.95	0.05	5.36	0.00
4.07	3.57	0.04	5.71	0.00
4.15	3.15	0.03	6.09	0.00
4.23	2.74	0.02	6.47	0.00
4.33	2.35	0.01	6.83	0.00
4.44	1.91	0.01	7.23	0.00
4.55	1.55	0.01	7.55	0.00
4.68	1.19	0.00	7.87	0.00
4.97	0.65	0.00	8.37	0.00
5.10	0.49	0.00	8.49	0.00
5.58	0.17	0.00	8.77	0.00
7.66	0.00	0.00	8.83	0.08
8.79	0.00	0.00	7.90	0.96
9.63	0.00	0.00	4.71	3.96
10.04	0.00	0.00	2.71	5.78
10.47	0.00	0.00	1.24	7.07
11.06	0.00	0.00	0.35	7.79

pH±0.05	b	2	3	4
3.32	6.97	0.41	1.99	0.00
3.55	6.10	0.21	2.94	0.00
3.75	5.09	0.11	3.93	0.00
3.84	4.64	0.08	4.37	0.00
3.91	4.24	0.06	4.75	0.00
3.99	3.81	0.05	5.15	0.00
4.08	3.38	0.04	5.55	0.00
4.17	2.94	0.02	5.96	0.00
4.26	2.53	0.02	6.33	0.00
4.40	1.97	0.01	6.86	0.00
4.53	1.56	0.01	7.23	0.00
4.61	1.33	0.00	7.43	0.00
4.88	0.76	0.00	7.96	0.00
5.17	0.40	0.00	8.27	0.00
5.41	0.24	0.00	8.40	0.00
6.33	0.03	0.00	8.57	0.00
8.58	0.00	0.00	7.97	0.59
8.91	0.00	0.00	7.36	1.16
9.56	0.00	0.00	4.89	3.45
9.91	0.00	0.00	3.14	5.02

pH±0.05	b	2	3	4
3.38	7.74	0.39	2.57	0.00
3.21	8.16	0.62	1.82	0.00
3.10	8.30	0.81	1.44	0.00
3.06	8.30	0.88	1.32	0.00
3.01	8.29	1.01	1.15	0.00
2.94	8.25	1.17	0.98	0.00
2.88	8.17	1.32	0.86	0.00
2.83	8.08	1.47	0.75	0.00
2.78	7.97	1.62	0.66	0.00
2.73	7.84	1.78	0.58	0.00
2.69	7.69	1.95	0.51	0.00
2.64	7.55	2.10	0.46	0.00
2.61	7.40	2.26	0.41	0.00
2.57	7.24	2.41	0.37	0.00
2.52	7.03	2.63	0.32	0.00
2.47	6.83	2.82	0.28	0.00
2.44	6.66	2.97	0.25	0.00
2.39	6.40	3.22	0.22	0.00
2.36	6.22	3.33	0.20	0.00
2.33	6.07	3.46	0.18	0.00
2.31	5.93	3.57	0.17	0.00
2.28	5.76	3.67	0.15	0.00
2.24	5.49	3.88	0.13	0.00
2.19	5.19	4.12	0.11	0.00

2.15	4.95	4.29	0.10	0.00
2.12	4.73	4.45	0.09	0.00
2.09	4.53	4.58	0.08	0.00
2.07	4.42	4.61	0.07	0.00
2.03	4.19	4.78	0.06	0.00
2.01	4.03	4.87	0.06	0.00
1.95	3.66	5.07	0.05	0.00
1.89	3.33	5.24	0.04	0.00
1.84	3.05	5.37	0.03	0.00
1.80	2.79	5.47	0.02	0.00
1.76	2.60	5.50	0.02	0.00
1.74	2.47	5.49	0.02	0.00

Apéndice 2 . Tabla de datos para el sistema H⁺ - V (V) – Ácido aspártico.

Experimento 1

Relación 2:1

Hs=0.01101M Bs=0.00656M Cs=0.01378M Ht=0.0998M Vo= 12.15mL
Eo=389.03 J=0.40

V _{КОН} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θc	θc*	error
0.12	170.4	3.69	0.75	0.90	0.15
0.22	175.4	3.60	0.80	0.94	0.13
0.32	182.9	3.47	0.86	1.00	0.14
0.42	188.3	3.38	0.91	1.04	0.13
0.82	193.2	3.30	1.14	1.09	-0.06
0.92	197.6	3.23	1.19	1.13	-0.07
1.02	201.6	3.16	1.25	1.17	-0.08
1.12	206.7	3.07	1.29	1.22	-0.08
1.22	211.7	2.99	1.34	1.27	-0.07
1.32	216.2	2.91	1.38	1.32	-0.06
1.42	221.8	2.82	1.41	1.39	-0.02
1.52	225.6	2.75	1.45	1.44	-0.01
1.62	229.0	2.69	1.49	1.49	0.00
1.72	230.5	2.67	1.54	1.51	-0.03
1.82	233.7	2.62	1.57	1.55	-0.02
1.91	239.0	2.53	1.58	1.63	0.05
2.01	242.3	2.47	1.60	1.68	0.08
2.51	249.9	2.34	1.79	1.80	0.01
3.01	257.0	2.22	1.94	1.90	-0.04
3.51	263.9	2.10	2.05	2.01	-0.04
4.01	270.5	1.99	2.10	2.10	0.00

V_{КОН}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θb	θb*	error
0.12	170.4	3.68	1.57	1.91	0.34
0.22	175.4	3.59	1.69	1.99	0.30
0.32	182.9	3.47	1.80	2.12	0.32
0.42	188.3	3.38	1.91	2.22	0.31
0.82	193.2	3.29	2.40	2.31	-0.09
0.92	197.6	3.22	2.51	2.40	-0.11
1.02	201.6	3.15	2.61	2.48	-0.14
1.12	206.7	3.06	2.71	2.59	-0.13
1.22	211.7	2.98	2.81	2.70	-0.11
1.32	216.2	2.90	2.90	2.80	-0.09
1.42	221.8	2.81	2.97	2.94	-0.03
1.52	225.6	2.74	3.05	3.04	-0.01
1.62	229.0	2.69	3.13	3.13	0.00
1.72	230.5	2.66	3.23	3.17	-0.06
1.82	233.7	2.61	3.30	3.26	-0.04
1.91	239.0	2.52	3.31	3.40	0.09
2.01	242.3	2.46	3.36	3.50	0.14
2.51	249.9	2.33	3.74	3.72	-0.03
3.01	257.0	2.21	4.06	3.92	-0.14
3.51	263.9	2.10	4.28	4.12	-0.16
4.01	270.5	1.99	4.38	4.31	-0.07

V_{КОН}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θbf	θbf*	error
0.12	170.4	3.66	-0.25	0.09	0.33
0.22	175.4	3.58	-0.19	0.10	0.30
0.32	182.9	3.45	-0.18	0.13	0.31
0.42	188.3	3.36	-0.13	0.16	0.29
0.82	193.2	3.27	0.29	0.19	-0.10
0.92	197.6	3.20	0.35	0.22	-0.13
1.02	201.6	3.13	0.41	0.25	-0.16
1.12	206.7	3.05	0.44	0.29	-0.15
1.22	211.7	2.96	0.47	0.34	-0.13
1.32	216.2	2.89	0.51	0.39	-0.12
1.42	221.8	2.79	0.50	0.45	-0.05
1.52	225.6	2.73	0.53	0.50	-0.03
1.62	229.0	2.67	0.57	0.54	-0.02
1.72	230.5	2.64	0.65	0.56	-0.08
1.82	233.7	2.59	0.67	0.61	-0.06
1.91	239.0	2.50	0.60	0.68	0.08
2.01	242.3	2.44	0.60	0.73	0.13
2.51	249.90	2.32	0.87	0.84	-0.03
3.01	257.00	2.20	1.06	0.95	-0.12
3.51	263.90	2.08	1.15	1.04	-0.11
4.01	270.50	1.97	1.12	1.11	-0.01

V_{кон}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θcf	θcf*	error
0.12	170.4	3.65	-0.26	0.07	0.34
0.22	175.4	3.57	-0.21	0.09	0.30
0.32	182.9	3.44	-0.19	0.11	0.31
0.42	188.3	3.35	-0.15	0.14	0.29
0.82	193.2	3.27	0.28	0.16	-0.11
0.92	197.6	3.19	0.33	0.19	-0.14
1.02	201.6	3.12	0.39	0.22	-0.17
1.12	206.7	3.04	0.42	0.26	-0.17
1.22	211.7	2.95	0.45	0.30	-0.15
1.32	216.2	2.88	0.49	0.35	-0.14
1.42	221.8	2.78	0.48	0.41	-0.07
1.52	225.6	2.72	0.51	0.46	-0.06
1.62	229.0	2.66	0.54	0.50	-0.04
1.72	230.5	2.64	0.62	0.52	-0.10
1.82	233.7	2.58	0.65	0.56	-0.09
1.91	239.0	2.49	0.58	0.64	0.06
2.01	242.3	2.44	0.58	0.69	0.12
2.51	249.9	2.31	0.85	0.82	-0.03
3.01	257.0	2.19	1.05	0.94	-0.11
3.51	263.9	2.07	1.14	1.06	-0.09
4.01	270.5	1.96	1.12	1.17	0.05

V_{кон}(mL)	E(mV)±0.2	E*(mV)±0.2	pH	error
0.12	170.4	156.5	3.85	-13.81
0.22	175.4	164.3	3.72	-11.08
0.32	182.9	171.4	3.60	-11.41
0.42	188.3	178.1	3.49	-10.11
0.82	193.2	200.5	3.11	7.36
0.92	197.6	205.1	3.03	7.54
1.02	201.6	209.3	2.96	7.77
1.12	206.7	213.2	2.89	6.59
1.22	211.7	216.9	2.83	5.25
1.32	216.2	220.3	2.77	4.16
1.42	221.8	223.5	2.72	1.76
1.52	225.6	226.5	2.67	0.97
1.62	229.0	229.4	2.62	0.40
1.72	230.5	232.0	2.57	1.58
1.82	233.7	234.6	2.53	0.92
1.91	239.0	236.7	2.49	-2.21
2.01	242.3	239.0	2.45	-3.21
2.51	249.9	249.0	2.28	-0.89
3.01	257.0	256.8	2.15	-0.14
3.51	263.9	263.1	2.04	-0.74
4.01	270.5	268.2	1.95	-2.21

pH±0.05	b	10	11	12
3.62	0.00	0.01	0.66	5.83
3.53	0.00	0.01	0.78	5.65
3.41	0.00	0.03	0.99	5.38
3.32	0.00	0.04	1.16	5.14
3.23	0.00	0.05	1.31	4.78
3.16	0.00	0.07	1.48	4.55
3.09	0.00	0.08	1.64	4.32
3.01	0.01	0.12	1.86	4.02
2.92	0.01	0.16	2.09	3.71
2.84	0.01	0.21	2.29	3.41
2.75	0.02	0.29	2.54	3.03
2.68	0.02	0.35	2.69	2.77
2.63	0.02	0.42	2.81	2.54
2.60	0.03	0.45	2.85	2.42
2.55	0.03	0.53	2.94	2.21
2.46	0.05	0.68	3.07	1.87
2.40	0.06	0.79	3.12	1.67
2.27	0.09	1.04	3.08	1.23
2.15	0.14	1.31	2.93	0.88
2.03	0.21	1.58	2.69	0.62
1.92	0.29	1.82	2.39	0.42

Experimento 2

Relación 2:1

Hs=0.01338M Bs=0.00639M Cs=0.01380M Ht=0.0998M Vo=12.46mL
Eo=392.15 J=0.45

V KOH (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θc	θc*	error
0.00	169.7	3.76	0.87	0.89	0.02
0.12	174.9	3.67	0.94	0.93	-0.01
0.22	180.6	3.57	0.99	0.97	-0.02
0.32	188.4	3.44	1.04	1.04	-0.01
0.42	192.9	3.37	1.10	1.08	-0.02
0.52	198.2	3.28	1.15	1.12	-0.02
0.62	205.2	3.16	1.19	1.19	0.00
0.72	209.7	3.08	1.24	1.23	0.00
0.82	212.9	3.03	1.29	1.27	-0.02
0.92	217.8	2.94	1.33	1.32	-0.01
1.02	220.0	2.91	1.38	1.35	-0.03

1.12	223.9	2.84	1.42	1.40	-0.02
1.22	228.8	2.76	1.45	1.46	0.01
1.32	233.5	2.68	1.48	1.52	0.04
1.52	238.5	2.59	1.56	1.59	0.03
1.62	240.0	2.57	1.60	1.61	0.01
1.72	243.5	2.51	1.63	1.67	0.04
1.82	244.5	2.49	1.67	1.68	0.01
1.91	245.7	2.47	1.71	1.70	-0.01
2.01	248.3	2.43	1.74	1.74	0.00
2.51	258.0	2.27	1.87	1.88	0.02
3.01	265.2	2.14	1.98	1.99	0.01
3.51	271.4	2.04	2.07	2.08	0.01
4.01	276.2	1.96	2.15	2.14	-0.01
4.50	280.0	1.89	2.23	2.19	-0.04

V _{KOH} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θb	θb*	error
0.00	169.7	3.75	1.88	1.94	0.06
0.12	174.9	3.66	2.02	2.03	0.00
0.22	180.6	3.57	2.14	2.12	-0.02
0.32	188.4	3.43	2.25	2.26	0.01
0.42	192.9	3.36	2.36	2.35	-0.01
0.52	198.2	3.27	2.47	2.45	-0.02
0.62	205.2	3.15	2.57	2.60	0.03
0.72	209.7	3.07	2.67	2.69	0.02
0.82	212.9	3.02	2.78	2.77	-0.01
0.92	217.8	2.94	2.87	2.88	0.02
1.02	220.0	2.90	2.97	2.94	-0.04
1.12	223.9	2.83	3.06	3.03	-0.03
1.22	228.8	2.75	3.13	3.16	0.03
1.32	233.5	2.67	3.19	3.29	0.10
1.52	238.5	2.59	3.36	3.43	0.07
1.62	240.0	2.56	3.45	3.47	0.02
1.72	243.5	2.50	3.50	3.57	0.07
1.82	244.5	2.49	3.60	3.60	0.00
1.91	245.7	2.47	3.68	3.64	-0.05
2.01	248.3	2.42	3.74	3.71	-0.02
2.51	258.0	2.26	4.01	4.00	-0.01
3.01	265.2	2.14	4.26	4.21	-0.05
3.51	271.4	2.03	4.44	4.39	-0.05
4.01	276.2	1.95	4.61	4.52	-0.08
4.50	280.0	1.89	4.77	4.63	-0.14

V_{КОН} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θbf	θbf*	error
0.00	169.7	3.74	0.02	0.07	0.06
0.12	174.9	3.65	0.09	0.09	0.00
0.22	180.6	3.55	0.13	0.11	-0.02
0.32	188.4	3.42	0.14	0.14	0.00
0.42	192.9	3.34	0.19	0.16	-0.03
0.52	198.2	3.26	0.23	0.20	-0.04
0.62	205.2	3.14	0.24	0.25	0.01
0.72	209.7	3.06	0.28	0.29	0.00
0.82	212.9	3.01	0.35	0.31	-0.03
0.92	217.8	2.92	0.37	0.36	-0.01
1.02	220.0	2.89	0.45	0.39	-0.06
1.12	223.9	2.82	0.49	0.43	-0.05
1.22	228.8	2.74	0.49	0.49	0.00
1.32	233.5	2.66	0.48	0.55	0.07
1.52	238.5	2.57	0.58	0.62	0.05
1.62	240.0	2.55	0.65	0.64	0.00
1.72	243.5	2.49	0.64	0.69	0.05
1.82	244.5	2.47	0.73	0.71	-0.02
1.91	245.7	2.45	0.79	0.73	-0.07
2.01	248.3	2.41	0.80	0.76	-0.04
2.51	258.0	2.24	0.92	0.91	-0.02
3.01	265.2	2.12	1.04	1.01	-0.03
3.51	271.4	2.02	1.10	1.08	-0.01
4.01	276.2	1.94	1.16	1.13	-0.03
4.50	280.0	1.87	1.23	1.17	-0.07

V_{КОН} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θcf	θcf*	error
0.00	169.7	3.74	-0.01	0.06	0.07
0.12	174.9	3.65	0.06	0.07	0.01
0.22	180.6	3.55	0.10	0.09	-0.01
0.32	188.4	3.42	0.11	0.12	0.01
0.42	192.9	3.34	0.16	0.14	-0.02
0.52	198.2	3.25	0.20	0.17	-0.04
0.62	205.2	3.14	0.21	0.21	0.00
0.72	209.7	3.06	0.25	0.25	-0.01
0.82	212.9	3.01	0.32	0.27	-0.04
0.92	217.8	2.92	0.34	0.32	-0.02
1.02	220.0	2.89	0.42	0.34	-0.08
1.12	223.9	2.82	0.46	0.38	-0.07
1.22	228.8	2.74	0.46	0.44	-0.02
1.32	233.5	2.66	0.45	0.50	0.05
1.52	238.5	2.57	0.55	0.57	0.03
1.62	240.0	2.55	0.62	0.59	-0.02
1.72	243.5	2.49	0.62	0.65	0.03
1.82	244.5	2.47	0.70	0.66	-0.04
1.91	245.7	2.45	0.77	0.68	-0.08
2.01	248.3	2.41	0.78	0.72	-0.06
2.51	258.0	2.24	0.91	0.88	-0.02
3.01	265.2	2.12	1.03	1.01	-0.03
3.51	271.4	2.02	1.11	1.11	0.00
4.01	276.2	1.94	1.19	1.19	0.00

4.50	280.0	1.87	1.29	1.25	-0.03
------	-------	------	------	------	-------

V _{KOH} (mL)	E(mV)±0.2	E*(mV)±0.2	pH	error
0.00	169.7	167.8	3.75	-1.88
0.12	174.9	176.2	3.61	1.31
0.22	180.6	182.7	3.50	2.12
0.32	188.4	188.8	3.40	0.43
0.42	192.9	194.5	3.30	1.64
0.52	198.2	199.8	3.21	1.65
0.62	205.2	204.7	3.13	-0.42
0.72	209.7	209.3	3.05	-0.34
0.82	212.9	213.6	2.98	0.70
0.92	217.8	217.5	2.91	-0.25
1.02	220.0	221.2	2.85	1.23
1.12	223.9	224.6	2.79	0.78
1.22	228.8	227.9	2.74	-0.88
1.32	233.5	230.9	2.69	-2.53
1.52	238.5	236.5	2.59	-1.91
1.62	240.0	239.1	2.55	-0.81
1.72	243.5	241.6	2.51	-1.85
1.82	244.5	244.0	2.47	-0.50
1.91	245.7	246.0	2.43	0.32
2.01	248.3	248.1	2.40	-0.13
2.51	258.0	257.5	2.24	-0.44
3.01	265.2	265.1	2.12	-0.06
3.51	271.4	271.3	2.02	-0.05
4.01	276.2	276.5	1.93	0.30
4.50	280.0	280.7	1.86	0.77

pH±0.05	b	10	11	12
3.72	0.00	0.01	0.53	5.86
3.63	0.00	0.01	0.63	5.69
3.53	0.00	0.01	0.76	5.51
3.40	0.00	0.02	0.97	5.23
3.33	0.00	0.03	1.11	5.03
3.24	0.00	0.05	1.30	4.78
3.12	0.00	0.08	1.58	4.43
3.04	0.00	0.10	1.77	4.16
2.99	0.01	0.12	1.91	3.96
2.91	0.01	0.17	2.13	3.65
2.87	0.01	0.19	2.22	3.49
2.80	0.01	0.24	2.38	3.23
2.72	0.02	0.31	2.59	2.90
2.64	0.02	0.40	2.77	2.59

2.56	0.03	0.51	2.91	2.24
2.53	0.03	0.55	2.94	2.13
2.47	0.04	0.64	3.02	1.91
2.46	0.04	0.67	3.02	1.84
2.44	0.05	0.70	3.03	1.76
2.39	0.06	0.78	3.05	1.61
2.23	0.10	1.12	3.01	1.09
2.11	0.15	1.39	2.83	0.78
2.01	0.21	1.62	2.59	0.56
1.93	0.27	1.77	2.37	0.43
1.87	0.33	1.87	2.16	0.34

Experimento 3

Relación 5:1

Hs=0.05190M Bs=0.00652M Cs=0.0330M Ht=0.0998M Vo=12.27mL
Eo=389.03 J=0.40

V _{KOH} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θc	θc*	error
0.00	183.9	3.46	1.47	1.47	0.00
0.12	185.7	3.43	1.50	1.49	-0.01
0.22	188.3	3.39	1.52	1.51	-0.01
0.42	192.6	3.32	1.57	1.56	-0.01
0.52	193.9	3.29	1.59	1.57	-0.02
0.62	197.6	3.23	1.61	1.61	-0.01
0.72	198.9	3.21	1.64	1.62	-0.02
0.82	202.3	3.15	1.66	1.66	0.00
0.92	204.7	3.11	1.68	1.68	0.00
1.02	207.2	3.07	1.70	1.71	0.01
1.12	209.3	3.03	1.72	1.73	0.01
1.22	211.6	3.00	1.75	1.76	0.01
1.32	214.0	2.96	1.77	1.78	0.02
1.52	218.9	2.87	1.81	1.84	0.03
1.72	222.9	2.80	1.85	1.89	0.04
1.82	224.6	2.78	1.87	1.91	0.04
1.91	226.6	2.74	1.89	1.93	0.04
2.01	228.3	2.71	1.90	1.95	0.05
2.51	230.9	2.67	2.02	1.98	-0.03
3.01	239.4	2.53	2.11	2.09	-0.02
3.51	246.9	2.40	2.18	2.19	0.00
4.01	253.3	2.29	2.26	2.27	0.01
4.50	258.8	2.20	2.32	2.33	0.01
5.00	263.7	2.12	2.38	2.39	0.01
5.50	267.7	2.05	2.43	2.43	-0.01
6.00	271.5	1.98	2.48	2.47	-0.01
6.50	274.6	1.93	2.53	2.50	-0.03
6.99	277.7	1.88	2.56	2.53	-0.04

V_{КОН}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θb	θb*	error
0.00	183.9	3.46	7.51	7.54	0.02
0.12	185.7	3.43	7.66	7.63	-0.03
0.22	188.3	3.38	7.78	7.76	-0.01
0.42	192.6	3.31	8.01	7.99	-0.03
0.52	193.9	3.29	8.13	8.05	-0.08
0.62	197.6	3.23	8.25	8.25	0.00
0.72	198.9	3.21	8.36	8.32	-0.05
0.82	202.3	3.15	8.47	8.50	0.02
0.92	204.7	3.11	8.59	8.62	0.04
1.02	207.2	3.07	8.70	8.76	0.06
1.12	209.3	3.03	8.81	8.88	0.07
1.22	211.6	2.99	8.92	9.00	0.09
1.32	214.0	2.95	9.02	9.14	0.11
1.52	218.9	2.87	9.23	9.42	0.19
1.72	222.9	2.80	9.44	9.65	0.22
1.82	224.6	2.77	9.54	9.75	0.21
1.91	226.6	2.74	9.63	9.87	0.25
2.01	228.3	2.71	9.73	9.98	0.25
2.51	230.9	2.66	10.30	10.13	-0.16
3.01	239.4	2.52	10.75	10.66	-0.09
3.51	246.9	2.39	11.15	11.12	-0.03
4.01	253.3	2.29	11.52	11.51	-0.01
4.50	258.8	2.19	11.84	11.82	-0.01
5.00	263.7	2.11	12.13	12.09	-0.03
5.50	267.7	2.04	12.41	12.30	-0.11
6.00	271.5	1.98	12.65	12.49	-0.16
6.50	274.6	1.93	12.89	12.64	-0.25
6.99	277.7	1.87	13.06	12.78	-0.28

V_{КОН}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θbf	θbf*	error
0.00	183.9	3.45	0.11	0.13	0.03
0.12	185.7	3.42	0.17	0.14	-0.03
0.22	188.3	3.37	0.17	0.15	-0.01
0.42	192.6	3.30	0.21	0.18	-0.03
0.52	193.9	3.28	0.27	0.19	-0.08
0.62	197.6	3.22	0.22	0.21	0.00
0.72	198.9	3.20	0.28	0.22	-0.05
0.82	202.3	3.14	0.23	0.25	0.01
0.92	204.7	3.10	0.24	0.27	0.03
1.02	207.2	3.06	0.24	0.29	0.05
1.12	209.3	3.02	0.25	0.31	0.06
1.22	211.6	2.98	0.26	0.33	0.07
1.32	214.0	2.94	0.25	0.35	0.10
1.52	218.9	2.86	0.23	0.41	0.17

1.72	222.9	2.79	0.25	0.45	0.20
1.82	224.6	2.76	0.28	0.48	0.20
1.91	226.6	2.73	0.27	0.50	0.23
2.01	228.3	2.70	0.29	0.52	0.23
2.51	230.9	2.65	0.74	0.56	-0.18
3.01	239.4	2.51	0.78	0.68	-0.10
3.51	246.9	2.38	0.83	0.79	-0.04
4.01	253.3	2.28	0.90	0.89	-0.01
4.50	258.8	2.18	0.98	0.98	-0.01
5.00	263.7	2.10	1.07	1.05	-0.02
5.50	267.7	2.03	1.20	1.11	-0.09
6.00	271.5	1.97	1.29	1.16	-0.12
6.50	274.6	1.92	1.41	1.20	-0.21
6.99	277.7	1.86	1.47	1.24	-0.22

V кон (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θcf	θcf*	error
0.00	183.9	3.44	0.08	0.11	0.03
0.12	185.7	3.41	0.14	0.12	-0.02
0.22	188.3	3.37	0.14	0.13	-0.01
0.42	192.6	3.30	0.18	0.15	-0.03
0.52	193.9	3.28	0.25	0.16	-0.08
0.62	197.6	3.21	0.19	0.18	-0.01
0.72	198.9	3.19	0.25	0.19	-0.06
0.82	202.3	3.13	0.21	0.21	0.01
0.92	204.7	3.09	0.21	0.23	0.02
1.02	207.2	3.05	0.21	0.25	0.04
1.12	209.3	3.02	0.23	0.27	0.04
1.22	211.6	2.98	0.23	0.29	0.06
1.32	214.0	2.94	0.23	0.31	0.08
1.52	218.9	2.85	0.21	0.36	0.16
1.72	222.9	2.79	0.23	0.41	0.18
1.82	224.6	2.76	0.25	0.43	0.18
1.91	226.6	2.72	0.24	0.45	0.21
2.01	228.3	2.69	0.26	0.47	0.21
2.51	230.9	2.65	0.71	0.51	-0.20
3.01	239.4	2.51	0.75	0.63	-0.12
3.51	246.9	2.38	0.80	0.75	-0.05
4.01	253.3	2.27	0.87	0.85	-0.02
4.50	258.8	2.18	0.95	0.95	-0.01
5.00	263.7	2.10	1.04	1.03	-0.01
5.50	267.7	2.03	1.17	1.10	-0.07
6.00	271.5	1.96	1.26	1.16	-0.09
6.50	274.6	1.91	1.39	1.22	-0.17
6.99	277.7	1.86	1.45	1.27	-0.18

V кон (mL)	E(mV)±0.2	E*(mV)±0.2	pH	error
0.00	183.9	184.2	3.43	0.31
0.12	185.7	186.9	3.38	1.28
0.22	188.3	189.2	3.35	0.97
0.42	192.6	193.8	3.27	1.20

0.52	193.9	196.0	3.23	2.12
0.62	197.6	198.2	3.19	0.62
0.72	198.9	200.3	3.16	1.49
0.82	202.3	202.5	3.12	0.22
0.92	204.7	204.6	3.09	-0.08
1.02	207.2	206.6	3.05	-0.51
1.12	209.3	208.7	3.02	-0.59
1.22	211.6	210.7	2.98	-0.90
1.32	214.0	212.6	2.95	-1.35
1.52	218.9	216.4	2.89	-2.47
1.72	222.9	220.0	2.83	-2.85
1.82	224.6	221.8	2.80	-2.79
1.91	226.6	223.3	2.77	-3.24
2.01	228.3	225.0	2.74	-3.25
2.51	230.9	233.0	2.61	2.13
3.01	239.4	240.2	2.48	0.89
3.51	246.9	246.9	2.37	0.03
4.01	253.3	252.9	2.27	-0.31
4.50	258.8	258.3	2.18	-0.42
5.00	263.7	263.3	2.09	-0.36
5.50	267.7	267.7	2.02	0.09
6.00	271.5	271.7	1.95	0.25
6.50	274.6	275.2	1.89	0.66
6.99	277.7	278.3	1.84	0.63

pH±0.05	b	10	11	12
3.44	0.00	0.02	0.95	5.55
3.41	0.00	0.03	1.00	5.43
3.36	0.00	0.03	1.08	5.30
3.29	0.00	0.04	1.22	5.05
3.27	0.00	0.04	1.26	4.96
3.21	0.00	0.06	1.39	4.76
3.18	0.00	0.06	1.44	4.66
3.13	0.00	0.08	1.57	4.47
3.09	0.00	0.09	1.66	4.31
3.04	0.00	0.10	1.77	4.15
3.01	0.00	0.12	1.85	4.01
2.97	0.00	0.13	1.94	3.85
2.93	0.00	0.15	2.04	3.69
2.85	0.00	0.20	2.25	3.35
2.78	0.00	0.25	2.40	3.06
2.75	0.00	0.28	2.46	2.94
2.72	0.01	0.31	2.53	2.80
2.69	0.01	0.34	2.59	2.68
2.64	0.01	0.38	2.60	2.43
2.50	0.01	0.56	2.79	1.87
2.37	0.02	0.77	2.85	1.43
2.26	0.03	0.97	2.81	1.10
2.17	0.04	1.16	2.72	0.86
2.09	0.05	1.34	2.58	0.67

2.02	0.06	1.47	2.43	0.54
1.96	0.08	1.60	2.27	0.44
1.90	0.09	1.69	2.12	0.36
1.85	0.11	1.77	1.98	0.30

Experimento 4

Relación 5:1

Hs=0.04850M Bs=0.00666M Cs=0.0330M Ht=0.0998M Vo=11.97mL
Eo=392.15 J=0.45

V KOH (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θc	θc*	error
0.00	184.2	3.51	1.37	1.43	0.07
0.12	184.4	3.51	1.40	1.44	0.04
0.22	184.8	3.50	1.42	1.44	0.02
0.42	186.0	3.48	1.47	1.45	-0.02
0.52	189.5	3.42	1.50	1.49	-0.01
0.62	192.0	3.38	1.52	1.51	-0.01
0.72	194.4	3.34	1.54	1.54	-0.01
0.82	196.6	3.30	1.57	1.56	-0.01
0.92	199.0	3.26	1.59	1.58	-0.01
1.02	202.0	3.21	1.61	1.61	0.00
1.12	205.6	3.15	1.64	1.65	0.01
1.22	207.1	3.12	1.66	1.67	0.01
1.32	209.3	3.08	1.68	1.69	0.01
1.52	213.7	3.01	1.73	1.74	0.01
1.72	217.5	2.95	1.77	1.78	0.01
1.82	220.5	2.90	1.79	1.81	0.02
1.91	222.5	2.86	1.81	1.84	0.02
2.01	224.4	2.83	1.83	1.86	0.03
2.51	233.3	2.68	1.93	1.97	0.03
3.01	241.4	2.54	2.03	2.07	0.04
3.51	247.7	2.44	2.12	2.15	0.03
4.01	253.0	2.35	2.21	2.22	0.01
4.50	258.1	2.26	2.28	2.28	-0.01
5.00	262.1	2.19	2.36	2.33	-0.04
5.50	266.4	2.12	2.43	2.38	-0.05
6.00	269.6	2.07	2.50	2.41	-0.09

V_{КОН} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θb	θb*	error
0.00	184.2	3.51	6.78	7.13	0.35
0.12	184.4	3.50	6.93	7.14	0.21
0.22	184.8	3.50	7.05	7.16	0.11
0.42	186.0	3.47	7.30	7.22	-0.08
0.52	189.5	3.42	7.41	7.39	-0.02
0.62	192.0	3.37	7.53	7.52	-0.02
0.72	194.4	3.33	7.65	7.64	-0.02
0.82	196.6	3.30	7.77	7.75	-0.02
0.92	199.0	3.26	7.89	7.87	-0.02
1.02	202.0	3.20	8.00	8.02	0.02
1.12	205.6	3.14	8.11	8.21	0.10
1.22	207.1	3.12	8.23	8.28	0.06
1.32	209.3	3.08	8.34	8.40	0.06
1.52	213.7	3.01	8.56	8.63	0.07
1.72	217.5	2.94	8.78	8.84	0.06
1.82	220.5	2.89	8.88	9.01	0.13
1.91	222.5	2.86	8.97	9.12	0.14
2.01	224.4	2.83	9.08	9.23	0.15
2.51	233.3	2.68	9.58	9.74	0.16
3.01	241.4	2.54	10.05	10.23	0.18
3.51	247.7	2.43	10.50	10.61	0.11
4.01	253.0	2.34	10.93	10.92	-0.01
4.50	258.1	2.26	11.31	11.22	-0.09
5.00	262.1	2.19	11.70	11.44	-0.26
5.50	266.4	2.12	12.03	11.67	-0.36
6.00	269.6	2.06	12.38	11.84	-0.54

V_{КОН} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θbf	θbf*	error
0.00	184.2	3.49	-0.23	0.12	0.36
0.12	184.4	3.49	-0.09	0.12	0.22
0.22	184.8	3.48	0.01	0.12	0.11
0.42	186.0	3.46	0.21	0.13	-0.08
0.52	189.5	3.40	0.17	0.15	-0.02
0.62	192.0	3.36	0.18	0.16	-0.02
0.72	194.4	3.32	0.19	0.17	-0.02
0.82	196.6	3.28	0.21	0.19	-0.03
0.92	199.0	3.24	0.22	0.20	-0.02
1.02	202.0	3.19	0.21	0.22	0.02
1.12	205.6	3.13	0.16	0.25	0.09
1.22	207.1	3.10	0.21	0.26	0.05
1.32	209.3	3.07	0.23	0.28	0.05
1.52	213.7	2.99	0.26	0.32	0.06
1.72	217.5	2.93	0.31	0.36	0.05
1.82	220.5	2.88	0.28	0.39	0.11
1.91	222.5	2.84	0.28	0.42	0.13
2.01	224.4	2.81	0.30	0.44	0.13
2.51	233.3	2.66	0.40	0.55	0.15
3.01	241.4	2.52	0.49	0.67	0.17
3.51	247.7	2.42	0.66	0.76	0.10

4.01	253.0	2.33	0.85	0.84	-0.01
4.50	258.1	2.24	1.01	0.92	-0.09
5.00	262.1	2.17	1.23	0.98	-0.25
5.50	266.4	2.10	1.38	1.05	-0.33
6.00	269.6	2.05	1.60	1.09	-0.50

V _{KOH} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θcf	θcf*	error
0.00	184.2	3.48	-0.26	0.10	0.36
0.12	184.4	3.48	-0.12	0.10	0.22
0.22	184.8	3.47	-0.01	0.11	0.12
0.42	186.0	3.45	0.18	0.11	-0.07
0.52	189.5	3.39	0.14	0.13	-0.02
0.62	192.0	3.35	0.15	0.14	-0.02
0.72	194.4	3.31	0.17	0.15	-0.02
0.82	196.6	3.27	0.19	0.16	-0.03
0.92	199.0	3.23	0.20	0.18	-0.02
1.02	202.0	3.18	0.18	0.19	0.01
1.12	205.6	3.12	0.14	0.22	0.08
1.22	207.1	3.10	0.19	0.23	0.04
1.32	209.3	3.06	0.20	0.25	0.04
1.52	213.7	2.98	0.23	0.29	0.05
1.72	217.5	2.92	0.29	0.32	0.03
1.82	220.5	2.87	0.25	0.35	0.10
1.91	222.5	2.84	0.26	0.37	0.12
2.01	224.4	2.80	0.27	0.40	0.12
2.51	233.3	2.65	0.37	0.51	0.14
3.01	241.4	2.52	0.46	0.62	0.16
3.51	247.7	2.41	0.62	0.72	0.10
4.01	253.0	2.32	0.81	0.81	-0.01
4.50	258.1	2.23	0.97	0.89	-0.07
5.00	262.1	2.17	1.19	0.96	-0.23
5.50	266.4	2.09	1.34	1.03	-0.30
6.00	269.6	2.04	1.56	1.09	-0.47

V _{KOH} (mL)	E(mV)±0.2	E*(mV)±0.2	pH	error
0.00	184.2	178.3	3.58	-5.87
0.12	184.4	181.2	3.53	-3.13
0.22	184.8	183.7	3.49	-1.10
0.42	186.0	188.5	3.41	2.51
0.52	189.5	190.8	3.36	1.39
0.62	192.0	193.2	3.33	1.24
0.72	194.4	195.5	3.29	1.17
0.82	196.6	197.8	3.25	1.28
0.92	199.0	200.1	3.21	1.16
1.02	202.0	202.4	3.17	0.40
1.12	205.6	204.6	3.13	-1.00
1.22	207.1	206.7	3.10	-0.33
1.32	209.3	208.9	3.06	-0.40
1.52	213.7	213.0	2.99	-0.67
1.72	217.5	216.9	2.92	-0.51

1.82	220.5	218.9	2.89	-1.60
1.91	222.5	220.5	2.86	-1.91
2.01	224.4	222.4	2.83	-1.97
2.51	233.3	231.0	2.68	-2.27
3.01	241.4	238.7	2.55	-2.63
3.51	247.7	245.7	2.43	-1.93
4.01	253.0	252.1	2.32	-0.90
4.50	258.1	257.7	2.22	-0.40
5.00	262.1	262.8	2.13	0.71
5.50	266.4	267.3	2.05	0.95
6.00	269.6	271.3	1.98	1.74

pH±0.05	b	10	11	12
3.48	0.00	0.02	0.90	5.75
3.48	0.00	0.02	0.89	5.68
3.47	0.00	0.02	0.90	5.62
3.45	0.00	0.02	0.92	5.50
3.39	0.00	0.03	1.02	5.33
3.35	0.00	0.03	1.10	5.20
3.31	0.00	0.04	1.18	5.07
3.27	0.00	0.04	1.25	4.94
3.23	0.00	0.05	1.33	4.80
3.18	0.00	0.06	1.45	4.63
3.12	0.00	0.08	1.59	4.42
3.09	0.00	0.09	1.64	4.32
3.05	0.00	0.10	1.73	4.17
2.98	0.00	0.13	1.91	3.87
2.91	0.00	0.16	2.06	3.60
2.86	0.00	0.19	2.19	3.40
2.83	0.00	0.21	2.27	3.26
2.80	0.00	0.24	2.34	3.12
2.65	0.01	0.38	2.64	2.49
2.51	0.01	0.56	2.82	1.94
2.40	0.02	0.73	2.87	1.54
2.31	0.02	0.89	2.85	1.24
2.22	0.03	1.05	2.77	0.98
2.15	0.04	1.19	2.66	0.81
2.08	0.05	1.34	2.53	0.65
2.02	0.06	1.44	2.40	0.54

Experimento 5

Relacion 10:1

Hs=0.12760M Bs=0.0066M Cs= 0.06840M Ht=0.09980M Vo= 11.97mL
Eo=383.83 J=0.40

V_{KOH}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θcf	θcf*	error
0.00	192.2	3.24	1.83	1.77	-0.06
0.12	194.1	3.21	1.85	1.79	-0.06
0.22	195.5	3.19	1.86	1.81	-0.05
0.32	197.0	3.16	1.87	1.82	-0.05
0.42	198.4	3.14	1.88	1.84	-0.04
0.52	199.8	3.12	1.89	1.85	-0.04
0.62	201.2	3.09	1.90	1.87	-0.04
0.72	202.6	3.07	1.92	1.88	-0.03
0.82	203.9	3.05	1.93	1.90	-0.03
0.92	205.7	3.02	1.94	1.92	-0.02
1.02	206.3	3.01	1.95	1.92	-0.03
1.12	208.1	2.97	1.96	1.94	-0.02
1.22	209.4	2.95	1.97	1.96	-0.02
1.32	210.7	2.93	1.98	1.97	-0.01
1.42	211.9	2.91	1.99	1.98	-0.01
1.52	212.7	2.90	2.01	1.99	-0.01
1.62	213.9	2.88	2.02	2.01	-0.01
1.72	215.6	2.85	2.03	2.03	0.00
1.82	216.7	2.83	2.04	2.04	0.00
1.91	217.9	2.81	2.05	2.05	0.01
2.01	219.0	2.79	2.06	2.07	0.01
2.51	224.6	2.70	2.11	2.13	0.02
3.01	229.9	2.61	2.16	2.20	0.03
3.51	234.4	2.53	2.21	2.25	0.04
4.01	239.2	2.45	2.26	2.31	0.05
4.50	242.8	2.39	2.31	2.35	0.04
5.00	247.0	2.32	2.35	2.40	0.05
5.50	250.7	2.25	2.39	2.44	0.05
6.00	252.6	2.22	2.44	2.46	0.02
6.50	256.0	2.17	2.48	2.50	0.02
6.99	259.5	2.11	2.51	2.53	0.02
7.49	262.7	2.05	2.54	2.56	0.02
7.99	265.4	2.01	2.57	2.59	0.01
8.49	268.0	1.96	2.60	2.61	0.01
8.99	270.3	1.92	2.63	2.63	0.00
9.48	272.6	1.88	2.65	2.65	-0.01
9.98	275.1	1.84	2.67	2.67	0.00

V_{KOH}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θb	θb*	error
0.00	192.2	3.24	18.83	18.23	-0.60
0.12	194.1	3.21	18.97	18.43	-0.53
0.22	195.5	3.19	19.09	18.59	-0.50

0.32	197.0	3.16	19.21	18.75	-0.45
0.42	198.4	3.14	19.32	18.90	-0.42
0.52	199.8	3.11	19.44	19.06	-0.38
0.62	201.2	3.09	19.56	19.21	-0.35
0.72	202.6	3.07	19.68	19.37	-0.31
0.82	203.9	3.04	19.79	19.51	-0.28
0.92	205.7	3.01	19.91	19.71	-0.19
1.02	206.3	3.00	20.03	19.78	-0.25
1.12	208.1	2.97	20.14	19.98	-0.16
1.22	209.4	2.95	20.25	20.13	-0.12
1.32	210.7	2.93	20.37	20.28	-0.09
1.42	211.9	2.91	20.48	20.42	-0.07
1.52	212.7	2.89	20.60	20.51	-0.09
1.62	213.9	2.87	20.71	20.65	-0.07
1.72	215.6	2.85	20.82	20.84	0.02
1.82	216.7	2.83	20.93	20.97	0.04
1.91	217.9	2.81	21.03	21.11	0.08
2.01	219.0	2.79	21.14	21.24	0.10
2.51	224.6	2.69	21.69	21.91	0.22
3.01	229.9	2.60	22.21	22.55	0.33
3.51	234.4	2.53	22.73	23.09	0.36
4.01	239.2	2.45	23.21	23.66	0.45
4.50	242.8	2.39	23.69	24.09	0.40
5.00	247.0	2.31	24.14	24.58	0.44
5.50	250.7	2.25	24.57	24.99	0.42
6.00	252.6	2.22	25.06	25.20	0.14
6.50	256.0	2.16	25.45	25.56	0.11
6.99	259.5	2.10	25.78	25.92	0.13
7.49	262.7	2.05	26.11	26.23	0.12
7.99	265.4	2.00	26.43	26.48	0.05
8.49	268.0	1.96	26.72	26.71	-0.01
8.99	270.3	1.92	27.01	26.90	-0.10
9.48	272.6	1.88	27.24	27.09	-0.15
9.98	275.1	1.84	27.42	27.28	-0.13

V кон (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θbf	θbf*	error
0.00	192.2	3.24	0.78	0.20	-0.58
0.12	194.1	3.21	0.73	0.22	-0.52
0.22	195.5	3.19	0.71	0.23	-0.48
0.32	197.0	3.16	0.68	0.24	-0.44
0.42	198.4	3.14	0.65	0.25	-0.40
0.52	199.8	3.11	0.63	0.26	-0.37
0.62	201.2	3.09	0.61	0.27	-0.33
0.72	202.6	3.07	0.58	0.28	-0.30
0.82	203.9	3.04	0.57	0.29	-0.27
0.92	205.7	3.01	0.50	0.31	-0.18
1.02	206.3	3.00	0.56	0.32	-0.24
1.12	208.1	2.97	0.48	0.33	-0.15
1.22	209.4	2.95	0.47	0.35	-0.12
1.32	210.7	2.93	0.45	0.36	-0.08
1.42	211.9	2.91	0.44	0.37	-0.06

1.52	212.7	2.89	0.47	0.38	-0.09
1.62	213.9	2.87	0.46	0.40	-0.06
1.72	215.6	2.85	0.39	0.42	0.02
1.82	216.7	2.83	0.39	0.43	0.04
1.91	217.9	2.81	0.36	0.44	0.08
2.01	219.0	2.79	0.36	0.46	0.10
2.51	224.6	2.69	0.31	0.53	0.22
3.01	229.9	2.60	0.27	0.60	0.33
3.51	234.4	2.53	0.31	0.66	0.35
4.01	239.2	2.45	0.29	0.74	0.44
4.50	242.8	2.39	0.40	0.79	0.39
5.00	247.0	2.31	0.43	0.86	0.43
5.50	250.7	2.25	0.50	0.92	0.41
6.00	252.6	2.22	0.82	0.95	0.13
6.50	256.0	2.16	0.90	1.00	0.10
6.99	259.5	2.10	0.93	1.05	0.13
7.49	262.7	2.05	0.98	1.10	0.12
7.99	265.4	2.00	1.09	1.14	0.05
8.49	268.0	1.96	1.19	1.18	-0.01
8.99	270.3	1.92	1.31	1.22	-0.10
9.48	272.6	1.88	1.39	1.25	-0.15
9.98	275.1	1.84	1.41	1.28	-0.12

V _{KOH} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θcf	θcf*	error
0.00	192.2	3.24	0.74	0.17	-0.56
0.12	194.1	3.21	0.69	0.18	-0.50
0.22	195.5	3.19	0.66	0.19	-0.47
0.32	197.0	3.16	0.63	0.20	-0.43
0.42	198.4	3.14	0.61	0.21	-0.40
0.52	199.8	3.12	0.58	0.22	-0.36
0.62	201.2	3.09	0.56	0.23	-0.33
0.72	202.6	3.07	0.53	0.24	-0.29
0.82	203.9	3.05	0.52	0.25	-0.27
0.92	205.7	3.02	0.45	0.27	-0.18
1.02	206.3	3.01	0.51	0.27	-0.24
1.12	208.1	2.97	0.44	0.29	-0.15
1.22	209.4	2.95	0.42	0.30	-0.12
1.32	210.7	2.93	0.40	0.32	-0.09
1.42	211.9	2.91	0.39	0.33	-0.06
1.52	212.7	2.90	0.43	0.34	-0.09
1.62	213.9	2.88	0.42	0.35	-0.07
1.72	215.6	2.85	0.35	0.37	0.02
1.82	216.7	2.83	0.34	0.38	0.03
1.91	217.9	2.81	0.32	0.39	0.07
2.01	219.0	2.79	0.31	0.40	0.09
2.51	224.6	2.70	0.27	0.47	0.21
3.01	229.9	2.61	0.23	0.54	0.31
3.51	234.4	2.53	0.27	0.61	0.34
4.01	239.2	2.45	0.25	0.68	0.43
4.50	242.8	2.39	0.36	0.74	0.38
5.00	247.0	2.32	0.39	0.81	0.42

5.50	250.7	2.25	0.46	0.87	0.41
6.00	252.6	2.22	0.78	0.90	0.12
6.50	256.0	2.17	0.86	0.96	0.10
6.99	259.5	2.11	0.89	1.02	0.13
7.49	262.7	2.05	0.95	1.08	0.12
7.99	265.4	2.01	1.07	1.12	0.05
8.49	268.0	1.96	1.17	1.17	0.00
8.99	270.3	1.92	1.30	1.20	-0.09
9.48	272.6	1.88	1.38	1.24	-0.14
V кон (mL)	E(mV)±0.2	E*(mV)±0.2	pH	error	
0.00	192.2	196.7	3.17	4.56	
0.12	194.1	198.0	3.15	3.98	
0.22	195.5	199.1	3.13	3.67	
0.32	197.0	200.2	3.11	3.26	
0.42	198.4	201.3	3.09	2.94	
0.52	199.8	202.4	3.07	2.62	
0.62	201.2	203.4	3.06	2.29	
0.72	202.6	204.5	3.04	1.96	
0.82	203.9	205.6	3.02	1.72	
0.92	205.7	206.6	3.00	0.97	
1.02	206.3	207.7	2.99	1.41	
1.12	208.1	208.7	2.97	0.65	
1.22	209.4	209.7	2.95	0.39	
1.32	210.7	210.8	2.93	0.11	
1.42	211.9	211.8	2.92	-0.07	
1.52	212.7	212.8	2.90	0.14	
1.62	213.9	213.8	2.88	-0.06	
1.72	215.6	214.8	2.87	-0.76	
1.82	216.7	215.8	2.85	-0.87	
1.91	217.9	216.7	2.83	-1.19	
2.01	219.0	217.6	2.82	-1.32	
2.51	224.6	222.4	2.74	-2.15	
3.01	229.9	227.0	2.66	-2.86	
3.51	234.4	231.4	2.59	-2.92	
4.01	239.2	235.7	2.51	-3.42	
4.50	242.8	239.8	2.45	-2.92	
5.00	247.0	243.9	2.38	-3.07	
5.50	250.7	247.8	2.31	-2.83	
6.00	252.6	251.7	2.25	-0.90	
6.50	256.0	255.3	2.19	-0.61	
6.99	259.5	258.8	2.13	-0.62	
7.49	262.7	262.2	2.07	-0.42	
7.99	265.4	265.5	2.02	0.12	
8.49	268.0	268.5	1.97	0.59	
8.99	270.3	271.4	1.92	1.18	
9.48	272.6	274.1	1.88	1.53	
9.98	275.1	276.6	1.84	1.57	

pH±0.05	b	10	11	12
3.25	0.00	0.05	1.39	5.22
3.21	0.00	0.06	1.46	5.08
3.19	0.00	0.06	1.51	4.97
3.16	0.00	0.07	1.56	4.86
3.14	0.00	0.07	1.61	4.75
3.12	0.00	0.08	1.66	4.64
3.09	0.00	0.09	1.71	4.53
3.07	0.00	0.10	1.77	4.42
3.05	0.00	0.10	1.81	4.32
3.02	0.00	0.12	1.89	4.18
3.01	0.00	0.12	1.90	4.12
2.98	0.00	0.13	1.97	3.99
2.96	0.00	0.14	2.02	3.88
2.93	0.00	0.15	2.07	3.78
2.91	0.00	0.16	2.11	3.68
2.90	0.00	0.17	2.13	3.61
2.88	0.00	0.18	2.17	3.51
2.85	0.00	0.20	2.24	3.38
2.83	0.00	0.21	2.27	3.30
2.81	0.00	0.23	2.31	3.20
2.79	0.00	0.24	2.35	3.11
2.70	0.00	0.32	2.51	2.68
2.61	0.00	0.41	2.63	2.28
2.53	0.00	0.50	2.69	1.96
2.45	0.01	0.61	2.72	1.65
2.39	0.01	0.70	2.71	1.43
2.32	0.01	0.81	2.68	1.20
2.26	0.01	0.91	2.62	1.02
2.23	0.01	0.95	2.55	0.92
2.17	0.02	1.05	2.47	0.78
2.11	0.02	1.16	2.37	0.66
2.06	0.02	1.25	2.27	0.56
2.02	0.03	1.32	2.16	0.48
1.97	0.03	1.39	2.06	0.41
1.94	0.04	1.45	1.96	0.36
1.90	0.04	1.50	1.86	0.31
1.86	0.05	1.56	1.76	0.27

Experimento 6

Relación 10:1

Hs=0.11630M Bs=0.00647M Cs=0.06500M Ht=0.09980M Vo=12.32mL
Eo=387.49 J=0.45

V_{KOH}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θc	θc*	error
0.00	191.5	3.32	1.75	1.72	-0.03
0.32	193.0	3.29	1.79	1.74	-0.05
0.42	194.4	3.27	1.80	1.75	-0.05
0.52	195.8	3.24	1.81	1.77	-0.05
0.62	197.7	3.21	1.82	1.79	-0.04
0.72	199.1	3.19	1.84	1.80	-0.03
0.82	200.5	3.16	1.85	1.82	-0.03
0.92	201.9	3.14	1.86	1.83	-0.03
1.02	203.2	3.12	1.87	1.85	-0.03
1.12	204.5	3.10	1.88	1.86	-0.02
1.22	205.9	3.07	1.89	1.87	-0.02
1.32	207.1	3.05	1.91	1.89	-0.02
1.42	208.4	3.03	1.92	1.90	-0.02
1.52	209.6	3.01	1.93	1.92	-0.01
1.62	210.9	2.99	1.94	1.93	-0.01
1.72	212.7	2.96	1.95	1.95	0.00
1.82	213.3	2.95	1.96	1.96	-0.01
1.91	214.5	2.93	1.97	1.97	0.00
2.01	216.2	2.90	1.98	1.99	0.00
2.51	222.0	2.80	2.04	2.05	0.01
3.01	227.5	2.71	2.09	2.12	0.03
3.51	232.5	2.62	2.15	2.18	0.03
4.01	237.3	2.54	2.20	2.24	0.04
4.50	241.5	2.47	2.25	2.29	0.04
5.00	245.9	2.40	2.29	2.34	0.05
5.50	249.8	2.33	2.34	2.39	0.05
6.00	251.9	2.30	2.39	2.41	0.02
6.50	255.7	2.23	2.43	2.45	0.02
6.99	258.9	2.18	2.47	2.49	0.02
7.49	262.0	2.13	2.50	2.52	0.01
7.99	265.1	2.07	2.54	2.55	0.01
8.49	267.6	2.03	2.57	2.57	0.00
8.99	270.3	1.98	2.60	2.60	0.00
9.98	274.5	1.91	2.66	2.63	-0.03

V_{KOH}(mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θb	θb*	error
0.00	191.5	3.31	17.57	17.33	-0.24
0.32	193.0	3.29	17.97	17.49	-0.48
0.42	194.4	3.27	18.09	17.64	-0.45
0.52	195.8	3.24	18.21	17.79	-0.42
0.62	197.7	3.21	18.32	17.99	-0.33

0.72	199.1	3.19	18.44	18.14	-0.30
0.82	200.5	3.16	18.56	18.29	-0.27
0.92	201.9	3.14	18.68	18.44	-0.24
1.02	203.2	3.12	18.80	18.58	-0.22
1.12	204.5	3.09	18.91	18.72	-0.19
1.22	205.9	3.07	19.03	18.87	-0.16
1.32	207.1	3.05	19.15	19.00	-0.15
1.42	208.4	3.03	19.26	19.14	-0.12
1.52	209.6	3.01	19.38	19.27	-0.11
1.62	210.9	2.99	19.50	19.42	-0.08
1.72	212.7	2.96	19.61	19.62	0.01
1.82	213.3	2.95	19.73	19.68	-0.04
1.91	214.5	2.93	19.83	19.82	-0.01
2.01	216.2	2.90	19.94	20.01	0.07
2.51	222.0	2.80	20.49	20.67	0.17
3.01	227.5	2.71	21.04	21.31	0.27
3.51	232.5	2.62	21.57	21.89	0.33
4.01	237.3	2.54	22.08	22.46	0.38
4.50	241.5	2.47	22.56	22.96	0.39
5.00	245.9	2.39	23.03	23.47	0.44
5.50	249.8	2.33	23.48	23.91	0.43
6.00	251.9	2.29	23.99	24.14	0.16
6.50	255.7	2.23	24.39	24.56	0.17
6.99	258.9	2.17	24.78	24.89	0.11
7.49	262.0	2.12	25.15	25.21	0.06
7.99	265.1	2.07	25.48	25.51	0.03
8.49	267.6	2.03	25.83	25.74	-0.09
8.99	270.3	1.98	26.11	25.98	-0.14
9.98	274.5	1.91	26.71	26.33	-0.37

V _{КОН} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θbf	θbf*	error
0.00	191.5	3.31	0.40	0.18	-0.22
0.32	193.0	3.29	0.64	0.18	-0.46
0.42	194.4	3.26	0.62	0.19	-0.43
0.52	195.8	3.24	0.60	0.20	-0.40
0.62	197.7	3.21	0.53	0.22	-0.32
0.72	199.1	3.19	0.52	0.23	-0.29
0.82	200.5	3.16	0.50	0.24	-0.26
0.92	201.9	3.14	0.48	0.25	-0.23
1.02	203.2	3.12	0.47	0.26	-0.21
1.12	204.5	3.09	0.45	0.27	-0.19

1.22	205.9	3.07	0.43	0.28	-0.15
1.32	207.1	3.05	0.43	0.29	-0.14
1.42	208.4	3.03	0.42	0.30	-0.12
1.52	209.6	3.01	0.42	0.31	-0.10
1.62	210.9	2.99	0.40	0.33	-0.07
1.72	212.7	2.96	0.33	0.34	0.01
1.82	213.3	2.95	0.39	0.35	-0.04
1.91	214.5	2.92	0.37	0.36	-0.01
2.01	216.2	2.90	0.31	0.38	0.07
2.51	222.0	2.80	0.28	0.45	0.17
3.01	227.5	2.70	0.26	0.52	0.26
3.51	232.5	2.62	0.27	0.59	0.32
4.01	237.3	2.54	0.28	0.65	0.37
4.50	241.5	2.47	0.34	0.72	0.38
5.00	245.9	2.39	0.36	0.78	0.42
5.50	249.8	2.33	0.43	0.84	0.42
6.00	251.9	2.29	0.73	0.88	0.15
6.50	255.7	2.23	0.78	0.94	0.16
6.99	258.9	2.17	0.88	0.99	0.11
7.49	262.0	2.12	0.98	1.04	0.05
7.99	265.1	2.07	1.06	1.08	0.02
8.49	267.6	2.03	1.21	1.12	-0.09
8.99	270.3	1.98	1.30	1.16	-0.14

V _{кон} (mL)	E(mV)±0.2	pH±0.05	θcf	θcf*	error
0.00	191.5	3.32	0.35	0.15	-0.21
0.32	193.0	3.29	0.60	0.16	-0.44
0.42	194.4	3.27	0.58	0.16	-0.42
0.52	195.8	3.24	0.56	0.17	-0.39
0.62	197.7	3.21	0.49	0.18	-0.31
0.72	199.1	3.19	0.47	0.19	-0.28
0.82	200.5	3.16	0.45	0.20	-0.25
0.92	201.9	3.14	0.43	0.21	-0.22
1.02	203.2	3.12	0.42	0.22	-0.20
1.12	204.5	3.10	0.41	0.23	-0.18
1.22	205.9	3.07	0.39	0.24	-0.15
1.32	207.1	3.05	0.39	0.25	-0.14
1.42	208.4	3.03	0.38	0.26	-0.11
1.52	209.6	3.01	0.37	0.27	-0.10
1.62	210.9	2.99	0.36	0.28	-0.07
1.72	212.7	2.96	0.29	0.30	0.01
1.82	213.3	2.95	0.35	0.31	-0.04
1.91	214.5	2.93	0.33	0.32	-0.01
2.01	216.2	2.90	0.27	0.33	0.07
2.51	222.0	2.80	0.24	0.40	0.16
3.01	227.5	2.71	0.21	0.46	0.25
3.51	232.5	2.62	0.23	0.53	0.31
4.01	237.3	2.54	0.24	0.60	0.36

4.50	241.5	2.47	0.30	0.66	0.37
5.00	245.9	2.40	0.32	0.73	0.41
5.50	249.8	2.33	0.39	0.80	0.41
6.00	251.9	2.29	0.69	0.83	0.14
6.50	255.7	2.23	0.74	0.90	0.15
6.99	258.9	2.18	0.84	0.95	0.11
7.49	262.0	2.12	0.95	1.00	0.05
7.99	265.1	2.07	1.03	1.06	0.02
8.49	267.6	2.03	1.18	1.10	-0.09
8.99	270.3	1.98	1.27	1.14	-0.13
9.98	274.5	1.91	1.58	1.21	-0.37

V KOH (mL)	E(mV)±0.2	E*(mV)±0.2	pH	error
0.00	191.5	193.0	3.29	1.57
0.32	193.0	196.7	3.23	3.72
0.42	194.4	197.8	3.21	3.45
0.52	195.8	198.9	3.19	3.18
0.62	197.7	200.1	3.17	2.40
0.72	199.1	201.2	3.15	2.12
0.82	200.5	202.3	3.13	1.84
0.92	201.9	203.4	3.12	1.55
1.02	203.2	204.5	3.10	1.35
1.12	204.5	205.6	3.08	1.15
1.22	205.9	206.7	3.06	0.84
1.32	207.1	207.8	3.04	0.73
1.42	208.4	208.9	3.02	0.51
1.52	209.6	209.9	3.01	0.38
1.62	210.9	211.0	2.99	0.15
1.72	212.7	212.1	2.97	-0.60
1.82	213.3	213.1	2.95	-0.15
1.91	214.5	214.0	2.94	-0.41
2.01	216.2	215.1	2.92	-1.07
2.51	222.0	220.1	2.83	-1.81
3.01	227.5	225.0	2.75	-2.45
3.51	232.5	229.7	2.67	-2.77
4.01	237.3	234.2	2.60	-3.05
4.50	241.5	238.5	2.53	-2.98
5.00	245.9	242.7	2.46	-3.15
5.50	249.8	246.8	2.39	-2.96
6.00	251.9	250.8	2.32	-1.09
6.50	255.7	254.6	2.26	-1.06
6.99	258.9	258.2	2.20	-0.63
7.49	262.0	261.8	2.14	-0.18

7.99	265.1	265.2	2.08	0.12
8.49	267.6	268.4	2.03	0.84
8.99	270.3	271.4	1.98	1.19
9.98	274.5	276.9	1.89	2.49

pH±0.05	b	10	11	12
3.32	0.00	0.04	1.19	5.25
3.29	0.00	0.04	1.21	5.05
3.27	0.00	0.04	1.26	4.96
3.24	0.00	0.05	1.30	4.86
3.21	0.00	0.05	1.37	4.74
3.19	0.00	0.06	1.41	4.64
3.16	0.00	0.06	1.46	4.54
3.14	0.00	0.07	1.51	4.44
3.12	0.00	0.08	1.55	4.35
3.10	0.00	0.08	1.60	4.25
3.07	0.00	0.09	1.65	4.15
3.05	0.00	0.10	1.69	4.06
3.03	0.00	0.10	1.73	3.97
3.01	0.00	0.11	1.77	3.88
2.99	0.00	0.12	1.82	3.78
2.96	0.00	0.13	1.89	3.66
2.95	0.00	0.14	1.90	3.60
2.93	0.00	0.15	1.94	3.51
2.90	0.00	0.16	2.01	3.40
2.80	0.00	0.22	2.19	2.96
2.71	0.00	0.29	2.35	2.56
2.63	0.00	0.37	2.46	2.21
2.54	0.00	0.46	2.53	1.89
2.47	0.01	0.55	2.56	1.63
2.40	0.01	0.65	2.57	1.38
2.33	0.01	0.75	2.55	1.17
2.30	0.01	0.79	2.49	1.06
2.24	0.01	0.90	2.43	0.89
2.18	0.02	0.99	2.36	0.77
2.13	0.02	1.07	2.28	0.66
2.08	0.02	1.16	2.19	0.56
2.04	0.03	1.22	2.10	0.49
1.99	0.03	1.29	2.00	0.42
1.92	0.04	1.38	1.83	0.33

