



## ELABORACIÓN DE UN SIMULADOR PARA VALORACIONES POTENCIOMÉTRICAS DE UN AMINOÁCIDO

**Juan Ramírez Balderas**

*Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología del Instituto Politécnico Nacional  
jramirezb@ipn.mx*

**Teresa Jaens Contreras**

*Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología del Instituto Politécnico Nacional  
jaensmayte79@gmail.com*

**Sandra Vázquez Romero**

*Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología del Instituto Politécnico Nacional  
sandycic@hotmail.com*

### Resumen

*En este trabajo, se propone la elaboración de un simulador de valoraciones potenciométricas de un aminoácido con el uso de una hoja de cálculo. Para ello, se deduce la ecuación que rige el comportamiento de la valoración potenciométrica de un aminoácido diprótico titulado con una base fuerte. Se dan las instrucciones detalladas para emplear la ecuación deducida y la hoja de Excel a fin de obtener el simulador deseado. Se traza, con el simulador propuesto, la curva de valoración potenciométrica de la glicina valorada con hidróxido de sodio. Se realiza la valoración potenciométrica experimental de la glicina y se compara con la curva de valoración de la glicina obtenida con el simulador. Se observa que no existe diferencia significativa entre las dos curvas de valoración; por lo que se concluye, que el simulador propuesto se puede usar para trazar curvas de valoración potenciométricas de aminoácidos dipróticos.*

*Palabras clave: simulador, Excel, aminoácido, glicina, valoración potenciométrica*

Las curvas de valoración ácido-base son representaciones gráficas del pH en función del volumen de reactivo titulante. A partir de estas curvas de valoración, se pueden deducir las

cantidades de componentes ácidos y básicos de una muestra, así como sus correspondientes valores de pKa (Harris, 2016). Se han propuesto ecuaciones para el trazo teórico de



curvas de valoración de distintas reacciones ácido-base tales como: ácido fuerte con base fuerte, ácido débil con base fuerte, ácido débil con base débil, base débil con ácido débil, ácidos polipróticos con base fuerte, sal ácida con base fuerte y mezclas de ácidos fuerte y débil con base fuerte (*de Levie, 1993*); así como un simulador general para valoraciones ácido-base (*de Levie, 1999*). *Harris (2016)*, deduce las ecuaciones para el trazo de curvas de valoración teóricas de un ácido débil con base fuerte y de un ácido débil con base débil empleando hojas de cálculo. En este trabajo, se elabora un simulador de curvas de valoración potenciométricas de aminoácidos con una base fuerte y se aplica para la obtención de la curva de valoración de la glicina. Se compara la curva de valoración potenciométrica obtenida con el simulador propuesto con la curva experimental de la glicina y no se observa diferencia significativa entre ambas.

### Valoración de un aminoácido con una base fuerte

El equilibrio químico de un aminoácido se puede representar por la reacción que se muestra en la Figura 1, donde se observa la estructura no ionizada y ionizada de un aminoácido. En la forma ionizada se observa el grupo amonio y el grupo carboxílico cuyas propiedades químicas responden a las propiedades de los ácidos y las bases; por lo que, es posible valorarlos con reactivos titulantes con propiedades ácido-base. R representa un grupo sustituyente.

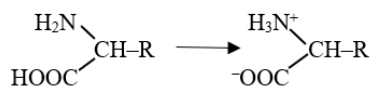


Figura 1. Estructura no ionizada y ionizada de un aminoácido

Al hacer reaccionar el aminoácido con un ácido fuerte en cantidad estequiométrica (por ejemplo: HCl), el grupo carboxilo y el grupo amonio se encuentran totalmente protonados como lo muestra la Figura 2.

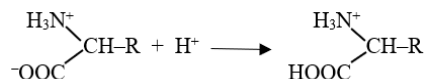
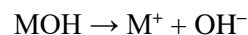


Figura 2. A pH bajo el grupo amonio y el grupo carboxilo se encuentran protonados

La valoración del aminoácido se realizará a pH bajo (se usará HCl en cantidad estequiométrica para bajar el pH). A continuación, se presentan las reacciones y ecuaciones involucradas en la valoración del aminoácido titulado con una base fuerte. Se procede posteriormente, a la deducción de la ecuación que rige el comportamiento de dicha valoración.

Reacción del reactivo titulante (MOH):



Las reacciones de la sustancia a valorar se muestran en la Figura 3.

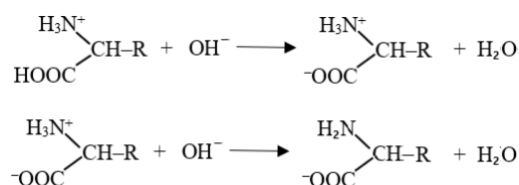


Figura 3. Reacciones de titulación de la sustancia a valorar

Las constantes de acidez del grupo carboxilo y el grupo amonio del aminoácido están dadas por las ecuaciones (1) y (2).

$$K_{\text{carboxilo}} = \frac{[\text{H}^+][\sim\text{COO}^-]}{[\sim\text{COOH}]} \quad (1)$$

$$K_{\text{amonio}} = \frac{[\text{H}^+][\sim\text{H}_2\text{N}]}{[\sim\text{H}_3\text{N}^+]} \quad (2)$$



El balance de electroneutralidad se presenta en la ecuación (3).

$$[H^+] + [M^+] + [\sim H_3N^+] = [Cl^-] + [\sim COO^-] + [OH^-] \quad (3)$$

La concentración analítica del aminoácido ( $C_{AM}$ ) está dada por la ecuación (4).

$$C_{AM} = \frac{C_A V_A}{V_{HCl} + V_A + V_B} \quad (4)$$

$$C_{AM} = C_{carboxilo} = C_{amonio} \quad (4a)$$

Donde:

$C_A$  = concentración inicial del aminoácido en [mol/L]

$V_A$  = volumen inicial del aminoácido en [mL]

$V_{HCl}$  = volumen agregado del ácido fuerte en [mL]

$V_B$  = volumen agregado de la base fuerte en [mL]

$C_{carboxilo}$  = concentración analítica del grupo carboxilo en [mol/L]

$C_{amonio}$  = concentración analítica del grupo amonio en [mol/L]

La fracción de moléculas ( $\alpha$ ) de  $\sim COO^-$  (grupo carboxilo) está dada por la ecuación (6) que se obtiene combinando y reordenando las ecuaciones (1) y (5).

$$C_{carboxilo} = [\sim COOH] + [\sim COO^-] \quad (5)$$

$$\alpha_{\sim COO^-} = \frac{[\sim COO^-]}{C_{carboxilo}} = \frac{[\sim COO^-]}{[\sim COOH] + [\sim COO^-]} = \frac{K_{carboxilo}}{K_{carboxilo} + [H^+]} \quad (6)$$

De acuerdo con las ecuaciones (4), (4a), (5) y (6) la concentración de  $\sim COO^-$  esta dada por la ecuación (7).

$$[\sim COO^-] = \alpha_{\sim COO^-} \left( \frac{C_A V_A}{V_{HCl} + V_A + V_B} \right) \quad (7)$$

La fracción de moléculas ( $\alpha$ ) de  $\sim H_3N^+$  (grupo amonio) está dada por la ecuación (9) que se obtiene combinando y reordenando las ecuaciones (2) y (8).

$$C_{amonio} = [\sim H_3N^+] + [\sim H_2N] \quad (8)$$

$$\alpha_{\sim H_3N^+} = \frac{[\sim H_3N^+]}{C_{amonio}} = \frac{[\sim H_3N^+]}{[\sim H_3N^+] + [\sim H_2N]} = \frac{[H^+]}{K_{amonio} + [H^+]} \quad (9)$$

De acuerdo con las ecuaciones (4), (4a), (8) y (9) la concentración de  $\sim H_3N^+$  esta dada por la ecuación (10).

$$[\sim H_3N^+] = \alpha_{\sim H_3N^+} \left( \frac{C_A V_A}{V_{HCl} + V_A + V_B} \right) \quad (10)$$

La concentración de  $M^+$  está dada por la ecuación (11).

$$[M^+] = \frac{C_B V_B}{V_{HCl} + V_A + V_B} \quad (11)$$

La concentración de  $Cl^-$  esta dada por la ecuación (12)

$$[Cl^-] = \frac{C_{HCl} V_{HCl}}{V_{HCl} + V_A + V_B} \quad (12)$$

Sustituyendo las ecuaciones (7), (10), (11) y (12) en la ecuación (3) se obtiene la ecuación (13).

$$[H^+] + \frac{C_B V_B}{V_{HCl} + V_A + V_B} + \alpha_{\sim H_3N^+} \left( \frac{C_A V_A}{V_{HCl} + V_A + V_B} \right) = \frac{C_{HCl} V_{HCl}}{V_{HCl} + V_A + V_B} + \alpha_{\sim COO^-} \left( \frac{C_A V_A}{V_{HCl} + V_A + V_B} \right) + [OH^-] \quad (13)$$

Multiplicando la ecuación (13) por  $(V_{HCl} + V_A + V_B)$ , reordenando, sustituyendo  $\frac{K_W}{[H^+]}$  por  $[OH^-]$  y despejando  $V_B$  se tiene finalmente la ecuación (14); que es, la ecuación que rige el comportamiento de la valoración



potenciométrica de un aminoácido con una base fuerte.

$$V_B = \frac{V_{HCl}(C_{HCl} - [H^+] + \frac{K_W}{[H^+]}) + V_A \{ C_A (\alpha_{-COO^-} - \alpha_{-H_3N^+}) - [H^+] + \frac{K_W}{[H^+]} \}}{C_B + [H^+] - \frac{K_W}{[H^+]}} \quad (14)$$

### Simulador de la curva de valoración de un aminoácido con una base fuerte.

Para simular la curva de valoración potenciométrica de un aminoácido con una base fuerte se usa una hoja de cálculo de Excel. Proceder de la siguiente manera: colocar las etiquetas y los valores en la hoja de Excel como lo muestran las Figuras 4 y 5. Se toma como ejemplo a la glicina; por lo que, las constantes de disociación corresponden a este compuesto.

	A	B	C	D	E
1	<b>VALORACIÓN DE UN AMINOÁCIDO</b>				
2	<b>CONCENTRACIONES INICIALES</b>				
3	C <sub>A</sub> [mol/L] =	0.0463			
4	C <sub>B</sub> [mol/L] =	0.1222			
5	C <sub>HCl</sub> [mol/L] =	0.1757			
6	<b>VOLUMEN INICIAL DEL AMINOÁCIDO</b>				
7	V <sub>A</sub> [mL] =	31.60			
8	<b>VOLUMEN AGREGADO DEL ÁCIDO FUERTE</b>				
9	V <sub>HCl</sub> [mL] =	8.40			
10	<b>CONSTANTE DE DISOCIACIÓN DEL AGUA</b>				
11	K <sub>w</sub> =	1.00E-14			
12	<b>CONSTANTES DE DISOCIACIÓN DEL AMINOÁCIDO</b>				
13	K <sub>carboxilo</sub> =	4.47E-03			
14	K <sub>amonio</sub> =	1.67E-10			

Figura 4. Etiquetas y valores que se usan como ejemplo para el trazo de la curva de valoración

	A	B	C	D
18	V <sub>B</sub>	pH	α(~COO <sup>-</sup> )	α(~H <sub>3</sub> N <sup>+</sup> )

Figura 5. Etiquetas que se usan para el trazo de la curva de valoración

**Valores de pH.** En la celda B19 colocar el valor de 0.00 y a partir de esta celda rellenar la columna con incrementos de 0.1 en 0.1 hasta 14.

**Cálculo de la fracción de moléculas de ~COO<sup>-</sup>.** Para calcular la fracción de moléculas del grupo carboxilo colocar en la celda C19 la ecuación (6) en la forma: =B\$13/(B\$13+10^(-B19)). Se copia esta ecuación hasta la celda C159.

**Cálculo de la fracción de moléculas de ~H<sub>3</sub>N<sup>+</sup>.** Para calcular la fracción de moléculas del grupo amonio colocar en la celda D19 la ecuación (9) en la forma: =(10^(-B19))/(B\$14+10^(-B19)). Se copia esta ecuación hasta la celda D159.

**Cálculo del volumen adicionado de reactivo titulante.** Para calcular V<sub>B</sub>, colocar en la celda A19, la ecuación (14) en la forma: =(B\$9\*(B\$5-10^(-B19))+B\$11/(10^(-B19)))+B\$7\*(B\$3\*(C19-D19)-10^(-B19)+B\$11/(10^(-B19)))/(B\$4+10^(-B19)-B\$11/(10^(-B19))). Se copia esta ecuación hasta la celda A159.

**Gráfica pH = f(V<sub>B</sub>).** Finalmente se traza la gráfica de pH en función del volumen del reactivo titulante; para ello, seleccionar las columnas A y B desde la línea 18 hasta la 159. En la barra de herramientas seleccionar "Insertar", "Gráfico", "Dispersión" como lo muestra la Figura 6.

En la gráfica resultante, cambiar los valores del eje X, para el valor mínimo 0 y para el valor máximo 35. Los valores mínimo y máximo del eje Y serán 0 y 14 respectivamente. Dar el formato deseado al gráfico para obtener la simulación de la curva de valoración potenciométrica de la glicina titulada con hidróxido de sodio como lo muestra la Figura 7.

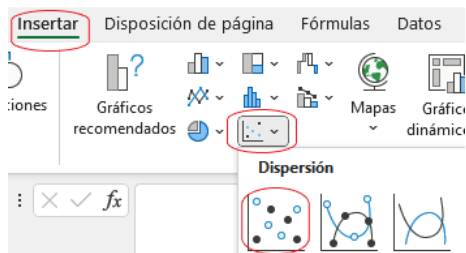


Figura 6. Selección de las herramientas para el trazo de la curva de valoración

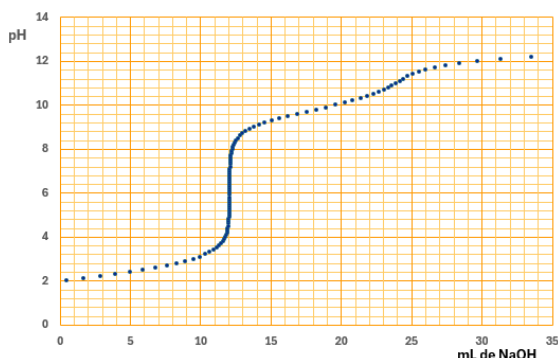


Figura 7. Curva teórica de valoración potenciométrica de glicina titulada con NaOH obtenida con el simulador propuesto.

**Curva de valoración experimental de la glicina titulada con NaOH.** A 31.60 mL de glicina se le adicionaron 8.40 mL de HCl 0.1757 M y se valoraron con NaOH 0.1222 M. Los datos experimentales se muestran en la Tabla 1 y la curva experimental resultante se muestra en la Figura 8.

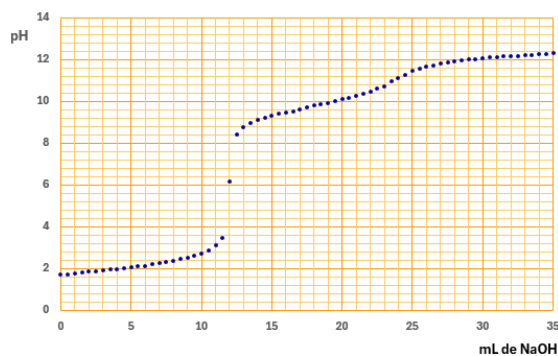


Figura 8. Curva de valoración potenciométrica experimental de 31.60 mL glicina (con 8.40 mL de HCl 0.1757 M) titulada con NaOH 0.1222 M

Tabla 1. Datos experimentales de la valoración potenciométrica de 31.60 mL de glicina (se adicionaron 8.40 mL de HCl 0.1757 M) con NaOH 0.1222 M.

NaOH [mL]	pH	NaOH [mL]	pH	NaOH [mL]	pH
0.00	1.70	12.00	6.15	24.00	11.10
0.50	1.73	12.50	8.42	24.50	11.28
1.00	1.77	13.00	8.75	25.00	11.45
1.50	1.82	13.50	8.99	25.50	11.55
2.00	1.85	14.00	9.12	26.00	11.65
2.50	1.89	14.50	9.23	26.50	11.73
3.00	1.92	15.00	9.33	27.00	11.80
3.50	1.95	15.50	9.42	27.50	11.88
4.00	1.99	16.00	9.49	28.00	11.90
4.50	2.03	16.50	9.53	28.50	11.96
5.00	2.07	17.00	9.61	29.00	12.00
5.50	2.10	17.50	9.70	29.50	12.03
6.00	2.14	18.00	9.80	30.00	12.07
6.50	2.20	18.50	9.87	30.50	12.10
7.00	2.27	19.00	9.94	31.00	12.12
7.50	2.32	19.50	10.00	31.50	12.15
8.00	2.39	20.00	10.11	32.00	12.17
8.50	2.45	20.50	10.18	32.50	12.19
9.00	2.53	21.00	10.27	33.00	12.20
9.50	2.63	21.50	10.39	33.50	12.23
10.00	2.73	22.00	10.49	34.00	12.25
10.50	2.84	22.50	10.61	34.50	12.28
11.00	3.10	23.00	10.73	35.00	12.30
11.50	3.49	23.50	10.95		

## Conclusiones

Se elaboró un simulador de curvas de valoración potenciométricas de aminoácidos dipróticos titulados con una base fuerte con el uso de una hoja de cálculo. Se aplicó el simulador, para la obtención de la curva de valoración de la glicina. Se valoró experimentalmente una muestra de glicina y se trazó su curva de valoración. Se compararon, las curvas de valoración potenciométricas de la glicina obtenidas: a) con el simulador propuesto



y b) la trazada experimentalmente. Al analizar ambas curvas, observa que no existe diferencia significativa entre ambas; por lo que, el simulador propuesto, se puede usar para trazar curvas de valoración potenciométricas de aminoácidos dipróticos.

### Referencias

- De Levie, R. (1993). Explicit Expressions of the General Form of the Titration Curve in Terms of Concentration. *Journal of Chemical Education*, 209-217.
- De Levie, R. (1999). A General Simulator for Acid-Base Titrations. *Journal of Chemical Education*, 987-991.
- Harris, D. (2016). *Análisis Químico Cuantitativo*. Barcelona, España: Editorial Reverté, S. A.