

SMARTPHONES COMO FERRAMENTA NO ENSINO DE QUÍMICA E FÍSICA

Wevylla Milena Silva de Oliveira¹

Prof. Dr. Vagner Bezerra dos Santos²

RESUMO:

Este trabalho descreve a análise da espectroscopia molecular na região UV/Vis, bem como o estudo dos fenômenos de transmitância, absorção e reflectância utilizando um método baseado em imagens digitais (DIB) utilizando um smartphone para comparar com um espectrofotômetro de bancada e dados da literatura para a determinação da constante de equilíbrio do azul de bromotimol, empregando teste T pareado para 95% de confiança. As novidades deste trabalho estão focadas na utilização de instrumentação analítica simples, de baixo custo e portátil, baseada em DIB utilizando smartphone, para o ensino de Química e Física. Além disso, foram discutidos conceitos relacionados à lei de Lambert-Beer, espectroscopia, pH, mudança de equilíbrio e cálculo para determinação da constante de equilíbrio e pKa do azul de bromotimol, que foi utilizado como prova de conceito. A melhor compreensão dos conceitos teóricos e a possibilidade de levar a instrumentação do DIB para escolas, exposições, feiras de ciências e reuniões de ensino de Química e Física foram apontadas pelos alunos da graduação ao longo da disciplina Experimentos em Termodinâmica e Equilíbrio Químico, ofertada para alunos de física e química como componente obrigatório como as principais vantagens da instrumentação e dos métodos descritos.

Palavras-chave: espectrofotometria; pKa; smartphone.

¹Graduanda em Física – Licenciatura/UFPE. E-mail: wevylla.oliveira@ufpe.br

²Docente do Departamento de Química Fundamental DQF-UFPE. E-mail: vagner.bsantos@ufpe.br

ABSTRACT:

This work describes the analysis of molecular spectroscopy in the UV/Vis region, as well as the study of transmittance, acquisition and reflection characteristics using a method based on digital images (DIB) using a smartphone to compare with a benchtop spectrophotometer and literature data. to determine the equilibrium constant of bromothymol blue, using a paired T test for 95% confidence. The novelties of this work are focused on the use of simple, low-cost and portable analytical instrumentation, based on DIB using a smartphone, for teaching Chemistry and Physics. Furthermore, concepts related to the Lambert-Beer law, spectroscopy, pH, change in equilibrium and calculation to determine the equilibrium constant and pKa of bromothymol blue were considered, which was used as a proof of concept. A better understanding of theoretical concepts and the possibility of taking DIB instrumentation to schools, exhibitions, science fairs and Chemistry and Physics teaching meetings were highlighted by undergraduate students throughout the discipline Experiments in Thermodynamics and Chemical Equilibrium, offered to physics and chemistry students as a mandatory component as the main advantages of the instrumentation and methods described.

Keywords: spectrophotometry; pKa; Smartphone.

1. INTRODUÇÃO

Neste trabalho foi desenvolvida uma atividade experimental focada na utilização de instrumentações espectroscópicas portáteis, de baixo custo e acessíveis baseadas em imagens digitais através de um smartphone, que foram aplicadas a um equilíbrio ácido-base clássico para obtenção de K_a e pK_a . Como algumas instituições de ensino não têm acesso a espectrofotômetros mais sofisticados [1,6], o aprendizado dos alunos sobre instrumentação analítica fica prejudicado, o que pode levar a uma deficiência no seu aprendizado.

Espectroscopia é um termo geral para a ciência que estuda a interação de diferentes tipos de radiação com a matéria por meio de fenômenos de emissão, espalhamento ou absorção. Dentre as diversas regiões espectrais da radiação eletromagnética, destacam-se as regiões ultravioleta (UV), visível (Vis) e infravermelha (IR). A espectrofotometria UV/Vis é baseada em medições da absorção de radiação eletromagnética nas regiões ultravioleta e visível do espectro, no qual a quantidade de radiação transmitida ou absorvida é medida. A absorção de radiação visível e ultravioleta depende principalmente do número e da disposição dos elétrons e seus níveis de energia nas moléculas ou íons absorventes. Como resultado, a banda de absorção pode ser correlacionada com o tipo de ligação que existe nos compostos químicos em estudo [1,2]. A espectrofotometria de absorção molecular baseia-se na medição da transmitância ou absorbância de moléculas com algum cromóforo a ser determinado.

Um cromóforo é um grupo específico de átomos unidos por um excesso de elétrons livres ou facilmente excitados nos quais a absorção de fótons está em a região visível do espectro eletromagnético. Quando uma radiação fonte de intensidade (I_0), com um determinado comprimento de onda (λ_0), passa através uma cubeta contendo o cromóforo, parte dessa energia é absorvida pelas moléculas resultando na intensidade luminosa (I), e assim, $I_0 > I$ [1]. Assim, a transmitância (T) pode ser calculada pela relação mostrada na Equação 1:

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (1)$$

A absorbância (A) pode ser definida como o logaritmo negativo da base 10 da transmitância, conforme Equação 2:

$$A = -\log(T) = -\log \frac{I}{I_0} \quad (2)$$

A relação matemática amplamente utilizada na espectrofotometria é a lei de Lambert-Beer (Equação 3), que afirma que a absorvância é diretamente proporcional à concentração das espécies absorventes (c) em $mol L^{-1}$ e ao caminho óptico (b) em cm utilizando radiação monocromática para baixa concentração de espécies absorventes.

A absorvidade molar (ε) pode ser definida como uma constante de proporcionalidade entre absorvância e concentração. Além disso, utilizando apenas soluções diluídas de azul de bromotimol, o coeficiente de força iônica se aproxima de 1, portanto a atividade da solução pode ser considerada igual à sua concentração. Por esse motivo, apenas a concentração em $mol L^{-1}$ foi utilizada nas Equações 3 a 5 aqui utilizadas.

$$A = \varepsilon \times b \times c \quad (3)$$

A absorvância é característica de uma substância em um determinado meio e indica a quantidade de radiação absorvida em um determinado comprimento de onda.

Espectrofotometria e método baseado em imagens digitais foram realizados para encontrar a constante de equilíbrio do indicador azul de bromotimol (BTB), cuja a cor depende do pH do meio. Em uma solução ácida, o BTB tem uma cor amarela, enquanto uma solução básica tem uma cor azul [6]. Essa mudança de cor está intimamente ligada à concentração de íons H_3O^+ e está relacionada à constante de acidez (K_a) pela Equação 4.

$$K_a = \frac{[H_3O^+] \times [Forma\ alcalina]}{[Forma\ ácida]} \quad (4)$$

Combinando as Equações 3 e 4 com a equação de Henderson-Hasselbalch, a Equação 5 é obtida. Vale ressaltar que o pK_a para este equilíbrio ácido-base é alcançado em média aos 7, e assim, em solução neutra, $[forma\ alcalina] = [forma\ ácida]$.

Para cada solução em estudo, tem-se o comprimento de onda de absorção máximo $\lambda_{m\acute{a}x}$ (nm), assim de acordo com Klotz et al [6] para o BTB, as absorções são 616 nm e 453 nm respectivamente [6].

$$K_a = [H_3O^+] \times \frac{A_{616}^{Neutro}}{A_{453}^{Neutro}} \times \frac{A_{453}^{\acute{A}cido}}{A_{616}^{Alcalino}} \quad (5)$$

Após a execução da equação 5, para calcular o pK_a de azul de bromotimol, uma simples aplicação do logaritmo negativo de K_a é feito, onde A_{616}^{Neutro} e A_{453}^{Neutro} são as absorvâncias do BTB na água medido em 616 nm e 453 nm, respectivamente. $A_{616}^{Alcalino}$ e $A_{453}^{\acute{A}cido}$ são para BTB em soluções alcalinas e ácidas medidas em 616 nm e 453 nm,

respectivamente, sendo o $[H_3O^+]$ relacionado ao pH da solução de BTB. No entanto, como o comprimento de onda na absorção máxima ($\lambda_{m\acute{a}x}$ (nm)) é dependente do pH, os espectros de absorção para o neutro, ácido e formas alcalinas de BTB podem ser diferentes e o $\lambda_{m\acute{a}x}$ precisa ser encontrado para cada solução BTB.

O azul de bromotimol muda sua cor de acordo com o pH do meio, a tonalidade de cor de uma solução refere-se à radiação refletida por uma fonte de radiação branca e pode ser explicada pelo princípio das cores complementares [6], onde as cores diretamente opostas no círculo cromático são chamadas de complementares. Este fenômeno também é a base de métodos modernos baseados em imagens digitais utilizando smartphones como instrumentos analíticos.

O método baseado em imagem digital (DIB) [3,7-9] é uma ferramenta poderosa e flexível que pode ser aplicada em diversas áreas [10]. É um método eficaz, fácil e de baixo custo em comparação aos espectrofotômetros convencionais. Após a digitalização das imagens, as informações de cores são convertidas em dados RGB no intervalo de 0 a 255, esses valores são utilizados para fins de quantificação [11,12].

A aplicação do método DIB é realizada por meio de dispositivos como webcams, câmeras, scanners e smartphones para capturar as imagens. Por meio de softwares e aplicativos [9,13] as imagens obtidas pelos dispositivos são decompostas em valores de cores utilizando sistemas de cores como RGB (Vermelho, Verde e Azul), CMYK (Ciano, Magenta, Amarelo, Key), HSL (Matiz, Saturação, Leveza), HSV (Matiz, Saturação, Valor), entre outros. O sistema de cores comumente utilizado é o RGB, sendo o modelo mais simples. As intensidades das cores geradas são armazenadas em 256 níveis, numa escala de 0 a 255 para cada canal de cor (Vermelho, Verde e Azul), onde a combinação destes três canais para cada nível de cor será equivalente a uma cor específica do espectro eletromagnético [7]. O valor 0 para todos os canais representa a cor preta, enquanto o valor 255 para todos os canais representa a cor branca [7,14].

Para utilizar o método DIB é necessário utilizar plataformas para acomodar as soluções contendo o analito. Por esta razão, materiais como papel [15,16], cubetas convencionais [17], placas cerâmicas [18], microplacas de poliestireno [7] e ácido polilático (PLA) [12] estão entre os materiais mais utilizados para essa finalidade. No método DIB, o controle ou homogeneização da radiação para captura da imagem digital, a fim de evitar radiações espúrias, é de fundamental importância, pois a negligência desse controle pode levar a baixa exatidão e precisão [11,19]. Assim, é necessário um

procedimento cuidadoso para superar essas desvantagens e, portanto, uma câmara é comumente usada neste método, a fim de evitar excesso de luz e sombra [11,12,20].

O método DIB é baseado no fenômeno de reflectância [19,21,22], enquanto o método espectrofotométrico é baseado na transmitância ou na absorbância [3,23]. Na reflectância, a medição é realizada com os comprimentos de onda que foram refletidos por uma fonte de radiação, após interação com a amostra, diferentemente da transmitância, em que o feixe emitido pela fonte de radiação passa por uma amostra absorvente e a radiação atenuada é medida em um detector localizado a um ângulo de 180° em relação ao feixe de radiação [1,3].

Assim, este trabalho visa a possibilidade de contribuir para o enriquecimento da formação dos alunos do ensino médio, com conceitos complementares de fenômenos de absorção e reflexão e encontrar uma constante de equilíbrio utilizando instrumentação portátil, como o smartphone, tendo a participação efetiva dos alunos da graduação nas experiências. Assim, com a participação dos alunos na realização do experimento, foram obtidas adequadamente algumas informações relevantes a respeito da relação ensino-aprendizagem, seus impactos na assimilação de conceitos teóricos e na satisfação dos alunos, entre outros fatores importantes.

2. METODOLOGIA

2.1 Materiais e reagentes

Para a realização do experimento foram utilizados balões volumétricos de 10 mL, béquer de 10 mL, micropipeta Kasvi (Brasil) de 20 a 200 μL e água deionizada (resistividade $> 18,0 \text{ M}\Omega \text{ cm}$) obtida em sistema Millipore Milli-Q (EUA). As soluções de fosfato em pH 2,0; 7,0 e 12,0 foram preparadas e utilizadas para obtenção de BTB nas formas ácida, neutra e básica. Foram utilizados ácido clorídrico $1,0 \text{ mol L}^{-1}$ e hidróxido de sódio $1,0 \text{ mol L}^{-1}$ para ajustar o pH das soluções. Todos os reagentes eram de grau analítico e adquiridos da Dinâmica (Brasil).

2.2 Soluções de azul de bromotimol

Uma solução aquosa de azul de bromotimol (BTB) $1,6 \text{ mmol L}^{-1}$ foi preparada e 50 μL desta solução foram inseridos em cada um dos três Balões volumétricos de 10

mL. Cada solução de fosfato foi inserida em cada um dos balões volumétricos para preparar soluções de BTB em pH 2,0; 7,0 e 12,0. Para dados de pH mais precisos, um pHmetro HI-222 da Hanna (Brasil) com eletrodo de vidro combinado com referência Ag/AgCl eletrodo com KCl $3,0 \text{ mol L}^{-1}$ foi previamente calibrado usando soluções em pH 4,0; 7,0 e 10,0. Os espectros UV-Vis do BTB em soluções com pH 2,0; 7,0 e 12,0 foram obtidos utilizando um espectrofotômetro Perkin Elmer Lambda 650 com varredura de 300 a 800 nm com resolução de 1 nm usando uma cubeta de quartzo com caminho óptico de 10 mm. A solução tampão fosfato em pH 7,0 foi usada como solução do branco.

2.3 Câmara de LED para o DIB

A câmara de LED utilizada para a análise consistia em quatro LEDs brancos ultra brilhantes (Bluex, Aliexpress), com tensão de 12 V e potência de 1 W, que foram utilizadas para iluminar a câmara. Na parte superior da câmara há uma pequena abertura para a objetiva ou lente da câmera do celular (Figura 1) e quatro resistores variáveis de 10 k Ω , que foram usados para fornecer uma corrente elétrica adequada aos LEDs e fornecer uma luz homogênea na câmara. Um botão liga/desliga e dois conectores para carregador de bateria também foram empregados. No compartimento inferior da câmara foram dispostas as cubetas com os analitos de interesse, bem como uma bateria recarregável, Unipower 12 V com 1.3 A h^{-1} para alimentação dos LEDs, Figura 1.

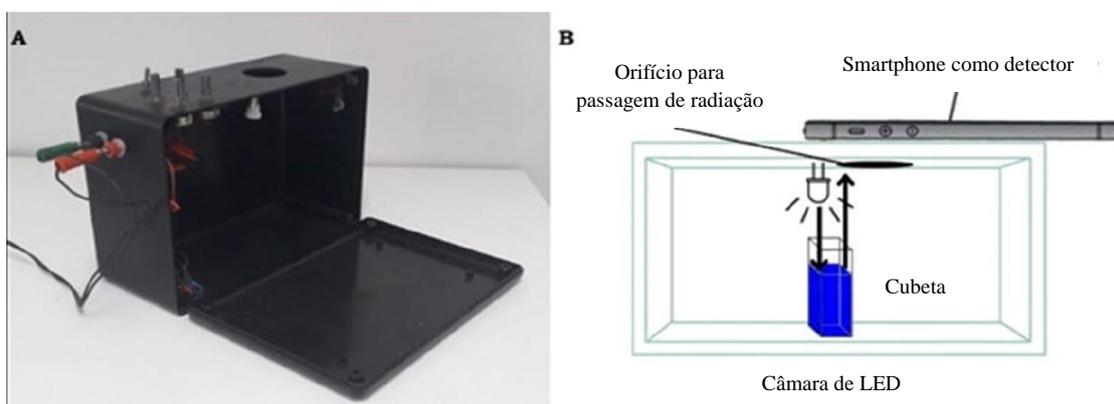


Figura 1. Câmara de LED usada para análise DIB (A); esquema da câmara com a amostra e o smartphone (B).

2.4 Determinação da absorbância com UV/Vis espectrofotômetro

As soluções contendo BTB (neutro, ácido e básico) foram transferidas para diferentes cubetas, manuseando-as sempre na parte opaca da cubeta. Com o

espectrofotômetro Kasuaki modelo IL-593 (190-1100 nm) já calibrado, foi selecionado o comprimento de onda de 435 nm. Em seguida, uma cubeta com solução de fosfato pH 7,0 foi utilizada como branco e sua absorvância foi medida. Em seguida, também foi registrada a solução ácida (BTB em solução fosfatada pH 2,0) ou alcalina (BTB em solução fosfatada pH 12,0). Medições no comprimento de onda de 615 nm foram realizadas utilizando as mesmas cubetas com BTB em soluções diferentes.

2.5 Determinação de dados de reflectância por método baseado em imagem digital

Fotografias foram tiradas das vistas frontal e superior das cubetas contendo solução do branco, BTB em solução neutra, BTB em solução ácida e BTB em solução alcalina. Para o processamento dos dados de imagens digitais (1500 × 1500 pixels), foi utilizado o aplicativo Color Grab (versão 3.6.1, Loomatix©) [13] para smartphone (Motorola One) desenvolvido para Android (tutorial de uso encontra-se nos anexos), no qual regiões de sombra e excesso de brilho das imagens digitais foram evitadas, então foram selecionadas as regiões mais adequadas para cubeta, Figura 3(C) e Figura 3(D). Para a configuração do DIB foi utilizada apenas a configuração padrão da câmera do smartphone e a imagem digital não foi tratada para correção de contraste e brilho. O modo flash não foi utilizado, pois a iluminação homogênea foi obtida a partir dos LEDs brancos. Outras câmeras de smartphones poderiam ser utilizadas, porém a configuração de cada smartphone não deve ser alterada ao longo da aplicação do método [11,18]. Outros softwares podem ser utilizados para obter os dados RGB como Photometrix [24] para dispositivos móveis e ImageJ para computadores [11,12,18].

Todos os dados presentes neste trabalho foram obtidos em triplicata ao longo do componente curricular Experimentos em Termodinâmica e Equilíbrio Químico ministrada para os cursos de Física e Química. Os demais dados qualitativos obtidos foram sintetizados após diálogos com diferentes alunos da licenciatura em física e química durante minha experiência como monitora da disciplina ao longo de 2 anos, o qual as experiências foram reproduzidas durante 8 aulas. Essas informações qualitativas foram adquiridas a partir de um relatório experimental divulgado pelos alunos após a execução dos experimentos. As vantagens da utilização da instrumentação desenvolvida aqui para o aprendizado de Física e Química foram destacados e estão presentes na seção de resultados e discussão.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Cálculo de pK_a com o espectrofotômetro UV/Vis

O BTB apresenta cor amarelada em soluções com valor de pH abaixo de 6,6 e cor azul em pH acima de 7,6, enquanto na faixa de pH de 6,6-7,6 a solução geralmente apresenta cor verde [6,25]. Os espectros UV-Vis para cada solução BTB em pH 2,0, 7,0 e 12,0 são apresentados na Figura 2.

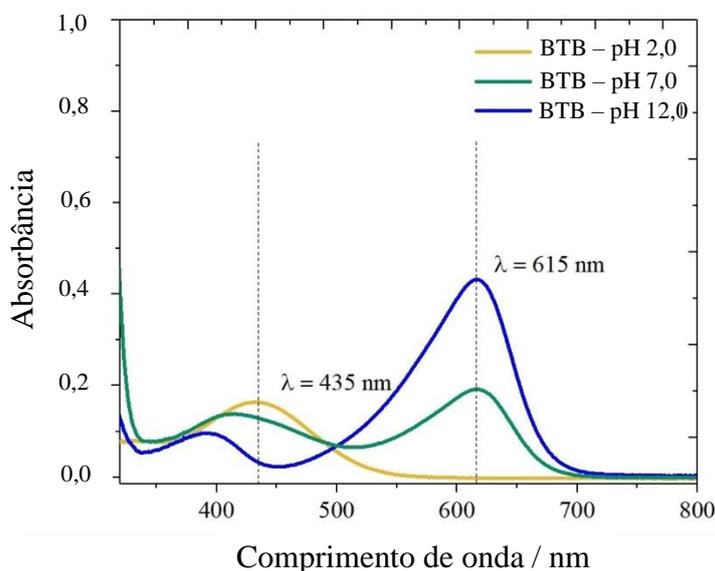


Figura 2. Espectros UV-Vis das soluções de BTB em solução de fosfato pH 2,0; 7,0 e 12,0. Os comprimentos de onda máximos de absorção () representados pelas linhas tracejadas referem-se à forma ácida do azul de bromotimol (435 nm) e à forma básica do azul de bromotimol (615 nm). O azul de bromotimol em pH neutro 7,0 apresenta 50% de cada um.

Após, o espectrofotômetro UV/Vis utilizado para a realização dos experimentos apresentou os resultados mostrados na Tabela 1. Como o $\lambda_{máx}$ é dependente do pH, os espectros de absorção para as formas ácida e básica do BTB foram de 435 nm e 615 nm para pH 2,0 e pH 12,0 respectivamente. Estes $\lambda_{máx}$ foram diferentes daqueles descritos por Klotz et al. [6] (453 nm e 616 nm, respectivamente), principalmente para BTB na forma ácida. De fato, no trabalho descrito por Klotz et al. [6] os espectros de BTB foram obtidos em soluções de HCl $1,0 \text{ mol L}^{-1}$ e NaOH $1,0 \text{ mol L}^{-1}$. Assim, o $\lambda_{máx}$ da forma ácida do BTB é mais dependente do pH do que a sua forma básica.

Tabela 1. Transmittância (T) e Absorbância (A) usando espectrofotômetro comercial em 435 nm e 615 nm.

Solução	T em 435 nm	A em 435 nm	T em 615 nm	A em 615 nm
Solução do branco (tampão pH 7)	1,000 ± 0,001	0,000 ± 0,001	1,000 ± 0,001	0,000 ± 0,001
Solução neutra + BTB	0,740 ± 0,001	0,131 ± 0,001	0,641 ± 0,002	0,193 ± 0,002
Solução ácida + BTB	0,685 ± 0,002	0,164 ± 0,002	0,996 ± 0,001	0,002 ± 0,001
Solução alcalina + BTB	0,803 ± 0,002	0,096 ± 0,002	0,369 ± 0,002	0,433 ± 0,002

A Tabela 1 mostra que as soluções com maior absorvância no comprimento de onda de 435 nm apresentam coloração amarela, ou seja, BTB em solução de fosfato em pH 2,00. No comprimento de onda de 615 nm, a solução com maior absorvância foi a BTB em solução alcalina, que possui coloração azul. Este resultado está associado ao conceito de cor e sua cor complementar conforme o esperado. Para calcular a constante de equilíbrio BTB foi utilizada a Equação 5. Esta equação requer a concentração de H_3O^+ , cujo valor já foi medido pelo valor do pH na solução tampão neutra (pH = 7,0). Assim, a concentração do íon hidrônio foi de $1,0 \times 10^{-7} mol L^{-1}$.

$$K_a = 1,0 \times 10^{-7} \times \frac{0,193}{0,131} \times \frac{0,164}{0,433} = 5,61 \times 10^{-8}$$

A partir do logaritmo negativo do K_a , o pK_a experimental de BTB foi de 7,25 (n = 3).

3.2 Cálculo de pK_a por imagens digitais

As Figuras 3(C) e 3(D) mostram as imagens das vistas superior e frontal das cubetas, respectivamente, que foram processadas pelo App Color Grab para obtenção dos dados RGB. Ao processar as imagens das cubetas, os dados de reflectância foram obtidos e convertidos para $-\log R/R_0$, $-\log G/G_0$ e $-\log B/B_0$, sendo R_0 , G_0 e B_0 , o sinal da solução branco, e R, G e B o sinal das soluções BTB (Tabela 3). Os dados do verde (G) não foram utilizados devido ao resultado do espectro de absorções máximas, que resultaram no comprimento de onda das regiões do azul e vermelho. Este cálculo não deve ser confundido com a absorvância, pois a medida para o método DIB é a reflectância, medindo a radiação refletida pela solução conforme configuração apresentada na Figura 1. Por outro lado, a atenuação da radiação a 180° é medida em espectrofotometria [3,4,7]. Porém, existe uma correlação entre reflectância e absorção, mas os dados experimentais coletados nos métodos DIB são de reflectância com a configuração aqui empregada.

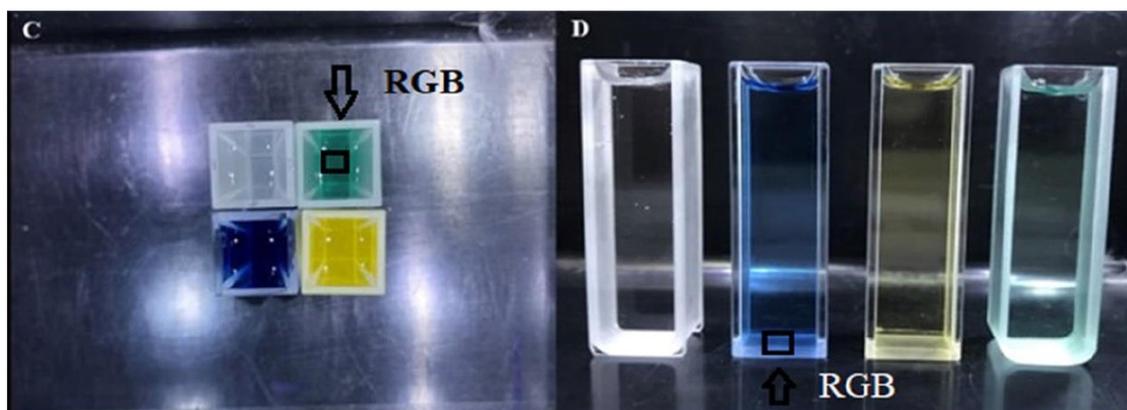


Figura 3. Imagem das vistas superior (C) e frontal (D). A solução do branco (fosfato pH 7,0), BTB em pH 12,0 (azul), BTB em pH 2,0 (amarelo), BTB em pH 7,0 (verde) mostrada da esquerda para a direita em (D). Os valores RGB são obtidos pelo tratamento da região de interesse, (C) e (D), respectivamente.

Tabela 2. Sinal analítico usando a imagem de vista superior com DIB.

Solução	$-\log B/B_0$	$-\log R/R_0$
Solução neutra + BTB	$0,195 \pm 0,013$	$0,373 \pm 0,023$
Solução ácida + BTB	$0,455 \pm 0,024$	$0,121 \pm 0,004$
Solução alcalina + BTB	$0,040 \pm 0,004$	$0,911 \pm 0,028$

A determinação de K_a também foi realizada utilizando a Equação 5 adaptada, conforme mostrado na Equação 6, onde R' e B' são R/R_0 e B/B_0 , respectivamente.

$$K_a = [H_3O^+] \times \frac{-\log (R')^{Neutro}}{-\log (B')^{Neutro}} \times \frac{-\log (B')^{\text{Ácido}}}{-\log (R')^{\text{Alcalino}}} \quad (6)$$

Assim, o K_a foi $9,55 \times 10^{-8}$ e o pK_a experimental foi 7,02 ($n = 3$) para a imagem vista superior.

$$K_a = 1,0 \times 10^{-7} \times \frac{0,373}{0,195} \times \frac{0,455}{0,911} = 9,55 \times 10^{-8}$$

O mesmo processo foi utilizado para a vista frontal das cubetas e a Tabela 3 mostra os valores de cada solução nas regiões azul (B) e vermelho (R) usando DIB, respectivamente.

Tabela 3. Sinal analítico usando imagem frontal com DIB.

Solução	$-\log B/B_0$	$-\log R/R_0$
Solução neutra + BTB	$0,135 \pm 0,002$	$0,283 \pm 0,003$
Solução ácida + BTB	$0,319 \pm 0,014$	$0,056 \pm 0,005$
Solução alcalina + BTB	$0,056 \pm 0,002$	$0,713 \pm 0,020$

O K_a do BTB foi calculado e obteve-se um valor de $9,38 \times 10^{-8}$, com pK_a de 7,03 ($n = 3$).

$$K_a = 1,0 \times 10^{-7} \times \frac{0,283}{0,135} \times \frac{0,319}{0,713} = 9,38 \times 10^{-8}$$

3.3 Comparação dos valores obtidos de K_a e pK_a em relação à literatura para BTB

Uma comparação entre o K_a e o pK_a para o BTB encontrado por métodos propostos neste trabalho e aqueles relatados na literatura é apresentado na Tabela 4. Um teste T pareado para um nível de confiança de 95% e erros relativos (%) foram calculados para verificar a precisão dos resultados usando dados da literatura como referência.

Com base no valor teórico de $5,47 \pm 2,81 \times 10^{-8}$ que é a média da literatura, com ($n = 3$) para K_a , e no pK_a de $7,33 \pm 0,25$ ($n = 3$) que é a média da literatura para três repetições, pode-se concluir que os métodos do espectrofotômetro, e em especial o DIB apresentaram resultados ótimos em relação à literatura. Todos os valores de K_a e pK_a foram comparados com a literatura e uma concordância próxima foi obtida com um nível de confiança de 95%, assim, os métodos desenvolvidos apresentaram resultados semelhantes e podem ser usados para encontrar valores de K_a e pK_a para BTB e outros sistemas de equilíbrio colorimétrico. Além disso, os experimentos com DIB utilizando smartphones permitem que os alunos criem uma discussão sobre os fenômenos complementares de cor, absorção e reflexão da luz utilizando seu próprio smartphone com um aplicativo gratuito, com um erro relativo inferior a 4,3% tornando este método preciso, mais simples e barato e acessível em comparação ao método digital e outros apresentados na Tabela 4.

Tabela 4. Comparação entre os valores de K_a e pK_a da solução BTB obtidos.

		K_a	pK_a	$a_{ER} / \%$	$b_{\text{Teste-T}} K_a$	$b_{\text{Teste-T}} pK_a$	Ref.
Método analítico	Espectrofotômetro UV/Vis	$5,61 \pm 0,13 \times 10^{-8}$	$7,25 \pm 0,06$	1,09	0,76	0,58	-
	Imagem de vista superior	$9,55 \pm 0,57 \times 10^{-8}$	$7,02 \pm 0,05$	4,23	1,03	1,09	-
	Imagem de vista frontal	$9,38 \pm 0,29 \times 10^{-8}$	$7,03 \pm 0,07$	4,10	1,52	2,52	-
Literatura	Klotz <i>et al.</i>	$9,12 \times 10^{-8}$	7,04	-	-	-	6
	Bishop	$5,01 \times 10^{-8}$	7,30	-	-	-	28
	Shalaby <i>et al.</i>	$2,29 \times 10^{-8}$	7,64	-	-	-	22
	Média	$5,47 \pm 2,81 \times 10^{-8}$	$7,33 \pm 0,25$				

^aErro relativo para $pK_a = [(\text{valor do método proposto}) - (\text{valor médio da literatura}) / (\text{valor médio da literatura})] \times 100\%$. ^bO valor tabelado do teste T para 95% de confiança é 4,403 para $n = 3$.

Na verdade, o método de imagem digital relatado por Shalaby e Mohamed [22] e apresentado na Tabela 4 utilizou uma câmera digital profissional com custo superior a um simples smartphone, além disso, necessita de um difusor; um suporte para celular e câmera baseado em madeira e uma lâmpada fluorescente convencional usada como fonte de luz para capturar a imagem digital. Aqui apenas uma câmara de LED em módulo de bateria foi utilizada para capturar a imagem digital de um smartphone sem a necessidade de ter uma rede elétrica estável em ambiente de laboratório durante toda a execução dos experimentos. Além disso, a qualidade do smartphone utilizado pelos alunos aqui não prejudica encontrar o K_a e pK_a com precisão, conforme relatado de forma semelhante por Benedetti et al. [26].

Assim, neste trabalho, os alunos de graduação utilizaram a instrumentação smartphone com DIB, e descreveram o experimento como ideal para o ensino de Química e Física, e também destacaram algumas vantagens, como a portabilidade, baixo custo, praticidade, e a possibilidade de observar os conceitos teóricos. Segundo os alunos, foi mais bem assimilada uma relação ensino-aprendizagem, com as metodologias sendo avaliadas detalhadamente, tendo como principais vantagens a facilidade, domínio do conteúdo, observações de princípios, correlação entre teoria e prática, além de levar a instrumentação DIB para escolas, exposições, feiras de ciências, reuniões de ensino de física e química, possibilidade de utilização em diversas outras aplicações e o baixo custo foram apontados pelos estudantes como outras vantagens do método. Na verdade, apesar de ser usado apenas para um equilíbrio ácido-base, o método proposto poderia ser

empregado para vários outros sistemas ácido-base, como Alizarin Red S (1,2-dihidroxi-antraquinona-3-sulfonato de sódio) e antocianinas [27]. Assim, o objetivo principal da realização de tal experimento foi facilitar a transmissão de conhecimento e uma maior participação dos alunos, que foi alcançada com sucesso através da utilização da metodologia aqui desenvolvida. Fato é que o trabalho foi apresentado no Congresso da Sociedade Brasileira de Química (SBQ) em 2023, e no mesmo ano, publicado na revista Química Nova (<https://doi.org/10.21577/0100-4042.20230065>), na área de educação, compondo a capa da revista do mês de outubro. Cópias estão na seção de Apêndices.

4. CONCLUSÕES

O método DIB usando um smartphone foi aplicado por alunos de um curso de graduação em Química e Física para ensinar o princípio da espectroscopia com instrumentação moderna e portátil para obter o equilíbrio constante de um sistema ácido-base. Além disso, foi possível explorar o sistema RGB para fins quantitativos, o fenômeno de reflectância, e a obtenção de resultados semelhantes em relação à espectrofotometria foi obtida com base no teste T aplicado para 95% de confiança e baixos erros relativos encontrados. Portabilidade, facilidade, praticidade, baixo custo e a possibilidade de levar a metodologia desenvolvida até uma escola para ensinar princípios de Química ou Física foram algumas das vantagens apontadas pelos alunos. Além de manipular e controlar o ambiente para obtenção das imagens digitais, uso do próprio smartphone e observar o impacto disso na resposta foram destaques para eles devido às poucas oportunidades para realizar tais atividades. Assim, pela primeira vez, esse tema foi abordado, com aplicação real no ensino realizado pelos alunos, sendo um grande diferencial deste presente trabalho.

5. REFERÊNCIAS

- [1] Skoog, D. A.; Holler, F. J.; Nieman, T. A.; *Principles of Instrumental Analysis*, 5th ed.; Bookman: Porto Alegre, 2002.
- [2] Ingle, J. D.; Crouch, S. R.; *Spectrochemical Analysis*, 1st ed.; Pearson: United States, 1988.
- [3] Suarez, W. T.; Pessoa-Neto, O. D.; dos Santos, V. B.; Nogueira, A. R. A.; Faria, R. C.; Fatibello-Filho, O.; Puyol, M.; Alonso, J.; *Anal. Bioanal. Chem.* **2010**, *398*, 1525.
- [4] dos Santos, V. B.; Guerreiro, T. B.; Faria, R. C.; Fatibello-Filho, O.; *Quim. Nova* **2012**, *35*, 802.
- [5] Harris, D. C.; *Quantitative Chemical Analysis*, 8th ed.; W. H. Freeman: United States, 2012.
- [6] Klotz, E.; Doyle, R.; Gross, E.; Mattson, B.; *J. Chem. Educ.* **2011**, *88*, 637.
- [7] de Oliveira, L. M. A.; dos Santos, V. B.; da Silva, E. K. N.; Lopes, A. S.; Dantas-Filho, H. A.; *Talanta* **2020**, *206*, 120219.
- [8] Filgueiras, M. F.; de Jesus, P. C.; Borges, E. M.; *J. Chem. Educ.* **2021**, *98*, 3303.
- [9] Böck, F. C.; Helfer, G. A.; Costa, A. B.; Dessuy, M. B.; Ferrão, M. F.; *J. Chemom.* **2020**, *34*, e3251.
- [10] Sonka, M.; Hlavac, V.; Boyle, R.; *Image Processing, Analysis and Machine Vision*, 4th ed.; Cengage Learning: New York, 2008, p. 11-44.
- [11] da Silva, E. K. N.; dos Santos, V. B.; Resque, I. S.; Neves, C. A.; Moreira, S. G. C.; Franco, M. O. K.; Suarez, W. T.; *Microchem. J.* **2020**, *157*, 104986.
- [12] de Almeida, J. P. B.; dos Santos, V. B.; do Nascimento, G. A.; Suarez, W. T.; de Azevedo, W. M.; Ferreira, A. F.; Maia, M. V.; *Anal. Methods* **2022**, *14*, 2631.
- [13] https://play.google.com/store/apps/details?id=com.loomatix.colorgrab&hl=pt_BR, accessed in May 2023
- [14] Capitán, V. L. F.; Ruiz, N. L.; Olmos, A. M.; Erenas, M. M.; Palma, A. J.; *Anal. Chim. Acta* **2015**, *899*, 23.
- [15] Mahato, K.; Chandra, P.; *Biosens. Bioelectron.* **2019**, *128*, 9.
- [16] Li, W.; Zhang, Xiaoyue, X.; Miao, C.; Li, R.; Ji, Y.; *Anal. Bioanal. Chem.* **2020**, *412*, 2805.
- [17] Gee, C. T.; Kehoe, E.; Pomerantz, W. C. K.; Penn, R. L.; *J. Chem. Educ.* **2017**, *94*, 941.
- [18] Resque, I. S.; dos Santos, V. B.; Suarez, W. T.; *Chem. Pap.* **2019**, *73*, 1659.

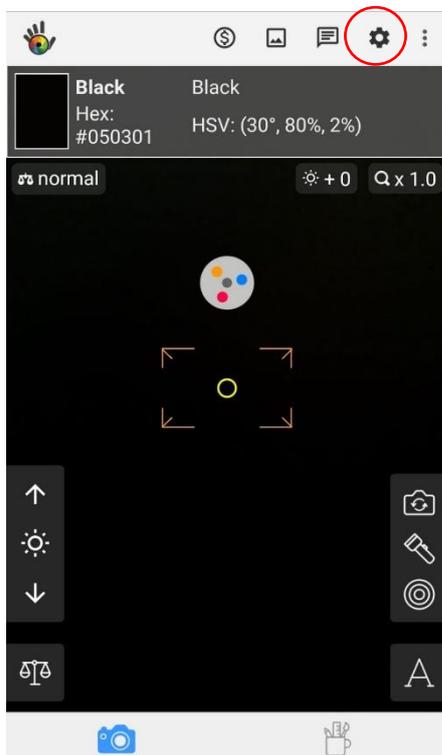
- [19] Paciornik, S.; Yallouz, A. V.; Campos, R. C.; Gannerman, D.; *J. Braz. Chem. Soc.* **2006**, *17*, 156.
- [20] Curbani, L.; Gelinski, J. M. L. N.; Borges, E. M.; *Food Analytical Methods* **2020**, *13*, 249.
- [21] Soares, S.; Rocha, F. R. P.; *Microchem. J.* **2021**, *162*, 105862.
- [22] Shalaby, A. A.; Mohamed, A. A.; *RSC Adv.* 2020, *10*, 11311.
- [23] Shimada, T.; Hasegawa, T.; *Spectrochim. Acta, Part A* **2017**, *185*, 104.
- [24] Franco, M. O. K.; Suarez, W. T.; dos Santos, V. B.; Resque, I. S.; dos Santos, M. H.; Capitán-Vallvey, L. F.; *Spectrochim. Acta, Part A* **2021**, *253*, 119580.
- [25] Bishop, E.; *Indicators*, 1st ed.; Pergamon: Oxford, 1972.
- [26] Benedetti, L. P. S; dos Santos, V. B.; Silva, T. A.; Benedetti Filho, E.; Martins, V. L.; Fatibello-Filho, O.; *Anal. Methods* **2015**, *7*, 4138.
- [27] Silva, W. R. F.; Suarez, W. T.; Reis, C.; dos Santos, V. B.; Carvalho, F. A.; Reis, E. L.; Vicentini, F. C.; *J. Chem. Educ.* **2021**, *98*, 1442.

ANEXO 1 – TUTORIAL DA COLETA DE RGB NO APP COLOR GRAB

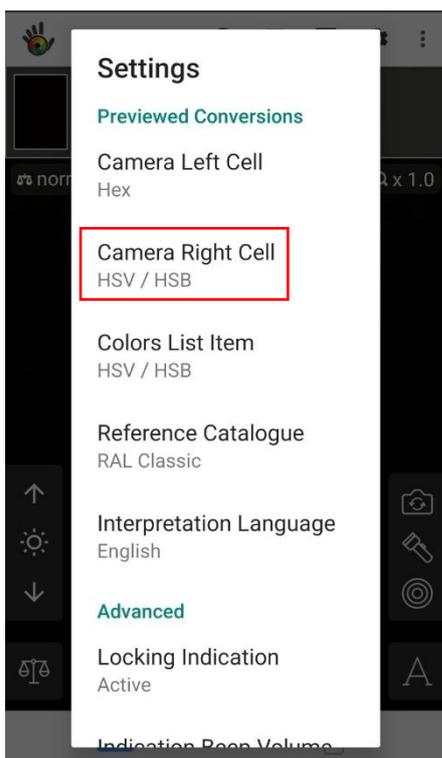
1º Passo – Baixar o aplicativo Color Grab no Google Play Store.



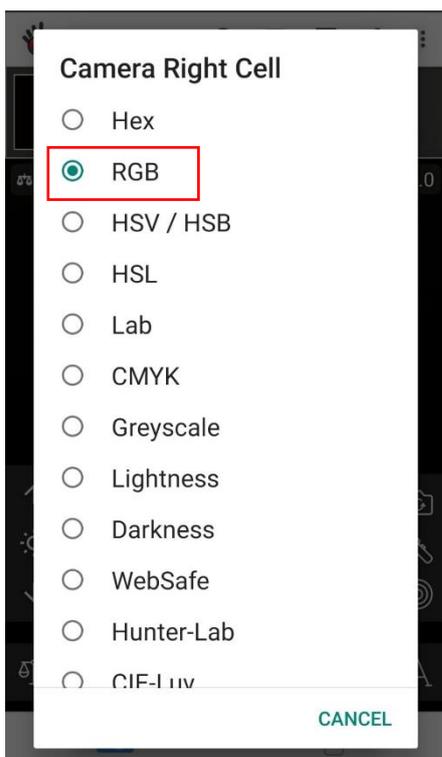
2º Passo – Abrir a configuração em destaque para selecionar o formato desejado.



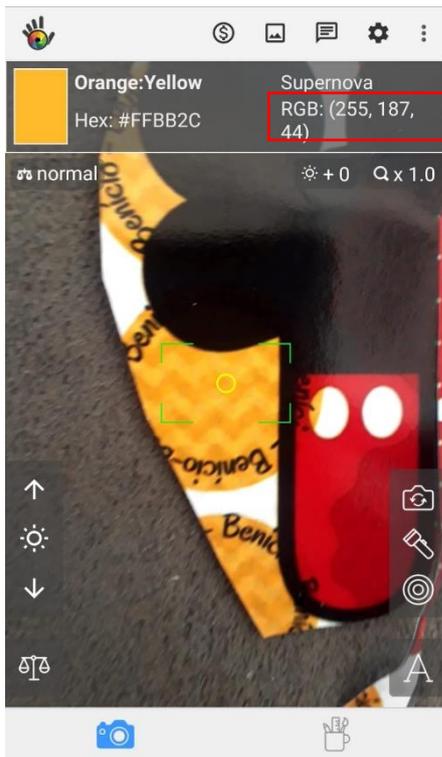
3º Passo - Selecionar a opção em destaque.



4º Passo – Marcar a opção em destaque.



5º Passo – Selecionar a área desejada pelo enquadramento mostrado no layout do aplicativo e anotar os valores de RGB dados na própria interface para fins posteriores.



APÊNDICE 1- ARTIGO

<http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20230065>

Quim. Nova, Vol. 46, No. 9, 924-930, 2023

RGB-LED-PHOTOMETER AND THE DIGITAL IMAGE-BASED METHOD USING A SMARTPHONE FOR CHEMISTRY AND PHYSICS TEACHING

Vagner B. dos Santos^{a,*}, Wevylla M. S. de Oliveira^a, João Paulo B. de Almeida^a, Marcos V. Foguel^a, Willian T. Suarez^b and Josiane L. de Oliveira^b

^aDepartamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), 50740-560 Recife – PE, Brasil

^bDepartamento de Química, Universidade Federal de Viçosa, 36570-900 Viçosa – MG, Brasil

Recebido em 23/01/2023; aceito em 26/04/2023; publicado na web 23/06/2023

This work describes the analysis of molecular spectroscopy in the UV/Vis region, as well as the study of transmittance, absorption, and reflectance phenomena in an undergraduate class using an LED (light emitting diodes)-photometer and digital image-based (DIB) method using a smartphone to compare with a benchtop spectrophotometer and literature data employing paired T-test for 95% confidence. The novelties of this work are focused on the use of simple, low-cost, and portable analytical instrumentation, based on an RGB-LED photometer and DIB using a smartphone, for teaching Chemistry to undergraduate classes. Moreover, discussions were held on concepts related to the Beer-Lambert law, spectroscopy, pH, equilibrium shift, and calculation for determining the equilibrium constant and pK_a of bromothymol blue, which was used as proof of concept. The advantages are the use of low-cost instrumentation for teaching Chemistry, students' access to concepts, such as radiation source, photodetector, transmittance calculation from analog data, regulation of the power of the light emitted by the LED, and details to understand the interaction between matter and light were described by undergraduate students in Physics and Chemistry throughout the course of Experiments in Thermodynamic and Chemical Equilibrium. The better understanding of theoretical concepts and the possibility of taking the RGB-LED-photometer and DIB instrumentation to schools, exhibitions, science fairs, and Chemistry teaching meetings were pointed out by students as the main advantages of the instrumentation and methods described.

Keywords: photometry; spectrophotometry; pK_a ; smartphone; LED.

química nova

ISSN: 0100-4042

ISSN:1678-7064 on line

Volume 46, Número 9, 2023

RGB-LED-photometer and the digital image-based method using a smartphone for Chemistry and Physics teaching

Contracapa

Vagner B. dos Santos, Weylla M. S. de Oliveira, João Paulo B. de Almeida, Marcos V. Foguel, Willian T. Suarez and Josiane L. de Oliveira;
Quim. Nova 2023, 46, 924. <http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20230065>