

ESTUDIO DE LOS ACIDOS 3-NAFTIL-2-MERCAPROPENOICOS
COMO COMPLEJANTES DE IONES METALICOS

I. 3-(1-NAFTIL)-2-MERCAPTOPROPENOICO (31N2MP)

II. 3-(2-NAFTIL)-2-MERCAPTOPROPENOICO (32N2MP)

Memoria presentada por
JOSE LUIS BELTRAN ABADIA
para aspirar al grado de
Doctor en Química

Barcelona, octubre de 1986

II.10. Datos experimentales

Las valoraciones potenciométricas llevadas a cabo en el estudio del sistema Ni(II)-glicina se presentan como datos de entrada para el programa MINIGLASS.

Cada valoración viene representada como un bloque, del que la primera línea de datos corresponde a:

$$N_p \quad V_0 \quad E_0 \quad G \quad H_t \quad C_1 \quad C_2 \quad \dots \quad C_n$$

Donde 'N_p' es el número de puntos de la valoración, 'V₀' el volumen inicial de la disolución, 'E₀' el potencial normal del electrodo, 'G' su pendiente y 'H_t' la concentración del valorante. C₁, ..., C_n son las concentraciones iniciales de los 'n' componentes de la disolución, siendo siempre la última la de acidez mineral. En el caso de las valoraciones del sistema Ni(II)-glicina, C₁ es la concentración de metal y C₂ la de ligando. El resto de las líneas del bloque corresponden a los datos de volumen de valorante añadido y potencial leído.

Todos los datos numéricos introducidos son de formato libre ("free-field format"), estando separados entre sí por un espacio en blanco como mínimo.

II.10.1. Valoraciones del medio iónico

Valoración G.1

47	30.00	409.30	59.157	-0.1998	0.03305			
0.00	321.7		0.20	320.5	0.40	319.2	0.60	317.9
0.80	316.5		1.00	315.1	1.20	313.6	1.40	312.0
1.60	310.3		1.80	308.6	2.00	306.8	2.20	304.8
2.40	302.7		2.60	300.5	2.80	298.0	3.00	295.4
3.20	292.5		3.40	289.2	3.60	285.6	3.80	281.4
4.00	276.4		4.10	273.5	4.20	270.2	4.30	266.5
4.40	262.2		4.50	257.1	4.60	250.8	4.70	242.5
4.80	230.1		5.20	-232.5	5.30	-241.7	5.40	-248.5
5.50	-253.7		5.60	-258.0	5.70	-261.7	5.80	-264.8
5.90	-267.5		6.00	-270.0	6.10	-272.2	6.20	-274.3
6.30	-276.1		6.40	-277.9	6.50	-279.5	6.60	-281.0
6.70	-282.4		6.80	-283.7	6.90	-284.9		

Valoración G.2

54	35.00	410.44	59.157	-0.1998	0.02825			
0.00	318.9		0.20	317.7	0.40	316.4	0.60	315.1
0.80	313.8		1.00	312.4	1.20	310.9	1.40	309.3
1.60	307.7		1.80	305.9	2.00	304.1	2.20	302.2
2.40	300.1		2.60	297.8	2.80	295.4	3.00	292.7
3.20	289.8		3.40	286.5	3.60	282.8	3.80	278.5
4.00	273.5		4.10	270.6	4.20	267.3	4.30	263.5
4.40	259.1		4.50	253.9	4.60	247.3	4.70	238.7
4.80	225.5		5.20	-229.7	5.30	-238.5	5.40	-245.1
5.50	-250.2		5.60	-254.5	5.70	-258.0	5.80	-261.2
5.90	-263.9		6.00	-266.4	6.10	-268.6	6.20	-270.6
6.30	-272.5		6.40	-274.2	6.50	-275.9	6.60	-277.4
6.70	-278.8		6.80	-280.1	6.90	-281.3	7.00	-282.5
7.10	-283.6		7.20	-284.7	7.30	-285.7	7.40	-286.7
7.50	-287.6		7.60	-288.5				

II.10.2. Valoraciones de la glicina

Valoración P.1

65	40.00	409.08	59.160	-0.1998	0.00696	0.02479		
0.00	307.1		0.20	305.7	0.40	304.2	0.60	302.6
0.80	301.0		1.00	299.3	1.20	297.5	1.40	295.6
1.60	293.6		1.80	291.4	2.00	289.2	2.20	286.7
2.40	284.1		2.60	281.3	2.80	278.2	3.00	274.8
3.10	273.0		3.20	271.1	3.30	269.1	3.40	267.0
3.50	264.7		3.60	262.4	3.70	259.8	3.80	257.1
3.90	254.2		4.00	251.0	4.10	247.6	4.20	243.7
4.30	239.4		4.40	234.5	4.50	228.7	4.60	221.7
4.70	212.6		4.80	199.6	4.90	174.2	5.00	-67.9
5.05	-91.9		5.10	-105.3	5.15	-114.3	5.22	-124.2
5.25	-127.6		5.30	-132.9	5.35	-137.8	5.40	-142.1
5.45	-146.2		5.50	-149.9	5.55	-153.7	5.60	-157.1
5.65	-160.8		5.70	-163.9	5.75	-167.4	5.80	-170.9
5.85	-174.2		5.90	-177.7	5.96	-181.8	6.00	-184.7
6.05	-188.5		6.10	-192.3	6.15	-196.4	6.20	-200.2
6.25	-204.7		6.30	-208.8	6.35	-213.1	6.40	-217.1
6.45	-221.6							

Valoración P.2

56	40.00	409.86	59.157	-0.1998	0.01323	0.02479		
0.00	301.1		0.30	298.6	0.60	295.8	0.90	292.8
1.20	289.7		1.50	286.2	1.80	282.6	2.10	278.5
2.40	274.1		2.50	272.5	2.60	270.8	2.70	269.2
2.80	267.4		2.90	265.6	3.00	263.7	3.10	261.8
3.20	259.8		3.30	257.7	3.40	255.5	3.50	253.1
3.60	250.7		3.70	248.1	3.80	245.4	3.90	242.5
4.00	239.4		4.10	235.9	4.20	232.2	4.30	228.0
4.40	223.1		4.50	217.5	4.60	210.7	4.70	201.9
4.80	189.2		4.90	165.1	5.00	-46.9	5.10	-85.4
5.20	-101.2		5.30	-111.6	5.40	-119.5	5.50	-126.1
5.60	-131.7		5.70	-136.8	5.80	-141.4	5.90	-145.7
6.00	-149.7		6.10	-153.6	6.20	-157.4	6.30	-161.2
6.40	-164.9		6.50	-168.7	6.60	-172.5	6.70	-176.4
6.80	-180.4		6.90	-184.5	7.00	-188.9	7.10	-193.5

Valoración P.3

48	40.00	409.83	59.157	-0.1998	0.02646	0.02479		
0.00	284.2		0.30	281.2	0.60	278.0	0.90	274.6
1.20	271.1		1.50	267.4	1.80	263.6	2.10	259.6
2.40	255.3		2.60	252.2	2.80	249.0	3.00	245.5
3.20	241.7		3.40	237.7	3.60	233.3	3.80	228.4
4.00	222.7		4.20	215.9	4.40	207.2	4.60	195.1
4.80	173.7		5.00	-30.8	5.20	-82.6	5.40	-99.7
5.60	-110.6		5.80	-118.8	6.00	-125.4	6.20	-131.2
6.40	-136.3		6.60	-141.1	6.80	-145.4	7.00	-149.6
7.20	-153.5		7.40	-157.4	7.60	-161.2	7.80	-165.0
8.00	-168.8		8.20	-172.6	8.40	-176.6	8.60	-180.7
8.80	-185.0		9.00	-189.6	9.20	-194.4	9.40	-199.8
9.60	-205.7		9.80	-212.3	10.00	-219.6	10.20	-227.4

II.10.3. Valoraciones del sistema Ni(II)-glicina

Valoración C.1

40	42.00	407.95	59.157	-0.1998	0.01201	0.00249	0.01177		
1.80	227.3		2.00	216.9	2.20	202.0	2.40	169.7	
2.50	119.1		2.60	84.4	2.65	73.5	2.70	64.0	
2.75	55.7		2.80	48.0	2.85	41.0	2.90	34.5	
2.96	26.7		3.00	21.7	3.05	15.5	3.10	9.2	
3.15	2.6		3.20	-3.8	3.26	-11.9	3.30	-17.2	
3.36	-25.9		3.40	-32.0	3.45	-39.8	3.50	-47.5	
3.55	-55.2		3.61	-64.7	3.66	-72.2	3.71	-79.4	
3.75	-85.2		3.80	-91.9	3.85	-98.1	3.90	-104.7	
3.95	-110.5		4.00	-116.1	4.05	-121.7	4.10	-127.2	
4.20	-137.1		4.30	-146.4	4.40	-155.1	4.50	-163.8	

Valoración C.2

36	49.00	408.74	59.157	-0.1998	0.01080	0.00533	0.00381		
0.00	236.1		0.10	232.7	0.20	228.8	0.30	224.5	
0.40	219.5		0.50	213.7	0.60	206.5	0.70	197.2	
0.80	183.6		0.90	159.6	1.00	123.9	1.10	101.4	
1.20	86.9		1.30	76.0	1.40	66.7	1.50	58.5	
1.60	51.0		1.70	44.0	1.80	37.3	1.90	30.8	
2.00	24.4		2.10	18.0	2.20	11.5	2.30	5.0	
2.40	-1.7		2.50	-8.6	2.60	-15.8	2.70	-23.2	
2.80	-31.1		2.90	-39.5	3.00	-48.6	3.10	-58.7	
3.20	-70.0		3.30	-83.3	3.40	-100.1	3.50	-123.3	

Valoración C.3

51	49.00	406.48	59.157	-0.1998	0.02160	0.00533	0.00394		
0.60	192.6		0.70	184.4	0.80	173.2	0.90	157.2	
1.00	136.8		1.10	119.1	1.20	105.9	1.30	95.8	
1.40	87.2		1.50	79.8	1.60	73.1	1.70	66.8	
1.80	60.9		1.90	55.2	2.00	49.8	2.10	44.5	
2.20	39.2		2.30	34.0	2.40	28.7	2.50	23.5	
2.60	18.1		2.70	12.8	2.80	7.3	2.90	1.7	
3.00	-4.1		3.10	-10.0	3.20	-16.2	3.30	-22.7	
3.40	-29.4		3.50	-36.2	3.60	-43.1	3.70	-50.0	
3.80	-57.0		3.90	-63.8	4.00	-70.6	4.10	-77.3	
4.20	-84.0		4.30	-90.5	4.40	-97.1	4.50	-103.7	
4.60	-110.2		4.70	-116.6	4.80	-123.0	4.90	-129.2	
5.00	-135.2		5.10	-141.0	5.20	-146.8	5.30	-152.4	
5.40	-158.0		5.50	-163.6	5.60	-169.4			

Valoración C.4

29	30.00	409.29	59.157	-0.1998	0.03329	0.00871	0.01623		
1.20	233.0		1.40	227.5	1.60	221.1	1.80	213.3	
2.00	203.3		2.20	188.5	2.40	162.2	2.60	127.4	
2.80	105.0		3.00	89.4	3.20	76.4	3.40	64.6	
3.60	53.6		3.80	42.8	4.00	32.2	4.20	21.3	
4.40	9.9		4.60	-2.2	4.80	-15.3	5.00	-29.2	
5.20	-43.7		5.40	-58.3	5.60	-72.7	5.80	-87.2	
6.00	-102.0		6.20	-117.1	6.40	-132.0	6.60	-146.3	
6.80	-160.3								

Valoración C.5

58	44.00	408.98	59.157	-0.1998	0.02406	0.01188	0.00439		
0.20	215.5		0.30	211.7	0.40	207.3	0.50	202.3	
0.60	196.3		0.70	189.1	0.80	179.9	0.90	168.1	
1.00	154.2		1.10	140.6	1.20	129.3	1.30	120.2	
1.40	112.8		1.50	106.3	1.60	100.6	1.70	95.6	
1.80	90.8		1.90	86.5	2.00	82.4	2.10	78.7	
2.20	74.6		2.30	71.0	2.40	67.4	2.50	63.9	
2.60	60.4		2.70	57.1	2.80	53.7	2.90	50.5	
3.00	47.2		3.10	44.0	3.20	40.7	3.30	37.5	
3.40	34.2		3.50	30.9	3.60	27.7	3.70	24.4	
3.80	21.0		3.90	17.6	4.00	14.2	4.10	10.7	
4.20	7.1		4.30	3.5	4.40	-0.3	4.50	-4.1	
4.60	-8.0		4.70	-12.1	4.80	-16.3	4.90	-20.6	
5.00	-25.1		5.10	-29.9	5.20	-34.9	5.30	-40.1	
5.40	-45.8		5.50	-51.8	5.60	-58.4	5.70	-65.5	
5.80	-73.6		5.90	-83.0					

II.11. BIBLIOGRAFIA

1. L. G. Sillén; Acta Chem. Scand., 18(1964)1085.
2. I. G. Sayce; Talanta, 15(1968)1397.
3. A. Sabatini, A. Vacca, P. Gans; Talanta, 21(1974)53.
4. R. M. Alcock, F. R. Hartley, D. E. Rogers; J. Chem. Soc., Dalton Trans., (1978)115.
5. F. Gaizer, A. Puskás; Talanta, 28(1981)565.
6. A. D. Zuberbuhler, T. A. Kaden; Talanta, 29(1982)201.
7. R. J. Motekaitis, A. E. Martell; Can. J. Chem., 60(1982)2403.
8. W. H. Sachs; Technometrics, 18(1976)161.
9. M. L. Ralston, R. I. Jenrich; Technometrics, 20(1977)7.
10. E. Durand, "Solutions Numeriques de Equations Algébriques. Tome II: Systemes de Plusieurs Equations", masson et Cie., Paris 1972.
11. A. Sabatini, A. Vacca; J. Chem. Soc., Dalton Trans., (1972)1693.
12. I. Nagypal, I. Paka, L. Zekani; Talanta, 25(1978)549.
13. W. E. Wentworth; J. Chem. Ed., 42(1965)96.
14. P. Segura, "Tratamiento de Datos y Análisis de Error", Promociones Publicaciones Universitarias, Barcelona 1985
15. R. J. Motekaitis, A. E. Martell; Can. J. Chem. 60(1982)168.
16. B. P. Demidovitch, I. A. Maron, "Computational Mathematics", Mir, Moscow 1981.
17. Ting-Po I, G. H. Nancollas; Anal. Chem., 44(1972)1940.

18. P. Gans, A. Sabatini, A. Vacca; J. Chem. Soc., Dalton Trans. (1985)1195.
19. P. R. Bevington, "Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences", McGraw-Hill, New York 1969.
20. G. Scott Owen; J. Chem. Ed., 61(1984)440.
21. A. I. Vogel; "A Textbook of Quantitative Inorganic Analysis", Longman, London 1978.
22. G. Gran; Analyst, 77(1952)661.
23. E. Bottari, A. Braibanti, L. Ciavatta, A.M. Corrie, P.G. Daniele, F. Dallavalle, M. Grimaldi, A. Mastroianni, G. Mori, G. Ostacoli, F. Paoletti, E. Rizzarelli, S. Sammartano, C. Severini, A. Vacca, D.R. Williams; Ann. Chim. (Roma), 68(1978)813.
24. A.P. Arnold, S.A. Daignault, D.L. Rabenstein; Anal. Chem., 57(1985)1112.
25. A. Braibanti, F. Dallavalle, G. Nori, B. Veroni; Talanta, 29(1982)725.

APENDICE III:DISTR: PROGRAMA PARA EL CALCULO DE DISTRIBUCION
DE ESPECIES COMPLEJAS EN FUNCION DEL pH

Aunque existen en la bibliografía varios programas para calcular la distribución de especies, tales como COMICS (1), HALTAFALL (2), ECCLES (3), etc., y algunos programas de cálculo de constantes de estabilidad incorporan rutinas que también calculan la concentración de especies en equilibrio (4, 5, 6, 7), nuestro objetivo era tener a disposición un programa sencillo y fácilmente operativo en el microordenador del que se ha dispuesto.

El programa DISTR, que se ha desarrollado en la presente memoria, se ha escrito para determinar la formación de las diferentes especies complejas de los sistemas estudiados. Se ha construido básicamente a partir de la subrutina de balances de masa del procedimiento Complex del programa MINIGLASS, y calcula la distribución de especies en función del pH de la disolución, de manera que su funcionamiento es totalmente similar a cuando se trabaja en el modo "Vt" del procedimiento Complex. A continuación se describen algunas de sus características. Al igual que el programa MINIGLASS, también está escrito en el lenguaje PASCAL.

III.1. Subrutina de balances de masa

Emplea el algoritmo descrito previamente en el apartado II.3.3, con una pequeña variación, ya que los valores estimados para las concentraciones libres en cada punto (a partir del cuarto) se calculan a partir de los datos de los tres anteriores puntos según una función cuadrática dependiente del pH. De esta manera se consigue una buena estimación previa de las concentraciones libres, ya que se ha calculado un error aproximado de un 3 - 5 %. Las estimaciones para el primer punto se realizan suponiendo que no hay complejación, mientras que para el segundo y tercer puntos se toman como valores iniciales los calculados finalmente para el punto anterior.

III.2. Gráficos

Este programa representa sólomente las diferentes especies del (n-1)-simo componente de la disolución para unas condiciones determinadas, que en realidad es una de las tareas más usuales para un programa de este tipo. La gráfica obtenida se puede representar en la pantalla del ordenador o en el "plotter" acoplado.

III.3. Funcionamiento del programa DISTR

Al iniciarse la ejecución de este programa, en primer lugar se le pregunta al usuario qué modelo de complejación se utiliza. Dicho modelo es el mismo que el utilizado por el programa MINIGLASS, pues aunque ese modelo contiene más datos que los necesarios realmente (como pK_w , J_h y J_{oh}) se prefiere de esta manera para que sus ficheros de entrada sean totalmente compatibles.

Una vez leído el modelo se pregunta nuevamente sobre el intervalo de pH de trabajo, y las concentraciones totales de cada componente del sistema. Una vez entrado el último dato, se realizan los cálculos, y una vez finalizados éstos nos pregunta si la gráfica será en pantalla o en "plotter".

Para dar una idea del tiempo de cálculo, digamos que para un sistema binario como los de esta memoria tarda menos de un minuto. Para un sistema ternario, debido a su mayor complejidad, puede tardar de 2 a 5 minutos, mientras que para representar la gráfica en pantalla el tiempo necesario es de 3 a 5 segundos.

Adicionalmente se puede comentar que no sólo se ha utilizado para realizar las gráficas de distribución de especies, sino que además ha sido útil para probar la significancia de determinadas especies, en algún sistema particular estudiado potenciométricamente, cuya importancia en el sistema era du-

dosa debido a su baja constante de formación. En estas condiciones, el trabajo era rápido dado que el ordenador HP 9816 permite mantener en memoria varios programas a la vez y se han podido realizar los ciclos MINIGLASS - DISTR en un tiempo reducido.

III.4. Listado del programa DISTR

```

PROGRAM DISTR      (input,output,listing);

import dgl_lib;
CONST
mxt=8;
ppt=101;
tcomp=9 ;
TYPE
sixsix=array[1..mxt,1..mxt] of real;
ptr=array[1..mxt] of real;
archiv=string[20];
 $l_1 = 2.30258509$ 
 $l_2 = 0.43429448$ 
VAR
title:string[80];
model:text;
fmodel:archiv;
ncomp,nesp,final,pHo,pHf,resto,i,j,k,l:INTEGER;
tot,rese,fun:ptr;
su:array[1..9] of real;
pl:array[1..tcomp] of integer;
cf:ARRAY[1..30,1..tcomp] of integer;
conc:array[1..101,1..30] OF REAL;
pH:array[1..101] OF REAL;
beta:array[1..30] of real;
pkw,jh,joh,incr:real;
acabado:boolean;

function alog(l1:real):real;
var l11:real;
begin l11:=exp(2.302585*l1);
alog:=l11;
end;

function lgt(l2:real):real;
var l12:real;
begin l12:=0.434294*ln(l2);
lgt:=l12;
end;

function RS(R:real;
K:integer):real;
VAR L:integer;
U:real;
begin if K<0 then U:=1/R;
if K=0 then U:=1 else if K=1 then U:=R

```



```

else begin L:=abs(K);
U:=1;
repeat
if L mod 2 =1 then U:=R*U;
L:=L div 2;
if L<>0 then R:=R*R
until L=0;
if K<0 then U:=1/U          end;
RS:=U;
end;

```

```

function prime(pn:integer;
H:real):real;
VAR ab,ks,ns:integer;
pbeta:real;
begin pbeta:=0;
for ks:=1 to nesp do begin ab:=0;
for ns:=1 to ncomp do begin
if (ns<>pn) and (ns<>ncomp) then
ab:=ab+abs(cf[ks,ns]);
end;
if ab=0 then begin
if (cf[ks,pn]<>0) and (cf[ks,ncomp]<>0) then
pbeta:=pbeta+alog(beta[ks])*RS(H,cf[ks,ncomp]);
end;
end;
prime:=tot[pn]/(pbeta+1);
end;

```

```

procedure matinv(rne:si
xpsix;
f1:integer;
var enr:sixpsix);
var ik,k1,l2:integer;
va:real;
begin
for ik:=1 to f1 do begin
for k1:=1 to f1 do begin
enr[ik,k1]:=0;
enr[k1,ik]:=0;
end;
enr[ik,ik]:=1.0;
end;
enr[f1,f1]:=1.0;
for k1:=1 to f1 do begin

```

```

va:= rne[k1,k1];
if abs(va)<=1.0E-50 then va:=1.0E-10;
for ik:=1 to f1 do begin
rne[k1,ik]:=rne[k1,ik]/va;
enr[k1,ik]:=enr[k1,ik]/va;
end;
for l2:=1 to f1 do begin
if l2<>k1 then begin
va:=rne[l2,k1];
for ik:=1 to f1 do begin
rne[l2,ik]:=rne[l2,ik]-va*rne[k1,ik];
enr[l2,ik]:=enr[l2,ik]-va*enr[k1,ik];
end;
end;
end;
end;
end;

procedure complex;
var i7,j7,sv,tv,s,v:integer;
pere,prod,col:real;
jac,caj:sixpsix;
a,b,c,kas,l1,h1,h2,h3,h12,l21,l31,h21,h31,hh31,hh21,k1:real;
begin
for j7:=1 to 101 do begin
su[ncomp]:=1/alog(pH[j7]);
if j7=1 then begin kas:=su[ncomp];
for v:=1 to final do su[v]:=prime(v,kas);
end;
if j7>3 then begin
h1:=pH[j7-3];
h12:=h1*h1;
h2:=pH[j7-2];
h3:=pH[j7-1];
h21:=h2-h1;
h31:=h3-h1;
hh21:=h2*h2-h12;
hh31:=h3*h3-h12;
for v:=1 to final do begin
l1:=conc[j7-3,v];
l31:=conc[j7-1,v]-l1;
l21:=conc[j7-2,v]-l1;
c:=(l31*h21-l21*h31)/(hh31*h21-h31*hh21);
b:=(l21-c*hh21)/h21;
a:=l1-b*h1-c*h12;
k1:=a+b*pH[j7]+c*pH[j7]*pH[j7];

```

```

if k1>0 then su[v]:=k1;
end;
end;
repeat
for sv:=1 to final do begin fun[sv]:=0;
for tv:=1 to final do begin jac[sv,tv]:=0;
caj[sv,tv]:=0;
end;
end;
for s:=1 to nesp do begin prod:=alog(beta[s]);
for sv:=1 to ncomp do prod:=prod*RS(su[sv],cf[s,sv]);
for v:=1 to final do begin fun[v]:=fun[v]+prod*cf[s,v];
for sv:=1 to final do jac[v,sv]:=jac[v,sv]+prod*cf[s,v]*cf[s,sv];
end;
end;
pere:=0;
for s:=1 to final do begin fun[s]:=fun[s]-tot[s];
pere:=pere+abs(fun[s]);
end;
matinv(jac,final,caj);
for v:=1 to final do begin rese[v]:=0;
for s:=1 to final do begin
rese[v]:=rese[v]+fun[s]*caj[s,v];
end;
end;
for v:=1 to final do su[v]:=su[v]/exp(rese[v]);
until pere<1.0E-10;
for v:=1 to nesp do begin col:=alog(beta[v]);
for sv:=1 to ncomp do col:=col*RS(su[sv],cf[v,sv]);
concl[j7,v]:=col;
end;
end;
end;

procedure diagrama;
var lab,cnt,ts,i,j,k1,tr,num:integer;
xmax,xmin,ymax,ymin,pmax,pmin,inx,iny,wx,wy,x,y,sx,sy,ay,bx,yr:real;
sg:string[4] ;
nega,flag1:boolean;
begin pmax:=phf ;
pmin:=pho ;
inx:=(pmax-pmin)/10;
iny:=0.1;
xmin:=pHo-1.3*inx;
xmax:=pHf+0.7*inx;

```

```

ymin:=-0.2    ;
ymax:=1.3    ;
sx:=(xmax-xmin)/200;
sy:=(ymax-ymin)/150;
set_window(xmin,xmax,ymin,ymax);
wx:=3*sx;
wy:=5*sy;
set_char_size(wx,wy);
setstrlen(sg,2);
for lab:=0 to 5 do begin move(pmin+sx,0.2*lab);
line(pmin,lab*0.2);
move(pmin-10*sx,0.2*lab-wy/4);
setstrlen(sg,3);
strwrite(sg,1,cnt,0.2*lab:1:1);
gtext(sg);
end;
move(pmin-4*sy,1.05);
gtext('ALFA');
for lab:=pHo to pHf do begin flag1:=false;
if (pHf-pHo)<5 then flag1:=true else
if (lab mod 2)=0 then
flag1:=true;
if flag1 then begin move(lab,sy);
line(lab,0);
move(lab-wx/3,-6*sy);
if lab<10 then setstrlen(sg,1) else setstrlen(sg,2);
strwrite(sg,1,cnt,lab:1);
gtext(sg);
end;
end;
move(pmax-2*inx,-2*wy);
gtext('-log[H]');
move(pmin,1);
line(pmin,0);
line(pmax,0);
move(pmin+inx,-3*wy);
gtext(title);
set_char_size(0.65*wx,0.65*wy);
for i:=1 to nesp do begin
if cf[i,final]>0 then begin
move(pHo,concl[i]/tot[final]) ;
ay:=0;
for j:=1 to 101 do begin x:=pH[j];
y:=cf[i,final]*concl[j,i]/tot[final];
if y>0.001 then line(x,y) else if y>0.0005 then move(x,y);

```

```

if y>ay then begin ay:=y;
bx:=x;
end;
end;
{1} if ay>0.005 then begin ts:=0;
for k1:=1 to ncomp do begin nega:=false;
if cfl[i,k1]<0 then nega:=true;
yr:=ay+wy/4;
if nega then begin move(bx+(k1+ts)*wx/2,yr);
gtext('-');
end;
if nega then ts:=ts+1;
num:=abs(cfl[i,k1]);
move(bx+(k1+ts)*wx/2,yr);
case num of
0:gtext('0');
1:gtext('1');
2:gtext('2');
3:gtext('3');
4:gtext('4');
5:gtext('5');
6:gtext('6');
7:gtext('7');
8:gtext('8');
9:gtext('9');
end;
end;
end;
end;
end;
END;

```

```

procedure grafic;
CONST      control=0;
VAR        gdu,a,b:char;
gda,err,gft,gfp:integer;
begin
  writeln('      Plotter o pAntalla');
  writeln('      ^                ^');
  repeat read(gdu) until gdu in ['P','A'];
  case gdu of
    'P': gda:=705;
    'A': BEGIN gda:=3;
  page;
  END;
end;

```

```

graphics_init;
display_init(gda,control,err);
set_aspect(2,1.5);
diagrama;
writeln;
writeln('
',
chr(131), '< prem qualsevol tecla per continuar (F : fi) >');
read(a);
if a='F' then acabado:=true;
write(chr(128));
page;
clear_display;
graphics_term;
end;
begin
(main program)
writeln('          Titulo ?');
readln(title);
writeln;
writeln('          Nombre del modelo ?');
readln(fmodel);
reset(model,fmodel+'.TEXT');
read(model,pkw,jh,joh,ncomp,nesp);
for i:=1 to ncomp do          read(model,pl[i]);
final:=ncomp-1;
nesp:=nesp+ncomp;
resto:=ncomp+1;
for i:=resto to nesp do begin
for j:=1 to ncomp do read(model,cf[i,j]);
read(model,beta[i]);
END;
for i:=1 to ncomp do begin
for j:=1 to ncomp do begin
if i=j then cf[i,j]:=1 else cf[i,j]:=0;
end;
end;
write('          pH inicial? ==>');
readln(pHo);
writeln;
write('          pH final  ? ==>');
readln(pHf);
writeln;
for i:=1 to final do begin
write('          concentración del componente ',i:2,
'==>');

```

```
readln(tot[i]);
writeln;
end;
pH[1]:=pHo;
pH[101]:=pHf;
incr:=(pHf-pHo)/101;
for i:=2 to 100 do pH[i]:=pHo+i*incr;
acabado:=false;
complex;
repeat grafic until acabado;
end.
```

III.5. BIBLIOGRAFIA

1. D.D. Perrin, I.G. Sayce; *Talanta*, 14(1967)833.
2. N. Ingri, W. Kakolowicz, L.G. Sillén, B. Warnqvist; *Talanta*, 14(1967)1261.
3. P.M. May, P.W. Linder, D.R. Williams; *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, (1977)588.
4. Ting-Po I, G.H. Nancollas; *Anal. Chem.*, 44(1972)1940.
5. A. Sabatini, A. Vacca, P. Gans; *Talanta*, 21(1974)53.
6. R.J. Motekaitis, A.E. Martell; *Can. J. Chem.*; 60(1982)2403.
7. A.D. Zuberbuhler, T.A. Kaden; *Talanta*, 29(1982)201.



