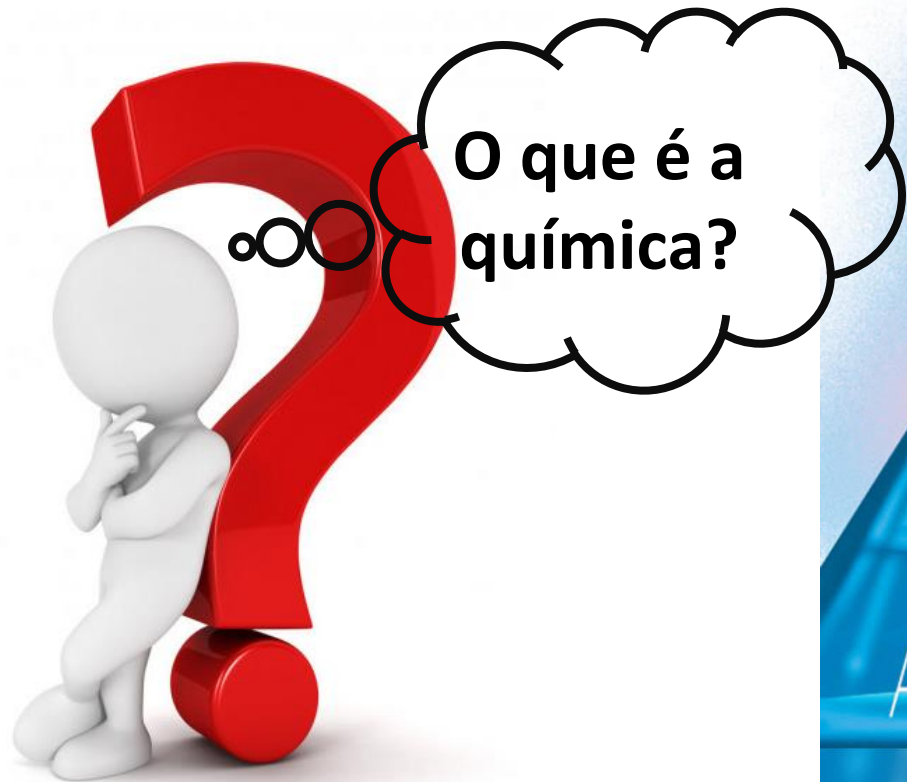


Planejamento experimental na química

A ciência química



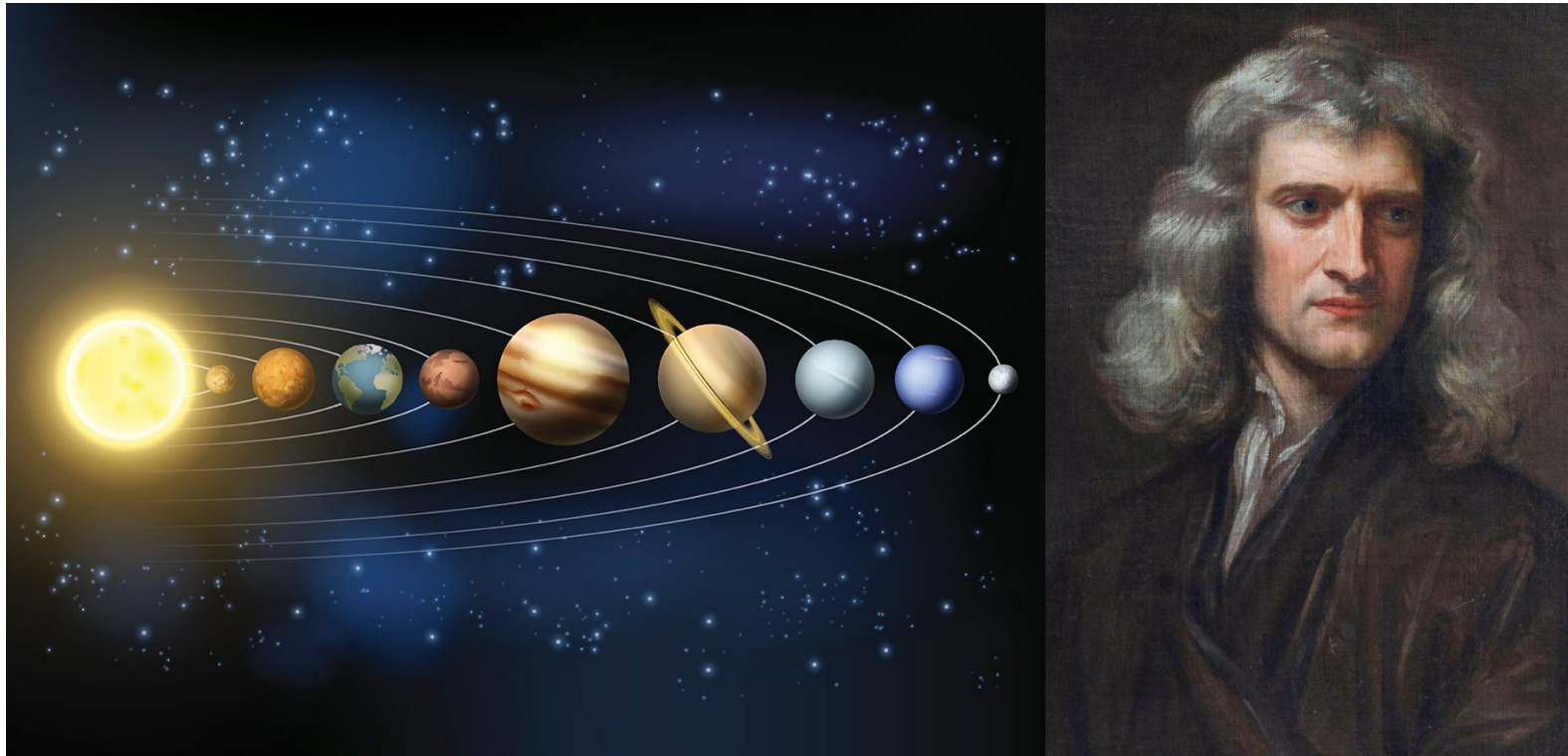
“estudo científico da constituição da matéria, suas propriedades, transformações e as leis que as regem”

O método científico

Planejamento de experimental:
Modelo probabilístico x mecanístico



Modelo mecánico



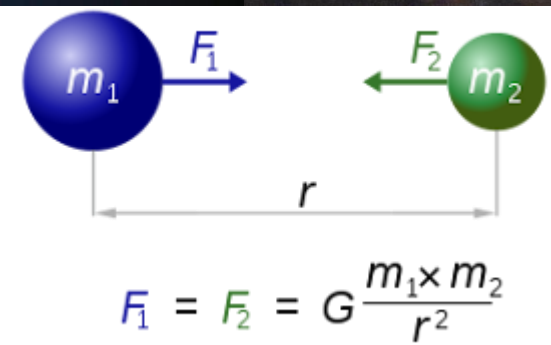
Quando utilizamos o modelo mecánico?



$$\cdot F_G = \frac{GMm}{R^2} \quad \cdot F_{CP} = \frac{mv^2}{R}$$
$$\frac{mv^2}{R} = \frac{GMm}{R^2} \rightarrow v = \frac{2\pi R}{T}$$

Lei de Kepler

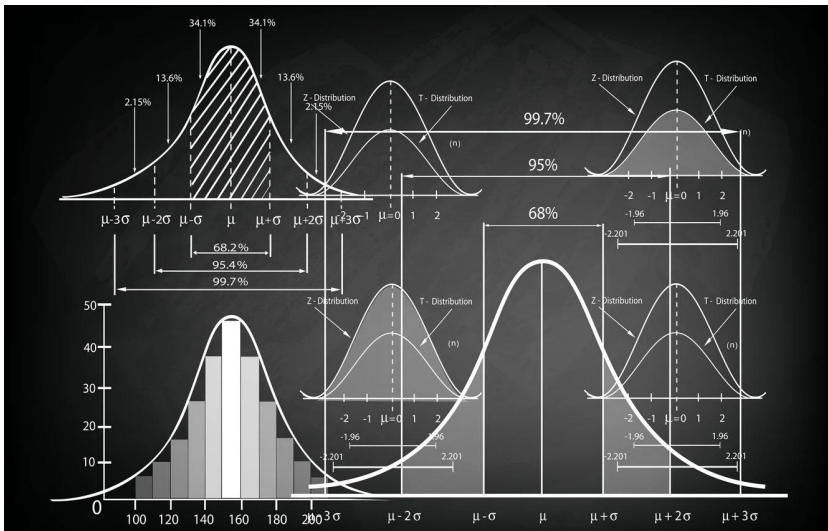
$$\frac{4\pi^2 R^3}{T^2 R} = \frac{GM}{R^2} \rightarrow \frac{T^2}{R^3} = \frac{4\pi^2}{GM}$$



Modelo probabilístico



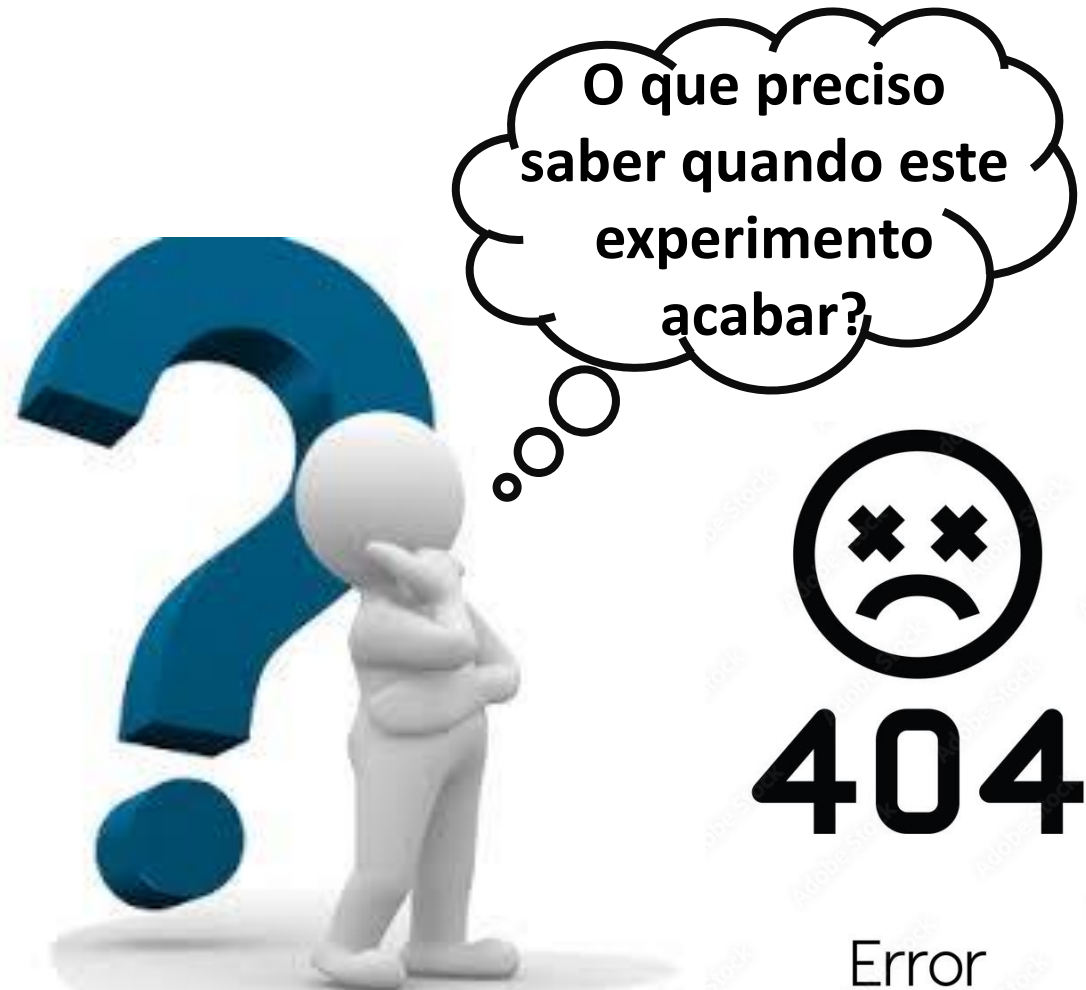
Estatística



Quando utilizamos o modelo probabilístico?



Planejamento experimental - Erros



“Se você não sabe para onde está indo, vai terminar batendo em outro lugar”

Alguns termos importantes

Média

$$\bar{x} = \frac{(x_1 + x_2 + x_3 \dots x_n)}{n}$$

$$\bar{x} = \frac{110 + 25 + 50 \dots + 60}{15}$$

$$\bar{x} = \frac{666}{15} = 44,4$$

Desvio padrão

$$d_i = |x_i - \bar{x}|$$

Erro absoluto

$$E = x_i - x_v$$

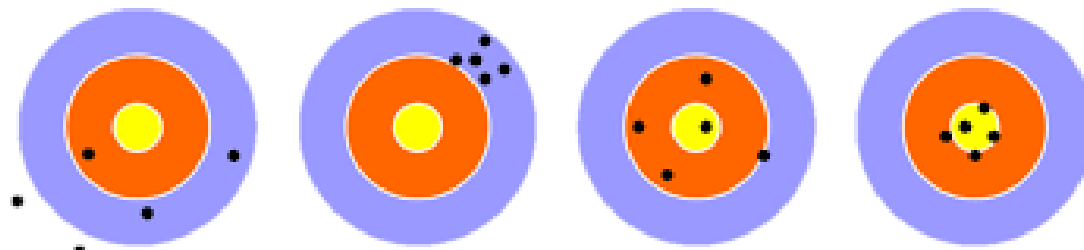
Erro relativo

$$E_r = \frac{x_i - x_v}{x_v} \times 100\%$$

Qual a diferença entre precisão e exatidão?



Precisão e exatidão



PRECISÃO: NÃO
EXATIDÃO: NÃO

PRECISÃO: SIM
EXATIDÃO: NÃO

PRECISÃO: NÃO
EXATIDÃO: SIM

PRECISÃO: SIM
EXATIDÃO: SIM

Analista 1



Analista 2



Analista 3



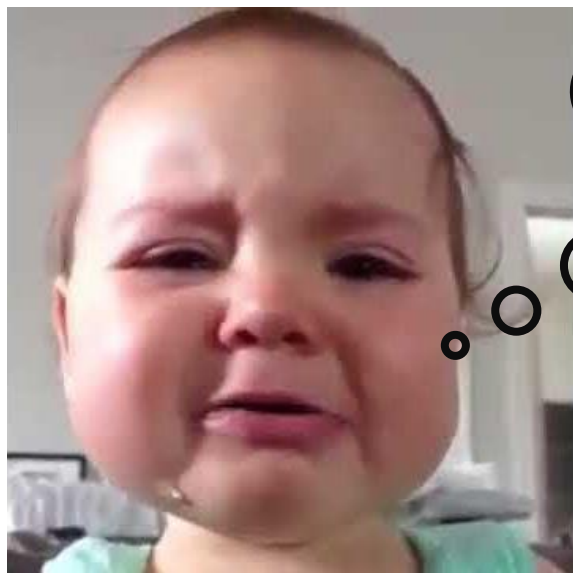
Analista 4



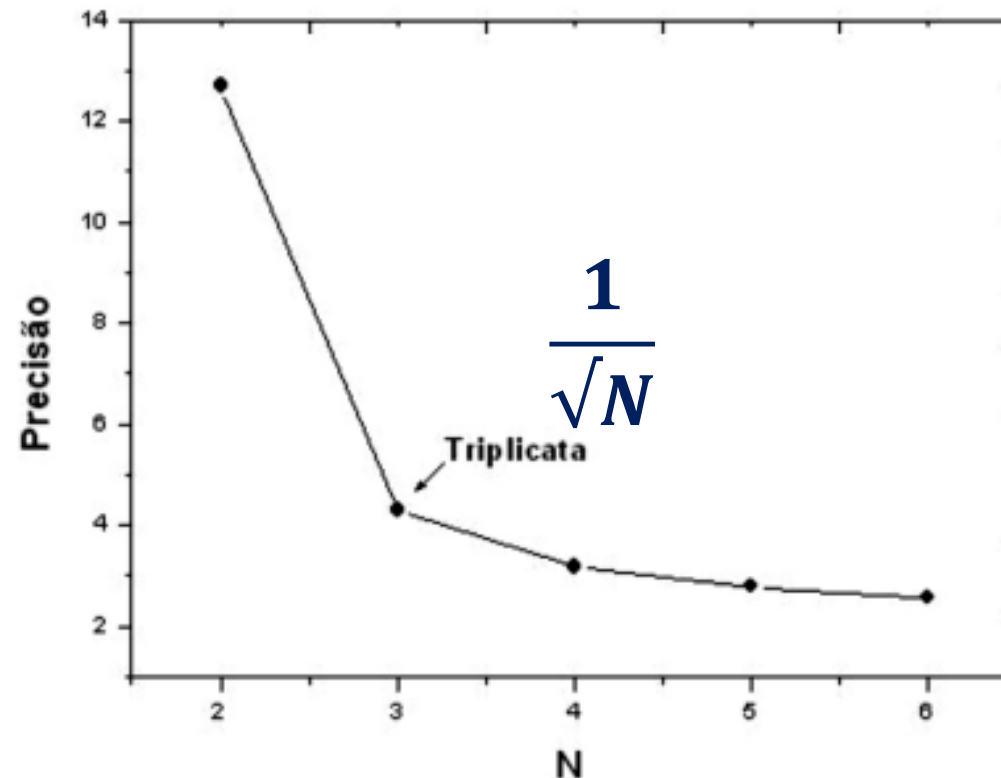
-1.5 -1.0 -0.5 0.0
Erro (xi - xv), %N

Por que preciso medir mais de uma vez?

Uma vez que uma única análise não fornece informações sobre a variabilidade dos resultados, geralmente os químicos utilizam entre duas e cinco porções (réplicas) de uma amostra para realizar um procedimento analítico completo.



Não quero fazer mais 3 vezes.



Principais tipos de erros

1

Erros grosseiros

2

Erros sistemáticos

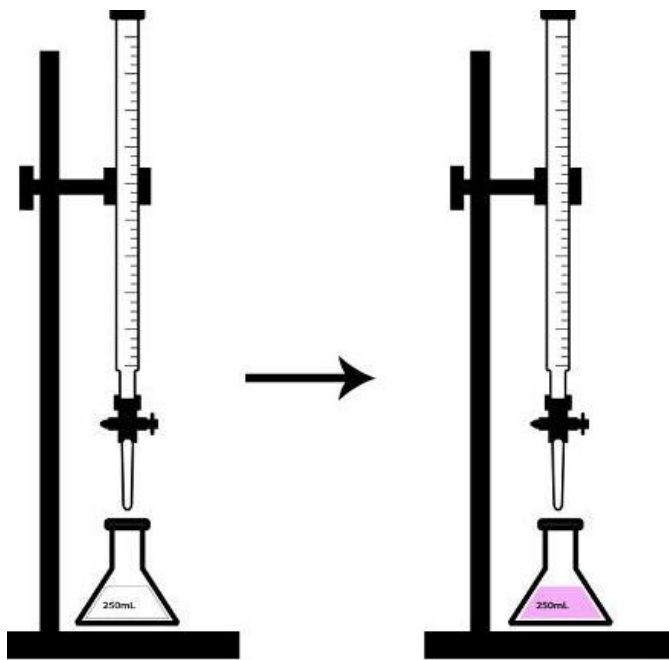
3

Erros aleatórios

Erro aleatório



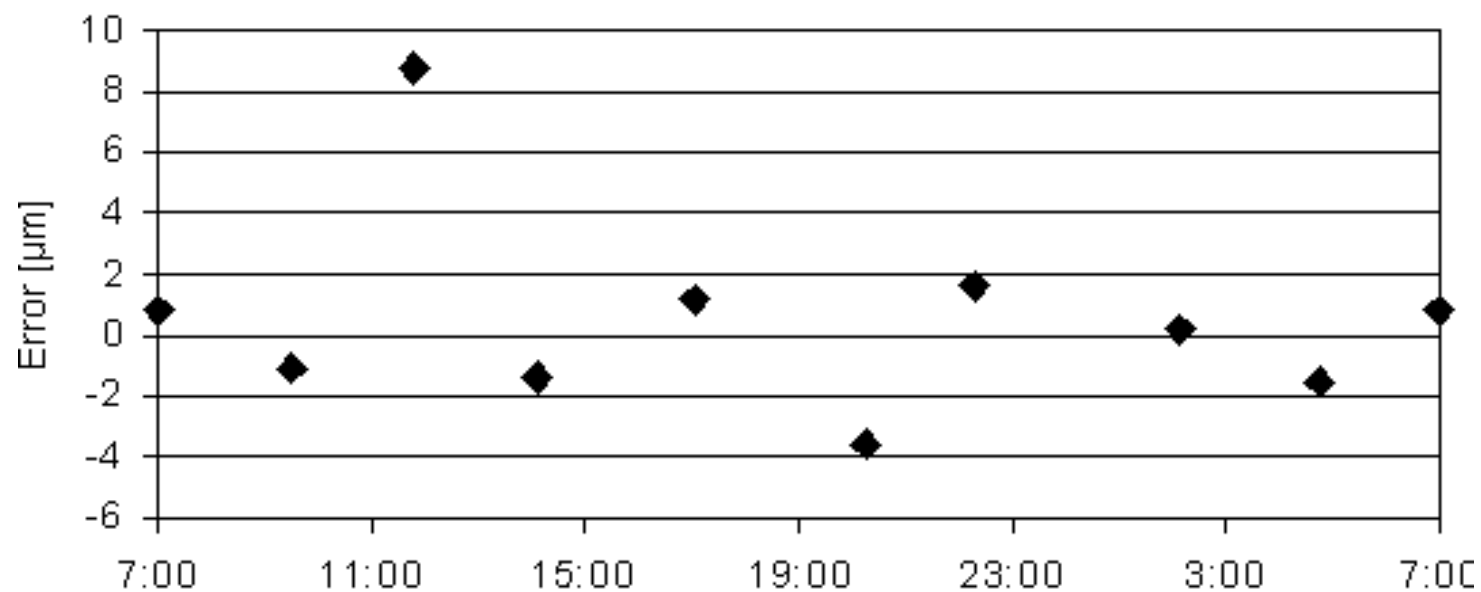
- Variabilidade Instrumental
- Variações nas Condições Ambientais
- Imprecisões no Procedimento Experimental
- Contaminação de Reagentes ou Amostras
- Erro Humano
- Instabilidade Química



1ª titulação = 13,2 mL

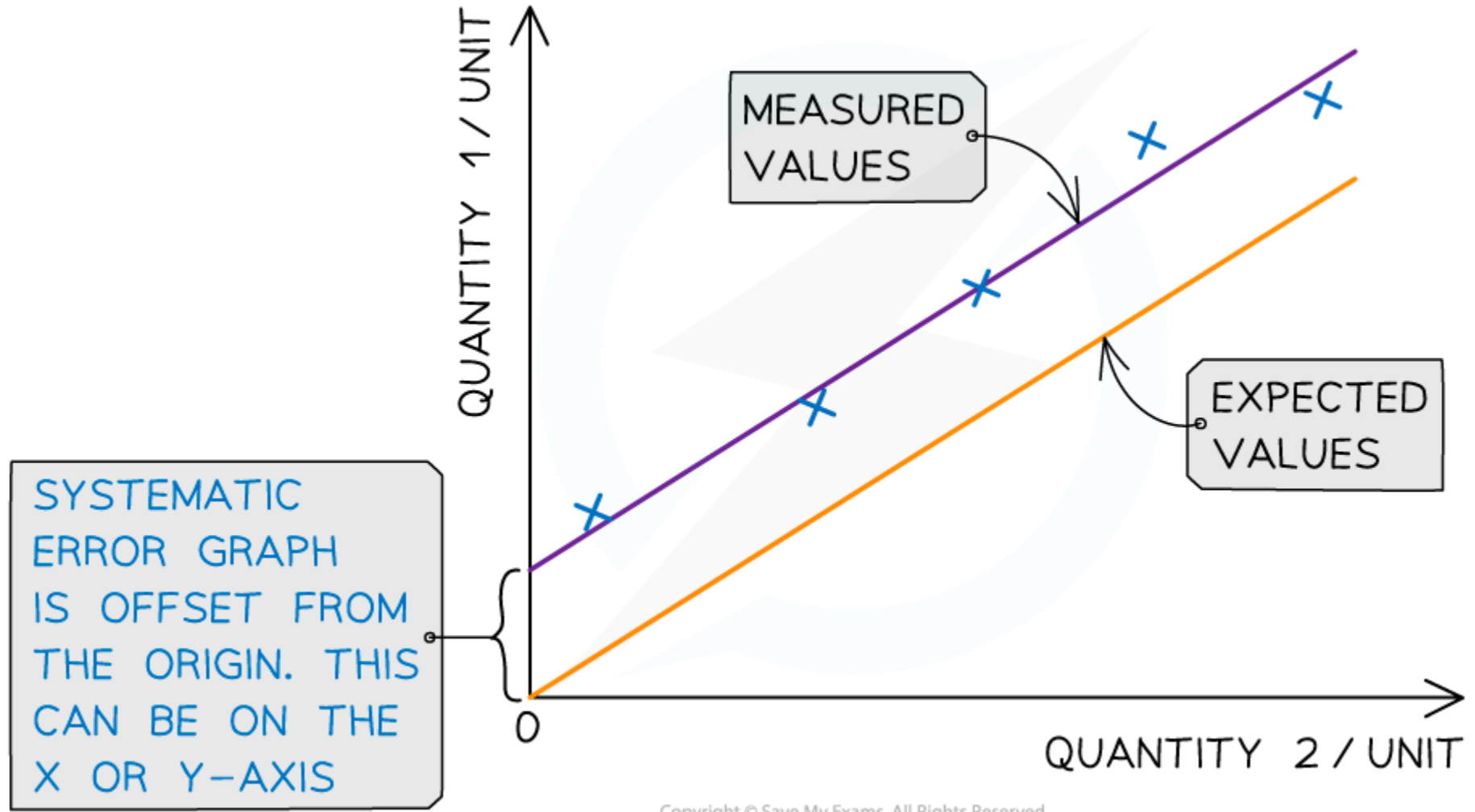
2ª titulação = 13,5 mL

Random Error



Erro sistemático

- Erros instrumentais
- Erros de método
- Erros pessoais



Erros grosseiros

$$2 + 2 = 5$$



Geralmente erro Humano -
Ex.: Esquecer de executar
algum passo do procedimento.



Esquecer de adicionar o
indicador da titulação

Amostragem

- Definir o que se quer analisar;
- Selecionar os pontos que são representativos



Identificar a população



Coletar uma amostra bruta



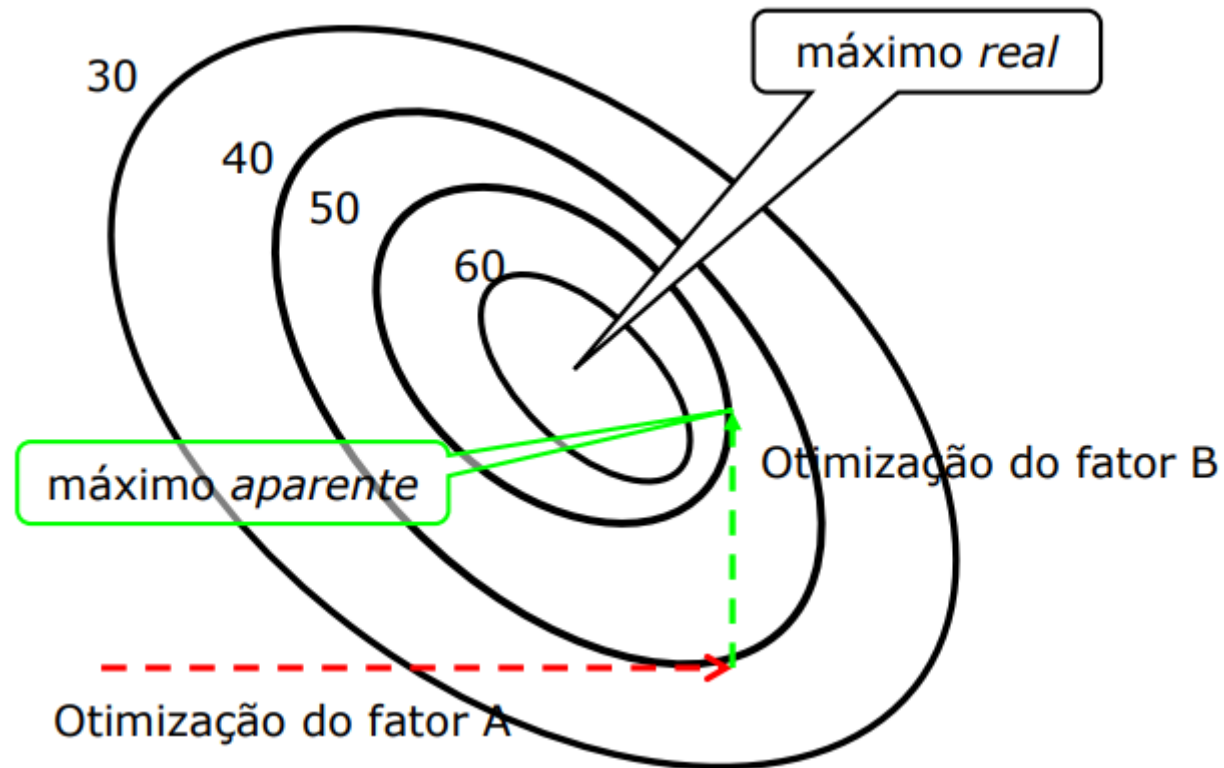
Reduzir a amostra bruta para uma amostra de laboratório



Desenvolvimento de pérolas de quitosana modificadas com ácido húmico para remoção de poluentes químicos da água

Planejamento experimental

Analise multivariada
X
Analise univariada



Determinação da capacidade adsorção de metais por materiais

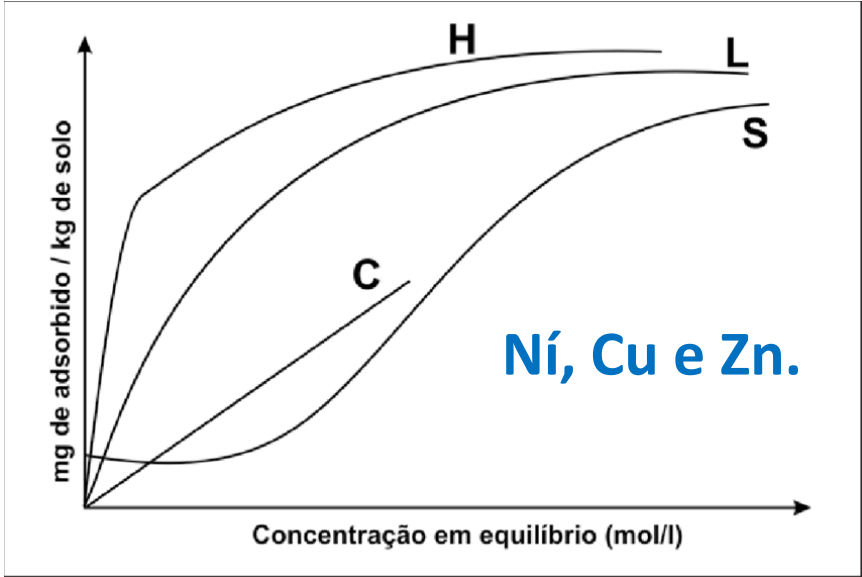


Sedimento



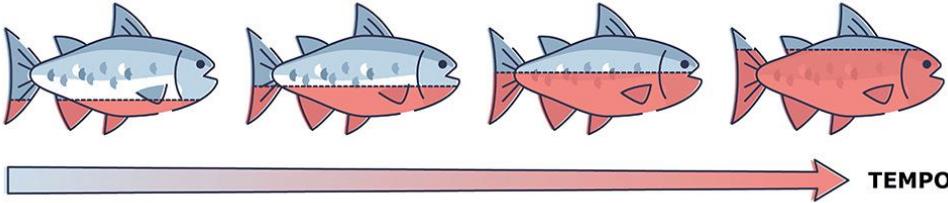
AH

Determinação da capacidade de adsorção de metais regulados



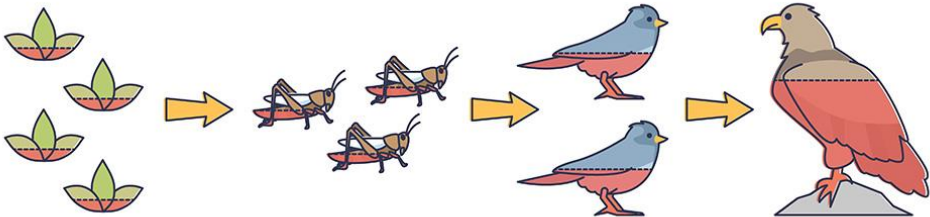
Avaliação da biodisponibilidade

BIOACUMULAÇÃO



● CONTAMINANTE

BIOMAGNIFICAÇÃO



concentrações ↓ podem se tornar tóxicas para o homem para biota

