

MODELO MATEMÁTICO PARA ACERTO DE COEFICIENTES DE EQUAÇÕES QUÍMICAS

Alexandre de Castro

Hoje, apesar de todo o avanço tecnológico e científico do homem, existem muitos mistérios a serem desvendados, mistérios esses que implicam uma grande soma de esforços por parte de vários segmentos científicos, inclusive segmentos das ciências humanas.

Visando a uma contribuição para esses esforços é que apresentamos o seguinte artigo que é uma abordagem simplificada de uma pesquisa sobre um desses mistérios: os mecanismos pelos quais as espécies químicas interagem.

Neste artigo, demonstramos as facilidades de um modelo matemático desenvolvido com o objetivo de proporcionar uma maior compreensão de balanceamento químico, cuja finalidade é estabelecer a quantidade de matéria necessária para que ocorra uma determinada reação e sua posterior representação gráfica através de uma equação química.

Alexandre de Castro é estudante de Física da Universidade Federal de Pelotas, vencedor na área de projetos de Química da I Feira de Produção Tecnológica.

1. Introdução

Antes das fórmulas das substâncias nas equações químicas, aparecem números denominados coeficientes que indicam a quantidade mínima de moléculas, íons ou íons-fórmula que reagem e a quantidade mínima desses que se formam.

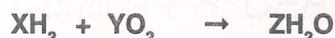
A determinação dos coeficientes de uma equação química recebe o nome de balanceamento, que pode ser realizado através de três métodos: REDOX, ALGÉBRICO, e TENTATIVAS.

O método REDOX é muito importante, porém é utilizado somente nas reações de oxirredução. Os métodos ALGÉBRICO e TENTATIVAS estendem-se a todos os tipos de equações químicas e respectivas reações, entretanto, tanto em determinações algébricas como tentando acertar coeficientes, é necessário estabelecer uma relação entre produtos e reagentes, mantendo-se assim o conceito de balanceamento propriamente dito.

A equação de formação da água através do oxigênio (O_2) e hidrogênio (H_2) é representada matematicamente por incógnitas **A**, **B** e **C**, ou esquematicamente:



O termo **A** é entendido como sendo XH_2 , o termo **B** como YO_2 e o termo **C** como ZH_2O . Dessa maneira, a equação $A + B = C$ é escrita quimicamente:



Segundo a representação química, **X** representa o coeficiente da substância simples hidrogênio; **Y**, o coeficiente da substância simples oxigênio; **Z**, o coeficiente da substância pura água.

De modo geral, **X** moléculas de H_2 reagem com **Y** moléculas de O_2 produzindo **Z** moléculas de H_2O .

Como os átomos não são modificados, o número de átomos de cada elemento no início da reação é igual ao número de átomos desse mesmo elemento no final da reação.

Assim, para o hidrogênio, $2X = 2Z$ e para oxigênio, $2Y = Z$.

As variáveis **X**, **Y** e **Z** satisfazem as equações matemáticas lineares do sistema:

$$\begin{cases} 2x - Z \\ 2x - Z = 0 \end{cases}$$

Esse sistema é facilmente resolvido por adição ou substituição, porém qualquer solução dada ao método algébrico dependerá da igualdade entre os membros da equação matemática, pois, no caso anterior, **X** depende de **Z** e **Z** depende de **Y** e assim para qualquer equação matemática adaptada a uma equação química. Portanto, toda equação química pode ser representada por uma equação matemática de primeiro grau.

No caso do método das TENTATIVAS, as conclusões são análogas, de modo que para determinar os coeficientes dos reagentes é necessário o conhecimento do que foi produzido, ou seja, dos reativos.

Em ambos os métodos a igualdade entre os átomos dos reagentes e átomos dos produtos é fundamental, mostrando que produtos são química e matematicamente função dos reagentes e que reagentes são função matemática dos produtos.

Este artigo demonstra parte de um estudo sobre equações químicas que visa a um novo conceito e definição de balanceamento químico, conceito esse elaborado a partir de verificações matemático-experimentais.

2. Balanceamento

Qualquer processo utilizado para se obter coeficientes de uma equação química é denominado balanceamento. Os principais processos são de amplo conhecimento, porém todos estes processos são uma função matemática $f(x) = y$.

Pesquisas levaram a crer que o acerto de coeficientes (balanceamento) não é necessariamente uma função $f(x) = y$, onde **y** são os reagentes e **x** os produtos.

Em todos os métodos conhecidos de balanceamento, somente os componentes explícitos da reação são levados em consideração, ou seja, se:



Somente **HCl**, **NaOH**, **NaCl** e **H₂O** são utilizados para o acerto de coeficientes, pois são explicitamente os componentes da reação. Porém como a reação de formação de cloreto de sódio (**NaCl**) é uma reação comum (*simples*) e não de oxirredução; os elétrons não são levados em conta.

Na reação: **HCl + NaOH → NaCl + H₂O**, não há transferência de elétrons, contudo cada forma (*substância*) participante possui uma carga em módulo, que nada mais é que a atomicidade multiplicada pela valência com cátion. Essa carga é um componente implícito da reação que deve ser reconhecido seguramente como participante da mesma.

Segundo a pesquisa, na reação genérica **aA + bB → cC**, a carga de **A** é diretamente proporcional ao número de moléculas, íons ou íons-fórmula de **B** e vice-versa.

Por conseguinte, matematicamente:

a ∝ **y_B** Onde **a** e **b** são os coeficientes das substâncias **A** e **B**.

b ∝ **y_A** e **y_A** e **y_B** são as cargas destas respectivamente.

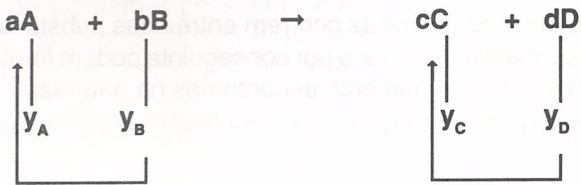
Deste modo é possível relacionar **a**, **b**, **y_A** e **y_B** em uma única fórmula matemática:

$$a \cdot y_A = b \cdot y_B$$

3. Teoria segundo a pesquisa

É importante ressaltar que mesmo levando-se em consideração as cargas das substâncias, ainda há explicitamente uma correspondência de reagentes entre si e de produtos entre si.

Esquemáticamente é fácil visualizar:



É possível transformar as proporções: **a** ∝ **y_B** e **b** ∝ **y_A**, em equações lineares.

$$\begin{array}{l} a = K \cdot y_B \\ b = K \cdot y_A \end{array}$$

Se **a** e **b** forem entendidos como os mínimos números inteiros das formas que devem reagir, não se faz necessário conhecer o valor de **K**.

$$a = y_B$$

$$b = y_A$$

Sendo assim, o número mínimo de moléculas, íons ou íons-fórmula de um dos participantes de uma reação química é sempre igual ao número de elétrons livres nos radicais da outra substância participante.

3.1. Consequências das proporções e equações matemáticas lineares

Toda equação matemática linear de duas variáveis pode ser desmembrada em duas equações de segundo grau com uma variável, onde o valor da variável é proporcional a um fator qualquer. Se a equação química pode ser adaptada a uma equação matemática, é possível o desmembramento também da equação química.

Se: **Ax = Bx₁**, e admitindo-se o coeficiente **A** como o coeficiente de um dos reagentes e **x** como a carga do mesmo, e ainda, fazendo-se as mesmas considerações para o outro reagente participante da reação, tem-se:

$$A = \sqrt{\frac{K \cdot x_1}{x}}$$

$$B = \sqrt{\frac{K \cdot x}{x_1}}$$

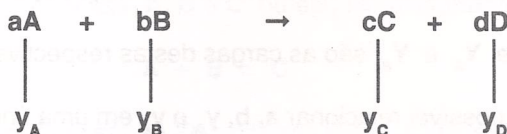
Como em uma reação química as proporções são sempre constantes, pode-se atribuir a **K** o valor de **1 (um)** e não se altera a igualdade:

$$A = \sqrt{\frac{x_1}{x}}$$

$$B = \sqrt{\frac{x}{x_1}}$$

Em síntese, se todas as colocações anteriormente feitas valem para reagentes, também são válidas para produtos.

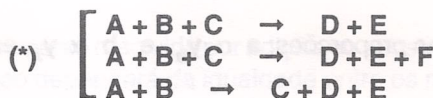
Em uma equação genérica que envolva quatro substâncias, as consequências matemáticas são as seguintes:



$$a = \sqrt{\frac{y_B}{y_A}} \quad // \quad b = \sqrt{\frac{y_A}{y_B}} \quad /// \quad c = \sqrt{\frac{y_D}{y_C}} \quad // \quad d = \sqrt{\frac{y_C}{y_D}}$$

3.2. Reações entre três ou mais substâncias

Nem todas as reações químicas ocorrem entre duas substâncias. Muitas reações são compostas de três ou mais reagentes e por conseguinte podem formar três ou mais reativos. Reações do tipo (*) são freqüentemente encontradas na natureza e também realizadas em laboratório, de modo que são reações que não fogem às mesmas leis de proporção das demais.



Se o fenômeno em questão não envolver corrente elétrica, duas são as colocações feitas a respeito:

1ª) as reações são divididas em etapas e subetapas, e as subetapas são compostas somente por duas espécies químicas;

2ª) as reações envolvendo três ou mais reagentes formam compostos instáveis de adição e/ ou compostos intermediários.

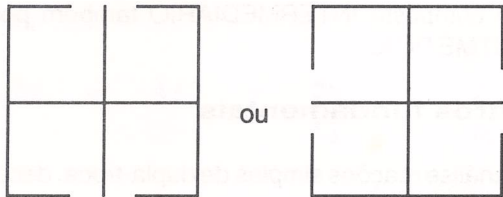
Caso o fenômeno químico envolva corrente elétrica (*reações de oxirredução*), a primeira colocação deixa de ser hipotética, pois é óbvio que apenas duas substâncias reagem de cada vez. Nas reações redox existe apenas um agente oxidante e um agente redutor.

De modo simplista, todo item 3.2 pode ser entendido conforme os seguintes exemplos:

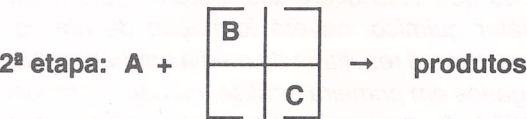
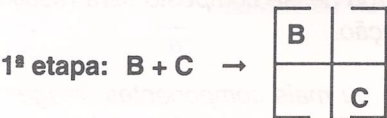
1º Exemplo: $A + B + C \rightarrow \text{produtos}$

Nesse exemplo, três formas químicas reagem e formam um produto genérico. Para esse caso, as formas **B** e **C** são de mesma função química e a forma **A** pertence a uma função oposta.

Matematicamente, verifica-se que ocorre uma adição de cargas de **B** e **C**, formando-se, assim, um composto instável denominado composto de ADIÇÃO, cuja simbologia que indica a formação deste composto é:



O esquema geral da reação em etapas fica:
reação geral: **A + B + C → produtos**



O composto **A** irá reagir somente quando o composto de ADIÇÃO estiver formado, finalizando, então, a reação com a formação do produto final.

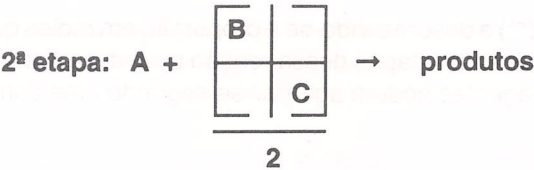
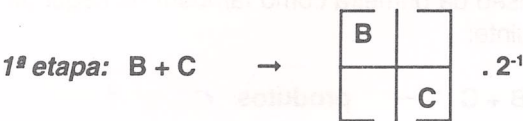


Nesse exemplo, igualmente, três formas químicas reagem e dão origem a um produto genérico . Para esse caso, as três formas pertencem, hipoteticamente, a funções químicas diferentes, porém duas destas formas possuem o mesmo caráter químico.

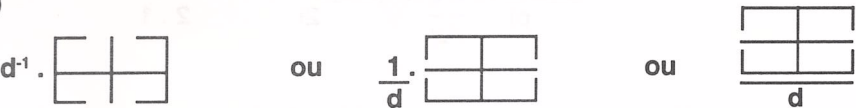
Adotando-se **A** e **C** como, supostamente, as substâncias do mesmo caráter, é possível concluir que somente após a formação de um composto intermediário formado por **B** e **C** haverá reação com a substância **A** e por conseguinte a formação do produto final.

Este composto formado por **B** e **C** é dito INTERMEDIÁRIO, pois verifica-se que se as substâncias possuem caráter e funções diferentes, as cargas destas somam-se e o total é dividido por 2 (*dois*).

Esquemáticamente, a reação em etapas fica:



A simbologia adotada para indicar a formação de um composto INTERMEDIÁRIO é igual à simbologia usada nos compostos de ADIÇÃO, apenas acrescenta-se um denominador (**d**)



Como o valor do denominador é sempre igual a dois, a carga do composto INTERMEDIÁRIO será sempre igual a:

$$\frac{\sum y}{d} = \frac{y1 + y2}{2}$$

Por esse motivo o composto INTERMEDIÁRIO também pode ser denominado de composto de MÉDIA ARITMÉTICA.

3.2.1. Parâmetros fundamentais

Tomando-se para análise reações simples de dupla-troca, decomposição, síntese, etc., é possível resumir que:

Quando em uma reação química houver três ou mais componentes (reagentes ou produtos) e alguns desses componentes pertencerem à mesma função química, haverá formação de um composto de ADIÇÃO, onde a carga desse composto será resultado da somatória das cargas dos compostos de mesma função.

Quando em uma reação química houver três ou mais componentes (reagentes ou produtos) e todos pertencerem a funções químicas diferentes, porém pelo menos dois componentes possuírem o mesmo caráter químico, haverá formação de um composto INTERMEDIÁRIO, onde a carga do composto será resultado da média aritmética das cargas dos compostos que formam pares conjugados em primeira análise, ou seja, compostos que formem uma reação de síntese, cujo produto formado não seja igual a um dos reativos do produto final da reação.

3.2.2. Reação Redox

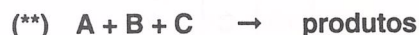
Nas equações químicas que envolvam agentes oxidantes e agentes redutores, não são válidas as mesmas considerações feitas para as equações simples. Apesar das reações redox apresentarem muitas vezes mais de dois reagentes, a reação fundamental ocorre entre o oxidante e o redutor que compõem uma reação eletroquímica propriamente dita. Porém as reações eletroquímicas são qualitativamente na proporção 1:1, portanto em relação aos elementos oxidados e reduzidos pode-se fazer as mesmas considerações, uma vez que o coeficiente do agente redutor é proporcional à variação eletrônica do elemento oxidado.

3.2.3. Formação das subetapas: formação de duplas

No subitem 3.2 são apresentadas duas hipóteses a respeito das reações que envolvem três ou mais reagentes. A primeira dessas hipóteses é sobre a formação de etapas e subetapas nas reações, indicando que somente duas espécies químicas reagem de cada vez.

Partindo desse princípio, é possível concluir que na reação (**), os três reagentes não se agrupam ao mesmo tempo; esse agrupamento dá-se em etapas ou ainda em subetapas se necessário.

O caminho usado para a conclusão da primeira como também da segunda hipótese apresentadas no subitem 3.2 é o seguinte:



Partindo-se da reação genérica (**) e desprezando-se a proporção em moles que possa haver entre A, B e C, é fácil concluir que se as etapas dessa reação podem ser formadas por somente dois componentes, esses reagentes podem agrupar-se segundo uma combinação simples C_n^p .

Admitindo-se: $p = 2$ e $n = 3$, tem-se:

$$C_3^2 = \frac{n \cdot (n - 1)}{p!} = \frac{3 \cdot (3 - 1)}{2!} = \frac{3 \cdot 2}{2 \cdot 1} = 3$$

Se a reação (**) possui somente duas etapas, a relação entre C_n^p / n_e , fica:

$$\frac{C_3^2}{n_e} = \frac{3}{2} = 1,5 \quad (\text{sendo } n_e \text{ igual ao número de etapas})$$

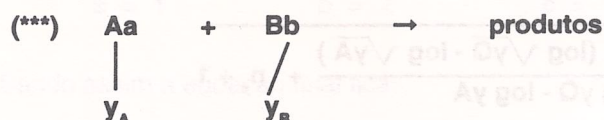
Dividindo-se n_o por 1,5:

$$\frac{n_o}{1,5} = 1,333...33 = 4/3 = \frac{2n_o}{C_3^2} = \frac{2^2}{n_r}$$

(sendo n_r igual ao número de reagentes)

$$\frac{2n_o}{C_3^2} = \frac{2^2}{n_r} \text{ equivale dizer que: } \frac{n_r \cdot n_o}{C_3^2} = 2$$

O subitem 3.1 mostra uma reação do tipo (***), onde as consequências matemáticas são as seguintes:

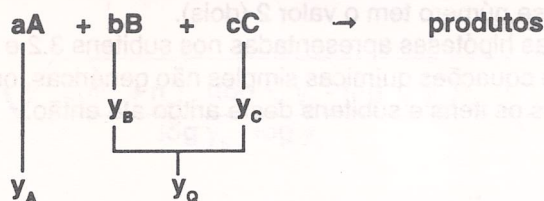


$$a = \sqrt{\frac{y_B}{y_A}}$$

e

$$b = \sqrt{\frac{y_A}{y_B}}$$

Se admitirmos que em uma reação comum, que envolva três reagentes, dois têm que ser de mesma função ou possuir pelo menos o mesmo carácter químico, tem-se:



Então:

$$a = \sqrt{\frac{y_Q}{y_A}}$$

e

$$b = c = \sqrt{\frac{y_A}{y_Q}}$$

Tomando-se para cálculo a equação que determina o coeficiente a e fazendo-se o desenvolvimento matemático, é possível concluir que:

$$a = \sqrt{\frac{y_Q}{y_A}}$$

$$a^2 = \frac{y_Q}{y_A} \quad \log a^2 = \log (y_Q / y_A) \quad 2 \log a = \log (y_Q / y_A)$$

$$2 = \frac{\log (y_Q / y_A)}{\log a} = \frac{\log (y_Q / y_A)}{\log \sqrt{y_Q / y_A}} = \frac{\log y_Q - \log y_A}{\log \sqrt{y_Q} - \log \sqrt{y_A}}$$

Substituindo-se 2 (dois) por $\frac{n_r \cdot n_o}{C_3^2}$ tem-se:

$$C_3^2 = \frac{(\log \sqrt{y_Q} - \log \sqrt{y_A}) \cdot n_r \cdot n_o}{\log y_Q - \log y_A}$$

Sendo: $C_n^p = \frac{n \cdot (n - 1)}{p!} = \frac{n^2 - n}{2}$

e sabendo-se que quando $n = n_r$ equivale dizer que $n_o = n_r - 1$, a conclusão final é a seguinte:

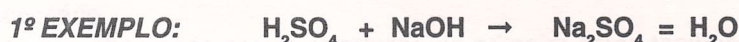
$$(***)n_r = \sqrt{\frac{2(n_r^2 + n_o) \cdot (\log \sqrt{y_Q} - \log \sqrt{y_A})}{\log y_Q - \log y_A}} + n_o + 1$$

Desse modo, o número de reagentes participantes de uma reação química é sempre igual à expressão (***).

3.2.3.1. Exemplos não genéricos

O procedimento usado para chegar à equação matemática (****) foi baseado no princípio da formação de duplas nas etapas e subetapas de uma reação química. Como consequência, desse princípio, encontrou-se um número constante que indica a formação dessas duplas e esse número tem o valor 2 (dois).

Para ratificar as hipóteses apresentadas nos subitens 3.2 e 3.2.1, são apresentados quatro exemplos de equações químicas simples não genéricas, onde pode ser constatado um resumo de todos os itens e subitens deste artigo até então.



I) Balanceamento: segundo o subitem 3.1, o balanceamento pode ser feito através das consequências das proporções e equações matemáticas lineares mostradas nos itens 2 e 3, ou seja, sendo uma equação (****), onde **a**, **b**, **c** e **d** são os coeficientes das substâncias, e y_a , y_b , y_c e y_d são as cargas dessas substâncias respectivamente, e as consequências matemáticas são as seguintes:

$$a = \sqrt{\frac{y_b}{y_a}} \quad b = \sqrt{\frac{y_a}{y_b}} \quad c = \sqrt{\frac{y_d}{y_c}} \quad d = \sqrt{\frac{y_c}{y_d}}$$

Quando $y_a = 2$, $y_b = 1$, $y_c = 2$ e $y_d = 1$, os coeficientes são:

$$a = \sqrt{\frac{1}{2}} \quad b = \sqrt{\frac{2}{1}} \quad c = \sqrt{\frac{1}{2}} \quad d = \sqrt{\frac{2}{1}}$$



$$a = 0,7071067 \quad b = 1,4142136 \quad c = 0,7071067 \quad d = 1,4142136$$

Dividindo-se os valores encontrados pelo menor número destes valores, é possível obter os menores números inteiros:

$$a = \frac{0,7071067}{0,7071067} \quad b = \frac{1,4142136}{0,7071067} \quad c = \frac{0,7071067}{0,7071067} \quad d = \frac{1,4142136}{0,7071067}$$

Portanto:

$$a = 1 \quad b = 2 \quad c = 1 \quad d = 2$$

Sendo assim a equação final fica:



II) Confirmação da formação de duplas em cada etapa ou subetapa da reação: nesse caso, a reação possui, logicamente, uma etapa e não possui subetapa, pois existem apenas dois reagentes participantes. Mesmo assim é possível a aplicação da expressão (****) para efeito de confirmação.

$$n_o = 1, \quad y_a = 2, \quad y_b = 1, \quad n_r = ?$$

$$n_r = \sqrt{\frac{2(n_o^2 + n_o) \cdot (\log \sqrt{y_b} - \log \sqrt{y_a})}{\log y_b - \log y_a}} + n_o + 1$$

$$n_r = \sqrt{\frac{2(1^2 + 1) \cdot (\log \sqrt{1} - \log \sqrt{2})}{\log 1 - \log 2}} + 1 + 1$$

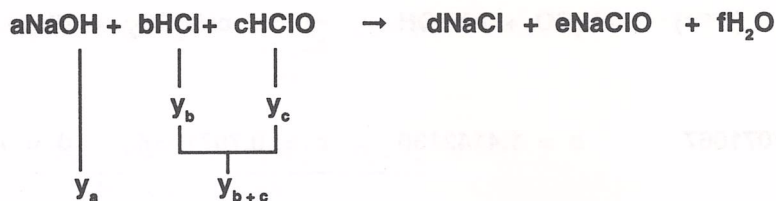
$$n_r = \sqrt{\frac{4(-0,150515)}{-0,30103}} + 2$$

$$n_r = \sqrt{2+2} = \sqrt{4} \Rightarrow n_r = 2$$

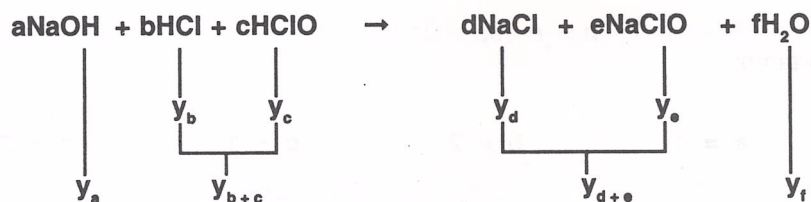
Portanto, admitindo-se $n_o = 1$ encontra-se $n_r = 2$, ou seja, o número de reagentes que entram na reação.



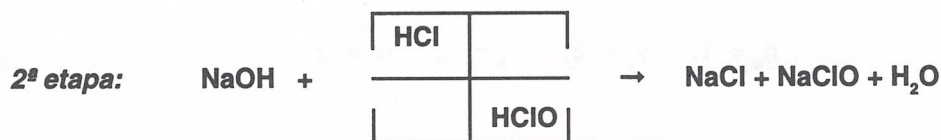
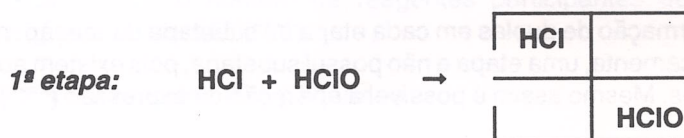
I) Balanceamento: segundo o subitem 3.2.1. “parâmetros fundamentais”, quando a reação apresenta três componentes e dois são de mesma função química, há formação de um composto de ADIÇÃO, onde a carga deste é resultado da soma das cargas dos compostos de mesma função, portanto:



Como os reativos são derivados dos reagentes, pode-se fazer as mesmas considerações:



Segundo o subitem 3.2., em etapas a reação é a seguinte:



Conseqüentemente:

$$a = \sqrt{\frac{y_{b+c}}{y_a}} \quad b = c = \sqrt{\frac{y_a}{y_{b+c}}} \quad d = \sqrt{\frac{y_f}{y_{d+e}}} \quad f = \sqrt{\frac{y_{d+e}}{y_f}}$$

Sabendo-se que: $y_a = 1, y_b = 1, y_c = 1, y_{b+c} = 2, y_d = 1, y_e = 1, y_{d+e} = 2, y_f = 1$, os coeficientes são:

$$a = \sqrt{\frac{2}{1}} \quad b = c = \sqrt{\frac{1}{2}} \quad d = e = \sqrt{\frac{1}{2}} \quad f = \sqrt{\frac{2}{1}}$$

$$a = 1,4142136 \quad b = c = 0,7071067 \quad d = e = 0,7071067 \quad f = 1,4142136$$

Dividindo-se pelo menor valor:

$$a = \frac{1,4142136}{0,7071067} \quad b = c = \frac{0,7071067}{0,7071067} \quad d = e = \frac{0,7071067}{0,7071067} \quad f = \frac{1,4142136}{0,7071067}$$

Portanto:

$$a = 2 \qquad b = c = 1 \qquad d = e = 1 \qquad f = 2$$

Sendo assim a equação final fica:



II) Confirmação da formação de duplas em cada etapa ou subetapa da reação: nessa equação química, verificam-se três reagentes, onde dois são ácidos e um é álcali. Portanto, segundo a expressão (****) e os subitens 3.2.1 e 3.2, há adição das cargas dos ácidos, pois há formação de um composto de ADIÇÃO.

Se $y_{\text{HClO} + \text{HCl}} = y_b = 1 + 1 = 2$, $y_{\text{NaOH}} = y_a = 1$ e $n_o = 2$, aplicando a expressão (****) tem-se que:

$$n_r = \sqrt{\frac{2(n_o^2 + n_o) \cdot (\log \sqrt{y_b} - \log \sqrt{y_a})}{\log y_b - \log y_a}} + n_o + 1$$

$$n_r = \sqrt{\frac{2(2^2 + 2) \cdot (\log \sqrt{2} - \log \sqrt{1})}{\log 2 - \log 1}} + 2 + 1$$

$$n_r = \sqrt{\frac{12(0,150515)}{0,30103}} + 3$$

$$n_r = \sqrt{6 + 3} = \sqrt{9} \Rightarrow n_r = 3$$

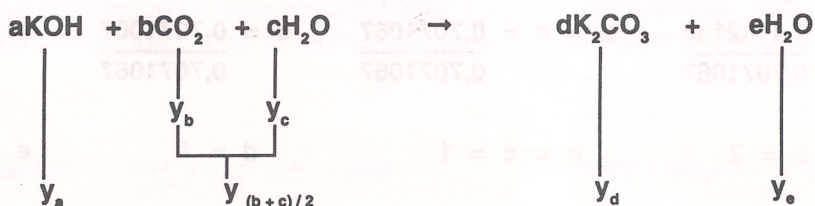
Portanto, admitindo-se $n_o = 2$, encontra-se $n_r = 3$, ou seja, o número de reagentes que entram na reação.

Como o número de reagentes (n_r) encontrado foi 3 (três) e esse número foi obtido através da expressão (****) e ainda sendo essa expressão baseada no princípio da formação de duplas (proporção qualitativa 1:1) nas etapas da reação, verifica-se a veracidade do que foi proposto nos subitens 3.2 e 3.2.1.

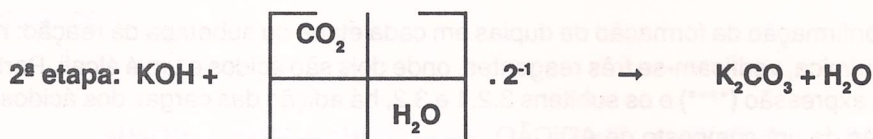
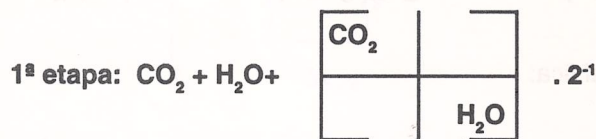
O cálculo do número de reagentes só foi possível admitindo que na reação de soda cáustica (NaOH) com água de cloro (HCl + HClO) havia duas etapas e esse número de etapas (n_o) só é possível quando se admitem os parâmetros do subitem 3.2.1.



I) Balanceamento: como nesse caso verificam-se três reagentes: um é álcali (KOH), outro é óxido ácido (CO_2) e o remanescente é água (H_2O), é possível concluir que sendo a água uma substância sem função química, ela adquire um caráter químico conforme a conveniência. Portanto, para essa reação, a água possui caráter básico e juntamente com o dióxido de carbono (CO_2) produz um composto INTERMEDIÁRIO, cuja carga é resultado da média aritmética das cargas modulares dessas substâncias (H_2O e CO_2):



Segundo o subitem 3.2, em etapas a reação é a seguinte:



Conseqüentemente:

$$a = \sqrt{\frac{y_{(b+c)/2}}{y_a}} \quad b = c = \sqrt{\frac{y_a}{y_{(b+c)/2}}} \quad d = \sqrt{\frac{y_d}{y_o}} \quad e = \sqrt{\frac{y_d}{y_o}}$$

Como a água está funcionando com carácter básico, reage primeiramente com o óxido ácido (CO_2) e forma o ácido carbônico (H_2CO_3).

Sendo a carga do ácido carbônico igual a 2 (dois), conseqüentemente, a carga, na reação, do gás carbônico (CO_2) e da água é igual também a 2 (dois). Então:

$$y_{\text{KOH}} = y_a = 1, \quad y_{(\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O})/2} = y_{(b+c)/2} + \frac{2+2}{2} = 4/2 = 2, \quad y_{\text{K}_2\text{CO}_3} = y_d = 2 \quad e \quad y_{\text{H}_2\text{O}} = y_o = 1.$$

O valor da carga da água (y_o) no produto é igual a 1 (um), pois no produto a água não está reagindo, portanto não adquire um carácter químico e por conseguinte não modifica sua carga natural.

A partir daí, os coeficientes são determinados conforme os exemplos anteriores:

$$a = \sqrt{\frac{2}{1}} \quad b = c = \sqrt{\frac{1}{2}} \quad d = \sqrt{\frac{1}{2}} \quad e = \sqrt{\frac{2}{1}}$$

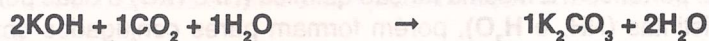
$$a = 1,4142136 \quad b = c = 0,7071067 \quad d = 0,7071067 \quad e = 1,4142136$$

Dividindo-se pelo menor valor:

$$a = \frac{1,4142136}{0,7071067} \quad b = c = \frac{0,7071067}{0,7071067} \quad d = \frac{0,7071067}{0,7071067} \quad e = \frac{1,4142136}{0,7071067}$$

$$a = 2 \quad b = c = 1 \quad d = 1 \quad e = 2$$

Sendo assim a equação final fica:



II) Confirmação da formação de duplas em cada etapa ou subetapa da reação: analisando-se a equação de formação do carbonato de potássio (K_2CO_3), verifica-se a existência de três reagentes distintos. Em relação às funções químicas, existe um óxido, um álcali (base) e água que é uma substância, cuja função está entre óxido e hidreto, porém seu carácter químico é facilmente constatado na reação.

Para a reação, a análise é a seguinte:



Segundo Lewis, o dióxido de carbono (CO_2) recebe elétrons e a água perde elétrons, portanto são ácido e base respectivamente. Então são o CO_2 e H_2O as substâncias que em primeira análise formam pares conjugados.

Sendo assim, conforme os subitens 3.2. e 3.2.1., a reação possui duas etapas: na primeira forma-se o composto INTERMEDIÁRIO e na segunda este composto reage com o hidróxido de potássio (KOH).

Se $y_{\text{KOH}} = y_a = 1$, $y_{(\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O})/2} = y_{(b+c)/2} = 2$ e $n_o = 2$, a expressão abaixo determina o valor de n_r .

$$n_r = \sqrt{\frac{2(n_o^2 + n_o) \cdot (\log \sqrt{y_b} - \log \sqrt{y_a})}{\log y_b - \log y_a}} + n_o + 1$$

$$n_r = \sqrt{\frac{2(2^2 + 2) \cdot (\log \sqrt{2} - \log \sqrt{1})}{\log 2 - \log 1}} + 2 + 1$$

$$n_r = \sqrt{\frac{12(0,150515)}{0,30103}} + 3$$

$$n_r = \sqrt{6+3} = \sqrt{9} \Rightarrow n_r = 3$$

Admitindo-se que a reação possui duas etapas, para todo $y_b = y_{(b+c)/2}$, encontra-se o número de reagentes (n_r) que entram na reação.

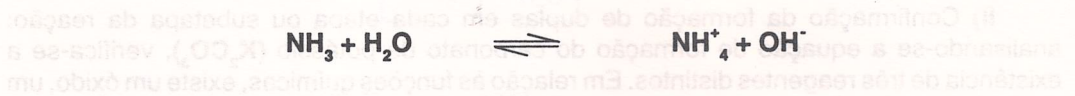
Portanto, verifica-se a veracidade dos subitens 3.2 e 3.2.1. como se verificou no exemplo anterior.

É importante ressaltar que a formação do composto INTERMEDIÁRIO se faz primeiramente pelos compostos que possam formar uma reação de síntese, (CO_2 e H_2O). A carga desses compostos é igual ao número de prótons e de elétrons que cederam ou receberam.



I) Balanceamento: essa reação nada mais é que as duas situações expostas nos exemplos 2 e 3 juntas.

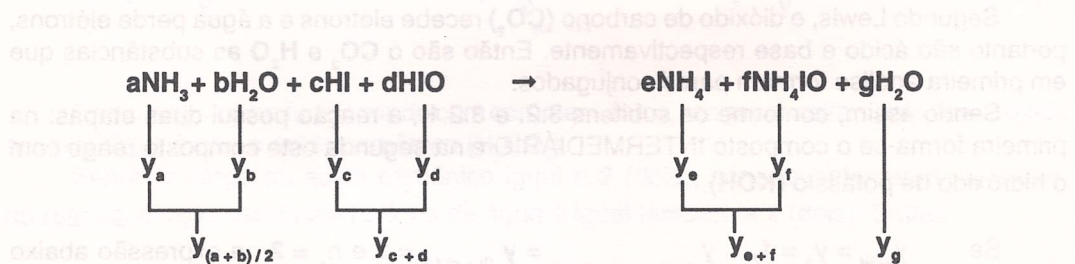
Para essa equação, existem, existem quatro espécies químicas reagindo (NH_3 , H_2O , HI e HIO), onde duas pertencem à mesma função química (HI e HIO) e duas pertencem a funções químicas distintas (NH_3 e H_2O), porém formam pares conjugados em primeira análise, pois podem formar uma reação de síntese e produzir um composto INTERMEDIÁRIO.



Como a amônia (NH_3) recebe um próton cedido pela água (H_2O), é possível concluir que a amônia adquire carácter básico e a água carácter ácido. Sendo assim, os pares conjugados são:



Segundo os subitens 3.1 e 3.2.1., as conseqüências matemáticas são as seguintes:



$$a = b = \sqrt{\frac{y_{c+d}}{y_{(a+b)/2}}} \quad c = d = \sqrt{\frac{y_{(a+b)/2}}{y_{c+d}}} \quad e = f = \sqrt{\frac{y_g}{y_{e+f}}} \quad g = \sqrt{\frac{y_f}{y_g}}$$

Sendo: $y_a = 1, y_b = 1, y_{(a+b)/2} = 1, y_c = 1, y_d = 1, y_{c+d} = 2, y_e = 1, y_f = 1, y_{e+f} = 2$ e $y_g = 1$, então:

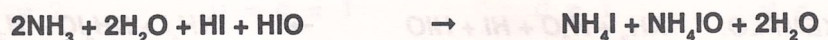
$$a = b = \sqrt{\frac{2}{1}} \quad c = d = \sqrt{\frac{1}{2}} \quad e = f = \sqrt{\frac{1}{2}} \quad g = \sqrt{\frac{2}{1}}$$

$$a = b = 1,4142136 \quad c = d = 0,7071067 \quad e = f = 0,7071067 \quad g = 1,4142136$$

Dividindo-se pelo menor valor encontrado, tem-se:

$$a = b = 2 \quad c = d = 1 \quad e = f = 1 \quad g = 2$$

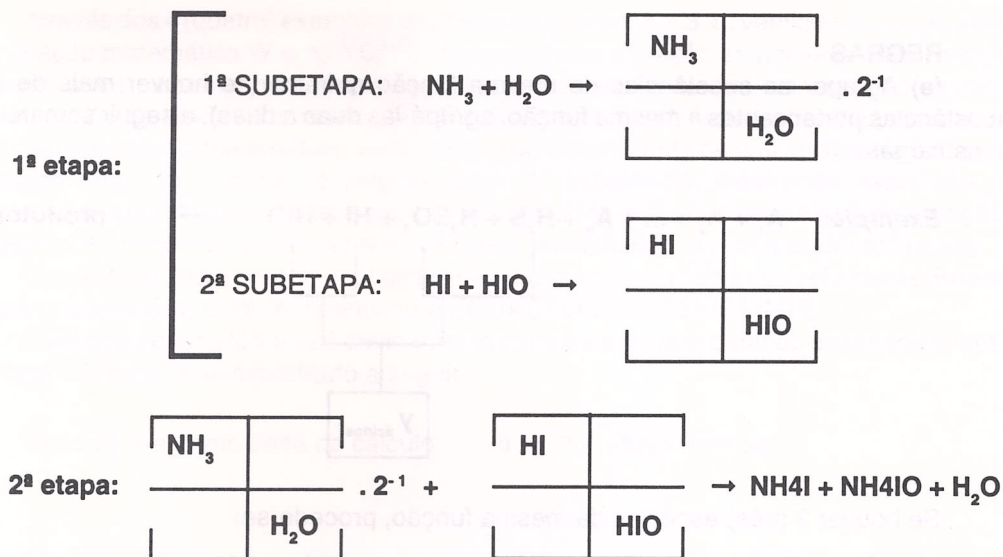
Sendo assim a equação final fica:



II) Confirmação da formação de duplas em cada etapa ou subetapa da reação: analisando o balanceamento da reação apresentada nesse exemplo, verifica-se a formação de um composto de ADIÇÃO e INTERMEDIÁRIO. Supondo-se que exista uma etapa para a formação dos compostos e outra etapa para a reação entre eles, então, a reação possui duas etapas.

Apesar de haver apenas uma etapa para a formação dos compostos de ADIÇÃO e INTERMEDIÁRIO, essa etapa é subdividida em subetapas. onde cada subetapa produz um desses compostos. Por conseguinte, pode-se considerar que a reação possui três etapas.

Em etapas, a reação é a seguinte:



3.3. Observações importantes:

Muitas vezes nos deparamos com reações químicas onde o número de reagentes e reativos (produtos) é superior a 4 (quatro). Nesse caso devemos seguir as mesmas regras (hipóteses) apresentadas no subitem 3.2.1., uma vez que através dessas regras dificilmente ocorre erro no balanceamento.

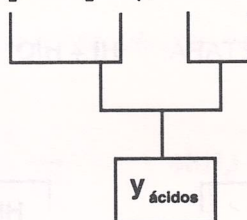
Para elucidar o subitem 3.2.1., apresentamos a seguir alguns dos principais artifícios matemáticos propostos neste artigo a fim de facilitar o entendimento do acerto de coeficientes.

Reações (equações) do tipo: $A_1 + A_2 + A_3 + \dots + A_n \rightarrow B_1 + B_2 + B_3 + \dots + B_n$, são facilmente balanceadas através das seguintes regras:

REGRAS

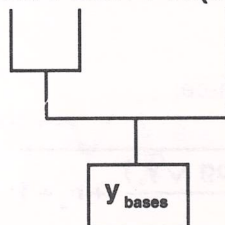
(a) Agrupar as substâncias de mesma função química (se houver mais de duas substâncias pertencentes à mesma função, agrupá-las duas a duas), a seguir somarem-se suas cargas.

Exemplo: $A_1 + A_2 + \dots + A_n + H_2S + H_2SO_4 + HI + HIO \rightarrow \text{produtos}$



Se houver 3 (três) espécies da mesma função, procede-se:

$A_1 + A_2 + \dots + A_n + KOH + LiOH + Ca(OH)_2 \rightarrow \text{produtos}$



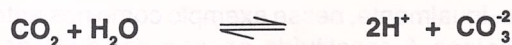
* Caso haja reagentes em número ímpar, procede-se conforme para 3 (três) reagentes, agrupando sempre em duplas.

Todos os artifícios utilizados para acertar os coeficientes dos reagentes são válidos para os reativos (produtos).

(b) Agrupar as substâncias que formam pares conjugados em primeira análise, ou seja, substâncias que formem uma reação de síntese, cujo produto não seja igual a um dos reativos do produto final da reação, a seguir soma-se a carga dessas substâncias e divide-se pelo número de componentes somados (média aritmética).

Exemplo: $Na_2O + CO_2 + H_2O \rightarrow Na_2CO_3 + H_2O$

Se o agruparmos Na_2O e CO_2 , o produto formado será um dos reativos do produto final (Na_2CO_3), por isso o agrupamento dá-se entre CO_2 e H_2O , produzindo, assim, um reativo INTERMEDIÁRIO.



Para calcular a carga das substâncias que formam o composto INTERMEDIÁRIO, procede-se conforme o exemplo acima.

Verifica-se que a água (H₂O) perdeu o oxigênio, cuja carga é igual a -2 e o dióxido de carbono (CO₂) recebeu esse oxigênio. Daí a carga de ambas as substâncias (H₂O e CO₂) ser igual a /2/ em módulo.

(c) Em uma reação que possua mais de dois reagentes , sempre há formação de um composto INTERMEDIÁRIO ou de ADIÇÃO. Caso a reação possua muitos reagentes, é comum que haja formação de compostos INTERMEDIÁRIOS a partir de compostos de ADIÇÃO e vice-versa.

4. Equação do coeficiente

Através dos 4 (quatro) exemplos expostos no subitem 3.2.3.1., verificou-se a aplicação da equação matemática $W = \sqrt{YQ/YL}$. Apesar dessa equação estabelecer uma relação somente entre os componentes que estão de um mesmo lado de uma equação química ($X + Y = Z + S$), ainda há uma relação X/Y e Z/S a ser considerada. Entretanto, através de um desenvolvimento matemático, verificou-se que o coeficiente de uma substância pode ser calculado somente a partir da própria carga da substância, mostrando assim que a proporção das reações químicas já está pré-estabelecida antes que ocorra a própria reação. Portanto, não necessita conhecer a reação para estabelecer sua proporção em moles.

O pré-estabelecimento do coeficiente de uma substância só é possível através de uma fórmula matemática, cuja denominação é EQUAÇÃO DO COEFICIENTE.

A dedução dessa fórmula é devidamente complexa, porém parte do desenvolvimento que leva à fórmula é demonstrado a seguir:

Tomando-se como base de cálculo $a = \sqrt{yb/ya}$ tem-se:

$$a = (yb/ya)^{1/2} \Rightarrow \log a = \log (yb/ya)^{1/2} \Rightarrow 2 \log a = \log (yb/ya)$$

$$C_{n_r}^2 = \frac{n_r \cdot (n_r - 1)}{2!} = \frac{n_r^2 - n_r}{2} \Rightarrow 2 = \frac{n_r^2 - n_r}{C_{n_r}^2}$$

$$\log a = \frac{C_{n_r}^2}{n_r^2 - n_r} \cdot \log (yb/ya) \Rightarrow a = 1/\log \left[\frac{C_{n_r}^2}{n_r^2 - n_r} \log (yb/ya) \right]$$

$$C_{n_r}^2 = \frac{(\log \sqrt{yb} - \log \sqrt{ya}) \cdot n_r \cdot n_r}{\log yb - \log ya} \Rightarrow \log a = \frac{(\log \sqrt{yb} - \log \sqrt{ya}) \cdot n_r \cdot n_r}{(\log yb - \log ya) \cdot (n_r^2 - n_r)} \cdot \log \left(\frac{yb}{ya} \right)$$

$$a = 10^{cte}, \text{ onde } cte = \frac{(\log \sqrt{yb} - \log \sqrt{ya})}{(n_r - 1) (\log yb - \log ya)} \cdot \log \left[\left(\frac{yb}{ya} \right)^{n_r} \right]$$

Partindo-se de uma pré-equação do coeficiente:

$$a = \log^{-1} \left[\frac{C_{n_r}^2}{n_r^2 - n_r} \cdot \log \left(\frac{yb}{ya} \right) \right]$$

É possível concluir que:

$$a = 10^{\left[\frac{C_{n_r}^2}{n_r^2 - n_r} \cdot \log (y_b/y_a) \right]}$$

Sendo: $\frac{C_{n_r}^2}{n_r^2 - n_r} = 1/2$, tem-se que: $a = 10^{[0,5 \cdot \log (y_b/y_a)]}$

$$a = 3,1622777^{\log (y_b/y_a)} \Rightarrow a = 3,1622777^{(\log y_b - \log y_a)}$$

Substituindo o fator $3,1622777^{\log y_b}$ através de operações matemáticas, chegou-se à conclusão que:

$$a = \sqrt[2]{5y a^3} \cdot K^{\ln y a} \text{ ou genericamente substituindo-se } K \text{ por } \beta \text{ e } a \text{ por } \alpha \text{ tem-se:}$$

$$\alpha = \sqrt[2]{5y^3} \cdot \beta^{\ln y^2}$$

A fórmula anterior é denominada EQUAÇÃO DO COEFICIENTE e pode ser facilmente aplicada a equações químicas quando é conhecido o valor momentâneo da carga modular da substância que participa da reação.

Sendo:

α (alfa) = coeficiente da espécie química;

y = carga da espécie química;

$\ln$ (neperiano) = logaritmo natural de base 2,7182818 [$\ln X = \log_e X$];

β (beta) = constante.

É possível calcular o coeficiente de qualquer substância antes mesmo que ocorra uma reação química, entretanto deve-se levar em consideração as substâncias que podem formar compostos de ADIÇÃO e INTERMEDIÁRIO, pois nesse caso faz-se necessário o conhecimento da reação e posterior reação química.

Outro fator importante a ser considerado é que nas equações eletroquímicas, somente os coeficientes dos agentes oxidante e redutor podem ser acertados com a EQUAÇÃO DO COEFICIENTE, pois nesse tipo de reação as etapas e subetapas não são iguais às etapas e subetapas das reações simples, exceto as ocorridas com os elementos oxidados e reduzidos.

Então para reações redox, a expressão fica:

$$\alpha = \sqrt[2]{5(\Delta y)^3} \cdot \beta^{\ln (\Delta y)^2}, \text{ onde } \Delta y \text{ é a variação eletrônica do elemento oxidado ou reduzido.}$$

5. Conclusão

Os exemplos mencionados neste artigo e qualquer outra situação envolvendo reações químicas podem ser balanceados através da EQUAÇÃO DO COEFICIENTE, desde que o valor de β seja conhecido, pois ao contrário não há como se aplicar a fórmula.

O termo β é um número irracional constante, para qualquer equação química, cujo valor, acreditamos ser cedo para divulgar, porém fica registrada nossa intenção a respeito de uma nova interpretação dos fenômenos químicos, que podem ser interpretados de várias maneiras, cuja uma delas é exposta através deste artigo que passa, principalmente, não à exaustão dos métodos de balanceamento já existentes e sim à inclusão de um novo método, método esse que faz uma nova interpretação dos mecanismos pelos quais as espécies químicas interagem.

6. Bibliografia

- (1) BOLDRINI et ali. Álgebra Linear. São Paulo: Harbra, 1986.
- (2) DEFINI, José Neto et ali. Química Inorgânica. Porto Alegre: Emma, 1975.