BALANCEAMENTO DE REAÇÕES QUÍMICAS POR SISTEMAS LINEARES: CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS E PRÁTICAS

Elizandro Max Borba
Universidade Estadual do Rio Grande do Sul
elizandro-borba@uergs.edu.br

Katiúscia Machado Nobre Borba
Universidade Federal do Rio Grande do Sul
katiusciamn@gmail.com

Eixo Temático: E4 – Práticas e Intervenções na Educação Básica e Superior
Modalidade: COMUNICAÇÃO CIENTÍFICA (CC)

Resumo

O balanceamento estequiométrico de reações químicas é comumente citado como aplicação de resolução de sistemas lineares (homogêneos, em particular), sendo, portanto, um exemplo de interdisciplinaridade entre a Matemática e a Química. No Ensino de Química, o balanceamento é feito tipicamente por tentativa-e-erro que, embora funcione bem para muitos casos, costumam não ser tão eficiente para reações mais complexas, potencialmente limitando a inserção dessas na prática didática. Em vista disso, tem-se apresentado métodos algébricos como alternativa. Neste trabalho, faremos algumas considerações teóricas sobre esses métodos quanto a restrições às variáveis, existência e número de soluções, bem como considerações práticas para a obtenção de soluções. Aplicamos o método a alguns casos não tão usuais quando o tema é abordado na literatura, como coeficientes fracionários, equações iônicas e de oxirredução.

Palavras-chave: Sistemas Lineares, Álgebra Linear, Química, Balanceamento, Interdisciplinaridade.

1 Introdução

Na prática de ensino de Química no Ensino Médio, o balanceamento de reações químicas costuma ser feita por métodos que basicamente consistem em tentativa-e-erro reforçados por regras empíricas. Por exemplo, NEHMI (1995) tem um capítulo dedicado ao balanceamento pelo “método das tentativas”, baseado em uma série de exemplos pontilhados por algumas dicas específicas. Já em TITO e CANTO (2006), não se discorre tanto sobre métodos, embora, ao tratar mais à frente sobre equações de oxirredução, cite que o balanceamento pode ser feito “por meio de tentativa e erro, como estamos acostumados a fazer”.

Diversos autores já notaram que o balanceamento equivale à resolução de um sistema linear homogêneo, e que os métodos de tentativa-e-erro podem ser limitantes à introdução de equações mais complexas. LAY (1999) cita alguns exemplos em exercícios de reações que se beneficiariam de auxílio computacional para serem balanceadas. GABRIEL e ONWUKA (2015) também utilizam a eliminação gaussiana mais estritamente para resolver o problema. Mais recentemente, TÔRRES, CAPISTRANO e MACIEL (2019) falam em utilizar um “método algébrico”, e enfatizam a oportunidade de uma interface entre a Matemática e a Química.

Neste trabalho, retomamos e aprofundamos o tema. Primeiramente, consideramos alguns aspectos teóricos que podem ser usados para ilustrar conceitos de Álgebra Linear envolvidos. Em seguida, apresentamos um método sistemático de resolução do problema que procura facilitar o balanceamento manual sem apelar explicitamente, o tanto quanto possível, para métodos matriciais. Acreditamos que o método possa vir a ter apelo entre estudantes que tenham dificuldade na falta de um método mais claro, bem como entre professores de Matemática e Química do Ensino Médio. Além disso, mostramos que o método pode ser facilmente estendido a alguns casos que normalmente são negligenciados mesmo nos tratamentos matriciais, como equações iônicas e de oxirredução.

2 Preliminares

Segundo ATKINS e JONES (2002), uma *reação química* é o processo de conversão de uma ou mais substâncias iniciais, chamadas *reagentes*, em outras substâncias, chamadas *produtos*. Esse processo é representado por um seta (→), na forma

$$\text{Reagentes} \rightarrow \text{Produtos}$$

Por exemplo, o sódio metálico reage vigorosamente com a água, formando gás hidrogênio e hidróxido de sódio em solução; isso seria representado por

$$\mathrm{Na} + \mathrm{H_2O} \rightarrow \mathrm{NaOH} + \mathrm{H_2}$$

Uma expressão desse tipo é dita uma *equação esqueleto*. Apesar de descrever os atores da reação, à equação esqueleto falta um caráter quantitativo, em especial no que se refere à *Lei de Conservação das Massas*, segundo a qual a quantidade total de cada elemento nos reagentes deve ser igual à quantidade total deste mesmo elemento nos produtos. Isso é ajustado através de coeficientes colocados em cada substância. No caso, teríamos

$$2\,\mathrm{Na} + 2\,\mathrm{H_2O} \rightarrow 2\,\mathrm{NaOH} + \mathrm{H_2}$$

Denominamos a determinação dos coeficientes de *balanceamento* da reação, e diz-se que está *balanceada* a reação com os coeficientes satisfazendo a Lei de Conservação das Massas.

Matematicamente, se temos m substâncias (k reagentes e $m-k$ produtos) usando n elementos, temos, para o elemento i,

$$R_{i1}x_1 + \cdots + R_{ik}x_k = P_{i(k+1)}x_{k+1} + \cdots + P_{im}x_m$$

onde os $x_1, \ldots, x_m$ são os coeficientes, e o índice, do elemento i na substância j é dado por R_{ij} ou P_{ij}, conforme a substância for reagente ou produto, respectivamente. Em forma matricial, podemos escrever uma matriz $\mathbf{R}$ de dimensão $n \times k$ cujos elementos são R_{ij} e uma matriz $\mathbf{P}$ de dimensão $n \times (m-k)$ cujos elementos são $P_{i(j+k)}$, de modo que temos o sistema homogêneo

$$[\mathbf{R} \quad -\mathbf{P}]\mathbf{x} = \mathbf{E}\mathbf{x} = \mathbf{0}.$$

Para a reação do exemplo anterior, a matriz **E** seria

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & -2 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Apontemos algumas peculiaridades desse sistema. Cada equação possui pelo menos duas incógnitas, pois cada elemento deve aparecer pelo menos uma vez em cada lado da reação. Os componentes da solução devem ser preferencialmente positivos. Valores nulos teoricamente são possíveis, porém costumam refletir uma reação irrelevante na prática.

Sendo $\mathbf{E}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ um sistema homogênea, certamente existe pelo menos a solução trivial $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, mas claramente esta não faz sentido quimicamente, caracterizando uma reação inexistente. Assim, nosso interesse está em obter soluções não triviais. Obviamente, se uma solução não trivial $\mathbf{x}$ existe, então qualquer múltiplo de $\mathbf{x}$ também é solução: se $\alpha \in \mathbb{R}$, então $\mathbf{E}(\alpha\mathbf{x}) = \alpha\mathbf{A}\mathbf{x} = \alpha\mathbf{0} = \mathbf{0}$. Como os coeficientes são inteiros, as soluções são racionais. Se há mais incógnitas que equações, é garantida a existência de ao menos uma solução não-trivial, e por extensão, infinitas soluções (LIMA, 1996).

3 Método e exemplos

Apresentamos a seguir o método proposto para o balanceamento de reações químicas, consistindo de uma sequência em 5 passos. Assume-se de antemão que a solução do sistema faça sentido químico, ou seja, é estritamente positiva. Primeiramente é apresentada uma versão preliminar, que sofrerá alguns ajustes antes de configurar uma versão final do método.

Método algébrico para balanceamento, versão preliminar

Passo 1 Atribua incógnitas $a, b, c, \dots$ a cada substância;

Passo 2 Para cada elemento, escreva uma equação, sendo que cada termo corresponde a uma substância onde o elemento aparece, como o índice do elemento como coeficiente e a incógnita atribuída no Passo 1;

Passo 3 Escolha uma incógnita qualquer e atribua a ela o valor 1;

Passo 4 Resolva o sistema;

Passo 5 Multiplique as soluções pelo m.m.c. dos denominadores das soluções obtidas.

O método funciona perfeitamente dessa forma, como ilustramos por um exemplo simples: a reação entre gases nitrogênio e hidrogênio resultando gás amônia, cuja equação esqueleto é:

$$\mathrm{N_2} + \mathrm{H_2} \to \mathrm{NH_3}$$

De acordo com o Passo 1, teríamos:

$$a\mathrm{N_2} + b\mathrm{H_2} \to c\mathrm{NH_3}$$

No Passo 2, teríamos as equações abaixo para N e H, respectivamente:

$$2a = c, \qquad 2b = 3c$$

Pelo Passo 3, fazendo $a = 1$ (escolha totalmente fortuita), obteríamos prontamente $c = 2$ e $2b = 6 \Longrightarrow b = 3$. Como a solução é inteira, o Passo 5 é desnecessário. Escrevemos então a solução balanceada:

$$\mathrm{N_2} + 3\mathrm{H_2} \to 2\mathrm{NH_3}$$

Caso no Passo 3 tivéssemos escolhido, por exemplo, $c = 1$, teríamos na solução $a = 1/2$ e $b = 3/2$. Nesse caso, Pelo passo 5, multiplicamos a solução por $\mathrm{mmc}(2, 2, 1) = 2$ e terminaríamos com o mesmo balanceamento.

Não é tão comum, ao menos em reações encontradas em livros do Ensino Médio, que um elemento esteja presente em várias substâncias; o mais comum é que um dado elemento apareça apenas uma vez entre os reagentes e outra entre os produtos. Assim, no Passo 4, normalmente métodos simples de substituição costumam funcionar bem, não sendo necessário apelar a métodos mais sofisticados como escalonamento, a não ser que se trate de reações mais difíceis (e raras nos livros didáticos).

A seguir tecemos algumas observações adicionais que irão aprimorar o método, tornando-o mais efetivo para o cálculo manual, especialmente quando a reação for mais complicada. Por vezes, há elementos que aparecem uma única vez de cada lado da reação, e com o mesmo índice. Assim, as respectivas substâncias podem ser representadas pela mesma incógnita no Passo 1, e não há necessidade de se escrever a equação respectiva àquele elemento no Passo 2.

Quanto ao Passo 3, a escolha de uma substância com máximo número de elementos fará com que a incógnita seja eliminada de mais equações, simplificando mais o sistema e facilitando a obtenção da solução. Pode-se também argumentar que, caso haja mais de uma opção com número máximo de elementos, uma boa abordagem é escolher uma substância com índices maiores, pois isso pode simplificar ou até eliminar os ajustes feitos no Passo 5. Mesmo assim, não há garantia que seja a melhor escolha: no exemplo da reação de geração da amônia, por exemplo, o critério nos levaria a escolher $c = 1$, enquanto vimos que $a = 1$ nos dá a solução mais prontamente.

Apresentamos então a versão final do método.

Método algébrico para balanceamento, versão final

Passo 1 Atribua incógnitas $a, b, c, ...$ a cada substância;
Obs.: se um elemento aparecer uma única vez em cada lado, com índice igual, usar a mesma incógnita para as substâncias em que este elemento aparece;

Passo 2 Para cada elemento (exceto os que caem na observação do Passo 1), escreva uma equação, sendo que cada termo corresponde a uma substância onde o elemento aparece, como o índice do elemento como coeficiente e a incógnita atribuída no Passo 1;

Passo 3 Escolha uma incógnita corresponde a uma substância *com número máximo de elementos* e atribua a ela o valor 1;
Obs.: se houver mais de uma opção, prefira aquela com os maiores índices;

Passo 4 Resolva o sistema;

Passo 5 Multiplique as soluções pelo m.m.c. dos denominadores das soluções obtidas.

Vamos a alguns exemplos práticos da aplicação do método. A reação abaixo é encontrada em ATKINS e JONES (2002, pg. 124), já com os coeficientes, que substituiremos por incógnitas, ou seja, já executamos o Passo 1:

$$a\mathrm{NH_4ClO_4} + b\mathrm{Al} \to c\mathrm{Al_2O_3} + d\mathrm{N_2} + e\mathrm{HCl} + f\mathrm{H_2O}$$

Seguimos para o Passo 2. Por exemplo, o nitrogênio (N) aparece apenas uma vez à esquerda, na substância NH_4ClO_4 (incógnita a), com índice 1, e também apenas uma vez à direita, na substância N_2 (incógnita d), com índice 2, logo temos $a = 2d$. Continuando, podemos ilustrar isso de maneira tabular, como segue:

	NH_4ClO_4	$+$	Al	$\rightarrow$	Al_2O_3	$+$	N_2	$+$	HCl	$+$	H_2O
Incógnitas:	a		b		c		d		e		f
N:	a			$=$			$2d$				
H:	$4a$			$=$					e	$+$	$2f$
Cl:	a			$=$					e		
O:	$4a$			$=$	$3c$			$+$			f
Al:			b	$=$	$2c$						

Como NH_4ClO_4 é a substância com mais elementos, fazemos $a = 1$ (Passo 3), obtendo o sistema

$$\begin{cases} 1 = 2d & \text{(I)} \\ 4 = e + 2f & \text{(II)} \\ 1 = e & \text{(III)} \\ 4 = 3c + f & \text{(IV)} \\ b = 2c & \text{(V)} \end{cases}$$

Já temos prontos os valores de d e e. O valor de c pode ser obtido facilmente multiplicando (IV) por 2 e daí subtraindo (II), permitindo prontamente obter f e b, finalizando o Passo 4:

$$a = 1, \qquad b = \frac{10}{6}, \qquad c = \frac{5}{6}, \qquad d = \frac{1}{2}, \qquad e = 1, \qquad f = \frac{3}{2}$$

Finalmente, multiplicamos os valores obtidos por 6 (m.m.c. dos denominadores). Escrevemos abaixo a solução já balanceada.

$$6NH_4ClO_4 + 10Al \rightarrow 5Al_2O_3 + 3N_2 + 6HCl + 9H_2O$$

Vamos a outro exemplo, encontrado em LAY (1999, p. 53), em que o exercício é assinalado como sendo recomendado o auxílio de recurso computacional:

$$PbN_6 + CrMn_2O_8 \rightarrow Pb_3O_4 + Cr_2O_3 + MnO_2 + NO$$

O leitor pode verificar que, atribuindo as incógnitas $a, \dots, f$ às substâncias e fazendo $b = 1$, obtemos o sistema

$$\begin{cases} a = 3c \\ 6a = f \\ 1 = 2d \\ 2 = e \\ 8 = 4c + 3d + 2e + f \end{cases}$$

Substituindo $d = 1/2$ e $e = 2$, obtemos o sistema simplificado abaixo:

$$\begin{cases} a = 3c & \text{(I)} \\ 6a = f & \text{(II)} \\ \dfrac{5}{2} = 4c + f & \text{(III)} \end{cases}$$

Embora apenas substituição simples não resolva, pode-se usar (I) e (II) para escrever c e f em termos de a e substituir em (III), o que deixamos como exercício. Por fim, obtemos

$$a = \frac{15}{44}, \qquad b = 1, \qquad c = \frac{5}{44}, \qquad d = \frac{1}{2}, \qquad e = 2, \qquad f = \frac{90}{44}$$

Multiplicando pelo mmc 44, obtemos os coeficientes para a reação balanceada:

$$15\mathrm{PbN_6} + 44\mathrm{CrMn_2O_8} \rightarrow 5\mathrm{Pb_3O_4} + 22\mathrm{Cr_2O_3} + 88\mathrm{MnO_2} + 90\mathrm{NO}$$

Também em LAY (1999, pg. 54) encontramos um exemplo em que o autor também recomenda usar métodos matriciais, que mostramos já com as incógnitas (observe que o a é usado duas vezes, pois Mn aparece apenas uma vez de cada lado com índice 1):

$$a\mathrm{MnS} + b\mathrm{As_2Cr_{10}O_{35}} + c\mathrm{H_2SO_4} \rightarrow a\mathrm{HMnO_4} + d\mathrm{AsH_3} + e\mathrm{CrS_3O_{12}} + f\mathrm{H_2O}$$

O leitor é convidado a verificar que, fazendo $b = 1$ no passo 3, obtém-se $d = 2$, $e = 30$ e o resta o seguinte sistema:

$$\begin{cases} a + c = 30 & \text{(I)} \\ 4c = 4a + 85 + f & \text{(II)} \\ 2c = a + 6 + 2f & \text{(III)} \end{cases}$$

Este seria um exemplo de um sistema que, apesar de o presente método conferir uma forma mais simples, ainda assim a eliminação gaussiana se aparenta necessária. Com efeito, a solução desse sistema é $a = 16/13$, $c = 374/13$ e $f = 327/13$, e a reação balanceada é

$$16\mathrm{MnS} + 13\mathrm{As_2Cr_{10}O_{35}} + 374\mathrm{H_2SO_4} \rightarrow 16\mathrm{HMnO_4} + 26\mathrm{AsH_3} + 130\mathrm{CrS_3O_{12}} + 327\mathrm{H_2O}$$

4 Extensões: coeficientes fracionários, íons e oxirredução

Algumas extensões podem ser feitas ao método. Por vezes, permite-se o uso de coeficientes fracionários, como para substâncias diatômicas simples. Um exemplo comum é o de reações de combustão. Abaixo é mostrada a equação esqueleto da reação do butano:

$$\mathrm{C_4H_{10}} + \mathrm{O_2} \rightarrow \mathrm{CO_2} + \mathrm{H_2O}$$

Neste caso, o método pode ser ajustando facilmente colocando o denominador permitido no Passo 1:

$$a\mathrm{C_4H_{10}} + \frac{b}{2}\mathrm{O_2} \rightarrow c\mathrm{CO_2} + d\mathrm{H_2O}$$

Note que a, c e d poderiam ter sido escolhidos no Passo 3, porém fazemos $a = 1$ por causa dos maiores índices do butano ($\mathrm{C_4H_{10}}$), de modo que temos:

$$\begin{cases} 4 = c & \text{(I)} \\ 10 = 2d & \text{(II)} \\ b = 2c + d & \text{(III)} \end{cases}$$

o que nos dá imediatamente a solução $a = 1$, $b = 13$, $c = 2$ e $d = 5$, convenientemente já inteira, de modo que não precisamos fazer o passo 5. A reação balanceada é então:

$$\mathrm{C_4H_{10}} + \frac{13}{2}\mathrm{O_2} \rightarrow 2\mathrm{CO_2} + 5\mathrm{H_2O}$$

Outra extensão possível é para as ditas equações iônicas, que envolvem não só o balanceamento das cargas, mas também das massas. Considere a reação abaixo, presente em métodos de determinação do carbono orgânico do solo (WALKLEY e BLACK, 1934):

$$a\mathrm{Cr_2O_7}^{2-} + b\mathrm{Fe^{2+}} + c\mathrm{H^+} \rightarrow d\mathrm{Cr^{3+}} + e\mathrm{Fe^{3+}} + f\mathrm{H_2O}$$

O balanceamento das cargas é feito através da adição de uma única equação ao sistema, multiplicando as cargas pelas incógnitas. No caso, a equação extra seria:

$$-2a + 2b + c = 3d + 3e$$

O leitor pode confirmar que, novamente escolhendo $a = 1$ (porque $\mathrm{Cr_2O_7}$ e $\mathrm{H_2O}$ têm dois elementos, mas o primeiro tem índices maiores), obtemos a reação balanceada:

$$\mathrm{Cr_2O_7}^{2-} + 6\mathrm{Fe^{2+}} + 14\mathrm{H^+} \rightarrow 2\mathrm{Cr^{3+}} + 6\mathrm{Fe^{3+}} + 7\mathrm{H_2O}$$

Finalmente, o mesmo mecanismo pode ser aplicado a equações de oxirredução. Nesse caso, os números de oxidação fazem papel matematicamente idêntico ao das cargas no caso das equações iônicas. Aplicamos o método a um exemplo encontrado em TITO e CANTO (2006), com os números de oxidação indicados abaixo dos elementos que sofrem oxirredução:

$$a\mathrm{H_2}\underbrace{\mathrm{S}}_{-2} + b\mathrm{H}\underbrace{\mathrm{N}}_{+5}\mathrm{O_3} \rightarrow a\mathrm{H_2}\underbrace{\mathrm{S}}_{+6}\mathrm{O_4} + \mathrm{b}\underbrace{\mathrm{N}}_{+2}\mathrm{O} + c\mathrm{H_2O}$$

Aqui, aplicamos a observação do Passo 1 ao enxofre (S) e ao nitrogênio (N), representando as substâncias em que cada um aparecem, dos dois lados, com a mesma letra. A equação extra, portanto, seria $-2a + 5b = 6a + 2b$, e fazendo um deles igual a 1, já teríamos prontos seus valores, bastando determinar c, o que pode ser facilmente obtido pela relação gerada por H ou O. Fazendo o passo 5, obtemos a solução $a = 3$, $b = 8$ e $c = 4$, como mostrado no livro.

5 Considerações Finais

Como visto, o método algébrico de balanceamento de reações químicas apresentado neste trabalho mostra-se apropriado para o cálculo manual, sendo prático e geral o suficiente para abordar qualquer exercício de balanceamento encontrado em livros de Ensino Médio, incluindo reações iônicas e de oxirredução, e capaz de tratar até mesmo algumas reações mais complexas, que outros autores entregam a métodos matriciais ou recomendam auxílio computacional.

A expectativa é que o método encontre apelo entre estudantes que busquem um processo mais sistemático para resolver o problema, que os professores de Matemática o usem como aplicação de sistemas lineares, e que os professores de Química o usem para possivelmente introduzir, para balanceamento, reações mais complexas que as usualmente apresentadas nos livros didáticos.

6 Referências

ATKINS, P.; JONES, L. Princípios de Química. 3. ed. Porto Alegre: Bookman, 2002.

GABRIEL, C. I.; ONWUKA, G. I. Balancing of chemical equations using matrix algebra. Journal of Natural Sciences Research, v. 3, p. 29-36, 2015.

LAY, David C. Álgebra Linear e Suas Aplicações. 2a. Edição. São Paulo: LTC, 1999.

LIMA, E. L. Álgebra linear, 2. ed. IMPA, Rio de Janeiro, 1996.

NEHMI, V. Química, volume único. São Paulo: Editora Ática, 1995.

TITO, P.; CANTO, E. Química na abordagem do cotidiano. São Paulo: Moderna, 2006.

TÔRRES, A. R.; CAPISTRANO, R. A.; MACIEL, P. Balanceamento de equações e interdisciplinaridade entre química e matemática. Anais da Mostra de Pesquisa em Ciência e Tecnologia 2017. Fortaleza: DeVry Brasil - Damásio - Ibmec, 2019. Disponível em: <https//www.even3.com.br/anais/mpct2017/47189-BALANCEAMENTO-DE-EQUACOES-E-INTERDISCIPLINARIDADE-ENTRE-QUIMICA-E-MATEMATICA>. Acesso em 13/08/2020.

WALKLEY, A.; BLACK, I. A. An examination of the Degtjareff method for determining soil organic matter, and a proposed modification of the chromic acid titration method. Soil science, v. 37, n. 1, p. 29-38, 1934.