

APLICAÇÃO CÁLCULO ESTATÍSTICO COMO FERRAMENTA PARA DETERMINAÇÃO DA ESTEQUIOMETRIA EM MODELOS DE VARIAÇÃO CONTÍNUA

Eduardo Alberton Ribeiro¹, Murilo Colombo de Souza², Nycollas Fruhauff³

^{1,2,3} Instituto Federal de Santa Catarina/eduardo.ribeiro@ifsc.edu.br¹

Palavras-Chave: Estatística, gráfico de Job, estequiometria.

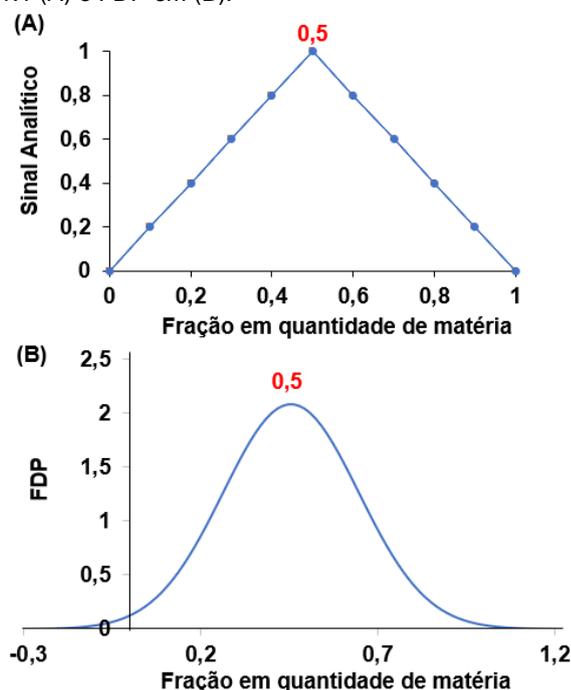
INTRODUÇÃO

A palavra estequiometria foi cunhada em 1792 por Richter¹, os estudos iniciais foram baseados no princípio da conservação da matéria e das proporções definidas, estabelecidas por Lavoisier e Proust, respectivamente. Desde então a compreensão da estequiometria desempenha um papel central no entendimento da química, permite relacionar as quantidades de matéria produzidas ou consumidas numa reação química, além de compreender as relações entre os produtos e reagentes nos diferentes processos químicos. O modelo de variação contínua, representado pelo gráfico de Job (Figura 1A), é frequentemente empregado na determinação da estequiometria, sendo bastante referenciado na literatura. Neste modelo o sinal analítico detectado, de acordo com a técnica empregada, é relacionado como uma função da fração em quantidade de matéria (Figura 1A). Desta forma, a maior amplitude do sinal é observada numa proporção definida entre os componentes do sistema o que permite apontar para a estequiometria no sistema estudado. Diante disto este trabalho tem por objetivo o uso de ferramentas estatísticas, como a função densidade de probabilidade (FDP)², disponível em software de fácil acesso como Excel ou LibreOffice, que pode contribuir como uma ferramenta interessante para estabelecer parâmetros indicando a estequiometria em um sistema explorado. Isto porque estes modelos são baseados na densidade das variáveis.

METODOLOGIA

Inicialmente foi simulado um comportamento ideal (Figura 1A) indicando uma estequiometria do tipo 1:1 para um sistema do tipo $aA + bB \rightarrow cC$.

Figura 1 – Modelo idealizado para estequiometria do tipo 1:1 (A) e FDP em (B).

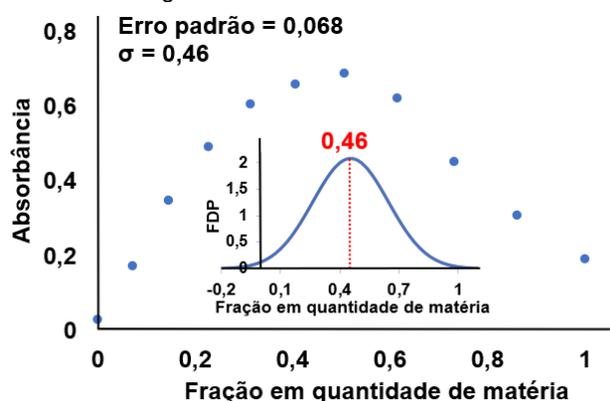


Em seguida, os dados foram tratados e graficados em função densidade de probabilidade (FDP) conforme mostrado na Figura 1B.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

No estudo teórico, a inflexão no gráfico de Jobs (Figura 1A) ocorreu quando a fração em quantidade de matéria é equivalente a 0,5 o que valida estequiometrias do tipo 1:1. O mesmo foi observado à FDP (Figura 1B). Adotando o mesmo procedimento descrito anteriormente, os gráficos foram refeitos, porém utilizando dados experimentais apresentados na literatura³ conforme mostra a Figura 2.

Figura 2 – Estequiometria do tipo 1:1 obtida através de dados experimentais apresentados na literatura e FDP inseridos na Figura 2.



O resultado mostrou que a aplicação da FDP pode contribuir como uma ferramenta interessante para indicar a estequiometria no sistema mostrado³. A densidade máxima ocorreu quanto a fração em quantidade de matéria é equivalente a 0,46 o que fornece fortes indícios para sustentar estequiometria do tipo 1:1.

CONCLUSÃO

O trabalho apresentado mostrou viabilidade no comparativo entre o modelo teórico e outro experimental. A FDP pode servir como ferramenta para indicar a estequiometria nos sistemas estudados. Entretanto há necessidade de estudos complementares envolvendo outras estequiometrias como as do tipo 1:2; 1:3; 1:4 ou outras, tornam-se importantes para serem agregadas ao estudo.

AGRADECIMENTOS

Ao Instituto Federal de Santa Catarina (IFSC), campus Criciúma, SICT-Sul.

REFERÊNCIAS

- CAZZARO, F. Um experimento Envolvendo Estequiometria. Química Nova Na Escola, v. 10, p. 53–54, 1999.
- SAMPAIO, N. A. de S.; et al. Estatística Descritiva. 10.5935, 2018.
- Ribeiro, E.A; Machado, V.G. J. Braz. Chem. Soc., Vol. 32, No. 10, 1972-1987, 2021.

