Balanceamento de equações químicas de combustão utilizando sequências numéricas

Ligia Laís Fêmina
Universidade Federal de Uberlândia - Faculdade de Matemática
ligia@ufu.br

Jhonathan Rosa de Souza
Universidade Federal do ABC
jhonathan.rs01@gmail.com

Luiza Araújo Gusmão
Universidade de São Paulo
luizaagusmao@hotmail.com

Victor Maia Miranda
Universidade de São Paulo
victor.maia65@gmail.com

RESUMO

As relações específicas de proporção entre os átomos das moléculas podem tornar o balanceamento de equações químicas uma tarefa complexa. Métodos como tentativa e erro e oxirredução foram desenvolvidos para solucionar este problema, porém alguns casos são muito trabalhosos manualmente e podem falhar. Com efeito, o balanceamento de equações químicas pode ser visto e trabalhado por uma perspectiva matemática, uma vez que se trata de um número finito de átomos diferentes se reorganizando em diferentes grupamentos (moléculas). Nesse contexto, este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de uma metodologia de balanceamento de equações químicas que representam reações de combustão completa e incompleta de compostos orgânicos dos tipos hidrocarbonetos alcano, alceno e alcino, e compostos saturados dos tipos álcool, éter, diól, diéter, aldeído, cetona, ácido carboxílico e éster. Os coeficientes estequiométricos das reações de combustão citadas foram associados a sequências numéricas, cujos termos gerais foram denominados como $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ e δ_n, para reações de combustão completa e $\alpha'_n, \beta'_n, \gamma'_n$ e δ'_n, para reações de combustão incompleta. Os termos α_n e α'_n resultam em sequências numéricas limitadas, monotônicas e convergentes, enquanto os demais termos levam a obtenção de sequências divergentes e crescentes. Contudo, a metodologia apresentada estabelece um rápido balanceamento para as equações químicas usando fórmulas matemáticas simples e permite trabalhar interdisciplinaridade entre a química e a matemática.

ABSTRACT

Specific relationships concerning the ratio between the atoms in molecules can make chemical equations balancing a complicated task. The methods such as trial-and-error and oxidation-reduction tend to solve this problem but, in some cases, are manually laborious and may fail. Indeed, the balancing of chemical equations can be viewed and worked from a mathematical perspective, as it deals with a finite number of different atoms reorganizing themselves in different groups (molecules). In this context, this work aims to present the development of a methodology for balancing chemical equations representing combustion reactions of the organic compounds alkane, alkene, alkyne hydrocarbons, and the saturated compounds alcohol, ether, diol, diether, aldehyde, ketone, carboxylic acid, and ester. The stoichiometric coefficients of the studied combustion reactions was associated with numerical sequences, whose general terms were denominated as $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ and δ_n, for complete combustion reactions, and $\alpha'_n, \beta'_n, \gamma'_n$ and δ'_n, for incomplete combustion reactions. The terms α_n and α'_n result in limited, monotonic and convergent numerical sequences, while the other terms lead to divergent and increasing sequences. However, the presented methodology determine a quick balance for the chemical equations using simple mathematical formulas and works interdisciplinarity between chemistry and mathematics.

Palavras-chave: Balanceamento. Equações químicas. Sequências numéricas.

1 INTRODUÇÃO

A química é uma ciência que investiga as reações químicas que ocorrem na matéria, abordando não só a mudança de estado físico das substâncias, mas também a alteração de sua composição. Uma maneira sistemática para representar uma transformação química é por meio de uma equação química, a qual apresenta informações sobre quantidade e composição das substâncias antes e após uma reação. O caráter conciso e simples deste tipo de representação, facilita a compreensão do processo retratado, tornando exequível a visualização das etapas de uma reação química. Além de clareza na visualização, é possível verificar se uma equação química está de acordo com a lei de Lavoisier calculando-se a soma das massas em ambos os lados da equação ([1]; [2], [3]). Consequentemente, os cálculos de proporção e de alteração de composição também são facilitados, sendo, portanto, um recurso didático-pedagógico amplamente difundido e presente em todos os livros e conteúdos de química, sendo uma ferramenta fundamental para o saber, o fazer e o ensinar química ([1]; [4]; [5]; [6]; [7]; [8]).

Em uma equação química genérica, as substâncias são representadas por fórmulas químicas compostas por símbolos da tabela periódica e cada símbolo é referente a um átomo de um elemento químico, por exemplo, C = carbono, H = hidrogênio e O = oxigênio. A quantidade de cada átomo que compõe uma determinada molécula é representada por um número subscrito imediatamente à direita do símbolo do elemento químico correspondente. Por exemplo, a molécula de água é constituída de dois átomos de hidrogênio ligados a um átomo de oxigênio, portanto, é representa pela fórmula química H_2O. As quantidades de moléculas de uma mesma substância que participam da reação química são representadas por números escritos à esquerda da fórmula química, sendo esses chamados de coeficientes estequiométricos. A Equação 1 corresponde a uma equação química genérica, em que A e B correspondem às substâncias reagentes e C e D aos produtos. As letras gregas α, β, γ e δ são os coeficientes estequiométricos.

$$\alpha A + \beta B \longrightarrow \gamma C + \delta D \tag{1}$$

De acordo com a lei de conservação das massas, para que a equação química possua significado físico, é necessário que haja o mesmo número de partículas de um dado elemento químico tanto nos reagentes como nos produtos ([2]; [3]). Para tanto, é necesário efetuar previamente o balanceamento na equação química, determinando seus coeficientes estequiométricos. Caso os coeficientes estejam incorretos, o cálculo de balanço de massas resultará em uma discrepância das massas. Um bom exemplo é a reação de combustão da substância metano (CH_4), representada pela Equação 2 ([9]). Verifica-se que, nesta equação, há o mesmo número de átomos de cada elemento químico em ambos os lados da equação. Portanto, a soma das massas é igual na situação inicial e final, garantindo o balanço estequiométrico.

$$CH_4 + 2O_2 \longrightarrow CO_2 + 2H_2O \tag{2}$$

Em alguns casos, essas equações podem alcançar um alto grau de complexidade, tornando seu balanceamento difícil e trabalhoso, como é o caso das reações do tipo oxirredução e reações com múltiplos reagentes e múltiplos produtos. Logo, tratar este desafio a partir de uma perspectiva mais simples pode tornar sua resolução mais acessível em vários contextos, como no aprendizado de química. O balanceamento estequiométrico é, essencialmente, um procedimento matemático e, por isso, pode ser abordado por diversos tipos de cálculos. Nesse sentido, várias estratégias têm sido desenvolvidas não só para facilitar a resolução deste problema, mas também para auxiliar no ensino das equações químicas de maneira interdisciplinar com a matemática.

A exemplo disso, Wang e colaboradores criaram um algoritmo computacional tratando o balanceamento como um problema de sistemas de equações lineares ([10]). Por outro lado, partindo da titulação de íons bivalentes de ferro como caso de estudo, Ghaffari e grupo empregaram cálculos simples de volumetria para efetuar o balanceamento de reações de oxirredução ([11]). Ademais, a fim de aprimorar o aprendizado de estudantes surdos, Fernandes e Freitas-Reis desenvolveram um trabalho em que modelos artesanais e desenhos de moléculas foram empregados para o ensino de estequiometria e do balanceamento ([6]). Além desses, vários outros trabalhos foram elaborados para auxiliar o ensino de um assunto recorrente na química ([12]; [13]; [14]; [15], [16]; [17]; [18]).

Geralmente, as equações químicas que correspondem à combustão são balanceadas por tentativa e erro. Porém, esse procedimento pode levar a balanceamentos errados, uma vez que nestas equações alguns coeficientes fracionários são necessários para alcançar o balanço das massas. Surpreendentemente, ao se estudar mais profundamente as reações químicas de combustão de algumas famílias de substâncias orgânicas, observa-se um padrão sequencial dos coeficientes estequiométricos dos reagentes e produtos, que pode ser visto como uma sequência numérica. Acredita-se que o uso de sequências numéricas permite aos químicos além de obter fórmulas rápidas e fáceis para determinação dos coeficientes estequiométricos, compreender os padrões de repetição que ocorrem em diferentes classes de reações químicas. Além disso, o emprego destas sequências no ensino de química pode facilitar a compreensão do estudante e estimular a percepção sobre como as composições das substâncias estão intrinsecamente relacionadas entre si.

Nessa perspectiva, propõe-se uma metodologia para o balanceamento de equações de combustão completa e incompleta de compostos orgânicos dos tipos hidrocarbonetos alcano, alceno e alcino, e também compostos saturados dos tipos álcool, éter, diól, diéter, aldeído, cetona, ácido carboxílico e éster. A nova estratégia proposta só é possível pois os coeficientes estequiométricos obedecem a um padrão de crescimento que se dá em função do número de átomos de carbonos n que constituem os compostos orgânicos em questão. Neste desenvolvimento, será considerada a situação ideal em que o rendimento é igual a 100% e que os reagentes são puros. Embora a discussão seja realizada em termos químicos, tratando-se de átomos e moléculas, a análise das sequências e dos coeficientes estequiométricos se segue por uma perspectiva essencialmente matemática, estruturada por um raciocínio simples sobre quantidades de elementos que se organizam de diferentes maneiras. Além disso, algumas propriedades das sequências são brevemente discutidas.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Definição 2.1: *Uma reação ideal de combustão completa é aquela em que uma substância orgânica* (SO) *reage com a molécula de oxigênio* (O_2), *gerando dióxido de carbônico* (CO_2) *e água* (H_2O) *como produtos. De modo genérico:*

$$\alpha SO + \beta O_2 \rightarrow \gamma CO_2 + \delta H_2O \tag{3}$$

sendo que α, β, γ *e* δ *pertencem ao subconjunto dos números racionais* $\mathbb{Q}$.

Definição 2.2: *Uma reação ideal de combustão incompleta é aquela em que uma substância orgânica* (SO) *reage com a molécula de oxigênio* (O_2), *gerando monóxido de carbônico* (CO) *e água* (H_2O). *Logo:*

$$\alpha' SO + \beta' O_2 \rightarrow \gamma' CO + \delta' H_2O \tag{4}$$

sendo que α', β', γ' *e* δ' *pertencem ao subconjunto dos números racionais* $\mathbb{Q}$.

Definição 2.3: *([19]) Uma sequência de números reais é uma função* f *cujo domínio é o conjunto dos números naturais e a imagem está contida no conjunto dos números reais,* $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$, *que associa a cada número natural* n *um número real* x_n, *chamado o* n*-ésimo termo da sequência. Assim,*

$$f(n) = x_n, \forall n \in \mathbb{N}, \tag{5}$$

Escreve-se $(x_1, x_2, \cdots, x_n, \cdots)$ *ou* (x_n), *para indicar a sequência cujo* n*-ésimo termo é* x_n.

Exemplo 2.1: *Seja a sequência de números:* $z_n = \left(-1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{3}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{5}, \frac{1}{6}, \cdots\right)$.

Pode-se escrever $z_n = \left(\frac{(-1)^n}{n}\right)$.

3 SEQUÊNCIAS MATEMÁTICAS PARA REAÇÕES DE COMBUSTÃO

Sejam as Equações 3 e 4 as representações de uma combustão ideal completa e incompleta, respectivamente, para uma substância orgânica (SO). Por definição, uma SO consiste em moléculas formadas por ligações covalentes entre carbonos, sendo n o número de átomos de carbono que constituem a molécula dessa substância. Ao considerar que os átomos são entidades indivisíveis e discretas, suas quantidades correspondem a números naturais, portanto, para todos os teoremas seguintes: $n \in \mathbb{N}$. A prova é apresentada apenas para o Teorema 1 itens $1.I$ e $1.II$ e se segue de maneira análoga para os demais teoremas e seus itens. Os teoremas a seguir formalizam a metodologia proposta neste trabalho. As fórmulas definidas pelos termos gerais das sequências serão utilizadas para determinação dos coeficientes estequiométricos de diferentes classes de SO.

Teorema 3.1: *Dado os compostos orgânicos hidrocarbonetos dos tipos alcano, alceno e alcino, cujas fórmulas químicas são, respectivamente,* $SO = \{C_nH_{2n+2}; C_nH_{2n}; C_nH_{2n-2}\}$, *sendo* $n \geq 1$ *para alcanos e* $n \geq 2$ *para alcenos e alcinos. Para cada tipo de hidrocarboneto, há dois conjuntos, um para combustão completa e outro para incompleta, constituídos por quatro sequências numéricas cada um deles:* $\{\alpha_n; \beta_n; \gamma_n; \delta_n\}$ *e* $\{\alpha_n^{'}; \beta_n^{'}; \gamma_n^{'}; \delta_n^{'}\}$. *Os termos destas sequências determinam os coeficientes estequiométricos das equações químicas 3 e 4.*

1. Alcanos:

I) Combustão completa:

$$\alpha_n = (1); \beta_n = \left(\frac{3n+1}{2}\right); \gamma_n = (n); \delta_n = (n+1), \forall n \in \mathbb{N}.$$

Prova: Considere a seguinte equação química para a combustão completa de um alcano:

$$\alpha_n C_n H_{2n+2} + \beta_n O_2 \to \gamma_n CO_2 + \delta_n H_2O \tag{6}$$

A fim de provar que os coeficientes propostos como sequências numéricas são válidos para qualquer n, será feito para melhor entendimento do leitor o balanceamento para alguns valores iniciais de n, antes da generalização.

Assim, considerando $n = 1$, temos

$$\alpha_1 CH_4 + \beta_1 O_2 \to \gamma_1 CO_2 + \delta_1 H_2O.$$

É fácil ver que a equação química balanceada é dada por

$$1CH_4 + 2O_2 \to 1CO_2 + 2H_2O,$$

ou seja,

$$\alpha_1 = 1; \beta_1 = 2 = \frac{(3.1+1)}{2}; \gamma_1 = 1; \delta_1 = 2 = 1 + 1.$$

Agora, assumindo que $n = 2$, tem-se que a equação química balanceada é dada por

$$1C_2H_6 + 7/2O_2 \to 2CO_2 + 3H_2O,$$

isto é,

$$\alpha_2 = 1; \beta_2 = 7/2 = (3.2+1)/2; \gamma_2 = 2; \delta_2 = 3 = 2 + 1.$$

Ao efetuar a soma do número de átomos de cada elemento em cada um dos lados da equação química, verifica-se que há o balanço de massas uma vez que a soma é igual nos reagentes e nos produtos. Repetindo este procedimento sucessivamente para valores maiores de n, é possível verificar que os termos destas sequências correspondem aos coeficientes estequiométricos que resultam no balanceamento da equação química associada àquele n.

Gereneralizando, considera-se a equação química:

$$\alpha_n C_n H_{2n+2} + \beta_n O_2 \to \gamma_n CO_2 + \delta_n H_2O$$

Precisa-se determinar $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ e δ_n.

Fazendo $\alpha_n = 1$ teremos n átomos de carbono nos reagentes, iremos determinar γ_n.

Note que temos γ_n átomos de carbono nos produtos, como a quantidade nos reagentes tem que ser igual a quantidade dos produtos, obtemos

$$\alpha_n \cdot n = \gamma_n \Longleftrightarrow 1 \cdot n = \gamma_n \Longleftrightarrow \gamma_n = n.$$

Logo, para $n \in \mathbb{N}$ determina-se as sequências

$$\alpha_n = (1) \;\; e \;\; \gamma_n = (n).$$

Vamos determinar δ_n.

Como $\alpha_n = 1$, então nos reagentes temos $2n + 2$ átomos de hidrogênio (H). Já, nos produtos temos $\delta_n H_2O$, ou seja, $2\delta_n$ átomos de hidrogênio (H). Assim, para termos o balaceamento:

$$2n + 2 = 2\delta_n \Longleftrightarrow \delta_n = n + 1$$

Logo, para $n \in \mathbb{N}$ temos a sequência

$$\delta_n = (n+1).$$

Resta determinar β_n:

Temos $\beta_n O_2$ nos reagentes, isto é, temos $2\beta_n$ átomos de oxigênio. Nos produtos, temos $nCO_2 + (n+1)H_2O$, ou seja, $2n + (n+1)$ átomos de oxigênio. Para atingir o balaceamento:

$$2\beta_n = 2n + (n+1) \Longleftrightarrow 2\beta_n = 3n+1 \Longleftrightarrow \beta_n = \frac{3n+1}{2}.$$

Finalmente, para $n \in \mathbb{N}$ temos a sequência

$$\beta_n = \left(\frac{3n+1}{2}\right).$$

Portanto,

$$\alpha_n = (1); \beta_n = \left(\frac{3n+1}{2}\right); \gamma_n = (n); \delta_n = (n+1), \forall n \in \mathbb{N}.$$

II) Combustão incompleta:

$$\alpha_n^{'} = (1); \beta_n^{'} = \left(\frac{2n+1}{2}\right); \gamma_n^{'} = (n); \delta_n^{'} = (n+1).$$

Prova: Seja a seguinte equação química para a combustão incompleta ideal de um alcano:

$$\alpha_n^{'} C_n H_{2n+2} + \beta_n^{'} O_2 \to \gamma_n^{'} CO + \delta_n^{'} H_2O \tag{7}$$

Neste caso, assumindo que $n = 1$, obtemos

$$\alpha_1^{'} CH_4 + \beta_1^{'} O_2 \to \gamma_1^{'} CO + \delta_1^{'} H_2O.$$

A equação química balanceada é:

$$1CH_4 + \frac{3}{2} O_2 \to 1CO + 2H_2O.$$

Deste modo, $\alpha_1^{'} = 1$; $\beta_1^{'} = \frac{3}{2} = \frac{2.1+1}{2}; \gamma_1^{'} = 1; \delta_1^{'} = 2 = 1+1$.
Já para n=2:

$$1CH_4 + \frac{5}{2} O_2 \to 2CO + 3H_2O$$

Logo, $\alpha_2^{'} = 1; \beta_2^{'} = \frac{5}{2} = \frac{2.2+1}{2}; \gamma_2^{'} = 2; \delta_2^{'} = 3 = 2+1$.
O próximo passo é fazer a generalização. Considera-se a equação química

$$\alpha_n^{'} C_n H_{2n+2} + \beta_n^{'} O_2 \to \gamma_n^{'} CO + \delta_n^{'} H_2O.$$

É necessário determinar os coeficientes $\alpha_n^{'}, \beta_n^{'}, \gamma_n^{'}$ e $\delta_n^{'}$.
Fazendo $\alpha_n^{'} = 1$ teremos n móleculas de carbono nos reagentes, iremos determinar $\gamma_n^{'}$.
Nos produtos existe $\gamma_n^{'}$ móleculas de carbono, como a quantidade nos reagentes tem que ser igual a quantidade dos produtos, obtém-se

$$\alpha_n^{'} \cdot n = \gamma_n^{'} \Longleftrightarrow 1 \cdot n = \gamma_n^{'} \Longleftrightarrow \gamma_n^{'} = n.$$

Portanto, para $n \in \mathbb{N}$ tem-se as seguintes sequências numéricas

$$\alpha_n = (1) \;\; e \;\; \gamma_n = (n).$$

Agora, $\alpha_n^{'} = 1$, então nos reagentes temos $2n+2$ móleculas de hidrogênio (H). Já, nos produtos temos $\delta_n^{'} H_2O$, ou seja, $2\delta_n^{'}$ moléculas de hidrogênio (H). Assim, para termos o balaceamento:

$$2n+2=2\delta_n^{'} \Longleftrightarrow \delta_n^{'}=n+1$$

Logo, para $n \in \mathbb{N}$ temos a sequência

$$\delta_n^{'}=(n+1).$$

Nos reagentes tem-se $\beta_n^{'}O_2$, ou seja, $2\beta_n^{'}$ móleculas de oxigênio. Já, nos produtos há $nCO+(n+1)H_2O$, ou seja, $2n+1$ móleculas de oxigênio. Para atingir o balaceamento:

$$2\beta_n^{'}=2n+1 \Longleftrightarrow \beta_n^{'}=\frac{2n+1}{2}.$$

Dessa maneira,

$$\beta_n^{'}=\left(\frac{2n+1}{2}\right).$$

Portanto,

$$\alpha_n^{'}=(1); \beta_n^{'}=\left(\frac{2n+1}{2}\right); \gamma_n^{'}=(n); \delta_n^{'}=(n+1).$$

2. Alcenos:

I) Combustão completa:

Seja a equação química genérica para uma reação de combustão completa de um alceno:

$$\alpha_n C_n H_{2n}+\beta_n O_2 \rightarrow \gamma_n CO_2+\delta_n H_2O \tag{8}$$

A prova é análoga àquela demonstrada para os alcanos e permite a geração das seguintes sequências numéricas que correspondem aos coeficientes estequiométricos:

$$\alpha_n=(1); \beta_n=\left(\frac{3n}{2}\right); \gamma_n=(n); \delta_n=(n).$$

II) Combustão incompleta:

Considere a equação química para combustão incompleta de um alceno:

$$\alpha_n^{'} C_n H_{2n}+\beta_n^{'} O_2 \rightarrow \gamma_n^{'} CO+\delta_n^{'} H_2O \tag{9}$$

As sequências numéricas que equivalem aos coeficientes estequiométricos dessa classe de SO serão dados por:

$$\alpha_n^{'}=(1); \beta_n^{'}=(n); \gamma_n^{'}=(n); \delta_n^{'}=(n)$$

3. Alcinos:

I) Combustão completa:

A equação química genérica para reação de combustão completa dos alcinos e seus respectivos coeficientes estequiométricos ($\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ e δ_n) pode ser representada por:

$$\alpha_n C_n H_{2n-2}+\beta_n O_2 \rightarrow \gamma_n CO_2+\delta_n H_2O \tag{10}$$

As sequências numéricas associadas são:

$$\alpha_n=(1); \beta_n=\left(\frac{3n-1}{2}\right); \gamma_n=(n); \delta_n=(n-1)$$

II) Combustão incompleta:

A equação química em questão é dada por:

$$\alpha_n^{'} C_n H_{2n-2}+\beta_n^{'} O_2 \rightarrow \gamma_n^{'} CO+\delta_n^{'} H_2O \tag{11}$$

As sequências numéricas que estão associadas são:

$$\alpha_n^{'} = (1); \beta_n^{'} = \left(\frac{2n-1}{2}\right); \gamma_n^{'} = (n); \delta_n^{'} = (n-1)$$

Os compostos orgânicos classificados como álcool e éter saturados, apresentam diferenças significativas em suas propriedades químicas e reatividades. Entretanto, ambas as classes podem ser representadas pela mesma fórmula química, pois a soma dos átomos de sua estrutura é igual para ambas. Por esse motivo, as SO que apresentam a mesma fórmula química foram agrupadas nos Teoremas 2 a 5, uma vez que os seus coeficientes estequiométricos são representados pelos mesmos conjuntos de sequências numéricas.

Teorema 3.2: *Dado os compostos orgânicos do tipo álcool e éter, representados pela fórmula química $SO = \{C_nH_{2n+2}O\}$, tal que $n \geq 1$, para álcool, e $n \geq 2$, para éter, existem dois conjuntos de sequências numéricas que determinam os coeficientes estequiométricos das equações de combustão destes compostos. Uma vez que ambos os tipos preservam a mesma fórmula química, um mesmo conjunto pode ser associado a eles, $\{\alpha_n; \beta_n; \gamma_n; \delta_n\}$ e $\{\alpha_n^{'}; \beta_n^{'}; \gamma_n^{'}; \delta_n^{'}\}$.*

I) Combustão completa:

Para álcoois e éteres, a equação química genérica que representa a reação de combustão completa e seus respectivos coeficientes estequiométricos $\{\alpha_n; \beta_n; \gamma_n; \delta_n\}$ é a seguinte:

$$\alpha_n C_nH_{2n+2}O + \beta_n O_2 \rightarrow \gamma_n CO_2 + \delta_n H_2O \tag{12}$$

Por meio de demonstração análoga àquela apresentada no Teorema 1, é fácil verificar que os coeficientes estequiométricos são :

$$\alpha_n = (1); \beta_n = \left(\frac{3n}{2}\right); \gamma_n = (n); \delta_n = (n+1)$$

II) Combustão incompleta:

A equação química genérica para a reação de combustão incompleta de álcoois e éteres e seus coeficientes estequiométricos, representados por $\{\alpha_n^{'}, \beta_n^{'}, \gamma_n^{'}$ e $\delta_n^{'}\}$, é dada por:

$$\alpha_n^{'} C_nH_{2n+2}O + \beta_n^{'} O_2 \rightarrow \gamma_n^{'} CO + \delta_n^{'} H_2O \tag{13}$$

Logo, as sequências que representam os coeficientes estequiométricos na combustão incompleta de álcoois e éteres são dados por:

$$\alpha_n^{'} = (1); \beta_n^{'} = (n); \gamma_n^{'} = (n); \delta_n^{'} = (n+1).$$

Teorema 3.3: *Dados os compostos orgânicos da classe do diol e diéter saturados, que podem ser representados pela mesma fórmula química do tipo $SO = \{C_nH_{2n+2}O_2\}$, sendo $n \geq 2$, para diol, e $n \geq 3$, para diéter. Há também dois conjuntos de quatro sequências numéricas em que seus termos correspondem aos coeficientes estequiométricos das Equações (3) e (4): $\{\alpha_n; \beta_n; \gamma_n; \delta_n\}$ e $\{\alpha_n^{'}; \beta_n^{'}; \gamma_n^{'}; \delta_n^{'}\}$.*

I) Combustão completa:

Similarmente aos teoremas anteriores, a equação química genérica para reações de combustão completa de dióis e diéteres está representada abaixo. Nela, os coeficientes estequiométricos são expressos por $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ e δ_n.

$$\alpha_n C_nH_{2n+2}O_2 + \beta_n O_2 \rightarrow \gamma_n CO_2 + \delta_n H_2O \tag{14}$$

É fácil obter os coeficientes estequiométricos a partir dos seguintes termos gerais:

$$\alpha_n = (1); \beta_n = \left(\frac{3n-1}{2}\right); \gamma_n = (n); \delta_n = (n+1).$$

II) Combustão incompleta: A equação química genérica que representa a combustão incompleta de dióis e diéteres e seus respectivos coeficientes estequiométricos pode ser representada por:

$$\alpha_n^{'} C_nH_{2n+2}O_2 + \beta_n^{'} O_2 \rightarrow \gamma_n^{'} CO + \delta_n^{'} H_2O \tag{15}$$

As sequências numéricas que permite o cálculo dos coeficientes estequiométricos de dióis e diéteres são:

$$\alpha_n^{'} = (1); \beta_n^{'} = \left(\frac{2n-1}{2}\right); \gamma_n^{'} = (n); \delta_n^{'} = (n+1).$$

Teorema 3.4: *Dados os compostos orgânicos classificados como aldeído e cetona saturadas, os quais também podem ser representados por uma mesma fórmula química $SO = \{C_nH_{2n}O\}$, onde $n \geq 1$ para o aldeído, e $n \geq 3$ para a cetona. Para ambas as classes de compostos orgânicos, existe um par de conjuntos de quatro sequências numéricas que determinam os coeficientes das Equações (3) e (4), são eles: $\{\alpha_n; \beta_n; \gamma_n; \delta_n\}$ e $\{\alpha_n^{'}; \beta_n^{'}; \gamma_n^{'}; \delta_n^{'}\}$.*

I) Combustão completa: A equação química genérica para combustão completa ideal de aldeídos e cetonas está representada abaixo, em que $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$ e δ_n são os coeficientes estequiométricos da equação.

$$\alpha_nC_nH_{2n}O + \beta_nO_2 \rightarrow \gamma_nCO_2 + \delta_nH_2O \tag{16}$$

As sequências que correspondem aos coeficientes estequiométricos são:

$$\alpha_n = (1); \beta_n = \left(\frac{3n-1}{2}\right); \gamma_n = (n); \delta_n = (n)$$

II) Combustão incompleta: Seja a equação química genérica que para combustão incompleta para aldeídos e cetonas:

$$\alpha_n^{'}C_nH_{2n}O + \beta_n^{'}O_2 \rightarrow \gamma_n^{'}CO + \delta_n^{'}H_2O \tag{17}$$

Temos as seguintes sequências numéricas:

$$\alpha_n^{'} = (1); \beta_n^{'} = \left(\frac{2n-1}{2}\right); \gamma_n^{'} = (n); \delta_n^{'} = (n)$$

Teorema 3.5: *Dados os compostos orgânicos da classe do ácido carboxílico e éster saturados, ambos representados pela fórmula química $SO = \{C_nH_{2n}O_2\}$, onde $n \geq 2$. Neste caso, também se pode determinar os coeficientes estequiométricos das Equações (3) e (4)com apenas dois conjuntos constituídos por quatro sequências numéricas cada um: $\{\alpha_n; \beta_n; \gamma_n; \delta_n\}$ e $\{\alpha_n^{'}; \beta_n^{'}; \gamma_n^{'}; \delta_n^{'}\}$.*

I) Combustão completa: A equação química geral para combustão completa ideal de ácidos carboxílicos e ésteres com seus coeficientes estequiométricos $\{\alpha_n; \beta_n; \gamma_n; \delta_n\}$, pode ser representada por:

$$\alpha_nC_nH_{2n}O_2 + \beta_nO_2 \rightarrow \gamma_nCO_2 + \delta_nH_2O \tag{18}$$

As sequência numérica associadas a equação acima são:

$$\alpha_n = (1); \beta_n = \left(\frac{3n-2}{2}\right); \gamma_n = (n); \delta_n = (n)$$

II) Combustão incompleta:

Seja a equação química genérica para a reação de combustão incompleta de ácidos carboxílicos e ésteres:

$$\alpha_n^{'}C_nH_{2n}O_2 + \beta_n^{'}O_2 \rightarrow \gamma_n^{'}CO + \delta_n^{'}H_2O \tag{19}$$

Os coeficientes estequiométricos são dados pelos seguintes sequências numéricas:

$$\alpha_n^{'} = (1); \beta_n^{'} = (n-1); \gamma_n^{'} = (n); \delta_n^{'} = (n)$$

Composto orgânico	SO	O_2	CO_2	H_2O
Alcano	$\alpha_n = (1)$	$\beta_n = \left(\frac{3n+1}{2}\right)$	$\gamma_n = (n)$	$\delta_n = (n+1)$
Alceno	$\alpha_n = (1)$	$\beta_n = \left(\frac{3n}{2}\right)$	$\gamma_n = (n)$	$\delta_n = (n)$
Alcino	$\alpha_n = (1)$	$\beta_n = \left(\frac{3n-1}{2}\right)$	$\gamma_n = (n)$	$\delta_n = (n-1)$
Álcool e Éter	$\alpha_n = (1)$	$\beta_n = \left(\frac{3n}{2}\right)$	$\gamma_n = (n)$	$\delta_n = (n+1)$
Diol e Diéter	$\alpha_n = (1)$	$\beta_n = \left(\frac{3n-1}{2}\right)$	$\gamma_n = (n)$	$\delta_n = (n+1)$
Aldeído e Cetona	$\alpha_n = (1)$	$\beta_n = \left(\frac{3n-1}{2}\right)$	$\gamma_n = (n)$	$\delta_n = (n)$
Ácido Carboxílico e Éster	$\alpha_n = (1)$	$\beta_n = \left(\frac{3n-2}{2}\right)$	$\gamma_n = (n)$	$\delta_n = (n)$

TABELA 1: Termos gerais das sequências numéricas para combustão completa

Uma vez que a prova dos teoremas verifica que as sequências são válidas para um número $n \in \mathbb{N}$, é verdade que é possível determinar os coeficientes estequiométricos das equações químicas em questão apenas conhecendo-se o número de átomos de carbono e qual é o tipo de composto orgânico (dentre os tratados neste artigo). Com isso, o procedimento para efetuar o balanceamento de uma destas equações químicas se inicia com a escolha do número de átomos de carbonos n da SO e da fórmula química genérica que corresponde ao tipo de composto orgânico. Em seguida, ao assumir um valor para n, uma equação química é estabelecida e a fórmula química de SO é conhecida. Além disso, o enésimo termo de cada uma das sequências dos conjuntos $\{\alpha_n; \beta_n; \gamma_n; \delta_n\}$ ou $\{\alpha_n^{'}; \beta_n^{'}; \gamma_n^{'}; \delta_n^{'}\}$ é igual ao coeficiente estequiométrico de sua respectiva molécula. Então, obtém-se a equação química balanceada em suas proporções de massa.

A combustão da gasolina é um exemplo prático em que os coeficientes que balanceiam a equação podem ser fácil e rapidamente determinados. A gasolina é majoritariamente constituída por um composto orgânico chamado de octano, o que corresponde a um hidrocarboneto alcano cujas moléculas possuem oito átomos de carbono. A partir destas informações, aplicando os enésimos termos das sequências dos itens $1.I$ e $1.II$ do Teorema 1 nas Equações (6) e (7), encontra-se a equação química balanceada tanto para combustão completa, como para combustão incompleta.

Combustão completa da gasolina ($n = 8$):

$$1C_8H_{18} + \frac{25}{2}O_2 \rightarrow 8CO_2 + 9H_2O \tag{20}$$

Combustão incompleta da gasolina ($n = 8$):

$$1C_8H_{18} + \frac{17}{2}O_2 \rightarrow 8CO + 9H_2O \tag{21}$$

Em súmula, as sequências que representam os coeficientes estequiométricos de cada um dos reagentes e produtos estão apresentados nas Tabela 1 e 2.

4 DISCUSSÃO

Os termos gerais das sequências propostas apresentam algumas semelhanças e diferenças importantes a serem destacadas. Verifica-se que $\alpha_n = \alpha_n^{'} = (1)$ em todas as classes de compostos orgânicos estudados. Logo, é possível afirmar que essas sequências numéricas são limitadas, monotônicas e convergentes. Já as demais sequências, para combustão

Composto orgânico	SO	O_2	CO_2	H_2O
Alcano	$\alpha_n^{'} = (1)$	$\beta_n^{'} = \left(\dfrac{2n+1}{2}\right)$	$\gamma_n^{'} = (n)$	$\delta_n^{'} = (n+1)$
Alceno	$\alpha_n^{'} = (1)$	$\beta_n^{'} = (n)$	$\gamma_n^{'} = (n)$	$\delta_n^{'} = (n)$
Alcino	$\alpha_n^{'} = (1)$	$\beta_n^{'} = \left(\dfrac{2n-1}{2}\right)$	$\gamma_n^{'} = (n)$	$\delta_n^{'} = (n-1)$
Álcool e Éter	$\alpha_n^{'} = (1)$	$\beta_n^{'} = (n)$	$\gamma_n^{'} = (n)$	$\delta_n^{'} = (n+1)$
Diol e Diéter	$\alpha_n^{'} = (1)$	$\beta_n^{'} = \left(\dfrac{2n-1}{2}\right)$	$\gamma_n^{'} = (n)$	$\delta_n^{'} = (n+1)$
Aldeído e Cetona	$\alpha_n^{'} = (1)$	$\beta_n^{'} = \left(\dfrac{2n-1}{2}\right)$	$\gamma_n^{'} = (n)$	$\delta_n^{'} = (n)$
Ácido Carboxílico e Éster	$\alpha_n^{'} = (1)$	$\beta_n^{'} = (n-1)$	$\gamma_n^{'} = (n)$	$\delta_n^{'} = (n)$

TABELA 2: Termos gerais das sequências numéricas para combustão incompleta

completa $(\beta_n, \gamma_n, \delta_n)$ e para combustão incompleta $(\beta_n^{'}, \gamma_n^{'}, \delta_n^{'})$, de todos compostos orgânicos descritos no artigo, são geradas por termos que crescem à medida em que n cresce. Portanto, com base nas definições das propriedades das sequências numéricas ([19]), são classificadas como sequências divergentes e crescentes. Além de propriedades em comum, é possível estabelecer algumas relações entre as composições das substâncias nas situações estudadas. Primeiramente, ao se comparar combustão completa e incompleta para cada uma das classes de compostos orgânicos, verifica-se que:

$$\alpha_n = \alpha_n^{'}; \gamma_n = \gamma_n^{'}; \delta_n = \delta_n^{'}.$$

Analisando os produtos das Equações 3 e 4, nota-se que a molécula de mono- ou dióxido de carbono (CO ou CO_2) é a única que apresenta átomos de carbono e que a molécula de água (H_2O) é a única que apresenta átomos de hidrogênio. No caso do carbono, há apenas um átomo em cada molécula, seja ela mono- ou dióxido de carbono. Portanto, a relação entre o número dessas moléculas em função do número de átomos de carbono se estabelece de maneira direta, $\gamma_n = n$. Já para o hidrogênio, dois átomos são necessários para formar cada molécula de água. Por isso, uma relação direta entre a quantidade de moléculas de água formadas e o número de átomos de hidrogênio (m) presentes em SO também pode ser estabelecida diretamente, $\gamma_n = \dfrac{m}{2}$. Para uma mesma família de compostos orgânicos, o número de átomos de carbono e de hidrogênio é o mesmo, logo tanto na combustão completa como na incompleta valem as igualdades anteriores.

Todavia, há uma diferença significativa entre β_n e $\beta_n^{'}$. Essas sequências diferem de $\dfrac{n}{2}$ para todas as classes de compostos orgânicos estudadas. Uma vez que a diferença entre os produtos CO_2 (na combustão completa) e CO (na combustão incompleta) consiste em apenas um átomo de oxigênio, os reagentes das Equações 3 e 4 também devem apresentar esta diferença para que o balanço das massas esteja correto. Sendo a molécula de oxigênio (O_2) diatômica, uma diferença $\beta_n - \beta_n^{'} = \dfrac{n}{2}$ demonstra que há apenas um átomo de oxigênio de diferença entre as quantidades expressas por esses dois termos gerais. Além disso, no caso da combustão completa (Equação 3), verifica-se que, para um dado n, tem-se que $\beta_{n+1} - \beta_n = \dfrac{3}{2}$, isto é, para cada átomo de carbono extra em SO são necessários $\dfrac{3}{2}$ de moléculas de O_2 adicionais para que o balanço de massas seja preservado. Já para a combustão incompleta (Equação 4), a diferença é $\beta_{n+1} - \beta_n = 1$ para um dado n, sendo necessário apenas 1 molécula de oxigênio adicional para cada átomo de carbono extra em SO.

Em relação ao Teorema 1, para um mesmo n, nota-se que a redução de dois (alcenos) e quatro (alcinos) átomos de hidrogênio em SO, comparativamente ao alcano correspondente, implica na redução de uma e duas moléculas de água formadas nos produtos, respectivamente. Similarmente, há também uma redução de $\frac{1}{2}$ de moléculas de O_2 para cada par de hidrogênios diminuído nos hidrocarbonetos. Em síntese, para cada par de átomos de hidrogênio retirado da SO, menos 1 átomo de oxigênio é necessário para manter o balanço das massas:

$$\beta_n(C_nH_{2n+2}) - \beta_n(C_nH_{2n}) = \frac{3n+1}{2} - \frac{3n}{2} = \frac{1}{2}$$

Também vale:

$$\beta_n(C_nH_{2n}) - \beta_n(C_nH_{2n-2}) = \frac{3n}{2} - \frac{3n-1}{2} = \frac{1}{2}$$

Consequentemente, uma molécula de água a menos será formada:

$$\delta_n(C_nH_{2n+2}) - \delta_n(C_nH_{2n}) = \delta_n(C_nH_{2n}) - \delta_n(C_nH_{2n-2}) = 1$$

$$\delta_n(C_nH_{2n+2}) - \delta_n(C_nH_{2n-2}) = 2$$

As moléculas das substâncias orgânicas estudadas nos Teoremas 2 e 3 diferem apenas em um átomo de oxigênio em sua composição e, por isso, as sequências associadas ao coeficiente estequiométrico da molécula de oxigênio, β_n e $\beta_n^{'}$, são as únicas que diferem de um teorema para o outro. Nota-se que, para um dado n, há uma diferença de $\frac{1}{2}$ unidade de moléculas de oxigênio $\beta_n(C_nH_{2n+2}O) - \beta_n(C_nH_{2n+2}O_2) = \frac{1}{2}$, ou seja, um átomo de oxigênio a menos. Uma vez que as classes de compostos do Teorema 3 apresentam um átomo de oxigênio extra é consistente que seja necessário um átomo de oxigênio a menos, oriundo da molécula de oxigênio, para se alcançar o balanço de massas. O mesmo ocorre para os Teoremas 4 e 5. Por fim, verifica-se que, para um dado n, as classes de compostos dos Teoremas 4 e 5 apresentam um par de hidrogênios a menos em relação àquelas dos Teoremas 2 e 3, respectivamente. Portanto, uma molécula de água a menos é formada na combustão de SO dos Teoremas 4 e 5, isto é:

$$\delta_n(C_nH_{2n+2}O) - \delta_n(C_nH_{2n}O) = 1$$

$$\delta_n(C_nH_{2n+2}O_2) - \delta_n(C_nH_{2n}O_2) = 1$$

O mesmo é válido também para $\delta_n^{'}$.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho reporta a aplicação da teoria de sequências numéricas no balanceamento de equações químicas, especificamente para reações ideais de combustão completa e incompleta de algumas famílias de substâncias orgânicas. A metodologia apresentada é uma nova maneira de determinar os coeficientes estequiométricos das reações químicas de forma simples e rápida por meio do uso da fórmula do termo geral da sequência. Além disso, o método de balanceamento proposto é uma ferramenta importante na inter-relação entre química e matemática, uma vez que o conceito de sequências matemáticas é apresentado durante o ensino de química, mas raramente é relacionado às problemáticas da área. Assim, o padrão sequencial dos coeficientes estequiométricos pode ser representado como sequência numérica de maneira simples e prática. Embora o trabalho tenha se limitado às reações ideais de combustão, esta metodologia apresenta potencial para ser aplicada a outros tipos de compostos orgânicos e reações químicas.

REFERÊNCIAS

[1] P. Atkins e L. Jones, *Chemical Principles: The Quest For Insight*. New York: W.H. Freeman, 2013.

[2] S. A. Ashrafizadeh e Z. Tan, *Mass and Energy Balances: Basic Principles for Calculation, Design, and Optimization of Macro/Nano Systems.* Switzerland: Springer, 2018.

[3] A. E. Morris e Col, *Handbook on material and energy balance calculations in materials processing.* New Jersey: John Wiley & Sons, 2011.

[4] P. Atkins e J. Paula, *Physical Chemistry.* Oxford: University Press, 2014.

[5] P. Bruice, *Organic Chemistry.* New Jersey: Pearson/Prentice Hall, 2004.

[6] J. Fernandes e Ivone, "Estratégia didática inclusiva a alunos surdos para o ensino dos conceitos de balanceamento de equações químicas e de estequiometria para o ensino médio," *Química Nova Escola*, vol. 39, no. 2, pp. 186–194, 2017.

[7] M. F. Z. Page e Col, "The effect of teaching the entire academic year of high school chemistry utilizing abstract reasoning." *Chemistry Education and Practice*, vol. 19, pp. 500–507, 2018.

[8] M. I. Vera e R. Petris, "Ict incorporation in chemical equations teaching: experience with engineering students." *Revista Educacion en Ingenieria*, vol. 14, no. 28, pp. 33–38, 2019.

[9] J. D. Roberts e M. C. Caserio, *Basic principles of organic chemistry.* California: W. A. Benjamin Inc., 1977.

[10] Y. Wang e Col, "Mathematical models and algorithms for problems of chemical reactions." *WSEAS Transactions on Mathematics*, vol. 16, 2017.

[11] S. Ghaffari e Col, "Balancing redox chemical equations: a discovery procedure employing reduction titration." *J. Laboratory Chemical Educations*, vol. 5, no. 1, pp. 6–8, 2017.

[12] M. Bílek e Col, "Balancing chemical equations using sandwich making computer simulation games as a supporting teaching method," *Problems of Education in the 21º Century*, vol. 76, no. 6, pp. 779–799, 2018.

[13] N. L. Charnock, "Teaching methods for balancing chemical equations: an inspection versus an algebraic approach," *American Journal of Education Research*, vol. 4, no. 7, pp. 507–511, 2016.

[14] B. Chibuye e K. Mupela, "Effects of using algebraic method on secondary school students performance in balancing chemical equations in chemistry," *Journal of Education and Practice*, vol. 10, no. 23, pp. 55–62, 2019.

[15] M. M. Junqueira e F. A. Maximiano, "Interações intermoleculares e o fenômeno da solubilidade: explicações de graduandos em química," *Química Nova*, vol. 43, no. 1, 2019.

[16] J. M. Nyachwaya e Col, "College chemistry students' use of memorized algorithms in chemical reactions." *Chemistry Education Research and Practice, v. 15, p. 81-93*, vol. 15, pp. 81–93, 2014.

[17] S. K. Porter, "How should equation balancing be taught." *Journal of Chemical Education*, vol. 62, no. 6, pp. 507–508, 1985.

[18] W. L. Yarroch, "Student understanding of chemical equation balancing." *Journal of Research in Science Teaching, v. 22, n. 5, p. 449-459*, vol. 22, no. 5, pp. 449–459, 1985.

[19] E. Lima, *Análise Real: volume 1.* Rio de Janeiro: Coleção Matemática Universitária - IMPA, 2017.