



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA EM REDE NACIONAL

JOSÉ ERNANDES OLIVEIRA DE SANTANA

MATEMÁTICA APLICADA À QUÍMICA

FORTALEZA

2016

JOSÉ ERNANDES OLIVEIRA DE SANTANA

MATEMÁTICA APLICADA À QUÍMICA

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática em Rede Nacional, do Departamento de Matemática da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Matemática. Área de concentração: Ensino de Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Ferreira de Melo

FORTALEZA

2016

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

S223m Santana, José Ernandes Oliveira.

Matemática Aplicada à Química / José Ernandes Oliveira Santana. – 2016.
89 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências,
Departamento de Matemática, Programa de Pós-Graduação em Matemática em Rede
Nacional, Fortaleza, 2016.

Orientação: Prof. Me. Marcelo Ferreira de Melo.

1. Interdisciplinaridade.. 2. Matemática.. 3. Química.. I. Título.

CDD 510

JOSÉ ERNANDES OLIVEIRA DE SANTANA

MATEMÁTICA APLICADA À QUÍMICA

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática em Rede Nacional, do Departamento de Matemática da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Matemática. Área de concentração: Ensino de Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Ferreira de Melo

Aprovada em: ____/____/____

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Marcelo Ferreira de Melo (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Esdras Soares de Medeiros Filho
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Profa. Dra. Regina Celia Monteiro de Paula
Universidade Federal do Ceará (UFC)

AGRADECIMENTOS

A Deus primeiramente, por ter me dado esta oportunidade de cursar e de concluir este mestrado com saúde, superando todas as dificuldades.

Aos meus pais, Maria Oliveira de Santana e José Canuto Santana, que, se vivos fossem, estariam muito orgulhosos de mim.

Aos meus familiares pelo apoio de todas as horas, aos meus professores e aos meus colegas que me ajudaram na conclusão deste trabalho e, em especial, ao professor Dr. Marcelo Ferreira de Melo, meu orientador, pela forma com que me conduziu ao longo desses meses, sempre me transmitindo tranquilidade e segurança.

Ao meu grande amigo Josenir Barreto de Sousa pela ajuda em todos os sentidos, à minha filha Bruna Vitoria Nascimento Santana pela contribuição na área de informática, à minha querida amiga Ana Valéria Damasceno Teixeira pelas correções ortográficas e gramaticais feitas, ao meu amigo Fábio Albuquerque por suas palavras de incentivo e de apoio.

Enfim, meus agradecimentos a todos que me ajudaram na conclusão deste mestrado, um momento de grande satisfação pessoal e profissional.

RESUMO

O presente trabalho divide-se em três capítulos. Capítulo 01: Matemática Básica Aplicada à Química; capítulo 02: Matemática do Ensino Médio Aplicada à Química; capítulo 03: Matemática ao ensino superior aplicada à Química. O primeiro capítulo consiste em usarmos assuntos de matemática no ensino fundamental como proporção direta e inversa, média aritmética ponderada porcentagem para resolvermos problemas de cálculo químico. Para o entendimento desse capítulo é necessário que se tenha pleno domínio de toda a matemática do ensino fundamental que será pré-requisito também para os capítulos dois e três. No segundo capítulo nos concentramos na aplicação dos logaritmos e de sistemas lineares para solução de problemas específicos como cálculo do pH e balanceamento das equações químicas respectivamente. Para isso temos que estar hábeis no trato das propriedades dos logaritmos e na solução de equações lineares bem como na interpretação das soluções. No terceiro capítulo faz-se a aplicabilidade do cálculo diferencial e integral no cálculo das concentrações, do tempo e da velocidade das reações químicas. Trata-se de um assunto de mais difícil compreensão, tendo em vista que requer um domínio do capítulo de derivadas e integrais. Foi realizado uma revisão teórica tanto de matemática quanto de química precedendo cada aplicação para facilitar um melhor entendimento deste trabalho.

Palavras chave: Interdisciplinaridade. Matemática. Química.

ABSTRACT

This work is divided into three chapters. Chapter 01: Basic Applied Mathematics to Chemistry; Chapter 02: Math Middle Applied Learning Chemistry; Chapter 03: Mathematics higher education Applied to Chemistry. The first chapter consists of we use mathematics subjects in primary education as a direct and inverse proportion, weighted arithmetic average percentage to solve chemical calculation problems. For the understanding of this chapter it is necessary to have full control of all the mathematics of elementary school which will be a prerequisite also for chapters two and three. In the second chapter we focus on the application of logarithms and linear systems for specific troubleshooting as calculation of pH and balancing chemical equations respectively. For that we must be skilled in handling properties of logarithms and solving linear equations and interpretation of solutions. The third chapter is the applicability of differential and integral calculus in calculating the concentrations, time and rate of chemical reactions. This is a subject more difficult to understand, given that requires a chapter of the domain derivatives and integrals. a theoretical review was made of both mathematics and chemistry before each application to facilitate a better understanding of this work.

Keywords: Interdisciplinarity. Mathematics. Chemistry.

FIGURAS

Figura 1: Átomo do Carbono 12.....	14
Figura 2: Tabela Periódica.....	17
Figura 3: Esquema de ionização.....	31
Figura 4 – Escala de ph.....	47
Figura 5 – Cinética química.....	61
Figura 6 – Meia Vida.....	63
Figura 7 - Derivada.....	66
Figura 8 - Derivada.....	66
Figura 9 - Integral.....	84

TABELAS

Tabela 1 - Isótopos.....	18
Tabela 2 - Tabela em exercício de pH.....	47
Tabela 3 – Número de mols.....	62
Tabela 4 – Número de mols.....	64

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	12
2	MATEMÁTICA DO ENSINO FUNDAMENTAL APLICADA À QUÍMICA.....	14
2.1	Grandezas	14
2.1.1	<i>No cálculo matemático.....</i>	14
2.1.2	<i>No cálculo químico</i>	14
2.2	Média Aritmética Ponderada	15
2.2.1	<i>Aplicação da média aritmética ponderada na Química</i>	16
2.3	Proporcionalidade direta e inversa entre grandezas	19
2.3.1	<i>Grandezas proporcionais ou diretamente proporcionais.</i>	19
2.3.2	<i>Grandezas inversamente proporcionais</i>	20
2.3.3	<i>Aplicação de proporcionalidade na Química.....</i>	20
2.4	Porcentagem.....	25
2.5	Porcentagem aplicada à Química.	26
2.5.1	<i>Título ou porcentagem em massa (τ)</i>	26
2.5.2	<i>Grau de ionização dos ácidos</i>	29
2.5.3	<i>Fórmulas percentual, mínima e molecular</i>	32
2	MATEMÁTICA DO ENSINO MÉDIO APLICADA À QUÍMICA.....	39
3.1	Logaritmo	39
3.1.1	<i>Definição de logaritmo</i>	39
3.1.2	<i>Propriedades dos logaritmos.....</i>	39
3.2	Aplicação dos logaritmos na Química.....	44
3.2.1	<i>Potência Hidrogênio Iônico (pH) ou Potencial Hidroxiliônico (pOH).....</i>	44
3.3	Sistemas lineares.....	50
3.3.1.	<i>Resolução e discussão de sistemas lineares</i>	50
3.4	Aplicação de sistemas lineares na Química.....	54
3.4.1	<i>Balanceamento das Equações Químicas</i>	54
3.4.1.1	<i>Método Algébrico.....</i>	54
4	MATEMÁTICA DO ENSINO SUPERIOR APLICADA À QUÍMICA.	59
4.1	Derivada aplicada à química	59
4.1.1	<i>Conceito de derivada</i>	59
4.1.2	<i>Taxa de variação média (TVM).....</i>	59

4.2	Aplicação de taxa de variação na cinética química.....	60
4.2.1	<i>Derivada</i>	65
4.2.2	<i>Principais propriedades operatórias de derivada.....</i>	67
4.2.2.1	Regras de derivação	68
4.2.2.2	Derivadas implícitas.....	68
4.2.3	<i>Aplicação de derivadas na química</i>	69
4.2.3.1	Na cinética química: velocidade instantânea de uma reação química.....	69
4.2.3.2	Decaimento exponencial ou meia vida de uma substância radioativa.	72
4.2.3.3	Aplicação do estudo dos gases	78
4.3	Definição de Integral	84
4.3.1	<i>Aplicações das integrais na química.....</i>	87
4.3.1.1	Na cinética química:	87
5	CONCLUSÃO.....	92
	REFERÊNCIAS.....	93

1 INTRODUÇÃO

A Matemática, por seu vasto campo de atuação em outras ciências, especificamente nas ciências exatas, tem sua posição enfatizada quando da confecção dos currículos escolares.

O grande problema atual das escolas é como ministrar o conteúdo de Matemática de uma forma prática a fim de que o aluno possa relacionar seu cotidiano com assuntos de outras disciplinas.

Neste trabalho, tentamos, de forma objetiva, mostrar alguns modelos matemáticos aplicáveis na Química. Por meio de observações experimentais, pudemos construir esses modelos usando conceitos matemáticos dos Ensinos Fundamental, Médio e Superior.

Para isso, foram realizados estudos sobre as áreas de atuação da Matemática na Química nos três níveis. Um exemplo típico desse processo foi a dedução da Equação Geral dos Gases, utilizando conhecimentos básicos de Matemática, mas amplamente discutida no Ensino Superior. O conhecimento de Química é fundamental para o entendimento do modelo e da sua aplicação. Sem esses conhecimentos, não há segurança efetiva em sua aplicabilidade. O propósito é mostrar que não há aprendizado na Química sem a Matemática, e não existe como interdisciplinarizar a Matemática com a Química sem o conhecimento de Química.

Diante do que foi citado, nós, professores, tentamos cada vez mais conectar a Matemática às demais ciências. Dessa maneira, mostramos que a Matemática é a principal ferramenta para que as ciências exatas possam se apoiar e conseguir entender a natureza.

Sendo assim, propomos três capítulos que passam a trabalhar as definições e as propriedades de cada assunto específico, incluindo tanto a Matemática como a Química, sempre acompanhado com exemplos para um melhor esclarecimento. A proposta deste trabalho é fornecer a alunos e a professores de Matemática e de Química a estreita relação entre as duas nos três níveis: Fundamental, Médio e Superior.

2 MATEMÁTICA DO ENSINO FUNDAMENTAL APLICADA À QUÍMICA.

2.1 Grandezas

2.1.1 No cálculo matemático

Devemos entender como *grandeza* aquilo que pode ser quantificado, como comprimento, temperatura, massa, tempo, volume, força. Já *medidas* é o que mensura as grandezas, e cada medida possui um símbolo próprio.

Podemos enumerar alguns exemplos na área do conhecimento matemático que se referem às grandezas e às medidas, tais como: medida de comprimento, medidas de espaço, medidas de massas.

2.1.2 No cálculo químico

A primeira grandeza química surgiu pela necessidade de determinar a massa de um átomo que foi chamada de unidade de massa atômica simbolizada pela letra “u”. Convencionou-se que uma unidade de massa atômica seria o equivalente a $\frac{1}{12}$ do átomo do carbono 12.

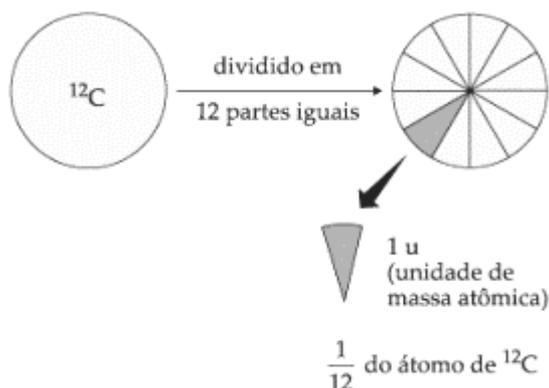


Figura 1: Átomo do Carbono 12

Conclui-se que:

“Massa atômica é o número que indica quantas vezes um elemento qualquer pesa mais que $\frac{1}{12}$ do ^{12}C .

Exemplos:

a) A massa atômica do Hélio = 4 significa que o Hélio tem 4 vezes a massa de $\frac{1}{12}$ do ^{12}C .

b) A massa atômica do Urânio = 238,4 significa que o Urânio tem 238,4 vezes a massa de $\frac{1}{12}$ do ^{12}C .

2.2 Média Aritmética Ponderada

Quando trabalhamos com a média aritmética ponderada simples, todas as ocorrências têm a mesma importância ou o mesmo peso. Dizemos, então, que elas têm o mesmo peso relativo. No entanto, existem situações em que as ocorrências têm importâncias relativas diferentes. Nesses casos, o cálculo da média deve levar em conta essa importância relativa ou peso relativo. Esse tipo de média chama-se média aritmética ponderada e será calculada por,

$$\overline{X}_p = \frac{p_1 x_1 + p_2 x_2 + \dots + p_n x_n}{p_1 + p_2 + \dots + p_n}$$

, onde:

$\overline{X}_p \rightarrow$ média aritmética ponderada.

$x_1, x_2, \dots, x_n \rightarrow$ conjunto dos valores cuja média se quer calcular.

$p_1, p_2, \dots, p_n \rightarrow$ peso de cada elemento $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ respectivamente.

Exemplo 01.

Mariana participou de um concurso, em que foram realizadas provas de Matemáticas, Química, Física e Biologia com pesos iguais a 3, 3, 2 e 2 respectivamente. Sabendo-se que Mariana tirou 8,0 em Matemática; 7,5 em Química; 5,0 em Física e 4,0 em Biologia, qual foi a média obtida por ela?

Solução:

Dados: $x_1 = 8,0$; $x_2 = 7,5$; $x_3 = 5,0$ e $x_4 = 4,0$

$$p_1 = 3; p_2 = 3; p_3 = 2 \text{ e } p_4 = 2$$

Aplicando-se a fórmula obtemos,

$$\overline{X}_p = \frac{8,0 \times 3 + 7,5 \times 3 + 5,0 \times 2 + 4,0 \times 2}{3 + 3 + 2 + 2} = \frac{64,5}{10} = 6,45$$

2.2.1 Aplicação da média aritmética ponderada na Química

Antes dessa aplicação, para um melhor entendimento, vamos conhecer a estrutura representativa de um átomo e rever a tabela periódica.

Para representar um átomo, costuma-se escrever seu símbolo, com seu número atômico (número de prótons) e seu número de massa ao lado (prótons mais nêutrons).

${}^A_Z X$ ou ${}_Z X^A$ onde:

$$A = Z(\text{prótons}) + N(\text{nêutrons})$$

Na tabela periódica temos o símbolo químico dos elementos bem como seu número atômico e o número de massa (Figura 1)

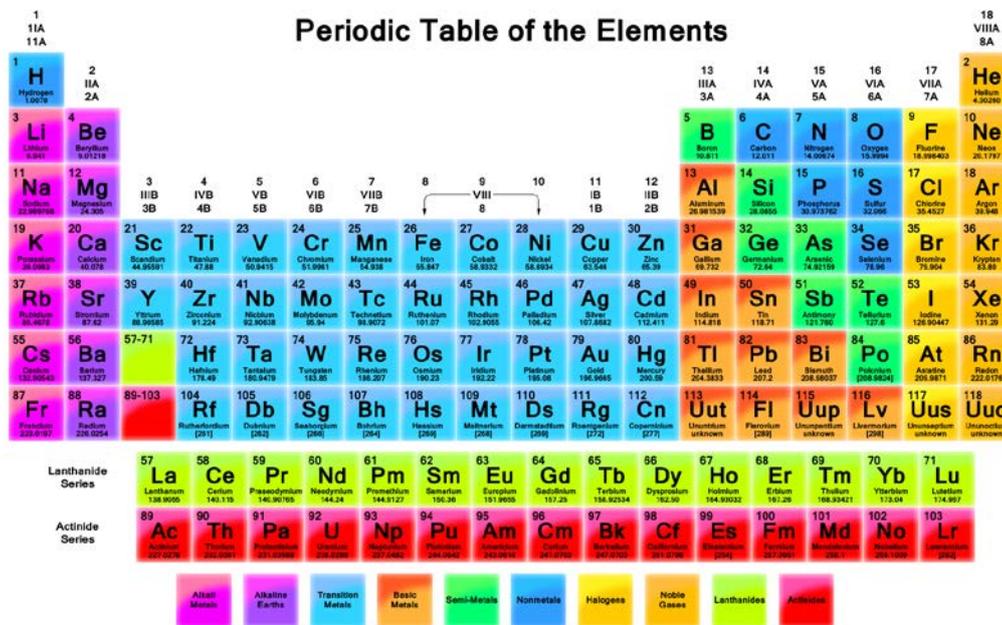


Figura 2: Tabela Periódica

Fonte: <https://esquadraodoconhecimento.wordpress.com/2013/10/14/a-tabela-periodica-dos-elementos-vai-ser-atualizada/>

Exemplo 01.

A maioria dos elementos apresenta isótopos (elementos com mesmo número atômico e número de massa diferente). A massa atômica de um elemento é dada pela média aritmética ponderado das massas isotópicas. Calcule:

- A massa atômica do elemento químico Cloro formado pelos isótopos $^{35}_{17}\text{Cl}$ e $^{37}_{17}\text{Cl}$ com 75% e 25% de abundância respectivamente.
- Com os dados da tabela abaixo, determine a massa atômica do Neônio.

Isótopos	Abundância na Natureza (%)	Massa Atômica (u)
----------	----------------------------	-------------------

Ne^{20}	90,92	20,00
Ne^{21}	0,26	21,00
Ne^{22}	8,82	22,00

Tabela 1 - Isótopos

- c) A massa atômica do ferro formado pelos isótopos Fe^{54} , Fe^{56} , Fe^{57} e Fe^{58} com abundância na natureza de 5,846%, 91,754%, 2,119% e 0,282% respectivamente.

Solução:

Utilizando a fórmula da média aritmética ponderada, nos três itens, vamos constatar que os resultados obtidos são exatamente a massa atômica do elemento químico presente na tabela periódica.

- a) Dados: $x_1 = 35$ e $x_2 = 37$; $p_1 = 75\%$ e $p_2 = 25\%$.

$$A = \frac{35 \times 75\% + 37 \times 25\%}{75\% + 25\%} = \frac{35 \times 0,75 + 37 \times 0,25}{0,75 + 0,25} = \frac{26,25 + 9,25}{1} = 35,54$$

- b) Dados: $x_1 = 20$, $x_2 = 21$ e $x_3 = 22$; $p_1 = 90,92\%$, $p_2 = 0,26\%$ e $p_3 = 8,82\%$.

$$A = \frac{20 \times 90,92\% + 21 \times 0,26\% + 22 \times 8,82\%}{90,92\% + 0,26\% + 8,82\%}$$

$$A = \frac{20 \times 0,9092 + 21 \times 0,0026 + 22 \times 0,0882}{0,9092 + 0,0026 + 0,0882}$$

$$A = \frac{18,184 + 0,0546 + 1,9404}{1} = 20,179$$

- c) Dados: $x_1 = 54$, $x_2 = 56$, $x_3 = 57$ e $x_4 = 58$; $p_1 = 5,845\%$, $p_2 = 91,754\%$, $p_3 = 2,119\%$ e $p_4 = 0,282\%$.

$$A = \frac{54 \times 5,845\% + 56 \times 91,754\% + 57 \times 2,119\% + 58 \times 0,282\%}{5,845\% + 91,754\% + 2,119\% + 0,282\%}$$

$$A = \frac{54 \times 0,05845 + 56 \times 0,91754 + 57 \times 0,02119 + 58 \times 0,00282}{0,05845 + 0,91754 + 0,02119 + 0,00282}$$

$$A = \frac{3,1563 + 51,38224 + 1,20783 + 0,16356}{1} = 55,90993$$

2.3 Proporcionalidade direta e inversa entre grandezas

2.3.1 Grandezas proporcionais ou diretamente proporcionais.

São aquelas em que o aumento de uma provoca o aumento de outra, ou a diminuição de uma resulta na diminuição de outra na mesma proporcionalidade, isto é, se uma duplica, a outra também duplicará, se uma for reduzida à metade a outra também será reduzida à metade. Significa que a razão entre antes e depois de suas variações permanece constante.

Exemplo 01:

Um trem percorre 40 km em 1 hora, 80 km em 2 horas, 120 km em 3 horas e assim por diante, temos então:

$$\frac{40}{1} = \frac{80}{2} = \frac{120}{3} = \dots = 40 \text{ (Constante).}$$

Nesse caso, o espaço e o tempo são grandezas proporcionais ou diretamente proporcionais.

Concluimos, então, que, se a e b são grandezas diretamente proporcionais, temos:

$$\frac{a}{b} = \frac{a_1}{b_1} = \frac{a_2}{b_2} = \dots = \frac{a_n}{b_n} = k$$

2.3.2 Grandezas inversamente proporcionais

São aquelas em que o aumento de uma provoca a diminuição da outra ou a diminuição de uma implica o aumento da outra na mesma proporção, isto é, se uma triplica, a outra fica dividida por três, se uma for reduzida à metade a outra duplica. Significa que a razão entre os valores antes e o inverso dos valores depois permaneceu constante.

Exemplo 01.

Percorrendo certa distância d a 120 km/h gastamos 1 hora , percorrendo a 80 km/h gastamos $1,5 \text{ hora}$, a 60 km gastamos 2 horas e assim por diante. Temos então:

$$\frac{120}{1} = \frac{80}{1,5} = \frac{60}{2} = 120 \text{ (Constante)}$$

Nesse caso, a velocidade e o tempo são grandezas inversamente proporcionais. Concluímos, então, que, se a e b são grandezas inversamente proporcionais, temos:

$$\frac{a}{1} = \frac{a_2}{1} = \frac{a_3}{1} = \dots = \frac{a_n}{1} = k \text{ ou } a \times b = a_1 \times b_1 = a_2 \times b_2 = \dots = a_n \times b_n = k$$

2.3.3 Aplicação de proporcionalidade na Química

Vimos no tópico (1.1.2.) que a unidade de massa atômica (u) é a primeira unidade usada nos cálculos químicos. Ampliaremos o quadro das unidades para uma melhor compreensão das aplicações de proporcionalidade e de assuntos subsequentes.

❖ Massa molecular (MM)

“Massa molecular é o número que indica quantas vezes a massa de uma molécula é mais pesada que 1 u, ou seja, $\frac{1}{12}$ do carbono C^{12} ”.

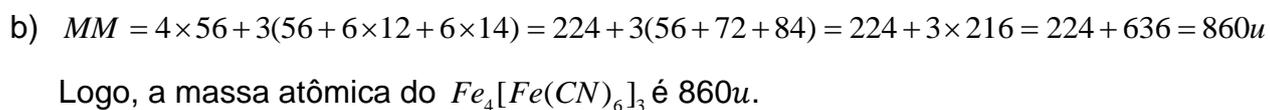
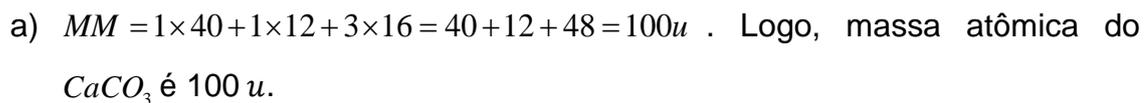
As moléculas são formadas por grupo de átomos ligados entre si, somando a massa atômica de cada átomo envolvido, tem-se a massa molecular.

Exemplo 01.

Calcule as massas moleculares das seguintes substâncias:



Solução:



❖ Constante de Avogadro (N) ou Mol

Assim como uma dezena corresponde a 10 unidades, uma dúzia corresponde a 12 unidades, definiu-se que 1 mol é igual a $6,02 \times 10^{23}$ unidades, e 1 mol de carbono contém 12 gramas (equivalente ao C^{12}).

1 mol de carbono = $6,02 \times 10^{23}$ átomos = 12 gramas.

❖ Massa molar (M)

É a massa correspondente a $6,02 \times 10^{23}$ átomos ou moléculas, expresso em gramas(g).

Exemplo 01:

- a) Quantos mols correspondem a 600 g de H_2O ? Dados: H^1 e O^{16} .
b) Qual é a massa, em gramas, de uma molécula de (C_2H_6) ? Dados: C^{12} e H^1 .

Solução:

- a) Mol e massa são diretamente proporcionais. Calculando-se a massa molecular do H_2O , temos $M = 2 \times 1 + 1 \times 16 = 18g$. Aplicando-se a proporcionalidade:

$$\begin{array}{l} 1mol \longrightarrow 18g \\ n \longrightarrow 600g \end{array} \Rightarrow 18n = 600 \Rightarrow n = 33,3mol$$

Logo, 600 g de H_2O corresponde a 33,3mol.

- b) Massa e número de molécula são diretamente proporcionais. Calculando-se a massa molar do C_2H_6 temos,

$M = 2 \times 12 + 6 \times 1 = 24 + 6 = 30g$ e usando-se a proporcionalidade:

$$\begin{array}{l} 1mol : 30g \longrightarrow 6,02 \times 10^{23} \text{ moléculas} \\ x \longrightarrow 1 \text{ molécula} \end{array}$$

logo:

$$\frac{30g}{x} = \frac{6,02 \times 10^{23}}{1} \Rightarrow 6,02 \times 10^{23} x = 30$$

$$x = \frac{30}{6,02 \times 10^{23}} \Rightarrow x = 5 \times 10^{-23} \text{ g}$$

Logo, a massa, em gramas, de 1 molécula de C_2H_6 é $5 \times 10^{-23} \text{ g}$.

Exemplo 02.

A lei dos gases ideais, bastante difundida na Química, é dada por $PV = nRT$, onde P é a pressão em atm, V é o volume em litros, T é a temperatura absoluta em K e n é o número de mols. Utilizando as leis de Boyle, Charles e de Avogadro, demonstre a lei dos gases ideais.

Solução:

Lei de Boyle: mantendo constantes o número de mols n e a temperatura T , o volume V e a pressão P se tornam inversamente proporcionais, isto é,

$$V \propto \frac{1}{P} \text{ (i)}$$

Lei de Charles: mantendo constante o número de mols n e a pressão P , o volume V e a temperatura T se tornam diretamente proporcionais, ou seja,

$$V \propto T \text{ (ii)}$$

Lei de Avogadro: mantendo constantes a pressão P e a temperatura T , o número de mols n e o volume V se tornam diretamente proporcionais, o que equivale a

$$V \propto n \text{ (iii)}$$

De (ii) e (iii) deduzimos que,

$$V \propto nT \text{ (iv)}$$

De (I) e (IV) temos,

$V \propto \frac{nT}{P} \longrightarrow PV \propto nT$. Para confirmar a igualdade, acrescentamos a constante R

chamada de constante universal dos gases. Logo, $PV = nRT$ onde

$$R = 0,082 \frac{\text{atm} \times \text{L}}{\text{mol} \times \text{K}}$$

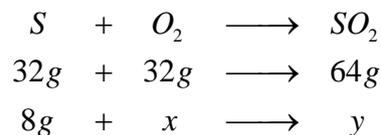
Exemplo 03.

A lei de Lavoisier ou lei da conservação da massa diz que, em uma reação química, em um sistema fechado, a soma das massas dos reagentes é igual à soma das massas dos produtos. A partir disso, Lavoisier criou a célebre frase “Na natureza nada se cria, nada se perde, tudo se transforma”. A lei de Proust revela que a proporção das massas que reagem permanece constante.

“Se 32 g de enxofre (S) reagem com 32 g de oxigênio (O), produzindo o anidrido sulfuroso (SO_2), então 8,0 g de enxofre reagirão com x de oxigênio, produzindo y de SO_2 ”. Calcule os valores de x e y .

Solução:

A reação é: $S + O_2 \longrightarrow \text{SO}_2$. Vamos usar a lei de Lavoisier:



$$\frac{32g}{8g} = \frac{32g}{x} \Rightarrow x = 8g \text{ (Lei de Proust)}$$

$$8g + x = y \Rightarrow y = 8g + 8g = 16g \text{ (Lei de Lavoisier)}$$

Logo, $x = 8g$ e $y = 16g$

2.4 Porcentagem

É definida como uma forma de expressar uma relação entre dois valores. Dizer que numa escola 60% (lê-se: sessenta por cento) dos alunos são mulheres significa dizer que a cada 100 alunos 60 são mulheres. Isso pode ser expresso por meio de uma fração cujo denominador é 100 e o numerador é parte envolvida, ou seja, 60.

Logo, $60\% = \frac{60}{100} = 0,6$.

O cálculo da porcentagem pode ser feito por uma proporção direta. Veja os exemplos:

Exemplo 01.

Comprei um livro que custa R\$ 250,00 para pagar após 30 dias, mas, se o pagamento fosse à vista, a livraria me concederia um desconto de 10%. De quanto seria o desconto se tivesse comprado o livro à vista?

Solução:

Notemos que a cada R\$ 100,00 teríamos um desconto de R\$ 10,00, portanto trata-se de uma proporção direta,

$$\frac{10}{100} = \frac{x}{250} \Rightarrow 100x = 10 \times 250 \Rightarrow x = 25.$$

Logo, o desconto seria de R\$ 25,00.

Exemplo 02.

Um aluno recebe R\$ 10,00 para seu lanche diariamente. Seu pai disse que, se suas notas melhorassem, ele receberia um aumento de 15% no final do mês (30 dias). Quanto esse aluno irá receber se melhorar suas notas?

Solução:

Sabendo que a cada R\$ 100,00 ele terá um aumento de R\$ 15,00. Isto é,

$$\frac{15}{100} = \frac{x}{10} \rightarrow 100x = 150 \rightarrow x = 1,5 \text{ por dia, em 30 dias ele receberia } 1,5 \times 30 = 45.$$

Logo, no final do mês ele receberá R\$ 45,00.

2.5 Porcentagem aplicada à Química.

2.5.1 Título ou porcentagem em massa (τ)

Nos rótulos dos medicamentos e de vários produtos que são consumidos pelas pessoas, são apresentados os teores das substâncias presentes em forma de porcentagem. Esse teor é só mais uma das diversas maneiras de expressar a concentração de uma substância. Essa porcentagem é chamada de título ou porcentagem em massa e pode ser calculada de duas formas:

- I) Título percentual em massa: é o quociente entre a massa do soluto (m_1) e a massa total da solução (m):

$$\tau = \frac{m_1}{m} \times 100$$

- II) Título percentual em volume: é o quociente entre o volume de soluto (v_1) e o volume total da solução (v):

$$\tau_v = \frac{v_1}{v} \times 100$$

Exemplo 01.

Uma solução contém 8 g de NaCl e 42 g de água. Qual o título percentual?

Solução:

Se não quisermos utilizar a fórmula direta, podemos resolver a questão usando uma simples proporção. Observemos que massa total da solução $m = 8 \text{ g} + 42 \text{ g} = 50 \text{ g}$. Logo,

$$\frac{50}{8} = \frac{100}{\tau\%} \longrightarrow \tau\% = \frac{800}{50} = 16\% \quad \begin{cases} m_1 = 8\text{g} \rightarrow \text{massa do soluto} \\ m_2 = 42\text{g} \rightarrow \text{massa do solvente} \end{cases}$$

Exemplo 02.

Temos 250 g de solução de hidróxido de sódio (NaOH) cuja porcentagem em massa é 20%. Adicionamos a essa solução 150 g de água. Calcule:

- A massa do cloreto de sódio.
- A porcentagem em massa após a diluição (acréscimo de solvente).

Solução:

a) Tem-se: $\begin{cases} m = m_1 + m_2 = 250 \text{ g} \rightarrow \text{massa da solução} \\ m_1 = 20\% \rightarrow \text{massa do soluto em \%} \end{cases}$

$$\frac{250\text{g}}{m_1} = \frac{100\%}{20\%} \rightarrow 100m_1 = 5000 \rightarrow m_1 = 50 \text{ g}$$

Logo, a massa do Cloreto de Sódio (m_1) é de 50 g.

- b) Como $m_1 = 50\text{g}$ e $m = 250 \text{ g}$ temos que a massa do solvente m_2 é,
 $m = m_1 + m_2 \rightarrow 250 = 50 + m_2 \rightarrow m_2 = 200 \text{ g}$. Ao adicionarmos 150 g de solvente (água), passaremos a ter 350 g de solvente ($200+150=350 \text{ g}$). Como a massa do soluto permanece inalterada, teremos uma nova massa para a solução que é $m' = 50 + 350 = 400 \text{ g}$.

$$\text{Proporcionalmente temos } \frac{400 \text{ g}}{50 \text{ g}} = \frac{100\%}{\tau} \rightarrow 400\tau = 5000 \rightarrow \tau = 12,5\% .$$

Desse modo, a porcentagem em massa após a diluição é de 12,5%.

Exemplo 03.

Uma solução aquosa de nitrato de potássio (KNO_3), contendo 20% de soluto, tem 30% de seu solvente evaporado. O coeficiente de solubilidade do KNO_3 a 20°C é igual a 31,5 g de soluto/100 g de água. Calcule a massa cristalizada a partir de 1 kg da solução inicial, se a temperatura de equilíbrio for igual a 20°C .

Solução:

Vamos calcular a massa de KNO_3 e H_2O na solução inicial (1 kg), a 20%

$$m = 1\text{kg} = 1000 \text{ g} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1000 \text{ g}}{m_{KNO_3}} = \frac{100\%}{20\%} \rightarrow m_{KNO_3} = 200 \text{ g} \\ \frac{1000 \text{ g}}{m_{H_2O}} = \frac{100\%}{100\% - 20\%} \rightarrow m_{H_2O} = 800 \text{ g} \end{array} \right.$$

Durante a evaporação, a massa de KNO_3 permanece inalterada: $m_{KNO_3} = 200 \text{ g}$.

Porém, do solvente inicial (800 g), 30% evaporam:

$$\frac{800 \text{ g}}{m_{ev}} = \frac{100\%}{30\%} \rightarrow m_{ev} = 240 \text{ g} \text{ de } H_2O \text{ evaporam e a massa de água final é:}$$

$$m_{H_2O} = 800 \text{ g} - 240 \text{ g} = 560 \text{ g} .$$

Na mistura final, temos: 200 g de KNO_3 em 560 g de H_2O . Mas a solubilidade dada para o KNO_3 é de 31,5 g KNO_3 para 100 g de água, então, vamos calcular quantos gramas de KNO_3 se dissolvem em 560 g de H_2O .

$$\frac{31 \text{ g } KNO_3}{100 \text{ g } H_2O} = \frac{m_{2(KNO_3)}}{560 \text{ g } H_2O} \rightarrow m_{2(KNO_3)} = \frac{31 \times 560}{100} = 176,5 \text{ g} . \text{ Como havia } 200 \text{ g de } KNO_3$$

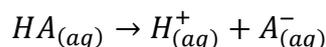
, restam, no fundo do frasco sem dissolver $200 \text{ g} - 176,4 \text{ g} = 23,6 \text{ g}$.

Logo, cristalizam, após a evaporação, $23,6 \text{ g}$ de KNO_3 .

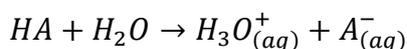
2.5.2 Grau de ionização dos ácidos

Vamos, para um melhor entendimento, definir ácidos e grau de ionização.

Os ácidos, segundo a teoria de Arrhenius, são aquelas substâncias que, em meio aquoso, reagem com a água, sofrendo ionização e liberando como único cátion o hidrogênio (H^+) ou, mais corretamente, cátion hidrônio (H_3O^+):



Ou



A força dos ácidos inorgânicos é medida de acordo com o grau de ionização (α) deles em solução aquosa. Esse grau de ionização (α) é medido experimentalmente e pode ser obtido pela relação entre a quantidade de moléculas que se ionizam e a quantidade total de moléculas que foram dissolvidas.

$$\alpha = \frac{\text{número de moléculas ionizadas}}{\text{número de moléculas dissolvidas}}$$

Esse valor pode variar de 0 a 1 e também pode ser expresso em porcentagem recebendo as seguintes classificações:

$\alpha \geq 50\%$: ácido forte. Exemplos: HCl ($\alpha = 92\%$) e H_2SO_4 ($\alpha = 61\%$).

$5\% < \alpha < 50\%$: ácido moderado. Exemplos: HF ($\alpha = 8\%$) e H_2PO_4 ($\alpha = 27\%$).

$\alpha \leq 5\%$: ácido fraco. Exemplos: HCN ($\alpha = 0,008\%$) e H_2CO_3 ($\alpha = 0,18\%$).

Exemplo 01.

A cada 6,115 L o ácido sulfídrico verifica-se que $4,647 \cdot 10^{-3}$ L dissociam formando, $H_3O^+_{(aq)} + S^{2-}_{(aq)}$ e todo o restante continua na forma molecular. Baseado no grau de ionização (α), indique se o ácido sulfídrico é forte, moderado ou fraco.

Solução:

Cálculo do grau de ionização (α):

$$\alpha = \frac{\text{número de moléculas ionizadas}}{\text{número de moléculas dissolvidas}}$$

$$\alpha = \frac{4,647 \times 10^{-3}}{6,115} \rightarrow \alpha = 0,00076 \times 100\% = 0,76\%$$

Logo, o ácido sulfídrico é fraco, pois se grau de ionização é menor que 5%.

Exemplo 02.

Após a ionização de um ácido em água, observou-se que o número de moléculas ionizadas era o quádruplo do número de moléculas não ionizadas. Com base nessa observação, calcule a porcentagem de ionização do referido ácido.

Solução:

Os dados fornecidos pelo exercício foram:

- Nº de partículas ionizadas: x (apenas informa que elas são o quádruplo das não ionizadas).
- Nº de partículas não ionizadas: y (não foi informado).
- Nº de partículas total: z (é a soma de x+y).

Como a questão informa que o número de moléculas ionizadas é quatro vezes maior que o número de moléculas não ionizadas, logo:

$$x = 4.y \text{ ou } y = \frac{x}{4}$$

O número total de partículas é a soma das ionizadas com as não ionizadas. Como estamos falando de ionização, substituiremos no lugar do y a expressão $\frac{x}{4}$, já que x é o número de partículas ionizadas. Assim,

$z = x + y \rightarrow z = x + \frac{x}{4} \rightarrow z = \frac{5x}{4}$. Para encontrar a porcentagem de ionização, basta utilizar a fórmula do cálculo do grau de ionização (α):

$$\alpha = \frac{\text{número de moléculas ionizadas}}{\text{número de moléculas dissolvidas}} = \frac{x}{\frac{5x}{4}} = \frac{4}{5} = 0,8 \times 100 = 80\%.$$

Logo, a porcentagem de ionização desse ácido é de 80%, portanto um ácido forte.

Exemplo 04.

Quanto maior a força de um ácido, maior a sua capacidade de sofrer ionização e, conseqüentemente, produzir íons em água. Assim é possível acender uma lâmpada utilizando apenas uma cuba de vidro, dois fios elétricos e um soquete. Qual dos ácidos abaixo, ao ser adicionado a água, seria capaz de ionizar-se bastante e, com isso, acender a lâmpada com um brilho mais intenso?

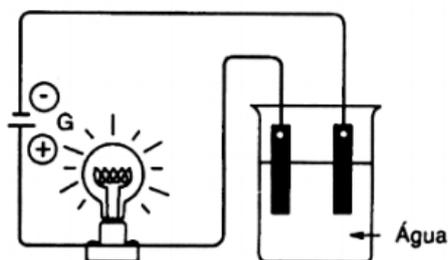


Figura 3: Esquema de ionização

Fonte: <http://mundoeducacao.bol.uol.com.br/upload/conteudo/forca-de-acidos.jpg>

- a) HF ($\alpha = 8 \%$)
- b) H₂S ($\alpha = 0,076 \%$)
- c) H₃PO₄ ($\alpha = 27 \%$)

d) H_2SiO_4 ($\alpha < 5 \%$)

e) HNO_3 ($\alpha = 92 \%$)

Solução:

Letra e). Se o ácido apresenta grau de ionização maior ou igual a 50% ele é forte, logo os ácidos HNO_3 e H_3SiO_4 são fortes. Todavia HNO_3 (I) é mais forte por ter maior grau de ionização. O H_3PO_4 (c) é um ácido semi forte por ter grau de ionização entre 50% e 5%. Já o H_2S (b) é um ácido fraco por ter grau de ionização menor que 5%.

2.5.3 Fórmulas percentual, mínima e molecular

O foco desse tópico será dar ênfase na formula percentual, como as três formulas estão intimamente ligadas relacionaremos para não quebrar a linha de raciocínio.

A fórmula percentual mostra quantas partes existe de um determinado elemento, em 100 parte, em massa, de uma substância.

A fórmula mínima mostra a menor proporção, em números inteiros, existentes entre átomos de cada elemento participante de um composto.

A fórmula molecular mostra o número de átomos de cada elemento em uma molécula ou íon - fórmula de um composto.

A massa molecular é o produto da massa da fórmula mínima por um número inteiro conveniente (n).

$$(\text{massa molecular}) = (\text{massa fórmula mínima}).n$$

Ou seja, sabendo a massa molecular da substância, é possível calcular de quantas vezes precisamos da massa da fórmula mínima para atingir aquele valor. [Química e muito mais (2016)]

Exemplo 01.

A porcentagem em massa do carbono no clorofórmio, $CHCl_3$ é, aproximadamente:
(Dados: $C = 12$, $H = 1$ e $Cl = 35,5$.)

- a) 1% b) 10% c) 12% d) 24% e) 50%

Solução:

Letra b). Vamos calcular a massa molar do clorofórmio levando em consideração a participação de cada elemento na fórmula.

$$C = 1 \times 12 = 12$$

$$H = 1 \times 1 = 1$$

$$Cl = 3 \times 35,5 = 106,5$$

$$\text{Massa total do } CHCl_3 = 119,5 \text{ g}$$

Pela proporção direta

$$\frac{119,5 \text{ g}}{100 \%} = \frac{12 \text{ g}}{x}$$

$$x \% = \frac{100 \% \times 12}{119,5} \rightarrow x = 10,04 \%$$

Logo, a resposta correta é o item b, aproximadamente 10 %.

Exemplo 02.

Determine a fórmula molecular de um óxido de fósforo que apresenta 43,6% de fósforo e 56,4% de oxigênio (porcentagem em massa) e massa molecular de 142 g é: Dados: (massas atômicas: P = 31; O = 16). [Funadesp]

- a) P_2O b) PO_3 c) P_3O_2 d) PO_2 e) P_2O_5

Solução:

Letra e). $\begin{cases} P = 31 \\ O = 16 \end{cases}$ Vamos batizar o composto de P_xO_y

Calculo do fósforo (P)

$$\frac{31}{100} \times P = \frac{43,6}{100} \rightarrow P = \frac{43,6}{31} \rightarrow P = 1,41$$

$$\frac{16}{100} \times O = \frac{56,4}{100} \rightarrow O = \frac{56,4}{16} \rightarrow O = 3,52$$

Dividindo pelo menor dos resultados encontramos o primeiro inteiro.

$$P = 1,41 \div 1,41 = 1$$

$$O = 3,52 \div 1,41 = 2,50$$

Vamos tornar todos os menores inteiros possíveis, para isso multiplicamos todo por 2 logo,

$$x = 1 \times 2 = 2$$

$$y = 2,5 \times 2 = 5$$

Portanto; $P_xO_y = P_2O_5$ (Item e).

Exemplo 03.

Sabendo-se que a fórmula molecular do ácido oxálico é $H_2C_2O_4$, sua composição centesimal será: (Dadas as massas atômicas: H=1, C=12 e O=16). [Unimep]

- a) 16,30% de hidrogênio, 29,70% de carbono e 54,00% de oxigênio.
- b) 3,74% de hidrogênio, 37,40% de carbono e 58,86% de oxigênio.
- c) 2,22% de hidrogênio, 26,67% de carbono e 71,11% de oxigênio.
- d) 26,67% de hidrogênio, 32,23% de carbono e 41,10% de oxigênio.
- e) 8,23% de hidrogênio, 17,47% de carbono e 73,30% de oxigênio.

Solução:

Letra c). Calculando a massa atômica e a participação de cada um dos átomos na fórmula do ácido oxálico.

Temos:

$$H = 1 \times 2 = 2$$

$$O = 4 \times 16 = 64$$

$$C = 2 \times 12 = 24$$

A massa molar do ácido oxálico é:

$$2 + 64 + 24 = 90g/mol.$$

Para o hidrogênio em (%)

$$\frac{90g \text{ de ácido oxálico}}{100 \%} = \frac{2g \text{ de hidrogênio}}{x}$$

$$\frac{90}{100} = \frac{2}{x} \rightarrow x = \frac{100 \times 2}{90} \rightarrow x = 2,22 \%$$

Para o oxigênio em (%)

$$\frac{90g \text{ de ácido oxálico}}{100 \%} = \frac{64g \text{ de oxigênio}}{x}$$

$$\frac{90}{100} = \frac{64}{x} \rightarrow x = \frac{100 \times 64}{90} \rightarrow x = 71,11 \%$$

Para o carbono em (%)

$$\frac{90 \text{ g de ácido oxálico}}{100} = \frac{24 \text{ g de carbono}}{x}$$

$$\frac{90}{100} = \frac{24}{x} \rightarrow x = \frac{100 \times 24}{90} \rightarrow x = 26,67 \%$$

Portanto, resposta item c).

Exemplo 04:

Uma substância pura de massa igual a 32 g foi submetida a análise elementar e verificou-se que continha 10 g de cálcio, 6,08 g de carbono e 15,92 g de oxigênio.

- Qual o teor (porcentagem) de cada elemento da substância?
- Qual a fórmula mínima da substância?
(massas atômicas: $Ca = 40, C = 12$ e $O = 16$)

Solução:

Massa total da substância: $10 + 6,08 + 15,92 = 32\text{g}$.

- Participação percentual do cálcio:

$$\frac{32 \text{ g da substância}}{100\%} = \frac{10 \text{ g de cálcio}}{x}$$

$$\frac{32}{100} = \frac{10}{x} \rightarrow 32 = 10 \times 100 \rightarrow x = \frac{1000}{32} \rightarrow x = 31,25\%$$

Logo, o teor de cálcio é de 31,25%.

Participação percentual do carbono:

$$\frac{32 \text{ g da substância}}{100 \text{ g}} = \frac{6,08 \text{ g de carbono}}{x}$$

$$\frac{32}{100} = \frac{6,08}{x} \rightarrow 32x = 608 \rightarrow x = \frac{608}{32} \rightarrow x = 19 \%$$

Logo, o teor de carbono é de 19 %.

Participação percentual do oxigênio:

$$\frac{32 \text{ g da substância}}{100 \text{ g}} = \frac{15,92 \text{ g de oxigênio}}{x}$$

$$\frac{32}{100} = \frac{15,92}{x} \rightarrow 32x = 1592 \rightarrow x = \frac{1592}{32} \rightarrow x = 49,75 \%$$

Logo, o teor de oxigênio é de 49,75 %.

b) $Ca = 31,25 \div 40 = 0,78$

$$C = 19 \div 12 = 1,58 \quad \xrightarrow{\div 0,78} \begin{cases} Ca = 0,78 \div 0,78 = 1 \\ C = 1,58 \div 0,78 = 2,02 \cong 2,0 \\ O = 3,11 \div 0,78 = 3,99 \cong 4,0 \end{cases}$$

$$O = 49,75 \div 16 = 3,11$$

Logo, a fórmula mínima é CaC_2O_4 .

Exemplo 05:

A fórmula percentual ou centesimal indica a porcentagem, em massa de cada elemento químico da substância. Isso quer dizer que se tivermos 100 g de uma substância pura e ela possuir 80 g do elemento carbono e 20 g do elemento

hidrogênio, então, podemos concluir que há 80% de carbono e 20% de hidrogênio, sendo a fórmula percentual dessa substância igual a $C_{80\%}H_{20\%}$. [Alunos online (2016)]

Com estas informações, resolva:

O ácido oxálico inibe a absorção de cálcio pelo organismo e é encontrado no chocolate. Assim, a criança que toma somente achocolatado não aproveita o cálcio que o leite oferece e, em longo prazo, pode apresentar deficiência desse mineral. A decomposição de 9,0 g de ácido oxálico produziu: 0,2 g de hidrogênio, 2,4 g de carbono e 6,4 g de oxigênio. Determine a fórmula percentual do ácido oxálico.

Solução:

Usando a proporção percentual temos:

% de carbono

$$\frac{9,0 \text{ g de substância}}{100 \% \text{ de substância}} = \frac{2,4 \text{ g de carbono}}{x} \rightarrow x = 26,67 \% \text{ de carbono.}$$

% de hidrogênio

$$\frac{9,0 \text{ g de substância}}{100 \% \text{ de substância}} = \frac{0,2 \text{ g de hidrogênio}}{x} \rightarrow x = 2,22 \% \text{ de hidrogênio.}$$

% de oxigênio

$$\frac{9,0 \text{ g de substância}}{100 \% \text{ de substância}} = \frac{6,4 \text{ g de oxigênio}}{x} \rightarrow x = 71,11 \% \text{ de oxigênio.}$$

Logo, a fórmula percentual do ácido oxálico é $C_{26,67\%}H_{2,22\%}O_{71,11\%}$.

2 MATEMÁTICA DO ENSINO MÉDIO APLICADA À QUÍMICA.

Neste capítulo, abordaremos dois assuntos da matemática ligados ao Ensino Médio: logaritmos e sistemas lineares. O primeiro para aplicarmos no cálculo da acidez e basicidade de uma solução química, e o segundo usado no balanceamento das equações químicas.

3.1 Logaritmo

Na aplicação deste tema, é necessário o domínio da definição e de suas propriedades que serão revisados a seguir.

3.1.1 Definição de logaritmo

Dados os número reais $0 < b \neq 1$, $N > 0$ e x , que satisfaçam a relação $b^x = N$, dizemos que x é o logaritmo de N na base b . Essa relação também pode ser expressa simbolicamente da forma:

$\log_b^N = x$, onde:

b é a base do sistema de logaritmos;

N é o logaritmando ou antilogaritmo

x é o logaritmo

$$(0 < b \neq 1 \text{ e } N > 0)$$

3.1.2 Propriedades dos logaritmos

Abaixo relacionamos as propriedades imediatas e operatórias dos logaritmos.

i) Propriedades imediatas:

$$P.1) \log_b^1 = 0.$$

$$P.2) \log_b^b = 1.$$

$$P.3) \log_b^{b^k} = k.$$

$$P.4) \log_b^M = \log_b^N \longrightarrow M = N.$$

$$P.5) {}_b \log_b^N = N$$

ii) Propriedades operatórias dos logaritmos:

$$P.6) \log_b^{M \times N} = \log_b^M + \log_b^N$$

$$P.7) \log_b^{\frac{M}{N}} = \log_b^M - \log_b^N$$

$$P.8) \log_b^{N^k} = k \times \log_b^N$$

$$P.9) \log_b^N = \frac{\log_c^N}{\log_c^b}$$

Observações:

i) Quando a base do sistema de logaritmos é igual a 10, usamos a expressão logaritmo decimal e escrevemos $\log N$ em vez de \log_{10}^N , ou seja, omitimos o 10 da sua apresentação.

ii) Quando a base é o número irracional, $e = 2,7183 \dots$ (número neperiano), indicamos esse logaritmo por \ln , isto é, $\log_e^N = \ln N$ (em homenagem a John Napier, um escocês do século XVI, inventor dos logaritmos).

Exemplo 01.

Usando a definição e as propriedades dos logaritmos, determine x em cada equação abaixo:

a) $\log_3^{(x-2)} = -1.$

b) $\log_x^{(3x)} = 2.$

$$c) \log_3^{(x-2)} + \log_3^{(x-4)} = \log_3^{135} + \log_3^5.$$

$$d) \log_{27}^x \times \log_9^x = \frac{2}{3}.$$

Solução:

a) A condição de existência: $x-2 > 0 \Leftrightarrow x > 2$, Aplicando a definição de logaritmo, temos:

$$x-2 = 3^{-1} \rightarrow x-2 = \frac{1}{3} \rightarrow x = \frac{1}{3} + 2 \rightarrow x = \frac{7}{3}$$

(Satisfaz a condição $x > 2$). Portanto, $x = \frac{7}{3}$.

b) A condição de existência: $\left\{ \begin{array}{l} 3x > 0 \\ e \\ 0 < x \neq 1 \end{array} \right\} \Leftrightarrow 0 < x \neq 1$. Aplicando a definição de logaritmo, temos:

$$x^2 = 3x \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} x = 0 \text{ (não satisfaz a condição } 0 < x \neq 1) \\ \text{ou} \\ x = 3 \text{ (satisfaz a condição } 0 < x \neq 1). \end{array} \right.$$

Portanto, $x = 3$.

c) A condição de existência: $\left\{ \begin{array}{l} x-2 > 0 \Leftrightarrow x > 2 \\ e \\ x+4 > 0 \Leftrightarrow x > -4 \end{array} \right\} \Leftrightarrow x > 2$. Aplicando a definição de logaritmo, temos:

$$\log_3^{(x-2)} + \log_3^{(x+4)} = \log_3^{135} - \log_3^5$$

$$\log_3^{(x-2)(x+4)} = \log_3^{\frac{135}{5}} \quad \rightarrow$$

$$(x-2)(x+4) = \frac{135}{5} \rightarrow \boxed{x^2 + 2x - 35 = 0}$$

$$\begin{cases} x = -7 \text{ (não satisfaz a condição } x > 2). \\ \text{ou} \\ x = 5 \text{ (satisfaz a condição } x > 2). \end{cases}$$

Portanto, $x = 5$.

d) A condição de existência: $x > 0$. Mudando as bases dos logaritmos para a base 3, temos:

$$\log_{27}^x \times \log_9^x = \frac{2}{3} \rightarrow \frac{\log_3^x}{\log_3^{27}} \times$$

$$\log_{27} x - \log_9 x = \frac{2}{3} \rightarrow \frac{\log_3 x}{\log_3 27} \cdot \frac{\log_3 x}{\log_3 9} = \frac{2}{3} \rightarrow \frac{(\log_3 x)^2}{\log_3 3^3 \cdot \log_3 3^2} = \frac{2}{3} \rightarrow \frac{(\log_3 x)^2}{3 \cdot 2} = \frac{2}{3} \rightarrow$$

$$= \frac{2}{3} \rightarrow$$

$$(\log_3 x)^2 = 4 \rightarrow \log_3 x = \pm 2 \rightarrow \begin{cases} x = 3^2 \rightarrow x = 9 \\ \text{ou} \\ x = 3^{-2} \rightarrow x = \frac{1}{9} \end{cases} \text{ ambos satisfazem a}$$

condição $x > 0$

Exemplo 02.

Como achar o valor da incógnita t na equação $3 = 5^t$?

Solução:

Vamos aplicar logaritmo, na base dez, nos dois membros da equação

$$\log^3 = \log^{5^t}$$

$$\log^3 = t \times \log^5$$

$$t = \frac{\log^3}{\log^5} = \frac{0,47712}{0,69897} \rightarrow t \cong 0,6826$$

Agora, em vez de usarmos a base dez, vamos usar a base neperiana de logaritmos (e)

$$\ln^3 = \ln^{5^t}$$

$$\ln^3 = t \times \ln^5$$

$$t = \frac{\ln^3}{\ln^5} = \frac{1,09861}{1,60943} \rightarrow t \cong 0,6862$$

Conclusão: a resposta será a mesma, qualquer que seja a base utilizada!

Exemplo 03.

Como isolar uma incógnita exponencial em uma equação?

Vamos isolar a variável t na seguinte equação $y(t) = (y_0 - T)e^{-kt} + T$.

Solução:

Observe que a base é a neperiana (e) $y(t) - T = (y_0 - T)e^{-kt} \rightarrow y(t) - T = \frac{y_0 - T}{e^{kt}}$

$$\rightarrow e^{kt} = \frac{y_0 - T}{y(t) - T} \rightarrow \ln e^{kt} = \ln \frac{y_0 - T}{y(t) - T}$$

Usando a propriedade de potência no lado esquerdo da equação e como $\ln e = 1$, vem:

$$\rightarrow kt \cdot \ln e = \ln \frac{y_0 - T}{y(t) - T} \rightarrow t = \frac{1}{k} \cdot \ln \frac{y_0 - T}{y(t) - T}$$

Exemplo 04.

Resolver as equações:

a) $2^x = 5$.

b) $5^{x+1} - 5^x = 2^{x+3} - 2^x$.

Solução:

a) $2^x = 5$. Como $2^x > 0$ e $5 > 0$, podemos aplicar logaritmo numa base qualquer a ($0 < a \neq 1$) aos dois membros:

$$\log_a 2^x = \log_a 5 \rightarrow x \cdot \log_a 2 = \log_a 5 \rightarrow x = \frac{\log_a 5}{\log_a 2} \rightarrow x = \log_2 5.$$

b) $5^{x+1} - 5^x = 2^{x+3} - 2^x$. Colocando em evidência 5^x no 1º membro e 2^x no 2º membro temos,

$$5^x(5 - 1) = 2^x(2^3 - 1) \rightarrow \frac{5^x}{2^x} = \frac{7}{4} \rightarrow \left(\frac{5}{2}\right)^x = \frac{7}{4}$$

Usando a definição de logaritmo, encontramos $x = \log_{\frac{5}{2}} \frac{7}{4}$.

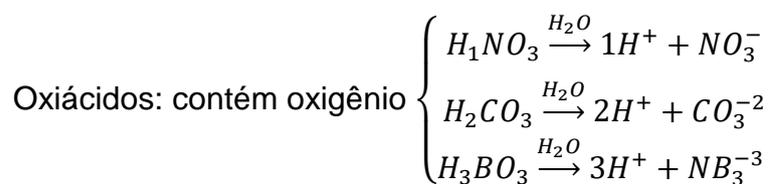
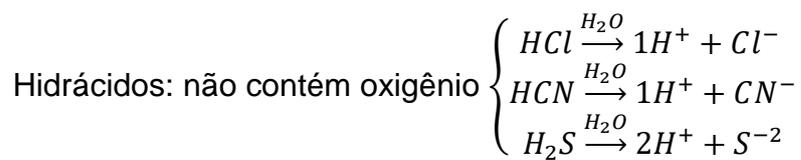
3.2 Aplicação dos logaritmos na Química.

3.2.1 Potência Hidrogênio Iônico (pH) ou Potencial Hidroxiliônico (pOH).

O cálculo da acidez ou basicidade de uma substância conhecida como pH (Potência de Hidrogênio Iônico) ou pOH (potencial Hidroxiliônico) é feito através de um cálculo logaritmo. Para entendermos esse cálculo, vamos inicialmente entender o que é uma substância ácida e uma substância básica.

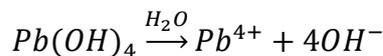
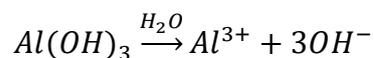
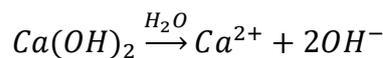
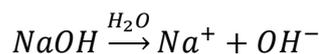
- **Substância ácida:** é aquela que em água ioniza liberando H^+ . Isso significa que o Hidrogênio perde seu elétron.

Exemplos:



- **Substância básica:** é aquela que em água dissocia liberando OH^{-1} (Hidroxila). Isso significa que a Hidroxila ganha elétron.

Exemplos:



Depois de definidas substâncias ácidas e básicas, podemos definir potencial hidrogênio iônico. Esse potencial refere-se à concentração (quantidade) de cátions hidrônios (H^+ ou H_3O^+) presentes no meio e indica se esse meio é ácido, básico ou neutro.

- **Meio Ácido:** quantidade de íons hidrônicos (H^+) maior que a quantidade de íons hidróxidos.

- **Meio Neutro:** quantidade de íons H^+ igual à quantidade de íons H_3O^- .

- **Meio Básico:** quantidade de íons H^+ menor que a quantidade de íons H_3O^- .

Essa quantidade de H^+ ou H_3O^+ seria calculada através de uma expressão logarítmica como veremos a seguir.

Iniciaremos com a dissociação da água:



A 25°C, apenas 2 em cada 10^9 molécula de água sofre ionização.

Podemos calcular a constante de equilíbrio da água pela fórmula: $K_{eq} = \frac{[H^+].[OH^-]}{[H_2O]}$ que será melhor discutida no capítulo 3. Na água pura, a concentração de H_2O ($[H_2O]$) é de 55,5 M(molar). Substituindo na fórmula acima, temos:

$$K_{eq} = \frac{[H^+].[OH^-]}{55,5} \rightarrow \frac{55,5.K_{eq}}{K_w} = [H^+].[OH^-] \quad (I)$$

$K_w = [H^+].[OH^-]$ que é o produto iônico a água à 25°C. A constante de equilíbrio também pode ser calculada através da condutividade elétrica da água que é $1,8 \cdot 10^{-16} M$ a 25°C. Substituindo K_{eq} por esse valor da equação, temos:

$55,5 \times 1,8 \cdot 10^{-16} m = [H^+].[OH^-] = K_w \rightarrow K_w = 99,9 \cdot 10^{-16} \rightarrow K_w = 100 \cdot 10^{-16} \rightarrow K_w = 10^{-14}$. Logo, $K_w = [H^+].[OH^-] = 10^{-14}$. Como o meio está em equilíbrio, $[H^+] = [OH^-]$ logo, $[H^+].[H^+] = 10^{-14} \rightarrow [H^+]^2 = 10^{-14} \rightarrow [H^+] = \sqrt{10^{-14}}$. Portanto, $[H^+] = 10^{-7} M = [OH^-]$ para água neutra.

Quando há aumento da concentração de H^+ , a concentração de OH^- diminui, e vice-versa para manter o equilíbrio. Como essa notação é muito pequena, para melhor compreensão, o produto foi transformado em pH (-log da concentração de H^+), ou seja, $[H^+] = [OH^-] = 10^{-7} M$ substituindo temos, $pH = -\log[H^+] \rightarrow pH = -\log 10^{-7} \rightarrow pH = 7 = pOH$ água neutra. Quando o pH cai, a concentração de íons H^+ sobe e OH^- cai, quando pH sobe, a concentração de H^+ cai e OH sobe. Portanto,

- pH < 7 solução ácida
- pH = 7 solução neutra
- pH > 7 solução básica

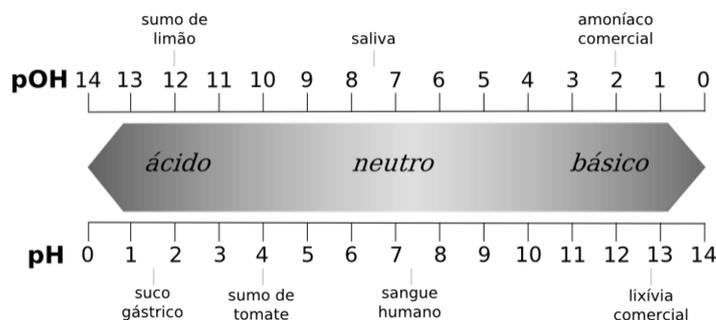


Figura 4 – Escala de pH

Fonte: https://pt.wikibooks.org/wiki/Bioqu%C3%ADmica/pH,_pKa_e_solu%C3%A7%C3%B5es_tamp%C3%A3o

Exercício 01.

Os sistemas químicos baseiam-se em algumas características. Os sistemas ácidos caracterizam-se pela liberação de íon hidrônio, $H_3O^+_{(aq)}$. Os sistemas básicos baseiam-se na liberação de íon hidroxila, $OH^-_{(aq)}$. A tabela a seguir mostra a característica de alguns sistemas.

Sistema	$[H_3O^+]$ mol/L
Vinagre	10^{-3}
Saliva	10^{-6}
Clara de ovo	10^{-8}

Tabela 2 - Tabela em exercício de pH

Considerando os sistemas citados, 100% ionizados, julgue os itens abaixo.

Todos os sistemas são formados por substâncias ácidas.

1. O pOH da saliva é igual a 6.
2. O vinagre é mais ácido que a clara de ovo.
3. O pH do vinagre é igual a 3.
4. Acrescentando uma gota de vinagre a uma gota de saliva, a solução se tornará neutra.

Solução:

0. Falso. Vamos calcular o pH de cada sistema:

Vinagre:	Saliva:	Clara de ovo:
$pH = -\log [10^{-3}]$	$pH = -\log [10^{-6}]$	$pH = -\log [10^{-8}]$
$pH = -(-3)$	$pH = -(-6)$	$pH = -(-8)$
$pH = 3$	$pH = 6$	$pH = 8$

Portanto, a clara de ovo forma um sistema básico.

1. Falso.

$$pH + pOH = 14$$

$$pOH = 14 - pH$$

$$pOH = 14 - 6$$

$$pOH = 8$$

2. Verdadeiro.

3. Verdadeiro.

4. Falso. Acrescentando uma gota de vinagre a uma gota de saliva, a solução torna-se ainda mais ácida.

Exercício 02.

A concentração hidrogeniônica do suco de limão puro é 10^{-3} mol/L. Qual o pH de um refresco preparado com 20 mL de suco de limão e água suficiente para completar 200 mL? [UFPE]

a) 2,5

b) 3,0

c) 3,5

d) 4,0

e) 4,5

Solução:

Alternativa d.

A concentração inicial era de 10^{-3} mol/L ou 0,01 mol/L

Antes da diluição:

$$10^{-3} \text{ mol} \longrightarrow 1000 \text{ mL}$$

$$x \longrightarrow 20 \text{ mL}$$

$$x = 2 \times 10^{-5} \text{ mol}$$

Depois da diluição:

$$2 \times 10^{-5} \text{ mol} \longrightarrow 200 \text{ mL}$$

$$y \longrightarrow 1000 \text{ mL}$$

$$y = 10^{-4} \text{ mol}$$

$$pH = -\log[H_3O^+]$$

$$pH = -\log[10^{-4}]$$

$$pH = -(-4)$$

$$pH = 4$$

Exercício 03.

Considere uma solução 0,01 mol . L⁻¹ de um monoácido forte genérico HA e indique a alternativa correta.

- a) O pH é igual a 1.
- b) O pH é menor que 1.
- c) O pH é maior que 1.
- d) [HA] é muito maior que [A⁻].
- e) [A⁻] = 0,1 mol . L⁻¹.

Solução

Alternativa c.

$$0,01 \text{ mol L}^{-1} = 10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$$

$$10^{-2} \text{ mol de } H_3O^{1+} \text{ -----} 1000 \text{ mL}$$

$$pH = -\log[H_3O^+]$$

$$pH = -\log[10^{-2}]$$

$$pH = -(-2)$$

$$pH = 2$$

3.3 Sistemas lineares

Chamamos de **equação linear** toda equação do tipo $a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + \dots + a_nx_n = c$. Um sistema linear é um conjunto de duas ou mais equações lineares e podemos representá-lo da forma

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n = c_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n = c_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \dots + a_{3n}x_n = c_3 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + a_{m3}x_3 + \dots + a_{mn}x_n = c_m \end{cases}$$

Ou em forma de produto de matrizes

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \cdot \\ c_m \end{bmatrix}$$

3.3.1. Resolução e discussão de sistemas lineares

Em relação ao Ensino Médio, abordaremos resolução dos sistemas com máximo de três equações e três variáveis, fazendo uma discussão dos resultados encontrados. Utilizaremos o método da adição, uma vez que ele é prático e de mais fácil compreensão. Dividiremos em três tipos: número de equações iguais ao número de

variáveis, número de equações menor que o número de variáveis e número de equações maior que o número de variáveis. Na resolução, encontraremos sempre três resultados possíveis:

- o sistema será possível e determinado (SPD),
- uma única solução; possível e indeterminado (SPI),
- infinitas soluções ou impossível (SI), sem solução.

Vamos aos casos:

*Nº de equações = nº de variáveis.

Exemplo 01.

Classificar e dar o conjunto solução de cada um dos sistemas abaixo:

$$a) \begin{cases} x + 3y - 2z = 3 \\ 2x + 8y - 3z = 5 \\ 3x + y + z = 2 \end{cases}$$

$$b) \begin{cases} x + 2y - z = 2 \\ 4x + 9y = 1 \\ 5x + 11y - z = 3 \end{cases}$$

$$c) \begin{cases} 3x + 2y + z = 2 \\ 2x + y + 2z = -1 \\ 8x + 5y + 4z = 1 \end{cases}$$

Solução:

Como mencionado anteriormente, utilizaremos o método da adição, que consiste em reduzir o sistema de três equações e três variáveis para um sistema de duas equações e duas variáveis, chamado escalonamento, simplificando assim a solução.

$$a) \begin{cases} x + 3y - 2z = 3 \text{ (I)} \\ 2x + 8y - 3z = 5 \text{ (II)} \\ 3x + y + z = 2 \text{ (III)} \end{cases}$$

Iniciaremos zerando (escalonando) os coeficientes de x das equações (II) e (III).

Para isso:

*Substituímos a equação (II) pela soma dela com a equação (I) multiplicada por -2.

$$(II) + (-2) \cdot (I) = 0 \cdot x + 2y + z = -1 \quad (IV)$$

*Substituímos a equação (III) pela soma dela com a equação (I) multiplicada por -3.

$$(III) + (-3) \cdot (I) = 0 \cdot x - 8y + 7z = -7 \quad (V)$$

Vamos agora resolver o sistema usando as equações (IV) e (V):

$$\begin{cases} 2y + z = -1 & (IV) \\ -8y + 7z = -7 & (V) \end{cases}$$

Façamos: $4 \cdot (IV) + (V) = 0 \cdot y + 11z = -11 \rightarrow z = -1$. Substituindo $z = -1$ em (IV):

$$2y - 1 = -1 \rightarrow 2y = 0 \rightarrow y = 0$$

Da equação (I) temos: $x + 3 \cdot 0 - 2(-1) = 3 \rightarrow x = 1$. Concluimos que o sistema dado é SPD, ou seja, tem uma única solução $S = \{(1, 0, -1)\}$.

$$b) \begin{cases} x + 2y - z = 2 & (I) \\ 4x + 9y = 1 & (II) \\ 5x + 11y - z = 3 & (III) \end{cases}$$

Observe que para chegarmos a um sistema de duas equações com duas variáveis, basta zerarmos o coeficiente de z da equação (I) ou (III). Vamos zerar o coeficiente de z da equação (III) substituindo-a por sua soma com a equação (I) multiplicando por -1.

$$(III) + (-1) \cdot (I) = 4x + 9y + 0 \cdot z = 1 \quad (IV)$$

Resolvendo o sistema com as equações (II) e (IV), encontramos uma resposta interessante. Veja:

$$\begin{cases} 4x + 9y = 1 & (II) \\ 4x + 9y = 1 & (IV) \end{cases}$$

Façamos: $(-1) \cdot (II) + (IV) = 0 \cdot x + 0 \cdot y = 0 \rightarrow 0 = 0$. Logo, a equação (II)=(IV) e a solução se resume em resolver o sistema abaixo que deverá ter infinitas soluções:

$$\begin{cases} x + 2y - z = 2 & (I) \\ 4x + 9y = 1 & (II = IV) \end{cases}$$

De (II) temos: $x = \frac{1-9y}{4} + 2y - z = 2 \rightarrow 1 - 9y + 8y - 4z = 8 \rightarrow z = \frac{-y-7}{4}$. Logo,

$$S = \left\{ \left(\frac{1-9y}{4}, 1, \frac{-y-7}{4} \right) \right\} \forall y \in \mathbb{R}.$$

Logo, o sistema é SPI, ou seja, tem infinitas soluções.

$$c) \begin{cases} 3x + 2y + z = 2 \text{ (I)} \\ 2x + y + 2z = -1 \text{ (II)} \\ 8x + 5y + 4z = 1 \text{ (III)} \end{cases}$$

Processo análogo ao item (b):

*Substituímos a equação (II) por: $2 \cdot (I) + (-3) \cdot II = 0 \cdot x + y - 4z = 7$.

*Substituímos a equação (III) por: $8 \cdot (I) + (-3) \cdot (III) = 0 \cdot x + y - 4z = 13$.

$$\text{Temos: } \begin{cases} y - 4z = 7 \\ y - 4z = 13 \end{cases}$$

Fazendo (IV) - (V) encontramos $0 = 5$ (absurdo!). Isso mostra que o sistema é S.I, ou seja, impossível já que não existem y e z que satisfaçam (IV) e (V) ao mesmo tempo. Portanto, o conjunto solução desse sistema é $S = \emptyset$.

*Nº de equações < nº de variáveis

$$\text{Veja a solução do sistema: } \begin{cases} x + 2y - z = 2 \\ 4x + 9y = 1 \end{cases}$$

No final do item (b) do exemplo 01. Para resolver esse sistema, expressamos sua solução em função de uma variável. Nesse caso, exibimos x, y e z em função de y :

$S = \left\{ \left(\frac{1-9y}{4}, y, \frac{-y-7}{4} \right) \right\}$. Enfatizando que o sistema é SPI, porque cada valor atribuído a y gera uma solução do sistema.

*Nº de equações > nº de variáveis

Exemplo 02:

$$\text{Classificar e dar o conjunto solução do sistema: } \begin{cases} x + 3y = 4 \\ 2x - y = 1 \\ 3x - 5y = -2 \end{cases}$$

Solução:

$$\begin{cases} x + 3y = 4 \text{ (I)} \\ 2x - y = 1 \text{ (II)} \\ 3x - 5y = -2 \text{ (III)} \end{cases}$$

Nesse caso, resolveremos o sistema utilizando o número de equações conveniente, ou seja, basta tomarmos duas orações, por exemplo, a (I) e (II).

$$\begin{cases} x + 3y = 4 \text{ (I)} \\ 2x - y = 1 \text{ (II)} \end{cases}$$

Fazendo: $(-2)(I) + II = 0$. $x - 7y = -7 \rightarrow y = 1$ e $x + 3.1 = 4 \rightarrow x = 1$.

Substituímos os valores encontrados na equação (III):

$3.1 - 5.1 = -2 \rightarrow -2 = -2$, observamos que ela é satisfeita. Logo, o sistema é SPD e seu conjunto solução é $S = \{(1,1)\}$. Caso a 3ª equação não fosse satisfeita, o conjunto solução seria vazio e o sistema seria S.I.

3.4 Aplicação de sistemas lineares na Química

No Ensino Médio, podemos trabalhar esse tema de forma interdisciplinar, fazendo uma modelagem matemática para o Balanceamento das Equações Químicas.

3.4.1 Balanceamento das Equações Químicas

3.4.1.1 Método Algébrico

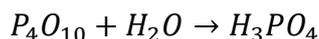
Balancear uma equação química é igualar o número total de átomos de cada elemento, no 1º e no 2º membros da equação. Vamos mostrar como isso pode ser feito nas aplicações a seguir.

Exemplo 01.

Determine as relações molares presentes na reação entre o decaóxido de tetrafósforo (P_4O_{10}) e a água (H_2O) que tem como produto o ácido fosfórico (H_3PO_4).

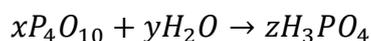
Solução:

O que queremos, na verdade, é fazer o balanceamento da seguinte reação



Começaremos escolhendo as variáveis de cada um dos coeficientes do reagente e do produto.

Usaremos x, y e z para representar as quantidades, em mols, de P_4O_{10}, H_2O e H_3PO_4 , respectivamente, ou seja:



Os três átomos presentes nessa reação são fósforo (P), oxigênio (O) e hidrogênio (H). Para cada um deles, teremos uma equação que representa a preservação de sua quantidade total.

1º Preservação da quantidade de Fósforo.

$$x \cdot 4 = z \cdot 1 \rightarrow 4x - z = 0 \quad (I)$$

2º Preservação da quantidade de Oxigênio.

$$x \cdot 10 + y \cdot 1 = z \cdot 4 \rightarrow 10x + y - 4z = 0 \quad (II)$$

3º Preservação da quantidade de Hidrogênio.

$$y \cdot 2 = z \cdot 3 \rightarrow 2y - 3z = 0$$

Montando o sistema linear com as equações (I), (II) e (III):

$$\begin{cases} 4x - z = 0 \quad (I) \\ 10x + y - 4z = 0 \quad (II) \\ 2y - 3z = 0 \quad (III) \end{cases}$$

Vamos resolver o sistema usando o método visto no tópico (3.3). Utilizando as equações (I) e (III) já que existem coeficientes zerados, temos:

$$\begin{cases} 4x - z = 0 \quad (I) \rightarrow z = 4x \quad (IV) \text{ substituindo em (III) temos} \\ 2y - 3z = 0 \quad (III) \rightarrow 2y - 3 \cdot 4x = 0 \rightarrow y = 6x. \end{cases}$$

Logo, $S = \{(x, 6x, 4x)\}$, ou seja, infinitas soluções.

Se $x = 0$ temos $S = \{(0,0,0)\}$ chamada solução trivial que é quimicamente desinteressante.

Se $x = 1$ temos $S = \{(1,6,4)\}$, evitamos frações no coeficiente da reação e a reação química fica: $1P_4O_{10} + 6H_2O \rightarrow 4H_3PO_4$.

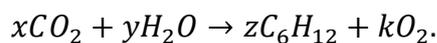
Exemplo 02.

Faça o balanceamento da equação química para cada reação.

- a) $CO_2 + H_2O \rightarrow C_6H_{12}O_2 + O_2$ (Essa reação ocorre quando uma planta verde converte dióxido de carbono e água em glicose e oxigênio durante a fotossíntese.)
- b) $C_4H_{10} + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$ (Essa reação acontece quando o gás butano, C_4H_{10} , queima na presença de oxigênio para formar dióxido de carbono e água.)
- c) $C_5H_{11}OH + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$ (Essa reação representa a combustão do álcool pentanol.)

Solução:

- a) $CO_2 + H_2O \rightarrow C_6H_{12}O_2 + O_2$. Escolhendo as variáveis x, y, z e k para representarmos os coeficientes de $CO_2, H_2O, C_6H_{12}O_2$ e O_2 respectivamente temos:



Os átomos presentes são C, H e O montarem as equações para cada um deles.

Carbono C $\rightarrow x \cdot 1 = z \cdot 6$

Hidrogênio H $\rightarrow y \cdot 2 = z \cdot 12$

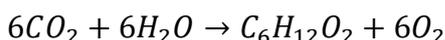
Oxigênio O $\rightarrow x \cdot 2 + y \cdot 1 = z \cdot 6 + k \cdot 2$.

Temos agora que resolver o sistema:

$$\begin{cases} x = 6z \\ 2y = 12z \\ 2x + y = 6z + 2k \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x = 6z \text{ (I)} \\ y = 6z \text{ (II)} \\ 2x + y = 6z + 2k \text{ (III)} \end{cases}$$

Substituindo I e II em III e isolando k fica:

$2 \cdot 6z + 6z = 6z + 2k \rightarrow 12z + 6z - 6z = 2k \rightarrow k = 6z$. Logo, a solução do sistema é $S = \{(6z, 6z, z, 6z)\}$: SPI se $z=0$ encontramos $S = \{(0,0,0)\}$ que quimicamente não nos interessa. Se $z=1$ encontramos $S = \{(6,6,1,6)\}$ que nos dá os menores números naturais que satisfazem o sistema, tornando os coeficientes da reação não fracionários. Portanto, a reação química é:



- b) $C_4H_{10} + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$ x, y, z e k são as variáveis representativas dos coeficientes de C_4H_{10}, O_2, CO_2 e H_2O , respectivamente. $x C_4H_{10} + y O_2 \rightarrow z CO_2 + k H_2O$.

Para cada átomo, temos:

Carbono C $\rightarrow x \cdot 4 = z \cdot 1$

Hidrogênio H $\rightarrow x \cdot 10 = k \cdot 2$

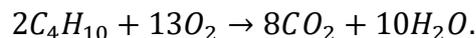
Oxigênio O $\rightarrow y \cdot 2 = z \cdot 2 + k \cdot 1$

Temos o seguinte sistema a ser resolvido:

$$\begin{cases} 4x = z \\ 10x = 2k \\ 2y = 2z + k \end{cases} \rightarrow \begin{cases} 4x = z \text{ (I)} \\ 5x = k \text{ (II)} \\ 2y = 2z + k \text{ (III)} \end{cases}$$

Substituindo I e II em III fica:

$2y = 2 \cdot 4x + 5x \rightarrow y = \frac{13x}{2}$. Portanto, o sistema é SPI e sua solução é $S = \left\{ \left(x, \frac{13x}{2}, 4x, 5x \right) \right\}$. O menor número natural que torna os coeficientes inteiros é $x=2$. Logo, uma solução $S = \{(2,13,8,10)\}$ e a equação balanceada é



c) $C_5H_{11}OH + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$. Chamando os coeficientes de x, y, z e k temos:

$x C_5H_{11}OH + y O_2 \rightarrow z CO_2 + k H_2O$. A quantidade de átomos de cada elemento é

Carbono C $\rightarrow x \cdot 5 = z \cdot 1$

Hidrogênio H $\rightarrow x \cdot 11 + x \cdot 1 = k \cdot 2$

Oxigênio O $\rightarrow x \cdot 1 + y \cdot 2 = z \cdot 2 + k \cdot 1$

Temos o seguinte sistema:

$$\begin{cases} 5x = z \\ 12x = 2k \\ x + 2y = 2z + k \end{cases} \rightarrow \begin{cases} 5x = z \text{ (I)} \\ 6x = k \text{ (II)} \\ x + 2y = 2z + k \text{ (III)} \end{cases}$$

Substituindo (I) e (II) em (III) fica:

$$x + 2y = 2.5x + 6x \rightarrow 2y = 15x \rightarrow y = \frac{15x}{2}.$$

O conjunto solução é $S = \left\{ \left(x, \frac{15x}{2}, 5x, 6x \right) \right\}$. E o menor x natural que torna os coeficientes também naturais é $x=2$. Portanto, $x = 2, y = 15, z = 10$ e $k = 12$. Logo, a equação balanceada é $2C_5H_{11}OH + 15O_2 \rightarrow 10CO_2 + 12H_2O$

4 MATEMÁTICA DO ENSINO SUPERIOR APLICADA À QUÍMICA.

4.1 Derivada aplicada à química

4.1.1 Conceito de derivada

Para entender melhor o conceito de derivada devemos entender primeiramente o que é razão de variação ou taxa de variação média ou de uma função já que a derivada é nada mais nada menos do que uma taxa de variação.

4.1.2 Taxa de variação média (TVM)

No nosso dia a dia sabemos que as grandezas são variáveis. Pensamos muitas vezes em variação de grandezas, como por exemplo, o quanto gastamos de combustível no último mês, a que velocidade devemos andar para não chegar atrasado no trabalho, quanto devemos emagrecer por dia para adquirir um determinado peso daqui 60 dias, e assim por diante.

De um modo geral, quando uma grandeza y está expressa em função de uma outra grandeza x , que pode ser escrita da forma.

$y = f(x)$, observa-se que, para cada variação de x , de x_1 para x_2 , que denotaremos por $\Delta x = x_2 - x_1$ ocorre uma correspondência de y variando de y_1 para y_2 , expressa por $\Delta y = y_2 - y_1$ ou $\Delta y = f(x_2) - f(x_1)$.

Para medir a maior ou menor rapidez com que uma grandeza y varia em função de outra grandeza x , num intervalo fechado $[x_2, x_1]$ recorreremos a seguinte razão:

$$\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \text{ ou } \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

chamada de Taxa de Variação Média (TVM) de y em função de x , ou seja,

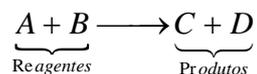
$$TVM_{[x_1, x_2]} = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

Vamos tomar como exemplo, para melhor esclarecimento de taxa de variação média, a função deslocamento $d(t) = t^2 + 1$ onde t representa o tempo, em segundos, e d o deslocamento de uma partícula, em metros. Analisando a posição da partícula no intervalo de tempo $[t_1, t_2] = [2, 3]$ temos:

$d(t_1) = d(2) = 2^2 + 1 = 5m$ e $d(t_2) = d(3) = 3^2 + 1 = 10m$, ou seja, em 2 segundos a partícula se encontrava na posição 5 m e, já no tempo 3 segundo a partícula se encontrava na posição 10 m. A razão $\frac{\Delta d}{\Delta t} = \frac{10 - 5}{3 - 2} = 5m/s$ nos fornece a taxa de variação média do deslocamento em função do tempo conhecida, na física, como velocidade média da partícula onde, concluímos que, a cada segundo a posição da partícula se desloca 5 m. Este conceito pode ser usado em outras disciplinas inclusive na química, como mostraremos a seguir.

4.2 Aplicação de taxa de variação na cinética química

Cinética química é um conjunto de fenômenos nos quais duas ou mais substâncias reagem entre si, sendo chamadas de reagentes, dando origem a diferentes compostos, denominados produtos. A equação química é a forma gráfica de uma reação química sendo simplificada pela forma:



Uma determinada reação química ocorre sempre da mesma maneira, os reagentes são consumidos ou gastos à medida que são formados os produtos.

A velocidade de uma reação química é o tempo gasto para que uma quantidade de reagentes seja consumida ou o tempo gasto para que os produtos sejam formados.

A figura 5 representa a quantidade de reagentes e produtos de uma reação ao longo do tempo.

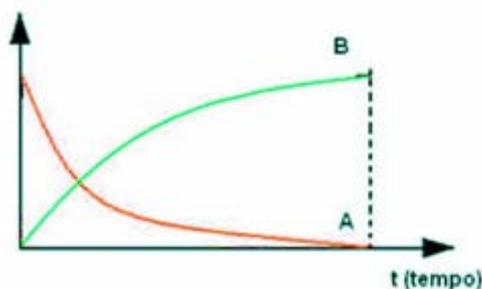


Figura 5 – Cinética química
Fonte: Marco (2016)

Conforme se pode ver, no início da reação a quantidade de reagente, curva A, é máxima, onde a quantidade de substância diminui com o transcorrer do tempo, decrescente. O processo inverso ocorre com o produto, curva B, que inicialmente tem uma quantidade zero, pois ainda não começou a ser formado. Mas quando o reagente começa a reagir, a quantidade do produto começa a aumentar gradativamente no decorrer do tempo, até que, no final da reação torna-se máxima.

Na química a quantidade de reagentes ou de produtos chamamos de concentração e é representada por colchetes com a fórmula da substância dentro []. Essa concentração pode ser medida em massa, número de mol, porcentagem, mol/L ou qualquer outra unidade que dê a ideia de quantidade.

Exemplo 1:

Observando os dados da tabela abaixo, determine a velocidade média da reação química $N_{2(g)} + 3H_{2(g)} \longrightarrow 2NH_{3(g)}$ já devidamente balanceada, no intervalo de 0 a 4 segundo.

Nº mols/L de N ₂	Tempo (min)
10	0
6	2
4	4

Tabela 3 – Número de mols

Solução:

No tempo inicial ($t = 0$) temos 10 mols de N_2 reagindo com o H_2 . Após 2 minutos a quantidade de N_2 caiu para 6 mols e mais 2 minutos passou para 4 mols. Como N_2 é o reagente sua quantidade diminui com o passar do tempo. A velocidade média da reação será calculada usando a definição de taxa média de variação para o N_2 , ou seja,

$$Vm = -\frac{\Delta[N_2]}{\Delta t} = -\frac{\text{Variação da quantidade de } N_2}{\text{Variação de tempo}}$$

$$Vm = -\frac{[N_2]_{final} - [N_2]_{inicial}}{t_{final} - t_{inicial}} = -\frac{4 - 10}{4 - 0} = 1,5 \text{ mol / min}$$

O sinal negativo significa que a velocidade média foi calculada em função um reagente, no caso N_2 , que tem sua quantidade final diminuída em relação a quantidade inicial.

Ainda nesse problema podemos calcular a velocidade média de reação em função de qualquer um dos participantes, mesmo que nós não tenhamos dados na tabela em relação ao H_2 e o NH_3 usando a proporcionalidade entre os coeficientes já visto anteriormente.

Na reação: $N_{2(g)} + 3H_{2(g)} \longrightarrow 2NH_{3(g)}$ 1 mol de N_2 reage com 3 mols de H_2 resultando 2 mols de NH_3 . No tempo que é consumido 1 mol de N_2 são consumidos 3 mols de H_2 , então, a velocidade de consumo do H_2 é três vezes a velocidade média de consumo do N_2 , e no tempo que são consumidos 1 mol de

N_2 são produzidos 2 mols de NH_3 sendo, portanto, a velocidade média do NH_3 duas vezes a velocidade do N_2 . Logo,

$$|Vm_{H_2}| = 3|Vm_{N_2}| \Rightarrow |Vm_{H_2}| = 3|-1,5| \Rightarrow \boxed{|Vm_{H_2}| = 4,5 \text{ mol} / L \cdot \text{min}}$$

$$|Vm_{NH_3}| = 2|Vm_{N_2}| \Rightarrow |Vm_{NH_3}| = 2|-1,5| \Rightarrow \boxed{|Vm_{NH_3}| = 3,0 \text{ mol} / L \cdot \text{min}}$$

Nota-se que foi utilizado módulo. Isto facilita os cálculos pois nos possibilita calcular qualquer uma substância em função de outra, não deixando de lembrar que os reagentes têm velocidades médias negativas e os produtos velocidades médias positivas. Os sinais positivos e negativos sendo dispensados a proporcionalidade não se altera.

Exemplo 2:

Observe o gráfico abaixo obtido através de dados experimentais, representando a decomposição da água oxigenada (H_2O_2) produzindo água (H_2O) e gás oxigênio (O_2), de acordo com a equação:

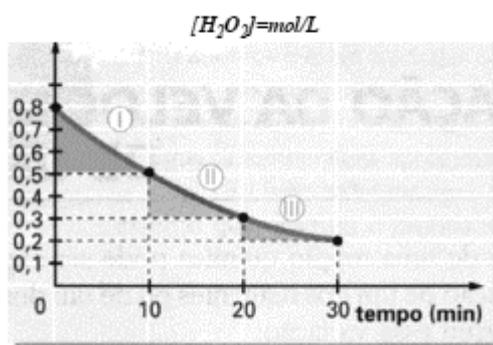
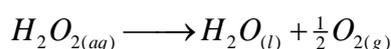


Figura 6 – Decomposição da H_2O_2 .
Fonte: Marco 2016

Determine a velocidade média nas etapas I, II e III presentes nessa reação.

Solução:

Vamos usar como referência a água oxigenada H_2O_2 e os pontos finais e iniciais de cada etapa.

$$I) \quad V_{m(I)} = \frac{|\Delta[H_2O_2]|}{\Delta t} = \frac{|0,5 - 0,8|}{10 - 0} = \frac{|-0,3|}{10} = 0,03 \text{ mol} / L \cdot \text{min}$$

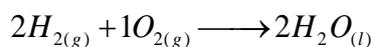
$$II) \quad V_{m(II)} = \frac{|\Delta[H_2O_2]|}{\Delta t} = \frac{|0,3 - 0,5|}{10 - 0} = \frac{|-0,2|}{10} = 0,02 \text{ mol} / L \cdot \text{min}$$

$$III) \quad V_{m(III)} = \frac{|\Delta[H_2O_2]|}{\Delta t} = \frac{|0,3 - 0,2|}{10 - 0} = \frac{|-0,1|}{10} = 0,01 \text{ mol} / L \cdot \text{min}$$

Exemplo 3:

Na reação de combustão $2H_{2(g)} + 1O_{2(g)} \longrightarrow 2H_2O_{(l)}$ tem-se 10 mols de H_2 reagindo com 10 mols de O_2 inicialmente. Após 4 segundos todo hidrogênio foi consumido restando 5 mols oxigênio e 10 mols de água. Determine a velocidade média dessa reação nos 4 primeiros segundos.

Solução:



Tempo (s)	$2H_2(g)$ (mol/L)	$1O_2(g)$ (mol/L)	$2H_2O(l)$ (mol/L)
Início 0	10	10	0
Final 4	0	5	10

Tabela 4 – Variação da concentração em relação ao tempo.

Tomando como referência o reagente H_2 temos:

$$Vm_{(H_2)} = \frac{|\Delta[H_2]|}{\Delta t} = \frac{|[(H_2)_f - (H_2)_i]|}{t_f - t_i} = \frac{|10 - 0|}{4 - 0} = 2,5 \text{ mol / L.s}$$

Sendo os coeficientes dos reagentes, 2 e 1, proporcionais as velocidades de reação de cada um concluímos que o tempo para consumir 2 mols de H_2 é o dobro para consumir 1 mol de O_2 logo, a velocidade média do hidrogênio é o dobro da velocidade média do oxigênio, isto é,

$$\frac{1}{2} |Vm_{(H_2)}| = |Vm_{(O_2)}| \Rightarrow \frac{1}{2} \times 2,5 = |Vm_{(O_2)}| \Rightarrow \boxed{|Vm_{(O_2)}| = 1,25 \text{ mol / L.s}}$$

Já a proporcionalidade dos coeficientes de H_2 e do H_2O é de 2 para 2. Portando as velocidades médias são iguais, ou seja,

$$\frac{1}{2} |Vm_{(H_2)}| = \frac{1}{2} |Vm_{(H_2O)}| \Rightarrow \boxed{|Vm_{(H_2O)}| = 2,5 \text{ mol / L.s}}$$

4.2.1 Derivada

Imaginemos uma reta $s = \overline{PQ}$ secante ao gráfico de uma função $f(x)$ (figura 7). Se P e Q são pontos quaisquer de $f(x)$ de abscissas respectivamente x_0 e x com $x_0 \neq x$, o coeficiente angular da reta é dado por :

$$m_s = (x_0, x) = \text{tg} \alpha_s = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

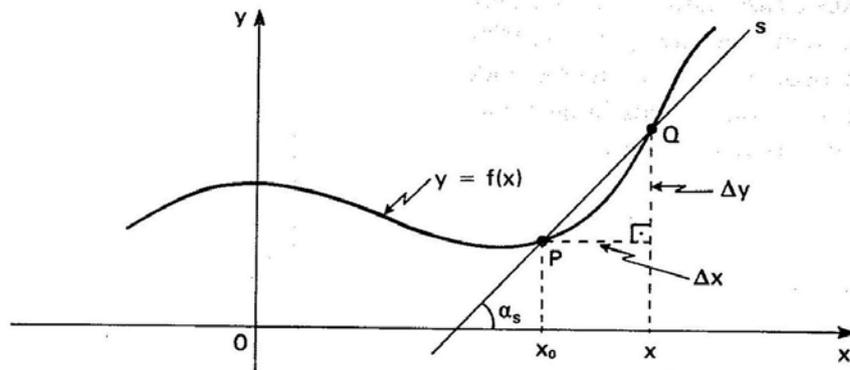


Figura 7 - Derivada

Fonte: *Matemática - temas e metas*

Fazendo x tender para x_0 (fig. 7), isto é, imaginando P fixo e Q movimentando-se sobre o gráfico, aproximando-se de P , observamos que a inclinação da reta secante tende a inclinação da reta tangente, isto é,

$$\alpha_s \longrightarrow \alpha_t(x_0)$$

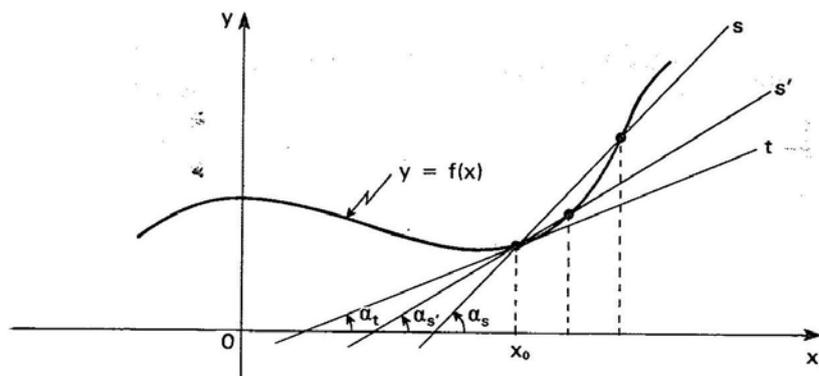


Figura 8 - Derivada

Fonte: *Matemática - temas e metas*

Neste caso, temos:

$$tg(\alpha_s) \longrightarrow tg\alpha_t(x_0)$$

$$m_s \longrightarrow m_t(x_0)$$

Portanto, podemos colocar:

$$m_t(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} m_s(x_0, x)$$

$$m_t(x) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

quando existe o limite finito.

Logo, dada uma função real $y = f(x)$, se existe e é finito, o limite de $\frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$

quando x tende a x_0 , ele é chamado de derivada de f ou Taxa de Variação Média instantânea, no ponto $x = x_0$. Indicamos a derivada por $f'(x)$. Assim definimos

$$f'(x) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

4.2.2 Principais propriedades operatórias de derivada

Se $f(x)$ e $g(x)$ são deriváveis com derivadas respectivamente iguais a $f'(x)$ e $g'(x)$ e c uma constante, então:

- i) $(c)' = 0$
- ii) $[c \times f(x)]' = c \times f'(x)$
- iii) $[(f(x))^n]' = n \times [f(x)]^{n-1} \times f'(x)$
- iv) $[f(x) + g(x)]' = f'(x) + g'(x)$
- v) $[f(x) - g(x)]' = f'(x) - g'(x)$
- vi) $[f(x) \times g(x)]' = f'(x) \times g(x) + f(x) \times g'(x)$
- vii) $[f(x) / g(x)]' = \frac{f'(x) \times g(x) - f(x) \times g'(x)}{g(x)^2}$
- viii) $[f(g(x))]' = f'(g(x)) \times g'(x)$

4.2.2.1 Regras de derivação

$$\text{i) } (e^{f(x)})' = e^{f(x)} \times f'(x)$$

$$\text{ii) } (\ln f(x))' = \frac{f'(x)}{f(x)}$$

$$\text{iii) } (a^{f(x)})' = a \times \ln a \times f'(x)$$

$$\text{iv) } (\log f(x))' = \frac{f'(x)}{f(x)} \times \ln a$$

4.2.2.2 Derivadas implícitas

Algumas funções $y = f(x)$ não se mostram com y completamente isolados de um dos lados da igualdade dizemos, então, que y é uma função implícita de x e, mesmo assim, podemos derivá-la sem que tenhamos necessidade de isolar o y . A esse procedimento chamamos de derivação implícita.

Exemplo: Se $2x^2 + y^2 = 3$, calcule a derivada $\frac{dy}{dx} = y'$.

Solução:

Vamos derivar $2x^2 + y^2 = 3$ (I) não esquecendo de usar a regra da cadeia temos,

$$4x + 2y \times y' = 0 \Rightarrow 2y \times y' = -4x \Rightarrow y' = \frac{-2x}{y} \quad \text{(II)}$$

Tirando o valor de y em (I),

$$y^2 = 3 - 2x^2 \Rightarrow y = \sqrt{3 - 2x^2} \quad \text{(III)}$$

Substituindo (III) em (II),

$$y' = \frac{x}{\sqrt{3-2x^2}} \text{ para } x < -\frac{\sqrt{6}}{2} \text{ ou } x > \frac{\sqrt{6}}{2} .$$

4.2.3 Aplicação de derivadas na química

4.2.3.1 Na cinética química: velocidade instantânea de uma reação química.

Vimos no tópico 3.2 que a velocidade média de uma reação química é o tempo gasto para que os reagentes sejam consumidos ou o tempo gasto para que os produtos sejam formados. Sabe-se também que a velocidade média da equação, da forma geral, $aA + bB \longrightarrow cC + dD$ é qualquer uma das quatro quantidades iguais seguintes:

$$V_m = -\frac{1}{a} \times \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \times \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \times \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \times \frac{\Delta[D]}{\Delta t}$$

A divisão pelos coeficientes leva em conta a relação de proporcionalidade entre as concentrações de reagentes e produtos e seus respectivos coeficientes (estequiometria). Como a velocidade das reações se processa a todo instante podemos calcular a velocidade num pequenino espaço de tempo, que chamaremos de velocidade instantânea, usando o conceito de derivada visto no tópico 3.2.1, ou seja,

$$V_{Inst.} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{a} \times \frac{\Delta[A]}{\Delta t} \right) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{b} \times \frac{\Delta[B]}{\Delta t} \right) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{c} \times \frac{\Delta[C]}{\Delta t} \right) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{d} \times \frac{\Delta[D]}{\Delta t} \right)$$

Que pode ser também representada da forma,

$$V_{Inst.} = -\frac{1}{a} \times \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \times \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \times \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \times \frac{d[D]}{dt}$$

sendo $d[A]$ e $d[B]$ as derivadas das concentrações dos reagentes e $d[C]$ e $d[D]$ as derivadas das concentrações dos produtos.

Exemplo 1:

Se uma molécula do produto C é produzida de uma molécula de reagente A e de uma molécula do reagente B, e as concentrações iniciais de A e B tem o mesmo valor $[A] = [B] = a$ mol/L então,

$$[C] = \frac{a^2 kt}{(akt + 1)}$$

onde k é constante.

- Encontre a taxa de reação no instante t .
- Mostre que, se $x = [C]$ então $dx = k(a - x)^2$.
- O que acontece com a concentração quando t tende para o infinito.
- O que acontece com a taxa de reação quando t tende para o infinito.
- O que os resultados da parte (c) e (d) significam em termos práticos

Solução:

- a) Pelo enunciado temos $A + B \longrightarrow C$ e a concentração de C é $[C] = \frac{a^2 kt}{(akt + 1)}$ e a

taxa de reação de C num instante qualquer t é dada por $\frac{dC}{dt}$ onde,

$$\frac{dC}{dt} = \frac{(a^2 kt)' \times (akt + 1) - (a^2 kt) \times (akt + 1)'}{(akt + 1)^2}$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{a^2 k(akt + 1) - a^2 kt \times ak}{(akt + 1)^2}$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{a^2 k(akt + 1 - akt)}{(akt + 1)^2}$$

$$\boxed{\frac{dC}{dt} = \frac{a^2 k}{(akt + 1)^2}}$$

b) Vamos mostrar agora que se $x = [C]$ então $\frac{dx}{dt} = k(a-x)^2$.

Solução:

$$\text{Se } x = [C] \Rightarrow \frac{dx}{dt} = \frac{d[C]}{dt} \Rightarrow \frac{dx}{dt} = \frac{a^2k}{(akt+1)^2}$$

$$\frac{dx}{dt} = k \left(\frac{a}{akt+1} \right)^2 = k \left(\frac{a^2kt + a - a^2kt}{akt+1} \right)^2 = k \left(\frac{a^2kt + a}{akt+1} - \frac{a^2kt}{akt+1} \right)^2$$

$$\frac{dx}{dt} = k \left(\frac{a(akt+1)}{akt+1} - \underbrace{\frac{a^2kt}{akt+1}}_{[C]=x} \right)^2 = k(a-x)^2 \text{ logo, se verifica que se } x = [C] \text{ então}$$

$$\boxed{\frac{dx}{dt} = k(a-x)^2}$$

c) Vamos calcular $[C]$ para $t \rightarrow \infty$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} [C] = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{a^2kt}{akt+1} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{a^2kt}{-t \left(ak + \frac{1}{t} \right)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{a^2k}{ak + \frac{1}{t}} = \frac{\lim_{t \rightarrow \infty} a^2k}{\lim_{t \rightarrow \infty} ak + \frac{1}{t}} = \frac{a^2k}{ak+0} = \frac{a^2k}{ak} = a$$

d) Vamos calcular $\frac{dC}{dt}$ para $t \rightarrow \infty$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{dC}{dt} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{a^2k}{(akt+1)^2} = \frac{\lim_{t \rightarrow \infty} a^2k}{\lim_{t \rightarrow \infty} (akt+1)^2} = \frac{a^2k}{\infty} = 0$$

e) Quando o tempo tende ao infinito ($t \rightarrow \infty$) a concentração de $[C]$ tende a ser máxima, logo as concentrações dos reagentes tendem a zero

$[A] \rightarrow 0$ e $[B] \rightarrow 0$, com isso a taxa de reação $\left(\frac{dC}{dt} \right)$ tende a zero.

Exemplo 2:

As experiências mostram que se a reação química $N_2O_5 \longrightarrow 2NO_2 + \frac{1}{2}O_2$ ocorre a 45° C, a taxa de reação do pentóxido de dinitrogênio é proporcional à sua concentração da seguinte forma:

$$\boxed{-\frac{d[N_2O_5]}{dt} = 0,0005[N_2O_5]}$$

- Encontre uma expressão para concentração $[N_2O_5]$ após t segundos se a concentração inicial for C .
- Quanto tempo levará para que a reação reduza a concentração de $[N_2O_5]$ para 90% de seu valor original?

Solução:

- Tem-se $-\frac{d[N_2O_5]}{dt} = 0,0005 \times [N_2O_5]$ sendo $\frac{d[N_2O_5]}{dt}$ a taxa de variação da concentração de N_2O_5 que é proporcional a concentração presente de N_2O_5 . Logo, $\frac{dy}{dt} = k \times y \rightarrow y = C \times e^{kt}$ já que $y' = k \cdot \frac{k \cdot (C \cdot e^{kt})}{y} = ky$. C é chamado "valor inicial" porque quando $t = 0$, $y = C \cdot e^{k(0)} = C \times 1 = C$. Portanto. $y = C \cdot e^{kt}$
 $[N_2O_5] = C \cdot e^{-0,0005t}$

$$b) [N_2O_5] = \frac{90}{100} C$$

$$\text{Vamos substituir em } [N_2O_5] = C \cdot e^{-0,0005t}, \frac{90}{100} C = C \cdot e^{-0,0005t}$$

aplicando \ln em ambos os lados a igualdade fica $\ln 0,9 = \ln e^{0,0005t}$

$$\ln 0,9 = 0,0005t \ln e^{-0,0005t} = \ln 0,9 - \frac{5}{10000} t = \ln 0,9 \quad t = -2000 \ln \frac{9}{10}$$

$$t = -2000(\ln 9 - \ln 10) = -2000(2,1972 - 2,3025) \cong 211 \text{ segundos.}$$

4.2.3.2 Decaimento exponencial ou meia vida de uma substância radioativa.

O tempo necessário para que a quantidade de átomos de uma substância radioativa se reduza a metade é o que chamamos de meia-vida de uma substância.

As substâncias radioativas têm a taxa de concentração proporcional à concentração presente. Assim, podemos resolver problemas de decaimento através de um modelo matemático semelhante ao exemplo 02 do tópico anterior.

Exemplo 01:

O estrôncio-90 tem uma meia-vida de 28 dias.

- Uma amostra tem massa de 50mg inicialmente. Encontre a fórmula para massa restante após t dias.
- Encontre a massa remanescente após 40 dias.
- Quanto tempo a amostra leva para decair para uma massa de 2 mg?

Solução:

- O estrôncio-90 é uma substância radioativa. Por este fato, sua massa decai a uma taxa proporcional à massa presente. Isto significa que $\frac{dm}{dt} = -km$, onde $k < 0$, pois $m(t)$ é decrescente. A solução desta equação diferencial é $m(t) = m_0 \times e^{-kt}$. Como a condição inicial $m(0) = 50$, então $m(t) = 50 \times e^{-kt}$.

Para calcular o valor da constante k , usamos o fato de que o estrôncio-90 tem meia-vida de 28 dias, isto é,

$$m(28) = 50 \times e^{-28k} \rightarrow 25 = 50 \times e^{-28k} \rightarrow \frac{1}{2} = e^{-28k} \rightarrow \ln \frac{1}{2} = \ln e^{-28k} \rightarrow$$

$$\ln 1 - \ln 2 = -28k \rightarrow 0 - \ln 2 = -28k \rightarrow k = \frac{\ln 2}{28} = \frac{0,6931}{28} \rightarrow \boxed{k = 0,0247}$$

Logo, a fórmula para massa restante no instante t é dada por,

$$m(t) = 50 \times e^{-kt}$$

$$\boxed{m(t) = 50 \times e^{-0,0247 \times t}}$$

b) Para $t = 40$ temos,

$$m(t) = 50 \times e^{-0,0247 \times t} \rightarrow m(40) = 50 \times e^{-0,0247 \times 40} \rightarrow m(40) = 50 \times e^{-0,990}$$

$$m(40) = \frac{50}{e^{0,990}} \rightarrow m(40) = \frac{50}{2,691} \rightarrow \boxed{m(40) = 18,58 \text{ mg}}$$

c) Para $m(t) = 2$ temos, $m(t) = 50 \times e^{-kt} \rightarrow 2 = 50 \times e^{-0,0247 \times t} \rightarrow \frac{1}{25} = e^{-0,0247 \times t}$

$$\ln \frac{1}{25} = \ln e^{-0,0247 \times t} \rightarrow \ln 1 - \ln 25 = -0,0247 \times t \times \ln e$$

$$0 - 3,2188 = -0,247t \rightarrow t = \frac{3,2188}{0,0247} \rightarrow \boxed{t \cong 130 \text{ dias}}$$

Exemplo 02:

A meia-vida do césio-137 é 30 anos. Suponha que tenhamos uma amostra de 100 mg.

- Encontre a massa remanescente após t anos.
- Quanto de amostra restará depois de 100 anos?
- Depois de quanto tempo restará apenas 1mg?

Solução:

- a) Usando o modelo do exemplo anterior para o decaimento de uma substância temos, $\frac{dm}{dt} = -km \rightarrow m(t) = m_0 \times e^{-kt}$. Pela informação de que dispomos, sabemos que $m(t) = 100$ quando $t = 0$. Levando esses valores no modelo vem $m_0 \times e^{-k \times 0} = 100$ o que implica que $m_0 = 100$. Como o césio-137 tem uma meia-vida de 30 anos sabemos que $m(t) = \frac{m_0}{2}$ quando $t = 30 \text{ anos}$. Levando esses valores no modelo, podemos tirar o valor de k .

$$m(t) = m_0 \times e^{-kt} \rightarrow \frac{m_0}{2} = m_0 \times e^{-kt} \rightarrow \frac{1}{2} = e^{-30k} \rightarrow \ln \frac{1}{2} = \ln e^{-30k}$$

$$\ln 1 - \ln 2 = -30k \times \ln e \rightarrow 0 - 0,6931 = -30k \rightarrow k = \frac{0,6931}{30} \rightarrow \boxed{k = 0,0231}$$

Assim, $k = 0,0231$, e a massa remanescente após t anos é

$$m(t) = 100 \times e^{-0,0231 \times t}$$

b) O que restará de amostra depois de 100 anos é

$$m(100) = 100 \times e^{-0,0231 \times 100} \rightarrow m(100) = 100 \times e^{-2,31} \rightarrow m(100) = \frac{100}{e^{2,31}} \rightarrow$$

$$m(100) = \frac{100}{2,72^{2,31}} \rightarrow m(100) = \frac{100}{10,01} \rightarrow \boxed{m(100) \cong 9,91 \text{ mg}}$$

c) Queremos encontrar o valor t para que $m(t) = 1$, ou seja,

$$m(t) = 100 \times e^{-0,0231 \times t} \rightarrow 1 = 100 \times e^{-0,0231 \times t} \rightarrow \frac{1}{100} = e^{-0,0231 \times t} \rightarrow$$

$$\ln \frac{1}{100} = \ln e^{-0,0231 \times t} \rightarrow \ln 1 - \ln 100 = -0,0231 \times t \times \ln e \rightarrow 0 - 4,60517 = -0,0231 \times t$$

$$t = \frac{4,60517}{0,0231} \rightarrow \boxed{t \cong 199,358 \text{ anos}}$$

Exemplo 03:

Uma amostra de trítio-3 decai 94,5% de sua quantidade original depois de 1 ano.

- Qual é a meia-vida do trítio-3?
- Quanto tempo levaria para a amostra decair para 20% de sua quantidade original?

Solução:

- Por se tratar de uma substância radioativa, o trítio-3 decai a uma taxa proporcional a massa presente, isto é, $\frac{dm}{dt} = -km$ logo, concluímos como nos exemplos anteriores que $m(t) = m_0 \times e^{-kt}$. Pelas informações dadas no problema para $t=1$ temos $m(t) = \frac{94,5}{100} \times m$, ou seja, podemos encontrar a

constante k fazendo, $\frac{94,5}{100} \times m_0 = m_0 \times e^{-kt} \rightarrow \frac{94,5}{100} = e^{-kt}$. Aplicando

logaritmos natural em ambos os lados da igualdade temos,

$$\ln \frac{94,5}{100} = \ln e^{-k} \rightarrow \ln 94,5 - \ln 100 = -k \ln e \rightarrow 4,5486 - 4,6052 = -k \text{ logo } k = 0,0566$$

. Para o cálculo da meia-vida do trítio-3 temos $m(t) = \frac{m_0}{2}$ onde substituindo

na função exponencial temos, $\frac{m_0}{2} = m_0 \times e^{-0,0566 \times t} \rightarrow \frac{1}{2} = e^{-0,0566 \times t}$ usando

novamente o logaritmo natural dos dois lados da igualdade ficamos com,

$$\ln \frac{1}{2} = \ln e^{-0,0566 \times t} \rightarrow \ln 1 - \ln 2 = -0,0566 \times t \times \ln e \rightarrow 0 - 0,6931 = -0,0566t$$

$$t_{\frac{1}{2}} = \frac{0,6931}{0,0566} \rightarrow \boxed{t_{\frac{1}{2}} \cong 12,3 \text{ anos}}$$

Logo, a meia-vida do trítio-3 é $t \cong 12,3$ anos.

b) Para a amostra decair para 20% de sua quantidade original temos,

$$\frac{20}{100} m_0 = m_0 \times e^{-0,0566 \times t} \rightarrow \ln \frac{20}{100} = \ln e^{-0,0566 \times t} \rightarrow \ln 20 - \ln 100 = -0,0566t \times \ln e \rightarrow$$

$$2,9957 - 4,6052 = 0,0566t \rightarrow t = \frac{1,6095}{0,0566} \rightarrow \boxed{t \cong 28,4 \text{ anos}}$$

Logo, para o trítio-3 atingir 20% da amostra original $t \cong 28,4$ anos.

Exemplo 04.

Os cientistas podem determinar a idade de objetos antigos pelo método da datação por radiocarbono-14. Essa descoberta rendeu ao químico americano Willard Frank Libby (1908-1980), em 1960, o prêmio Nobel de química pelo desenvolvimento dessa técnica. O bombardeamento da parte superior da atmosfera pelos raios cósmicos converte o nitrogênio em isótopo radioativo do carbono C^{14} , com meia-vida de cerca de 5730 anos. A vegetação absorve o dióxido de carbono através da atmosfera e a vida animal assimila ^{14}C através da cadeia alimentar. Quando uma planta ou

animal morre. Para repor seu carbono e a quantidade de ^{14}C começa a decrescer por decaimento radioativo. Portanto, o nível de radioatividade também deve decrescer exponencialmente.

Foi descoberto que um fragmento de pergaminho tinha 74% de ^{14}C do que os materiais das plantas têm atualmente na terra. Estime a idade do papiro.

Solução:

Seja,

$N(t)$: quantidade de carbono 14 presente no tempo t em anos.

N_0 : quantidade de carbono 14 presente no tempo $t = 0$.

t : o tempo em anos.

Sendo a taxa de variação do ^{14}C proporcional a sua quantidade presente, pois trata-se de uma substância radioativa temos, $\frac{dN}{dt} = -kN$. Encontramos a função cuja derivada corresponde a $-kN$ que é $N(t) = N \times e^{-kt}$ onde $N = N_0$.

Pelo enunciado do problema tem-se $N(t) = \frac{N_0}{2}$ e $t = 5730$ substituindo em

$N(t) = N_0 \times e^{-kt}$ encontramos veja, $\frac{N_0}{2} = N_0 \times e^{-5730k}$ aplicando \ln nos dois

membros fica, $\ln \frac{1}{2} = \ln e^{-5730k} \rightarrow$

$\ln 1 - \ln 2 = -5730k \rightarrow 0 - 0,6931 = -5730k \rightarrow \boxed{k = 0,00012}$. O modelo está completo agora. $N(t) = N_0 \times e^{-0,00012t}$. Vamos agora calcular a idade do papiro

usando o fato de que $N(t) = \frac{74}{100} N_0$ como diz o problema. Portanto,

$\frac{74}{100} N_0 = N_0 \times e^{-0,00012t} \rightarrow 0,74 = e^{-0,00012t}$. Com aplicação de \ln nos dois membros

da igualdade, conseguimos calcular t , observe:

$$\ln 0,74 = \ln e^{-0,00012t} \rightarrow -0,301 = -0,00012t \rightarrow t = \frac{0,301}{0,00012} \rightarrow \boxed{t \cong 2509}$$

Logo, a idade do papiro é de aproximadamente 2509 anos.

4.2.3.3 Aplicação do estudo dos gases

Outra grande aplicação das derivadas é no estudo químico dos gases envolvendo as três variáveis: pressão, volume e temperatura. Vimos no cap. 1, nas aplicações de proporções da química, alguns conceitos que iremos utilizar nas aplicações de derivadas.

Exemplo 01:

A Lei de Boyle afirma que quando uma amostra de gás é comprimida a uma temperatura constante, o produto da pressão pelo volume permanece constante:

$$PV = c.$$

- Encontre a taxa de variação do volume em relação à pressão.
- Uma amostra de gás está em um recipiente à baixa pressão e é regularmente comprimida a uma temperatura constante por 10 minutos. O volume decresce mais rapidamente no início ou no final dos 10 minutos? Explique.
- A compressibilidade isotérmica é definida introduzindo-se o sinal negativo e dividindo a derivada $\frac{dV}{dP}$ pelo volume V . Demonstre que a compressibilidade

$$B \text{ é dada por } \frac{1}{P}.$$

Solução:

a) Do enunciado temos $PV = c \rightarrow V = \frac{c}{P}$. Derivando V em relação a P

encontramos a taxa de variação procurada, isto é, $V' = \frac{c' \times P - c \times P'}{P^2}$

(derivada do quociente). Logo, $V' = \frac{0 \times P - c \times 1}{P^2} \rightarrow \frac{dV}{dP} = -\frac{c}{P^2}$.

b) No início, pois a taxa de variação do volume é inversamente proporcional ao quadrado da pressão. Se a pressão é baixa a taxa de variação do volume é alta, ou seja, mais rápida.

c) Temos que $\frac{dV}{dP} = -\frac{c}{P^2}$ (I) e por definição $\beta = -\frac{dV/dP}{V}$ (II). Substituindo (I) e

(II) obtemos, $\beta = -\frac{\left(-\frac{c}{P^2}\right)}{V} \rightarrow \beta = \frac{c}{P^2 \times V} = \frac{c}{P \times \underbrace{P \times V}_c} \rightarrow \beta = \frac{c}{P \times c} \rightarrow \beta = \frac{1}{P}$.

Logo, $\beta = \frac{1}{P}$

Exemplo 02:

Usando a lei de Boyle já anunciada na questão anterior, resolva os dois itens abaixo.

a) Supondo que a pressão de uma amostra de ar ocupa $0,106m^3$ a $25^\circ C$ seja $50kPa$ Escreva V em função de P.

b) Calcule $\frac{dV}{dP}$ quando $P = 50kPa$. Qual o significado da derivada? Quais são suas unidades.

Solução:

a) Pela lei de Broyle $PV = k$ com T constante logo, para $p_1 = 50kPa$
 $V_1 = 0,106m^3$ e $T = constante = 25^\circ C$ obtemos $k = 50 \times 0,106 \rightarrow k = 5,3 kPa \times m^3$
 . Para uma pressão qualquer P e um volume qualquer V encontramos
 $PV = k$ para P e V qualquer e $k = 5,3$. Logo, $PV = 5,3 \rightarrow V = \frac{5,3}{P}$.

b) Derivando V em relação a P :

$$dV = \frac{(5,3) \times P - 5,3 \times P'}{P^2} \text{ (derivada do quociente).}$$

$$\frac{dV}{dP} \frac{0 \times P - 5,3 \times 1}{50^2} \rightarrow \frac{dV}{dP} = -\frac{5,3}{2500} = -0,00212$$

Este valor significa a taxa de variação instantânea com relação à pressão em $25^\circ C$. As unidades envolvidas são $\frac{kPa \times m^3}{(kPa)^2} = \frac{m^3}{kPa}$ ou melhor,

$$\frac{dV}{dP} = 0,00212 m^3 / kPa .$$

Exemplo 03:

a) A equação de Van Der Waals para n mols de um gás

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) \times (V - nb) = nRT$$

Onde P é a pressão, V é o volume e T a temperatura do gás. A constante R é a constante de gás universal e a e b são constantes positivas que são características de um gás particular. Se T permanece constante use a derivação implícita para encontrar $\frac{dV}{dP}$.

b) Encontre a taxa de variação de volume em relação à pressão de 1mol de dióxido de carbono em um volume de $V=10$ L e uma pressão de $P=2,5$ atm.

Solução:

a) $\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) \times (V - nb) = nRT$. Antes de derivarmos, vamos desenvolver o

produto para facilitar a derivação. $PV - nRT + \frac{n^2 a}{V^2} - \frac{n^3 \times a \times b}{V^2} = nRT$.

Derivando implicitamente os dois lados de igualdade:

$$P' \times V + PV' - nb - \frac{n^2 a V'}{V^2} - \frac{[-n^3 ab \times 2V \times V']}{V^4} = 0$$

$$1 \times V + P \times V' - nb - \frac{n^2 a}{V^2} \times V' + \frac{n^3 ab \times 2V \times V'}{V^4} = 0$$

$$V + P \times V' - nb - \frac{n^2 a}{V^2} \times V' + \frac{n^3 ab \times 2V \times V'}{V^3} = 0$$

$$P \times V' - \frac{n^2 a V'}{V^2} + \frac{2n^3 ab \times V'}{V^3} = nb - V$$

$$\frac{V^3 PV' - Vn^2 a + 2n^3 ab V'}{V^3} = \frac{V^3 (nb - V)}{V^3}$$

$$V'(PV^3 - n^2 aV + 2n^3 ab) = V^3 (nb - V)$$

$$V' = \frac{V^3 (nb - V)}{PV^3 - n^2 aV + 2n^3 ab}$$

$$\frac{dV}{dP} = \frac{V^3 (nb - V)}{PV^3 - n^2 aV + 2n^3 ab}$$

b) Para: $n = 1 \text{ mol}$, $V = 10 \text{ L}$, $P = 2,5 \text{ atm}$, $a = 3,592 \text{ L}^2 \cdot \text{atm}/\text{m}^2$ e $b = 0,04267 \text{ L/mol}$ temos:

$$\frac{dV}{dP} = \frac{10^3 (1,0,04267 - 10)}{2,5(10^3) - 1^2 \cdot 3,592 \cdot 10 + 2 \cdot 1^3 \cdot 3,592 \cdot 0,04267}$$

$$\frac{dV}{dP} = \frac{1000(0,04267 - 10)}{2,5 \cdot 1000 - 35,92 + 0,3065412}$$

$$\frac{dV}{dP} = \frac{1000(-9,95733)}{2500 - 35,92 + 0,3065412}$$

$$\frac{dV}{dP} = -\frac{9957,33}{2464,3865} = -4,04 \text{ L/atm.}$$

Logo, a taxa de variação do volume em relação à pressão é de -4,04 L/atm.

Exemplo 04.

A lei dos gases para um gás ideal à temperatura absoluta T (em kelvins), pressão P (em atmosfera) e volume V (em litros) é $PV = nRT$, em que n é o número de mols de gás e $R = 0,0821 \frac{\text{atm} \times \text{L}}{\text{mol} \times \text{K}}$ é a constante do gás. Suponha que, em certo instante, $P=8,0$ atm, e está crescendo a uma taxa de 0,10 atm/min, e $V=10$ L, e está decrescendo a uma taxa de 0,15 L/min. Encontre a taxa de variação de T em relação ao tempo naquele instante, se $n=10$ mols.

Solução:

Temos: $R = 0,0821$, $P = 8,0 \text{ atm}$, $\frac{dP}{dt} = 0,10 \frac{\text{atm}}{\text{min}}$, $V = 10 \text{ L}$, $\frac{dV}{dt} = -0,15 \text{ L/min}$ e $n = 10 \text{ mols}$.

Sendo $PV = nRT$ vamos derivar os dois membros da igualdade em função do tempo t $\frac{dP}{dt}V + P\frac{dV}{dt} = nRT\frac{dT}{dt}$ substituindo agora os dados do problema encontramos

$$0,10 \times 10 + 8(-0,15) = 10 \times 0,0821 \frac{dT}{dt}$$

$$1 - 1,2 = 0,821 \frac{dT}{dt}$$

$$-0,2 = 0,821 \frac{dT}{dt}$$

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{0,2}{0,821}$$

$$\frac{dT}{dt} = -0,2435 \text{ K / min}$$

Logo, a taxa de variação da temperatura T em relação ao tempo t é de - 0,2436 K/min.

Exemplo 05.

Suponha que a pressão P (em quilo-pascal) e o volume V (em cm^3) de um gás em expansão estejam relacionados por $PV^b = c$, onde b e c são constantes. (Isso é válido para expansões adiabáticas, em que não ocorre transferência de calor).

a) Encontre $\frac{dP}{dt}$ se $b = 1,2$; $P = 8 \text{ kPa}$, $V = 100 \text{ cm}^3$ e $\frac{dV}{dt} = 20 \text{ cm}^3 / \text{min}$.

b) Encontre b se $P=25 \text{ kPa}$, $\frac{dP}{dt} = 12 \text{ Pa / min}$, $V=100 \text{ cm}^2$ e $\frac{dV}{dt} = 20 \text{ cm}^3 / \text{min}$.

c) O volume V e a pressão P de um gás num pistão (que variam com o tempo) satisfazem $PV^{\frac{3}{2}} = c$, onde c é uma constante. Prove que

$$\frac{\frac{dP}{dt}}{\frac{dV}{dt}} = -\frac{3P}{2V}. \text{ Observe que o quociente das derivadas é negativo. Isso}$$

poderia ser previsto a partir da equação $PV^{\frac{3}{2}} = c$? Justifique sua resposta.

Solução:

$$PV^b = C \rightarrow C = 8,100^{1,2} \approx 2009,5$$

$$\begin{aligned} \text{a) } P &= \frac{c}{V^b} \rightarrow \frac{dP}{dt} = \frac{dP}{dV} \times \frac{dV}{dt} = -bcV^{-b-1} \frac{dV}{dt} = 1,2 \times 2009,5 \times 100^{-2,2} \times 20 \rightarrow P = -1,9 \text{ kPa} / \text{min} \\ \text{b) } \frac{dP}{dt} &= \frac{dP}{dV} \times \frac{dV}{dt} \rightarrow 12 = -bP \times V^b \times V^{-b-1} \times 20 \rightarrow 12 = -bP \times V^{-1} \times 20 \rightarrow b = \frac{-12V}{20P} = -\frac{12}{5} = -2,4 \\ \text{c) } \frac{dP}{dt} \times V^{\frac{3}{2}} &+ P \times \frac{3}{2} \times V^{\frac{1}{2}} \times \frac{dV}{dt} = 0 \rightarrow V^{\frac{3}{2}} \frac{dP}{dt} = -\frac{3PV^{\frac{1}{2}}}{2} \times \frac{dV}{dt} \rightarrow \frac{dP/dt}{dV/dt} = -\frac{3PV^{\frac{1}{2}}}{2V^{\frac{3}{2}}} = -\frac{3P}{2V} \end{aligned}$$

O sinal negativo poderia ser previsto observando que como $P = \frac{c}{V^b}$, quando P aumenta V diminui e vice-versa. Portanto, sempre teremos uma função decrescente e, conseqüentemente, uma derivada negativa.

4.3 Definição de Integral

Originalmente, a integral de uma função foi criada para determinar a área sob uma curva no plano cartesiano.

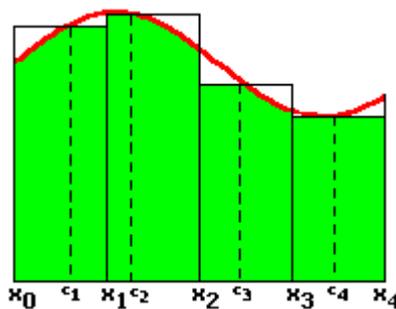


Figura 9 - Integral

Fonte: <http://pessoal.sercomtel.com.br/matematica/superior/calculo/integral/integral.htm>

Observe na figura 9 que para calcular a área da curva no intervalo $[x_1, x_2]$, podemos intuitivamente dividir esse espaço em infinitos retângulos de base Δx infinitamente pequenos, ou seja, x tendendo a zero, com alturas iguais a $f(x)$ onde $i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$ representa os n retângulos nas quais a região ficou dividida. A área da curva será dada pelo somatório:

$S = f(x_1)\Delta x + f(x_2).\Delta x + \dots + f(x_n).\Delta x$ quando Δx tende para zero. Podemos então definir integral, em linguagem matemática, como

$S = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n f(x_i).\Delta x = \int_{x_1}^{x_2} f(x).d(x)$. Onde: S é a integração da função $f(x)$, no intervalo entre x_1 e x_2 . \int é o símbolo representativo da integral, $f(x)$ é o integrando e os pontos x_1 e x_2 são os limites inferior e superior, respectivamente, de integração.

Por outro lado, a integral pode ser também definida como a operação inversa da derivada. Muitas vezes estamos diante da taxa de variação de uma função, ou seja, da sua derivada e para calcularmos a função que deu origem a essa derivada, chamada de função primitiva ou antiderivada, devemos integrá-la. Essa segunda definição é a que aplicaremos na química.

Propriedades básicas das integrais

Sejam f e g funções integráveis em $[x_1, x_2]$ e c uma constante:

$$\text{I)} \quad \int_{x_1}^{x_2} [f(x) + g(x)]dx = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} g(x)dx$$

$$\text{II)} \quad \int_{x_1}^{x_2} [f(x) - g(x)]dx = \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx - \int_{x_1}^{x_2} g(x)dx$$

$$\text{III)} \quad \int_{x_1}^{x_2} cf(x)dx = c \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx$$

Integrais Importantes Na Química

$$\text{I)} \quad \int dx = x + c$$

$$\text{II)} \quad \int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} + c, n \neq -1$$

$$\text{III)} \quad \int \frac{dx}{x} = \ln|x| + c$$

$$\text{IV)} \quad \int a^x \cdot dx = \frac{a^x}{\ln a} + c, a > 0, a \neq 1$$

$$\text{V)} \quad \int e^x \cdot dx = e^x + c$$

Exemplo 01:

Calcule $\int_0^1 x^2 \cdot dx$. Esta é a função que ao se derivar encontramos x^2 . Usemos agora o teorema fundamento do cálculo nos pontos $x_1 = 0$ e $x_2 = 1$ teremos:

$$\int_0^1 x^2 dx = \left(\frac{x^3}{3} + c \right) \Big|_0^1 = \left(\frac{1^3}{3} + c \right) - \left(\frac{0^3}{3} + c \right) = \frac{1}{3} + c - 0 - c = \frac{1}{3}$$

Como os limites estão definidos de $[x_1, x_2]$ esta integral é chamada integral definida.

Exemplo 02:

$$\text{Calcule } \int_1^2 \frac{2x}{x^2+5} \cdot dx$$

Solução:

Notemos que a integral referida é composta pelo quociente entre duas funções e não temos uma técnica direta para resolvê-la, portanto usaremos um artifício chamado método da substituição para solucioná-la.

Chamemos $\mu = x^2 + 5$, derivando encontramos $d\mu = 2x dx$ onde $dx = \frac{d\mu}{2x}$.

Segue que $G(x) = \int_1^2 \frac{2x}{x^2+5} dx$ fazendo as substituições e usando a integral (...) vista anteriormente temos

$$G(x) = \int_1^2 \frac{2x}{u} \cdot \frac{du}{dx} = \int_1^2 \frac{du}{u} = (\ln |u| + c) \Big|_1^2 = \ln |x^2 + 5| + c \Big|_1^2 = (\ln |2^2 + 5| + c) - (\ln |1^2 + 5| + c)$$

$$G(x) = \ln |9| + c - \ln |6| - c = \ln 9 - \ln 6 = \ln \frac{9}{6} \rightarrow \boxed{G(x) = \ln \frac{3}{2}}$$

4.3.1 Aplicações das integrais na química

4.3.1.1 Na cinética química:

Tempo de reação e a quantidade de reagentes ou produtos presentes na reação em um determinado tempo. Em uma reação química três parâmetros são importantes: velocidade da reação, quantidade de reagentes ou produtos presentes no decorrer da reação e o tempo gasto para que uma reação ocorra. O primeiro já foi discutido do tópico anterior, discutiremos agora os outros dois. Antes, vamos definir uma equação matemática para velocidade da reação em função de uma ou mais variáveis que nos dê condições de entender o seu comportamento. Voltemos para isso, à equação geral de uma reação química:



A concentração dos reagentes é, normalmente, diretamente proporcional à velocidade da reação, sendo também proporcional ao produto dos reagentes, isto

é, $\frac{V}{[A] \times [B]} = k \rightarrow \boxed{V = k[A][B]}$, onde k é a constante de velocidade característico

para cada reação. Empiricamente a Lei da velocidade das reações químicas é dada por: $V = k[A]^m[B]^n$, sendo m e n indicativo da ordem da reação em função de um determinado reagente. A determinação de k, m e n vem sempre de resultados experimentais podendo ser diferentes para uma mesma reação já que outros

fatores como temperatura, por exemplo, influenciam na velocidade da reação. Logo,

$m \rightarrow$ ordem da reação em relação ao reagente A

$n \rightarrow$ ordem da reação em relação ao reagente B

$m + n \rightarrow$ ordem da reação.

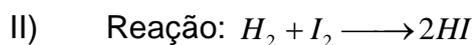
Vale salientar que m e n não necessariamente serão iguais aos coeficientes a e b da reação química, muito embora possa haver uma coincidência. Veja os exemplos abaixo de algumas reações com suas respectivas velocidades de reação.

Exemplos:



Lei da Velocidade: $V = k[N_2O_5]$

O coeficiente a do reagente N_2O_5 é igual 2 e a ordem m desse mesmo reagente é igual a 1. Portanto não há coincidência entre os coeficientes e a ordem. Dizemos, nesse caso, que a reação é não elementar.



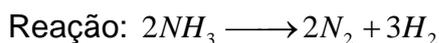
Lei da Velocidade: $V = k[H_2][I_2]$

Os coeficientes a e b dos reagentes são ambos iguais a 1 e as ordens m e n desses mesmos reagentes também são iguais a 1. Logo, há uma coincidência entre os coeficientes a e b e as ordens m e n dos reagentes, respectivamente. Dizemos, nesse caso, que a reação é elementar.

Exemplo 01

Dada a reação de decomposição da amônia $2NH_3 \longrightarrow 2N_2 + 3H_2$, encontre uma relação entre a concentração de NH_3 em função, do tempo t , sabendo que se trata de uma reação de ordem zero e tem a constante de velocidade igual a k .

Solução:



Lei da Velocidade: $V = k[NH_3]^0 \rightarrow V = k$

Vamos supor que $[NH_3] = [C]$ temos $V = -\frac{d[C]}{dt} = k \rightarrow dC = -kdt$ integrando os dois

lados temos $\int_{C_0}^C d[C] = \int_0^t -kdt \rightarrow C = -kt \rightarrow [C] - [C_0] = -(kt - k \times 0) \rightarrow [C] - [C_0] = -kt$

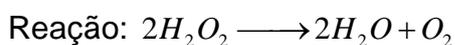
logo, $[C] = -kt - [C_0]$ que representa uma função do 1º grau do tipo $y = ax + b$.

Substituindo $[C]$ por $[NH_3]$ temos $[NH_3] = -kt + [NH_3]_0$.

Exemplo 02

Na decomposição do peróxido de hidrogênio da reação $2H_2O_2 \longrightarrow 2H_2O + O_2$, estabeleça uma relação entre a concentração do reagente H_2O_2 em função do tempo t , sabendo que a relação é de ordem 1 e tem constante de velocidade k .

Solução:



Lei da Velocidade: $V = k[H_2O_2]^1 \rightarrow V = k[H_2O_2]$

Vamos generalizar. Seja $[H_2O_2] = [C]$

$$V = -\frac{d[C]}{dt} = k[C] \rightarrow \frac{d[C]}{[C]} = -kdt$$

Integrando ambos os lados teremos: $\int_{c_0}^c \frac{d[C]}{C} = \int_0^t -k \times dt$ usando as integrais do resumo do tópico anterior temos: $\ln[C] = -kt \rightarrow \ln[C] - \ln[C]^0 = -k(t-0)$ logo, $\ln[C] = -kt + \ln[C]$ o que também representa uma reta do tipo $y = ax + b$ onde $a = -k$ e $b = \ln[C]$. Substituindo $[C]$ por $[H_2O_2]$ concluímos que $[H_2O_2] = -kt + [H_2O_2]$.

Exemplo 03.

Determine na reação de decomposição do dióxido de nitrogênio $2NO_2 \longrightarrow 2NO + O_2$ modelo matemático que forneça a concentração do NO_2 em função do tempo t conhecendo a ordem da reação igual 2 e a constante de velocidade k .

Solução:



Lei da velocidade: $v = k[NO_2]^2$.

Como no exemplo anterior façamos $[NO_2] = C$, isto é,

$V = k[C]^2 \rightarrow -\frac{d[C]}{dt} = k[C]^2 \rightarrow \frac{d[C]}{dt} = -kdt$, Integrando os dois membros temos:

$$\int_{c_0}^c \frac{d[C]}{dt} = \int_0^t -kdt \quad \text{usando:} \quad \int x^n dx = \frac{x}{n+1} + k \quad . \quad \text{Portanto,} \quad \left. \frac{[C]^{-2+1}}{-2+1} \right|_{c_0}^c = -kt \Big|_0^t \rightarrow$$

$$-\left[\frac{1}{[C]} \right]_{c_0}^c = -kt \rightarrow -\frac{1}{[C]} = kt \rightarrow -\frac{1}{[C]} - \left[-\frac{1}{[C_0]} \right] = -kt \quad . \quad \text{Logo,} \quad \frac{1}{[C]} = kt + \frac{1}{[C_0]} \quad \text{o que}$$

representa uma função do 1º grau $y=ax+b$, onde: $\begin{cases} y = \frac{1}{[C]} \\ a = k \neq 0 \\ b = \frac{1}{[C_0]} \end{cases}$.

Exemplo 04.

Mostre que uma reação de ordem $n \in \mathbb{Z}$ e $n \neq 1$ em função de um único reagente é modelada na forma $\frac{[C]^{-n+1}}{-n+1} = -kt + \frac{[C]^{-n+1}}{-n+1}$ onde C representa a concentração do reagente, n é a ordem e k é a constante de velocidade da reação.

Solução:

$v = k[C]^n$. Vamos escrever:

$$-\frac{d[C]}{dt} = k[C]^n \rightarrow \frac{d[C]}{[C]^n} = -kt. \text{ Aplicando a integral, } \int_{C_0}^C \frac{d[C]}{[C]^n} = -\int_0^t kt \rightarrow \frac{[C]^{-n+1}}{-n+1} - \frac{[C_0]^{-n+1}}{-n+1} = -kt. \text{ Logo, } \frac{[C]^{-n+1}}{-n+1} = -kt + \frac{[C_0]^{-n+1}}{-n+1}.$$

5 CONCLUSÃO

As informações coletadas através de estudos realizados e por experiências em sala de aula, pode-se afirmar que a maior parte dos estudantes de Química sente dificuldade em seu aprendizado devido à deficiência no ensino-aprendizado de matemática, principalmente no cálculo (derivadas e integrais) o que leva um atraso no conteúdo, bem como a um maior número de reprovações.

Nos dias de hoje, entender matemática como algo implícito ou explícito em diversos contextos torna o indivíduo capaz de planejar e organizar situações diversas. A matemática insere-se no grupo das ciências exatas e possui como um dos seus objetivos a capacidade de solucionar problemas. Na química não é diferente onde se cria o modelo matemático para aplicação num conteúdo específico de química, facilitando ao aluno a obtenção da solução problema.

Para mergulhar no aprendizado da matemática e sua aplicabilidade devemos ter um conhecimento substancial das outras ciências, principalmente ciências exatas. Professores devem sempre se modernizar e buscar novos conhecimentos e metodologias para facilitar o processo de aprendizagem e uma das metodologias é ter também domínio do conteúdo em outras áreas.

REFERÊNCIAS

ALUNOS ONLINE. Disponível em: <Fonte: <http://alunosonline.uol.com.br/quimica/formula-percentual.html>>. Acesso em: 28 de jul de 2016.

CANTO, Eduardo Leite; Peruzzo, Francisco Miragaia. **Química, na abordagem do cotidiano.** 4.ed. São Paulo: Moderna, 2006, Vol. 1 e 2.

EBAH. Disponível em: <<http://www.ebah.com.br/content/ABAAABMCoAK/determinacao-valor-constante-dos-gases-ideais>>. Acesso em 24 mai de 2016.

ESALQ. Disponível em: <<http://ce.esalq.usp.br/arquimedes/Atividade09.pdf>>. Acesso em 18 de mai de 2016.

FELTRE, Ricardo. **Química Geral.** 4.ed. São Paulo: Moderna, 1996. Vol. 1 e 2.

FONSERA, Marta Reis Fonseca. **Química, fisicoquímica.** 2ed. São Paulo: FTD, 1992. Vol. 2.

FUNADESP. Centro Universitário Ibero-americano.

INFOESCOLA. Disponível em: <<http://www.infoescola.com/quimica/leis-das-reacoes-quimicas-leis-ponderais/>>. Acesso em 24 mai 2016.

KALILBN. Disponível em: <<https://kalilbn.wordpress.com/cinetica-quimica-i-introducao-e-reacoes-de-primeira-ordem/>>. Acesso em 10 mar 2016.

KIYUKAWA, Rokusaburo; Shigekiyo, Carlos Tadashi; Yamamoto, Kazuhito. **Os elos da matemática.** 3.ed. São Paulo: Saraiva. Vol. 1.

MACHADO, Antônio dos Santos. **Matemática Temas e Metas, conjuntos numéricos e funções.** 2.ed. São Paulo: Atual, 1988. Vol. 1.

MACHADO, Antônio dos Santos. **Matemática Temas e Metas, funções e derivadas.** 2.ed. São Paulo: Atual, 1988. Vol. 6.

MACHADO, Antônio dos Santos. **Matemática Temas e Metas, sistemas lineares e combinatórias**. 2.ed. São Paulo: Atual, 1988. Vol. 3.

MARCO PEREIRA. Disponível em: <<http://marco.eng.br/cinetica/notasdeaula/capitulo-3.pdf>>. Acesso em 13 abr de 2016.

QUÍMICA E MUITO MAIS. Disponível em: <Fonte: <http://quimicaemuitomais.blogspot.com.br/2012//06/formulas-percentual-e-molecular.html>>. Acesso em: 28 de jun 2016.

QUÍMICA VER +. Disponível em: <<http://quimicacrescersempre.blogspot.com.br/2011/06/grandezas-quimicas.html>>. Acesso em 24 de mai de 2016.

STWART, James. **Cálculo**. 7.ed. São Paulo: Thomson Learning, 2007. Vol. 1.

UNICENTRO. Disponível em: <http://www.unicentro.br/editora/anais/iiiiepmem/relatos/RE_544-557.pdf>. Acesso em 24 mai 2016.

WIKIPÉDIA. Disponível em: <<https://pt.wikipedia.org/wiki/Proporcionalidade>>. Acesso em 24 mai de 2016.

_____. Disponível em: <www.marco.eng.br/cinetica/trabalhodealunos/cineticabasica/velocidade.html>. Acesso em 20 de mai 2016.

TABELA DE LOGARÍTMOS NATURAIS

nº	log	nº	log
1	0	50	1,69897
2	0,30103	51	1,70757
3	0,477121	52	1,716003
4	0,60206	53	1,724276
5	0,69897	54	1,732394
6	0,778151	55	1,740363
7	0,845098	56	1,748188
8	0,90309	57	1,755875
9	0,954243	58	1,763428
10	1	59	1,770852
11	1,041393	60	1,778151
12	1,079181	61	1,78533
13	1,113943	62	1,792392
14	1,146128	63	1,799341
15	1,176091	64	1,80618
16	1,20412	65	1,812913
17	1,230449	66	1,819544
18	1,255273	67	1,826075
19	1,278754	68	1,832509
20	1,30103	69	1,838849
21	1,322219	70	1,845098
22	1,342423	71	1,851258
23	1,361728	72	1,857332
24	1,380211	73	1,863323
25	1,39794	74	1,869232
26	1,414973	75	1,875061
27	1,431364	76	1,880814
28	1,447158	77	1,886491
29	1,462398	78	1,892095
30	1,477121	79	1,897627
31	1,491362	80	1,90309
32	1,50515	81	1,908485
33	1,518514	82	1,913814
34	1,531479	83	1,919078
35	1,544068	84	1,924279
36	1,556303	85	1,929419
37	1,568202	86	1,934498
38	1,579784	87	1,939519
39	1,591065	88	1,944483

40	1,60206
41	1,612784
42	1,623249
43	1,633468
44	1,643453
45	1,653213
46	1,662758
47	1,672098
48	1,681241
49	1,690196

89	1,94939
90	1,954243
91	1,959041
92	1,963788
93	1,968483
94	1,973128
95	1,977724
96	1,982271
97	1,986772
98	1,991226
99	1,995635