

Modelagem da Reação Relógio Bromato-Iodo.

Pedro Henrique M. Fortunato¹ (IC), Roberto B. Faria^{2*} (PQ)

¹Escola de Química – Universidade Federal do Rio de Janeiro

²Instituto de Química – Universidade Federal do Rio de Janeiro *faria@iq.ufrj.br

Palavras Chave: reação relógio, modelagem, bromato

Introdução

A química dos halogênios (cloro, bromo, iodo), em solução aquosa, é muito rica de fenômenos não lineares, tais como reações relógio e reações oscilantes. Dessa forma são conhecidas reações relógio e reações oscilantes para os sistemas, clorito-iodeto, clorito-iodo, dióxido de cloro-iodeto, dióxido de cloro-iodo, bromito-iodeto, bromato-iodeto, clorato-iodo, bromato-iodo e iodato-iodeto, estas três últimas apenas como reação relógio.

Para os sistemas bromato-iodeto e bromito-iodeto que são conhecidos apresentarem o comportamento de reação relógio e reação oscilante, foi desenvolvido o mecanismo FLEK¹ formado por 21 reações e 14 espécies independentes que reproduz o comportamento experimental observado. Mais recentemente, quando da descoberta da reação relógio bromato-iodo por Chinake e Simoyi², foi proposto o mecanismo CS, composto por 17 reações e 10 espécies independentes. Apesar de ambos os modelos considerarem a formação do IBr como intermediário, o modelo FLEK considera que o IBr é formado pelas reações do HOBr com iodo e com iodeto, enquanto o modelo CS não considera essas reações e propõe que o IBr se forme pela reação direta entre bromo e iodo.

Assim, o objetivo deste trabalho é o de investigar o desempenho destes dois modelos na simulação dos resultados experimentais² da reação relógio bromato-iodo.

As equações diferenciais que descrevem os respectivos modelos foram integradas pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem codificado em Turbo Pascal. A absorvância em 390 nm foi calculada considerando-se as concentrações de IBr ($\epsilon = 346 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$) e Br_2 ($\epsilon = 161 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$).

Resultados e Discussão

Pelas Figs. 1 e 2 observa-se que os resultados dos modelos são bem diferentes. Uma vez que os resultados experimentais (não mostrados) apresentam um máximo de absorvância em 26 s nas condições da Fig. 1 e comportamento de reação relógio nas condições da Fig. 2, fica claro que o modelo FLEK se mostra bem superior ao CS.

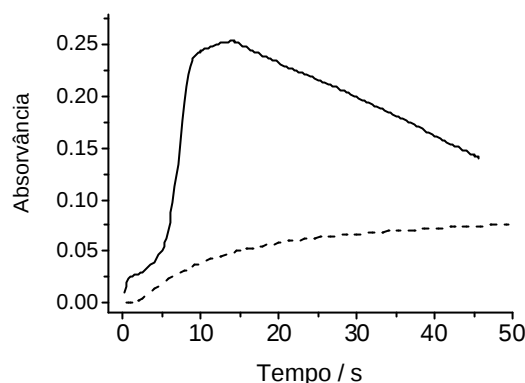


Figura 1. Modelos FLEK (—) e CS (---). $[\text{BrO}_3^-]_0 = 0,01 \text{ M}$, $[\text{I}^-]_0 = 0,001 \text{ M}$, $[\text{I}_2]_0 = 2 \times 10^{-4}$, $[\text{H}^+]_0 = 1,0 \text{ M}$.

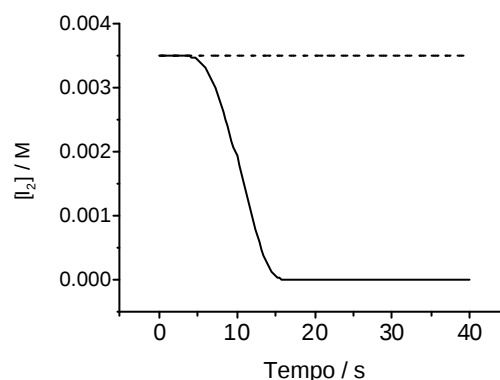


Figura 2. Modelos FLEK (—) e CS (---). $[\text{BrO}_3^-]_0 = 0,01 \text{ M}$, $[\text{I}_2]_0 = 0,0035 \text{ M}$. $[\text{H}^+]_0 = 1,0 \text{ M}$

Conclusões

Os resultados obtidos mostram que o modelo FLEK tem um comportamento consistente, sendo assim o modelo mecanístico capaz de simular o maior número de reações relógio e sistemas oscilantes até hoje produzido.

Agradecimentos

CNPq.

¹ Faria, R. B.; Lengyel, I.; Epstein, I. R. e Kustin, K. *J. Phys. Chem.* **1993**, 97, 1164.

² Chinake, R. e Simoyi, R. H. *J. Phys. Chem.* **1996**, 100, 1643.