Solução algébrica de equações cúbicas e quárticas em química analítica

Cassius K. Nascimento[1](PG), Jessé M. Oliveira[1](PG), Nelson H. T. Lemes[2](PQ)* e João P. Braga[1](PQ)

[1]Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais (31270-901) Belo Horizonte – Minas Gerais
[2]Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal de Alfenas (37130-000) Alfenas – Minas Gerais
**nelsonlemes@unifal-mg.edu.br*

Palavras Chave: *equilíbrio químico, Cardano e pH.*

Introdução

De maneira geral as reações química se iniciam com a formação dos produtos que, por sua vez, reagem para formar os reagentes, até se estabelecer um equilíbrio dinâmico, denominado equilíbrio químico. O equilíbrio químico, a uma pressão e temperatura constante, é atingido quando o produto das concentrações dos produtos dividido pelo produto das concentrações dos reagentes, com cada concentração elevada ao coeficiente estequiométrico correspondente, é igual a uma constante, denominada constante de equilíbrio.[1]

As quantidades de todas as espécies químicas no equilíbrio são obtidas pela solução de um conjunto de equações acopladas, para a constante de cada equilíbrio envolvido, para o balanço de massa e o balanço carga do sistema. Para muitos sistemas químicos no equilíbrio, quando tratados rigorosamente, resultam do rearranjo destas equações funções polinomiais de terceiro ou quarto grau.[1]

Este trabalho pretende discutir como a solução destas equações são obtidas nos livros textos de química analítica[1,2,3] e explorar a solução analítica de equações cúbicas e quárticas, baseada numa fatorização, proposta por Girolamo Cardano (1501-1576).[4]

Resultados e Discussão

O objetivo inicial será o de resolver uma equação geral do terceiro grau, que pode ser escrita na forma reduzida equivalente,

$$y^3 + py + q = 0\,.$$

A solução de (5) pode ser encontrada na forma, $y = u + v$,

$$u^3 + v^3 + (3uv + p)(u + v) + q = 0$$

Impondo a condição $3uv + p = 0$, mplicando também que $v = -p/3u$, obtém-se

$$(u^3)^2 + qu^3 - (p/3)^3 = 0$$

após multiplicação por u^3. A solução de (7), equação do segundo grau em u^3, será,

$$u^3 = -\frac{q}{2} \pm \sqrt{(\frac{q}{2})^2 + (\frac{p}{3})^3}$$

Com os valores u e v pode-se construir as soluções $y = u + v$ e consequentemente as soluções reais da equação geral.[4] Com a solução da equação polinomial do terceiro grau pode-se, facilmente, encontrar a solução analítica de uma equação quártica, conforme proposto por Ludovido Ferrari (1522-1560).[4]

A Tabela (1) apresenta resultados para alguns sistemas químicos: (a) equilíbrio químico de sais pouco solúvies, (b) ácido monoprótico fraco e (c) ácido fraco diprótico ou mistura de ácidos fracos monopróticos. Como podemos verificar, tabela (1), alguns resultados numéricos e gráficos[2,3] resultam em erros superiores a 7,0% quando comparados ao resultado analítico.

Tabela 1. Comparação do método numérico e gráfico[2,3] com a solução algébrica proposta.

Sistemas químicos estudados	Métodos numéricos*	Método algébrio, s (mol/L)
(a) $s^3 - 4\times10^{-6} = 0$	0,819%	$1{,}587\times10^{-2}$
(a) $s^3 + 0{,}15s^2 + 0{,}005625s - 4\times10^{-6} = 0$	0,0143%	$6{,}981\times10^{-4}$
(a) $s^3 + 0{,}15s^2 + 2{,}25\times10^{-6}s - 3{,}92\times10^{-10} = 0$	7,29%	$1{,}564\times10^{-4}$
(a) $s^3 + 0{,}05s^2 + 6{,}25\times10^{-4}s - 4\times10^{-6} = 0$	10,9%	$5{,}131\times10^{-3}$
(a) $s^3 + 0{,}15s^2 - 4\times10^{-6} = 0$	33,7%	$5{,}079\times10^{-3}$
(a) $s^3 + 0{,}08s^2 - 4\times10^{-6} = 0$	0,0147%	$6{,}789\times10^{-3}$
(a) $s^3 - 10^{-14}s - 1{,}42\times10^{-11} = 0$	0,0413%	$2{,}421\times10^{-4}$
(b) $s^3 + 1{,}8\times10^{-5}s^2 - 1{,}8\times10^{-6}s - 1.8\times10^{-19} = 0$	2,77%	$1{,}337\times10^{-3}$
(b) $s^3 + 3\times10^{-8}s^2 - 4\times10^{-14}s - 3\times10^{-22} = 0$	1,85%	$1{,}895\times10^{-7}$
(b) $s^3 + 6{,}2\times10^{-10}s^2 - 1{,}062\times10^{-14}s - 6{,}2\times10^{-24} = 0$	0,971%	$1{,}030\times10^{-7}$
(c) $s^4 + 8{,}75\times10^{-4}s^3 - 5{,}9413\times10^{-8}s^2 - 5{,}6175\times10^{-12}s - 2{,}8088\times10^{-22} = 0$	15,5%	$1{,}114\times10^{-4}$
(c) $s^4 + 9{,}2\times10^{-4}s^3 - 5{,}2348\times10^{-8}s^2 - 7{,}9304\times10^{-12}s - 3{,}9652\times10^{-22} = 0$	18,4%	$1{,}163\times10^{-4}$

*Erro do método numérico[2,3] em relação ao resultado algébrico.

Conclusões

As expressões estabelecidas por Cardano e Ferrari são extremamente fáceis de serem utilizadas, envolvendo somente substituições elementares. O caminho aqui aprensentado é geral e pode ser usados em outras áreas da quimica, como no cálculo do volume na equação de van der Waals.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pela ajuda financeira.

[1] Skoog, D. A.; West, D. M.; Holler, F. J.; *Fundamentals of Analytical Chemistry*, 8ª ed., Saunders College Publishing, Philadelphia, 1988.
[2] Bamdad, F.; *J. Chem. Educ.*; **2004**, 81, 758-761.
[3] Donato Jr., Henry; *J. Chem. Educ.;* **1999**, 76, 632-634.
[4] Cardano, G.; *Ars Magna, The Rules of Algebra*; Dover Publications: New York, 1968.