

Planejamento fatorial da reação de Belousov-Zhabotinsky

Bianca T. Kitagaki e Raphael Nagao*

Resumo

O planejamento fatorial é um método multivariado que possibilita com um pequeno número de experimentos extrair o máximo de informação de um sistema. Utilizamos essa metodologia a fim de quantificar o efeito da concentração de ácido malônico e bromato além da temperatura no período oscilatório da reação de Belousov-Zhabotinsky.

Palavras-chave:

Reação de Belousov-Zhabotinsky, planejamento fatorial, reações oscilantes

Introdução

A reação de Belousov-Zhabotinsky é uma reação que apresenta comportamento temporal complexo como oscilações de concentração e padrões auto-organizados espaço-temporais. De forma geral, a reação procede via oxidação de um substrato orgânico em meio ácido na presença de um catalisador metálico. Um método de adquirir valores quantitativos do efeito de parâmetros experimentais facilmente controláveis (concentração dos reagentes, temperatura, agitação, etc) no período da reação é através do planejamento fatorial [1]. Este é um método multivariado que consiste em conduzir o menor número de experimentos com a extração da maior quantidade de informações para a obtenção de uma resposta desejada [2]. Neste trabalho verificamos o efeito das concentrações de ácido malônico e bromato além da temperatura no período oscilatório da reação de Belousov-Zhabotinsky utilizando um planejamento fatorial 2³.

Resultados e Discussão

Para realizar o planejamento fatorial da reação de Belousov-Zhabotinsky foi necessária primeiramente a construção de um reator do tipo CSTR (*Continuous Stirred Tank Reactor*) para manter o período das oscilações constante. Sendo os principais fatores de relevância para a sua eficiência: o fluxo de entrada e saída, tempo de residência e agitação. Estes fatores afetam o tempo que os reagentes permanecem no reator e sua concentração. Pode-se observar na Figura 1 o período da reação Belousov-Zhabotinsky (BZ) monitorado em regime de batelada, em preto, que aumenta monotonamente com o passar do tempo. Esse comportamento pode ser explicado pela ausência do suprimento de reagentes o que mantém sua concentração inicial. Em vermelho, pode-se observar o período da reação BZ em CSTR que é mantido constante ao longo do tempo e retrata a qualidade do reator construído. Após a construção do reator CSTR foram realizados os experimentos com o planejamento fatorial 2³, vide Tabela 1. Nesse caso optou-se em manter constantes as concentrações de ácido sulfúrico, ferroína e a agitação. Portanto, foram usados como parâmetros experimentais de controle as concentrações de bromato de sódio, ácido malônico e temperatura. Pode-se observar que todos os parâmetros estudados têm grande influência no período da reação. Essa influência será quantificada, permitindo obter o controle do período oscilatório com eficácia.

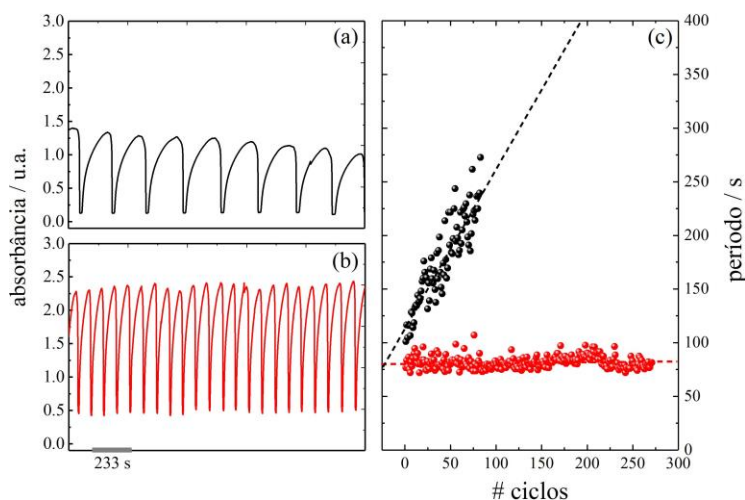


Figura 1. Período da reação de Belousov-Zhabotinsky em batelada (preto) e em CSTR (vermelho).

Tabela 1. Experimentos do planejamento fatorial.

[NaBrO ₃] (mol/L)	[MA] (mol/L)	Temperatura (°C)	Período (s)	Desvio Padrão
0,1	0,02	40	64,4	8,2
0,1	0,02	30	124,9	19,9
0,3	0,02	40	16,9	1,8
0,3	0,02	30	26,5	1,5
0,3	0,05	40	14,2	0,7
0,3	0,05	30	23,6	1,4
0,1	0,05	30	65,9	9,0

Conclusões

Pode-se concluir que é possível obter o controle do período de reações oscilatórias a partir da construção do CSTR e aplicação do planejamento fatorial.

Agradecimentos

Os autores agradecem à FAPESP (2017/22387-5 e 2016/01817-9) pelo auxílio financeiro.

¹Scott, S. K., *Oscillations, Waves, and Chaos in Chemical Kinetics*, 1994

² BARROS NETO, Benício de. *Como fazer experimentos: pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria*. Coautoria de Ieda Spacino Scarmínio, Roy Edward Bruns. 4. ed. Porto Alegre, RS: Bookman, 2010. 413 p., il. ISBN 9788577806522 (broch.).