

INSTITUTO FEDERAL

Sertão Pernambucano

**INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO SERTÃO
PERNAMBUCANO**

**COORDENAÇÃO DO CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA
CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA**

MELQUISEDEK SANTOS DA LUZ

**Eletrólise da Água: Investigação experimental do impacto da diferença de
potencial e da concentração de NaOH na produção dos gases H_2 e O_2**

SALGUEIRO

2025

MELQUISEDEK SANTOS DA LUZ

Eletrólise da Água: Investigação experimental do impacto da diferença de potencial e da concentração de NaOH na produção dos gases H₂ e O₂

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado a Coordenação do curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano, campus Salgueiro, como requisito parcial à obtenção do título de licenciado em Física.

Orientador(a): Prof. Eriverton Rodrigues da Silva.

Coorientador(a) Prof. Samuel dos Santos Feitosa

SALGUEIRO

2025

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

L979 Luz, Melquisedek Santos.

Eletrólise da Água: : Investigação experimental do impacto da diferença de potencial e da concentração de NaOH na produção dos gases H₂ e O₂ / Melquisedek Santos Luz. - Salgueiro, 2025.
80 f. : il.

Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Física) -Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano, Campus Salgueiro, 2025.
Orientação: Prof. Dr. Eriverton Rodrigues da Silva.
Coorientação: Msc. Samuel dos Santos Feitosa.

1. Física. 2. Eletroquímica. 3. Eletrólise da água. 4. Produção de hidrogênio. 5. Hidróxido de Sódio. I. Título.

CDD 530

MELQUISEDEK SANTOS DA LUZ

Eletrólise da Água: Investigação experimental do impacto da diferença de potencial e da concentração de NaOH na produção dos gases H₂ e O₂

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado a Coordenação do curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano, campus Salgueiro, como requisito parcial à obtenção do título de licenciado em Física.

Aprovado em: ___/___/_____.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Eriverton Rodrigues da Silva
IF Sertão PE – Campus Salgueiro

Prof. Samuel dos Santos Feitosa
IF Sertão PE – Campus Salgueiro

Prof. Carlos Daniel Frazao
Escola de Referência em Ensino Médio Aura Sampaio

SALGUEIRO

2025

Dedicatória.

A todos àqueles que acreditaram e
forneceram apoio para a conclusão desta
jornada.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Eriverton Rodrigues, pela excelente orientação e por todo o apoio prestado ao longo deste trabalho, que foram fundamentais para o sucesso desta jornada.

Agradeço ao CNPq pelo apoio fundamental que contribuiu significativamente para a realização deste projeto.

Aos professores da banca examinadora, assim como àqueles que contribuíram para minha formação ao longo do curso, pelo compartilhamento de conhecimentos valiosos que puderam contribuir para este estudo.

Agradeço também aos meus colegas de curso, pelo apoio constante e pelo incentivo, que foram essenciais para que eu perseverasse durante esta caminhada.

Finalmente, à minha família e amigos, por todo o suporte emocional e motivacional que me proporcionaram, sempre acreditando na realização deste objetivo.

“Tudo é água” – Tales de Mileto.

RESUMO

Diante da busca por fontes de energia sustentáveis, o hidrogênio verde tem sido um tema bastante recorrente por ser um excelente portador de energia, sendo defendido por muitos como o combustível do futuro. Este trabalho investigou os fatores que influenciam a produção de hidrogênio e oxigênio durante a eletrólise da água, com foco na diferença de potencial aplicada na célula eletrolítica e na concentração de eletrólitos. O eletrólito usado no estudo foi o hidróxido de sódio, NaOH, dissolvido em água destilada. Os resultados experimentais demonstraram que o aumento da concentração de NaOH na solução e da diferença de potencial aplicada resultam em maiores taxas de produção dos gases. Os resultados experimentais obtidos estão em concordância a teoria eletroquímica. A quantidade de gás liberada nos eletrodos aumenta linearmente com o tempo, sendo o volume de gás produzido no cátodo aproximadamente o dobro do volume liberado no ânodo. O aumento da diferença de potencial acelera o movimento dos íons na solução, promovendo um maior fluxo de elétrons e aumentando a eficiência das reações nos eletrodos, o que se traduz em uma produção mais rápida de H₂ e O₂.

Palavras-chave: Eletrólise da água. Produção de hidrogênio. Hidróxido de Sódio.

ABSTRACT

Amidst the search for sustainable energy sources, green hydrogen has become a recurring topic due to its potential as an excellent energy carrier, with many advocating it as the fuel of the future. This study investigated the factors influencing hydrogen and oxygen production during water electrolysis, focusing on the applied potential difference in the electrolytic cell and electrolyte concentration. The electrolyte used in this study was sodium hydroxide, NaOH, dissolved in distilled water. Experimental results showed that increasing the NaOH concentration in the solution and the applied potential difference led to higher gas production rates. The experimental findings align with electrochemical theory. The amount of gas released at the electrodes increases linearly over time, with the volume of gas produced at the cathode being approximately twice the volume released at the anode. The increase in potential difference accelerates ion movement in the solution, promoting a greater electron flow and enhancing reaction efficiency at the electrodes, resulting in faster production of H₂ and O₂.

Keywords: Water electrolysis. Hydrogen production. Sodium hydroxide.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Representação esquemática de um tubo de raios catódicos.....	27
Figura 2: Modelo atômico de Thomson (pudim de passas).....	28
Figura 3: Representação esquemática do experimento de Rutherford.....	29
Figura 4: Comparação entre os modelos de Thomson e Rutherford.....	30
Figura 5: Modelo atômico de Bohr.....	32
Figura 6: Decomposição da luz do hidrogênio através de um prisma.....	32
Figura 7: Espectro de emissão do hidrogênio.....	33
Figura 8: Estrutura do átomo de hélio.....	34
Figura 9: Ilustração gráfica do Princípio de Indeterminação de Heisenberg.....	37
Figura 10: Orbital 1s do átomo de hidrogênio.....	40
Figura 11: Formas dos orbitais do átomo de hidrogênio.....	41
Figura 12: Ilustração das camadas eletrônicas no sódio.....	43
Figura 13: Representação do retículo cristalino iônico.....	45
Figura 14: Representação da nuvem eletrônica na molécula de H ₂	47
Figura 15: Representação molecular da reação entre H ₂ e O ₂	48
Figura 16: Representação esquemática da molécula de água.....	49
Figura 17: Distribuição de elétrons na molécula de água.....	50
Figura 18: Representação das pontes de hidrogênio.....	51
Figura 19: Ilustração da solvatação.....	53
Figura 20: Ilustração de uma célula eletrolítica.....	54
Figura 21: Fluxograma do processo de eletrólise.....	56
Figura 22: Ilustração do processo Volmer – Heyrovsky.....	58
Figura 23: Ilustração do processo Volmer – Tafel.....	59
Figura 24: Medição da temperatura da solução eletrolítica.....	66
Figura 25: Fonte de alimentação POL-16E.....	67
Figura 26: Voltâmetro de Hoffmann.....	68
Figura 27: Fluxograma da metodologia.....	70

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1: Distribuição de probabilidade radial dos orbitais 1s,2s e 3s.....	41
Gráfico 2: Calor liberado durante a combustão de diferentes combustíveis.....	62
Gráfico 3: Produção global de hidrogênio.....	63
Gráfico 4: Emissões totais de CO ₂ por ano.....	64
Gráfico 5: Temperatura da solução nos 12 primeiros ensaios.....	71
Gráfico 6: Volume dos gases H ₂ e O ₂ em função do tempo.....	73
Gráfico 7: Evolução do H ₂ e O ₂	74
Gráfico 8: Taxas de produção em função da diferença de potencial.....	75
Gráfico 9: Razão entre as taxas.....	76
Gráfico 10: Taxas vs Tensão.....	77
Gráfico 11: Efeitos da concentração de eletrólitos nas taxas de produção.....	78
Gráfico 12: Resistência em diferentes concentrações de eletrólito.....	79

Sumário

1. INTRODUÇÃO	14
2. REVISÃO DE LITERATURA	16
2.1. Filósofos pré-socráticos e a gênese do átomo	16
2.1.1. <i>Contexto histórico e cultural da origem dos pré-socráticos</i>	16
2.1.2. <i>Heráclito e Parmênides: Mutabilidade vs Imutabilidade</i>	18
2.1.3. <i>O atomismo</i>	19
2.2. Estrutura atômica na ciência moderna	20
2.2.1. <i>Modelo da bola de bilhar</i>	21
2.2.2. <i>Modelo de pudim de passas</i>	23
2.2.3. <i>Modelo nuclear</i>	25
2.2.4. <i>Niels Bohr e o átomo de hidrogênio</i>	28
2.2.5. <i>Estrutura nuclear do átomo</i>	30
2.3. Modelo atômico da Mecânica Quântica.....	32
2.3.1. <i>Natureza ondulatória da matéria</i>	32
2.3.2. <i>Princípio de Indeterminação de Heisenberg</i>	33
2.3.3. <i>A Função de onda e a Equação de Schrödinger</i>	35
2.3.4. <i>Orbitais atômicos</i>	36
2.4. Formação de moléculas e ligações químicas	39
2.4.1. <i>Configuração eletrônica</i>	39
2.4.2. <i>Teoria do Octeto</i>	40
2.4.3. <i>Ligações químicas</i>	41
2.5. Estrutura molecular do H ₂ O.....	44
2.6. Solução de NaOH(aq)	49
2.7. Eletrólise.....	50

2.7.1.	<i>Célula eletrolítica</i>	51
2.7.2.	<i>Processos químicos na eletrólise da água</i>	52
2.7.3.	<i>Reações de Evolução do Hidrogênio (HER)</i>	54
2.7.4.	<i>Leis de Faraday da eletrólise</i>	56
2.7.5.	<i>Hidrogênio verde e o meio ambiente</i>	58
3.	METODOLOGIA.....	62
3.1.	Etapa 1: Preparo da solução eletrolítica.....	62
3.2.	Etapa 2: Controle das variáveis.....	62
3.3.	Etapa 3: Equipamentos e procedimentos experimentais.....	64
3.4.	Etapa 4: Coleta e análise dos dados.....	65
4.	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	68
4.1.	Influência da diferença de potencial elétrico.....	68
4.2.	Influência da concentração do eletrólito.....	74
5.	CONCLUSÃO.....	76
6.	BIBLIOGRAFIA.....	78

1. INTRODUÇÃO

Desde a antiguidade, o estudo da natureza da matéria, sua estrutura e da forma como ela se transforma tem sido um tema de grande importância nas ciências naturais. Ao longo do tempo, muitas teorias foram propostas, questionadas e refinadas, resultando na constante evolução do conhecimento.

O debate sobre a natureza e as transformações da matéria tem uma longa história, que se inicia a partir das contribuições dos filósofos pré-socráticos na Grécia Antiga, avança com os progressos científicos da Idade Moderna e então chega à Idade Contemporânea.

Antes mesmo do desenvolvimento da ciência, o homem buscava formas de descrever a natureza através dos mitos. No entanto, com o surgimento da ciência, as descrições passaram a utilizar uma linguagem mais precisa, se distanciando das antropopatias, que personificam a natureza com sentimentos humanos e relações pessoais. Um exemplo notável disso é o mito grego de Deméter e Perséfone, que se trata de uma narrativa simbólica que descreve as mudanças sazonais no ambiente ao longo do ano. Deméter, deusa da agricultura, representa a fertilidade da terra, isto é, a capacidade fazer as plantas germinarem, enquanto Perséfone, sua filha, personifica o florescimento e crescimento das plantas, sendo a deusa da primavera.

Perséfone foi raptada por Hades para ser a rainha do submundo, sendo levada através do solo que se abriu. Isso deixou Deméter em profunda tristeza. Negligenciando seu trabalho, ela causou seca e infertilidade à terra, punindo Gaia, a personificação da terra, que foi cúmplice no sequestro. Após uma série de eventos, decidiu-se que Perséfone passaria metade do ano com Hades e a outra metade com sua mãe. Sua ausência resultava nas transformações do outono e inverno, enquanto seu retorno fazia a alegria de Deméter florescer, resultando na primavera e no verão. Esse ciclo reflete as mudanças na natureza ao longo das estações.

O mito de Deméter e Perséfone ilustra como os gregos percebiam as transformações cíclicas da natureza, descrevendo as mudanças do ambiente ao longo das estações. Embora essas mudanças sempre tenham ocorrido, na era contemporânea é testemunhado outro tipo de mudança, que são aquelas resultantes das atividades humanas. Diferentemente do curso natural mencionado, que é cíclico, essas mudanças climáticas são contínuas e irreversíveis, e suas consequências exigem uma reavaliação urgente na relação entre o homem e o planeta.

Atualmente, a relação entre o ser humano e o meio ambiente é uma preocupação crescente, especialmente no contexto do desenvolvimento sustentável. Muitas fontes de energia são nocivas ao meio ambiente, tornando necessária a busca por alternativas que minimizem esses efeitos e possam mitigar as consequências, garantindo um futuro verde. Entre essas alternativas, o hidrogênio tem se destacado como uma opção promissora por se mostrar um ótimo portador de energia. A razão disso é explicada por Zaman et al (2021, p. 1):

Hoje em dia, o hidrogênio como fonte de energia tem despertado grande interesse devido a várias qualidades notáveis, como sua natureza renovável, elevado conteúdo energético gravimétrico ($\sim 142 \text{ MJkg}^{-1}$) e produto de combustão sem emissão de gases de efeito estufa (ZAMAN; NOOR; IQBAL, 2021, p. 1, tradução nossa).

Isso significa que cada quilograma de hidrogênio pode liberar aproximadamente 142 megajoules de energia quando queimado. O autor explica que essa queima não gera subprodutos nocivos, apenas ar quente e vapor d'água, o que significa que é uma boa opção de combustível.

Uma das formas de se obter hidrogênio molecular é através da eletrólise da água, que é um fenômeno eletroquímico. A química é a ciência que estuda as transformações da matéria, assim, a eletroquímica é uma área interdisciplinar que está na intersecção entre a física e a química, estudando as transformações da matéria capazes de gerar corrente elétrica e as transformações que são causadas por uma corrente elétrica. Isso significa conversões de energia química em energia elétrica e vice-versa.

Assim, a eletrólise é o processo eletroquímico específico em que uma corrente elétrica induz uma reação química de decomposição. Dessa forma, é possível remover o hidrogênio da água em um dispositivo chamado célula eletrolítica.

A corrente elétrica em um material condutor é gerada por uma diferença de potencial elétrico. A água pura, contudo, não conduz corrente elétrica, sendo necessário o uso de eletrólitos para formar uma solução eletrolítica. Um eletrólito é uma substância que quando é adicionada à água, a torna capaz de conduzir uma corrente elétrica, como o hidróxido de sódio, NaOH, por exemplo. Assim, a concentração de eletrólitos apresenta influência na eficiência do processo de eletrólise, visto que quanto maior a concentração, maior será a quantidade de íons

presentes na água, o que, por sua vez, resulta na melhoria de sua condutividade elétrica.

Além disso, há diversos outros fatores que apresentam melhoria no processo, como a diferença de potencial elétrico que é aplicada à célula eletrolítica, responsável pela intensidade da corrente elétrica. Diante disso, este trabalho tem como objetivo investigar experimentalmente como a diferença de potencial e a concentração de NaOH influenciam a eficiência do processo de produção das substâncias gasosas H₂ e O₂.

2. REVISÃO DE LITERATURA

A teoria atômica se consolidou como a base da física e da química moderna, sendo essencial para descrever os processos de transformação da matéria através de reações químicas. O conceito de átomo surgiu em um período conhecido como transição do *mythos* ao *logos*, que representa o nascimento da ciência e filosofia grega.

2.1. Filósofos pré-socráticos e a gênese do átomo

Entre os séculos VII a.C. e V a.C., na Grécia Antiga, surgiu a primeira geração de filósofos gregos, que são conhecidos como filósofos pré-socráticos, responsáveis por lançar as bases do pensamento ocidental. O principal objetivo deles era entender o Universo e os fenômenos naturais através da razão. Eles desenvolveram uma forma alternativa de entender a realidade que se distanciava da forma padrão da época, que era através dos mitos. Essa busca por explicações racionais para o funcionamento da natureza é considerada o embrião do que, mais tarde, se desenvolveria como a ciência moderna.

2.1.1. Contexto histórico e cultural da origem dos pré-socráticos

A produção de conhecimento da civilização grega se destacou como uma exceção, despertando o interesse de historiadores e antropólogos que buscam

explicar o porquê desses filósofos optaram por descrições não mitológicas. Pires (2011) destaca:

[...] Para uns isso foi causado pelo fato de que eles viviam na costa da Ásia Menor, cercados por várias nações em um estado de civilizações mais adiantado do que aquele da Grécia, cujas explicações mitológicas diferiam enormemente, não só entre si, mas também daquelas dos gregos. Parecia necessário, portanto, seguir um caminho novo buscando explicações a partir das observações do mundo (PIRES, 2011, p. 14).

De acordo com o historiador e antropólogo Jean Pierre Vernant (1914-2007), o emprego da razão (o *logos*) nas investigações da natureza está vinculado à pólis (em grego πόλις), um modelo político de sociedade onde os cidadãos participavam ativamente nas decisões coletivas, expressando suas ideias através de debates nas ágoras (COTRIM e FERNANDES, 2016, p. 205-207). As ágoras eram praças públicas nas cidades-Estado gregas, onde se reuniam para debater questões políticas. Os debates em praças públicas eram uma característica notável da vida cívica dos gregos desse período, com o poder de decisão centrado no povo.

Cotrim e Fernandes (2016, p. 205-207) explicam que na concepção de Vernant essa forma de organização social teve uma importância substancial para o pensamento grego, pois esse aspecto cultural característico dessas cidades (democracia), contribuiu significativamente para o desenvolvimento das habilidades de argumentação e raciocínio lógico, uma vez que eles precisavam apresentar suas ideias de forma clara e convincente uns para os outros. Assim, o uso da razão tornou-se essencial na tentativa de persuadir os demais de suas ideias.

Com o desenvolvimento da democracia, a diferença fundamental da Grécia Antiga em relação às outras culturas é que, enquanto as outras culturas comumente atribuíam o poder de definir seu sistema de leis a divindades, os gregos tinham a consciência de que eles mesmos eram responsáveis por formar a sociedade através de seu sistema democrático.

Assim, para Vernant, ao longo do tempo a razão se expandiu para além do aspecto político e passou a se fazer presente também nas reflexões sobre a natureza. Para ele, a razão grega é filha da pólis. Nesse contexto, ocorreu uma importante transição do pensamento mítico para o pensamento racional (transição do *mythos* ao *logos*), onde, ao descrever os fenômenos da natureza, os mitos foram substituídos por explicações racionais (COTRIM e FERNANDES, 2016, p. 205-207).

Cabe destacar, contudo, que esse tipo de transição é um processo gradual. Essa mudança de paradigma foi um marco significativo na história, pois é amplamente reconhecida como a origem da ciência. Nesse período entram em cena os filósofos pré-socráticos cujas ideias prepararam o terreno para o desenvolvimento do conceito de átomo.

2.1.2. Heráclito e Parmênides: Mutabilidade vs Imutabilidade

A teoria atômica emerge não apenas como uma tentativa de descrever a constituição da matéria, mas também como uma resposta a um problema, que é o dilema entre as teorias de Heráclito e Parmênides (século VI a.C.). A teoria atômica propõe unificar os pontos discutidos pelos dois pensadores.

Heráclito Éfeso é conhecido por sua perspectiva sobre o devir, isto é, a concepção de que tudo está em constante transformação e movimento. De acordo com Heráclito, nada é permanente, exceto a própria mudança, que é um fluxo de constantes transformações que ocorrem na natureza. Segundo ele, “tu não podes descer duas vezes no mesmo rio, porque novas águas correm sobre ti” (SOUZA, 1996, p. 32). Com essa frase, o pensador ilustra sua ideia sobre o devir. Ao entrar no rio pela segunda vez, ele está com uma nova configuração, o que significa que o antigo rio já não existe.

Parmênides de Eleia, por outro lado, ficou conhecido por seu princípio de imutabilidade da natureza, o qual propunha que a realidade é constituída de uma única e eterna essência, sendo as transformações da matéria meras ilusões.

Parmênides expressou suas ideias através de seu poema Sobre a Natureza, onde ele argumentou que as mudanças não podem acontecer, pois elas exigem uma existência anterior e uma existência posterior de tal forma que o objeto antes da mudança deixou de existir enquanto o objeto depois da mudança passou a existir, o que Parmênides considerava absurdo. Para ele, isso implicaria na admissão da não-existência, na passagem da existência para a não-existência e vice-versa (PARMÊNIDES, 2002, p. 4, tradução de José Gabriel Trindade Santos).

A ideia de Parmênides pode ser exemplificada durante a transição das estações, com uma folha verde e macia cuja cor e textura mudam com o tempo, tornando-se uma folha seca. Após secar, a folha verde deixou de existir, enquanto a

folha seca, que antes não existia, passou a existir. Parmênides argumentou que as coisas não podiam deixar de existir e nem passar a existir, portanto as mudanças não poderiam acontecer, concluindo, então, que as experiências sensíveis são ilusórias. Assim, ele endossa a ideia de que a única forma de se chegar ao conhecimento verdadeiro é utilizando a razão como metodologia, pois aquilo que os sentidos revelam é enganoso.

A concepção de Heráclito é revelada naturalmente pelos sentidos enquanto a concepção de Parmênides é alcançada pela razão. Essa discussão sobre o ser e o vir a ser lançou as bases para debates posteriores que buscaram explicar a natureza da realidade. Nesse contexto de disputa filosófica entre mutabilidade e imutabilidade encontra-se a gênese da teoria atômica.

2.1.3. O atomismo

Leucipo e Demócrito foram dois filósofos pré-socráticos da Grécia Antiga que fizeram contribuições significativas para a evolução do conhecimento. Leucipo é reconhecido como o fundador da teoria atômica. Seu discípulo, Demócrito, aderiu, refinou e ajudou a difundir essas ideias. Toribio (2012) destaca a motivação:

O objetivo dos atomistas era reconciliar o pensamento de imutabilidade de Parmênides com o pensamento do devir de Heráclito. Para eles se uma substância imutável pode construir o mundo mutável, não existe contradição entre as duas tendências de pensamento, sendo a substância imutável - o átomo (TORIBIO, 2012, p. 15).

Segundo a perspectiva de Leucipo e Demócrito, conforme destacado por Porto (2013, p. 2), a estrutura do universo material é constituída de uma quantidade infinita dessas partículas minúsculas, que são incriáveis e indestrutíveis. Para eles, suas propriedades são unicamente os seus tamanhos e estrutura morfológica, bem como sua característica indivisível. Etimologicamente, o termo “átomo” vem do grego ἄτομος (*átomos*), que significa “não divisível”. Pires (2011) explica:

Os átomos, corpúsculos sólidos, existiam em uma infinidade de formas, possuíam ganchos e engates que os permitiam combinar-se entre si, explicando assim a variedade das substâncias existentes. Uma variedade de átomos não podia se transformar em outra embora todas fossem feitas a partir de uma matéria prima fundamental chamada *protos* (primeiro, em grego) (PIRES, 2011, p. 26).

A conciliação entre o princípio de imutabilidade de Parmênides e o conceito de devir de Heráclito foi alcançada através da teoria atômica. Com isso, foi possível descrever a natureza a partir de diferentes combinações desses átomos, de forma que eles podem se juntar ou se separar, promovendo as mudanças perceptíveis pelos sentidos, conforme propõe Heráclito, sem, contudo, violar a lógica de Parmênides, uma vez que os átomos, em sua essência, permanecem inalterados. Isso contornou o problema físico/filosófico de como as coisas poderiam surgir ou deixar de existir durante as mudanças.

É importante destacar, contudo, que as contribuições dos pensadores da Antiguidade Clássica são de natureza filosófica, isto é, são concepções baseadas na razão, não na experimentação, que é uma característica fundamental da ciência moderna desde a Revolução Científica que ocorreu no Renascimento.

Embora o atomismo da Antiguidade Clássica tenha sido uma importante contribuição para o entendimento da estrutura da matéria, devido às limitações tecnológicas e metodológicas a teoria do átomo não teve contribuições significativas até o século XIX, quando o químico inglês John Dalton se dedicou ao tema e refinou o modelo de átomo.

Além disso, Aristóteles, que possuía uma grande influência entre os pensadores da época, apresentou uma visão que contrapõe à escola atomista, outro fator que pode ter contribuído para o atomismo não ser amplamente aceito durante esse período.

De acordo com Burns (2011, p. 88), a maioria dos filósofos gregos da antiguidade acreditava que a matéria era contínua e poderia ser dividida indefinidamente em partes cada vez menores. Eles pensavam que gotas d'água, por exemplo, poderiam ser divididas indefinidamente em gotas cada vez menores, tratando-se de uma visão não atomística do cosmos que predominou por cerca de dois milênios. Foram necessários os trabalhos de muitos cientistas para derrubar os diferentes pilares da física aristotélica, seja concernente ao movimento, à forma do Universo ou à estrutura da matéria.

2.2. Estrutura atômica na ciência moderna

Durante a Idade Média, na Europa Ocidental houve uma lacuna notável na produção de literatura científica. Após o colapso do Império Romano e a proliferação do sistema feudal houve uma ruptura no contato cultural com o Oriente. Isso resultou na perda do acesso a muitos textos científicos e filosóficos gregos que não haviam sido traduzidos para o latim. A língua grega era a língua da ciência na antiguidade e foi esquecida na maior parte da Europa Ocidental. Caruso e Oguri (1996, p.123) destacam:

Durante a Idade Média, o homem torna-se o centro dos interesses e de suas próprias preocupações, e o atomismo, enquanto doutrina filosófica, é praticamente abandonado. O olhar do homem volta-se para questões humanísticas e espirituais, dirigindo-se a Deus (CARUSO; OGURI, 1996, p. 123).

Essa lacuna, contudo, durou até o período conhecido como Renascimento (ou Renascença), quando renasce o interesse pela literatura, arte, ciência e filosofia grega, onde muitos textos clássicos que outrora haviam sido esquecidos são redescobertos e traduzidos para o latim, ganhando um público notório. Caruso e Oguri (1996, p.123) destacam:

Com o início da Renascença Italiana, surgiu um crescente interesse em relação à Natureza. Foi nos séculos XVI e XVII que a Ciência Natural recebeu grande impulso. Sabe-se que a origem do método científico contemporâneo é atribuída a Galileu, pois ele combinou de forma indissolúvel o conhecimento empírico com a Matemática (CARUSO; OGURI, 1996, p. 123).

Nesse período ocorre uma grande revolução na ciência, não só devido a mudanças de paradigma na ciência, mas também pela própria forma de se fazer ciência. Durante esse período, os estudos científicos começaram a incorporar a experimentação e a linguagem matemática na descrição dos fenômenos naturais, uma abordagem que demonstrou ser um grande sucesso na história da ciência. Essa nova maneira de conduzir a investigação científica é o que comumente é chamado de ciência moderna.

2.2.1. Modelo da bola de bilhar

Quando os cientistas desenvolveram técnicas para medir quantidades de elementos que reagiam uns com os outros para formar novas substâncias, foi possível notar certas proporções que demonstravam ser fixas. Por exemplo, o processo de

queima de hidrogênio na presença de oxigênio para formar água (reação de síntese) sempre ocorre na proporção 1:8 de massa de hidrogênio para massa de oxigênio. Antes da teoria atômica ressurgir na Europa, o motivo para essas proporções nas reações químicas não era claro, uma vez que não havia um mecanismo que explicasse. Como destacado por Lopes (2016, p. 44), nesse contexto o terreno encontrava-se em estado de fertilidade para o desenvolvimento de uma teoria atômica, que surgiu com o trabalho de John Dalton, entre 1803 e 1807. De acordo com o mesmo autor, o modelo atômico de Dalton se baseia em quatro postulados:

- I. Todo elemento é composto por partículas extremamente pequenas chamadas átomos.
- II. Todos os átomos de um dado elemento são idênticos, porém os átomos de um elemento são diferentes dos outros átomos de todos os outros elementos.
- III. Os átomos de um elemento não podem ser convertidos em outros átomos de outro elemento por meio de reações químicas; átomos não podem ser criados ou destruídos em reações químicas.
- IV. Os compostos são formados quando átomos de mais de um elemento se combinam; um dado composto sempre tem o mesmo número relativo e os mesmo tipos de átomos.

A teoria atômica de Dalton, quando proposta, demonstrou um grande poder explicativo para uma série de observações da época. Uma dessas observações, por exemplo, foi a lei de conservação de massa, um princípio fundamental na química formulado por Antoine Lavoisier. Esta lei afirma que a massa total não muda durante uma reação química. A teoria de Dalton forneceu a explicação microscópica para essa lei a partir do postulado de que os átomos não são criados ou destruídos em uma reação química, apenas rearranjados. Isso significa que a massa total dos átomos envolvidos deve permanecer constante.

Outro êxito da teoria de Dalton foi o esclarecimento da lei de proporções constantes, que estabelece que em qualquer substância pura, os elementos constituintes estão sempre presentes em proporções fixas por massa. Por exemplo, como já citado, a água, independentemente da quantidade, é formada pela reação do hidrogênio com o oxigênio na proporção de massa 1:8. Esta constância nas proporções é um reflexo direto dos postulados de Dalton, que afirma que os átomos de um mesmo elemento são idênticos em massa e que os compostos são formados por combinações de átomos de diferentes elementos.

Além de explicar fatos já conhecidos, Dalton foi capaz de prever novos, o que é característica de uma boa teoria. Baseado em sua teoria atômica, ele propôs a lei de proporções múltiplas. Essa lei afirma que quando dois elementos formam mais de um composto, as massas de um elemento que se combinam com uma massa fixa do outro estão em uma proporção de números inteiros. Um exemplo disso é a relação entre o carbono e o oxigênio, que podem se combinar para formar monóxido de carbono (CO) ou dióxido de carbono (CO₂). Observa-se que a quantidade de carbono permanece constante, com apenas um átomo em ambas as substâncias, enquanto a quantidade de oxigênio varia. No monóxido de carbono, há apenas um átomo de oxigênio, enquanto no dióxido de carbono, há dois átomos de oxigênio. Portanto, a proporção de massa entre eles é 1:2, ou seja, uma proporção de números inteiros, conforme previsto por Dalton.

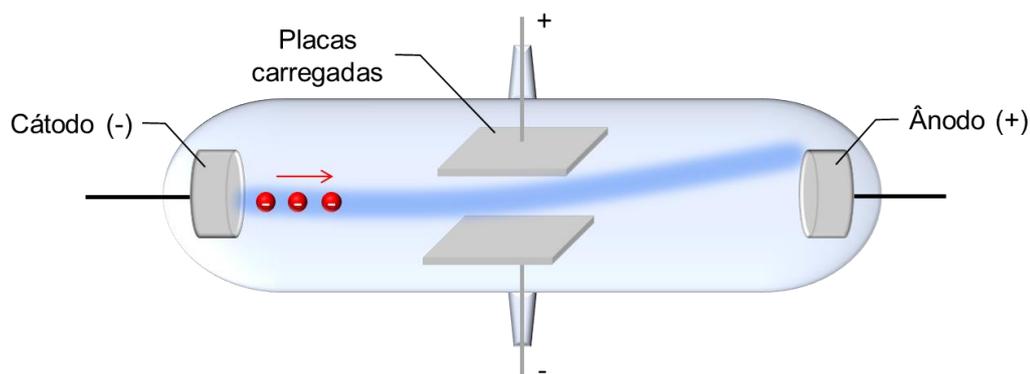
Posteriormente, devido a novas observações, o modelo atômico de Dalton, também conhecido como modelo da bola de bilhar, se mostrou ser incompleto e foi refinado por outros cientistas.

2.2.2. Modelo de pudim de passas

Em outubro de 1897, Thomson publicou um artigo intitulado *Cathode Rays* na revista *Philosophical Magazine*. Nesse artigo, Thomson descreve seus experimentos com o tubo de raios catódicos, também conhecido como ampola de Crookes, onde apresenta a primeira evidência experimental da estrutura interna do átomo.

O dispositivo que Thomson utilizou consistia em um tubo de vidro do qual quase todo o ar havia sido removido, criando, portanto, um vácuo. Dois eletrodos metálicos foram instalados nas extremidades do tubo. Tais eletrodos são chamados de cátodo, que é o eletrodo ligado ao terminal negativo da bateria, e ânodo, que é ligado ao terminal positivo. Ao gerar uma diferença de potencial elétrico nos eletrodos, um feixe de partículas é gerado. Esse feixe de partículas é conhecido como raios catódicos, que viajam do cátodo para o ânodo (Figura 1).

Figura 1: Representação esquemática de um tubo de raios catódicos



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

Estudando a natureza desses raios, Thomson (1897) chegou à importante conclusão:

Os raios catódicos carregam uma carga de eletricidade negativa, são desviados por uma força eletrostática como se estivessem negativamente eletrificados e são atuados por uma força magnética exatamente da maneira que essa força atuaria em um corpo negativamente eletrificado movendo-se ao longo do caminho desses raios. Não vejo como escapar da conclusão de que eles são cargas de eletricidade negativa carregadas por partículas de matéria (THOMSON, 1897, p. 302, tradução nossa).

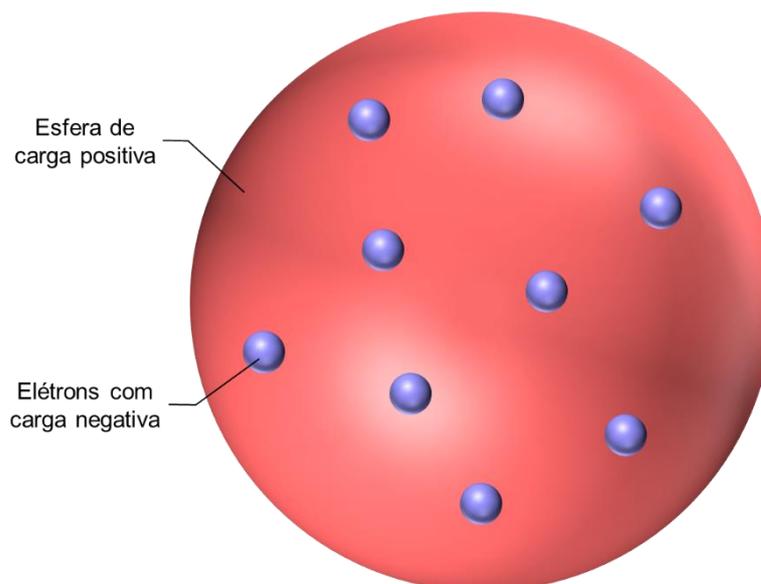
Os experimentos de Thomson mostraram que os campos elétricos e magnéticos provocam desvios nas trajetórias dos raios catódicos da mesma forma como se espera de um feixe de partículas com carga elétrica negativa. Ele chamou essas partículas de elétrons.

Thomson conduziu seus experimentos usando diferentes gases no tubo e também com diferentes materiais para os eletrodos. Os mesmos efeitos eram observados independentemente da natureza dos materiais. Essas partículas pareciam ser, portanto, comuns a todos os átomos.

Thomson elabora, então, o seu modelo atômico, que ficou conhecido como modelo de pudim de passas. Ele descreveu o átomo como uma esfera com os elétrons incrustados nela, como as passas em um pudim.

Sabendo que os átomos eram eletricamente neutros e os elétrons possuíam carga negativa, ele concluiu que a esfera, onde estão incrustados os elétrons, deve possuir carga positiva, distribuída uniformemente (Figura 2).

Figura 2: Modelo atômico de Thomson (pudim de passas)



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

A partir dos seus experimentos, Thomson determinou a razão entre a carga do elétron e sua massa, $\frac{e}{m}$, que foi de $-1,76 \times 10^8 \text{ C/g}$. Dessa forma, conhecendo uma das grandezas é possível calcular a outra. Robert Andrews Millikan, um físico experimental dos EUA, realizou um experimento que permitiu determinar a carga do elétron. Ele observou o comportamento de pequenas gotas de óleo que adquiriram cargas estáticas dos íons presentes no ar. Aplicando um campo elétrico, Millikan conseguiu suspender as gotas carregadas no ar e acompanhar seus movimentos com um microscópio. Partindo disso ele determinou que a carga do elétron era de $-1,6022 \times 10^{-19} \text{ C}$ (CHANG; GOLDSBY, 2013, p. 42).

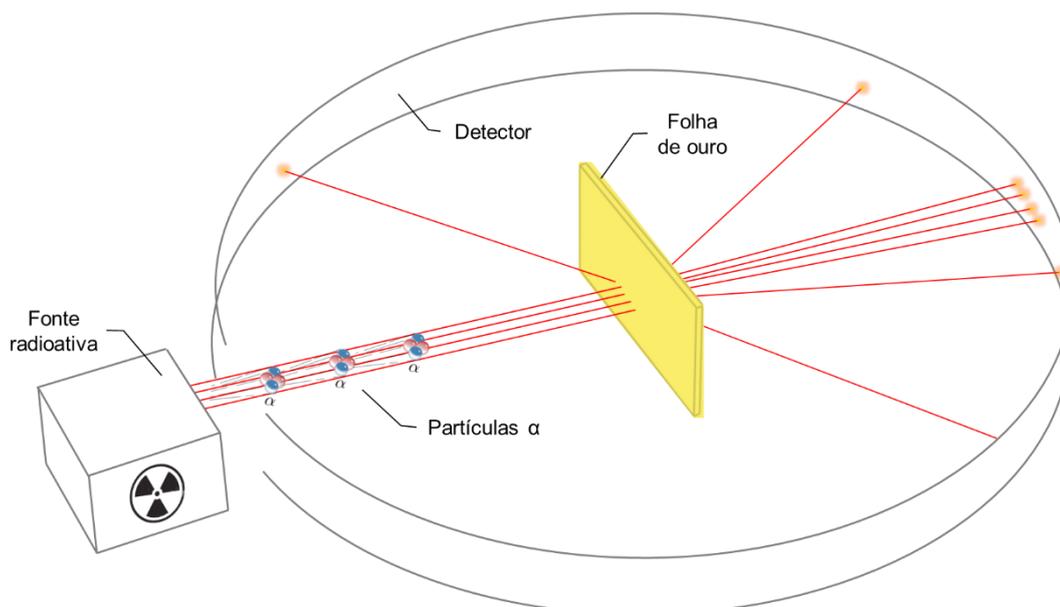
Usando a razão $\frac{e}{m}$ determinada por Thomson e o valor que encontrou para a carga do elétron, Millikan ele encontrou o valor de $9,10 \times 10^{-28} \text{ g}$ para a massa do elétron. Esse valor é aproximadamente 2.000 vezes menor do que a massa do núcleo de hidrogênio (próton). “Thomson argumentou que, uma vez que os elétrons contribuem apenas com uma fração muito pequena da massa de um átomo, eles provavelmente são responsáveis por uma fração igualmente pequena do tamanho do átomo” (LOPES, 2016, p. 48). Isso é ilustrado na Figura 2.

2.2.3. Modelo nuclear

Avançando pela linha temporal na história atômica, são encontrados os trabalhos do cientista Ernest Rutherford, da Nova Zelândia. Ele é bastante conhecido por seu papel no desenvolvimento dos modelos atômicos com seu experimento de dispersão de partículas α (*alpha*), que são núcleos de hélio. Seus resultados experimentais derrubaram a concepção de que o átomo era como o pudim de passas, levando a uma visão mais refinada da estrutura do átomo.

Rutherford conduziu um experimento onde enviava um feixe de partículas α através de uma folha de ouro bastante fina por intermédio de uma fonte radioativa. Em volta da folha de ouro havia um detector que indicava onde as partículas estavam colidindo, conforme ilustra a Figura 3.

Figura 3: Representação esquemática do experimento de Rutherford



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

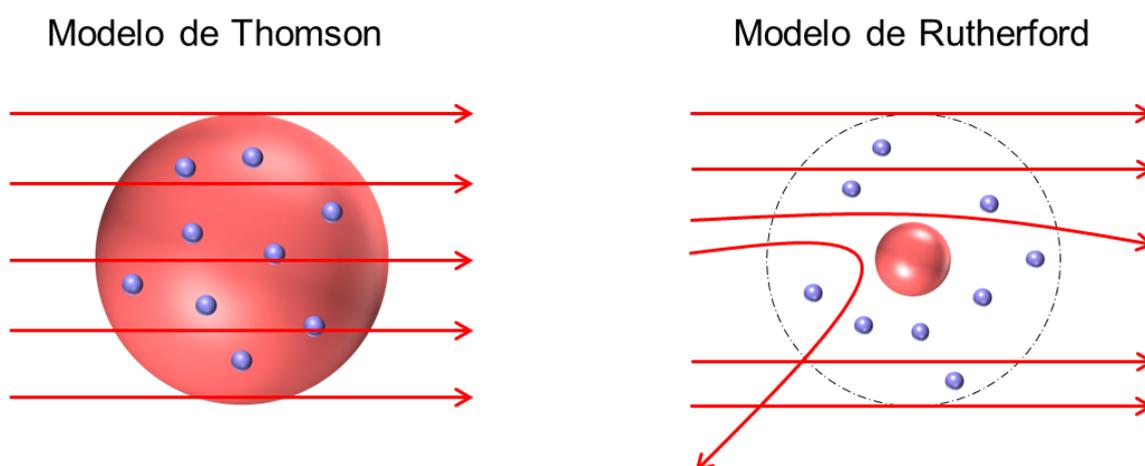
Se os átomos realmente fossem compostos por uma carga positiva distribuída uniformemente em uma esfera gelatinosa, conforme sugerido pelo modelo de Thomson, seria esperado que as partículas α atravessassem a folha com alguns poucos desvios de sua trajetória. Certamente suas velocidades diminuiriam devido a dissipação de energia, contudo seguiriam com poucos desvios.

Os resultados do experimento, entretanto, mostraram algo bem diferente do esperado. Atkins, Jones e Laverman (2018, p. 3) explicam que todos ficaram surpresos com estes resultados. Mesmo que a grande maioria das partículas α tenham passado direto com alguns desvios eventuais, 1 em cada 20.000

apresentavam desvios superiores a um ângulo de 90° , com algumas voltando na mesma direção da trajetória original, como ilustrado pela Figura 3.

Esses resultados sugerem um modelo nuclear, ou seja, que a maior parte do átomo é vazio, com um núcleo positivo e muito pequeno em relação ao tamanho do átomo, contendo elétrons no espaço em volta dele.

Figura 4: Comparação entre os modelos de Thomson e Rutherford



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

A Figura 4 mostra uma comparação entre o que era esperado, de acordo com o modelo de Thomson, e a interpretação de Rutherford quando analisou os resultados do experimento.

O modelo de Rutherford também ficou conhecido como modelo planetário, devido às semelhanças com o sistema solar. O fato de a maior parte do átomo ser vazio explica porque a maioria das partículas α não sofrem deflexões. Quando as partículas se aproximam do núcleo sofrem uma força de repulsão substancial, levando-as a uma maior deflexão. Quando as partículas se dirigem diretamente ao núcleo, a força de repulsão faz com que elas sejam repelidas e retornem pela mesma direção que vieram.

O modelo de Rutherford, contudo, nasce condenado. Na época em que Rutherford propôs o seu modelo, os trabalhos de James Clerk Maxwell já eram bem conhecidos na comunidade científica. As equações de Maxwell, que descrevem o comportamento das ondas eletromagnéticas, previam que os elétrons em movimento acelerado, como descritos pelo modelo de Rutherford, emitiriam radiação e perderiam energia. Isso faria com que os elétrons espiralassessem para dentro, eventualmente

colidindo com o núcleo, contradizendo o que se observa na realidade. A solução para esse problema veio alguns anos depois com o desenvolvimento da mecânica quântica e o modelo atômico de Bohr.

2.2.4. Niels Bohr e o átomo de hidrogênio

Niels Bohr, um físico dinamarquês, se baseando na teoria quântica de Max Planck, propôs um modelo para a estrutura atômica que incorpora a ideia de quantização da energia. Sabendo que os elétrons estão em volta do núcleo atômico, Bohr propõe que eles orbitam o núcleo em caminhos específicos, chamados níveis de energia (ou camadas eletrônicas).

Cada camada corresponde a um nível de energia, que é conhecido como número quântico principal, n , onde n são números inteiros. Quanto maior o valor de n , mais distante do núcleo. No modelo de Bohr, os elétrons podem mudar de camada, seja passando para uma camada mais externa ou mais interna, entretanto eles não podem ser encontrados entre uma camada e outra.

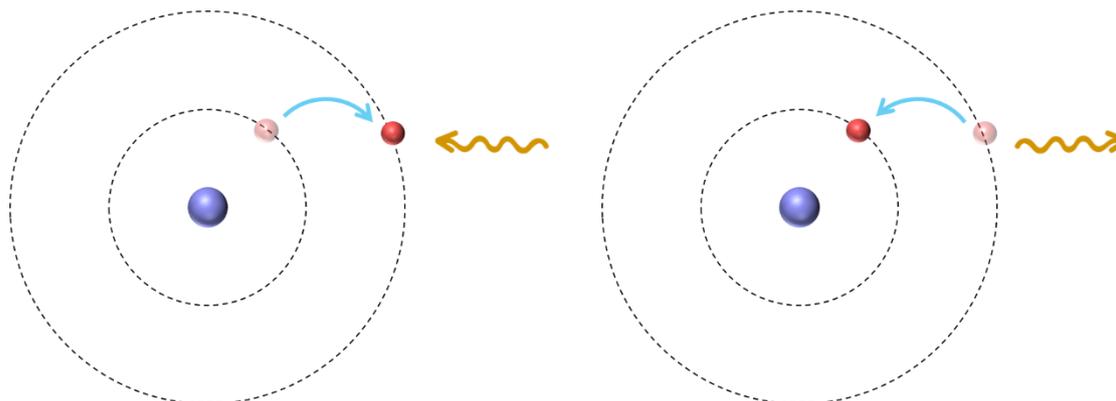
Bohr demonstrou que no átomo de hidrogênio a energia de um elétron pode ser descrita matematicamente pela seguinte equação:

$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right) \quad (1)$$

Nesta equação, R_H representa a constante de Rydberg e o sinal negativo é definido arbitrariamente ao assumir que o elétron livre ($n = \infty$) tem energia zero. Quando o valor de n é igual a 1 denomina-se de estado fundamental, que é o estado de menor energia e mais estável.

Burns (2011, p. 128) destaca que a energia total de um elétron, que é a soma de sua energia cinética com sua energia potencial, muda ao passar de uma camada para outra. Quando o elétron absorve um fóton, que é um pacote de energia, ou *quanta*, ele é elevado para um nível de energia mais alto, o que é chamado de estado excitado. Quando esse elétron cai para níveis mais baixos libera essa energia, que geralmente é na forma de luz. Este fenômeno é ilustrado pela Figura 5.

Figura 5: Modelo atômico de Bohr



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

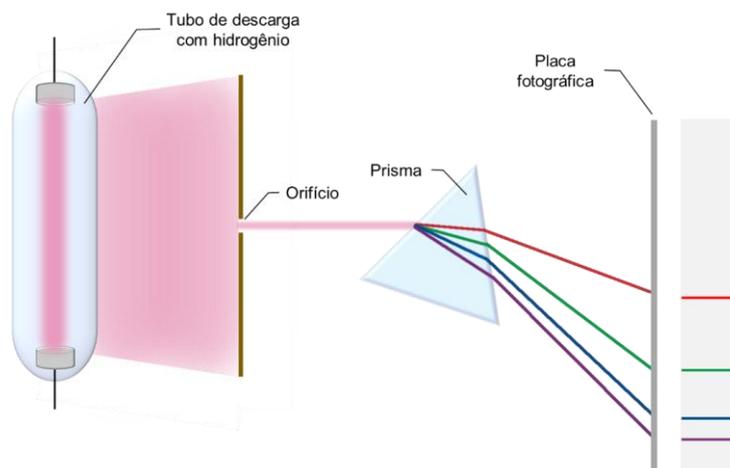
A cor da luz que é emitida por um átomo quando o elétron passa para um nível mais baixo depende da quantidade de energia que é liberada, obedecendo à Equação de Planck.

$$E = h\nu \quad (2)$$

Planck propôs que a energia, E , de um único *quantum* é igual à constante de Planck, h , multiplicada pela frequência do fóton, ν . A energia sempre é absorvida ou liberada em quantidades discretas (múltiplos inteiros de $h\nu$), ou seja, é quantizada.

Newton demonstrou que a luz branca, ao ser passada por um prisma, pode ser decomposta em suas cores constituintes, revelando um espectro contínuo de cores. Quando uma alta tensão é aplicada no tubo contendo hidrogênio, os átomos ganham energia, passando para um estado excitado. Quando os elétrons retornam para um nível de energia menor ou para o estado fundamental, eles liberam essa energia na forma de fótons, que é a luz vista no espectro de emissão. A Figura 6 ilustra esse experimento.

Figura 6: Decomposição da luz do hidrogênio através de um prisma



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

A energia liberada neste processo corresponde à variação da energia, ΔE , que é dada pela diferença entre a energia final e inicial, conforme expresso na Equação 3:

$$\Delta E = E_f - E_i \quad (3)$$

Dito isso, combinando as equações 1 e 3, a variação da energia pode ser expressa em termos dos números quânticos dos estados final e inicial:

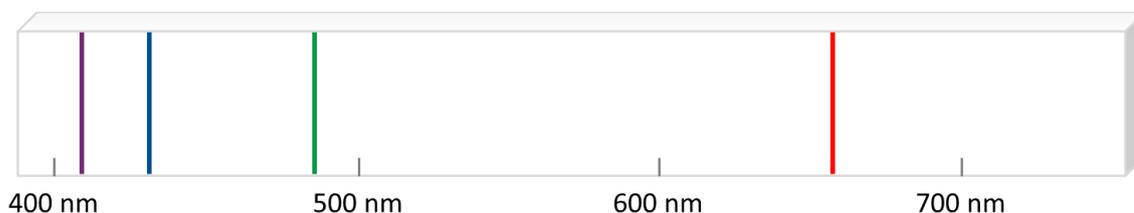
$$\Delta E = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (4)$$

Sabendo que a energia dos fótons emitidos é proporcional à frequência, de acordo com a Equação de Planck, pode-se combinar as equações 2 e 4 para encontrar a frequência dos fótons emitidos, conforme expresso pela Equação 5:

$$\nu = \frac{R_H}{h} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (5)$$

Essas equações permitem explicar o espectro de linhas do hidrogênio. As frequências dos fótons emitidos correspondem às diferentes cores observadas no espectro, mas também podem incluir fótons no infravermelho e ultravioleta. A Figura 7 ilustra o espectro de linhas do hidrogênio na faixa de luz visível.

Figura 7: Espectro de emissão do hidrogênio



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

As linhas espectrais desempenham um papel fundamental na determinação da composição química de substâncias. Cada elemento químico possui um conjunto único de linhas de emissão ou absorção, que funcionam como uma "impressão digital". Esse princípio é utilizado na espectroscopia, permitindo a identificação de elementos presentes em diferentes materiais.

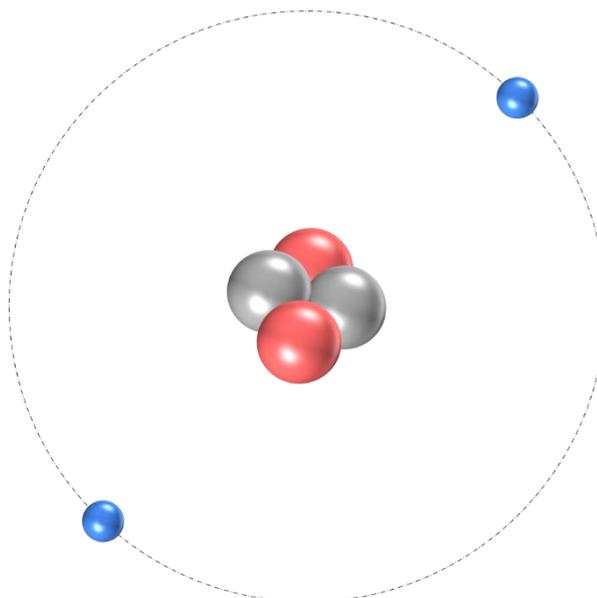
2.2.5. Estrutura nuclear do átomo

A descoberta do próton está relacionada com os experimentos realizados por Rutherford. Ele observou que quando as partículas α colidiam com o nitrogênio, núcleos de hidrogênio eram emitidos nesse processo. Rutherford interpretou essa observação como uma evidência de que o núcleo de hidrogênio era uma partícula fundamental presente nos átomos. Pelo fato de o hidrogênio ser o elemento mais simples, ele chamou a partícula de próton, que significa primeiro.

Conforme apontado por Chang e Goldsby (2013, p. 45), já era conhecido que o átomo de hidrogênio possui um único próton, enquanto o de hélio possui dois. Portanto, a relação entre as massas do hélio e do hidrogênio deveria ser de 2:1. No entanto, os experimentos mostravam uma relação de 4:1. Essa discrepância levou Rutherford e outros pesquisadores a sugerirem a existência de uma partícula adicional no núcleo atômico, o nêutron, que foi posteriormente descoberta por Chadwick. A descoberta do nêutron ajudou a resolver o mistério da razão das massas entre o hélio e o hidrogênio, pois o núcleo de hélio contém dois prótons e dois nêutrons, enquanto o núcleo de hidrogênio contém apenas um próton e nenhum nêutron.

O núcleo atômico é, portanto, constituído de dois tipos de partículas: os prótons e os nêutrons, enquanto em volta do núcleo encontram-se os elétrons, orbitando-o. A Figura 8 ilustra a estrutura do átomo de hélio.

Figura 8: Estrutura do átomo de hélio



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

A identidade de um elemento químico é definida a partir do seu número atômico, que é a quantidade de prótons contidos em seu núcleo. Cada elemento possui um número atômico único, o que significa que a quantidade específica de prótons em seu núcleo é exclusiva para aquele elemento. Dado que um átomo é eletricamente neutro e que os prótons e elétrons possuem cargas de mesmo valor absoluto, mas de sinais contrários, conclui-se que a quantidade de prótons e elétrons em um átomo é a mesma.

2.3. Modelo atômico da Mecânica Quântica

O modelo de Bohr, embora descreva com excelente precisão o átomo de hidrogênio, ou até mesmo íons como He^+ ou Li^{2+} (que são átomos com apenas um elétron), falha ao descrever átomos polieletrônicos.

O modelo da mecânica quântica, contudo, substituiu esses modelos. De fato, os modelos de Bohr e Sommerfeld incorporam aspectos da mecânica quântica, como a energia quantizada e as órbitas permitidas, contudo eles são modelos semi-clássicos, uma vez que não incorporam a natureza ondulatória da matéria e as relações de indeterminação de Heisenberg, tratando como partículas que descreve trajetórias bem definidas.

2.3.1. Natureza ondulatória da matéria

Depois de Albert Einstein usar a teoria de Planck da quantização da energia para explicar o efeito fotoelétrico, a natureza dual de onda e partícula da luz tornou-se conhecida. Quase duas décadas depois, Louis de Broglie, um físico francês, propôs em sua tese de doutorado que se ondas luminosas apresentavam o comportamento de partículas, então um feixe de partículas de matéria talvez pudesse apresentar um comportamento característico de ondas. Como destacado por Young e Freedman (2016):

Seu pensamento, parafraseado livremente, foi mais ou menos o seguinte: a natureza ama a simetria. A luz possui uma natureza dual, comportando-se em algumas situações como onda e em outras, como partícula. Se a natureza é simétrica, essa dualidade também deveria ser válida para a matéria. Os

elétrons, que geralmente são considerados partículas, em algumas situações podem se comportar como ondas (YOUNG; FREEDMAN, 2016, p. 231-232).

A hipótese de de Broglie sugeriu que todas as partículas de matéria têm uma natureza dual, assim como a luz, podendo se comportar como onda ou como partícula, dependendo das circunstâncias.

Young e Freedman (2016, p. 232) explicam que quando uma partícula se comporta como onda deve ter um comprimento de onda e uma frequência associada. Então de Broglie postulou que uma partícula livre e que esteja se movendo a uma velocidade não relativística deve ter o seu comprimento de onda associado ao seu momento linear. Dessa forma o comprimento de onda de de Broglie (λ) pode ser expresso pela Equação 6.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (6)$$

Contudo se a velocidade da partícula for consideravelmente próxima da velocidade da luz, o termo mv deve ser multiplicado pelo fator de Lorentz, γ .

$$\gamma mv = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (7)$$

2.3.2. Princípio de Indeterminação de Heisenberg

Na mecânica clássica, as partículas são descritas a partir de trajetórias bem definidas. É possível descrever, através de teorias clássicas, e também determinar experimentalmente a posição e o momento linear de uma partícula clássica em qualquer instante de tempo, entretanto, não é possível especificar a localização precisa de uma partícula se ela apresentar comportamento ondulatório. Atkins, Jones e Laverman (2018) explicam isso da seguinte forma:

[...] imagine uma onda em uma corda de violão, que se espalha por toda a corda, sem se localizar em um ponto determinado. Uma partícula com um momento linear determinado tem comprimento de onda preciso, mas, como não faz sentido falar da localização de uma onda, não é possível especificar a localização da partícula que tem determinado momento linear. Esta dualidade onda-partícula da matéria significa que o elétron de um átomo de hidrogênio não pode ser descrito como estando em uma órbita ao redor do núcleo com uma trajetória definida (ATKINS, JONES e LAVERMAN, 2018, p. 19).

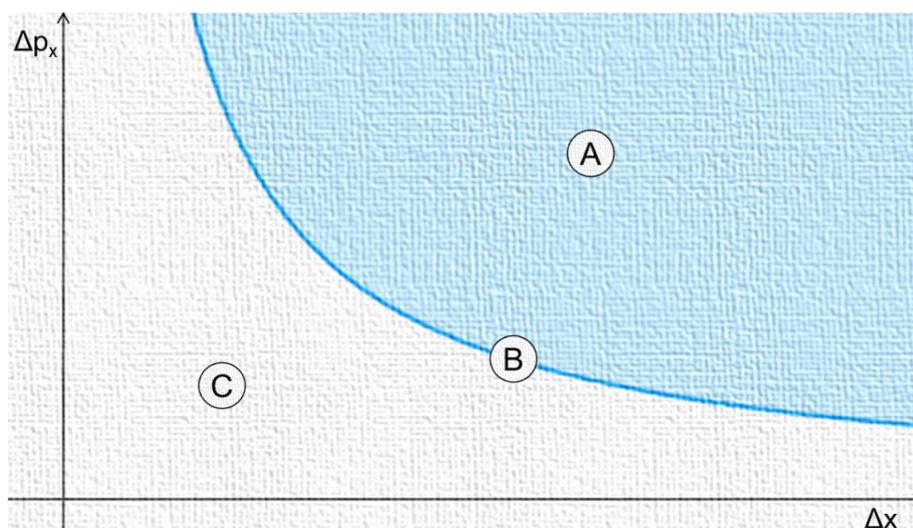
O mesmo autor explica que esta dificuldade não pode ser resolvida. A natureza dual das partículas elimina a possibilidade de se determinar simultaneamente o momento linear e a localização de uma partícula com boa precisão. Este é um aspecto da complementaridade de posição e momento conhecido como Princípio de Indeterminação de Heisenberg, formulado pelo físico alemão Werner Heisenberg. A ideia pode ser expressa da seguinte forma:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (8)$$

Δx representa a incerteza da posição enquanto Δp denota a incerteza do momento linear. O produto dessas duas quantidades é sempre igual ou maior à metade da constante reduzida de Planck ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$).

A Figura 9 ilustra graficamente esta relação fundamental. O eixo vertical representa a incerteza do momento linear da partícula enquanto o eixo horizontal representa a incerteza de sua posição. A região sombreada de coloração azul (A) representa as combinações de Δp e Δx que excedem $\frac{\hbar}{2}$, enquanto a curva destacada em azul mais escuro (B) representa as combinações que são exatamente iguais a $\frac{\hbar}{2}$. A curva destaca que quanto mais se sabe sobre uma grandeza, menos se sabe sobre a outra. Por outro lado, qualquer combinação que caia na região branca (C) é proibida pelo Princípio de Indeterminação.

Figura 9: Ilustração gráfica do Princípio de Indeterminação de Heisenberg



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

Quando aplicada ao mundo macroscópico, esta relação de indeterminação não apresenta resultados significativos, contudo, quando aplicada ao contexto subatômico seus efeitos podem ser observados. As partículas não possuem posição e velocidade definidas, apresentando uma natureza probabilística. Isso significa que o mundo subatômico é fundamentalmente diferente do que é percebido nas escalas macroscópicas.

Esta relação de indeterminação não pode ser evitada com tecnologia, é uma característica fundamentalmente inerente à própria natureza das partículas. Isso significa que a ideia de órbitas de Bohr teve que ser refinada e substituída por um modelo que leva em consideração a natureza ondulatória e a indeterminação na posição/momento dos elétrons.

2.3.3. A Função de onda e a Equação de Schrödinger

Considerando a natureza ondulatória das partículas, não se pode presumir que o seu comportamento seja como o de objetos pontuais que se move em trajetórias precisas. O físico austríaco Erwin Schrödinger propôs uma abordagem alternativa, substituindo a trajetória bem definida das partículas por uma função matemática conhecida como função de onda (ψ). Com isso, um físico alemão chamado Max Born propôs uma interpretação para a função de onda que ficou conhecida como interpretação de Born. Segundo sua interpretação, a probabilidade de encontrar uma partícula numa determinada região é proporcional ao quadrado da função de onda naquela região. Em termos mais precisos, ψ^2 representa a densidade de probabilidade, que é a probabilidade de encontrar uma partícula em uma região específica dividida pelo volume da região (ATKINS, JONES e LAVERMAN, 2018, p. 23).

Uma função de onda é uma solução da equação de Schrödinger (Equação 9), que é uma equação diferencial que descreve como o estado quântico do sistema evolui.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (9)$$

As funções de onda dos elétrons nos átomos mostram as formas dos orbitais atômicos.

2.3.4. Orbitais atômicos

O conceito de orbital atômico não deve ser confundido com o de órbita. Enquanto o termo “órbita” descreve o caminho definido ao redor de outro de forma clássica, o termo “orbital” refere-se à região do espaço onde é mais provável encontrar um elétron, devido à sua natureza quântica.

Atkins, Jones e Laverman (2018) elucidam que, para representar a forma de um orbital atômico, é necessário determinar a posição de cada ponto ao redor do núcleo e associar a esse ponto um valor correspondente da função de onda. Utilizando o sistema de coordenadas esféricas, a posição de um ponto é descrita pelas coordenadas r , θ , e ϕ , onde r é a distância do núcleo, θ é o ângulo polar e ϕ o ângulo azimutal. Assim, a função de onda $\psi(r, \theta, \phi)$ pode ser expressa como o produto das duas funções expressas na Equação 10.

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \times Y(\theta, \phi) \quad (10)$$

A parcela $R(r)$ representa a função de onda radial e a parcela $Y(\theta, \phi)$ representa a função de onda angular.

As funções de onda radiais que correspondem aos orbitais 1s, 2s e 3s são expressas pelas equações 11, 12 e 13, respectivamente. Pelo fato desses orbitais serem esfericamente simétricos, a única função de onda angular correspondente é uma constante, expressa pela Equação 14.

$$R_{10}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad (11)$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \quad (12)$$

$$R_{30}(r) = \frac{2}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(3 - \frac{2Zr}{a_0} + \frac{2Z^2 r^2}{9a_0^2} \right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \quad (13)$$

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

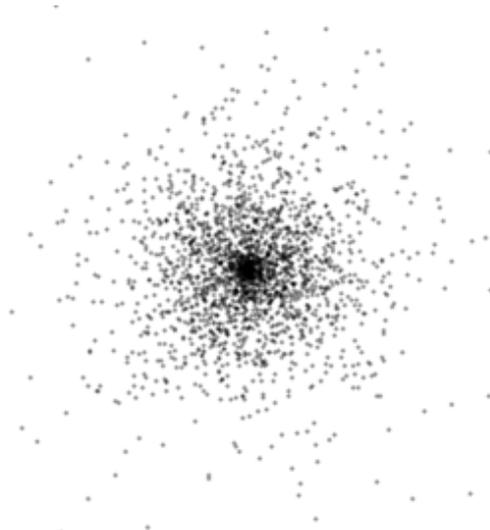
No caso do átomo de hidrogênio, Z é igual a 1. O raio de Bohr, a_0 , é expresso conforme a Equação 15.

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (15)$$

As funções de onda da mecânica quântica não são ondas físicas no sentido clássico, mas sim descrições matemáticas que fornecem probabilidade de encontrar o elétron em uma determinada região do espaço. Combinando as equações 10, 11 e

14, se obtém a função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio. Com isso, pode-se calcular a densidade de probabilidade $|\psi_{100}(r)|^2$, que representa a probabilidade de se encontrar o elétron em uma determinada região ao redor do núcleo. A Figura 10 ilustra a nuvem eletrônica que representa o orbital 1s do átomo de hidrogênio.

Figura 10: Orbital 1s do átomo de hidrogênio



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

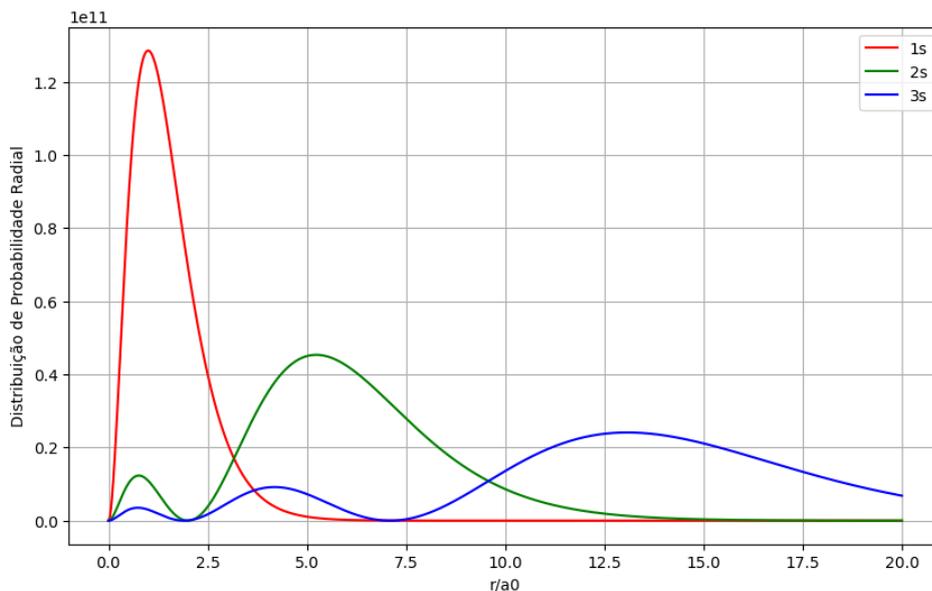
Cada ponto representa uma possível localização do elétron. Se a densidade de pontos é mais alta em uma determinada região, significa que a densidade de probabilidade é maior nela, indicando que essa é uma região com mais chances de encontrar o elétron.

A função de distribuição de probabilidade radial ($P(r)$) mostra a probabilidade de encontrar o elétron numa dada distância do núcleo independentemente da direção. A Equação 16 permite determinar $P(r)$ de um orbital s.

$$P(r) = 4\pi\psi^2r^2 \quad (16)$$

O Gráfico 1 mostra a distribuição de probabilidade radial para os orbitais 1s, 2s e 3s do átomo de hidrogênio.

Gráfico 1: Distribuição de probabilidade radial dos orbitais 1s,2s e 3s

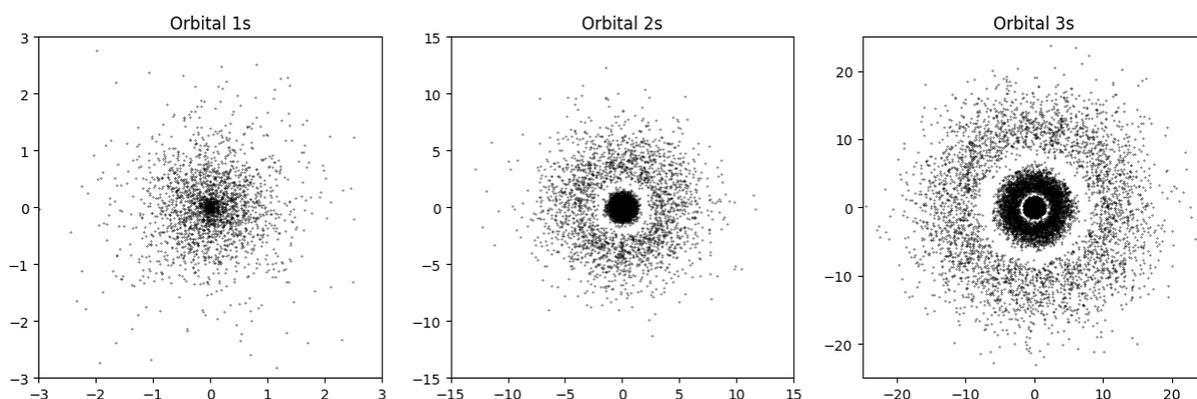


Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

Os pontos de máximos nesse gráfico indicam qual é a distância do núcleo onde é mais provável encontrar o elétron. Em outras palavras, ao efetuar diversas medidas da posição do elétron, a distância do núcleo que ocorre com maior frequência corresponde a estes pontos de máximo.

Por outro lado, os pontos do mínimo são os nós, que indicam as distâncias do núcleo onde a probabilidade de encontrar o elétron é zero. A existência desses nós está relacionada à natureza ondulatória dos elétrons, pois são descritos por funções de onda que podem ter pontos onde a amplitude é sempre zero (onda estacionária). Isso ocorre justamente porque a função de onda é uma solução da equação de Schrödinger, que é uma equação diferencial ondulatória. A Figura 11 mostra os orbitais correspondentes às funções de ondas citadas.

Figura 11: Formas dos orbitais do átomo de hidrogênio



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

Cada conjunto de pontos corresponde a um orbital (1s, 2s e 3s). É possível observar que existem algumas regiões que são semelhantes a um anel branco. Essas regiões correspondem aos nós. No orbital 1s não há nós, no orbital 2s há um nó e no orbital 3s há dois nós. Os orbitais s são esféricos, enquanto os demais orbitais, p, d e f, têm outras formas mais complexas.

2.4. Formação de moléculas e ligações químicas

Para a compreensão de como ocorre os processos eletrolíticos de quebra das moléculas de água é essencial a compreensão de como os átomos se ligam quimicamente uns aos outros para formar moléculas. Para entender como essas interações ocorrem, é crucial explorar como os elétrons se distribuem ao redor dos núcleos atômicos, pois isso desempenha um papel fundamental na formação de ligações e nos processos de reações químicas.

2.4.1. Configuração eletrônica

As propriedades químicas de um elemento são determinadas pela sua configuração eletrônica, que é a forma como os elétrons estão distribuídos nas camadas eletrônicas do átomo. Quando os elétrons estão organizados de maneira a preencher os orbitais alcançando o menor nível de energia possível, essa configuração é denominada configuração eletrônica do estado fundamental, sendo a mais estável.

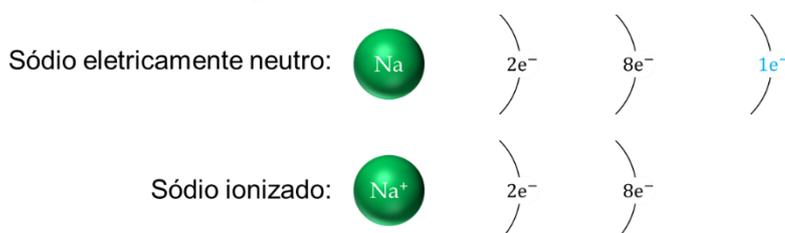
A distribuição dos elétrons nas camadas eletrônicas não é aleatória, existem algumas restrições que ditam a forma como eles são organizadas. Por exemplo, o princípio de exclusão de Pauli estabelece que um único orbital comporta no máximo dois elétrons. Dessa forma, dois elétrons não podem jamais possuir os mesmos valores para todos os números quânticos. Eles devem divergir pelo menos no número quântico de spin. O spin é o quarto número quântico, que é uma propriedade exclusivamente quântica dos elétrons.

Cada camada, ou nível, comporta um número máximo de elétrons. Conforme se afasta do núcleo, o número de elétrons que cada camada pode comportar vai variando. A primeira camada, conhecida como camada K, pode comportar até 2 elétrons. A segunda camada, chamada camada L, pode comportar até 8 elétrons. A terceira camada, ou camada M, pode comportar até 18 elétrons. A quarta camada, conhecida como camada N, pode comportar até 32 elétrons. No entanto, nas camadas mais externas, como a quinta, O, sexta, P, e sétima, Q, o número de elétrons tende a ser menor devido à menor energia de ligação, comportando até 32, 18 e 8 elétrons, respectivamente.

Um átomo eletricamente neutro possui o mesmo número de prótons e elétrons. Os átomos, contudo, podem ganhar ou perder elétrons, adquirindo uma carga líquida e formando um íon. Quando um átomo perde um ou mais elétrons, ele se torna um cátion, que é um íon de carga positiva. Por outro lado, quando ele ganha um ou mais elétrons, ele se torna um ânion, que é um íon de carga negativa.

A Figura 12 ilustra a configuração eletrônica do átomo de sódio eletricamente neutro e o íon sódio. A última camada de um átomo é denominada camada de valência, e seus elétrons são os elétrons de valência.

Figura 12: Ilustração das camadas eletrônicas no sódio



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

Cada nível de energia é subdividido em subníveis (s, p, d, f), e cada subnível também possui um número máximo de elétrons que pode comportar. O subnível s comporta até 2 elétrons, o subnível p até 6 elétrons, o subnível d até 10 elétrons e o subnível f até 14 elétrons.

2.4.2. Teoria do Octeto

A natureza tende a buscar estados de menor energia. Este princípio fundamental é observado em diversos fenômenos físicos e químicos, onde os sistemas tendem a evoluir para estados de menor energia, que correspondem às configurações mais estáveis.

O estado de menor energia refere-se à condição em que um sistema possui a menor quantidade possível de energia potencial. Em sistemas químicos, isso significa que os átomos e moléculas tendem a reorganizar seus elétrons e formar ligações de tal forma que a energia total do sistema é minimizada. Da mesma forma ocorre em sistemas físicos, como é o caso da energia potencial gravitacional, que tende a diminuir enquanto os objetos caem em direção à Terra.

A estabilidade de um sistema químico é a sua capacidade de manter sua estrutura ao longo do tempo de tal forma que ele resiste a mudanças espontâneas. Quanto menor seu estado de energia, mais estável ele é. Por outro lado, quando um sistema está em um estado de energia mais alta, ele é instável e, portanto, é mais propenso a passar por mudanças que o levem a um estado de menor energia.

Os átomos tendem a ser mais estáveis quando possuem 8 elétrons em sua camada de valência. Dessa forma, eles geralmente ganham, perdem ou compartilham elétrons para obter a mesma configuração eletrônica do gás nobre mais próximo na tabela periódica.

Os gases nobres possuem distribuições eletrônicas muito estáveis, evidenciadas por suas altas energias de ionização e, de modo geral, baixa reatividade química. Todos os gases nobres, exceto o hélio, apresentam 8 elétrons na camada de valência, e muitos átomos, em reações, acabam ficando com oito elétrons de valência. Essa observação levou à formulação da regra do octeto, que estabelece que os átomos tendem a ganhar, perder ou compartilhar elétrons até que estejam circundados por oito elétrons de valência (ATKINS; JONES, 2016, p. 319).

2.4.3. Ligações químicas

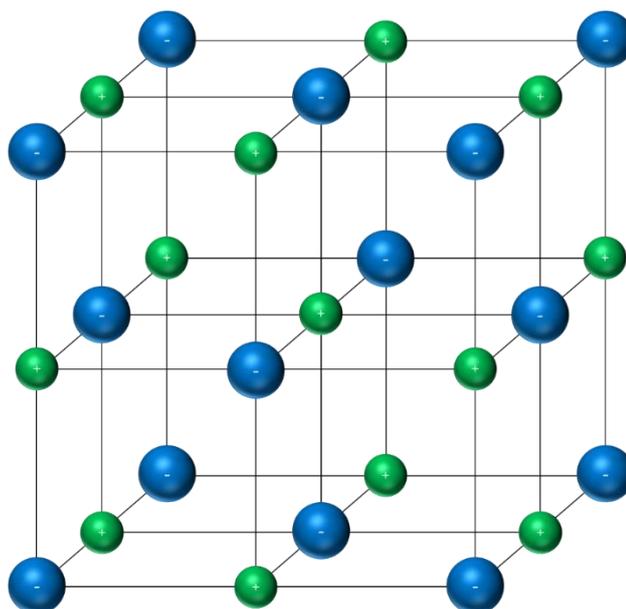
Chang e Goldsby (2013, p. 372) explicam: “Uma ligação iônica é a força eletrostática que mantém os íons ligados em um composto iônico.” Um exemplo clássico de ligação iônica é a formação do cloreto de sódio, NaCl. As configurações eletrônicas do sódio e do cloro são, respectivamente:

- $_{11}\text{Na}$: 2 – 8 – 1
- $_{17}\text{Cl}$: 2 – 8 – 7

Para que o Na atinja a configuração eletrônica de um gás nobre, ou seja, complete 8 elétrons em sua camada de valência, é necessário que perca o seu último elétron, pois a camada anterior possui 8 elétrons. Com isso ele se torna um íon de carga positiva, Na^+ .

Por outro lado, para que o Cl atinja os 8 elétrons de valência, é necessário que ganhe um elétron, tornando-se um íon negativo, Cl^- . Uma vez que se tornaram íons com cargas opostas, há uma atração de natureza eletrostática entre eles, fazendo com que se atraiam mutuamente. Em outras palavras, há uma transferência de elétrons do Na para o Cl. A atração mútua entre os cátions e ânions forma um retículo cristalino, conforme representado na Figura 13.

Figura 13: Representação do retículo cristalino iônico



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

A energia potencial entre dois íons em um composto iônico é a energia armazenada devido à atração eletrostática entre os íons de cargas opostas. Ela é diretamente proporcional ao produto de suas cargas e inversamente proporcional à distância entre seus respectivos núcleos, conforme ilustra a Equação 17.

$$U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{r^2} \quad (17)$$

A energia potencial elétrica é a energia associada à posição relativa das cargas. No caso de um cátion e um ânion, que têm cargas opostas, a energia potencial é negativa. Isso indica que o sistema é mais estável quando as cargas estão próximas uma da outra, pois há uma força atrativa entre elas. Isso significa que seria necessário trabalho para separar os íons, ou seja, é necessário fornecer energia ao sistema.

Outro tipo de força intramolecular capaz de manter átomos unidos é a denominada ligação covalente. Lopes (2016, p. 324) explica que os átomos podem assumir a mesma estrutura de elétrons de um gás nobre ao compartilharem pares de elétrons com outros átomos. Esse tipo de ligação é denominado ligação covalente.

Por exemplo, o átomo de oxigênio, quando eletricamente neutro, possui 6 elétrons na camada de valência. Para alcançar a estabilidade, conforme a regra do octeto, o oxigênio precisa completar sua camada de valência com 8 elétrons, semelhante à configuração eletrônica de um gás nobre. Isso significa que ele necessita de mais 2 elétrons. Essa necessidade pode ser satisfeita através do compartilhamento de elétrons com outro átomo de oxigênio.

Quando dois átomos de oxigênio se aproximam, cada um compartilha dois de seus elétrons com o outro, formando uma ligação covalente dupla. Esse compartilhamento resulta na formação da molécula de O_2 , onde cada átomo de oxigênio passa a ter acesso a 8 elétrons na camada de valência, sendo os 6 próprios e 2 compartilhados.

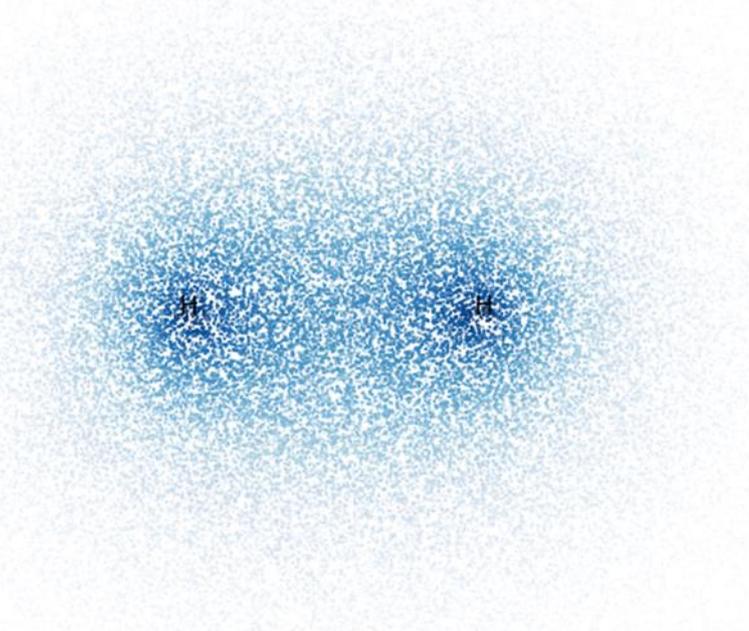
Dessa forma, ao compartilhar dois pares de elétrons, cada átomo de oxigênio atinge a configuração eletrônica estável de um gás nobre, completando o octeto. A ligação covalente dupla pode ser representada pela fórmula estrutural $O = O$, onde cada linha representa um par de elétrons compartilhados.

Os átomos de hidrogênio são uma exceção à regra do octeto, pois se estabilizam com apenas 2 elétrons em sua camada de valência, o que é conhecido como a regra do dueto. O hidrogênio, por ter apenas 1 elétron de valência, busca ganhar mais 1. Isso pode ser alcançado formando uma ligação covalente com outro átomo de hidrogênio, o que resulta na formação da molécula de H_2 . Cada átomo de hidrogênio contribui com um elétron para o par compartilhado, resultando em uma ligação simples entre os dois átomos e um total de 2 elétrons compartilhados na camada de valência de cada átomo $H - H$.

Lopes (2016, p. 324) explica que, ao aplicar os métodos da mecânica quântica, é possível calcular a distribuição da densidade eletrônica em moléculas. No caso da

molécula de H_2 , os cálculos mostram que a densidade eletrônica se concentra entre os núcleos, o que resulta em interações eletrostáticas atrativas. Dessa forma, os átomos de hidrogênio se unem porque os núcleos positivos são atraídos pela carga negativa concentrada entre eles. Assim, o par de elétrons compartilhado age como uma espécie de “cola” que mantém os átomos unidos.

Figura 14: Representação da nuvem eletrônica na molécula de H_2



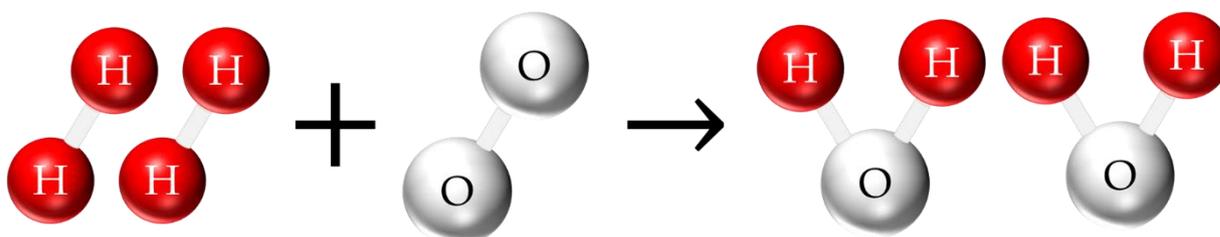
Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

Alguns elementos químicos apresentam maior tendência em atrair elétrons do que outros, uma característica associada a uma propriedade periódica chamada eletronegatividade. “A eletronegatividade é definida como a capacidade de um átomo em uma molécula de atrair elétrons para si” (LOPES, 2016, p. 326). Em outras palavras, quanto mais eletronegativo é um elemento, maior sua capacidade de atrair elétrons. Dessa forma, em moléculas diatômicas homonucleares, como H_2 e O_2 , os pares de elétrons compartilhados são igualmente atraídos. Isso significa que se tratam de moléculas apolares.

2.5. Estrutura molecular do H_2O

Chang e Goldsby (2013, p. 90) explicam que uma reação química é “um processo no qual uma substância (ou substâncias) se transforma(m) em uma ou mais novas substâncias.” De uma perspectiva microscópica, o processo onde há formação ou quebra de ligações químicas resultando na formação de novas moléculas, devido ao rearranjo dos átomos, é chamado de reação química. A Figura 14 é um recurso de linguagem utilizado pelos químicos que ilustra a nível molecular a reação de síntese do hidrogênio com o oxigênio para formar água.

Figura 15: Representação molecular da reação entre H_2 e O_2



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

Nesta ilustração, as ligações químicas são representadas pelos bastões, enquanto os átomos são representados pelas esferas. A quantidade de átomos de hidrogênio e oxigênio é a mesma antes e depois da reação. Este processo de rearranjo dos átomos também pode ser descrito na forma da seguinte equação:

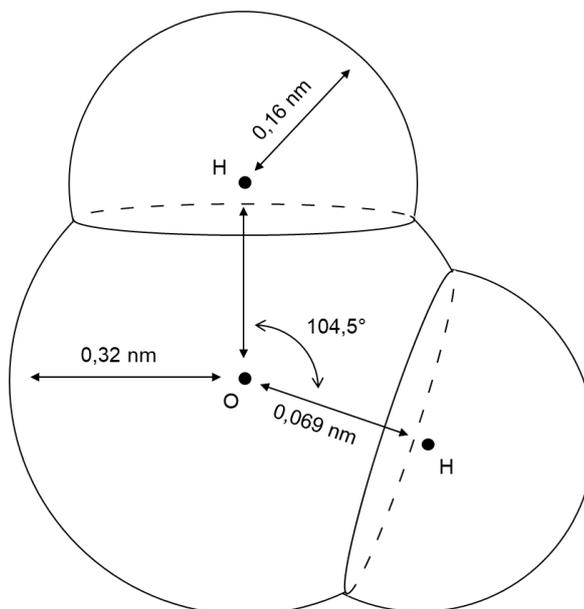


Esse novo arranjo permite que os átomos completem suas configurações eletrônicas estáveis. O átomo de oxigênio na molécula de H_2O recebe os dois elétrons necessários para completar seu octeto, compartilhando pares de elétrons com cada um dos dois átomos de hidrogênio. Simultaneamente, os átomos de hidrogênio adquirem os elétrons necessários para completar seu dueto, resultando em uma combinação estável do conjunto.

A molécula de água consiste em duas ligações O – H, cujo comprimento é 0,096 nm e formam um ângulo de $104,5^\circ$ entre elas (SHARP, 2001, p. 2). Sharp explica que quando átomos que não estão ligados se aproximam de tal forma que seus orbitais eletrônicos se sobrepõem, há uma forte repulsão. Por outro lado, para distâncias maiores ocorre uma leve atração entre os átomos devido à interação dipolo induzido – dipolo induzido, que é conhecida como força de dispersão de London. A combinação resultante dessas forças de repulsão e atração é conhecida como interação de van der Waals. Assim, o ponto onde essas forças se equilibram é usado

para definir o diâmetro de um átomo, que é de 0,32 nm para o oxigênio e 0,16 nm para o hidrogênio. A Figura 16 apresenta uma noção geométrica das dimensões da molécula de água.

Figura 16: Representação esquemática da molécula de água

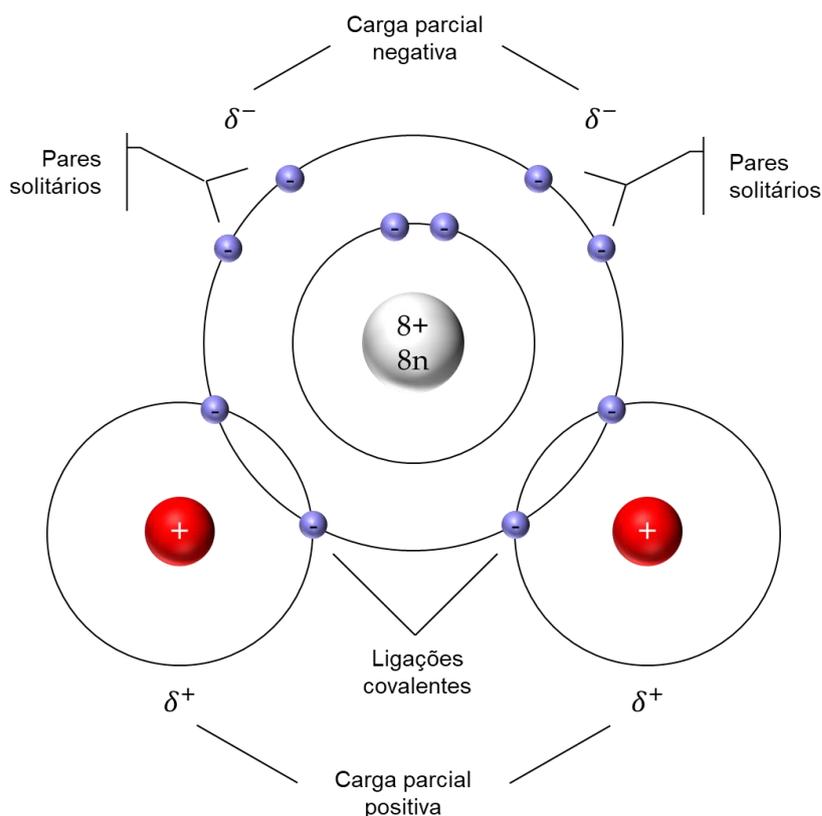


Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

A molécula de água, embora seja eletricamente neutra no sentido de que não possui uma carga líquida positiva ou negativa, apresenta uma distribuição desigual de seus elétrons. Isso ocorre devido à diferença significativa de eletronegatividade entre os átomos que a compõem. O oxigênio, sendo muito mais eletronegativo que o hidrogênio, exerce uma atração maior sobre os elétrons compartilhados (SHARP, 2001, p. 2).

Como consequência da diferença de eletronegatividade, os elétrons tendem a passar mais tempo próximos ao átomo de oxigênio, criando uma densidade eletrônica mais concentrada ao redor dele. Essa distribuição assimétrica de elétrons torna a molécula polarizada. Isso significa que, embora sua carga líquida seja neutra, a água apresenta uma extremidade com uma carga parcial negativa (próxima ao oxigênio) e outra com uma carga parcial positiva (próxima aos hidrogênios). Isso faz da água uma molécula polar, capaz de interagir fortemente com outras moléculas e íons. A Figura 17 apresenta uma noção da distribuição e compartilhamento de elétrons na molécula de água, bem como sua polarização.

Figura 17: Distribuição de elétrons na molécula de água



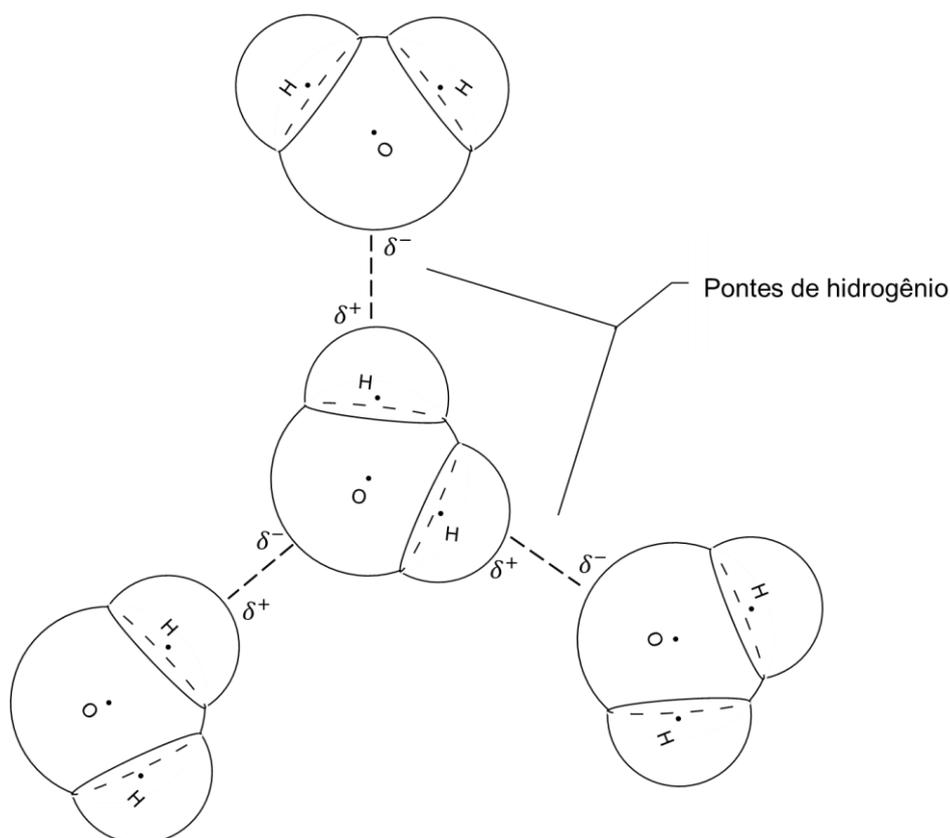
Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

De acordo com PANG (2014):

Esse estado da molécula de água pode ser facilmente demonstrado experimentalmente, em que uma caneta plástica carregada com eletricidade estática gerada por fricção é aproximada da água fluindo de uma torneira. Podemos claramente observar que a água desvia de sua direção original e se inclina em direção à caneta plástica. Isso demonstra claramente que as moléculas na água líquida são polarizadas (PANG, 2014, p. 4, tradução nossa).

A polarização da molécula de água acarreta na formação de pontes de hidrogênio, que são interações entre as cargas parciais das moléculas. As pontes de hidrogênio são formadas quando os átomos de hidrogênio de uma molécula de água interagem com os pares de elétrons não compartilhados (pares solitários) de outra molécula de água (PANG, 2014, p. 5). A Figura 18 ilustra essas interações.

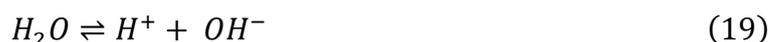
Figura 18: Representação das pontes de hidrogênio



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

A natureza polar das moléculas de água resulta em uma série de interações eletrostáticas que eventualmente acaba provocando a dissociação de algumas moléculas em íons hidróxidos e prótons (PANG, 2014, p. 5).

Sharp (2001, p. 3) explica que a água pura sofre flutuações térmicas que frequentemente causam a polarização adicional das ligações O – H, resultando na dissociação do núcleo de hidrogênio como um próton, H^+ . Embora a água seja um excelente solvente para íons, permitindo que os íons formados sejam solvatados, o tempo de vida desses íons dissociados em água pura é relativamente longo, em torno de 100 μs , antes de se recombinar.



A ionização espontânea da água é descrita por uma constante de dissociação, K_a , que é dada pela Equação 20. Os colchetes representam a concentração molar da espécie química dentro dele.

$$K_a = \frac{[H^+][OH^-]}{[H_2O]} \quad (20)$$

Uma vez que esse valor para a água pura é muito pequeno, significa que é um processo limitado, onde uma fração muito pequena das moléculas de água se dividem

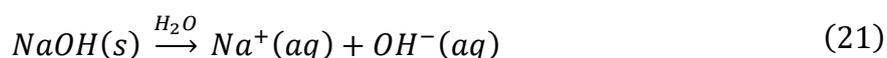
espontaneamente em íons, portanto, a condutividade elétrica da água pura é muito baixa, visto que há poucos íons que passam transportar cargas e gerar uma corrente elétrica.

2.6. Solução de NaOH(aq)

“Uma solução é uma mistura homogênea de duas ou mais substâncias. O soluto é a substância presente em menor quantidade e o solvente é a substância presente em maior quantidade” (CHANG; GOLDSBY, 2013, p. 119). Um exemplo disso é a solução de hidróxido de sódio, NaOH(aq).

O hidróxido de sódio, NaOH, também conhecido como soda cáustica, é um composto iônico formado por três átomos: um de sódio, um de oxigênio e um de hidrogênio. Em sua estrutura, o átomo de sódio forma uma ligação iônica com o grupo hidroxila, que por sua vez é constituído por uma ligação covalente entre o átomo de oxigênio e o de hidrogênio.

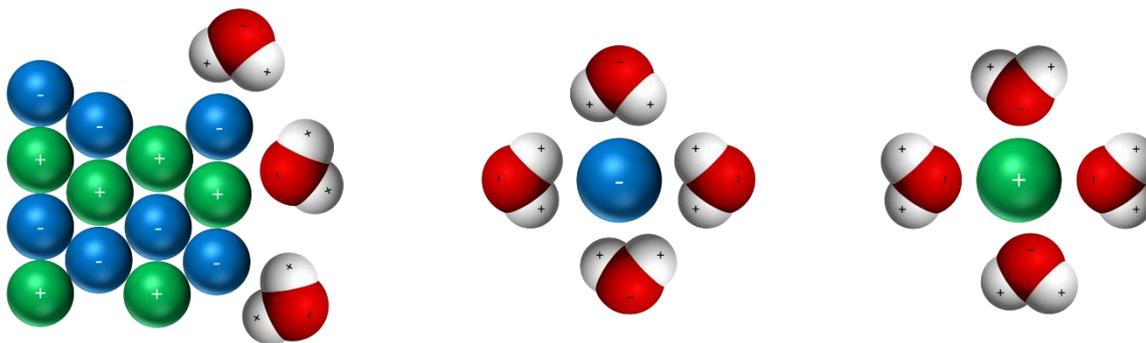
Por ser um composto iônico, o NaOH forma um retículo cristalino semelhante ao da Figura 13, pelos mesmos motivos discutidos no tópico 2.4.3. Dessa forma, quando ele é dissolvido em água, ocorre o processo de dissociação iônica, onde o retículo cristalino vai sendo desmanchado. Nesse processo, o NaOH se dissocia em íons individuais: o cátion Na^+ e o ânion OH^- . Assim, o processo pode ser equacionado da seguinte forma:



Esse processo é exotérmico, o que significa que há liberação de energia para o ambiente na forma de calor, aquecendo a solução.

Após a dissociação das moléculas de NaOH, ocorre um processo chamado solvatação. Na solvatação os íons do composto dissolvido, como é o caso do Na^+ e o OH^- , são cercados pelas moléculas de H_2O . Os íons, uma vez que possuem carga elétrica, interagem com as cargas parciais das moléculas de água. Essa interação de natureza eletrostática é ilustrada pela Figura 19.

Figura 19: Ilustração da solvatação



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

Uma vez realizada essa mistura, a concentração de íons presente na água aumenta. Ao ser adicionado à água soluto suficiente, a substância passa a se tornar condutora de eletricidade, devido à quantidade substancial de íon presentes, que são portadores de carga.

A concentração molar de uma solução (ou molaridade) é uma unidade de medida que indica a quantidade de soluto, em mol, presente no solvente, em litros.

$$M = \frac{m}{m_m V} \quad (22)$$

A Equação 22 expressa a relação entre a concentração, M , a massa do soluto, m , a massa molar do soluto, m_m , e o volume da solução, V .

2.7. Eletrólise

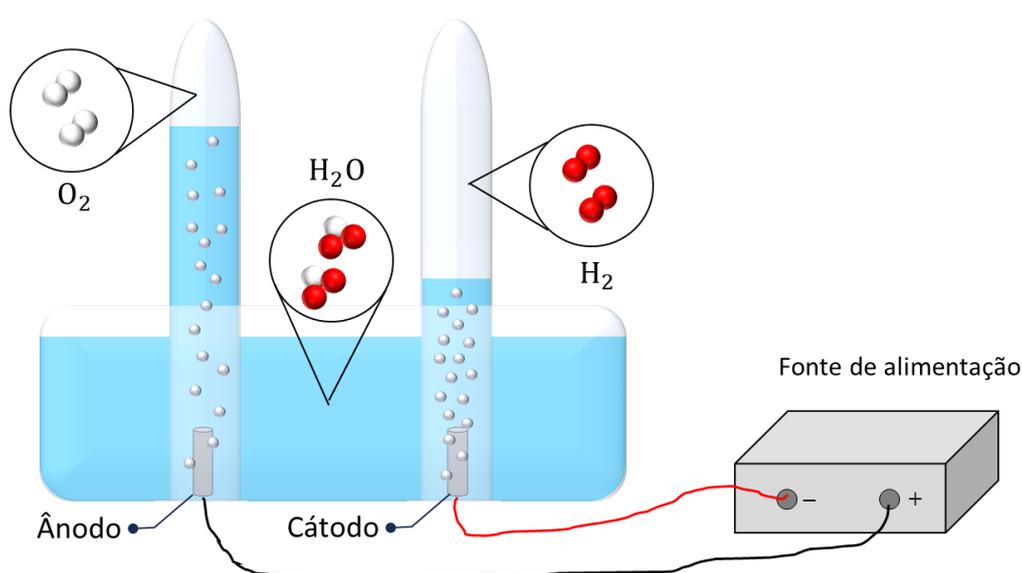
O fenômeno da eletrólise foi observado pela primeira vez nos anos 1800, por William Nicholson e Anthony Carlisle (FERREIRA et al., 2023, p. 3). O termo “eletrólise” tem origem no idioma grego e é constituído de duas partes: *elektron*, que significa “âmbar” e, por extensão, “eletricidade”; e *lysis*, que significa “dissociação” ou “decomposição”. Se trata de uma reação de decomposição ocasionada devido à presença de corrente elétrica.

A água pura, como discutido anteriormente, não possui condutividade elétrica significativa, o que dificulta o processo de eletrólise. No entanto, a adição de certos solutos, como sais, ácidos ou bases, pode fornecer à água a capacidade de conduzir corrente elétrica, uma vez que eles liberam íons na solução. Com a liberação dos íons, o processo de eletrólise da água pode ser executado.

2.7.1. Célula eletrolítica

O dispositivo usado para executar o processo de eletrólise é conhecido como célula eletrolítica. Um modelo básico de célula eletrolítica consiste em um recipiente que normalmente é de um material inerte e não condutor, onde contém uma solução eletrolítica. A célula possui dois eletrodos, normalmente dispostos como barras verticais, imersos no líquido. Um dos eletrodos é o ânodo (conectado ao polo positivo da fonte de tensão) e o outro é o cátodo (conectado ao polo negativo).

Figura 20: Ilustração de uma célula eletrolítica



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

Os eletrodos são feitos de materiais condutores, podendo ser metais ou carbono, dependendo do tipo de eletrólito usado e das reações envolvidas. A fonte de tensão externa fornece a energia necessária para que a corrente elétrica flua através do sistema, forçando a quebra das ligações químicas das moléculas de água e o movimento dos íons na solução. O design da célula eletrolítica deve garantir que os eletrodos estejam adequadamente espaçados e que a corrente possa circular de maneira eficiente.

Conforme as reações de decomposição das moléculas de água ocorrem, o líquido contido dentro dos tubos é reduzido, enquanto os gases liberados são armazenados na parte superior dos tubos, conforme ilustrado na Figura 20.

Alguns modelos de células podem incluir separadores ou membranas para evitar a mistura dos produtos formados em cada eletrodo. O objetivo principal da célula eletrolítica é criar um ambiente controlado onde a passagem de corrente elétrica resulte em processos químicos específicos.

2.7.2. Processos químicos na eletrólise da água

Ao aplicar a diferença de potencial elétrico entre os dois eletrodos submersos na solução, o processo eletroquímico de decomposição das moléculas de água é iniciado com a reação de ionização, onde as moléculas de H₂O são decompostas em íons de hidrogênio, H⁺, e hidróxido, OH⁻.



Devido à presença do campo elétrico, os íons são direcionados para os eletrodos de acordo com sua carga: os ânions OH⁻ são atraídos para o ânodo (eletrodo positivo), enquanto os cátions H⁺ migram em direção ao cátodo (eletrodo negativo). Nestes eletrodos, ocorrem reações parciais denominadas semirreações, onde há oxidação e redução das respectivas espécies químicas.

No ânodo, ocorre a semirreação de oxidação, que consiste na perda de elétrons por parte das espécies químicas. Nesse processo, os íons OH⁻ são oxidados, resultando na formação de oxigênio molecular, água e a liberação de elétrons, conforme a Equação 24.



Enquanto isso, no cátodo ocorre a semirreação de redução, caracterizada pelo ganho de elétrons pelas espécies químicas. Os íons H⁺ são reduzidos, capturando elétrons e acarretando na formação de hidrogênio molecular, H₂, como representado pela Equação 25.



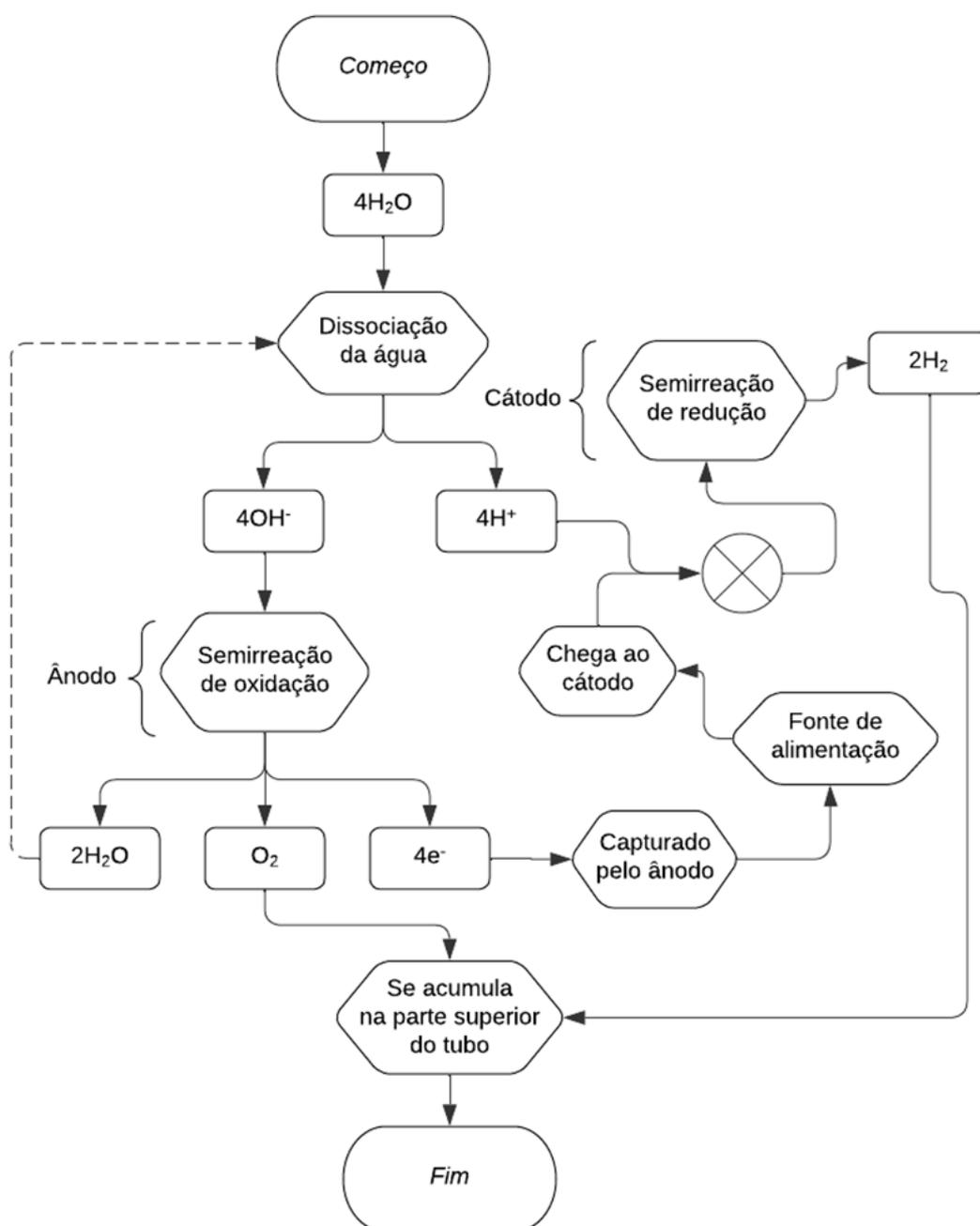
Os elétrons, liberados no ânodo, atravessam a fonte de tensão e são recebidos no cátodo, completando o circuito.

Também estão presentes na solução os íons Na⁺, resultantes da dissociação do hidróxido de sódio. Entretanto, durante o processo de eletrólise apenas os íons H⁺ participam da reação de redução no cátodo. Isso ocorre porque o potencial padrão de redução do H⁺ é mais favorável do que o do Na⁺, logo, os íons H⁺ são

preferencialmente reduzidos a hidrogênio molecular enquanto os íons Na^+ permanecem na solução.

Nas condições normais de temperatura e pressão a água encontra-se líquida, porém o H_2 e O_2 encontram-se na fase gasosa (GODULA-JOPEK, 2015, p. 33). Dessa forma, enquanto acontece a eletrólise da água há formação de bolhas nos eletrodos, onde são liberados os gases hidrogênio, no cátodo, e oxigênio, no ânodo. O processo é ilustrado no fluxograma da Figura 21.

Figura 21: Fluxograma do processo de eletrólise



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

O processo completo pode ser descrito pela equação global da reação:



Para que moléculas de água se dividam é necessária uma quantidade mínima de energia, que significa um valor mínimo para a diferença de potencial elétrico. Considerando o oxigênio e o hidrogênio como gases ideais a uma temperatura de 298 K, a diferença de potencial necessária para a decomposição das moléculas de água em meio alcalino é de pelo menos 1,23 V (ZHANG et al., 2020, p. 29).

Na prática, contudo, 1,23 V não é suficiente, sendo necessário um valor mais alto do que o valor teórico. Isso ocorre devido alguns obstáculos durante o processo que acabam consumindo mais energia do que o previsto, como a resistência interna da célula e eventuais barreiras que geram dificuldade para que a reação inicie.

Zhang (2020, p. 29) explica que qualquer excesso de potencial, η , é usado principalmente para superar as perdas de resistência na célula, η_Ω , e nas barreiras cinéticas das semirreações que ocorrem no ânodo, η_a , e no cátodo η_c . Assim, o potencial operacional, E_{op} , da decomposição da água pode ser expresso pela Equação 27.

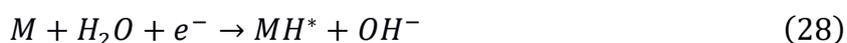
$$E_{op} = 1,23 V + \eta_a + \eta_c + \eta_\Omega \quad (27)$$

A equação sugere que se pode aumentar a eficiência do processo ajustando o design da célula de forma a diminuir a perda de energia e usando bons eletrocatalisadores.

2.7.3. Reações de Evolução do Hidrogênio (HER)

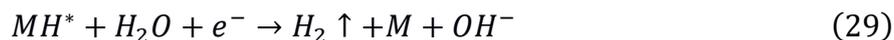
O processo descrito anteriormente se trata de uma simplificação. Nesse tópico será discutido de forma mais aprofundada o processo de formação da molécula de H_2 .

A reação de evolução do hidrogênio (HER) é um processo que consiste em algumas fases, começando com a adsorção e a dissociação da água, que ao quebrar as ligações H-O-H pode gerar H^* (CHEN et al., 2019, p. 3). Esse processo, chamado de reação de Volmer, pode ser descrito pela Equação 28.

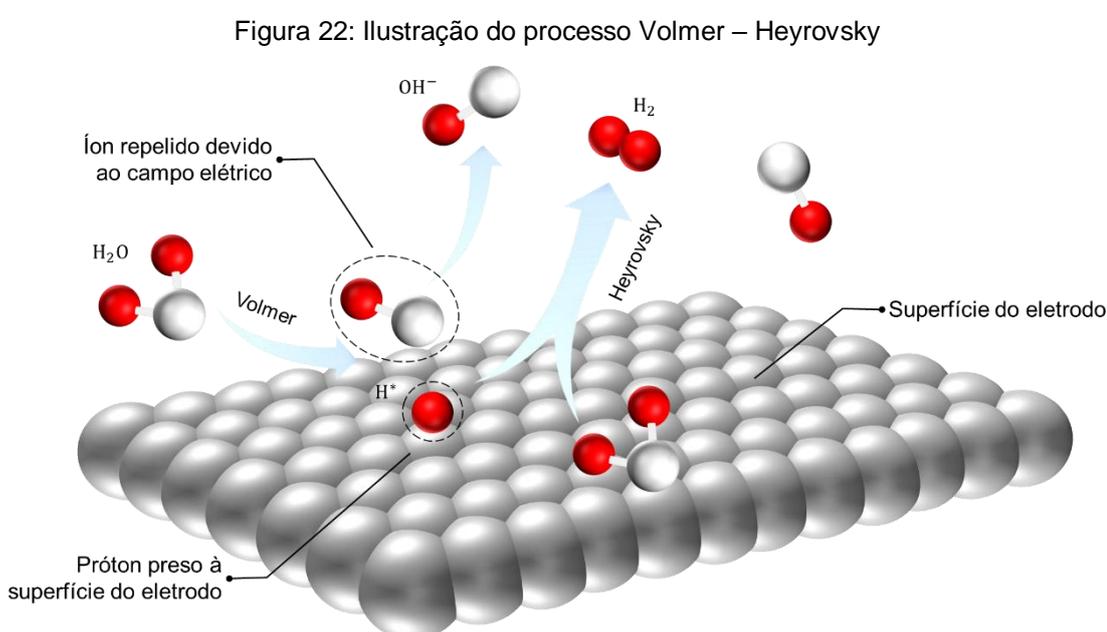


M representa o metal que atua como catalisador na HER. Esse metal facilita a adsorção e dessorção de hidrogênio, aumentando a eficiência da reação. Uma vez

que o eletrodo é o componente físico onde a reação ocorre, sua superfície pode ser revestida com o metal catalisador ou o eletrodo pode ser integralmente constituído desse metal catalisador. O H^* representa um átomo de hidrogênio adsorvido, ou seja, em MH^* o asterisco indica que o átomo de hidrogênio está preso à superfície M do eletrodo, formando um adsorvato de hidrogênio. Após essa etapa, ocorre a etapa de Heyrovsky, que pode ser descrita pela Equação 29.



A Figura 22 ilustra o processo Volmer – Heyrovsky.



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

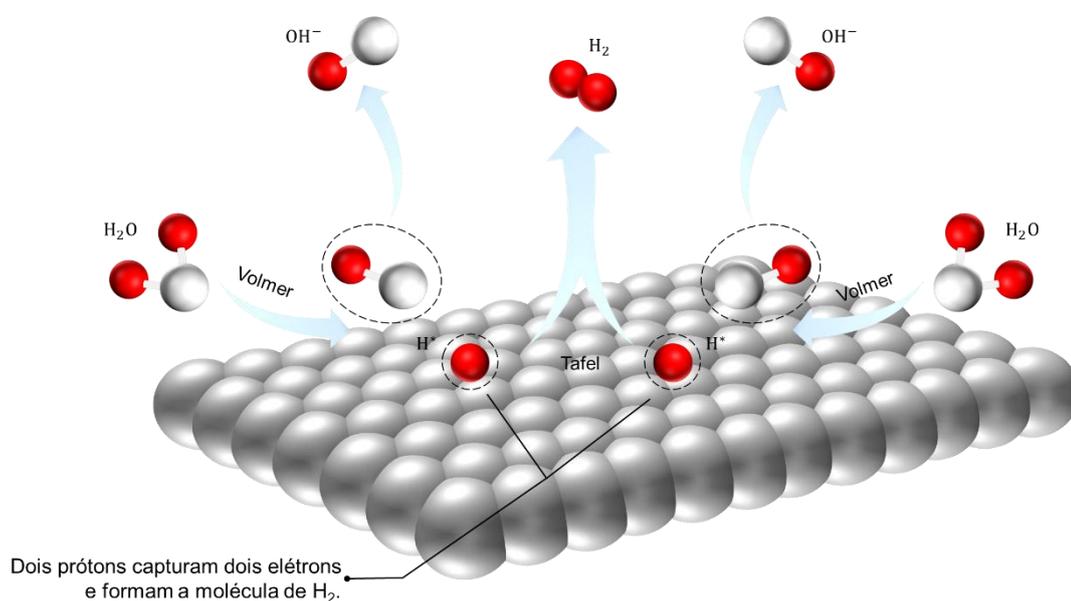
Uma das ligações da molécula de H_2O é quebrada, resultando na liberação de um próton, H^+ , e um íon hidróxido, OH^- . O íon hidróxido possui carga negativa, portanto, devido ao campo elétrico, ele é repelido da superfície do cátodo e direcionado ao ânodo. O próton liberado é adsorvido na superfície do cátodo e captura um elétron, formando um adsorvato de hidrogênio, MH^* . O próton adsorvido reage com outra molécula de H_2O , capturando um de seus prótons e mais um elétron, acarretando na formação da molécula de H_2 .

Uma alternativa à reação de Heyrovsky é a reação de Tafel, que pode ser expressa pela Equação 30.



O processo Volmer – Tafel é ilustrado pela Figura 23.

Figura 23: Ilustração do processo Volmer – Tafel



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

Nesse processo, dois adsorvatos de hidrogênio na superfície do eletrodo se aproximam e se combinam. A combinação resulta na formação da molécula de H₂, assim, os elementos de superfície, outrora ocupados pelos átomos de hidrogênio adsorvidos, ficam disponíveis para adsorver novos átomos de hidrogênio.

2.7.4. Leis de Faraday da eletrólise

As leis da eletrólise de Faraday, estabelecidas entre 1833 e 1834, são essenciais para a compreensão dos processos eletrolíticos. A primeira lei de Faraday estabelece que a quantidade de substância que se decompõe nos eletrodos durante a eletrólise é diretamente proporcional à quantidade de carga elétrica que passa (WALSH, 1991, p. 482).

$$w \propto Q \quad (31)$$

Isso significa que quanto maior a quantidade de carga elétrica Q , ou seja, quanto mais elétrons passam pelo sistema, maior será a massa w de substância se decompondo nos eletrodos.

A segunda lei de Faraday estabelece que a quantidade de substância decomposta nos eletrodos é diretamente proporcional ao equivalente químico da

substância, um termo que caiu em desuso e foi substituído pela razão entre massa molar da espécie química e a quantidade de elétrons transferidos na reação (WALSH, 1991, p. 482). Na época de Faraday os elétrons ainda não haviam sido descobertos, contudo, modernamente isso pode ser expresso como:

$$w \propto \frac{m_m}{z} \quad (32)$$

A segunda lei complementa a primeira ao correlacionar a massa da substância, w , com a massa molar, m_m , e o número de elétrons transferidos na reação, z .

No cátodo, onde ocorre a semirreação de redução, é necessária a transferência de 2 elétrons para formar uma única molécula de H_2 , conforme a Equação 25, portanto, nesse caso $z = 2$. No ânodo, contudo, ocorre a semirreação de oxidação, sendo necessária a transferência de 4 elétrons para formar uma única molécula de O_2 , conforme a Equação 24, portanto, nesse caso $z = 4$.

Assim, através da combinação das duas leis, pode-se expressar o fenômeno matematicamente com a Equação 33:

$$w = \frac{1}{F} \frac{Q m_m}{z} \quad (33)$$

O termo F representa a constante de Faraday, cujo valor aceito é 96485 C/mol.

A carga elétrica é, por definição, igual à integral da corrente elétrica em relação ao tempo, conforme a Equação 34.

$$Q = \int_{t_0}^t I \cdot dt \quad (34)$$

Dessa forma, pode-se substituir 34 em 33, resultando em:

$$w = \frac{m_m}{F \cdot z} \int_{t_0}^t I \cdot dt \quad (35)$$

Com isso, é possível prever quanta massa de hidrogênio e oxigênio é liberada num determinado intervalo de tempo. Reescrevendo a equação, se obtém:

$$\frac{w}{m_m} = \frac{1}{F \cdot z} \int_{t_0}^t I \cdot dt \quad (36)$$

O membro esquerdo equivale ao número de mols, portanto pode ser escrito como:

$$n_{mol} = \frac{1}{F \cdot z} \int_{t_0}^t I \cdot dt \quad (37)$$

É possível simplificar o modelo assumindo que a intensidade de corrente elétrica se mantém constante e que $t_0 = 0$ s.

$$n_{mol} = \frac{I \cdot t}{F \cdot z} \quad (38)$$

A Equação 38 sugere que a quantidade de moléculas formadas aumenta linearmente com o tempo t , portanto o gráfico do número de mols vs tempo deve ser uma reta. Nesse contexto, o termo $\frac{I}{F \cdot z}$ corresponde ao coeficiente angular da reta, indicando a taxa de variação do número de mols dos gases produzidos. Isso significa que quanto maior a intensidade de corrente elétrica I , maior será a inclinação da reta. Em outras palavras, quanto maior a intensidade da corrente elétrica mais moléculas de gás são produzidas por unidade de tempo.

2.7.5. Hidrogênio verde e o meio ambiente

O hidrogênio é o elemento mais simples e abundante no Universo, correspondendo a aproximadamente 75% de sua massa e 90% de todas as moléculas. Na Terra, entretanto, ele não é encontrado em sua forma pura, estando combinado em diversas substâncias, como hidrocarbonetos e seus derivados, bem como na água, minerais, oceanos, rios e organismos vivos. Por isso, a produção de hidrogênio requer sua extração a partir de várias fontes, entre as quais se destacam: gás natural, etanol, metanol, água, biomassa, metano, algas e bactérias, além de combustíveis fósseis como gasolina e diesel (VARGAS et al., 2006, p. 2-3).

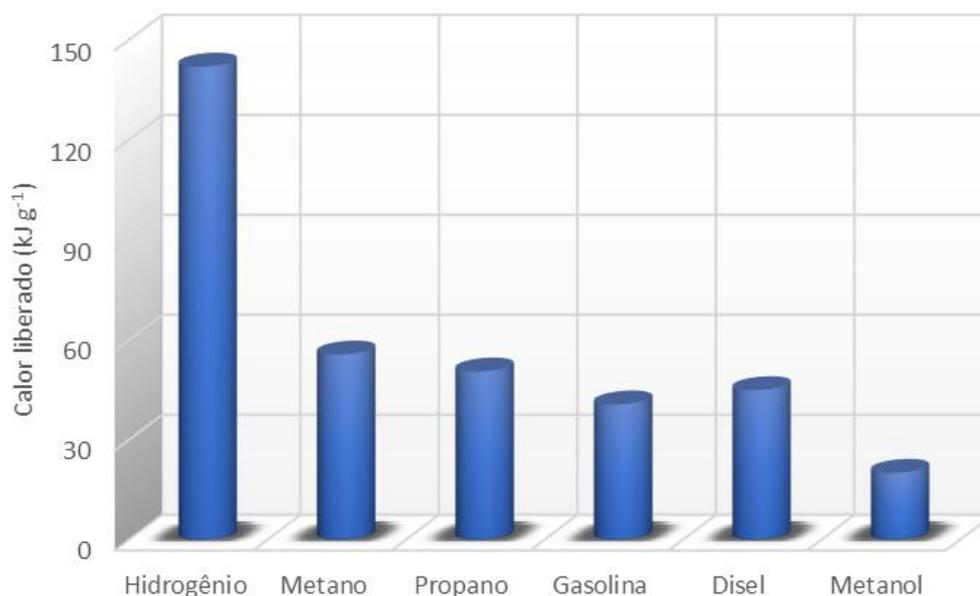
Alguns cientistas produziram hidrogênio antes dele ser formalmente reconhecido como um elemento químico. Em 1671, Robert Boyle obteve hidrogênio ao realizar experimentos com o ferro e ácidos, mas foi apenas em 1766 que Henry Cavendish caracterizou e reconheceu o hidrogênio como um elemento distinto, inicialmente nomeado de “ar inflamável”. Cavendish demonstrou que a queima desse gás produzia água e, posteriormente, Pierre Simon Laplace e Antoine Lavoisier replicaram o experimento. Com isso, Lavoisier nomeou o elemento de “hidrogênio”, derivado do grego *hydro* (água) e *genes* (gerar), em referência à formação de água ao ser queimado (CRUZ, 2010, p. 6).

Devido ao seu baixo peso molecular, o hidrogênio é uma boa opção de combustível empregado em jatos e foguetes, bem como diversas outras aplicações industriais. Estêvão (2008, p. 16) explica que a agência espacial americana, NASA, usa o hidrogênio como propelente em seus projetos espaciais para gerar a propulsão dos foguetes e, quando utilizado em células, a água que é gerada no processo é consumida pelos astronautas. A maior parte do hidrogênio produzido globalmente é

usada como matéria-prima na fabricação de fertilizantes e plásticos, bem como sua aplicação industrial no refino de petróleo.

Silva (2016, p. 124) explica que a quantidade de calor liberada por unidade de massa no processo de combustão do hidrogênio é maior do que qualquer outro combustível. Assim, um automóvel movido a hidrogênio tem sua potência maior do que aqueles movidos a combustíveis fósseis, conforme ilustra o Gráfico 2.

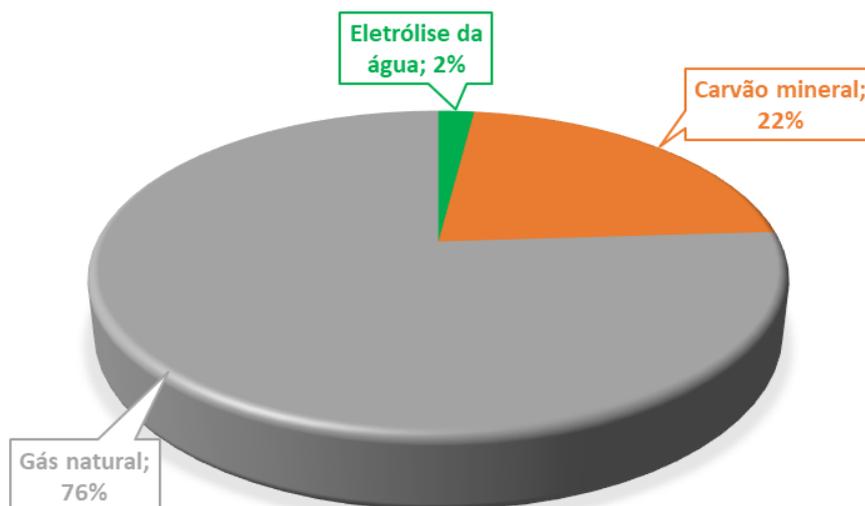
Gráfico 2: Calor liberado durante a combustão de diferentes combustíveis



Fonte: Elaborado pelo autor com dados extraídos de Silva (2016, p. 124)

Existem diversas formas de se obter hidrogênio, cada uma com impactos ambientais distintos. De acordo com a Energy Policy at Columbia University (2021), aproximadamente 76% do hidrogênio global é produzido a partir do gás natural, com 22% proveniente da gaseificação de carvão e 2% por eletrólise. 98% do hidrogênio produzido é extraído com base em combustíveis fósseis sem o controle de emissão de CO₂, sendo responsável por 830 Mt de CO₂ a cada ano.

Gráfico 3: Produção global de hidrogênio



Fonte: Elaborado pelo autor com dados extraídos da Energy Policy at Columbia University (2021)

O mercado global de produção de hidrogênio é dominado por processos que utilizam combustíveis fósseis, especialmente o gás natural, onde o hidrogênio é extraído através do processo de reforma a vapor. De acordo com Souza e Silveira (2004, p. 9), o reformador a vapor transforma gás natural em hidrogênio através de dois processos principais. No primeiro, os hidrocarbonetos presentes no gás natural, como metano, CH_4 , e etano, C_2H_6 , reagem com vapor d'água a altas temperaturas, produzindo monóxido de carbono, CO , e hidrogênio, H_2 .



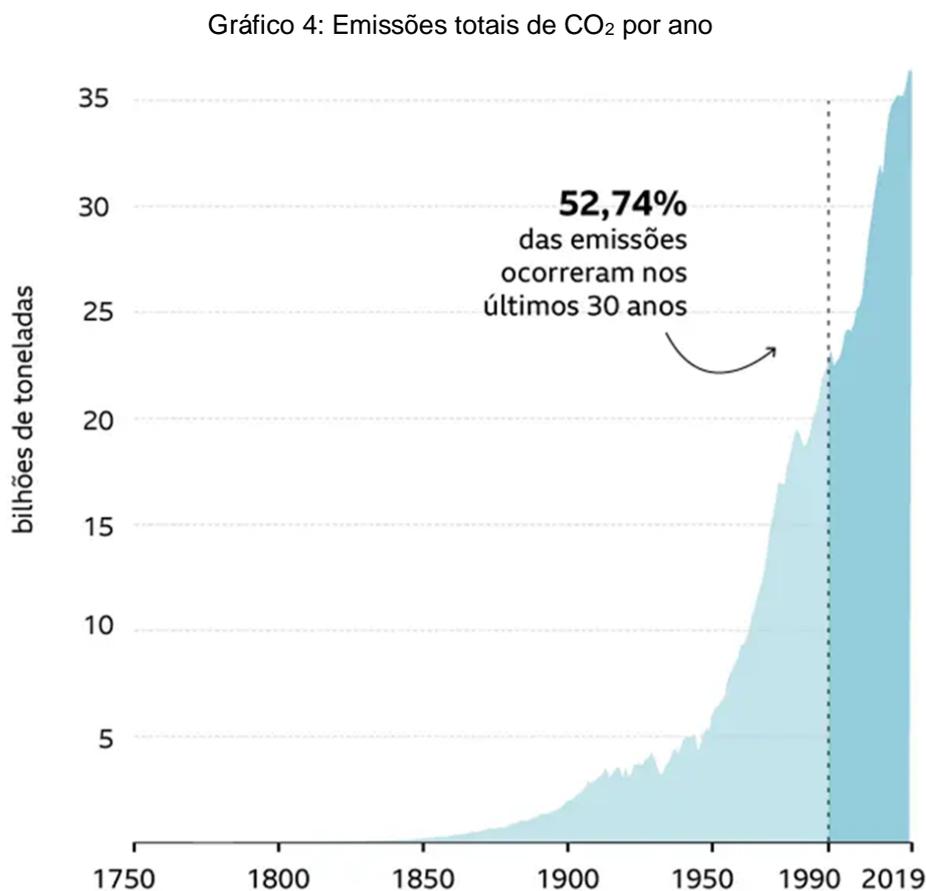
No segundo passo ocorre a reação de troca, que é uma reação secundária em que o monóxido de carbono resultante reage com mais vapor de água, gerando dióxido de carbono, CO_2 , e mais hidrogênio.



A extração de hidrogênio do gás natural pelo processo de reforma a vapor acarreta na formação de subprodutos como monóxido de carbono e dióxido de carbono, que são gases poluentes. O hidrogênio resultante desse processo é denominado hidrogênio cinza, pois, embora a combustão do hidrogênio em si não seja poluente, sua extração através desse processo é.

Esses métodos tradicionais de extração de hidrogênio têm um custo ambiental elevado, pois contribuem para o aumento das emissões de CO_2 , um dos principais gases responsáveis pelo aquecimento global, sendo, portanto, um problema que deve

ser contornado com urgência. O Gráfico 4 mostra como a emissão de carbono vem aumentando cada vez mais.



Fonte: BBC

Para atingir o êxito na política de descarbonização é necessário recorrer ao hidrogênio verde, uma forma de combustível limpo que pode ser produzido a partir de fontes renováveis. Ao utilizar-se de fontes renováveis (como solar ou eólica) para extraí-lo da água por eletrólise, o hidrogênio verde torna-se uma opção completamente sustentável e promissora, evitando a emissão de gases que contribuem para o efeito estufa, tanto durante a sua combustão quanto durante a sua produção, o que pode ajudar amenizar os impactos ambientais negativos. Portanto, a investigação e a compreensão de como ocorre esse processo torna-se crucial para garantir um futuro verde, o que enfatiza a importância de pesquisas nesse campo.

Segundo o Conselho Global de Hidrogênio, estima-se que, até 2050, o hidrogênio verde será responsável por cerca de 20% da demanda energética mundial, representando um mercado avaliado em 2,5 trilhões de dólares e gerando

aproximadamente 30 milhões de empregos. Além de ser uma alternativa energética e ambiental, o hidrogênio verde também se destaca nos setores sociais e econômicos (COUNCIL, 2024 apud GARCIA, 2024).

3. METODOLOGIA

3.1. Etapa 1: Preparo da solução eletrolítica

Conforme discutido no tópico 2.5, a constante de dissociação da água pura é muito pequena, o que significa que o processo de autoionização é muito limitado e, conseqüentemente, resulta em uma concentração insuficiente de íons livres para que a água pura seja capaz de conduzir uma corrente elétrica.

Para contornar esse problema e tornar a água uma condutora de eletricidade, foi realizado o preparo de uma solução de natureza eletrolítica. Isso foi feito adicionando um soluto para ser dissolvido na água e liberar íons suficiente para possibilitar a condução de uma corrente elétrica.

O material escolhido como soluto foi o hidróxido de sódio, NaOH, devido a sua eficiência como eletrólito e o seu baixo custo. Ao adicionar o composto iônico NaOH na água destilada, as interações de natureza elétrica promovem o desmanche do retículo cristalino, conforme discutido no tópico 2.6.

A estratégia descrita nessa etapa contorna o problema da baixa condutividade elétrica da água, possibilitando a execução do processo de eletrólise.

3.2. Etapa 2: Controle das variáveis

Para alcançar o objetivo de isolar a influência que a diferença de potencial e a concentração de NaOH exercem no processo de eletrólise, estabeleceu-se um controle rigoroso das variáveis que poderiam interferir na taxa de produção de hidrogênio e oxigênio. Esse controle é essencial para garantir a precisão dos resultados e permitir uma análise mais acurada.

A influência da diferença de potencial e da concentração de NaOH foram averiguadas separadamente. O estudo foi dividido em duas investigações distintas para avaliar esses fatores de forma independente.

No primeiro momento, o estudo focou na análise da influência que a diferença de potencial aplicada à célula eletrolítica apresenta na eficiência do processo de eletrólise. Assim, a concentração de NaOH foi mantida constante, e apenas a diferença de potencial foi sendo reajustada ao longo dos ensaios.

Em outro momento, o estudo focou na análise da influência que a concentração de NaOH apresenta na eficiência do processo de eletrólise, mantendo a diferença de potencial constante e reajustando a concentração de eletrólitos na solução a cada ensaio realizado.

A temperatura também apresenta um papel significativo na eficiência do processo de eletrólise, portanto ela também foi controlada, monitorada com um termômetro de mercúrio e mantida constante para amenizar variações térmicas que pudessem interferir na eficiência das reações eletrolíticas.

Figura 24: Medição da temperatura da solução eletrolítica



Fonte: Elaborado pelo autor

Outra propriedade que afeta o desempenho do processo de eletrólise é o material que constitui os eletrodos. Dessa forma, os eletrodos usados ao longo de todo o estudo são constituídos de uma liga de níquel cromo.

Esse controle de variáveis permitiu isolar os efeitos da diferença de potencial, bem como da concentração da concentração de eletrólitos, nas taxas de produção dos gases hidrogênio e oxigênio.

3.3. Etapa 3: Equipamentos e procedimentos experimentais

A fonte de alimentação utilizada foi o modelo POL-16E. De acordo com a fabricante, o equipamento possui precisão dos indicadores digitais de \pm (1% da leitura + 3 mV) para tensão e \pm (1% da leitura + 3 mA) para corrente.

Figura 25: Fonte de alimentação POL-16E.



Fonte: Politem Instrumentos de Medição Ltda.

Durante o monitoramento do processo de eletrólise, a fonte de alimentação foi ajustada para ser empregada uma corrente contínua. A utilização da corrente contínua é mais adequada para esse tipo de experimento, pois ao empregar uma corrente alternada o sentido dela mudaria constantemente, resultando na inversão periódica do cátodo e do ânodo. Essa inversão causaria uma alternância entre a produção de hidrogênio e oxigênio nos eletrodos, impossibilitando a análise dos respectivos gases de forma separada e independente.

A célula eletrolítica usada para conduzir o estudo foi o Voltômetro de Hoffmann, desenvolvido pela Cidepe (Figura 26), e os eletrodos utilizados são constituídos de uma liga de níquel cromo.

Figura 26: Voltômetro de Hoffmann



Fonte: Cidepe

O dispositivo é composto por três tubos verticais, nos quais a solução é injetada na célula a partir da extremidade superior do tubo central. Nos tubos laterais, os eletrodos são acoplados na parte inferior e conectados à fonte de alimentação, permitindo a condução de corrente elétrica e a execução da eletrólise.

À medida que os gases hidrogênio e oxigênio são gerados nos eletrodos ocorre a formação de bolhas que sobem através dos tubos laterais da célula, resultando na diminuição do volume de líquido e no acúmulo de gás na parte superior, conforme discutido no tópico 2.7.1.

O volume dos gases acumulados na parte superior dos tubos pode ser observado pelas marcações no dispositivo. Assim, com o uso do cronômetro, o processo de eletrólise foi monitorado com o volume de gás em cada tubo sendo registrado em função do tempo.

3.4. Etapa 4: Coleta e análise dos dados

Para realizar o tratamento dos dados experimentais coletados, utilizou-se o software *SciDAVis* para realizar o ajuste das retas, permitindo uma análise das taxas

de produção de cada gás. Posteriormente, os resultados foram plotados em gráficos com o uso da biblioteca *matplotlib* do *Python*, que possibilitou a visualização gráfica dos dados coletados ao longo dos ensaios.

Os dados coletados no monitoramento do volume em função do tempo possibilitaram o cálculo das taxas de produção dos gases em cada tubo, considerando separadamente os volumes acumulados de hidrogênio e oxigênio.

Para isso, foi realizado um ajuste de reta para cada conjunto de dados, correspondendo ao volume produzido no cátodo e no ânodo. Esse ajuste permitiu determinar as inclinações das retas, que representam as taxas de produção de hidrogênio e oxigênio. Essas taxas foram fundamentais para compreender a eficiência do processo de eletrólise sob diferentes condições experimentais. Os resultados experimentais obtidos foram analisados e discutidos, sendo comparados com as previsões teóricas.

Para investigar como a diferença de potencial se relaciona com essas taxas, o procedimento experimental foi replicado 12 vezes, com a diferença de potencial sendo reajustada a cada ensaio, o que permitiu a análise da relação entre a taxa de produção dos gases e a diferença de potencial aplicada. Isso possibilitou a construção gráfica para visualizar como as taxas de produção se comportam com a mudança da diferença de potencial elétrico.

Ao perceber que as curvas de taxa *versus* diferença de potencial não passariam pela origem, foram realizados mais 5 ensaios, ajustando gradualmente a fonte de alimentação para valores menores de tensão, com o objetivo de rastrear o ponto em que as taxas de produção dos gases tendem a zero. Esse ponto representa a diferença de potencial mínima para a eletrólise acontecer.

Após essa análise, deu-se início à nova fase da pesquisa, onde foi investigado como a concentração de NaOH na água se relaciona com essas taxas. Nessa parte do estudo, a diferença de potencial aplicada na célula foi mantida constante, enquanto a cada ensaio realizado a concentração de NaOH na solução foi reajustada, seguindo os mesmos protocolos experimentais já discutidos, com o objetivo de isolar o efeito da concentração nas taxas de produção dos gases.

Foram realizados 5 ensaios para coletar os dados e construir o gráfico que mostra a relação entre as taxas de produção dos gases em função da concentração.

Além disso, um experimento secundário foi realizado com cada uma das 5 soluções usadas, onde foi averiguada a relação entre a diferença de potencial e a

corrente elétrica em cada concentração, com o objetivo de calcular a resistência elétrica da solução em cada concentração. Isso permitiu construir o gráfico que mostra a relação entre a resistência elétrica e a concentração de NaOH, contribuindo para a discussão.

Por fim, a metodologia empregada é ilustrada pelo fluxograma da Figura 27.

Figura 27: Fluxograma da metodologia



Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

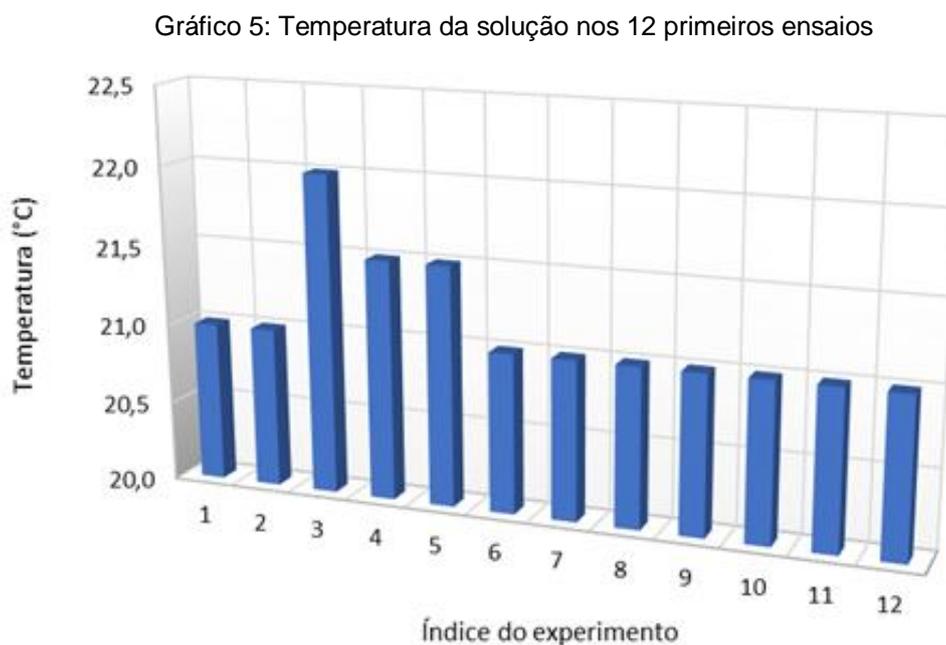
O fluxograma organiza e descreve as etapas metodológicas do estudo, fornecendo uma visão sequencial e estruturada, o que possibilita a sua replicação, bem como a aplicação do experimento em sala de aula.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1. Influência da diferença de potencial elétrico

O controle da temperatura durante todo o experimento foi um fator fundamental para garantir a precisão dos resultados. A temperatura da solução eletrolítica é um fator muito importante no processo de eletrólise, podendo impactar diretamente a eficiência da produção de hidrogênio e oxigênio. Isso significa que para isolar os efeitos da diferença de potencial na eficiência da produção dos gases é importante ter o controle dessa variável.

O Gráfico 5 apresenta a temperatura da solução eletrolítica em cada um dos 12 ensaios realizados nessa fase da pesquisa, com o eixo horizontal representando os índices numéricos dos ensaios, de 1 a 12.



Fonte: Elaborado pelo autor (2022)

Yuvaraj e Santharaj (2014, p. 85) explicam que variações significativas de temperatura durante o processo de eletrólise afetam substancialmente a demanda de energia elétrica da célula, com o processo de eletrólise sendo muito mais eficiente quando ocorre em temperaturas mais elevadas.

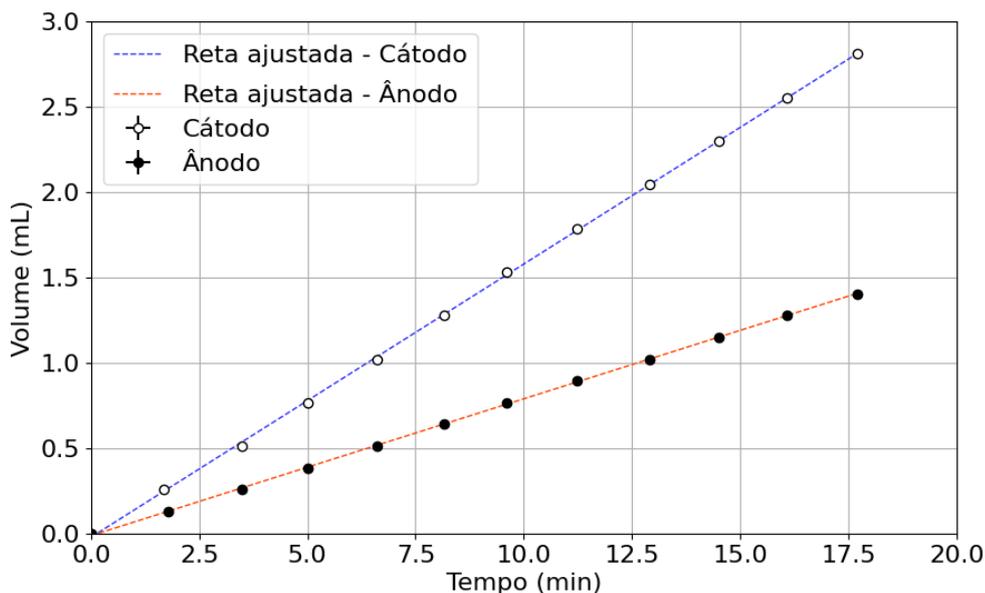
Esse fenômeno pode ser atribuído ao fato de que a energia necessária para quebrar as moléculas de água é menor quando sua temperatura está mais elevada. Além disso, a temperatura da solução eletrolítica mais elevada pode ser interpretada microscopicamente como suas moléculas com mais energia cinética, o que significa que os íons possuem maior mobilidade e, portanto, a condutividade iônica é maior, facilitando a passagem de corrente.

Uma temperatura mais elevada também significa que as moléculas da solução eletrolítica interagem mais com a superfície do eletrodo, uma vez que colidem com mais intensidade e frequência, facilitando as reações químicas adsorção na superfície do eletrodo.

As temperaturas registradas durante os ensaios (Gráfico 2) apresentaram uma média de 21,2 °C, com um desvio padrão de 0,3 °C e coeficiente de variação de 1,54%, indicando que a dispersão em torno da média apresentou pouca variação. Esses resultados demonstram que o controle da temperatura foi realizado de maneira eficiente, mantendo-se dentro de uma faixa restrita e, portanto, não apresentou impacto significativo nos resultados, o que possibilitou isolar mais adequadamente os efeitos da diferença de potencial.

O Gráfico 6 apresenta os resultados de um dos ensaios realizados, no qual o procedimento foi executado com a célula eletrolítica submetida à uma diferença de potencial de 10,0 V, resultando em uma corrente de 0,02 A. O gráfico mostra os dados registrados de volume em função do tempo, tanto do tubo correspondente ao cátodo quanto do tubo correspondente ao ânodo, permitindo uma comparação entre os volumes de hidrogênio e oxigênio produzidos ao longo do experimento.

Gráfico 6: Volume dos gases H₂ e O₂ em função do tempo



Fonte: Elaborado pelo autor (2022)

Os dados obtidos revelam uma tendência linear no aumento do volume dos gases ao longo do tempo. Essa linearidade sugere que a produção de gases foi constante durante o experimento. A linearidade observada é um resultado experimental que está de acordo com o previsto pela Equação 38, traçando um paralelismo entre o volume e o número de mols das substâncias liberadas.

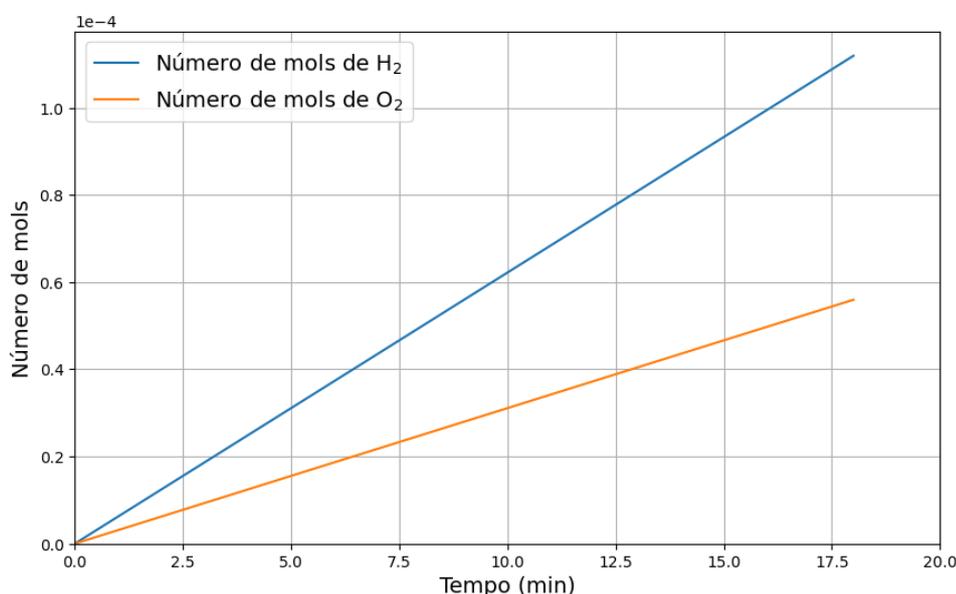
O coeficiente angular da reta observada pode ser interpretado como a taxa de produção dos gases expressa em mL/min. Ao fazer o ajuste da reta para os dados referente ao ânodo, onde ocorre a formação do gás O_2 , foi encontrado um valor de $(0,0650 \pm 0,0007)$ mL/min. Esse resultado sugere que, em média, o volume de oxigênio produzido no ânodo aumenta aproximadamente 0,0650 mL a cada minuto de funcionamento da célula eletrolítica. O ajuste apresenta um coeficiente de correlação linear de 0,9999, indicando uma correlação linear alta, e um R^2 de 0,9998, que indica que o modelo linear encontrado explica bem os dados.

Por outro lado, ao analisar os dados referentes ao cátodo, onde ocorre a formação do gás H_2 , o valor encontrado para taxa de produção foi de $(0,1304 \pm 0,0008)$ mL/min. Este valor revela que, a cada minuto, o volume de hidrogênio produzido aumenta cerca de 0,1304 mL. O ajuste apresenta um coeficiente de correlação linear de 0,9999, com um coeficiente de determinação R^2 de 0,9998, sugerindo que o volume de hidrogênio também segue uma tendência altamente linear. Esses altos coeficientes de correlação linear e de determinação indicam que o modelo experimental encontrado apresenta uma forte relação linear entre o volume dos gases e o tempo.

A comparação entre as taxas de produção dos gases gerados nos eletrodos evidencia uma relação notável, sendo a taxa de produção de hidrogênio aproximadamente o dobro da de oxigênio. A razão é de $(0,4985 \pm 0,0062)$. Esse resultado está de acordo com a equação global da reação (Equação 26), cuja proporção é de duas moléculas de H_2 para cada molécula de O_2 que é formada.

Usando a equação 38 pode-se simular evolução do número de mols de hidrogênio e oxigênio ao longo do tempo e plotar as retas teóricas correspondentes ao ensaio descrito no Gráfico 6.

Gráfico 7: Evolução do H_2 e O_2



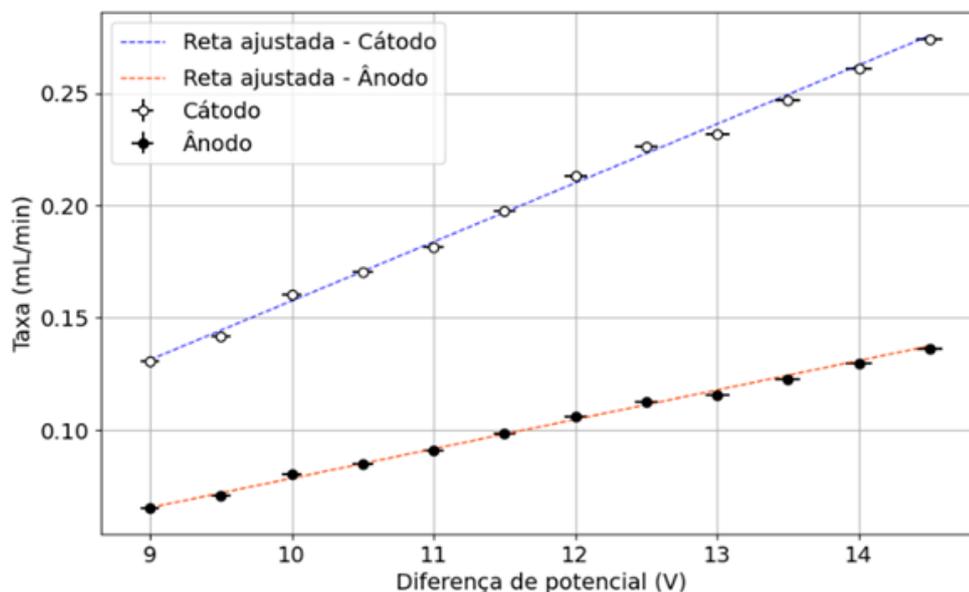
Fonte: Elaborado pelo autor (2024)

A inclinação das retas teóricas no Gráfico 7 é definida pelo fator $\frac{I}{F \cdot z}$ da Equação 38. Uma vez que $z = 2$ para o H_2 e $z = 4$ para o O_2 , pode-se comparar $\frac{I}{2F}$ e $\frac{I}{4F}$. Como $\frac{1}{2}$ é o dobro de $\frac{1}{4}$, a relação teórica também indica uma taxa de formação duas vezes maior para o H_2 . Isso significa que, para cada mol de O_2 gerado, dois mols de H_2 são produzidos. O resultado experimental observado no Gráfico 3 é compatível com a descrição teórica obtida a partir das leis de Faraday.

Após replicar o procedimento experimental em 12 ensaios distintos, com o reajuste da diferença de potencial aplicada à célula eletrolítica em cada um deles, foi possível compilar os dados que resultaram no Gráfico 8. Este gráfico representa a

relação entre a diferença de potencial elétrico aplicada e a taxa de produção dos gases hidrogênio e oxigênio.

Gráfico 8: Taxas de produção em função da diferença de potencial



Fonte: Elaborado pelo autor (2022)

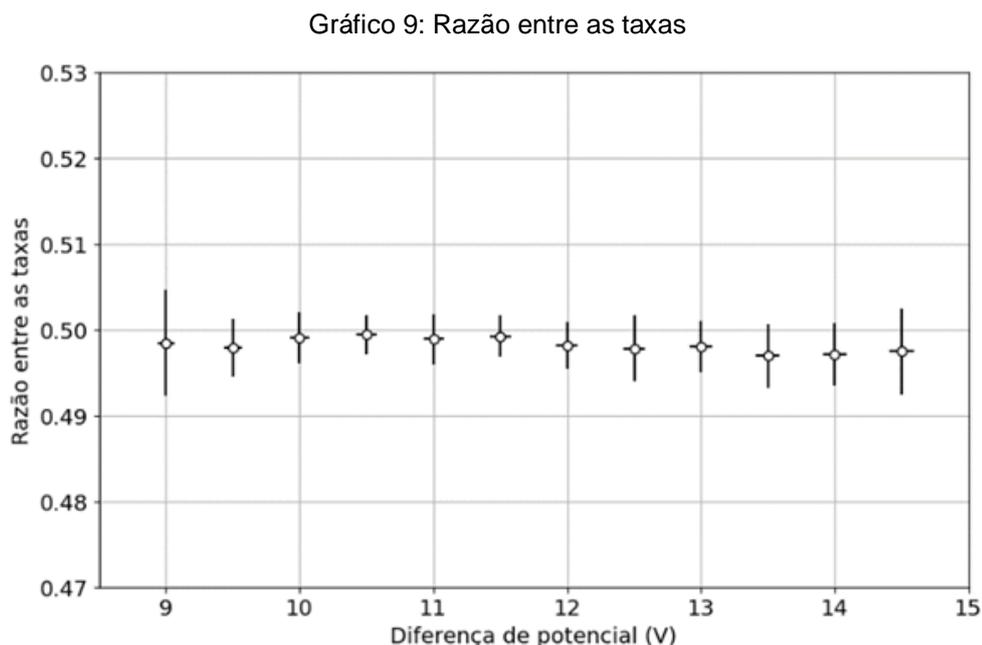
O gráfico revela uma tendência notável: à medida que a diferença de potencial aplicada à célula eletrolítica aumenta, observa-se um aumento proporcional na taxa de produção dos gases. O ajuste de reta para o ânodo revelou um coeficiente de correlação linear de 0,9985, com um coeficiente de determinação R^2 de 0,9970. Esses valores indicam que 99,70% da variação na taxa de produção do oxigênio pode ser explicada pelo reajuste na diferença de potencial na célula.

De maneira semelhante, o ajuste de reta para o cátodo apresentou um coeficiente de correlação linear de 0,9963 com um R^2 de 0,9926, o que significa que 99,26% da variação observada na taxa de produção do hidrogênio pode ser atribuída à variação na diferença de potencial. Essa observação é coerente com os princípios teóricos da eletrólise, segundo os quais um aumento na diferença de potencial intensifica o movimento dos íons na solução, favorecendo a geração mais rápida de H_2 e O_2 .

Uma diferença de potencial mais alta implica em uma corrente elétrica de maior intensidade, resultando em mais elétrons passando pelos eletrodos por unidade de tempo. Consequentemente, isso aumenta a quantidade de elétrons disponíveis para as semirreações de oxidação e redução, promovendo uma maior eficiência na

produção dos gases. Esse resultado também está de acordo com o fator $\frac{I}{F \cdot Z}$, que representa a inclinação das retas que descrevem o número de mols em função do tempo. Quanto maior o valor da corrente, maior a inclinação da reta.

Ao calcular a razão entre as taxas no cátodo e no ânodo, os resultados foram compilados no Gráfico 9.

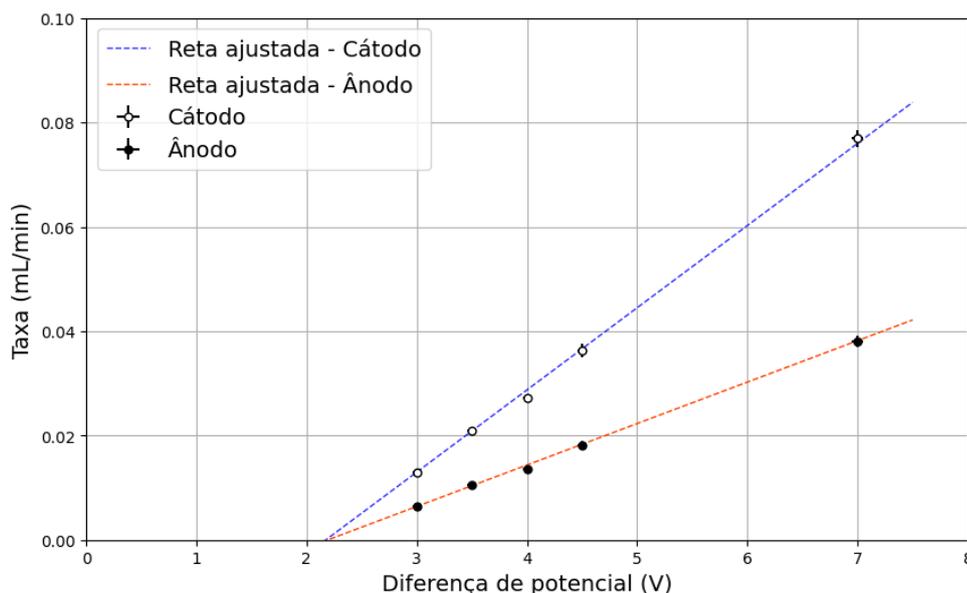


Fonte: Elaborado pelo autor (2022)

Considerando os 12 ensaios realizados, a razão entre as taxas foi $(0,4985 \pm 0,0009)$, o que indica que a taxa de formação de gás no cátodo é cerca de duas vezes maior do que no ânodo independentemente do valor da diferença de potencial na célula.

Para aprofundar a análise, foi realizado um estudo adicional com valores mais baixos de tensão, buscando identificar o ponto em que a produção dos gases se torna inviável e procurando identificar o valor mínimo de diferença de potencial para que a reação possa se desencadear.

Gráfico 10: Taxas vs Tensão



Fonte: Elaborado pelo autor (2022)

Os resultados experimentais evidenciam que as taxas de produção tendem a zero quando a diferença de potencial na célula tende a 2,2 V, sugerindo que esse é o valor mínimo de tensão necessária para que ocorra a produção dos gases nas condições em que o experimento foi realizado.

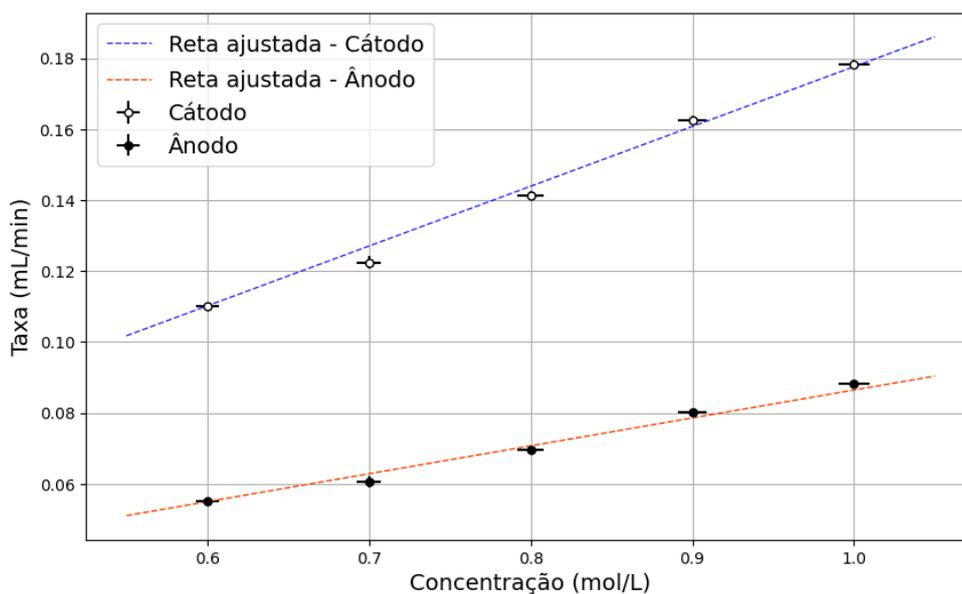
Como discutido no tópico 2.7.2, para que as moléculas de água se dividam é necessária uma certa quantidade de energia, o que implica um valor mínimo de diferença de potencial de 1,23 V. Na prática, contudo, esse valor é geralmente maior que o teórico devido a obstáculos característicos das condições em que o experimento foi executado. O valor excedente é necessário para superar a resistência interna da célula e as barreiras cinéticas das semirreações expressas pela Equação 27.

As barreiras cinéticas no cátodo são devidas à energia necessária para que os elétrons sejam transferidos do eletrodo para os íons presentes na solução e à energia necessária para quebrar e formar ligações químicas na formação do H_2 . No ânodo, as barreiras são similares, mas envolvem a energia necessária para capturar os elétrons dos íons para o eletrodo, bem como a energia necessária para quebrar e formar novas ligações durante a formação do O_2 . Os elétrons são capturados no ânodo e direcionados ao cátodo através da fonte de alimentação.

4.2. Influência da concentração do eletrólito

A concentração de eletrólitos na solução influenciou significativamente as taxas de produção dos gases H_2 e O_2 . O Gráfico 11 mostra os resultados obtidos para as taxas de produção nos eletrodos.

Gráfico 11: Efeitos da concentração de eletrólitos nas taxas de produção



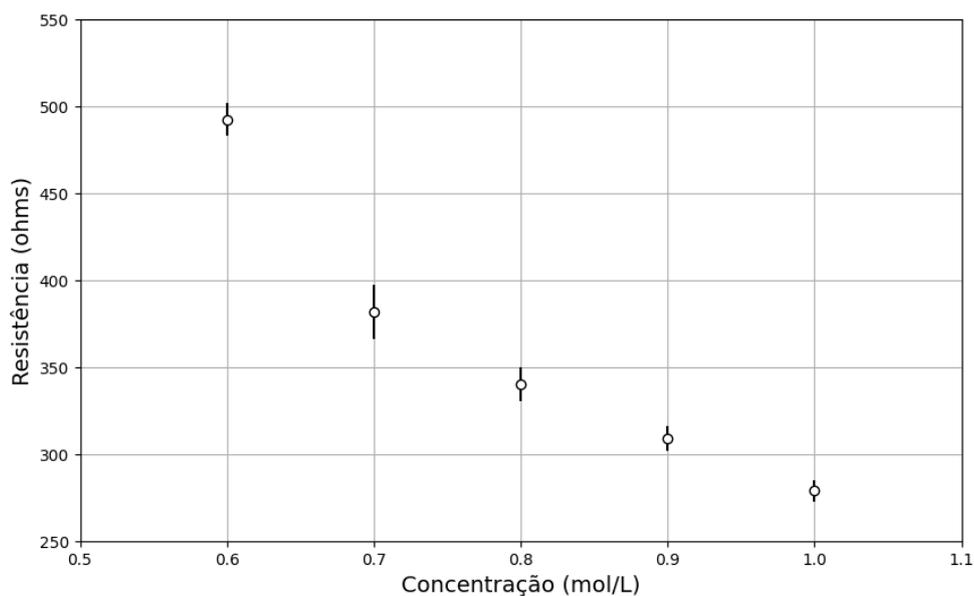
Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

Os resultados demonstram que, conforme a concentração de eletrólitos aumenta, as taxas de produção dos gases também aumentam proporcionalmente. Esse comportamento está em consonância com o estudo de Yuvaraj e Santharaj (2014, p. 84), que explicam que a corrente que flui pelo sistema depende tanto da condutância dos eletrodos quanto da concentração de eletrólitos presentes na solução. Em concentrações eletrolíticas mais elevadas, há um maior número de íons disponíveis, o que eleva a condutividade da solução.

O aumento na concentração de íons impacta diretamente os mecanismos eletroquímicos durante a eletrólise. Com mais íons circulando na solução, há uma maior chance de interação entre esses íons e a superfície dos eletrodos, favorecendo as reações eletroquímicas. No caso do NaOH, concentrações mais altas liberam mais íons OH^- , que são oxidados no ânodo, resultando na formação de oxigênio e água, além da liberação de elétrons para o circuito. Esse aumento na concentração de íons melhora a condutividade da solução, facilitando o fluxo de elétrons e, conseqüentemente, resultando no aumento das taxas de produção observadas no Gráfico 11.

Além da relação direta entre a concentração de eletrólitos e as taxas de produção, outro aspecto importante a ser considerado é a resistência do sistema, conforme mostrado no Gráfico 12. Analisando a correlação entre a diferença de potencial e a corrente elétrica para as diferentes concentrações da solução, foi possível determinar a resistência em cada concentração.

Gráfico 12: Resistência em diferentes concentrações de eletrólito



Fonte: Elaborado pelo autor (2023)

O gráfico evidencia que a resistência diminui substancialmente conforme a concentração de eletrólito na solução aumenta. Uma resistência menor significa um fluxo de elétrons maior, que por sua vez representa uma eficiência maior no processo de eletrólise. Esse comportamento é consistente com os mecanismos eletroquímicos discutidos, onde o aumento da concentração de íons eleva a condutividade. Isso significa que reduz a resistência à passagem de corrente, pois são grandezas inversamente proporcionais.

5. CONCLUSÃO

Os resultados obtidos neste estudo evidenciam uma relação entre as variáveis controladas e a eficiência do processo de eletrólise. A investigação experimental revelou que o volume de H_2 e O_2 armazenado na parte superior dos tubos aumenta

linearmente com o tempo. A taxa de produção do H_2 se mostrou duas vezes maior que a taxa de produção do O_2 em todas as circunstâncias. Esse resultado está de acordo com os modelos matemáticos resultantes das combinações das leis de Faraday, que preveem tanto um aumento linear do número de mols em função do tempo quanto uma taxa produção de H_2 duas vezes superior à de O_2 , que por sua vez concorda com a estequiometria da equação global da eletrólise da água.

A análise da influência da diferença de potencial aplicada à célula eletrolítica demonstrou que tanto a taxa de produção de hidrogênio quanto de oxigênio aumenta proporcionalmente conforme se eleva a diferença de potencial. Esse resultado experimental concorda com a previsão das leis de Faraday. Além disso, foi possível determinar um valor mínimo de aproximadamente 2,2 V para a diferença de potencial aplicada, abaixo do qual a produção de gases torna-se insignificante nas condições do experimento.

O impacto da concentração do eletrólito também foi crucial, revelando que uma maior concentração resulta em uma diminuição da resistência e, conseqüentemente, em um aumento nas taxas de produção dos gases. Este fenômeno pode ser explicado pelo aumento do número de íons disponíveis, que implicam uma maior condutividade da solução.

6. BIBLIOGRAFIA

ZAMAN, N.; NOOR, T.; IQBAL, N. Recent advances in the metal–organic framework-based electrocatalysts for the hydrogen evolution reaction in water splitting: a review. RSC Advances, 2021.

COTRIM, Gilberto; FERNANDES, Mirna. Fundamentos da filosofia. 4ª ed. São Paulo: Saraiva, 2016.

PIRES, Antonio S. T. Evolução das ideias da Física. São Paulo: Livraria da Física, 2011.

SOUSA, J. C. (org.). Pré-Socráticos. São Paulo: Nova Cultural, 1996.

Parmênides. Da Natureza. Tradução do Professor Dr. José Gabriel Trindade Santos. 1. ed. São Paulo: Loyola, 2002.

TORIBIO, Alan Miguel Velásquez. História da Física. Vitória: Universidade Federal do Espírito Santo, 2012.

PORTO, C. M. O atomismo grego e a formação do pensamento físico moderno. Revista Brasileira de Ensino de Física, Departamento de Física, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, v. 35, n. 4. 2013.

PIRES, Antonio S. T. Evolução das ideias da Física. São Paulo: Livraria da Física, 2011.

BURNS, Ralph A. Fundamentos de Química. 5ª ed. México: Pearson Educación de México, 2011.

LOPES, Eloiza; JONAS, Tiago; YAMAMOTO, Sonia Midori. Química: a ciência central. 13. ed. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2016.

THOMSON, J. J. Cathode Rays. Philosophical Magazine, 1897.

CHANG, R.; GOLDSBY, K. A. Química. 11ª ed. AMGH, 2013.

ATKINS, P.; JONES, L.; LAVERMAN, L. Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente. 7. ed. Porto Alegre: Bookman, 2018.

YOUNG, Hugh D.; FREEDMAN, Roger A. Física IV: Sears e Zemansky: ótica e física moderna. 14. ed. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2016.

SHARP, K. A. Water: Structure and Properties. 2001.

PANG, X. F. Water: molecular structure and properties. Singapore: World Scientific Publishing, 2014.

GODULA-JOPEK, A. Hydrogen production by electrolysis. Weinheim: Wiley-VCH, 2015.

CHEN, Z.; DUAN, X.; WEI, W.; WANG, S.; NI, B. J. Recent advances in transition metal-based electrocatalysts for alkaline hydrogen evolution. Journal of Materials Chemistry A, 2019.

WALSH, F. C. Faraday and his laws of electrolysis: an appreciation. Bulletin of Electrochemistry, 1991.

VARGAS, R. A.; CHIBA, R.; FRANCO, E. G.; SEO, E. S. M. Hidrogênio: O Vetor Energético do Futuro? São Paulo: IPEN, 2006.

CRUZ, F. E. da. Produção de hidrogênio em refinarias de petróleo: avaliação exergética e custo de produção. Dissertação de Mestrado. Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010.

ESTÊVÃO, T. E. R. O Hidrogênio como combustível. Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Mestrado Integrado em Engenharia Mecânica, 2008.

SILVA, I. A. Hidrogênio: Combustível do Futuro. Ensaios e Ciência: Ciências Biológicas, Agrárias e da Saúde, Campo Grande, 2016.

Energy Policy at Columbia University. Hydrogen Fact Sheet: Production of Low-Carbon Hydrogen. 2021. Disponível em: <<https://www.energypolicy.columbia.edu/publications/hydrogen-fact-sheet-production-of-low-carbon-hydrogen/>>. Acesso em: 31 de outubro de 2024.

SOUZA, A. C. C.; SILVEIRA, J. L. Ensinando os princípios básicos da reforma a vapor para a produção de hidrogênio. Congresso Brasileiro de Ensino de Engenharia - COBENGE 2004. Brasília, 2004.

BBC. CO₂: os gráficos que mostram que mais da metade das emissões ocorreram nos últimos 30 anos. Disponível em: <<https://www.bbc.com/portuguese/geral-59013520>>. Acesso em: 31 de outubro de 2024.

GARCIA, G. S. Hidrogênio Verde: seu papel estratégico na transição energética. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Física). Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2024.

YUVARAJ, A. L.; SANTHANARAJ, D. A Systematic Study on Electrolytic Production of Hydrogen Gas by Using Graphite as Electrode. Materials Research, 2014.