

## Material Suplementar

ESPAÇO ABERTO

# O uso de inteligência artificial no balanceamento de equações químicas: um relato de experiência

Miguel A. Medeiros e Claudia N. Sakai

qual é a reação química balanceada para a formação de  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2$ , considerando que o íon ferro apresenta número de oxidação igual a 3.



### Analisando a Fórmula $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2$ e o Número de Oxidação do Ferro

A fórmula  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2$  apresenta algumas inconsistências e dificuldades para ser balanceada diretamente:

- **Número de oxidação do ferro:** Se considerarmos que o ferro apresenta número de oxidação +3, a fórmula não está balanceada em termos de carga. O íon ferro (III) tem carga +3, cada íon sulfato ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) tem carga -2 e o íon hidrogênio ( $\text{H}^+$ ) tem carga +1. Assim, a soma das cargas não é zero, o que não é possível para um composto neutro.
- **Estabilidade do composto:** A combinação de um íon ferro (III), um íon hidrogênio e dois íons sulfato não é uma combinação estável e provável em condições normais.

Figura 1S. Recorte da segunda interação com a IA Gemini.

a formação do composto  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  é dada a partir da combinação de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  e  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , em temperaturas elevadas.



#### Analisando a Afirmação sobre a Formação de $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

A afirmação de que o composto  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  se forma a partir da combinação de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  e  $\text{H}_2\text{SO}_4$  em temperaturas elevadas é improvável e requer uma análise mais detalhada.

#### Por quê?

- Incompatibilidade da fórmula:** A fórmula  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , como já discutimos anteriormente, apresenta algumas inconsistências em relação à carga e à estabilidade do composto. A presença simultânea de um íon hidrogênio ( $\text{H}^+$ ) e dois íons sulfato ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) ligados a um íon ferro (III) é incomum e dificilmente ocorre em condições normais.
- Reação esperada entre  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  e  $\text{H}_2\text{SO}_4$ :** A reação entre óxido de ferro (III) ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) e ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) leva à formação de sulfato de ferro (III) e água:



Figura 2S. Recorte da quinta interação com a IA Gemini.

Eu percebi que a equação apresentada ( $\text{Fe}_2\text{O}_3 + 6\text{H}_2\text{SO}_4 + 7\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O} + 3\text{H}_2\text{O}$ ) ainda está com balanceamento químico incorreto. Para fazer o correto balanceamento, você deve inicialmente tentar igualar os átomos de ferro, dos dois lados da equação. Posteriormente, você deve tentar igualar os átomos de enxofre. Quando os átomos de ferro e enxofre já estiverem balanceados, você deve buscar balancear os átomos de hidrogênio. E por fim, tentar igualar os átomos de oxigênio. É importante você ter atenção para não alterar os átomos já balanceados. Por favor, tente novamente, da forma que eu descrevi.

< 2/2 >

 Memória atualizada

Você está absolutamente correto! Vamos seguir o método sistemático para balancear a reação da formação de  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , começando pelos átomos de ferro, enxofre, hidrogênio e, finalmente, oxigênio.

A equação inicial é:

$$\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$$

Figura 3S. Recorte da primeira interação para ensinar a IA ChatGPT a resolver balanceamento químico.

Não, não está tudo balanceado. Você não tomou o cuidado de verificar os elementos químicos que já haviam sido balanceados. Você balanceou corretamente o enxofre, mas quando foi balancear o hidrogênio, você alterou arbitrariamente a quantidade de enxofre, deixando as quantidades diferentes.

Você está certo. Cometi um erro ao ajustar o hidrogênio sem preservar o equilíbrio do enxofre. Vou corrigir o procedimento de balanceamento seguindo as etapas que você sugeriu, tomando cuidado para manter os elementos já balanceados.

Figura 4S. Recorte da segunda interação para ensinar a IA ChatGPT a resolver balanceamento químico.

Agora a equação fica:

$$\text{Fe}_2\text{O}_3 + 4\text{H}_2\text{SO}_4 + 5\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$$

**Passo 4: Balancear os átomos de oxigênio**

No lado dos produtos, temos:

- Cada molécula de  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  contém 8 átomos de oxigênio (4 da água de cristalização).
- Cada molécula de  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2$  também contém 8 átomos de oxigênio dos íons sulfato ( $\text{SO}_4^{2-}$ ).

Portanto, temos  $2 \times (8 + 8) = 32$  átomos de oxigênio no lado dos produtos.

Agora, no lado dos reagentes, temos:

- 4 moléculas de  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , que fornecem  $4 \times 4 = 16$  átomos de oxigênio.
- 3 átomos de oxigênio de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ .
- 5 moléculas de água ( $\text{H}_2\text{O}$ ), fornecendo  $5 \times 1 = 5$  átomos de oxigênio.

Isso nos dá  $16 + 3 + 5 = 24$  átomos de oxigênio no lado dos reagentes, enquanto o lado dos produtos tem 32 átomos. Para corrigir isso, precisamos adicionar mais 8 moléculas de água no lado dos reagentes.

A equação final balanceada é:

$$\text{Fe}_2\text{O}_3 + 4\text{H}_2\text{SO}_4 + 7\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$$

↓

Agora, a quantidade de ferro, enxofre, hidrogênio e oxigênio está corretamente balanceada nos dois

Figura 5S. Recorte da interação com a IA ChatGPT, mostrando a equação balanceada como intermediária.

**Conclusões:**

- **Não conseguimos balancear a equação.** Ao tentar balancear um elemento, desbalanceamos outro.
- **A fórmula  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  pode não ser a fórmula correta do produto da reação.** A presença de um íon ferro com carga +1 é incomum e pode indicar um erro na fórmula.

**Possíveis Explicações:**

- **Erro na fórmula do produto:** A fórmula correta do produto pode ser diferente.
- **Reação incompleta ou complexa:** A reação pode envolver outras etapas ou produtos intermediários.
- **Condições de reação não especificadas:** As condições da reação (temperatura, pressão, catalisadores) podem influenciar a formação dos produtos.

Figura 6S. Recorte da segunda interação para tentar ensinar IA Gemini, a resolver o balanceamento de equação química.

Gemini, a fórmula  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  representa sim um composto estável. Como já discutimos, tal composto se chama romboclase. Então, tente de maneira cuidadosa e com atenção, balancear os elementos da equação apresentada. Inicie pelo átomo de Fe, passe para o átomo de S, seguindo para o H e por fim, o átomo de O. Tenha atenção ao balancear um elemento, para que o balanceamento de outro elemento que já tenha sido realizado, não seja alterado.

**◆ Analisando a Equação e o Composto Romboclase**

**Você está absolutamente correto!** A fórmula  $\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  representa a **romboclase**, um sulfato de ferro hidratado. É um mineral relativamente raro, mas quimicamente válido.

**Vamos então tentar balancear a equação:**

$$\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$$

Figura 7S. Recorte da terceira interação para tentar ensinar IA Gemini, a resolver o balanceamento de equação química.

Gemini, percebendo que você não consegue balancear a equação, irei te apresentar a correta equação química balanceada, para que você seja capaz de identificar onde você está errando, para evitar tais erros em futuros balanceamentos de equação química. A equação química balanceada é:  $\text{Fe}_2\text{O}_3 + 4\text{H}_2\text{SO}_4 + 5\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ .

**Analisando a Equação Corrigida e Identificando os Erros**

Muito obrigado por fornecer a equação química balanceada correta:

$$\text{Fe}_2\text{O}_3 + 4\text{H}_2\text{SO}_4 + 5\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{HFe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$$

Com essa informação, podemos identificar os pontos em que minhas tentativas anteriores de balanceamento divergiram da resposta correta:

- **Inclusão de água como reagente:** A equação correta inclui 5 moléculas de água como reagente, o que não estava presente nas minhas tentativas anteriores. Essa adição de água é crucial para a formação da romboclase com 4 moléculas de água de hidratação.

Figura 8S. Recorte da interação em que é apresentada a equação química balanceada à IA Gemini.

---

**Miguel A. Medeiros** ([mmedeiros@uft.edu.br](mailto:mmedeiros@uft.edu.br)) é licenciado, mestre e doutor em Química pela Universidade Federal de Minas Gerais. Atualmente é professor Associado na Universidade Federal do Tocantins.

**Claudia N. Sakai** ([claudia.sakai@uft.edu.br](mailto:claudia.sakai@uft.edu.br)) é bacharel em Comunicação Social e mestranda no Programa de Pós-Graduação em Propriedade Intelectual e Transferência de Tecnologia para a Inovação (PROFNIT).