



REPRESENTAÇÃO MOLECULAR DA DECOMPOSIÇÃO DE PERÓXIDO DE HIDROGÊNIO (H_2O_2) CATALISADA POR IODETO DE POTÁSSIO (KI) UTILIZANDO SOFTWARE AVOGADRO

Rafael Elias Conti¹, Rodrigo Geremias²

1. Discente do curso de graduação em Engenharia Química, Unoesc, Videira, SC

2. Docente do curso de graduação em Engenharia Química, Unoesc, Videira, SC

Autor correspondente: Rafael Elias Conti, rafaelestudoconti@gmail.com

Área: Ciências Exatas e Tecnológicas

Introdução: A decomposição do peróxido de hidrogênio (H_2O_2) é uma reação exotérmica de primeira ordem, cuja taxa aumenta em soluções concentradas e requer um catalisador para manter sua eficácia. Para facilitar a visualização e análise das moléculas envolvidas, foi utilizado o Avogadro, um programa gratuito e de código aberto. Esse recurso permite criar e visualizar moléculas em 3D, facilitando a exploração das ligações químicas e a observação das estruturas em posições diferentes ângulos. Neste estudo, o Avogadro foi empregado para simular a interação entre o peróxido de hidrogênio (H_2O_2) e o iodeto de potássio (KI), fornecendo uma visão detalhada das interações e de como elas influenciam a cinética da decomposição. **Objetivo:** O objetivo deste estudo é utilizar o Avogadro para analisar em 3D o efeito do iodeto de potássio como catalisador na oxidação do peróxido de hidrogênio. Pretende-se construir e visualizar as moléculas para explorar a proximidade e a configuração dos átomos, identificando possíveis interações que possam impactar a reação catalítica. **Método:** A pesquisa foi aplicada, qualitativa e experimental. Utilizou-se a versão 1.2.0 do Avogadro para criar modelos 3D das estruturas químicas. As moléculas foram posicionadas para observar possíveis interações, e as imagens obtidas foram exportadas para análises e estudos futuros. **Resultados:** O uso do Avogadro permitiu visualizar as estruturas moleculares do peróxido de hidrogênio e do iodeto de potássio, posicionando-as lado a lado para analisar a proximidade e a configuração relativa. A ilustração gerada revelou a formação de complexos e movimentos intermediários, sugerindo um possível efeito catalítico. A modelagem mostrou que as moléculas estão próximas, indicando que a presença do iodeto de potássio pode influenciar a oxidação do peróxido de hidrogênio. **Conclusão:** Conclui-se com o experimento no software Avogadro que este contribui para o entendimento sobre a decomposição do peróxido de hidrogênio. Embora a modelagem seja estática e não envolva simulações interativas, a visualização ajudou a entender a estrutura do elemento H_2O_2 e KI. Sendo assim, é possível afirmar que o uso do software pode ser um excelente aliado no estudo da química.

Palavras-chave: Peróxido de hidrogênio; Avogadro; Estudo da química; Iodeto de potássio; Estrutura.