

Introdução ao Cálculo Estequiométrico

Cálculos estequiométricos

A palavra “estequiometria” vem do grego:

stoicheion (elemento) + *metria* (medida)

“a medida dos elementos químicos”.

A estequiometria é o estudo quantitativo da composição química das substâncias e de suas transformações

... Antes: **Fórmulas químicas**, equações e balanceamentos.

Fórmulas Químicas: Representação das substâncias Puras

Substância pura = a proporção de cada elemento é constante.

Ou seja, pode ser representada por uma fórmula (proporção entre os átomos).

Água

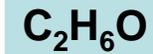
H₂O

Fórmulas Molecular:

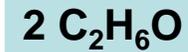
➤ **composição exata de cada elemento**

Fórmula molecular de algumas substâncias.

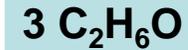
| Substância | Fórmula molecular |
|------------------------------------|----------------------|
| Álcool etílico (etanol) | C_2H_6O |
| Ácido muriático (clorídrico) | HCl |
| Gás carbônico (dióxido de carbono) | CO_2 |
| Amônia | NH_3 |
| Sacarose (açúcar comum) | $C_{12}H_{22}O_{11}$ |
| Octano | C_8H_{18} |
| Butano | C_4H_{10} |
| Ácido acético (etanóico) | $C_2H_4O_2$ |
| Acetona (propanona) | C_3H_6O |
| Éter etílico (etoxietano) | $C_4H_{10}O$ |



Uma molécula de etanol



Duas moléculas de etanol



Três moléculas de etanol



Quatro moléculas de etanol

Fórmula Mínima:

➤ proporção mínima entre os átomos formadores da substância

Fórmula molecular e fórmula mínima de algumas substâncias.

| Substância | Fórmula molecular | Fórmula mínima |
|------------------------------------|----------------------|----------------------|
| Álcool etílico (etanol) | C_2H_6O | C_2H_6O |
| Ácido muriático (clorídrico) | HCl | HCl |
| Gás carbônico (dióxido de carbono) | CO_2 | CO_2 |
| Amônia | NH_3 | NH_3 |
| Sacarose (açúcar comum) | $C_{12}H_{22}O_{11}$ | $C_{12}H_{22}O_{11}$ |
| Octano | C_8H_{18} | C_4H_9 |
| Butano | C_4H_{10} | C_2H_5 |
| Ácido acético (etanóico) | $C_2H_4O_2$ | CH_2O |
| Acetona (propanona) | C_3H_6O | C_3H_6O |
| Éter etílico (etoxietano) | $C_4H_{10}O$ | $C_4H_{10}O$ |

A **GLICOSE** é formada por carbono, hidrogênio e oxigênio na proporção de 1C ; 2H ; 1O

Qual a fórmula correta: CH_2O ou $C_2H_4O_4$ ou $C_3H_6O_3$ ou $C_4H_8O_4$ ou $C_xH_{2x}O_x$

A GLICOSE $C_6H_{12}O_6$

Fórmula Mínima:

➤ Proporção mínima onde as cargas + é igual a de cargas -

Fórmula mínima e a proporção de alguns compostos iônicos.

| Substância | Fórmula mínima | Proporção |
|----------------------|------------------------------|---------------------------------------|
| Nitrato de potássio | KNO_3 | $1\text{K}^+ : 1\text{NO}_3^-$ |
| Nitrato de cálcio | $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ | $1\text{Ca}^{2+} : 2\text{NO}_3^-$ |
| Sulfato de lítio | Li_2SO_4 | $2\text{Li}^+ : 1\text{SO}_4^{2-}$ |
| Sulfato de alumínio | $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ | $2\text{Al}^{3+} : 3\text{SO}_4^{2-}$ |
| Cloreto de bário | BaCl_2 | $1\text{Ba}^{2+} : 2\text{Cl}^-$ |
| Iodeto de potássio | KI | $1\text{K}^+ : 1\text{I}^-$ |
| Bicarbonato de sódio | NaHCO_3 | $1\text{Na}^+ : 1\text{HCO}_3^-$ |
| Carbonato de cálcio | CaCO_3 | $1\text{Ca}^{2+} : 1\text{CO}_3^{2-}$ |
| Hidróxido de sódio | NaOH | $1\text{Na}^+ : 1\text{OH}^-$ |

A determinação das Massas

Massa Atômica e Massa Molecular



- ✓ Identificada a massa atômica e a atomicidade dos elementos que compõem uma substância, determina-se sua massa molecular.

A massagem de um átomo do elemento carbono é aproximadamente igual a 12 u.

A massagem de um átomo do elemento oxigênio é aproximadamente igual a 16 u.

A massagem de uma molécula da substância oxigênio é aproximadamente igual a 32 u.

A massagem de uma molécula da substância gás carbônico é aproximadamente igual a 44 u.

Massas moleculares a partir da Tabela Periódica

A determinação das Massas

Exemplo 1

Suponha que se tenham obtido os seguintes valores de abundância dos três isótopos estáveis do neônio ($_{10}\text{Ne}$) e suas respectivas massas (usando C-12 como padrão)

| Isótopo | Massa atômica em relação ao C-12 | Abundância natural |
|---------|----------------------------------|--------------------|
| Ne-20 | 19,9924 u | 90,48% |
| Ne-21 | 20,9938 u | 0,27% |
| Ne-22 | 21,9914 u | 9,25% |

A determinação das Massas

A massa atômica do elemento neônio é, então, determinada por meio de uma média ponderada:

$$\text{MA} = \frac{(90,48 \times 19,9924 \text{ u}) + (0,27 \times 20,9938 \text{ u}) + (9,25 \times 21,9914 \text{ u})}{90,48 + 0,27 + 9,25}$$

| Isótopo | Massa atômica | Abundância natural |
|---------|---------------|--------------------|
| Ne-20 | 19,9924 u | 90,48% |
| Ne-21 | 20,9938 u | 0,27% |
| Ne-22 | 21,9914 u | 9,25% |

$$\text{MA} = 20,18 \text{ u}$$

A determinação das Massas

A massa Molecular = somatório das massas atômicas dos elementos que compõem a molécula (substância).

Exemplo 2

O aspartame é um composto que tem sido muito usado como adoçante, pois seu sabor é de cem a duzentas vezes mais doce que o do açúcar comum (sacarose). A fórmula molecular do aspartame é $\text{C}_{14}\text{H}_{18}\text{O}_5\text{N}_2$. Qual é a massa molecular desse composto?

Dados: massa atômicas: C = 12u; H = 1u; O = 16u; N = 14 u.

Resolução: $\text{C}_{14}\text{H}_{18}\text{O}_5\text{N}_2$.

Dados: massa atômicas: C = 12u; H = 1u; O = 16u; N = 14 u.

C_{14} : massa = $14 \times 12 \text{ u} = 168\text{u}$.

H_{18} : massa = $18 \times 1 \text{ u} = 18\text{u}$.

O_5 : massa = $5 \times 16 \text{ u} = 80\text{u}$.

N_2 : massa = $2 \times 14 \text{ u} = \underline{28\text{u}}$.

Massa molecular = 294u

Massa Molecular

Massa atômica e massa molecular de algumas substâncias.

| Substância | Massa atômica | Massa molecular |
|---------------------------------|-----------------------------|-----------------|
| C_2H_6O (álcool etílico) | C (12 u); H (1 u); O (16 u) | 46 u |
| CO_2 (gás carbônico) | C (12 u); O (16 u) | 44 u |
| NH_3 (amônia) | N (14 u); H (1 u) | 17 u |
| $C_{12}H_{22}O_{11}$ (sacarose) | C (12 u); H (1 u); O (16 u) | 342 u |
| H_2SO_4 (ácido sulfúrico) | H (1 u); S (32 u); O (16 u) | 98 u |

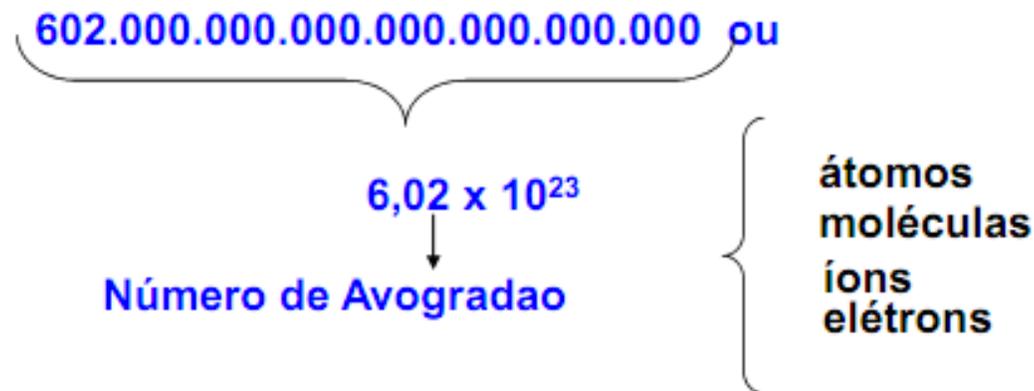
Massa Molar

A Massa Molecular = é a massa de um mol de uma substância.

Mol: Um mol é a quantia de substância que possui um número de unidades fundamentais (átomos, moléculas e outras partículas) igual ao número presente em exatamente 12g do isótopo carbono-12.

Mol: medida conveniente de quantidades químicas.

- 1 mol de “**algo**” = $6,02 \times 10^{23}$ daquele “**algo**”.
- Experimentalmente, 1 mol de ^{12}C tem uma massa de 12 g.



Massa Molar

Massa atômica e massa molar de alguns elementos e moléculas.

| Elemento | Massa atômica | Massa molar |
|--------------------------------|-----------------|---------------------------|
| Oxigênio | 16,0 u | 16,0 g mol ⁻¹ |
| Ferro | 55,8 u | 55,8 g mol ⁻¹ |
| Cálcio | 40,1 u | 40,1 g mol ⁻¹ |
| Cloro | 35,5 u | 35,5 g mol ⁻¹ |
| Molécula | Massa molecular | Massa molar |
| Fe ₂ O ₃ | 159,6 u | 159,6 g mol ⁻¹ |
| FeCl ₃ | 162,3 u | 162,3 g mol ⁻¹ |
| CaO | 56,1 u | 56,1 g mol ⁻¹ |
| CaCl ₂ | 111,1 u | 111,1 g mol ⁻¹ |

Massa Molar

Exemplo 3

Consulte a tabela periódica e determine qual é a massa atômica do alumínio e a massa molar do enxofre.

Respostas:

A massa atômica do alumínio massa de um átomo, portanto 27 u.

A massa molecular do enxofre é a massa de um mol ($6,02 \times 10^{23}$ átomos); portanto $32,1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Determinação da porcentagem em massa a partir de fórmulas

A partir da fórmula mínima ou molecular, podemos determinar a porcentagem em massa de cada elemento presente na fórmula em estudo (*análise elementar).

Exemplo 4

A glicose é um açúcar cuja fórmula molecular é $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$. Qual a porcentagem em massa de cada elemento?

Dados: massa molar: C = 12; H = 1; O = 16.

Resolução: **Massa molecular da glicose ($C_6H_{12}O_6$).**

C₆: massa = $6 \times 12 = 72$ g.

H₁₂: massa = $12 \times 1 = 12$ g.

O₆: massa = $6 \times 16 = \underline{96}$ g.

Massa molecular = 180 g

Cada 180 g de **glicose** ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$) apresentam 72 g de C, 12 g de H e 96 g de O. Transformando em porcentagem (%), temos:

180 g ----- **100 %**

72 g ----- X (% C)



X = 40,0 % de C

180 g ----- **100 %**

12 g ----- Y (% H)



Y = 6,67 % de H

180 g ----- **100 %**

96 g ----- Z (% O)



Z = 53,33 % de O

Determinação da Fórmula Mínima a partir da porcentagem em massa

Através da análise elementar, podemos determinar % massa de uma substância.

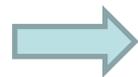
E a partir da % massa, podemos obter a fórmula mínima de uma substância.

Exemplo 5

A análise elementar de uma amostra revelou a % em massa de 88,89% de Oxigênio e 11,11% de hidrogênio. Determine a fórmula mínima do composto que forma essa amostra.

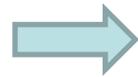
Resolução:
Basta dividir a % **em massa** pela massa atômica do elemento:

$$\text{O} = \frac{88,89}{16}$$



$$\text{O} = 5,56$$

$$\text{H} = \frac{11,11}{1}$$



$$\text{H} = 11,11$$

Proporção entre H e O é:
 $\text{H}_{11,11}\text{O}_{5,56}$

Dividindo os dois números pelo **MENOR** deles, temos:

$$\text{H} = \frac{11,11}{5,56}$$



$$\text{H} = 2$$

$$\text{O} = \frac{5,56}{5,56}$$



$$\text{O} = 1$$

Fórmula Mínima: H_2O (poderia = ~~$\text{H}_{11,11}\text{O}_{5,56}$~~ etc...)

Exemplo 6

A análise elementar de uma amostra indicou o seguinte resultado: 52,174% de carbono; 13,043% de hidrogênio; 34,783% de oxigênio. Qual é a fórmula mínima do composto?

$$\text{C} = \frac{52,174}{12} = 4,348$$

$$\text{H} = \frac{13,043}{1} = 13,043$$

$$\text{O} = \frac{34,783}{16} = 2,174$$

A fórmula Mínima é: entre H e O é: $\text{C}_{4,348} \text{H}_{13,043} \text{O}_{2,174}$

Dividindo os dois números pelo **MENOR** deles, temos:

$$\frac{4,348}{2,174} = 2$$

$$\frac{13,043}{2,174} = 6$$

$$\frac{2,174}{2,174} = 1$$

Fórmula Mínima é:
 $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$

Da Fórmula Mínima (Fm) a Fórmula Molecular (FM)

A partir da Fm podemos determinar a FM de um composto.

Se a Fm é CH_2 as possíveis FM serão: C_2H_4 ; C_3H_6 ; C_4H_8 ...
Mas **nem todos** podem existir.

A determinação a FM pode ser feita de 2 maneiras:

- a) Conhecendo a Massa Molar (MM) da substância;**
- b) Conhecendo a quantidade de um dos elementos na FM;**

a) Conhecendo a MM da substância:

Exemplo 7

A Fm da glicose é **CH₂O**. Sabendo que a MM da glicose vale 180 g/mol, qual a FM deste composto?

Dados: massa molar: C = 12; H = 1; O = 16.

1º) Determinar a massa molar da Fm (MMFm)!

$$\text{C: massa} = 1 \times 12 = 12 \text{ g.}$$

$$\text{H}_2: \text{ massa} = 2 \times 1 = 2 \text{ g.}$$

$$\text{O: massa} = 1 \times 16 = \underline{16 \text{ g.}}$$

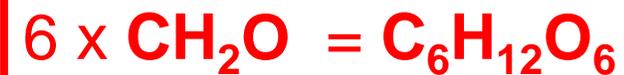
MMFm da glicose é **CH₂O**. = 30 g

2º) Dividir a MM pela massa molar da Fm

$$\text{FM} = \frac{\text{Mm}_{\text{da substância}}}{\text{MMFm}}$$

$$\text{FM} = \frac{180}{30} = 6$$

3º) Multiplicar a Fm pelo valor encontrado em (2º), ou seja, 6



b) Conhecendo a quantidade de um dos elementos da FM:

Exemplo 8

A Fm do ácido acético, ingrediente do vinagre, é CH_2O . Sabendo que na FM existem dois átomos de oxigênio, qual é a FM deste composto?

Resolução

1^o) Na Fm existe 1 átomo de O. Como na FM devem existir 2, é preciso multiplicar a Fm por 2;

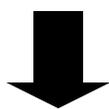


Introdução ao Cálculo Estequiométrico

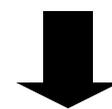
PARTE 2

Equações Químicas: Representação de uma Reação

Equações Químicas: uma transformação química é denominada reação química e é descrita por uma equação química.



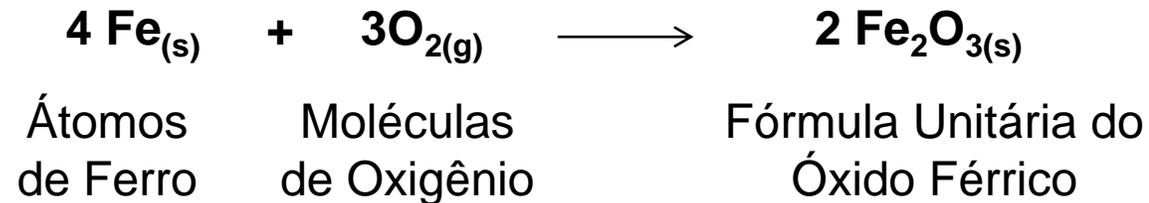
Reagente (s)



Produto (s)

ESTEQUIOMETRIA DAS REAÇÕES

Qualitativamente uma equação química descreve quais os reagentes e produtos que participam de uma reação.

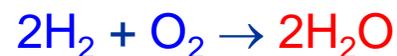


Na reação acima, o átomo de ferro reage com a molécula de oxigênio para formar o óxido férrico.

Quantitativamente uma equação química balanceada descreve a relação numérica entre átomos ou moléculas consumidas ou formadas em uma reação.

4 mols de átomos de **Fe** reagem com **3 mols** de moléculas de **O** para formar **2 mols** de moléculas de óxido férrico.

ESTEQUIOMETRIA DAS REAÇÕES



- ✓ A equação química balanceada de uma reação é usada para estabelecer a razão molar, que é o fator usado para converter a quantidade de uma substância na quantidade de outra.

Os coeficientes estequiométricos de cada substância numa equação química são equivalente aos seus correspondentes números de mols

ESTEQUIOMETRIA DAS REAÇÕES

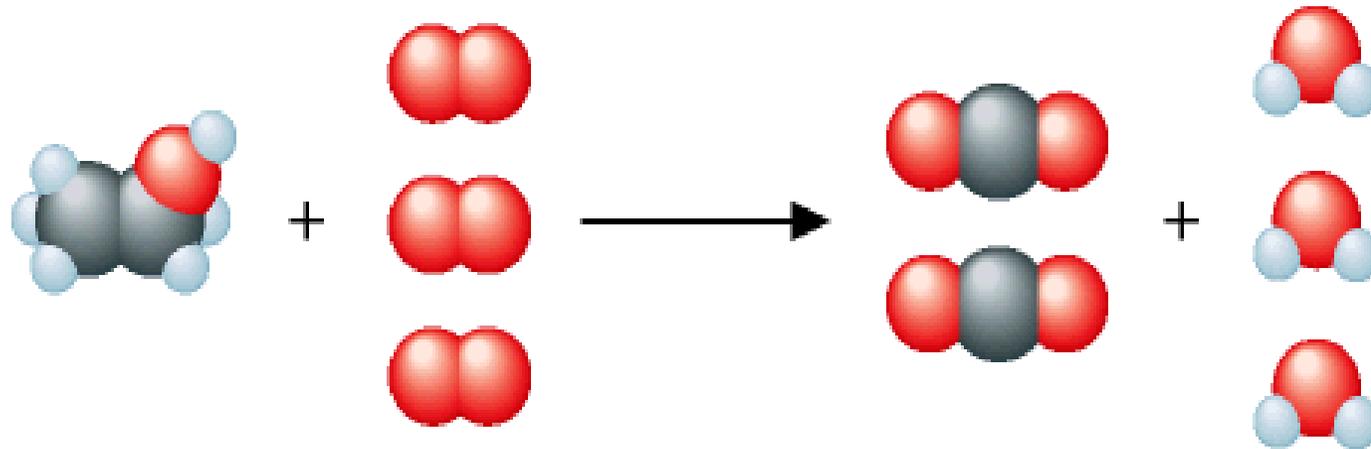
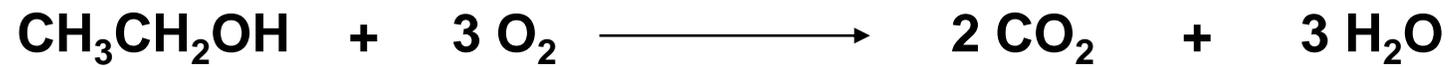
- ✓ A equação balanceada fornece o número de moléculas que reagem para formar produtos.
- ✓ Interpretação: a proporção da quantidade de matéria de reagente necessária para se chegar à proporção da quantidade de matéria do produto.
- ✓ Essas proporções são denominadas *proporções estequiométricas*.

As proporções estequiométricas são proporções ideais

- ✓ As proporções ideais de reagentes e produtos no laboratório devem ser medidas em gramas e convertidas para mols.

Equações Químicas: Representação de uma Reação

- Exemplo: Combustão de um Álcool (Etanol)



Balanceamento de Equações: Método das tentativas

- Escolhemos, de forma arbitrária, uma das substâncias e colocamos o coeficiente um (1). Na prática, um bom procedimento é **iniciar pela fórmula da substância que apresenta o MAIOR número de átomos ou o MAIOR número de elementos diferentes.**



Balanceamento de equações: Método das tentativas

1) Inicie Pelos Metais (Neste caso não há)

2) Depois pelos ametais

3) Deixe por último H e O



Balanceamento de equações: Método das tentativas

1) Inicie Pelos Metais (Neste caso não há)

2) Depois pelos ametais

3) Deixe por último H e O



2 C

1 C

$$\text{X} \cdot 1 = 2$$

$$\text{X} = 2$$

Balanceamento de equações: Método das tentativas

- 1) Inicie Pelos Metais (Neste caso não há)
- 2) Depois pelos ametais
- 3) Deixe por último H e O



2 C

2 C

6 H

$$\text{X} \cdot 2 = 6$$

$$\text{X} = 3$$

Balanceamento de equações: Método das tentativas

- 1) Inicie Pelos Metais (Neste caso não há)
- 2) Depois pelos ametais
- 3) Deixe por ultimo H e O



2 C

2 C

6 H

$$\text{X} \cdot 2 + 1 = 7$$

6 H

1 O + X O₂

$$\text{X} = 3$$

4 O + 3 O = 7 O

Balanceamento de equações: Método das tentativas

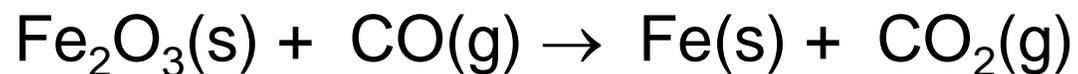
- 1) **Inicie Pelos Metais (Neste caso não há)**
- 2) **Depois pelos ametais**
- 3) **Deixe por ultimo H e O**



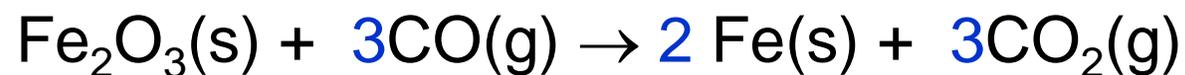
Equações Químicas: Representação de uma Reação

Exemplo 9

A hematita (óxido de ferro III), um minério de ferro cuja fórmula pode ser representada por Fe_2O_3 , reage nos altos fornos com monóxido de carbono, formando ferro metálico mais gás carbônico. Qual é a equação química que representasse processo?



(Equação NÃO Balanceada)



(Equação Balanceada)

Lei de Lavoisier = quantidades de átomos é conservada (equações Balanceadas)

Lei das Proporções Definidas (Proust)

- ✓ Proust descobriu que um composto, quando purificado, contém sempre os mesmos elementos na mesma razão entre as massas (composição fixa).

Relações fixas na proporção em massa da decomposição da água.

| Massa de água decomposta | Água $2\text{H}_2\text{O}$ | → | Hidrogênio 2H_2 | + | Oxigênio O_2 |
|--------------------------|-------------------------------|---|-----------------------------|---|--------------------------|
| 18 g | 18 g | | 2 g | | 16 g |
| 36 g | 36 g | | 4 g | | 32 g |
| 100 g | 100 g | | 11,11 g | | 88,89 g |

Lei das Proporções Definidas (Proust)

Relações fixas na proporção em massa da decomposição da água.

| Massa de água decomposta | Água | → | Hidrogênio | + | Oxigênio |
|--------------------------|-------------------|---|-----------------|---|----------------|
| | 2H ₂ O | → | 2H ₂ | + | O ₂ |
| 18 g | 18 g | | 2 g | | 16 g |
| 36 g | 36 g | | 4 g | | 32 g |
| 100 g | 100 g | | 11,11 g | | 88,89 g |

$$\frac{18}{36} = \frac{2}{4} = \frac{16}{32}$$

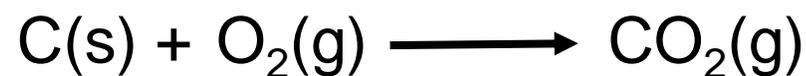
$$\frac{18}{100} = \frac{2}{11,11} = \frac{16}{88,89}$$

$$\frac{36}{100} = \frac{4}{11,11} = \frac{32}{88,89}$$

✓ Lei da Composição Constantes ou das Proporções Definidas

Lei das Proporções Definidas (Proust)

- ✓ **Exemplo 10:** De acordo com a equação abaixo, qual a massa de gás carbônico produzida na queima de 5 Kg de carvão – C(s)?



$$\frac{12 \text{ g}}{5 \text{ Kg}} = \frac{32 \text{ g}}{X} = \frac{44 \text{ g}}{Y}$$

$$\frac{12 \text{ g}}{5 \text{ Kg}} = \frac{44}{Y}$$

$$Y = \frac{5 \text{ Kg} \cdot 44 \text{ g}}{12 \text{ g}}$$

$$Y = 18,33 \text{ Kg}$$

Cálculos estequiométricos

✓ Com base na Equação Química balanceada e nas Leis de Lavoisier e Proust, podemos realizar cálculos para determinar quanto de reagente vai ser gasto ou quanto de produto será formado em uma reação (regra de três).

✓ A Equação Química traz a proporção em MOLS das substâncias, mas podemos relacioná-las (transformá-las) em massa ou volume (gases).

✓ O volume de um mol na CNTP é 22,71 L (ou 22,4L).

Volume Molar

- Condições normais de temperatura e pressão – CNTP
- $T = 273,15 \text{ K}$ ou $t = 0 \text{ °C}$
- $P = 100\,000 \text{ Pa}$
- $P_a = 1 \text{ bar} = 0,9869 \text{ atm} = 750,06 \text{ mmHg}$

Os gases, diferentemente dos sólidos e dos líquidos, são muito afetados por variações de temperatura ou de pressão. Amedeo Avogadro, que trabalhou com vários gases, percebeu isso: ele notou que iguais quantidades de matéria de diferentes gases ocupam volumes iguais. Posteriormente, determinou-se que 1 mol de qualquer gás, nas CNTP, ocupa um valor igual a 22,71 L.

- ✓ O **volume molar** (V_m) de qualquer gás nas CNTP é igual a 22,71 L..
- ✓ O valor de 22,71L para volume molar é obtido considerando-se a pressão de cem mil pascals (100000 Pa) e a temperatura igual a 273,15 k (0°C).
- ✓ Você encontrará livros e materiais mais antigos, o volume molar como 22,4L, por considerar a antiga definição de pressão-padrão = a 1 atm (101325 Pa).

Cálculos estequiométricos: Relação com o Volume Molar dos Gases

Transformação da quantidade em mol para massa e para volume (quando se tratar de gás).

| | $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}(\ell)$ | + | $3\text{O}_2(\text{g})$ | → | $2\text{CO}_2(\text{g})$ | + | $3\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ |
|--------------------------|---|---|----------------------------------|---|----------------------------------|---|----------------------------------|
| Relação em mol | 1 mol | | 3 mols | | 2 mols | | 3 mols |
| Relação em massa | 46 g | | $3 \times 32 = 96 \text{ g}$ | | $2 \times 44 = 88 \text{ g}$ | | $3 \times 18 = 54 \text{ g}$ |
| Relação em volume (CNTP) | — | | $3 \times 22,7 = 68,1 \text{ L}$ | | $2 \times 22,7 = 45,4 \text{ L}$ | | $3 \times 22,7 = 68,1 \text{ L}$ |

Relação em MOL

Exemplo 11:

- ✓ Considere um tanque de álcool com 55 L (aproximadamente 1000 mols de álcool). Que quantidade de matéria (número de mols) de O_2 será consumida e que quantidade de matéria de CO_2 e H_2O será formada na queima desse álcool?



1 mol ----- 3 mol de O_2

1 mol ----- 2 mol de CO_2

1000 mol ----- X mol de O_2

1000 mol ----- Y mol de CO_2

X = 3000 mols de O_2

Y = 2000 mols de CO_2

1 mol ----- 3 mol de H_2O

Z = 3000 mols de H_2O

1000 mol ----- Z mol de H_2O

Relação em MASSA

Exemplo 12:

Quanto de massa de gás carbônico será lançada na atmosfera pela queima de um tanque de álcool (1000 mols)?



1 mol ----- 88 g de CO_2

1000 mol ----- X g de CO_2

x = 88.000 g ou 88 Kg de CO_2

Relação em VOLUME

Exemplo 13:

Que volume de gás carbônico, nas CNTP, será lançada na atmosfera quando houver a queima de 100 L de álcool?

Dado: densidade do álcool = 0,8 g/mL

$$d = m/V, \text{ ou seja, } m = d.V$$

Logo, 100 L (100000 mL) de álcool:

$$m = 0,8 \times 100000$$

$$M = 80000\text{g ou } 80 \text{ Kg.}$$



$$\begin{array}{r} 46 \text{ g} \text{ ----- } 2(22,7 \text{ L}) \text{ de } \text{CO}_2 \\ 80000 \text{ g} \text{ ----- } X \text{ L de } \text{CO}_2 \\ \qquad \qquad \qquad x = 78.956,5 \text{ L de } \text{CO}_2 \end{array}$$

Relação em VOLUME

Exemplo 14:

A gasolina é uma mistura de substâncias na qual o hidrocarboneto isoctano é um importante componente. A equação não balanceada da combustão do isoctano está representada abaixo:



- a) Que número de mols de água será formado na combustão de 5 mols de isoctano?
- b) Quanto de massa de gás carbônico será lançada no ambiente pela queima de 50 L desse combustível? Dados: densidade do isoctano = 0,8 g/mL MM (g/mol) = C (12); H (1) e O (16).
- c) Que volume de ar atmosférico será consumido na queima de 50 L de isoctano?
- Dado: o ar contém cerca de 20 % de oxigênio; considerar CNTP.

Relação em MOLS



a) Que número de mols de água será formado na combustão de 5 mols de isoctano?



1 mol de $\text{C}_8\text{H}_{18}(\ell)$ ----- 9 mols de H_2O

5 mols de $\text{C}_8\text{H}_{18}(\ell)$ ----- X mols de H_2O

$$\mathbf{X = 45 \text{ mols de } H_2O}$$

Relação em MASSA

b) Quanto de massa de gás carbônico será lançada no ambiente pela queima de 50 L desse combustível? Dados: densidade do isoctano = 0,8 g/mL MM (g/mol) = C (12); H (1) e O (16).



$$114 \text{ g de } \text{C}_8\text{H}_{18}(\ell) \text{ ----- } 352 \text{ g de } \text{CO}_2$$

$$40000 \text{ g de } \text{C}_8\text{H}_{18}(\ell) \text{ ----- } X \text{ g de } \text{CO}_2$$

$$d = m/V, \text{ ou seja, } m = d.V$$

Logo, 50 L (50000 mL) de
álcool:

$$m = 0,8 \times 50000$$

$$M = 40000\text{g ou } 40 \text{ Kg.}$$

$$X = 123508,77 \text{ g de } \text{CO}_2$$

Ou 123,5 Kg de CO_2

Relação em VOLUME

c) Que volume de ar atmosférico será consumido na queima de 50 L de isooctano?

Dado: o ar contém cerca de 20 % de oxigênio; considerar CNTP.



1 mol de $\text{C}_8\text{H}_{18}(\ell)$ ----- 25/2 mols de O_2

114 g de $\text{C}_8\text{H}_{18}(\ell)$ ----- 25/2(22,7 L) de O_2

40000g de $\text{C}_8\text{H}_{18}(\ell)$ ----- X litros de O_2

X = 99561,4 L de O_2

Ar atmosf = 20 % de O_2

99561,4 L de O_2 ----- 20%

Y L de ar ----- 100%

Y = 497.807 L de ar

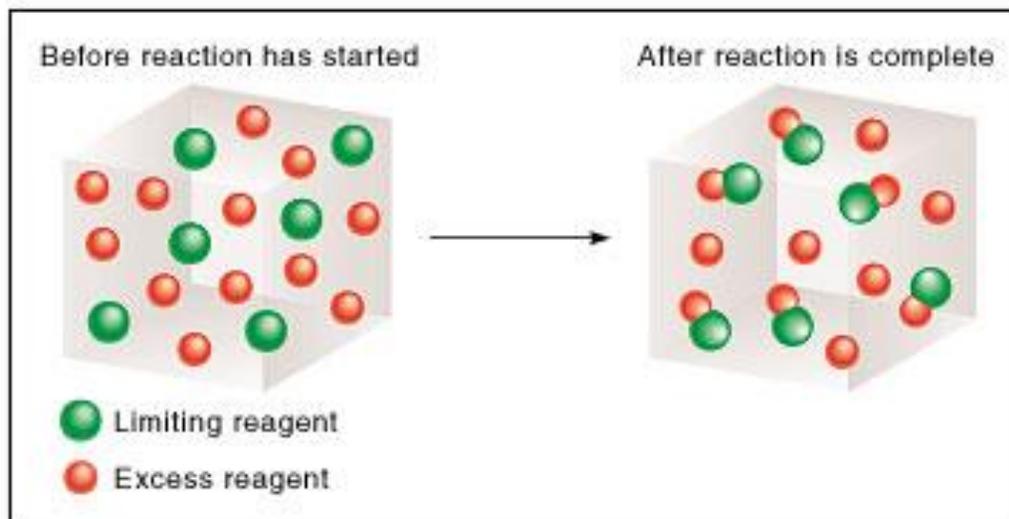
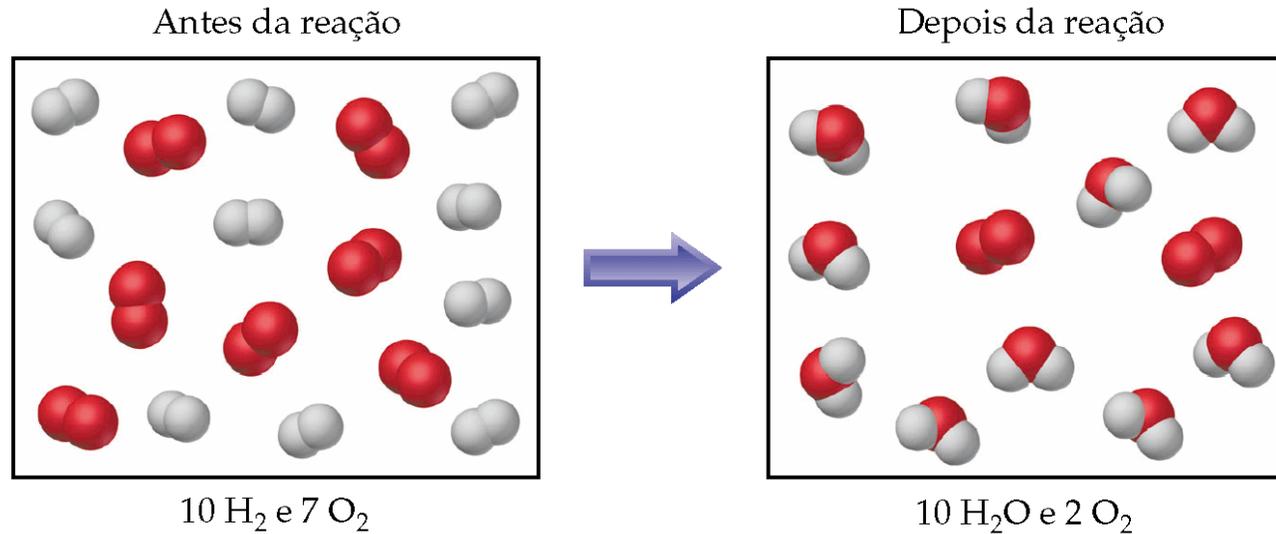
Introdução ao Cálculo Estequiométrico

PARTE 3

Reagentes limitante e Reagente em Excesso

| Reagente limitante | Reagente em excesso |
|---|--|
| Substância que determina a quantidade de produto que se formará na reação, obedecendo a proporção estequiométrica. | Substância que sobra numa reação química por estar em quantidade além daquela requerida pela proporção estequiométrica. |

Reagentes limitante e Reagente em Excesso



Observação:
**Reagente em
excesso não reage!**

EXEMPLO 15:

O cromo metálico pode ser obtido pela reação do óxido de cromo III (Cr_2O_3) com alumínio metálico, segundo a equação balanceada:



Qual a massa de cromo metálico vai se formar se misturarmos 1Kg de alumínio metálico com 2 kg de óxido de cromo?

Inicialmente vamos considerar que o Al (s) seja o reagente limitante:



54g de Al ----- **104 g de Cr**

1000 g de Al ----- **X de Cr**

$$X = 1925,92 \text{ g de } Cr_2O_3$$

Em seguida, vamos considerar que o Cr_2O_3 (s) seja o reagente limitante:



152g de Cr_2O_3 (s) ----- 104 g de Cr

2000 g de Cr_2O_3 (s) ----- Xg de Cr

$$X = 1368,42 \text{ g de Cr}$$

- Observe que a menor quantidade de cromo metálico produzido será de **1368,42 g** , correspondente ao consumo total de Cr_2O_3 , que é, então, o **reagente limitante**.

Agora vamos calcular a massa de $\text{Al}(s)$ que será consumida e o que restou em excesso:



A massa de Al que irá reagir é igual a:

$$Y = 710,5 \text{ g de Al}$$

Como a massa total de $Al(s)$ era de 1000 g e só 710,5 g de Al reagiram, teremos um excesso de 289,5 g de Al .

Assim, temos:

a) reagente limitante: $Cr_2O_3(s)$;

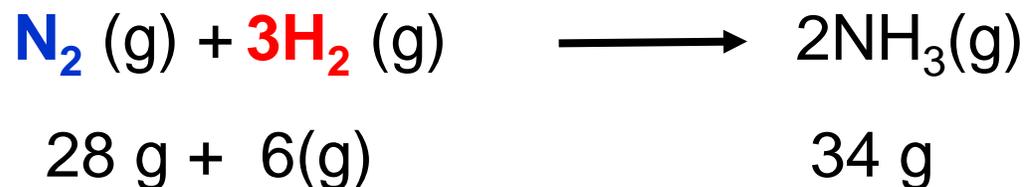
b) massa de Cromo metálico formado: 1368,42 g;

c) massa de Al em excesso: 289,5 g.

EXEMPLO 16:

Que quantidade máxima de amônia pode ser obtida, em gramas, com a mistura de **70 g de N₂** e **20 g de H₂**?

Dados: H = 1 u e N = 14 u.



28 g N₂ ----- 34 g de NH₃

70 g N₂ ----- X g de NH₃

X = 85 g de NH₃

EXEMPLO 16:

Que quantidade máxima de amônia pode ser obtida, em gramas, com a mistura de **70 g de N₂** e **20 g de H₂**?

Dados: H = 1 u e N = 14 u.



$$Y = 113,33 \text{ g de NH}_3$$

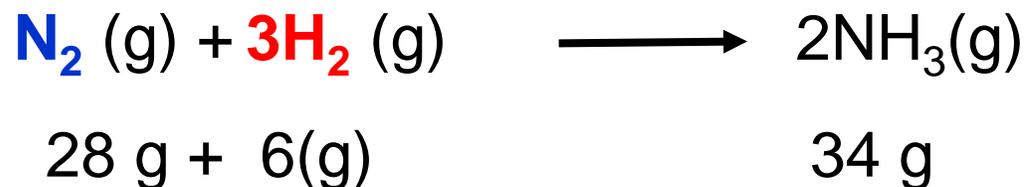
N₂ é o reagente limitante

$$X = 85 \text{ g de NH}_3$$

EXEMPLO 16:

Que quantidade máxima de amônia pode ser obtida, em gramas, com a mistura de **70 g de N₂** e **20 g de H₂**?

Dados: H = 1 u e N = 14 u.



28 g N₂ ----- 6 g de H₂

70 g N₂ ----- Z g de H₂

Z = 15 g de H₂

Excesso de 5 g de H₂

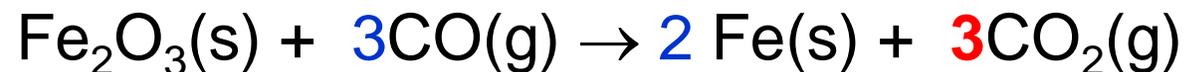
Cálculos com Grau de Pureza

- * Até aqui, trabalhamos com as substâncias admitindo que fossem puras (100% de pureza).
- * Na prática, isso ocorre apenas na produção de medicamentos ou em análises químicas muito especiais.
- * Normalmente, trabalhamos com substâncias que apresentam certa porcentagem de impurezas.

Cálculos com Grau de Pureza

EXEMPLO 17:

- ✓ Considerando que um depósito de hematita contenha um teor de 85%, qual a quantidade máxima de ferro que pode ser obtida a partir de uma tonelada (t) deste minério?



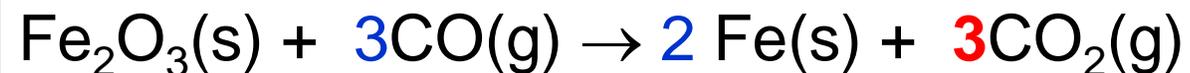
Relações estequiométricas em mol e massa na obtenção de ferro a partir da hematita.

| Fe_2O_3 | + | 3CO | → | 2Fe | + | 3CO_2 |
|-------------------------|---|------------------------------|---|-------------------------------|---|-------------------------------|
| 1 mol | | 3 mols | | 2 mols | | 3 mols |
| 160 g | | $3 \times 28 = 84 \text{ g}$ | | $2 \times 56 = 112 \text{ g}$ | | $3 \times 44 = 132 \text{ g}$ |

Massa molar: Fe = 56 g mol^{-1} ; O = 16 g mol^{-1} ; C = 12 g mol^{-1} .

Cálculos com Grau de Pureza

- ✓ Considerando que um depósito de hematita contenha um teor de 85%, qual a quantidade máxima de ferro que pode ser obtida a partir de uma tonelada (t) deste minério?



1 tonelada de hematita ----- **85 % de pureza** ----- 0,85 tonelada de hematita (850 Kg)

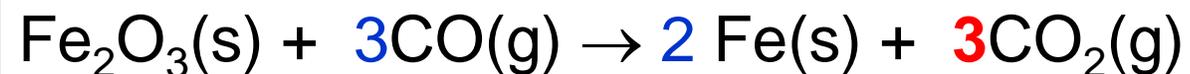
160 g de Fe_2O_3 ----- 112 g de Fe

850 Kg de Fe_2O_3 ----- X Kg de Fe

X = 595 Kg de Fe

Cálculos com Grau de Pureza

- ✓ Considerando que um depósito de hematita contenha um teor de 85%, qual a quantidade máxima de ferro que pode ser obtida a partir de uma tonelada (t) deste minério?



“Supondo” 100 % de pureza

160 g de Fe_2O_3 ----- 112 g de Fe

1000 Kg de Fe_2O_3 ----- **Y** Kg de Fe

Y = 700 Kg de Fe

“Supondo” 100 % de pureza

700 Kg de Fe_2O_3 ----- 100 % de pureza

X Kg de Fe_2O_3 ----- 80 % de pureza

X = 595 Kg de Fe

Cálculos com Grau de Pureza

EXEMPLO 18:

O carbonato de cálcio (CaCO_3) pode sofrer reação de decomposição, formando óxido de cálcio (CaO) e gás carbônico (CO_2). Essa reação pode ser representada pela equação:



Uma amostra de 5 g de carbonato de cálcio foi decomposta e produziu 2,24 g de CaO . Qual é o grau de pureza dessa amostra?

Dados: $\text{Ca} = 40 \text{ g/mol}$; $\text{C} = 12 \text{ g/mol}$; $\text{O} = 16 \text{ g/mol}$



100 g CaCO₃ ----- 56 g de CaO

5 g CaCO₃ ----- X g de CaO

X = 2,8 g de CaO

2,8 g de CaO ----- 100 % de pureza

2,24g de CaO ----- Y % de pureza

Y = 80 % de pureza

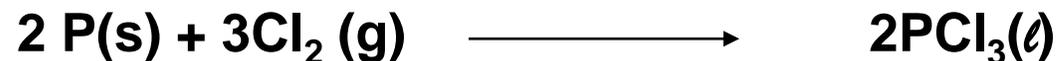
Cálculos de Rendimento Reacional

- ✓ A quantidade de produto prevista a partir da estequiometria, considerando os reagentes limitantes é chamada de **rendimento teórico**, ou seja, é a massa que deveríamos obter se não houvessem perdas ou produtos secundários (quantidade calculada COM BASE NA EQUAÇÃO QUÍMICA).
- ✓ O rendimento real é a quantidade de material obtida experimentalmente (no laboratório);
- ✓ O rendimento percentual relaciona o rendimento real (a quantidade de material recuperada no laboratório) ao rendimento teórico:

$$\text{Rendimento percentual} = \frac{\text{rendimento real}}{\text{rendimento teórico}} \times 100\%$$

CALCULANDO O RENDIMENTO PERCENTUAL DE UM PRODUTO

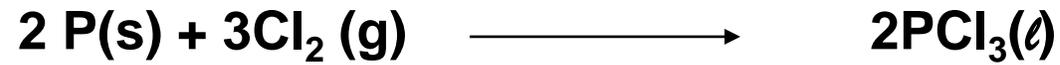
EXEMPLO 19: Um químico efetua a síntese do tricloreto de fósforo misturando **12,0 g** de P com **35,0 g** de Cl_2 e obtem **42,4 g** de PCl_3 . Calcule o rendimento percentual para este composto.



Uma vez que foram fornecidas as massas, deve-se saber qual é o reagente limitante.

Vamos escolher o fósforo e determinar se ele está presente em quantidade suficiente para reagir com 35 g de cloro.

Inicialmente vamos considerar que o P seja o reagente limitante:



2 mol de P ————— 2 mol de PCl₃

62 g de P

275g de PCl₃

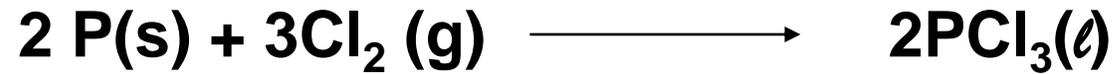
12 g de P

X

X = 53,22 g de de PCl₃

Se supormos que o P é o reagente limitante, obteríamos
53,22g de PCl₃

Agora vamos considerar que o Cl_2 seja o reagente limitante:



3 mol ————— 2 mol

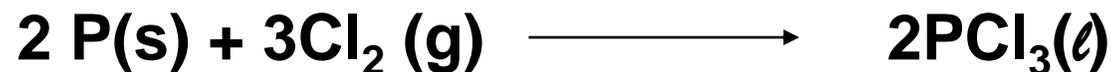
213g de Cl_2 ————— 275g de PCl_3
35g de Cl_2 ————— y

$$y = 45,18 \text{ g de } \text{PCl}_3$$

Supondo-se que o Cl_2 é o reagente limitante, obteríamos **45,18g de PCl_3** (ou seja, a menor quantidade possível, logo o Cl_2 é o reagente limitante)

Cálculo do Rendimento Percentual

Para obtermos rendimento teórico de PCl_3 , atribuímos a 100 % a massa teórica de PCl_3 que poderia ser obtida a partir de 35 g de Cl_2 (**Teórico**). Já a massa encontrada experimentalmente relacionamos ao rendimento obtido (**Real**)!



45,18g de PCl_3 _____ 100 % de Rendimento

42,4g de PCl_3 _____ Z

Z = 93, 85% de rendimento reacional

Cálculo do Rendimento Percentual

$$\text{Rendimento Percentual} = \frac{\text{Rendimento Real}}{\text{Rendimento Teórico}} \times 100\%$$

$$\text{Rendimento Percentual} = \frac{42,4 \text{ g de PCl}_3}{45,18 \text{ g de PCl}_3} \times 100\%$$

$$\text{Rendimento Percentual} = 93,85 \%$$

Bibliografia Básica

- BROWN, Theodore L.; LEMAY JR., H. Eugene; BURSTEN, Bruce E.; BURDGE, Julia R. **Química: A Ciência Central**. 9 ed. São Paulo: Editora Pearson Prentice Hall Inc., 2005.
- KOTZ, John C.; TREICHEL JR., Paul M.; WEAVER, Gabriela C. **Química Geral e Reações Químicas** - Vol. 1. 6 ed. São Paulo: Editora Cengage Learning, 2009.
- KOTZ, John C.; TREICHEL JR., Paul M.; WEAVER, Gabriela C. **Química Geral e Reações Químicas** - Vol. 2. 6 ed. São Paulo: Editora Cengage Learning, 2009.

Bibliografia Complementar

- ATKINS, Peter; JONES, Loretta. **Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente**. 5 ed. Porto Alegre: Editora Bookman, 2012.
- BROWN, L.S. e HOLME, T.A.; **Química geral aplicada à engenharia**. Tradução: Maria Lucia Godinho de Oliveira. Revisão técnica: Robson Mendes Matos. São Paulo: Cengage Learning, 2009.
- GEMELLI, Enori. **Corrosão de Materiais Metálicos e sua caracterização**. 1 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2001.
- GENTIL, Vicente. **Corrosão**. 6 Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2011.
- MAIA, Daltamir Justino e BIANCHI, J. C. de A. **Química geral**. 1 ed. São Paulo: Pearson, 2007.
- Raymond Chang, Trad. 4.ed. Maria J. F. Rebelo, et. All. **Química Geral - Conceitos Essenciais**,. Porto Alegre, AMGH, 2010.
- Burrows A. Holman J. Parsons A. Pilling G. Prince G. Química – Introdução à química inorgânica, orgânica e físico-química-v-1, Editora LTC, 2012
- Chang R. Goldsby K. **Química 11^a** edição, Porto Alegre, AMGH, 2013.
- James N. Spencer, George M. Bodner e Lyman H. Rickard. Edilson C. Silva e Oswaldo E. Barcia, **Química Geral Estrutura e Dinâmica** vol. 1 e 2, 3^a edição. LTC, 2007.
- Duward F. Shriver, et al. Trad. 4.ed. Roberto B. Faria. **Química Inorgânica**, Porto Alegre, Editora Bookman, 2008.