

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

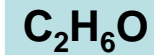
H₂O

Fórmulas Molecular:

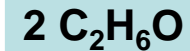
➤ **composição exata de cada elemento**

Fórmula molecular de algumas substâncias.

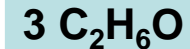
Substância	Fórmula molecular
Álcool etílico (etanol)	C_2H_6O
Ácido muriático (clorídrico)	HCl
Gás carbônico (dióxido de carbono)	CO_2
Amônia	NH_3
Sacarose (açúcar comum)	$C_{12}H_{22}O_{11}$
Octano	C_8H_{18}
Butano	C_4H_{10}
Ácido acético (etanóico)	$C_2H_4O_2$
Acetona (propanona)	C_3H_6O
Éter etílico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

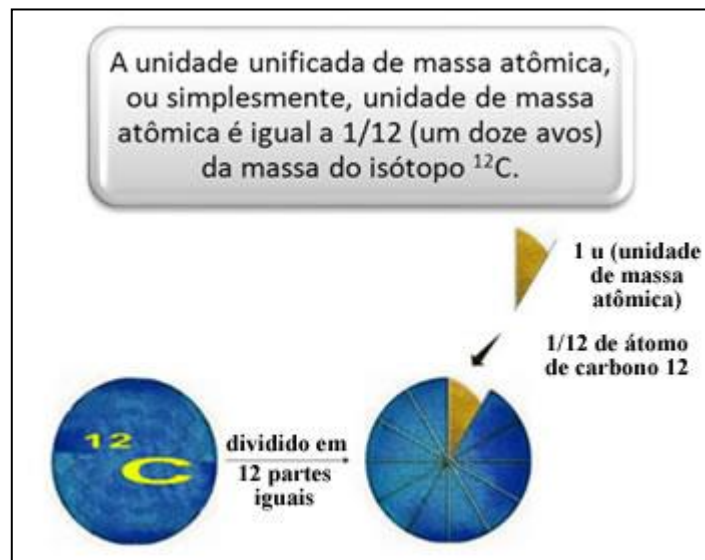
➤ Proporção mínima onde as cargas + é igual a de cargas -

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

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

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

A massa 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:

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

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%

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

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

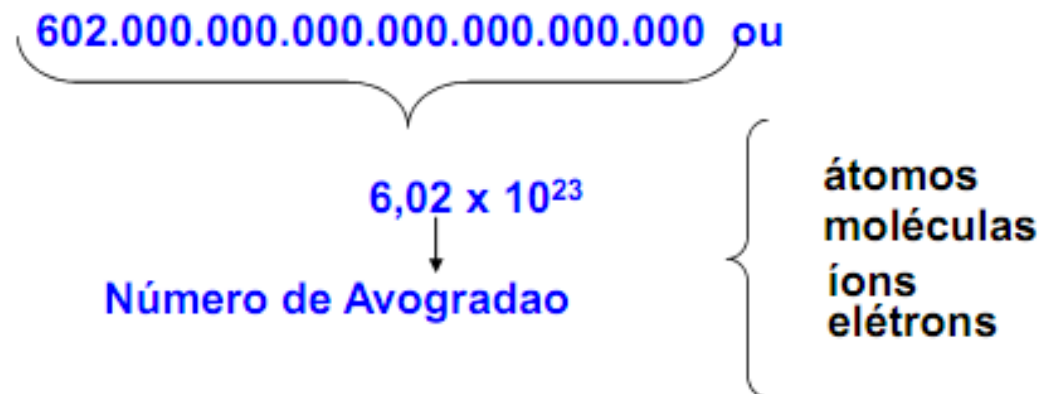
Massa Molar

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 (C₆H₁₂O₆).**

C₆: massa = 6 x 12 = 72 g.

H₁₂: massa = 12 x 1 = 12 g.

O₆: massa = 6 x 16 = 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:

$$\frac{4,343}{2,174} = 2$$

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

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

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)!

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

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

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

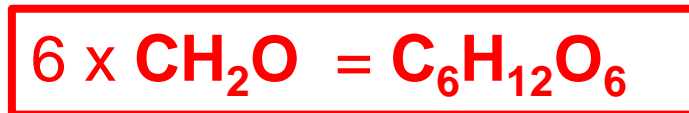
MMFm da glicose é **CH₂O**. = 30 g

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

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



Introdução ao Cálculo Estequiométrico

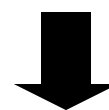
PARTE 2

Equações Químicas: Representação de uma Reação

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



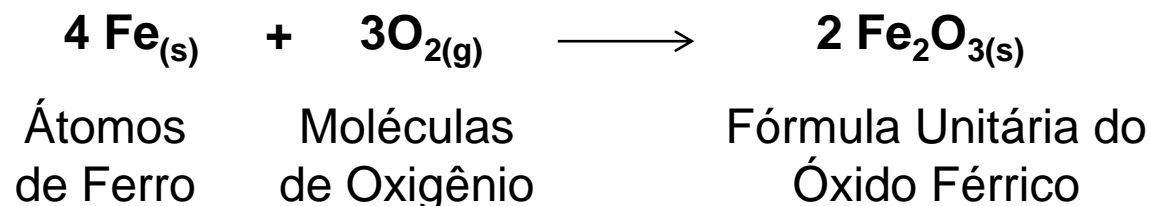
Reagente (s)



Produto (s)

ESTEQUIOMETRIA DAS REAÇÕES

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

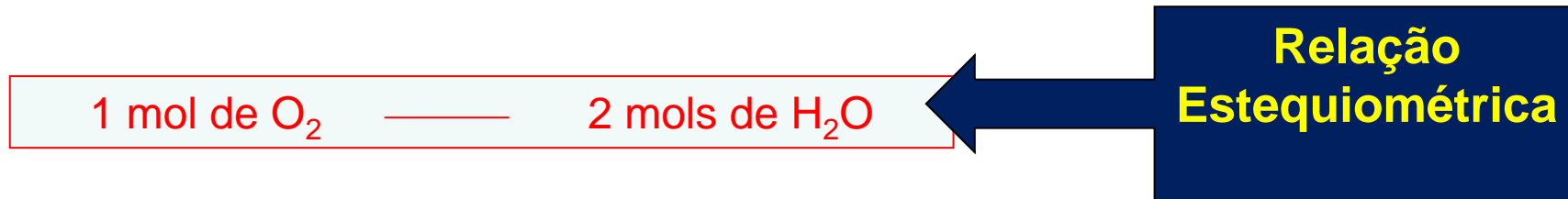
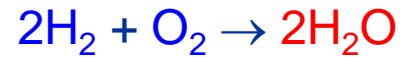


Na reação acima, o átomo de ferro reage com a molécula de oxigênio para formar o óxido férrico.

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

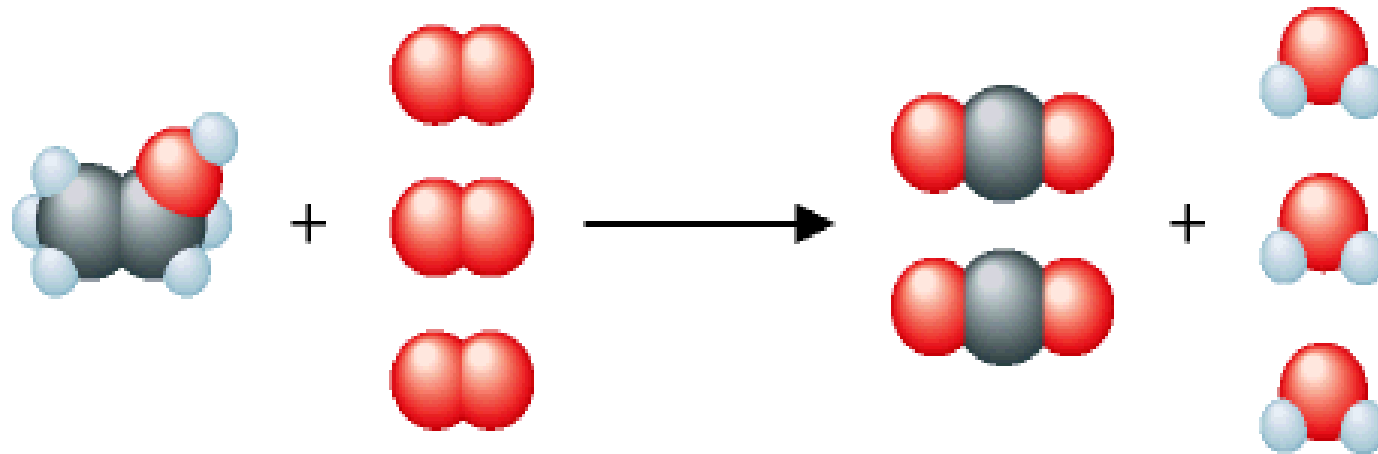
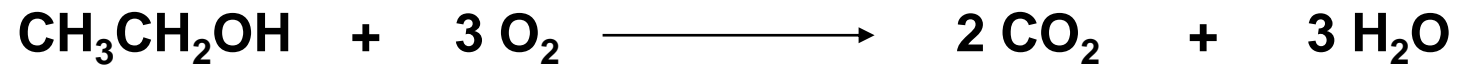
- ✓ A equação balanceada fornece o número de moléculas que reagem para formar produtos.
- ✓ Interpretação: a proporção da quantidade de matéria de reagente necessária para se chegar à proporção da quantidade de matéria do produto.
- ✓ Essas proporções são denominadas *proporções estequiométricas*.

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

$$X \cdot 1 = 2$$

$$X = 2$$

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

$$\text{X} = 3$$

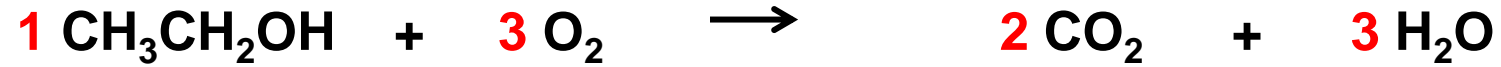
4 O + 3 O = 7 O

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**



Interpretação da reação de combustão do monóxido de carbono



Proporção molecular 1 molécula + 3 moléculas 2 moléculas + 3 moléculas

Proporção molar 1 mol 3 mol 2 mol 3 mol

Proporção em massa 1 . (46 g) 3. (32g) 2 . (44 g) 3. (18g)

Total = 142 g

Total = 142 g

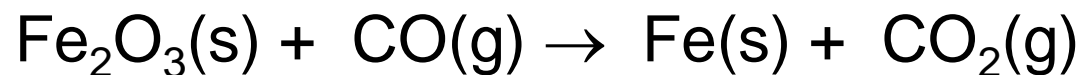
Lei da Conservação da Massa (Lavoisier)

em reações químicas não há variação da massa total. Os átomos não podem ser criados ou destruídos.

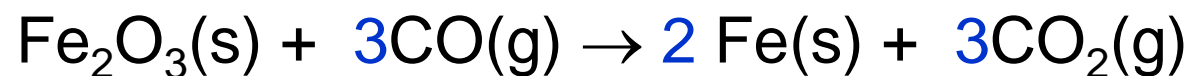
Equações Químicas: Representação de uma Reação

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:

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

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



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

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

$$\mathbf{X = 45 \text{ mols de } \text{H}_2\text{O}}$$

Relação em MASSA

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



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

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 isoctano?

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

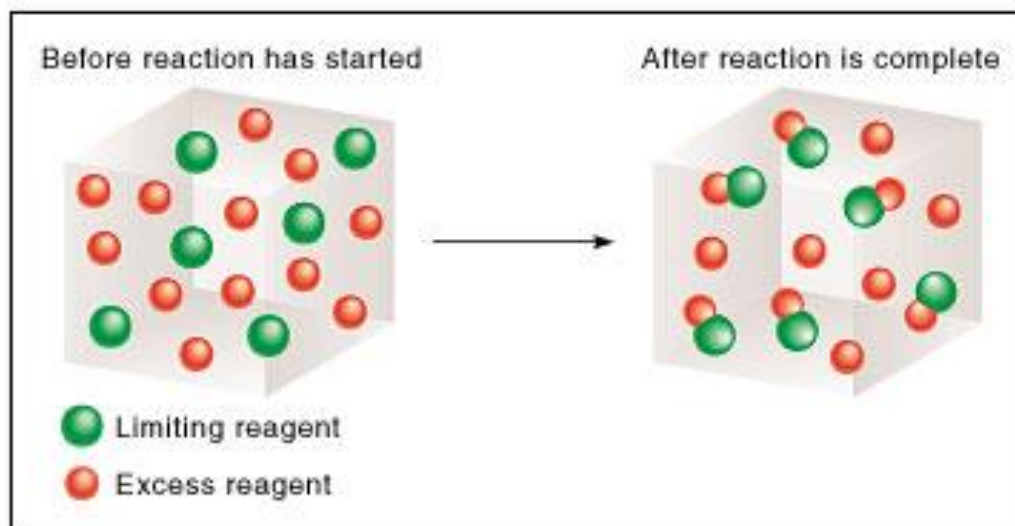
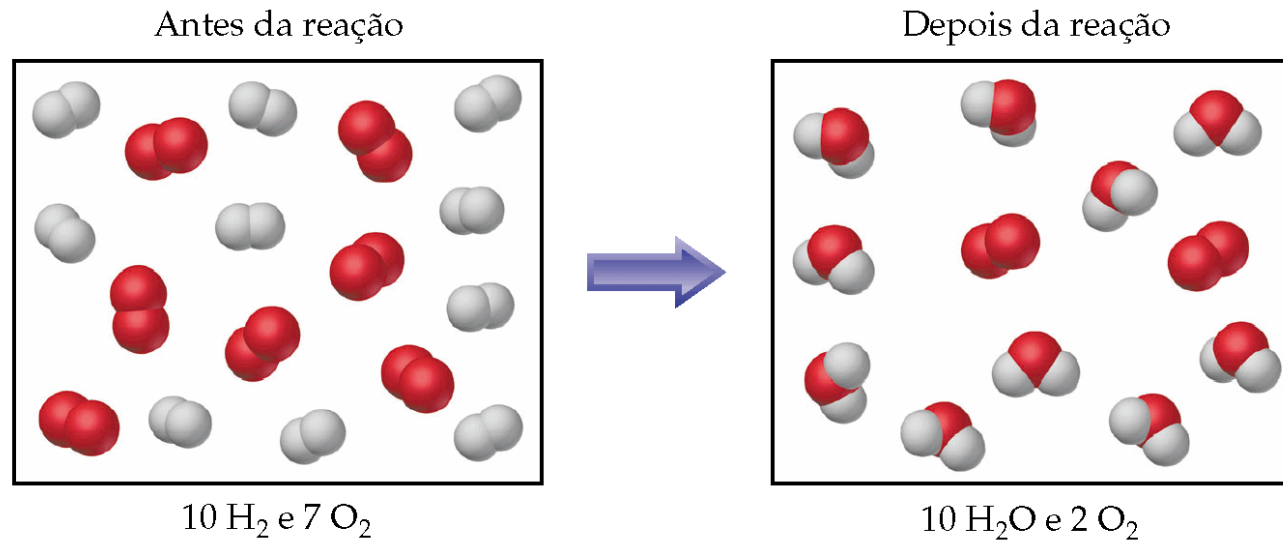
Introdução ao Cálculo Estequiométrico

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:

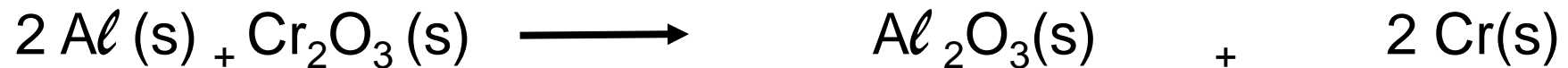


54g de Al ----- 104 g de Cr

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: $Cr_2O_3(s)$;

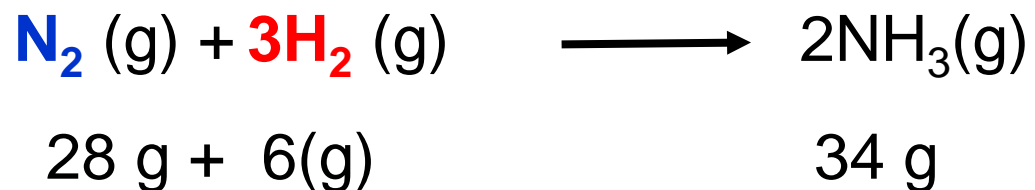
b) massa de Cromo metálico formado: 1368,42 g;

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.



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

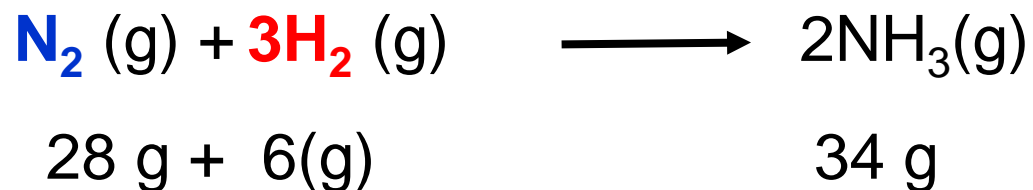
N₂ é o reagente limitante

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

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

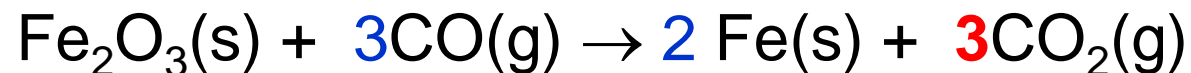
Cálculos com Grau de Pureza

- * 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?



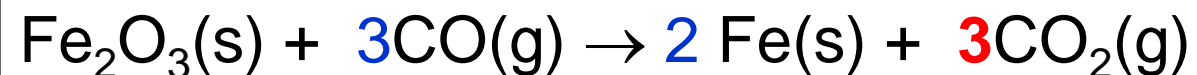
Relações estequiométricas em mol e massa na obtenção de ferro a partir da hematita.

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)

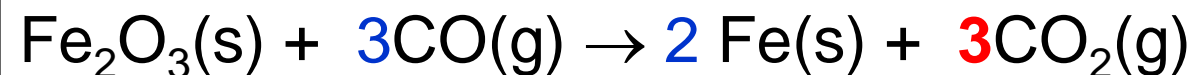
160 g de Fe_2O_3 ----- 112 g de Fe

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

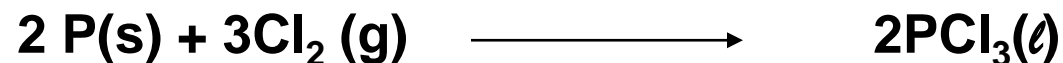
Cálculos de Rendimento Reacional

- ✓ 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

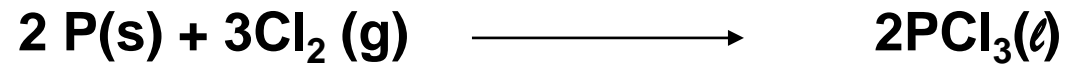
EXEMPLO 19: Um químico efetua a síntese do tricloreto de fósforo misturando **12,0 g** de P com **35,0 g** de Cl_2 e obtem **42,4 g** de PCl_3 . Calcule o rendimento percentual para este composto.



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

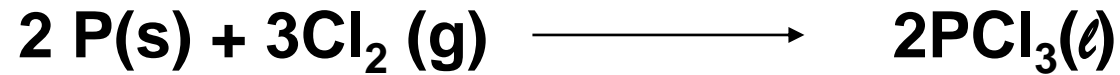
12 g de P

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

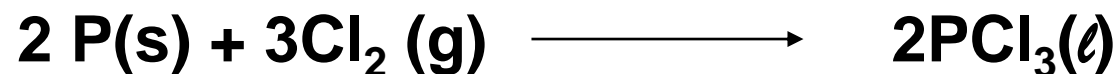
213g de Cl_2 ————— 275g de PCl_3
35g de Cl_2 ————— y

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

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.