



**EXAME DE ACESSO 2015  
MATERIAL DE ESTUDO DE QUÍMICA**

*Autores: Kátia Gabriel, Domingos Santana, Júlio Kuende, Martha Molina, Magata Nkuba, Miguel Clemente, Mário Reys, Mónica Francisco e Letícia Torres*

ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

***Janeiro de 2015***

## Índice

CAPÍTULO I - TEORIA ATÓMICA .....	1
1.1 Introdução .....	1
1.2 Evolução do modelo atómico .....	1
1.2.1 Modelo de pudim com passas de J. J. Thomson .....	1
1.2.2 Modelo planetário de E. Rutherford .....	2
1.2.3 Modelo quântico de Niels Bohr .....	3
1.2.4 Modelo da mecânica quântica .....	3
1.3 Estrutura do átomo .....	5
1.3.1 Isótopos, Isóbaros e Isótonos .....	6
1.3.2 Os números quânticos e distribuição electrónica .....	7
1.4 Efeito fotoeléctrico .....	10
1.5 Tabela periódica .....	11
1.5.1 Classificação dos elementos na tabla periódica .....	12
1.5.2 Propriedades periódicas .....	13
1.6 Ligações químicas .....	15
1.6.1 A regra do octeto .....	15
1.6.2 Ligação iónica .....	16
1.6.3 Ligações covalentes .....	16
1.6.3.1 Polaridade da ligação covalente .....	18
1.6.4 Ligação metálica .....	20
CAPÍTULO II - SÍMBOLOS E FÓRMULAS QUÍMICAS .....	24
2.1 Significado das fórmulas químicas .....	24
2.2 Fórmulas químicas para as substâncias .....	25
2.3 Regras para escrita de fórmulas químicas .....	26
2.3.1 Nomenclatura dos óxidos .....	28
2.3.2 Nomenclatura dos ácidos .....	29
2.3.4 Nomenclatura dos sais .....	31
1.3.4.1 Sais hidratados .....	32
2.3.5 Nomenclatura dos hidretos .....	32
CAPÍTULO III - SOLUÇÕES EM QUÍMICA .....	34
3.1 Introdução .....	34
2.3 Classificação das soluções .....	35
3.2 Unidades de concentração das soluções .....	37
3.4 Preparação de soluções aquosas de concentração conhecidas .....	43
3.5 Diluição de soluções .....	44
CAPÍTULO IV - CÁLCULO ESTEQUIOMÉTRICO .....	49
4.1 Reacções químicas: cálculos estequiométricos .....	49
4.2 Leis ponderais e reacções químicas .....	49
4.3 As leis ponderais e a teoria atômica de Dalton .....	51
4.4 Equações químicas .....	51
4.5 Tipos de cálculos estequiométricos .....	53
4.4.1 Regras para a realização dos cálculos estequiométricos .....	54
CAPÍTULO V - CINÉTICA QUÍMICA E EQUILÍBRIO QUÍMICO .....	64
5.1 Cinética química .....	64
5.1.1 Velocidade de uma reacção .....	64
5.1.1.2 Factores que afectam a velocidade de uma reacção .....	65
5.1.2 Equação cinética .....	66

5.1.3 Ordem da reacção .....	66
5.1.4 Relação entre a concentração de reagente e o tempo .....	67
5.1.5 Teorias de velocidades das reacções .....	70
5.1.6 Equação de Arrhenius .....	71
5.1.7 Mecanismos reaccionais .....	72
5.1.8 Catálise .....	73
5.2 Equilíbrio químico .....	74
5.2.1 Constante de equilíbrio .....	75
5.2.2 Previsão do sentido de uma reacção .....	78
5.2.4 Factores que afectam o equilíbrio químico .....	79
CAPÍTULO VI - TEORIAS ACIDO-BASE .....	83
6.1 Ácidos e bases: uma breve revisão .....	83
6.1.1 A definição de Arrhenius .....	83
6.1.2 Ácidos e bases de Lewis .....	83
6.1.3 A definição de Bronsted-Lowry .....	84
6.2 Pares ácido-base conjugados .....	84
6.3 Produto iónico da água .....	85
6.4 Forças relativas de ácidos e bases .....	86
6.4.1 pH- uma medida de acidez .....	87
6.4.2 Outras escalas 'p' .....	88
6.5 Ácidos e bases fortes .....	89
6.5.1 Ácidos fortes .....	89
6.5.2 Bases fortes .....	89
6.5.3 Ácidos fracos .....	89
6.5.4 Bases fracas .....	90
CAPÍTULO VII - TROCAS DE ENERGIA EM REAÇÕES QUÍMICAS .....	98
7.1 Calor associado à variação de temperatura .....	98
7.2 Cálculo da entalpia de uma reacção e lei de Hess .....	100
7.2.1 Cálculo da entalpia de uma reacção de forma directa .....	100
7.2.2 Cálculo da entalpia de uma reacção de forma indirecta, recorrendo à lei de Hess .....	101
CAPÍTULO VIII - HIDROCARBONETOS .....	105
8.1 Nomenclatura .....	105
8.1.1 Regras da IUPAC .....	106
8.2 Isomeria .....	107
8.2.1 Isomeria plana .....	108
8.2.2 Isomeria de Cadeia .....	108
8.2.3 Isomeria de posição .....	108
8.2.4 Isomeria de função .....	109
8.2.5 Isômeros de compensação ou metâmeros .....	109

ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## CAPÍTULO I - TEORIA ATÓMICA

### 1.1 Introdução

A constituição da matéria sempre intrigou o homem, a essência de tudo o que rodeia o ser humano sempre lhe causou curiosidade, despertou-lhe interesse... Na mente humana nunca se calaram as questões relativas aos constituintes dos edifícios, dos alimentos, da água, das estrelas... enfim, os constituintes do próprio corpo humano!

Desde a antiguidade que têm sido apresentadas e espalhadas por muitos homens ideias ou teorias sobre a constituição da matéria. Mediante experiências e suposições, conclusões acertadas foram sendo obtidas sobre aquilo de que é feito a matéria. Assim surgiu o conceito de átomo.

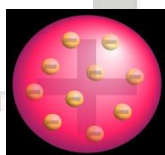
Embora nunca ninguém tenha visto um átomo, por ser tão pequeno que não pode ser observado a olho nu, as experiências realizadas permitiram chegar a conclusões sobre a sua estrutura, composição e comportamento. Pelo que, o átomo é descrito com base em tais conhecimentos que são sempre actualizados. Essa descrição é um modelo do átomo.

### 1.2 Evolução do modelo atómico

A seguir, são resumidamente apresentados os principais modelos atómicos desenvolvidos ao longo dos anos, para explicar a constituição da matéria e o seu comportamento.

#### 1.2.1 Modelo de pudim com passas de J. J. Thomson

Modelo de J. J. Thomson, físico inglês, propôs uma descrição (modelo) do átomo, baseado nos resultados das suas experiências onde, através da aplicação de uma corrente eléctrica sobre um gás, foi produzido um fluxo de electrões, interpretado por ele como se os electrões estivessem incrustados nos átomos do gás; a seguir, descreveu o átomo como uma esfera de carga homogénea e indivisível, constituída por cargas positivas nas quais os electrões se encontrariam incrustados como pequenos grânulos, semelhantes ao "pudim com passas", o nome pelo qual veio a ser conhecido.



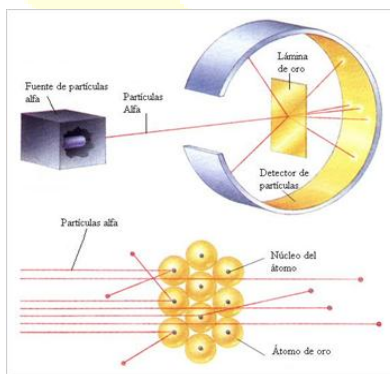
**Representação do modelo atómico de JJ Thomson "Pastel com passas" Fonte: Wikipedia.**

### 1.2.2 Modelo planetário de E. Rutherford

Ernest Rutherford, físico neozelandez, aluno de J.J. Thomson, realizou uma experiência que lhe permitiu refutar o modelo proposto pelo seu Professor.

Ele montou um equipamento como o da figura abaixo, com uma fonte de partículas a ser bombardeada, por uma fonte radioactiva. Colocou uma tela redonda de material fluorescente que se iluminaria ao receber o impacto das partículas e assim, poder conhecer a trajetória das mesmas. Na trajetória das partículas, colocou uma fina lâmina de metal (ouro) para deter as partículas ao chocar com o átomo homogêneo e indivisível de Thomson.

No entanto, a grande maioria das partículas continuou em linha recta atravessando o metal como se não tivesse nada na sua trajetória; muito poucas retrocederam e algumas foram desviadas. Este facto experimental refutou o modelo de Thomson, mostrando que o átomo é composto principalmente de espaços vazios.



**Experiência de L. Rutherford. (Fonte: <http://www.tplaboratorioquimico.com/2010/01/el-experimento-de-ernest-rutherford-el.html#.VFCCOyLF-rk>)**

Considerando outros factos científicos e a interpretação da sua experiência, Rutherford descreve o átomo da seguinte forma:

O átomo é formado por um núcleo extremamente pequeno em relação ao seu tamanho, onde a sua massa (prótons) é concentrada; e os electrões giram em torno dele, a grandes distâncias, como planetas ao redor do sol, descrevendo órbitas estacionárias, definidas, de modo que a sua força centrífuga compensa a atracção electrostática que o núcleo positivo exerce sobre eles.

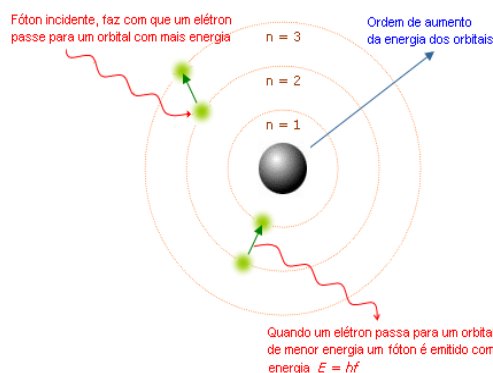
Rutherford sugeriu a ideia da existência de outras partículas no núcleo com massa igual ao próton, mas electricamente neutro.

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

### 1.2.3 Modelo quântico de Niels Bohr

O modelo de Bohr mostra factos que não foram explicados pelo modelo de Rutherford e afirma que:

- ✓ Os electrões giram em torno do núcleo em órbitas fixas sem emitir ou absorver energia, o que significa que ele tem uma quantidade de energia fixa e definida característica dessa órbita.
- ✓ Quando um electrão passa de uma órbita externa para uma mais interna, a diferença de energia entre os dois é emitida sob a forma de radiação electromagnética.
- ✓ A energia de cada órbita é constante e o electrão absorve ou emite energia em quantidades discretas, chamados quantos.



**Emissão e absorção da energia radiante num átomo. (Fonte: imagem tirada de: grupo Tchê Química.)  
Porto Alegre. Brasil. P. 10)**

### 1.2.4 Modelo da mecânica quântica

Depois de ser aceite a estrutura e a composição do átomo, como a célula da matéria, foi necessário aprofundar o entendimento do seu comportamento e principalmente das partículas que o constituem. Isso levaria ao modelo actual que é o da Mecânica Quântica.

Durante a década dos anos 20 do século XX, eram debatidos na comunidade científica alguns conflitos teóricos:

- ✓ O modelo ondulatório e corpuscular da luz.
- ✓ A teoria da energia quantizada que se opôs à mecânica clássica apresentada por Isaac Newton e que tinha sido aplicada aos fenómenos do "macromundo" por longo tempo.

A ciência estava em pleno desenvolvimento perante estes desafios. Foi necessário explicar fenómenos ainda não explicados que ajudariam a resolver as contradições teóricas anteriores e que enriqueceriam o conhecimento humano sobre a natureza, estrutura e composição da matéria. Entre os principais factos que marcaram esta etapa estão:

- ✓ O princípio de indeterminação: Não é possível conhecer ao mesmo tempo a posição e a velocidade de uma partícula. W. Heisenberg
- ✓ Equação de Onda, que descreve o movimento de onda, contribuindo para a compreensão da natureza dual da matéria (onda e corpúsculo): E. Schrodinger
  - Provou-se que um conjunto de partículas (electrões) a uma determinada velocidade pode comportar-se com todas as propriedades de uma onda (Ao incidir um fóton sobre um electrão, este dispersa-se: (comportamento ondulatório)
  - Ao incidir a luz sobre uma placa de metal, esta emite electrões: o electrão é deslocado como uma bola de bilhar. (comportamento corpuscular)

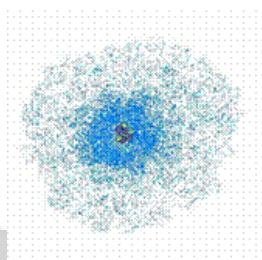
Através desta teoria foi possível explicar fenómenos não compreendidos:

- ✓ A polarização e difracção da luz
- ✓ Os fenómenos da difracção e interferência
- ✓ O facto de que as vibrações electromagnéticas de elevada frequência não necessitem de nenhum meio material para se espalharem
- ✓ O efeito fotoeléctrico.

Os físicos W. Heisenberg e M. Born na Alemanha e Schrödinger na Áustria, desenvolveram um modelo matemático complexo (equação de onda) que deu a resposta para o paradoxo de "ondas de matéria" e "partículas de luz"

Interpretado como... "o comportamento da matéria não depende de um único electrão, mas de feixes de partículas (ondas)."

Segundo Heisenberg, é difícil determinar a posição exacta de um electrão no envoltório atómico. Por outra parte, Schrödinger em 1926 calculou a região mais provável onde o electrão poderia estar, num período determinado. A essa região deu o nome de orbital.



Uma representação do modelo atómico da mecânica quântica. Fonte:  
<http://www.explicatorium.comCFQ9-Evolucao-atomo.php>

ISPTEC  
INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

### 1.3 Estrutura do átomo

O átomo é constituído por um núcleo e um envoltório (à volta do qual se movem os electrões-nuvem electrónica?). No núcleo, encontram-se os protões (partículas com carga positiva) e os neutrões (partículas com carga negativa). O envoltório do núcleo é a região em que se encontram os electrões (carregados negativamente).

No estado fundamental o átomo é electricamente neutro (i.e., a sua carga é nula) porque o seu número de protões é igual ao seu número de electrões.

As partículas que permitem identificar os átomos de um mesmo elemento químico são os protões. Todos os átomos que apresentam o mesmo número de protões pertencem ao mesmo elemento químico. E o número atómico ( $Z$ ) de um elemento é o seu número de protões. Além do número de protões, um átomo é também caracterizado pela sua massa ( $A$ ), que é igual ao somatório do seu número de protões e de neutrões. Por exemplo, a massa atómica ( $A$ ) do ferro é igual à 56 unidades de massa atómica ( $u$ ), o seu número atómico ( $Z$ ) é igual à 26. Essa informação sobre o elemento químico ferro pode ser simbolizada do modo seguinte:  ${}_{26}\text{Fe}^{56}$ .

Massa molecular: é igual a soma das massas atómicas de todos os átomos que formam a molécula.

#### Exemplo:

Determinação da massa molecular do Oxigénio  $\text{O}_2$ :  $(16 \times 2) = 32 \text{ u}$ .

Determinação da massa molecular da água  $\text{H}_2\text{O}$ :  $(1,0 \times 2) + (16 \times 1) = 18 \text{ u}$ .

Mol: é a unidade de medida da quantidade de matéria. É uma unidade básica do Sistema Internacional de Unidades (SI). O seu símbolo é: mol.

Para qualquer substância, 1 mol possui  $6,023 \times 10^{23}$  partículas (átomos, moléculas, iões). Por exemplo, 1 mol de qualquer gás possui  $6,023 \times 10^{23}$  moléculas deste gás. 1 mol de átomos de qualquer elemento pesa tantas gramas quanto a sua massa molar, sendo a massa molar e massa atómica do elemento iguais numericamente.

**Exemplo:** Massa do nitrogénio atómico é  $14u$ ; em 14 gramas de nitrogénio, há  $6,023 \times 10^{23}$  átomos de nitrogénio; 28 é massa molecular de nitrogénio ( $\text{N}_2$ ) molécula; 28 gramas de  $\text{N}_2$  há  $6,023 \times 10^{23}$  moléculas de nitrogénio.



### 1.3.1 Isótopos, Isóbaros e Isótonos

**Isótopos.** Um átomo do mesmo elemento pode ter um número diferente de neutrões. Por exemplo, são conhecidos três tipos de átomos de oxigénio:  ${}_8\text{O}^{16}$ ,  ${}_8\text{O}^{17}$  e  ${}_8\text{O}^{18}$ . Juntos consideram-se isótopos. Observe que os três têm o mesmo número de protões (8), porque é o mesmo elemento, mas têm massas atómicas (A) diferentes (16, 17 e 18), porque têm um número diferente de neutrões. Os átomos que possuem o mesmo número de protões e diferente número de neutrões no núcleo são chamados isótopos. Outro exemplo é o carbono:  ${}_6\text{C}^{12}$ ,  ${}_6\text{C}^{13}$  e  ${}_6\text{C}^{15}$ . Estes átomos são isótopos entre si.

**Isóbaros.** São átomos que têm um número diferente de protões, mas a mesma massa (A), portanto, pertencem a diferentes elementos. Por exemplo, os átomos seguintes são isóbaros uns dos outros:  ${}_{19}\text{K}^{40}$  e  ${}_{20}\text{Ca}^{40}$  potássio e cálcio são isóbaros, têm A=40.

**Isótonos.** São átomos que possuem o mesmo número de neutrões e pertencem a elementos diferentes: por exemplo, os seguintes átomos são isótonos uns dos outros:  ${}_{17}\text{Cl}^{37}$  e  ${}_{20}\text{Ca}^{40}$ ;  ${}_5\text{B}^{11}$  e  ${}_6\text{C}^{12}$ .

Resumo das características que distinguem os isótopos, Isóbaros e Isótonos

ÁTOMOS	Massa Atómica	Número de Neutrões	Número de Protões
Isótopos	$\neq$	$\neq$	$=$
Isóbaros	$=$	$\neq$	$\neq$
Isótonos	$\neq$	$=$	$\neq$

#### Exercícios Resolvidos:

1. Um átomo possui 12 protões, 13 neutrões e 11 electrões. Qual é o seu número atómico?

Resposta:

O seu número atómico é 12, porque é o número de protões no seu núcleo.

2. Quais dos átomos representados por X, Y e Z pertencem ao mesmo elemento?

**X:** tem 8 protões e 10 electrões; **Y:** tem 10 protões e 10 electrões; **Z:** tem 8 protões e 8 electrões.

Resposta:

X e Z pertencem ao mesmo elemento, uma vez que ambos têm o mesmo número de protões, só que X ganhou 2 electrões e tornou-se um anião com duas cargas positivas.

3. A seguir, apresentam-se os símbolos de vários elementos químicos. Escolha entre eles:

(a) Dois que são isótopos entre si

(b) Dois que são isóbaros

(c) Dois que são isótonos entre si.

$1\text{H}^2$ ;  $20\text{Ca}^{42}$ ;  $22\text{Ti}^{42}$ ;  $1\text{H}^3$ ;  $20\text{Ca}^{42}$ ;  $20\text{Ca}^{42}$ ;  $17\text{Cl}^{37}$

Resposta:

(a) São isótopos:  $1\text{H}^2$  e  $1\text{H}^3$  (têm o mesmo número de prótons)

São isóbaros;  $22\text{Ti}^{42}$  e  $20\text{Ca}^{42}$  (têm a mesma massa atómica)

São isótonos;  $20\text{Ca}^{42}$ ; e  $17\text{Cl}^{37}$  (têm o mesmo número de neutrões)

### 1.3.2 Os números quânticos e distribuição electrónica

De acordo com o modelo atómico de Rutherford-Bohr o átomo apresenta níveis de energia ou camadas de energia, cada nível possuindo um máximo número de electrões.

O modelo quântico permite calcular as regiões do espaço onde há maior probabilidade de localizar um electrão, ou seja, níveis, subníveis e orbitais. Esta teoria descreve esta localização através do que se denomina: "números quânticos", os quais descrevem as energias dos electrões nos átomos e são de enorme importância para descrever a posição de dois electrões nos átomos. Os números quânticos são 4.

O número quântico principal: Tem valores que indicam o número de níveis de energia. É representado por: ***n***.





O número quântico secundário ou azimutal (***l***). Toma valores que indicam o número de subníveis em cada nível de energia. É representado por: ***s, p, d, f***.

O número quântico magnético. Tem valores que indicam a orientação de cada orbital no espaço, segundo os eixes cartesianos X, Y, Z. É representado por: ***m***.

O número quântico spin. Indica o sentido do giro (rotação) dos electrões. É representado por: ***s***.

Número quântico principal ***n***: Pode apresentar os seguintes valores:  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots, \infty$ . São sempre números inteiros. Quanto maior for o valor de ***n***, maior é a distância média do electrão ao núcleo do átomo. Cada nível de energia tem um número máximo de electrões que é calculado pela expressão:  **$2n^2$** .

Número quântico de momento angular, azimutal ou secundário, ***l***. Informa-nos sobre a forma das orbitais. Verificou-se que um electrão, numa mesma orbital, apresentava energias diferentes para uma mesma camada electrónica

			
$l=0$	$l=0$ $l=1$	$l=0$ $l=1$ $l=2$	$l=0$ $l=1$ $l=2$ $l=3$
$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$

**As orbitais são esféricas, mais os p são elípticos, o que situa os electrões, em cada caso, a diferentes distâncias do núcleo e portanto com energias diferentes**

O número quântico secundário indica a energia do electrão no subnível. Um nível de energia  $n$  é formado por  $n$  subníveis de energia. Entre os átomos conhecidos nos seus estados fundamentais, os subníveis conhecidos são quatro, com os valores de  $l$  iguais a 0, 1, 2, 3, em ordem crescente de energia. Cada subnível de energia tem um número máximo de subníveis; os valores de  $l$  variam: Desde 0 a  $(n - 1)$

Exemplo: 1s representa o subnível s ( $l = 0$ ) do 1º nível. O número máximo de electrões, em cada subnível, é dado pela equação  $2(2l + 1)$ . Considerando-se os subníveis conhecidos:

O número quântico secundário define a forma da orbital e localiza o electrão num subnível de energia:

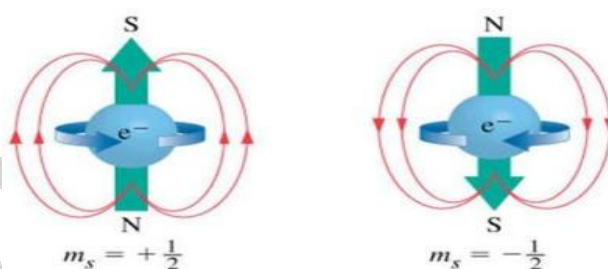
$l = 0$ , orbitais s, com formato esférico.

$l = 1$ , orbitais p, com formato de dois lóbulos e um nóculo.

$l = 2$ , orbitais d, com formato de quatro lóbulos e dois nóculos.

$l = 3$ , orbitais f, com formato de oito lóbulos e quatro nóculos.

**Número quântico spin.** Os electrões giram no mesmo sentido ou em sentido contrário, eles criam um campo magnético que os repelem ou os atraem. Essa rotação é chamada de SPIN, palavra em inglês, que significa girar. É por isso que em cada orbital os dois electrões devem ter spins contrários (+ e -).



(Fonte: Macedo G. Química aplicada a la engenharia. Universidade Católica do Salvador. <http://pt.slideshare.net/cmdantasbanmeros-quânticos-12285848> consultado Outubro 29 de 2014)

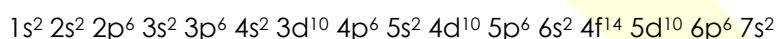
O princípio de exclusão de Pauli é um princípio da mecânica quântica formulado por Wolfgang Pauli em 1925, e expressa o seguinte: Num mesmo átomo, dois electrões não podem ter os mesmos quatro números quânticos. Por exemplo, se os números quânticos  $n$ ,  $l$ , e  $m$  são iguais nos dois electrões, estes

deverão necessariamente ter os números quânticos **s** diferentes, e portanto os dois electrões têm spins opostos.

Regra de Hund ou Princípio da Máxima Multiplicidade: foi desenvolvida pelo físico alemão Friedrich Herman Hund, mostra que, sempre que há maior número de electrões com spin paralelos num orbital incompleto, a energia será menor e o átomo mais estáveis. Os electrões que compartilham uma orbital deverão ter spins opostos.

O princípio de Aufbau contém uma série de instruções relacionadas com a localização dos electrões nos orbitais de um átomo. O modelo, desenvolvido pelo físico Niels Bhor, recebeu o nome de Aufbau (do alemão Aufbauprinzip: início da construção). Também popularmente conhecida sob o nome de regra de Madelung.

Os orbitais são preenchidos respeitando a regra de Hund: começa com a orbital de menor energia. Primeira preencha o orbital 1s (até um máximo de dois electrões), seguidamente preenche-se o orbital 2s (também com dois electrões máximos); o subnível 2p. De acordo com a sua posição tridimensional, 2px, 2py e 2pz tem três orbitais. Assim, os três orbitais 2p podem encher até seis electrões, dois em cada um. Novamente, de acordo com a regra de Hund, devem ter todos pelo menos um electrão antes que cada um se complete com dois e, assim por diante:

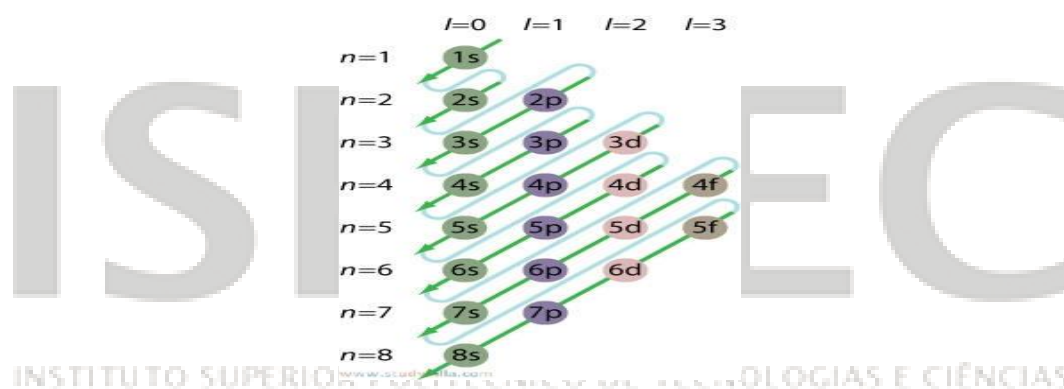


O Princípio de Exclusão de Pauli adverte-nos que qualquer electrão, num átomo, não pode ter os mesmos valores para os 4 números quânticos como uma descrição de seu estado de energia.

Para completar o orbital correctamente, siga a direcção da seta como se mostra no gráfico. O primeiro 1s e 2s, depois sobe para p, e baixa 3s, 3p e baixa a 4s. Neste ponto, o próximo nível de energia mais baixo não é 4p, mas sobe para 3d então até 4p e 5s. E assim, por diante.

1s, 2s, 2 p, 3s, 3P, 4s, 3d, 4 p, 5s, 4 d, 5P, 6s, 4f, 5 d, 6 p, 7s, 5f, 6 d, 7 p...

Este princípio também é conhecido como a regra DIAGONAL, para se expressar de uma forma esquemática, sendo útil para realizar o preenchimento dos orbitais por níveis, subníveis e orbitais



**O início da construção da regra de Aufbau. (Fonte: Macedo G. Química aplicado para a engenharia.)  
Universidade Católica El Salvador. <http://pt.slideshare.net/cmdantasbanmeros-Quanticos-12285848>**

## 1.4 Efeito fotoeléctrico

O efeito fotoeléctrico ocorre quando um feixe de energia incide sobre a superfície de um metal e remove um electrão da sua estrutura, que se desprende do metal por ter absorvido parte da energia do feixe incidente, o que lhe permite mover-se fora do metal.

"O efeito fotoeléctrico foi interpretado por Einstein em 1905: "quando a luz incide sobre a placa de metal, emite uma chuva de electrões... a luz não é um fluxo contínuo de energia, mas é composto de partículas individuais ou pacotes de energia chamados fotões."<sup>1</sup>

A radiação incidente está formada de fotões, cada um com uma energia que pode ser calculada de acordo com o seu comprimento de onda ( $\lambda$ ).

$$E = hf; \quad h = \frac{c}{\lambda};$$

**Onde:**

E = energia do fotão incidente; f = frequência h = constante de Planck ;

c = velocidade da luz;  $\lambda$  = comprimento de onda

O fotão, ao chocar contra os átomos de metal, consome a sua energia da seguinte forma:

Para que o fotão possa desprender os electrões da superfície do metal, é necessário:

- ✓ Uma energia chamado trabalho de extracção ou remoção ( $E_r$ ), uma vez que é usado para remover o electrão do metal e é característica de cada metal (energia de ionização).
- ✓ Transmissão de energia cinética para os electrões libertados ( $E_c$ ) para que possam mover-se fora do metal.

Portanto, para que o processo tenha lugar, a energia da radiação incidente (fotões) deve ter uma energia igual ou superior ao trabalho de remoção do metal mais a energia para transmitir ao electrão que precisa de energia cinética para sair do metal. Ou seja:

$$E_f = E_{rM} + E_c;$$

Onde:  $E_f$  = energia da radiação incidente;  $E_{rM}$  = Energia de remoção do metal;  $E_c$  = Energia cinética máxima para que os electrões possam sair do metal.

## 1.5 Tabela periódica

Na tabela periódica os elementos químicos estão dispostos em ordem crescente de números atômicos em 7 linhas horizontais, denominadas períodos, e em 18 colunas verticais, denominados grupos ou famílias.

Os elementos de um mesmo período têm igual número de níveis eletrônicos (a ordem do período corresponde ao número de camadas que os elementos têm). Os elementos de um mesmo grupo têm a mesma configuração eletrônica na sua camada de valência (pelo que, todos os elementos de um grupo possuem propriedades químicas semelhantes).

As famílias são constituídas pelos elementos representativos, sendo que todos esses elementos apresentam o seu elétron mais energético situado nos subníveis **s** ou **p**. Nas famílias IA a VIII A, o número da família indica a quantidade de elétrons existentes na camada de valência.

Por exemplo:

Grupo VIA

O, Z= 8:  $1s^2 2s^2 2p^2 2p^2$ , portanto: na camada de valência tem: = 6 elétrons

Grupo IA

Na, Z= 11:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ , portanto: na camada de valência tem: = 1 elétrons

Grupo VII A

Cl, Z= 17:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 3p^2 3p^1$ : na camada de valência tem: = 7 elétrons

Grupo VIIIA

Ne, Z= 10:  $1s^2 2s^2 2p^2 2p^2 2p^2$ : na camada de valência: tem: = 8 elétrons

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

Além de serem indicados por números e letras, essas famílias recebem também nomes característicos

Família ou Grupo	Nome	Configuração da última camada
I A ou 1	Alcalinos	$ns^1$
II A ou 2	Alcalinos térreos	$ns^2$
III A ou 13	Família do Boro	$ns^2 np^1$
IV A ou 14	Família do carbono	$ns^2 np^2$
V A ou 15	Família do Nitrógeno	$ns^2 np^3$
VIA ou 6	Calcogénios	$ns^2 np^4$
VII ou 17	Halogénios	$ns^2 np^5$
Zero ou 18	Gases nobres	$ns^2 np^6$

### 1.5.1 Classificação dos elementos na tabela periódica

A classificação dos elementos nas diferentes Tabelas Periódicas conhecidas geralmente concordam em: elementos representativos, metais de transição, lantanídeos e actinídeos.

Elementos representativos: localizados nos grupos 1, 2, 13, 14, 15, 16, 17, 18. O número de electrões da última camada dos seus átomos corresponde com o segundo dígito do número que designa cada família.

Então, a última camada dos átomos dos elementos da família 15 possui 5 electrões, da família 14, 4 electrões, e assim sucessivamente.

#### Classificação dos Elementos

Actualmente, os elementos químicos classificam-se da seguinte forma:

Metais, propriedades: Apresentam alta condutividade eléctrica e térmica; em geral são densos, tem brilho (propriedade de reflectir a luz); altos pontos de fusão e ebulição; ductilidade (é a propriedade de se converterem em fios), maleabilidade (é a propriedade de se transformarem em lâminas); tem facilidades para perder electrão dando origem a iões positivos (catiões); têm poucos electrões na última camada (menos de 4); todos os metais são sólidos a temperatura ambiente de 25° e 1 atm, excepto o mercúrio (Hg).

Não-Metais, propriedades: Apresentam propriedades opostas às dos metais: não são bons conductores de calor e electricidade, não são maleáveis e dúcteis e não possuem brilho (em geral, são opacos).

Têm facilidades em ganhar electrão, transformando-se em iões negativos (aniões). Apresentam, mais de 4 electrões na última camada. São os mais abundantes na natureza.

### 1.5.2 Propriedades periódicas

Em geral, a maioria das propriedades dos elementos químicos variam periodicamente com o aumento de seus números atómicos (segundo se avança nos períodos e grupos). Estas propriedades são:

Raio atómico: de um elemento é a metade da distância internuclear mínima que dois átomos desse elemento podem apresentar sem estarem ligados quimicamente.

Num grupo da tabela periódica segundo aumenta o número atómico (de cima para baixo) aumenta a quantidade de níveis de energia, e o raio atómico aumenta.

Num período (da esquerda à direita), o número de níveis não varia, com o aumento da carga nuclear, mas aumenta a atracção do núcleo aos electrões mais externos portanto, o tamanho do átomo é reduzido. O mesmo sucede com os iões.

Potencial ou energia de ionização: é a energia necessária para "arrancar" um electrão de um átomo isolado no estado gasoso. Quanto maior o tamanho do átomo, menor é a energia de ionização.

Num grupo, ao aumentar o raio atómico o tamanho do átomo diminui a atracção do núcleo dos electrões do último nível. Num período, diminuindo o raio atómico a energia de ionização geralmente aumenta.

Electroafinidade ou afinidade electrónica: é a energia libertada quando um electrão é adicionado a um átomo neutro no estado gasoso, formando o ião gasoso negativo (anião) e mede a "força" com que o átomo atrai esse electrão adicional. Num grupo ou num período, quanto menor é o raio, maior será a afinidade electrónica.

Electronegatividade: é a força de atracção exercida sobre os electrões de uma ligação. A electronegatividade é maior quanto menor é o raio atómico.

Carácter não metálico. É a característica de elementos que tendem a ganhar electrões, quanto menor é o raio, maior é a afinidade electrónica e grande o potencial de ionização. Neste caso haverá uma predominância de carácter não metálico.

Ao contrario, quanto maior é o raio menor é afinidade electrónica sendo a característica dos elementos que tendem a perder electrões. Neste caso haverá uma predominância de carácter metálico.

Metais: Baixa afinidade electrónica e baixo potencial de ionização, é mais fácil arrancar do que adicionar electrões, tendem a formar catião.

Não metais: Alta afinidade electrónica e alto potencial de ionização, é mais fácil adicionar do que arrancar electrões, tendem a formar anião.



### Exercícios resolvidos

1. Localize elementos que cumpram com as seguintes condições

- (a) mais electronegativo que S e menor que o F. Cl
- (b) maior carácter metálico que Ca e inferior a Rb. K
- (c) raio atómico menor do que o P e maior que O. S
- (d) maior carácter redutor que o Si e menor que o B. Ga
- (e) menor carácter metálico que o Na e maior que o Be. Li

2. Faça a distribuição electrónica dos seguintes elementos, aplicando a regra de Hund e o princípio de exclusão de Pauli.

- a) Mg, b) O; c) P; d) Cl; e) K

#### Respostas

- a)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
- b)  $1s^2 2s^2 2p^2 2p^1 2p^1$
- c)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1 3p^1 3p^1$
- d)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 3p^2 3p^1$
- e)  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3s^1$

3. Consulte a tabela periódica para colocar os elementos a seguir em ordem crescente ou decrescente da propriedade periódica indicada:

- (a) Diminuição da energia de ionização: Zr, Co, C
- (b) aumento da electronegatividade: Zn, Fr, ou
- (c) diminuição da afinidade electrónica: K, como, V
- (d) aumento do carácter metálico: Br, Cu, Cs
- (e) diminuição do raio atómico: Mn, Rb, B

#### Respostas

- a) C; Co; Zr    b) Fr; Zn; O    c) As; V; K    d) Br, Cu, Cs    e) Rb; Mn; B

## 1.6 Ligações químicas

As ligações químicas são as forças de atracção que unem os átomos. Quando os átomos estão ligados uns aos outros, podem perder, ganhar ou partilhar electrões, e isto determina o tipo de ligação. Os electrões de valência determinam como é que irão juntar-se um átomo com outro e as características da ligação.

### 1.6.1 A regra do octeto

No último grupo da Tabela Periódica VIII (18), que é a família dos gases nobres, os elementos são os mais estáveis da tabela. Isto é devido a que possuem 8 electrões na sua camada mais externa, excepto o hélio que tem apenas 2, mas que também é considerado como uma configuração estável, desde que complete o seu nível de energia, que neste caso é 2 electrões, porque é o primeiro e último nível de energia.

A **regra do octeto** descreve o comportamento dos elementos químicos combinar-se uns com os outros, onde eles podem ganhar, perder ou partilhar electrões para completar o último nível 8, quando ocorre uma ligação entre átomos para formar novas substâncias.

No caso único do H e o He que têm apenas um nível de energia, o máximo número de electrão para completar é 2; neste caso refere-se ao "**Dueto**"

A configuração dos elementos quando completarem o octeto acaba por ser semelhante aos gases nobres.

Exemplo:

He tem  $Z=2$ , sua configuração é:  $1s^2$ . Tem completo o seu primeiro e último nível de energia (o elemento H tende a assemelhar-se, a completar o seu "dueto" ganhou 1 electrão e atingindo a mesma configuração electrónica dele; os elementos Li e Be perdem 1 e 2 electrões respectivamente e também atingem a configuração do He).

Ne  $Z=10$ :  $1s^2, 2s^2, 2p^6$  tem completo o seu segundo e último nível de energia. (Os elementos do período 2, que têm orbitais p, ou seja, B, C, N, O, y F, tendem a alcançar esta configuração perdendo ou ganhando electrões).

ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

### 1.6.2 Ligação iónica

Característica que o define: transferência de electrão entre átomos muito electropositivos e átomos muito electronegativos.

- ✓ Ocorre entre átomos metálicos e átomos não-metálicos
- ✓ Não formam moléculas, só um único agregado constituído por partículas carregadas electricamente (iões), o seja aniões positivos ou catiões e iões negativos ou aniões.

Os compostos iónicos têm as seguintes características:

- ✓ São sólidos à temperatura ambiente.
- ✓ São bons conductores de calor e electricidade.
- ✓ Eles têm elevados pontos de fusão e ebulição
- ✓ São solúveis em solventes polares como a água

### 1.6.3 Ligações covalentes

Características: compartilhar electrões entre os átomos de electronegatividades semelhantes ou aproximada.

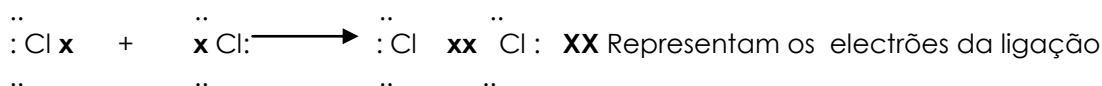
- Quando os átomos não ganham ou perdem electrão, são compartilhados.
- Consiste de elementos não-metálicos. 2 ou 3 podem ser não-metais.
- Podem estar unidos por ligações simples, duplas ou triplas, dependendo das características dos átomos dos elementos que estão ligados.

Exemplo nº 1 Ligação covalente simples entre dois átomos de flúor (F, não metal) para formar uma molécula diatómica.

F: grupo VII: não-metal: tendência a ganhar electrões

Configuração electrónica de cloro:  $1s^2, 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Cada átomo de cloro tem 7 electrões de valência, necessitam ganhar 1 para completar o seu octeto, se cada um compartilhar com o outro o electrão que tem desemparelhado, ambos completarão o octeto e formarão uma ligação covalente simples (partilha de um par de electrões)



Exemplo nº 2 Ligação covalente dupla entre dois átomos de oxigénio (O, não metal) para formar uma molécula diatómica.

O: do grupo VI: não-metal: tendência a ganhar electrões.

Configuração electrónica do oxigénio:  $1s^2, 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$  ( $3s^2 3p^2 3p^1 3p^1$ )

Como se observa, cada átomo possui 6 electrões de valência, mas eles estão organizados em pares (orbitais completos) e dois orbitais incompletos que são aqueles que precisam ser preenchidos; mas pela geometria do átomo no seu estado fundamental, seria muito difícil estabelecer-se esse partilha de electrões. É por isso que o modelo de ligação explica que ambos os átomos passam por uma transformação denominada hibridização, para resolver a dupla partilha de electrões: dupla ligação covalente, que pode ser representado pela estrutura de Lewis como:

$\begin{array}{c} \cdot\cdot & \cdot\cdot \\ \text{Estrutura de Lewis:} & :O::O: \\ \cdot\cdot & \cdot\cdot \end{array}$

Cada átomo tem 8 electrões, 4 são a partilhar, pertencentes a ambos os átomos depois de formada a molécula diatómica.

Exemplo nº 3 Ligação covalente tripla entre dois átomos de nitrogénio (N, não-metal) para formar uma molécula diatómica.

N: do grupo VII: não-metal: tendência a ganhar electrões

Configuração electrónica do nitrogénio:  $1s^2, 2s^2 2p^3 3p^1$

Como se pode ver, cada átomo tem 5 electrões na valência, (1orbital s completo) e três orbitais incompletos que são aqueles que precisam para completar o nível e o octeto, podendo partilhar, 3 electrões, mas como se viu com o oxigénio, pela geometria do átomo no seu estado fundamental seria muito difícil ocorrer essa tripla ligação; ambos os átomos também sugeriram uma transformação (hibridação) para finalmente resolver a tripla ligação covalente que pode ser representado pela estrutura de Lewis seguinte:

$\begin{array}{c} \cdot\cdot & \cdot\cdot \\ \text{: N: N:} & \text{(falta um par de electrões na ligação)} \\ \cdot\cdot & \cdot\cdot \end{array}$

Ligação covalente nas moléculas poliatómicas.

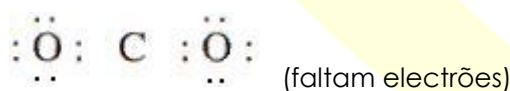
Quando a ligação covalente se estabelece entre mais de dois átomos formam-se moléculas, poliatómicas. Os modelos estabelecidos para descrever tais moléculas e suas ligações, têm as seguintes regras:

- ✓ Identificar um átomo central e a partir dele estabelecer a ligação com o resto.
- ✓ Não tomar o oxigénio nem o hidrogénio para átomos centrais.
- ✓ Em compostos contendo oxigénio e hidrogénio, na mesma molécula, o hidrogénio nunca é ligado ao átomo central, mas sim o oxigénio.
- ✓ O carbono tem preferência para o átomo central.
- ✓ O hidrogénio não satisfaz a regra do octeto, mais sim do dueto.
- ✓ Os átomos devem ser colocados de modo que a molécula seja tão simétrica quanto possível.

Exemplo nº 4 Ligações nas moléculas poliatómicas: CO<sub>2</sub> (dióxido de carbono)

Carbono é o átomo central.

C, Z= 6 e O, Z= 8.,



Nesta proposta de estrutura, os dois oxigénios completam o seu octeto, mas não o carbono. Portanto outro par de electrões de cada oxigénio é colocado na ligação c-o para completar o octeto de carbono e então serão duas ligações duplas.



A estrutura é formada por 2 duplas ligações covalentes que satisfazem os octetos dos três átomos.

### 1.6.3.1 Polaridade da ligação covalente

A electronegatividade é a propriedade de expressar a medida da tendência de um átomo atrair os electrões da ligação para o seu núcleo numa ligação covalente.

Quando estiver numa ligação covalente, a diferença de electronegatividade entre os átomos da ligação, é diferente. Os electrões compartilhados são mais atraídos para o núcleo do átomo mais electronegativo, criando uma zona de carga negativa parcial sobre este átomo e uma zona de carga positiva parcial sobre o outro átomo menos electronegativo.

A natureza parcial da carga é representada pela letra grega  $\delta$ . Um exemplo é o cloreto de hidrogénio (HCl); o H é menos electronegativo que o Cl.

Exemplo:  $\text{H}\overset{\delta+}{\text{Cl}}\overset{\delta-}{} \quad \text{H}-\text{Cl}$

Para determinar o carácter polar da ligação são realizados cálculos das diferenças de electronegatividades e elaborada uma tabela com esses dados para facilitar o trabalho:

Diferença de electronegatividade	Tipos de ligações
Maior ou igual a 0,4	Covalente polar
De 0,5 a 1,7	Covalente não polar
Superior a 1,7	Iónico

Desta forma é possível determinar o carácter polar das ligações covalentes, conhecendo os valores das electronegatividades dos elementos. Segue-se uma tabela com esses dados:

<b>H</b> 2.1						
<b>Li</b> 0.97	<b>Be</b> 1.5	<b>B</b> 2.0	<b>C</b> 2.5	<b>N</b> 3.1	<b>O</b> 3.5	<b>F</b> 4.0
<b>Na</b> 1.0	<b>Mg</b> 1.2	<b>Al</b> 1.5	<b>Si</b> 1.7	<b>P</b> 2.1	<b>S</b> 2.4	<b>Cl</b> 2.8
<b>K</b> 0.9	<b>Ca</b> 1.0	<b>Ga</b> 1.8	<b>Ge</b> 2.0	<b>As</b> 2.2	<b>Se</b> 2.5	<b>Br</b> 2.7
<b>Rb</b> 0.89	<b>Sr</b> 1.0	<b>In</b> 1.5	<b>Sn</b> 1.72	<b>Sb</b> 1.82	<b>Te</b> 2.0	<b>I</b> 2.2
<b>Cs</b> 0.86	<b>Ba</b> 0.97	<b>Tl</b> 1.4	<b>Pb</b> 1.5	<b>Bi</b> 1.7	<b>Po</b> 1.8	<b>At</b> 1.9

**Tabela de electronegatividades**

Quando a ligação é entre dois átomos iguais, ou seja, do mesmo elemento, a electronegatividade é a mesma, com a mesma electronegatividade com que estão ligados, a diferença é zero, e a ligação é covalente apolar, desde que os electrões sejam atraídos igualmente por ambos os átomos, a molécula é neutra:

Exemplo:  $F_2$  F-F

Na tabela de electronegatividades note-se que o elemento mais electronegativo é o flúor que tem atribuído o valor 4, o oxigénio é o segundo, seguido do cloro e nitrogénio. Observe que os gases nobres não são incluídos por serem menos reactivos e mais estáveis, elementos da Tabela Periódica.

Sabendo o valor da electronegatividade dos átomos envolvidos numa ligação, determina-se a diferença e pode determinar-se o carácter polar, não polar e iónico.

Quase todos os compostos contendo ligações covalentes polares; caem entre os extremos do covalente não-polar e do iónico puro.

### 1.6.4 Ligação metálica

Os átomos dos metais são muito electropositivos e a sua tendência é perder electrões para alcançar o octeto ou dueto no caso do Li e Be (uma configuração de gás nobre). Neste caso, os metais perdem os seus electrões de valência e formarão uma nuvem de electrões entre os núcleos positivos.

A nuvem electrónica que mantém a atracção sobre os catiões e que os mantém unidos como um único agregado (rede metálica) explica a razão de que quase todos os metais sejam sólidos a temperatura ambiente (excepto Hg) e tenham elevados pontos de fusão e ebulição.

A configuração ordenada da rede, onde as ligações entre átomos não estão dirigidas, permite que os planos dos átomos possam deslocar-se uns sobre os outros o que explica que os metais sejam dúcteis e maleáveis (não frágeis).

#### Exercícios resolvidos

1. Explique como se forma a ligação iónica entre o Sódio (Na) e o Flúor (F) na constituição de fluoreto de sódio (NaF).

Na: do Grupo IA: Metal alcalino: tendência a perder electrões

F: do Grupo VI A: não metal: tendência a ganhar electrões

Configuração electrónica Na:  $1s^2, 2s^2 2p^6 3s^1$

Se o sódio perder o electrão de valência, o seu último nível seria 2, e então teria 8 electrões de Valência, formando um catião (ião positivo):  $\text{Na}^{1+}$

Configuração electrónica de flúor:  $1s^2, 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 3p^1$

Flúor com 7 electrões de valência, só precisa de um, para completar o seu octeto, se ganha o electrão que perdeu o Na forma-se um anião (ião negativo):  $\text{F}^{1-}$

Uma forma de representar o composto formado é colocando pontos ou **x** em vez de electrões (um estilo que se conhece com o nome de "estrutura de Lewis")

#### Respostas

..  
 $[\text{Na}]^{1+} \quad [:\text{F}:]^{1-}$  A característica da ligação é a transferência de electrões

..

ISPT-EC  
 INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

2. Explicar como faz a ligação entre o cálcio (Ca) e o cloro (Cl) na formação de  $\text{CaCl}_2$ . Que tipo de ligação é formado e qual é a sua propriedade?

### **Respostas**

Ca: Grupos IA: Metal alcalino-térreo: tendência para perder electrões

Cl: Grupo VII: não-metal: tendência a ganhar electrões

Configuração electrónica de Ca:  $1s^2, 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

Se o cálcio perde os dois electrões de valência, o seu último nível seria o 3, e então teria 8 electrões de valência, formando um catião (ião positivo):  $\text{Ca}^{2+}$

Configuração electrónica do cloro:  $1s^2, 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3p^2 3p^1$

Se cada cloro com 7 electrões de valência, ganhar um electrão dos dois que perde o cálcio, cada um pode completar o seu octeto, e formar-se dois aniões (ões negativos):  $2 \text{Cl}^{-}$

$\cdot\cdot$   
 $[\text{Mg}]^{2+} \quad 2 [\text{:Cl:}]^{-}$  A característica da ligação é a transferência de electrões  
 $\cdot\cdot$

4. Classifique os seguintes compostos, em iónicos e covalentes.

a)  $\text{H}_2$ ; b)  $\text{MgCl}_2$ ; c) HF; d)  $\text{O}_2$ ; e)  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; f)  $\text{Si}_2$ ; g)  $\text{S}_8$

### **Respostas**

a) Covalente; b) Iónico; c) Iónico; d) Covalente e) Iónico f) covalente g) Covalente

5. Escolha a alternativa correcta. Um sólido metálico é formado por:

- a) Iões positivos e negativos
- b) Os catiões e uma nuvem de electrões
- c) Iões negativos e uma nuvem de electrões
- d) Átomos neutros e compartilhamento de electrões

Resposta: alínea a)

6- Das substâncias seguintes, quais consideram-se solúveis em água e quais são conductores de electricidade:

a)  $\text{KCl}_{(s)}$  b)  $\text{Br}_4\text{C}_{(l)}$  c)  $\text{Cu}_{(s)}$  d)  $\text{HCl}_{(g)(ac)}$  e)  $\text{Ag}_{(s)}$  f)  $\text{NaCl}_{(ac)}$  g)  $\text{H}_2\text{SO}_{4(ac)}$  h)  $\text{Pt}_{(s)}$

Resposta:

Solúveis em água: a)  $\text{KCl}_{(s)}$  d)  $\text{HCl}_{(g)}$  f)  $\text{NaCl}_{(ac)}$  g)  $\text{H}_2\text{SO}_{4(ac)}$



Condutores de electricidade: c)  $\text{Cu}_{(s)}$  e)  $\text{Ag}_{(s)}$  f)  $\text{NaCl}_{(ac)}$  h)  $\text{Pt}_{(s)}$

### Exercícios propostos

1. Complete a seguinte tabela

Especie química	Nº de Protões	Nº de Neutrões	Nº de Electrões	Massa Atómica	Nº atómico
Li	3			6	
$\text{Al}^{3+}$		13			13
$\text{Br}_2$		44			35
$\text{S}^{2-}$		16		32	
Ag				107	47

2. Encontre os átomos que possuem 6 neutrões dos exemplos a seguir;

${}^6\text{C}^{10}$ ;  ${}^6\text{C}^{12}$ ;  ${}^5\text{B}^{11}$ ;  ${}^6\text{C}^{12}$ ;  ${}^5\text{B}^{10}$ ;  ${}^5\text{B}^{11}$ ;  ${}^5\text{B}^9$ ;  ${}^6\text{C}^{14}$

3. Dos seguintes enunciados, identifique com **V** os verdadeiros e com **F**, os falsos.

- a) Os diferentes números atómicos correspondem diferentes elementos. \_\_\_\_\_
- b) Números atómicos iguais correspondem isótopos do mesmo elemento. \_\_\_\_\_
- c) Diferentes números de electrões correspondem a diferentes núcleos. \_\_\_\_\_
- d) Sempre a diferentes números de massa correspondem diferentes elementos. \_\_\_\_\_
- e) Diferentes números atómicos correspondem a diferentes núcleos. \_\_\_\_\_

4. Calcule a massa atómica média com 4 algarismos significativos, do chumbo, supondo que a abundância de isótopos no elemento natural é como aparece a seguir:  ${}^{64}\text{Zn}$  48,63%;  ${}^{66}\text{Zn}$  27,90%;  ${}^{67}\text{Zn}$  4,10%;  ${}^{68}\text{Zn}$  10%;  ${}^{69}\text{Zn}$  18,75%;  ${}^{70}\text{Zn}$  62%0:

**Resposta:** Massa atómica relativa do Zn= 63,5857

12. Calcular a massa atómica de lítio, sabendo que é constituído por uma mistura de  ${}^6\text{Li}$  e  ${}^7\text{Li}$ ; que a sua abundância de 7.5% e 92, 40%, as massas isotópicas são 6, 0167 e 7, 0179, respectivamente.

**Resposta:** Massa atómica média de 6.94 Li u

6. Calcule a energia e a frequência dos fotões de comprimento de ondas  $3,00 \times 10^{-4} \text{ m}$

**Resposta:**  $F = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ;  $E_f = 6,62 \cdot 10^{-30} \text{ J}$

7. A luz azul tem frequência  $7,5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ . Calcule:

a) O comprimento de onda da radiação.

b) A energia de um fóton de luz azul.

**Resposta:** a)  $\lambda = 4 \cdot 10^{-7} \text{ m}$ ; b)  $E_f = 4,9 \cdot 10^{-21} \text{ J}$

8. Ilumina-se uma superfície de metal com uma radiação de comprimento de onda 512 nm, conseguindo remover os electrões do metal; Se o máximo da energia cinética dos fotoelectrões é  $8,65 \cdot 10^{-20} \text{ J}$ . Qual é o poder de remoção do metal?

**Resposta:**  $E_{rM} = 3,02 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

9. Faça a distribuição electrónica, aplicando o Princípio de Exclusão de Pauli e a Regra de Hund, dos elementos a seguir:

a) Zn; b) Ne; c) Ca; d) P e) Se

10. Qual o grupo e o período onde estão localizados os elementos cuja distribuição electrónica do último nível estão representados a seguir:

a)  $2s^2$  b)  $3s^2 3p^6$  c)  $3s^1$  d)  $3s^2 3p^4$

**Respostas:** a) Be; b) Ne c) Na; d) Si

11. Escolha a alternativa correcta: Na combinação dos átomos de Rubídio (metal alcalino) com átomos de cloro (não-metal, do grupo de halogénios), a ligação mais provável entre eles é:

a) Covalente; b) Ponte de hidrogénio; c) Iónica; d) Metálica.

**Resposta:** c)

12. Dos sólidos seguintes, escolha os que considere que podem ser condutores de electricidade:

- a)  $K_{(s)}$  b)  $Na_{(s)}$  c)  $MgF_{2(s)}$  d)  $CaCl_{2(s)}$  e)  $LiO_{(s)}$

**Respostas:** a) ; b)

ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## CAPÍTULO II - SÍMBOLOS E FÓRMULAS QUÍMICAS

### 2.1 Significado das fórmulas químicas

As substâncias são formadas por unidades estruturais (átomos, iões ou moléculas) que podem ligar-se umas às outras, resultando numa diversidade de compostos químicos com propriedades químicas e físicas diferentes entre si. Estas unidades estruturais são formadas pelos átomos dos elementos químicos no estado natural.

Os elementos químicos são representados por meio de símbolos químicos, que consistem numa letra maiúscula ou um conjunto de duas ou três letras (sendo a primeira maiúscula e a(s) outra(s) minúscula(s)).

Exs: Oxigénio –  $O$ ; Iodo –  $I$ ; Ferro –  $Fe$ ; Sódio –  $Na$ ; Prata –  $Ag$ ; Ouro –  $Au$ ; Ununúnio –  $Uuu$ ; Ununóctio –  $Uuo$ .

As substâncias que ocorrem naturalmente ou que são sintetizadas pelo homem podem ser elementares ou compostas.

As substâncias elementares são aquelas cujas unidades estruturais são formadas por átomos de um mesmo elemento.

Exs: Diamante –  $C$ ; Ozono –  $O_3$ ; Ferro –  $Fe$ .

As substâncias compostas são aquelas cujas unidades estruturais são formadas por átomos de elementos diferentes.

Exs: Dióxido de carbono (gás carbónico) –  $CO_2$ ; Água –  $H_2O$ ; Carbonato de cálcio (calcário) –  $CaCO_3$ .

Para representar uma substância utiliza-se a sua fórmula química (ou fórmula bruta); esta fórmula é uma simbologia em que se indicam os elementos que constituem a substância, bem como a quantidade relativa de átomos de cada elemento presente nas suas unidades estruturais. A fórmula química representa a composição da menor quantidade de uma substância.

Assim, torna-se necessário saber diferenciar designações como as seguintes:

$3O$ : representa três unidades estruturais, cada uma com um único átomo de oxigénio.

$O_3$ : representa uma unidade estrutural constituída por três átomos de oxigénio.

As substâncias podem ser classificadas de modos diversos, como os que se seguem:

**Substâncias metálicas:** aquelas cujas unidades estruturais são átomos unidos por ligação metálica em agregados cristalinos – os metais.

Exs:  $Cu$  – metal cobre;  $Au$  – metal ouro;  $V$  – metal vanádio;  $Cr$  – metal crómio.

**Substâncias moleculares:** aquelas cujas unidades estruturais são moléculas (monoatômicas, diatômicas, triatômicas, etc.)

Exs:  $3\text{Xe}$  (gás xenônio): três moléculas de xenônio, cada uma delas formada por um único átomo de xenônio.

$\text{Cl}_2$  (gás cloro): uma molécula de cloro formada por dois átomos de cloro.

$2\text{O}_3$  (gás ozônio): duas moléculas de ozônio, cada uma delas formada por três átomos de oxigénio.

**Substâncias covalentes:** aquelas cujas unidades estruturais são átomos unidos por ligações covalentes em agregados cristalinos.

Exs:  $\text{C}$  – carbono;  $\text{C}$  – grafite (uma forma alotrópica do carbono);  $\text{Si}$  – silício.

**Compostos moleculares:** substâncias cujas unidades estruturais são moléculas.

Exs:  $\text{H}_2\text{SO}_4$  (ácido sulfúrico): uma molécula de ácido sulfúrico formada por dois átomos de hidrogénio, um átomo de enxofre e quatro átomos de oxigénio.

$3\text{H}_2\text{O}$  (água): três moléculas de água, cada uma delas constituída por dois átomos de hidrogénio e um átomo de oxigénio.

**Compostos covalentes:** substâncias cujas unidades estruturais são átomos de diferentes elementos químicos unidos por ligações covalentes e repetidos organizadamente numa estrutura (rede) cristalina.

Exs:  $\text{SiO}_2$  (óxido de silício – quartzo): os cristais de quartzo apresentam uma repetição ordenada dos átomos de oxigénio e silício, na proporção de um átomo de silício para dois átomos de oxigénio.

**Compostos iónicos:** substâncias cujas unidades estruturais são catiões (iões positivos) e aniões (iões negativos), ordenados numa rede cristalina, de tal modo que a carga eléctrica do composto seja nula.

Exs:  $\text{KCl}$  (cloreto de potássio) – formado por iões potássio ( $\text{K}^+$ ) e iões cloreto ( $\text{Cl}^-$ ), na proporção de um ião potássio para um ião cloreto (escreve-se 1:1)

$\text{Na}_2\text{SO}_4$  (sulfato de sódio) – formado por iões sódio ( $\text{Na}^+$ ) e iões sulfato ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) na proporção de 2:1.

Muitas vezes, os agregados cristalinos contêm moléculas de água – a designada água de cristalização. São substâncias hidratadas. Assim, é adequado indicar na fórmula química a proporção entre as moléculas de água e a menor porção da substância.

Exs:  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  (sulfato de cobre II penta-hidratado) – por cada ião cobre II ( $\text{Cu}^{2+}$ ) e por cada ião sulfato ( $\text{SO}_4^{2-}$ ) existem cinco moléculas de água.

## 2.2 Fórmulas químicas para as substâncias

Na simbologia química, quando se pretende informação sobre o modo como estão dispostas as unidades estruturais que formam uma substância e/ou a sequência em que se encontram os átomos nessas unidades estruturais são utilizadas outras fórmulas mais complexas do que a fórmula bruta. Assim, tem-se:

**Fórmula molecular:** para substâncias moleculares, mostra o número de átomos existentes na molécula.

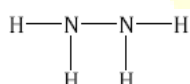
Ex:  $\text{C}_2\text{H}_6$  (etano)

**Fórmula empírica:** indica somente a proporção de combinação, em números inteiros, dos elementos que constituem a substância molecular, ou seja, é uma simplificação da fórmula molecular.

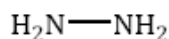
Ex:  $\text{CH}_3$  –esta fórmula empírica do etano indica que na substância etano o elemento carbono combina-se com o elemento hidrogénio na proporção de um átomo de carbono para três átomos de hidrogénio.

No caso do etano, a fórmula molecular é diferente da empírica; há casos, porém, em que as fórmulas molecular e empírica coincidem:  $\text{NH}_3$  é a fórmula molecular e simultaneamente empírica do amoníaco.

**Fórmula de estrutura ou estrutural:** é com este tipo de fórmula que se representa a ordem como os diferentes átomos estão ligados entre si numa substância. No caso da hidrazina será:

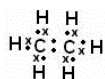


**Fórmula racional:** é a forma simplificada da fórmula estrutural; é bastante utilizada para os compostos orgânicos quando a fórmula estrutural é longa. Neste tipo de simbologia, os átomos são indicados e organizados em grupos, porém, é respeitada a electroneutralidade do composto. Para a hidrazina será:



**Fórmula de Lewis (ou fórmula electrónica):** nesse tipo de fórmula, associado aos símbolos químicos dos elementos que formam as unidades estruturais, são indicados os electrões de valência de cada átomo por cruces ou pontos.

Para substâncias moleculares: (etano)



Para substâncias iónicas: (sulfureto de sódio)



**Fórmula iónica:** é um tipo de fórmula aplicável aos compostos iónicos. Nela, são indicados os catiões e os aniões que formam a substância nas respectivas proporções de modo que a carga eléctrica total seja nula (pois esta fórmula deve respeitar a electroneutralidade do composto).

Ex:  $(\text{Na}^+)_2\text{CO}_3^{2-}$ : esta fórmula mostra que, nesse composto, a proporção de combinação é de dois iões sódio para um ião carbonato, ou seja, 2:1.

**Exercício:** Diga qual é a proporção de combinação entre os iões na fórmula seguinte:  $(\text{NH}_4^+)_3\text{PO}_4^{3-}$

## 2.3 Regras para escrita de fórmulas químicas

Quando se conhece o símbolo químico dos iões que constituem um dado composto de fórmula genérica  $\text{A}_x\text{B}_y$ , é fácil escrever a sua fórmula iónica e a sua fórmula química; aplica-se o esquema seguinte:

**Fórmula iónica:**  $(\text{A}^{y+})_x(\text{B}^{x-})_y$ ; **Fórmula química:**  $\text{A}_x\text{B}_y$

Isto é, o valor numérico da carga do catião passa como sub-índice do anião; o valor numérico da carga do anião passa como sub-índice do catião.

### Exemplos:

Sulfato de Amônio: anião sulfato  $\text{SO}_4^{2-}$ , catião amônio  $\text{NH}_4^+$

Fórmula iónica:  $(\text{NH}_4^+)_2(\text{SO}_4^{2-})$ ; Fórmula química:  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$

Óxido de ferro (II): anião óxido  $\text{O}^{2-}$ , catião ferro (II)  $\text{Fe}^{2+}$

Fórmula iónica:  $(\text{Fe}^{2+})(\text{O}^{2-})$ ; Fórmula química:  $\text{FeO}$

Para que as fórmulas químicas das substâncias fossem escritas do mesmo modo a IUPAC (União Internacional da Química Pura e Aplicada) estipulou normas que devem ser obedecidas quanto a escrita dessas fórmulas. Pelo que:

1 – Em qualquer fórmula química representam-se em primeiro lugar os elementos metálicos e, de seguida, os elementos não metálicos, dos mais eletropositivos para os mais eletronegativos.

**OBS.:** Os elementos mais eletropositivos são os que se situam à esquerda, na tabela periódica, e são tanto mais eletropositivos quanto mais à esquerda se encontram. Dentro do mesmo grupo da tabela periódica, quanto maior for o número atómico de um elemento, mais eletropositivo será.

– Os elementos eletronegativos são os que se encontram na posição oposta, no quadro periódico, à excepção dos elementos do grupo 18.

Exs: Deve escrever-se  $\text{NaCl}$  e não  $\text{ClNa}$  porque o sódio é um metal e o cloro é um não-metal;

Deve escrever-se  $\text{KNaSO}_4$  e não  $\text{NaKSO}_4$  pois o potássio é mais electropositivo que o sódio e, o oxigénio mais eletronegativo que o enxofre.

2 – No caso de compostos iónicos escrevem-se primeiro os catiões e só em seguida os aniões, de modo a que a soma das cargas eléctricas no composto seja nula.

Ex: O óxido de alumínio é composto pelos iões alumínio ( $\text{Al}^{3+}$ ) e os iões óxido ( $\text{O}^{2-}$ ). Para que se verifique a eletroneutralidade no composto, esses iões devem combinar-se na proporção de dois iões alumínio para três iões oxido. Escreve-se, então,  $(\text{Al}^{3+})_2(\text{O}^{2-})_3$ , ou seja,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .

3 – Nos compostos constituídos por átomos de elementos não-metálicos, esses devem ser representados nas fórmulas químicas pela seguinte ordem:  $\text{B, C, P, N, H, S, I, Br, Cl, O, F}$ .

Ex: Deve escrever-se  $\text{OF}_2$  e não  $\text{F}_2\text{O}$ ;

deve escrever-se  $\text{H}_2\text{O}$  e não  $\text{OH}_2$ ;

deve escrever-se  $\text{BH}_3$  e não  $\text{H}_3\text{B}$ .

A variedade de substâncias inorgânicas existente obriga a que as agrupemos em famílias químicas, segundo a sua estrutura e, portanto, de acordo com determinados grupos de átomos nelas existentes, que explicam o seu comportamento químico. Assim, temos os óxidos, os ácidos, os hidróxidos, os sais, os hidretos, etc.

O nome da substância é dado tendo em conta a família química a que ela pertence e de acordo com as regras propostas pela IUPAC – regras de nomenclatura.

Vejamos as regras de nomenclatura para as famílias mais comuns de compostos inorgânicos:

### 2.3.1 Nomenclatura dos óxidos

Os óxidos são compostos binários formados por apenas dois elementos, um dos quais o oxigénio, que podem ser iónicos ou moleculares.

**Óxidos iónicos:** são formados por aniões óxidos ( $O^{2-}$ ) e catiões metálicos nas devidas proporções estequiométricas. O nome é formado pelo termo **óxido** seguido do nome do catião metálico presente.

Exs:

Fórmula química	Fórmula iónica	Nome
$FeO$	$Fe^{2+}O^{2-}$	Óxido de ferro (II)
$V_2O_5$	$(V^{5+})_2(O^{2-})_5$	Óxido de vanádio (V)
$Al_2O_3$	$(Al^{3+})_2(O^{2-})_3$	Óxido de alumínio
$CuO$	$Cu^{2+}O^{2-}$	Óxido de cobre II

**Óxidos moleculares:** são constituídos por moléculas em cuja constituição entra o elemento oxigénio e um elemento não-metálico. O nome também é formado pelo termo **óxido** seguido do nome do não-metal, acrescentando um prefixo que indica o número de átomos de oxigénio ou do não-metal presentes na molécula.

Exs:

Fórmula molecular	Nome
$CO$	Monóxido de carbono
$CO_2$	Dióxido de carbono
$SO_3$	Trióxido de enxofre
$N_2O_4$	Tetróxido de diazoto

Um caso especial de óxidos refere-se àqueles em que existem dois átomos de oxigénio ligados entre si ( $-O-O-$ ), por uma ligação covalente – os peróxidos. Podem ser iónicos, peróxidos de metais; ou moleculares, como o peróxido de hidrogénio.

Exs:

Fórmula química	Nome
$Na_2O_2$	Peróxido de sódio
$CaO_2$	Peróxido de cálcio
$H_2O_2$	Peróxido de hidrogénio (água oxigenada)

### 2.3.2 Nomenclatura dos ácidos

Os ácidos são substâncias formadas por hidrogénio e não metais (substâncias moleculares). Se na sua constituição existir ainda oxigénio, são oxoácidos; caso contrário são hidrácidos.

Quando dissolvidos em água as moléculas dessas substâncias (moleculares) se ionizam formando iões hidrogénio ( $H^+$ ) e aniões resultantes do grupo de átomos residual da molécula:

Substância molecular	Solução aquosa
HI (brometo de hidrogénio)	$H^+_{(aq)} + Br^-_{(aq)}$ ou $HBr_{(aq)}$
$HNO_3$ (nitrato de hidrogénio)	$H^+_{(aq)} + NO_3^-_{(aq)}$ ou $HNO_3_{(aq)}$
$HNO_2$ (nitrito de hidrogénio)	$H^+_{(aq)} + NO_2^-_{(aq)}$ ou $HNO_2_{(aq)}$
$H_2SO_4$ (sulfureto de hidrogénio)	$2H^+_{(aq)} + SO_4^{2-}_{(aq)}$ ou $H_2SO_4_{(aq)}$

É exactamente por essas soluções assim formadas apresentarem propriedades ácidas que se chamam **ácidos** a estas substâncias.

O nome dos ácidos forma-se a partir do nome do elemento não metálico presente na sua constituição, sem ser o oxigénio, desde que se atendam as seguintes regras:

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS



- Quando o nome do anião termina em eto o nome do ácido termina em ídrico.

Exs:

Fórmula química	Anião presente em solução aquosa e respectivo nome	Nome do ácido
HCl	Cl <sup>-</sup> - cloro <b>eto</b>	Ácido clorí <b>dr</b> ico
HI	I <sup>-</sup> - iodo <b>eto</b>	Ácido iodí <b>dr</b> ico
H <sub>2</sub> S	S <sup>2-</sup> - sulfuro <b>eto</b>	Ácido sulfí <b>dr</b> ico

- Quando o nome do anião termina em ato o nome do ácido termina em ico.

Exs:

Fórmula química	Anião presente em solução aquosa e respectivo nome	Nome do ácido
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> - sulfato	ácido sulfú <b>ri</b> co
HClO <sub>3</sub>	ClO <sub>3</sub> <sup>-</sup> - clorato	ácido clór <b>ic</b> o
H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup> - fosfato	ácido fosfó <b>ri</b> co
HNO <sub>3</sub>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> - nitrato ou azotato	ácido nítr <b>ic</b> o (ou azót <b>ic</b> o)

- Quando o nome do anião termina em ito o nome do ácido termina em oso.

Exs:

Fórmula química	Anião presente em solução Aquosa e respectivo nome	Nome do ácido
HSO <sub>3</sub>	SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> - sulfito	ácido sulfuro <b>so</b>
HClO <sub>2</sub>	ClO <sub>2</sub> <sup>-</sup> - clorito	ácido cloro <b>so</b>
HNO <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> - nitrito	ácido nitro <b>so</b> (ou azoto <b>so</b> )

Como se conclui dos exemplos dados, todos os oxoácidos formam o respectivo nome com a terminação **ico** ou **oso**.

Acontece que por vezes o mesmo não-metal pode formar ácidos diferentes, que se distinguem entre si pelo número de átomos de oxigénio presente por molécula. Para os distinguir acrescenta-se ao respectivo nome o prefixo hipo para o que tiver menor número de átomos de oxigénio e, o prefixo per para o que tiver maior número de átomos de oxigénio.

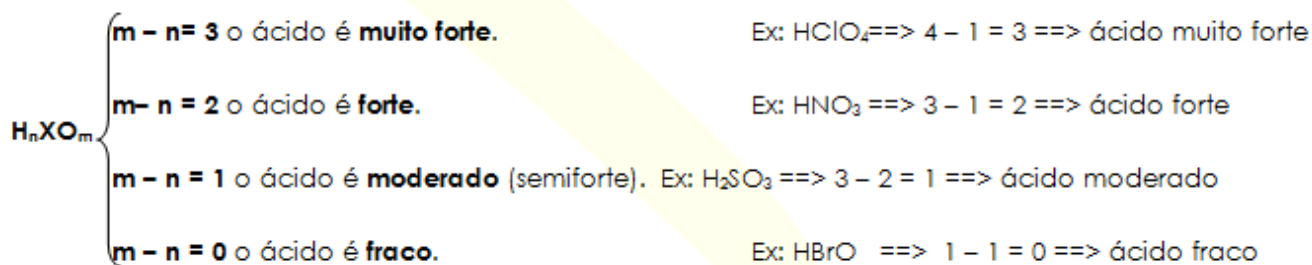
Exs: O elemento químico cloro (Cl) pode formar quatro oxoácidos diferentes, cujas fórmulas e nomes são os seguintes:

HClO – ácido hipocloroso; HClO<sub>2</sub> – ácido cloroso;

HClO<sub>3</sub> – ácido clórico; HClO<sub>4</sub> – ácido perclórico

Numa série de **oxoácidos** (ácidos oxigenados, de fórmula genérica H<sub>n</sub>XO<sub>m</sub>), o mais forte pode ser identificado aplicando a regra de Pauling que diz que a força do oxoácido é indicada pela diferença

entre o número de átomos de oxigénio e o número de átomos de hidrogénio existentes na molécula. Deste modo:



### 2.3.3 Nomenclatura dos hidróxidos

São constituídos por catiões metálicos e aniões hidróxido ( $HO^-$ ) e as suas soluções aquosas apresentam carácter básico, mais ou menos acentuado. Daí que se lhes chame **bases**.

O seu nome é formado acrescentando ao termo **hidróxido** o nome do catião metálico presente.

Exs:

Fórmula química	Fórmula iónica	Nome
NaOH	$Na^+OH^-$	Hidróxido de sódio
KOH	$K^+OH^-$	Hidróxido de potássio
$Ca(OH)_2$	$Ca^{2+}(OH^-)_2$	Hidróxido de cálcio
$Al(OH)_3$	$Al^{3+}(OH^-)_3$	Hidróxido de alumínio

### 2.3.4 Nomenclatura dos sais

Os sais são compostos iónicos, também, formados por catiões (à excepção do ião  $H^+$ ) e por aniões (à excepção do anião  $OH^-$  e do anião  $H^-$  - lê-se: hidreto). Os seus nomes formam-se acrescentando ao nome do anião o nome do catião presente no sal.

Exs:

Fórmula química	Anião presente	Catião presente	Nome
NaCl	$Cl^-$ - cloreto	$Na^+$ - sódio	Cloreto de sódio
CuS	$S^{2-}$ - sulfureto	$Cu^{2+}$ - cobre II	Sulfureto de cobre II
$KNO_3$	$NO_3^-$ - nitrato	$K^+$ - potássio	Nitrato de potássio
$CaCO_3$	$CO_3^{2-}$ - carbonato	$Ca^{2+}$ - cálcio	Carbonato de cálcio
$PbI_2$	$I^-$ - iodeto	$Pb^{2+}$ - chumbo	Iodeto de chumbo
$Al_2(SO_4)_3$	$SO_4^{2-}$ - sulfato	$Al^{3+}$ - alumínio	Sulfato de alumínio

### 1.3.4.1 Sais hidratados

Os sais consideram-se hidratados quando têm moléculas de água incorporadas na sua rede cristalina. Deve-se referir que quando um sal não tem moléculas de água incorporadas na sua rede cristalina é considerado sal anidro.

Exs: A fórmula do sulfato de cobre hidratado é:  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ .

Para nomeá-lo, acrescenta-se ao nome do sal anidro o termo "hidratado", precedido do prefixo que indica o número de moléculas de água representadas na fórmula química. Nesse caso,  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  será sulfato de cobre II penta-hidratado.

Fórmula química	Nome
$\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	Cloreto de cobre II di-hidratado
$\text{Mn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	Nitrato de manganês II tetra-hidratado
$\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	Cloreto de ferro III hexa-hidratado
$\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	Sulfato de magnésio hepta-hidratado

### 2.3.5 Nomenclatura dos hidretos

Os hidretos são compostos iônicos caracterizados pela presença dos aniões hidreto ( $\text{H}^-$ ) acompanhados de cátions metálicos.

Os seus nomes formam-se acrescentando ao termo **hidreto** o nome dos cátions metálicos presentes.

Exs:

Fórmula química	Fórmula iônica	Nome
$\text{NaH}$	$\text{Na}^+\text{H}^-$	Hidreto de sódio
$\text{KH}$	$\text{K}^+\text{H}^-$	Hidreto de potássio
$\text{CaH}_2$	$\text{Ca}^{2+}(\text{H}^-)_2$	Hidreto de cálcio

### EXERCÍCIOS

1 – Escreva a fórmula química dos compostos abaixo:

Ácidos: sulfuroso; sulfúrico; hipofosforoso; fosfórico; hipocloroso; cloroso; clórico; perclórico; iodoso; iódico; nítrico; nitroso; hiponitroso; brômico; bórico; carbônico; permangânico; pirossulfúrico; metabórico; pirofosfórico; metafosfórico; piromangânico; mangânico; cianídrico; crômico.

Bases: hidróxido: de magnésio; cuproso; cúprico; de zinco; crômico; plúmbico; de amônio; ferroso.

Sais: sulfato de zinco; sulfato de potássio; cloreto de potássio; carbonato de bário; cromato de sódio; sulfato plumboso; nitrito de cálcio.

2 – A sequência de fórmulas que representa, respectivamente, um hidrácido fraco, um hidrácido forte, uma base fraca, um óxido ácido e um óxido básico é:

- a)  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{HBr}$ ,  $\text{NH}_4\text{OH}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$ ,  $\text{CaO}$
- d)  $\text{H}_3\text{BO}_3$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{KOH}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{CaO}$
- b)  $\text{HF}$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{Al}(\text{OH})_3$ ,  $\text{SnO}$ ,  $\text{MgO}$
- e)  $\text{HCN}$ ,  $\text{HBr}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{BaO}$ ,  $\text{SO}_3$
- c)  $\text{HCN}$ ,  $\text{HI}$ ,  $\text{NH}_4\text{OH}$ ,  $\text{SO}_3$ ,  $\text{BaO}$

3 – Para responder à questão, analise a tabela abaixo, que apresenta soluções aquosas de ácidos de igual concentração molar e suas respectivas constantes de ionização:

	Solução	$K_a(25^\circ\text{C})$
I	Ácido acético	$1,8 \cdot 10^{-5}$
II	Ácido cianídrico	$6,2 \cdot 10^{-10}$
III	Ácido cloroso	$1,1 \cdot 10^{-2}$
IV	Ácido fórmico	$1,8 \cdot 10^{-4}$
V	Ácido hipocloroso	$3,0 \cdot 10^{-8}$

Pode afirmar-se que uma solução é mais ácida (ou um ácido é mais forte) quanto maior for o valor de  $K_a$ , quando se relaciona a força do ácido com o  $K_a$ .

Analisando a tabela, pode concluir-se que a ordem crescente de acidez das soluções aquosas é:

- a)  $\text{I} < \text{IV} < \text{III} < \text{V} < \text{II}$ ;    c)  $\text{III} < \text{I} < \text{IV} < \text{V} < \text{II}$ ;    e)  $\text{V} < \text{III} < \text{II} < \text{I} < \text{IV}$ ;  
Ob)  $\text{II} < \text{V} < \text{I} < \text{IV} < \text{III}$ ;    d)  $\text{IV} < \text{I} < \text{V} < \text{II} < \text{III}$

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## CAPÍTULO III - SOLUÇÕES EM QUÍMICA

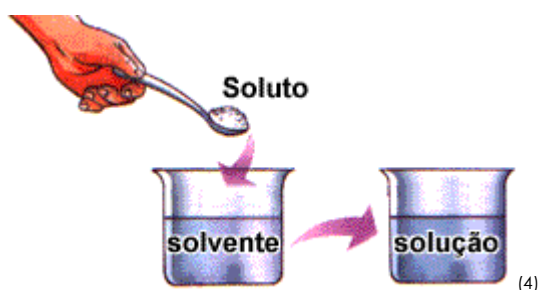
### 3.1 Introdução

Na natureza, dificilmente encontraremos substâncias puras. O mundo que nos rodeia é constituído por sistemas formados por mais de uma substância na qual é chamado de misturas. Normalmente as misturas são denominadas de soluções. É necessário referenciar que aproximadamente 90% das reacções químicas acontecem com os reagentes dissolvidos em algum líquido. Muitas das coisas que consumimos também são **soluções**. Daí a importância de entendermos algumas coisas sobre soluções. Uma solução é basicamente uma mistura homogênea de duas ou mais substâncias<sup>1</sup>. A água que bebemos, os refrigerantes, os combustíveis (álcool hidratado, gasolina), diversos produtos de limpeza (como sabonetes líquidos) são exemplos típicos de soluções. As soluções podem ser formadas por qualquer combinação envolvendo os três estados físicos da matéria: sólido, líquido e gasoso.

Exemplos de soluções no nosso dia-a-dia:

- Solução líquida (refrigerante)
- Solução sólida (bronze que é uma mistura de cobre e estanho)
- Solução Gasosa (ar atmosférico é uma misturas de gases)

Uma solução é sempre composta de duas componentes: uma que dissolve, que chamaremos de **solvente**, e outra que é dissolvida, que chamaremos de **solute**.



O soluto é a substância dissolvida no solvente. Em geral, encontra-se menor quantidade na solução. O solvente é a substância que dissolve o soluto, geralmente encontra-se em maior quantidade. Porém, é necessário saber que independentemente da sua quantidade na solução a água será sempre solvente.

A água é chamada de solvente universal. Isso porque, ela dissolve muitas substâncias e está presente em muitas soluções. Estas tipos de soluções são denominadas de soluções aquosas.

### 2.3 Classificação das soluções

Ao preparar uma solução, isto é, ao dissolver um soluto em um dado solvente, as moléculas ou os iões do soluto separam-se, permanecendo dispersos no solvente.

O grau de dissolução de um soluto em um solvente depende de vários fatores. Os mais importantes são:

- A natureza das partículas de solvente e soluto e as interações entre elas.
- A temperatura na qual a solução é formada.
- A pressão de um soluto gasoso.

As soluções podem ser classificadas quanto a:

- Estado físico: sólidas, líquidas ou gasosas.
- Condutividade elétrica: eletrolíticas e não eletrolíticas
- Proporção soluto/solvente: diluída, concentrada, saturadas, insaturada (não saturada) e sobressaturada (supersaturada).

- **Soluções eletrolíticas e não eletrolíticas**

Soluções eletrolíticas são soluções aquosas de sais, bases ou ácidos que têm como característica principal a condução de corrente elétrica (condutividade elétrica).

As **soluções não eletrolíticas** são soluções aquosas que não conduzem corrente elétrica (não possui condutividade). Normalmente são substâncias orgânicas, como açúcar, etanol e acetona. Assim, iremos apenas focar-nos nas soluções eletrolíticas.

Para que uma solução seja eletrolítica ela deve apresentar iões em meio aquoso. Eles podem ser libertados em solução de duas formas: pela **ionização** e pela **dissociação**.

A **ionização** ocorre quando uma molécula, ao entrar em contacto com a água, liberta iões um catião e um ião.

Exemplo: O HBr (ácido bromídrico), quando em contacto com a água liberta iões, sendo  $H^+$  (catião) e  $Br^-$  (anião), assim, ocorre uma ionização.

A dissociação ocorre com a formação de iões, ou seja, a substância iónica, ao entrar em contacto com a água ela liberta um catião e um anião.

Exemplo: O KCl (cloreto de potássio), em contacto com água, liberta  $K^+$  (catião) e  $Cl^-$  (anião), ocorrendo dissociação iónica.

As soluções eletrolíticas possuem mobilidade iónica, assim, é pela movimentação de iões livres na água (solução aquosa) que ocorre o transporte de corrente eléctrica.

É de salientar que, apenas o KCl ou a água não conduzem corrente eléctrica, é necessário que eles estejam misturados, e assim, em solução aquosa os iões podem movimentar-se conduzindo corrente eléctrica.

- **Solução saturada, insaturada (não saturada) e sobressaturada (supersaturada)**

Quando se fala em solubilidade, é comum a afirmação “semelhante dissolve semelhante”. Ou seja, uma substância polar tende a se dissolver num solvente polar e uma substância apolar tende a se dissolver em um solvente apolar.

Assim, fica mais fácil entender porque muitas substâncias inorgânicas, como os sais e os ácidos, que são polares dissolvem-se na água que é um solvente polar, como por exemplo, água e álcool. Já as substâncias orgânicas que, geralmente são apolares dissolvem-se em solventes orgânicos também apolares; por exemplo, é possível dissolver a parafina na gasolina, a gasolina no querosene, mas o mesmo não acontece se o solvente for a água. O mesmo acontece com óleo e água, que não se misturam.

A solubilidade ou coeficiente de solubilidade indica a quantidade máxima de um soluto que pode ser dissolvido em um determinado solvente, a determinada temperatura e pressão.

De acordo com a quantidade de soluto dissolvido, podemos classificar as soluções em:

- **Solução saturada** é aquela em que o solvente já dissolveu toda quantidade possível de soluto, e toda a quantidade agora adicionada não será dissolvida, pelo que, ficará no fundo do recipiente. Ou seja, a quantidade de soluto no excedeu o limite de solubilidade (coeficiente de solubilidade).
- **Solução insaturadas (não saturada) ou diluída** é aquela em que a quantidade de soluto usado não atinge o limite de solubilidade (coeficiente de solubilidade) a uma dada temperatura.
- **Solução supersaturada (instável)** ocorre quando uma quantidade de soluto dissolvido no solvente é maior que a sua solubilidade (coeficiente de solubilidade) naquela temperatura. Assim, a solução é aquecida ou resfriada de modo a reduzir o coeficiente de solubilidade. Quando isso é feito de modo cuidadoso, o soluto permanece dissolvido, mas a solução se torna extremamente instável. Qualquer vibração faz precipitar a quantidade de soluto em excesso dissolvida.

Em laboratório normalmente, as soluções são preparadas dissolvendo-se uma massa determinada de soluto em uma certa quantidade de solvente.

### 3.2 Unidades de concentração das soluções

O estudo quantitativo de uma solução implica o conhecimento da sua concentração, isto é, da quantidade de soluto presente em uma dada quantidade de solução. Os químicos usam várias unidades de concentração, cada qual com as suas vantagens e limitações. Examinaremos as cinco unidades de concentração mais utilizadas: concentração comum ou mássica, molaridade, molalidade, fração molar e percentagem em massa.

Para trabalhar as unidades de concentração adotaremos alguns números como índices para representar soluto, solvente e solução.

1-soluto;

2-solvente;

Sem índice – solução

**Concentração comum (C) ou mássica:** Determina a quantidade de massa de soluto ( $m_1$ ) em gramas por unidade de volume (V) de solução (L).

$$C = \frac{m_1}{V} \gg C = \frac{\text{grama (g)}}{\text{litro (L)}}$$

Exemplos:

1. Qual a concentração de uma solução contendo 40g de cloreto de sódio dissolvidos em 250 mL de solução?

Dados:

sabendo que:

substituindo:

$$m_1 = 40 \text{ g}$$

$$C = \frac{m_1}{V} \quad C = \frac{40 \text{ g}}{0,25 \text{ L}}$$

$$V = 250 \text{ mL} = 0,25 \text{ L}$$

$$C = 160 \text{ g/L}$$

$$C = ?$$

2. 300g de açúcar foram adicionados a uma certa quantidade de água, obtendo-se uma solução 60g/L. Qual o volume dessa solução, em mL? R:5000

Dados:

sabendo que:

substituindo:

$$m_1 = 300 \text{ g}$$

$$C = \frac{m_1}{V} \quad 60 \text{ g/L} = \frac{300 \text{ g}}{V}$$



$$V = ?$$

$$V = \frac{300 \text{ g}}{60 \text{ g/L}}$$

$$C = 60 \text{ g/L}$$

$$V = 5 \text{ L} = 5000 \text{ mL}$$

**Concentração molar ou molaridade (M):** É a relação entre o número de mols do soluto ( $n_1$ ) e o volume (V), em litros, da solução.

$$M = \frac{n_1}{V} \gg M = \frac{m_1}{MM \times V}$$

Onde:

$n_1$  = número de moles do soluto;  $V$  = volume da solução;  $m_1$  = massa do soluto

$MM$  = Massa molar ou massa molecular; A molaridade é expressa em  $\left[\frac{\text{mol}}{\text{L}}\right]$

Exemplos:

1. Quantos litros de solução de cloreto de sódio a 0,2M podem ser preparados a partir de 468g de cloreto de sódio? R: 40L

Dados:

Fórmula

$$V = ? \quad M = \frac{n_1}{V} \gg M = \frac{m_1}{MM \times V}$$

$$M = 0,2 \text{ mol/L}$$

substituindo:

$$m_1 = 468 \text{ g}$$

$$0,2 \text{ mol/L} = \frac{468 \text{ g}}{58,4 \text{ g/L} \times V}$$

$$MM_{(\text{NaCl})} = 58,4 \text{ g/mol}$$

$$V = \frac{468 \text{ g}}{58,4 \text{ g/L} \times 0,2 \text{ mol/L}}$$

$$V = 40 \text{ L}$$

1. No preparo de uma solução alvejante de tinturaria, 521,5g de hipoclorito de sódio ( $\text{NaClO}$ ) são dissolvidos em água suficiente para 10L de solução. Qual é a concentração molar da solução obtida?

Dados:

Fórmula:

$$V = 10 \text{ L}$$

$$M = \frac{n_1}{V} \gg M = \frac{m_1}{MM \times V}$$

$$m_1 = 521,5 \text{ g}$$

substituindo:

$$MM_{(\text{NaOCl})} = 74,4 \text{ g/mol}$$

$$M = \frac{521,5 \text{ g}}{74,4 \text{ g/L} \times 10 \text{ L}}$$

$$M = ? \quad V = 0,7 \text{ mol/L}$$

**Concentração molar ou molalidade (W):** É a relação entre o número de moles do soluto ( $n_1$ ) e a massa, em kg, do solvente.

$$W = \frac{n_1}{m_2} \gg W = \frac{m_1}{MM \times m_2} \text{ Obs.: massa do solvente } (m_2) \text{ deve ser sempre expressa em Quilograma (Kg)}$$

Onde:  $m_2$  = massa do solvente; A molalidade é expressa em  $\left[\frac{\text{mol}}{\text{Kg}}\right]$

Exemplos:

1. Calcular a molalidade da solução formada utilizando-se 171g de sacarose ( $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$ ) dissolvidos em 400g de água. R: 1,25

Dados:

$$m_1 = 171 \text{ g}$$

$$MM(\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}) = 342 \text{ g/mol}$$

$$m_2 = 400 \text{ g} = 0,4 \text{ Kg}$$

$$w = ?$$

Fórmula

$$W = \frac{m_1}{MM \times m_2}$$

Sstituindo:

$$W = \frac{171 \text{ g}}{342 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \times 0,4 \text{ Kg}}$$

$$w = 1,25 \text{ mol/Kg}$$

2. Determinar a massa de água, em gramas, que deve ser utilizada para dissolver 0,2 mol de cloreto de sódio e originar uma solução 0,4 molal.

Dados:

$$n_1 = 0,2 \text{ mol}$$

$$MM(\text{NaCl}) = 58,4 \text{ g/mol}$$

$$W = 0,4 \text{ mol/Kg}$$

$$m_1 = ?$$

Fórmula

$$W = \frac{n_1}{m_2} \gg m_2 = \frac{n_1}{W}$$

Sstituindo:

$$m_1 = \frac{0,2 \text{ mol}}{0,4 \text{ mol/Kg}}$$

$$m_1 = 0,5 \text{ Kg} = 500 \text{ g}$$

**Fracção molar do soluto ( $X_1$ ):** É a relação entre o número de mols do soluto ( $n_1$ ) e o número de mols da solução ( $n_2$ )

$$X_1 = \frac{n_1}{n} \gg X_1 = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \gg X_1 = \frac{\frac{m_1}{MM_1}}{\frac{m_1}{MM_1} + \frac{m_2}{MM_2}}$$

**Fracção molar do solvente ( $X_2$ ):** É a relação entre o número de moles do solvente ( $n_2$ ) e o número de mols da solução ( $n_2$ )

$$X_2 = \frac{n_2}{n} \gg X_2 = \frac{n_2}{n_1 + n_2} \gg X_1 = \frac{\frac{m_1}{MM_1}}{\frac{m_1}{MM_1} + \frac{m_2}{MM_2}}$$

Onde:  $n_2$  = número de moles do solvente

A soma das fracções molares é sempre igual a unidade (1) ou seja,  $X_1 + X_2 = 1$ . A fracção molar é adimensional, não possui unidade.

Exemplos:

1. Calcular as fracções molares do soluto e do solvente em uma solução que contém 117g de cloreto de sódio dissolvidos em 324g de água. R: 0,1 e 0,9

Dados:

Fórmula:

Fórmula:

$$m_1 = 117 \text{ g}$$

$$X_1 = \frac{\frac{m_1}{MM_1}}{\frac{m_1}{MM_1} + \frac{m_2}{MM_2}} \quad X_2 = \frac{\frac{m_2}{MM_2}}{\frac{m_1}{MM_1} + \frac{m_2}{MM_2}}$$

$$MM(\text{NaCl}) = 58,4 \text{ g/mol}$$

Substituindo:

Substituindo:

$$m_2 = 324 \text{ g}$$

$$X_2 = \frac{\frac{324 \text{ g}}{18 \text{ g/mol}}}{\frac{117 \text{ g}}{58,4 \text{ g/mol}} + \frac{324 \text{ g}}{18 \text{ g/mol}}}$$

$$MM(\text{H}_2\text{O}) = 18 \text{ g/mol}$$

$$X_1 = 0,1$$

$$X_2 = 0,9$$

$$X_1 = ?$$

$$X_2 = ?$$

2. Uma solução contém 18g de glicose ( $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ ), 24,0g de ácido acético ( $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ ) e 81,0g de água. Qual a fracção molar do ácido acético na solução? R: 0,08

Dados:

Fórmula:

$$m_1 = 18 \text{ g}$$

$$X_3 = \frac{\frac{m_3}{MM_3}}{\frac{m_1}{MM_1} + \frac{m_2}{MM_2} + \frac{m_3}{MM_3}}$$

$$MM(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6) = 180 \text{ g}$$

Substituindo:

$$m_3 = 24 \text{ g}$$

$$X_3 = \frac{\frac{24 \text{ g}}{60 \text{ g/mol}}}{\frac{18 \text{ g}}{180 \text{ g/mol}} + \frac{81 \text{ g}}{18 \text{ g/mol}} + \frac{24 \text{ g}}{60 \text{ g/mol}}}$$

$$MM(\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2) = 60 \text{ g/mol}$$

$$X_3 = 0,08$$

$$m_2 = 81,0 \text{ g}$$

$$MM(\text{H}_2\text{O}) = 18 \text{ g/mol}$$

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

**Título ou percentagem em massa/massa (T):** Determina a quantidade de massa de soluto ( $m_1$ ) em uma determinada quantidade de massa de solução ( $m$ ). Esta grandeza é adimensional.

$$T = \frac{m_1}{m} \gg T = \frac{m_1}{m_1 + m_2}$$

$$T_{\%} = T \times 100$$

Exemplos:

1. Calcular a percentagem, em massa, de uma solução formada, quando foram utilizados 40g de cloreto de sódio para serem dissolvidos em 60g de água.

R/ 40%

Dados:

$$m_1 = 40 \text{ g}$$

$$m_2 = 60 \text{ g}$$

$$T_{\%} = ?$$

$$T_{\%} = \frac{40}{40 + 60} \times 100\%$$

Fórmula:

$$T = \frac{m_1}{m} \gg T = \frac{m_1}{m_1 + m_2}$$

$$T_{\%} = T \times 100$$

Substituindo:

$$T_{\%} = 40\%$$

2. Tem-se um frasco de soro glicosado, a 5% (solução aquosa de 5% em massa de glicose). Para preparar 1 kg desse soro, quantos gramas de glicose devem ser dissolvidos em água? R: 50g

Dados:

Fórmula:

Fórmula:

$$T_{\%} = 5\%$$

$$T_{\%} = T \times 100 \quad \%T = \frac{m_1}{m}$$

$$m = 1 \text{ Kg} = 1000 \text{ g}$$

$$T = \frac{T_{\%}}{100 \%} m_1 = T \times m$$

$$m_1 = ? \text{ Substituindo:}$$

Substituindo:

$$T = \frac{5 \%}{100 \%} m_1 = 0,05 \times 1000 \text{ g}$$

$$T = 0,05$$

$$m_1 = 50 \text{ g}$$

### Exercícios propostos

1. Um medicamento contém 90 mg de ácido acetilsalicílico ( $C_9H_8O_4$ ) por comprimido. Dissolvendo-se 1 comprimido num copo de água (250mL). Calcule:

a) Molaridade

b) Percentagem em massa

R/ 0,002 mol/L ; 0,036 %

2. O soro fisiológico é uma solução aquosa de cloreto de sódio a 0,9% (m/m). Determinar a molaridade e a molalidade da solução. R/ 0,15 mol/L , 0,15 mol/Kg

**Nota:** considere densidade da solução = densidade água,  $d(H_2O) = 1,00 \text{ g/ml}$ .

Dados complementares: Massas atômicas Na= 23,00u , Cl = 35,45u

3. Dissolveu-se uma amostra de 5 g de brometo de potássio em 250 ml de água. Calcule:

a) A concentração em massa

b) A concentração molar

c) A molalidade,

d) A percentagem em massa

e) As fracções molares do soluto e do solvente.

Dados complementares: Massas atômicas K = 39,10u , Br = 79,90u

R/ 20 g/L ; 0,168 mol/L ; 0,168 Kg/mol ; 0,030 ; 0,099

4. Preparou-se uma solução aquosa de ácido sulfúrico de densidade igual a 1,064 g/ml pela adição de 25g de  $H_2SO_4$  a 225g de  $H_2O$ . Calcule:

a) Concentração massica

b) Percentagem em massa

c) Molaridade

d) Molalidade

R/ 106,38 g/L ; 10% ; 1,085 mol/L ; 1,134 Kg/mol

5. Quando 39,2g de ácido sulfúrico são dissolvidos em 200mL de água, obtém-se uma solução de volume igual a 220 mL. Qual a molalidade e a molaridade dessa solução?

R/ 2 Kg/mol ; 1,8 mol/L

### 3.4 Preparação de soluções aquosas de concentração conhecidas

Quando as moléculas são dissolvidas em qualquer líquido ou até mesmo na água, elas se transformam em solução. As moléculas dissolvidas recebem o nome de soluto, e o líquido que as dissolve é chamado de solvente. Se uma solução é preparada com o solvente água, dizemos que é uma **solução aquosa**. Ao dissolver sal em água, por exemplo, obtemos uma solução aquosa de sal, na qual a água é o solvente e o sal é o soluto.

Quanto maior for a quantidade de soluto dissolvido em solvente maior será a sua concentração na solução.

Observe, nas fotos abaixo, o preparo de uma solução aquosa de NaOH.

- O soluto é transferido para o frasco e, em seguida, adiciona-se um pouco de água destilada e agita-se até que todo o sólido se dissolva.
- Finalmente, acrescenta-se água com auxílio de uma pisseta até atingir a marca de 1.000mL

O preparo de uma solução aquosa em laboratório



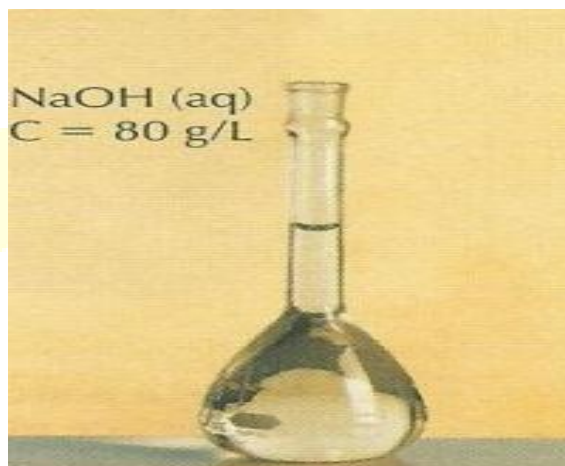
Massa de soluto = 80 g

Adição de água destilada até a marca de 1 L.

$MM_{(\text{NaOH})} = 40 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS



A solução preparada contém 80 g de soluto dissolvidos em 1,0 L de solução

Os químicos têm uma forma única de representar uma solução preparada. Assim sobre a solução hidróxido de sódio, pode dizer-se que:

- A solução preparada contém 80 g de soluto dissolvidos em 1.000 mL de solução.
- A solução preparada contém 80 g de soluto dissolvidos em uma quantidade de água suficiente para 1,0 L de solução.
- A solução preparada contém 80 g de soluto dissolvidos em 1,0 L de solução.

As frases acima, embora diferentes, dizem respeito à mesma solução.

O frasco com a solução preparada deve ser tapado e rotulado para indicar o conteúdo.

Ao Ser rotular um frasco para informar o seu conteúdo, os químicos adotam uma linguagem matemática. Essa linguagem utiliza fracções para representar quantitativamente os componentes da solução, ou seja, a concentração da solução.

O estudo dessa linguagem matemática é chamado em química de estudo da concentração das soluções.

### 3.5 Diluição de soluções

As soluções podem classificar-se em diluídas ou concentradas.

Uma solução pode ser preparada adicionando-se solvente a uma solução inicialmente mais concentrada. Este processo é denominado de diluição. Actividades comuns do dia-a-dia, como acrescentar água a um sumo de frutas, misturar o detergente na água durante a lavagem de roupas,

adicionar água a um medicamento ou aplicar solventes próprios às tintas para deixá-la mais fluidas são bons exemplos de diluição.

Ao diluir uma solução, a massa ( $m_1$ ) do soluto não se altera, sendo a mesma na solução inicial e na final. O volume da solução aumentará (de  $V$  a  $V'$ ), uma vez que será adicionada uma porção de solvente. A concentração, por sua vez, diminuirá (diluição e concentração são processos opostos). Assim, pode-se concluir que volume e concentração são grandezas inversamente proporcionais, ou seja, o primeiro aumenta a mesma proporção que o outro diminui.

Para calcular, podemos ter as seguintes relações entre solução inicial e a final:

	Inicial	Final	Relação
Concentração Comum [g/L]	$C = \frac{m_1}{V}$	$C' = \frac{m_1}{V'}$	$C \times V = C' \times V'$
Molaridade [mol/L]	$M = \frac{n_1}{V}$	$M' = \frac{n_1}{V'}$	$M \times V = M' \times V'$

Note que, na tabela anterior as colunas relativas à massa ( $m_1$ ) do soluto e o número de moles ( $n_1$ ) do soluto não aparecem, isto, justifica-se pelo facto de ambos permanecerem constantes, pelo que, se pode igualar as duas expressões desprezando  $m_1$  e  $n_1$ .

É de se salientar que foi apresentada na tabela apenas os dois tipos de concentração mais utilizadas na diluição.

Observe os exemplos:

- 1) Ao diluir 100 mL de uma solução de cloreto de sódio, cuja concentração é igual a 15 g/L ao volume final de 150 mL, qual será a concentração final da solução?

Dados:

$$V = 100 \text{ mL}$$

$$C = 15 \text{ g/L}$$

$$V' = 150 \text{ mL}$$

$$C' = ?$$

Aplicando a fórmula de diluição:

$$C \times V = C' \times V'$$

temos:

$$15 \text{ g/L} \times 100 \text{ mL} = 150 \text{ mL} \times C'$$

$$C' = 10 \text{ g/L}$$

- 2) A uma solução de 40 mL de NaOH a 0,1 mol/L (molar) foi adicionado 100 mL de água. Determine a concentração desta solução após a adição de água.

Dados:

Aplicando a fórmula de diluição:



$$V = 40 \text{ mL}$$

$$M \times V = M' \times V'$$

$$M = 0,1 \text{ mol/L}$$

temos:

$$V' = 100 \text{ mL}$$

$$0,1 \text{ mol/L} \times 40 \text{ mL} = 100 \text{ mL} \times M'$$

$$M' = ?$$

$$M' = 0,04 \text{ mol/L}$$

3) Qual deve ser o volume de água adicionado a 50 cm<sup>3</sup> de solução de hidróxido de sódio (NaOH), cuja concentração é igual a 60 g/L, para que seja obtida uma solução a 5,0 g/L?

Dados:

Aplicando a fórmula de diluição:

$$V = 50 \text{ cm}^3 \quad C \times V = C' \times V'$$

$$M = 60 \text{ g/L}$$

temos:

$$M' = 5,0 \text{ g/L}$$

$$60 \text{ g/L} \times 50 \text{ cm}^3 = 5,0 \text{ g/L} \times V'$$

$$V' = ?$$

$$V' = 600 \text{ cm}^3$$

4) Uma solução aquosa de ácido sulfúrico, para ser utilizada em baterias de chumbo de veículos automotivos, deve apresentar concentração igual a 4 mol/L. Determine o volume total de uma solução adequada para se utilizar para se utilizar nestas baterias, que pode ser obtido a partir de 500 mL de solução de ácido sulfúrico de concentração 18 mol/L.

Dados:

Aplicando a fórmula de diluição:

$$V = 500 \text{ mL}$$

$$M \times V = M' \times V'$$

$$M = 18 \text{ mol/L}$$

temos:

$$V' = ?$$

$$18 \text{ mol/L} \times 500 \text{ mL} = 4 \text{ mol/L} \times V'$$

$$M' = 4 \text{ mol/L}$$

$$V' = 2250 \text{ mL} = 2,25 \text{ L}$$

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

5) Uma solução 1 mol/L de glicose, contida em um béquer, perde água por evaporação até restar um volume de 150 mL, passando a concentração para 2 mol/L. Determine o volume de água evaporada.

Dados:

Aplicando a fórmula de diluição:

$$V = 150 \text{ mL}$$

$$M \times V = M' \times V'$$

$$M = 2 \text{ mol/L}$$

temos:

$$V' = ?$$

$$2,0 \text{ mol/L} \times 150 \text{ mL} = 1,0 \text{ mol/L} \times V'$$

$$M' = 1 \text{ mol/L}$$

$$V' = 300 \text{ mL}$$

O volume obtido de 300 mL ( $V' = 300 \text{ mL}$ ) não é a quantidade de água evaporada na solução, mas sim, este é o volume total da solução de 2 mol/L antes da evaporação. Assim sendo, deve-se achar a diferença entre o volume total da solução e o volume que restou após a evaporação o valor obtido será exactamente a quantidade de água evaporada. Logo teremos:

$$V_{\text{Evaporada}} = V_{\text{Total}} - V_{\text{que restou após evaporação}}$$

$$V_{\text{Evaporada}} = 300 \text{ mL} - 150 \text{ mL}$$

$$V_{\text{Evaporada}} = 150 \text{ mL}$$

### Exercícios propostos

1) Determine o volume de água, que deve ser adicionado a 80 mL de solução aquosa 12 mol/L de hidróxido de sódio, para que a solução resultante seja 1,2 mol/L. R/ 800 mL

2) Um laboratorista precisa preparar solução 1 mol/L de  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ , aproveitando 200 mL de solução 0,8 mol/L do mesmo sal. Determine a quantidade de solvente que deve ser adicionado a solução inicial para se conseguir atingir a concentração de 1 mol/L. R/ 160 mL

3) Uma solução contendo 5 mL de NaCl 1 mol/L é diluída com água suficiente para atingir o volume de 500 mL. Qual será a concentração dessa nova solução? R/ 0,010 mol/L

4) Se adicionarmos 80 mL de água a 20 mL de uma solução 0,20 mol/L de KOH, qual será a concentração molar obtida para a nova solução? R/ 0,05 mol/L

5) Preparam-se 100 mL de uma solução contendo 1 mol de KCl. Tomaram-se, então, 50 mL dessa solução e juntaram-se 450 mL de água. Qual será a molaridade da solução final? R/ 0,11 mol/L

6) Para que volume devem ser alterados os 500 mL de uma solução de concentração igual a 10 g/L a fim de:

- a) Torná-la de concentração igual a 1 g/L;
- b) Dobrar sua concentração inicial.

a) R/ 5000 mL ; b) 250 mL

7) Um dentista precisa obter uma solução aquosa de fluoreto de sódio (NaF) na concentração de 20 g/L. Sabendo-se que em seu consultório ele dispõe de 250 mL de uma solução a 40 g/L como deverá ser o procedimento para se obter a solução desejada? R/ Deve-se diluir a solução até ao volume de 500 mL

8) Aqueceu-se um frasco contendo uma solução aquosa de  $\text{CuSO}_4$  0,05 mol/L. O aquecimento foi interrompido quando restavam 100 mL de uma solução aquosa de  $\text{CuSO}_4$  1,2 mol/L. Determine o volume da solução inicial e o volume de água perdida pelo aquecimento. R/ 2400 mL , 2300 mL

9) A uma amostra de 100 mL de NaOH de concentração 20g/L foi adicionada água suficiente para completar 500 mL. Determine a concentração, em g/L, dessa nova solução. R/ 4 g/L

10) Pipetaram-se 10 mL de uma solução aquosa de NaOH de concentração 1,0 mol/L. Em seguida, adicionou-se água suficiente para atingir o volume final de 500 mL. Determine a concentração da solução resultante, em mol/L. R/ 0,02 mol/L

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## CAPÍTULO IV - CÁLCULO ESTEQUIOMÉTRICO

### 4.1 Reações químicas: cálculos estequiométricos

A queima de uma vela, a obtenção de álcool etílico a partir de açúcar e o enferrujamento de um pedaço de ferro são exemplos de transformações onde são formadas substâncias com propriedades diferentes das substâncias que interagem. Tais transformações são chamadas reações químicas. As substâncias que interagem são chamadas reagentes e as formadas, produtos.

No final do século XVIII, estudos experimentais levaram os cientistas da época a concluir que as reações químicas obedecem a certas leis. Estas leis são de dois tipos:

- **leis ponderais:** tratam das relações entre as massas de reagentes e produtos que participam de uma reação;
- **leis volumétricas:** tratam das relações entre volumes de gases que reagem e são formados numa reação.

### 4.2 Leis ponderais e reações químicas

#### Lei da conservação das massas (lei de Lavoisier)

Esta lei foi elaborada, em 1774, pelo químico francês Antome Laurent Lavoisier. Os estudos experimentais realizados por Lavoisier levaram-no a concluir que numa reacção química, que se processa num sistema fechado, a soma das massas dos reagentes é igual à soma das massas dos produtos:

$$m_{\text{(reagentes)}} = m_{\text{(produtos)}}$$

Assim, por exemplo, quando 2 gramas de hidrogênio reagem com 16 gramas de oxigênio verifica-se a formação de 18 gramas de água; quando 12 gramas de carbono reagem com 32 gramas de oxigênio ocorre a formação de 44 gramas de gás carbônico.

**Lei das proporções constantes (lei de Proust)**

Esta lei foi elaborada, em 1797, pelo químico Joseph Louis Proust. Ele verificou que as massas dos reagentes e as massas dos produtos que participam de uma reacção química obedecem sempre a uma proporção constante. Esta proporção é característica de cada reacção e independente da quantidade das substâncias que são colocadas para reagir. Assim, para a reacção entre hidrogénio e oxigénio formando água, os seguintes valores experimentais podem ser obtidos:

<i>Experimento</i>	<i>hidrogénio (g)</i>	<i>oxigénio (g)</i>	<i>água (g)</i>
I	10	80	90
II	2	16	18
III	1	8	9
IV	0,4	3,2	3,6

Observe que:

- para cada reacção, a massa do produto é igual à massa dos reagentes, o que concorda com a lei de Lavoisier;
- as massas dos reagentes e do produto que participam das reacções são diferentes, mas as relações massa de oxigénio/massa de hidrogénio, massa de água/massa de hidrogénio e massa de água/massa de oxigénio são sempre constantes.

<i>Experimento</i>	<i>m oxigénio/m hidrogénio</i>	<i>m água/m hidrogénio</i>	<i>m água/oxigénio</i>
I	$8/10 = 8$	$90/10 = 9$	$90/80 = 1,125$
II	$16/2 = 8$	$18/2 = 9$	$18/16 = 1,125$
III	$8/1 = 8$	$9/1 = 9$	$9/8 = 1,125$
IV	$3,2/0,4 = 8$	$3,6/0,4 = 9$	$3,6/3,2 = 1,125$

No caso das reacções de síntese, isto é, aquelas que originam uma substância, a partir de seus elementos constituintes, o enunciado da lei de Proust pode ser o seguinte:

**Lei de Proust:** A proporção, em massa, dos elementos que participam da composição de uma substância é sempre constante e independe do processo químico pelo qual a substância é obtida.

#### 4.3 As leis ponderais e a teoria atômica de Dalton

Na tentativa de explicar as leis de Lavoisier e Proust, em 1803, Dalton elaborou uma teoria atômica, cujo postulado fundamental era que a matéria deveria ser formada por entidades extremamente pequenas, chamadas átomos. Estes seriam indestrutíveis e intransformáveis. A partir dessa ideia, Dalton conseguiu explicar as leis de Lavoisier e Proust:

**Lei de Lavoisier:** Numa reacção química a massa se conserva porque não ocorre criação nem destruição de átomos. Os átomos são conservados, eles apenas se rearranjam. Os agregados atômicos dos reagentes são desfeitos e novos agregados atômicos são formados.

#### 4.4 Equações químicas

Os químicos utilizam expressões, chamadas equações químicas, para representar as reacções químicas.

Para se escrever uma equação química é necessário:

- saber quais substâncias são consumidas (reagentes) e quais são formadas (produtos);
- conhecer as fórmulas dos reagentes e dos produtos;
- escrever a equação sempre da seguinte forma: **Reagentes** => **Produtos**

Quando mais de um reagente, ou mais de um produto, participarem da reacção, as fórmulas das substâncias serão separadas pelo sinal "+";

- se for preciso, colocar números, chamados coeficientes estequiométricos, antes das fórmulas das substâncias de forma que a equação indique a conservação dos átomos. Esse procedimento é chamado balanceamento ou acerto de coeficientes de uma equação.

Utilizando as regras acima para representar a formação da água temos:

- reagentes: hidrogénio e oxigénio;

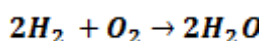
produto: água.

- fórmulas das substâncias:

hidrogênio:  $H_2$ ; oxigênio:  $O_2$ ; água:  $H_2O$

- equação:  $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$
- acerto dos coeficientes: a expressão acima indica que uma molécula de hidrogênio (formada por dois átomos) reage com uma molécula de oxigênio (formada por dois átomos) para formar uma molécula de água (formada por dois átomos de hidrogênio e um de oxigênio). Vemos, portanto, que a expressão contraria a lei da conservação dos átomos (lei da conservação das massas), pois antes da reacção existiam dois átomos de oxigênio e, terminada a reacção, existe apenas um. No entanto, se ocorresse o desaparecimento de algum tipo de átomo a massa dos reagentes deveria ser diferente da massa dos produtos, o que não é verificado experimentalmente.

Por tanto a equação química devidamente acertada que representa a reacção é:



Estudos realizados por Gay-Lussac levaram-no, em 1808, a concluir:

**Lei de Gay-Lussac:** Os volumes de gases que participam de uma reacção química, medidos nas mesmas condições de pressão e temperatura, guardam entre si uma relação constante que pode ser expressa através de números inteiros.

ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

Assim, por exemplo, na preparação de dois litros de vapor d'água devem ser utilizados dois litros de hidrogênio e um litro de oxigênio, desde que os gases estejam submetidos às mesmas condições de pressão e temperatura. A relação entre os volumes dos gases que participam do processo será sempre: 2 volumes de hidrogênio; 1 volume de oxigênio; 2 volumes de vapor d'água. A tabela a seguir mostra diferentes volumes dos gases que podem participar desta reação:  $10 \text{ L de } H_2 + 5 \text{ L de } O_2 \rightarrow 10 \text{ L de } H_2O$

Experimento	Hidrogênio (g)	Oxigênio (g)	Água (g)
I	20 cm <sup>3</sup>	10 cm <sup>3</sup>	20 cm <sup>3</sup>
II	180 cm <sup>3</sup>	90 dm <sup>3</sup>	180
III	82 ml	41 ml	82 ml
IV	126 l	63 l	126 l

Observe que nesta reação o volume do produto (vapor d'água) é menor do que a soma dos volumes dos reagentes (hidrogênio e oxigênio). Esta é uma reação que ocorre com contração de volume, isto é, o volume dos produtos é menor que o volume dos reagentes. Existem reações entre gases que ocorrem com expansão de volume, isto é, o volume dos produtos é maior que o volume dos reagentes, como por exemplo na decomposição do gás amônia:



2volumes

3volumes

1volume

#### 4.5 Tipos de cálculos estequiométricos

Os dados do problema podem vir expressos das mais diversas maneiras: quantidade de matéria (mol), massa, número de moléculas, volume, etc.



Em todos esses tipos de cálculo estequiométrico vamos nos basear nos coeficientes da equação que, como vimos, dão a proporção em moles dos componentes da reação.

Antes de efetuar um cálculo estequiométrico é importante saber calcular a massa atômica das substâncias.

### Cálculo da massa molecular (MM)

Sua unidade é em gramas (g/mol).

Procura-se o valor da massa atômica do elemento químico na tabela periódica e modificam-se as unidades.

Ex.  $H_e = 4,00g$      $Ne = 20,18g$

Se na substância tiver mais de um elemento a massa molar é calculada como o somatório, da massa atômica de cada um deles pelo número de átomos que possuem na fórmula. Se tiver do mesmo, multiplica-se a sua massa pelo número de átomos também.

Ex.

$$H_2O = 16 + 2.(1) = 18g$$

$$C_{12}H_{22}O_{11} = 11.(16) + 22.(1) + 12.(12) = 342g$$

$$Ca(NO_3)_2 = 2.3.(16) + 2.(14) + 40 = 164g$$

#### 4.4.1 Regras para a realização dos cálculos estequiométricos

**1ª** Regra: Escreva corretamente a equação química mencionada no problema (caso ela não tenha sido fornecida);

**2ª** Regra: As reações devem ser balanceadas corretamente (tentativa ou oxirredução), lembrando que os coeficientes indicam as proporções em moles dos reagentes e produtos;

**3ª** Regra: Caso o problema envolva pureza de reagentes, fazer a correção dos valores, trabalhando somente com a parte pura que efetivamente irá reagir;

**4ª Regra:** Caso o problema envolva reagentes em excesso – e isso percebemos quando são citados dados relativos a mais de um reagente – devemos verificar qual deles está correto. O outro, que está em excesso, deve ser descartado para efeito de cálculos.

**5ª Regra:** Relacione, por meio de uma regra de três, os dados e a pergunta do problema, escrevendo corretamente as informações em massa, volume, moles, moléculas, átomos, etc. Lembre-se de não podemos esquecer a relação:

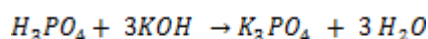
$$1 \text{ mol} = \dots\dots g = 22,4 \text{ L (CNTP)} = 6,02 \cdot 10^{23}$$

**6ª Regra:** Se o problema citar o rendimento da reação, devemos proceder à correção dos valores obtidos.

## Exercícios Resolvidos

### Exercício 1

Dada a seguinte reação:



Calcule: a) O número de moles presentes de cada substância.

b) Se se duplica o número de moles de  $KOH$ , quantos moles de  $H_3PO_4$  se requerem para participar na reação? Quantos moles de  $K_3PO_4$  são produzidos?

c) Ao se combinarem 3 moles de  $H_3PO_4$  com 10 mol de  $KOH$ , depois de concluir a reação, quantos moles de sal e de água se produzem? Quantos moles de cada substância se encontram?

### Solução:

a) Temos os coeficientes estequiométricos: 1 mol de  $H_3PO_4$ , 3 mol de  $KOH$ , 1 mol de  $K_3PO_4$  e 3 mol de  $H_2O$

b) Teremos que duplicar o número de moles de  $H_3PO_4$  para que a proporção seja a mesma, por tanto serão necessários 2 mol de  $H_3PO_4$ .

c) Depois de terem reagido os 3 mol de  $H_3PO_4$  haveram sido consumidos 9 mol de  $KOH$  (segundo a mesma proporção), pelo que restará 1 mol de  $KOH$ . Sendo assim se produziram

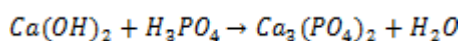
$$3 \text{ mol } H_3PO_4 \cdot \frac{3 \text{ mol } H_2O}{1 \text{ mol } H_3PO_4} = 9 \text{ mol } H_2O$$

$$3\text{mol H}_3\text{PO}_4 \cdot \frac{1\text{mol K}_3\text{PO}_4}{1\text{mol H}_3\text{PO}_4} = 3\text{mol K}_3\text{PO}_4$$

## Exercício 2

Se produz uma reacção entre hidróxido de cálcio e 60 g de ácido fosfórico  $\text{H}_3\text{PO}_4$

(seguindo a seguinte reacção:

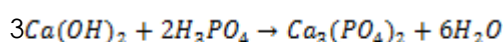


Calcula:

- A massa de fosfato de cálcio que se forma.
- O número de moles de fosfato de cálcio obtidos.
- A massa de hidróxido de cálcio utilizada.
- O número de moles de moléculas de água obtidos.

Solução

Primeiramente deveram acertar a reacção:



a) Determinamos os moles de ácido que reagirão. A massa molecular do ácido fosfórico é:  
 $3 \cdot 1 + 1 \cdot 31 + 4 \cdot 16 = 98 \text{ g/mol}$ :

$$60 \text{ g H}_3\text{PO}_4 \cdot \frac{1 \text{ mol}}{98 \text{ g}} = 0,61 \text{ mol H}_3\text{PO}_4$$

Utilizando as relações estequiométricas:

$$0,61 \text{ mol H}_3\text{PO}_4 \cdot \frac{\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2}{2 \text{ mol H}_3\text{PO}_4} = 0,305 \text{ mol Ca}_3(\text{PO}_4)_2$$

Convertemos a massa do dado obtido. A massa molecular do fosfato de cálcio é:

$$3 \cdot 40 + 2 \cdot 31 + 8 \cdot 16 = 310 \text{ g/mol}$$

$$0,305 \text{ mol } Ca_3 (PO_4)_2 \cdot \frac{310g}{1mol} = 94,55 \text{ g } Ca_3 (PO_4)_2$$

b) Se têm obtido 0,305 moles de fosfato de cálcio.

c) Aplicamos a estequiometria para o hidróxido de cálcio:

$$0,61 \text{ mol } H_3 PO_4 \cdot \frac{3 \text{ mol } Ca(OH)_2}{2 \text{ mol } H_3 PO_4} = 0,92 \text{ mol } Ca (OH)_2$$

Convertemos em massa o dado obtido. A massa molecular do hidróxido de cálcio é:

$$1 \cdot 40 + 2 \cdot 16 + 2 \cdot 1 = 74 \text{ g/mol} :$$

$$0,92 \text{ mol } Ca(OH)_2 \cdot \frac{74g}{1mol} = 68,08 \text{ g } Ca (OH)_2$$

d) As moles de água se obtiveram a partir da estequiometria:

$$0,61 \text{ mol } H_3 PO_4 \cdot \frac{6 \text{ mol } H_2 O}{2 \text{ mol } H_3 PO_4} = 1,83 \text{ mol } H_2 O$$

### Exercício 3

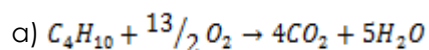
A combustão completa de uma quantidade de butano  $C_4H_{10}$  produz um total de 352 g de  $CO_2$  :

a) Qual é a massa de butano que se queimada?

b) Que volumes de  $\cdot$  (em CNTP) supõem os 352 g?

c) Que volume de ar, em CNTP será necessário para hacer a combustão?

**Solução :**



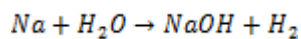
$$b) 352gCO_2 \cdot \frac{1mol}{44g} \cdot \frac{1molC_4H_{10}}{4molCO_2} \cdot \frac{58g}{1mol} = 58gC_4H_{10}$$

$$4mol \cdot \frac{22,4 L}{1mol} = 89,6LCO_2$$

$$c) 1molC_4H_{10} \cdot \frac{6,5molO_2}{1molC_4H_{10}} \cdot \frac{22,4 L}{1mol} \cdot \frac{100 \text{ L ar}}{21L O_2} = 693,33 \text{ Lar}$$

**Exercício 4**

Quando se misturam sódio metálico e água se produz uma reacção que desprende muita energia, tanta que pode produzir-se uma explosão. A reacção que tem lugar é:



- a) Que massa de **NaOH** obtém-se si se poem 15 g de **Na** num recipiente de água?
- b) Que massa de hidrogénio se desprenderá?
- c) Qual será o volume de **H<sub>2</sub>** medido a 0,8 atm e 32 °C?

**Solução:**a)

$$15 \text{ g Na} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{23 \text{ g}} = 0,65 \text{ mol Na}$$

$$0,65 \text{ Na} \cdot \frac{1 \text{ NaOH}}{1 \text{ mol Na}} \cdot \frac{40 \text{ g}}{1 \text{ mol}} = 26 \text{ g NaOH}$$

$$\text{b) } 0,65 \text{ Na} \cdot \frac{0,5 \text{ H}_2}{1 \text{ mol Na}} = 0,325 \text{ mol H}_2$$

$$0,325 \text{ mol H}_2 \cdot \frac{2 \text{ g}}{1 \text{ mol}} = 0,65 \text{ g H}_2$$

$$\text{c) } PV = nRT \rightarrow V = \frac{nRT}{P} = \frac{0,325 \text{ mol} \cdot 305 \text{ K} \cdot 0,082 \frac{\text{atm} \cdot \text{L}}{\text{K} \cdot \text{mol}}}{0,8 \text{ atm}} = 10,16 \text{ L H}_2$$

**Exercício 5**

Um automóvel viaja a 225 milhas com um rendimento de 20,05 milhas/galão de gasolina, quantos quilogramas de  $\text{CO}_2$  se produzem. Supondo que a gasolina está composta por octano,  $\text{C}_8\text{H}_{18}(\text{l})$ , cuja

densidade é 0,69 g/ml.

Solução:

Em primeiro lugar vamos trabalhar com conversão de unidades para homogeneizar o problema :

$$225 \text{ milhas} \cdot \frac{1,609 \text{ km}}{1 \text{ milha}} = 362 \text{ km}$$

$$20,05 \frac{\text{milhas}}{\text{galão}} \cdot \frac{1,609 \text{ km}}{1 \text{ milha}} \cdot \frac{1 \text{ galão}}{3,785 \text{ L}} = 8,52 \frac{\text{km}}{\text{L}}$$

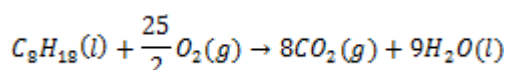
Agora podemos saber que gasolina há consumido para percorrer os 362 km:

$$362 \text{ km} \cdot \frac{1 \text{ L}}{8,52 \text{ km}} = 42,49 \text{ L}$$

Vamos a converter este volume de gasolina em massa, usando o dado da densidade:

$$42,49 \text{ L} \cdot \frac{1000 \text{ mL}}{1 \text{ L}} \cdot \frac{0,69 \text{ g}}{1 \text{ mL}} = 29318 \text{ g}$$

A reação de combustão que se da é a seguinte:



A massa de octano, expressada em moles, é:

$$29318 \text{ g} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{114 \text{ g}} = 257,2 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}$$

A estequiometria da reação é 1:8 entre o octano e o  $\text{CO}_2$  :

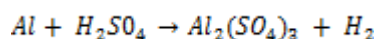
$$257,2 \text{ mol C}_8\text{H}_{18} \cdot \frac{1 \text{ mol C}_8\text{H}_{18}}{8 \text{ mol CO}_2} = 2057,6 \text{ mol CO}_2$$

Somente nos resta converter estes moles de  $\text{CO}_2$  em massa:

$$2057,6 \text{ mol} \cdot \frac{44 \text{ g CO}_2}{1 \text{ mol}} = 90534 \text{ g CO}_2$$

**Exercícios Propostos**

1. Sabendo que 10,8g de alumínio reagiram completamente com ácido sulfúrico, conforme a reação:

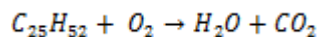


Calcule:

- a) Massa de ácido sulfúrico consumido;  
 b) Massa de sulfato de alumínio produzida;  
 c) Volume de gás hidrogênio liberado, medido nas CNTP.

**R: a) 58,8g b) 68,4g c) 13,44L**

2. Uma vela de parafina queima-se no ar ambiente, para formar água e dióxido de carbono. A parafina é composta por moléculas de vários tamanhos, mais utilizaremos para ela a fórmula  $C_{25}H_{52}$ . Tal reação representa-se pela equação:

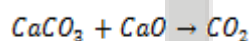


Responda as seguintes questões:

- a) Quantos moles de oxigênio são necessários para queimar um mol de parafina?  
 b) Quanto pesa esse oxigênio?

**R: a) 38 mol, b) 1216 g**

3. 5 Kg de  $CaCO_3$  são totalmente decompostos, conforme a reação química:



Calcule:

- a) Massa em kg de CaO obtido;  
 b) O volume de gás carbônico obtido a 25°C e 1 atm, considerando que o volume molar é de 25 L/mol.

**R: a) 2,8kg b) 1250L**

4. 400g de hidróxido de sódio  $\text{NaOH}$  são adicionados a 504g de ácido nítrico  $\text{HNO}_3$  produzindo nitrato de sódio  $\text{NaNO}_3$  e água. Calcule:

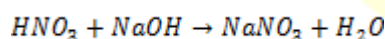
- a) Massa de nitrato de sódio obtida;  
b) Massa do reagente em excesso, se houver.

**R: a) 680g b) 80g de  $\text{NaOH}$ .**

5. Na reação da amônia  $\text{NH}_3$  com oxigênio  $\text{O}_2$  para formar  $\text{NO}$  e água, qual é a massa de água formada a partir de 160 g de  $\text{O}_2$ ? Quantos moles de  $\text{NO}$  são formados a partir da mesma quantidade de  $\text{O}_2$ ?

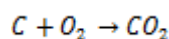
**R: 108 g e 4 mols.**

6. O salitre do Chile  $\text{NaNO}_3$  é utilizado como conservante em embutidos como o presunto, mortadela, etc. Esse composto pode ser obtido pela reação:



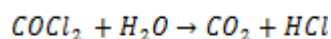
. Sendo a massa de ácido nítrico utilizada igual a 126g, qual a massa de salitre do Chile que obtemos se o rendimento dessa reação, é de 95%? **R: 161,5**

7. Qual o volume, em  $\text{m}^3$ , de gás oxigênio, nas CNTP, necessário para queimar totalmente 1200 kg de carvão, com 90% de pureza, conforme a equação:



**R: 2016  $\text{m}^3$**

8. Fosgênio,  $\text{COCl}_2$ , é um gás venenoso. Quando inalado, reage com água nos pulmões pode produzir ácido clorídrico, que causa graves danos pulmonares, levando, finalmente, à morte. Por causa disto, já foi usado até como gás de guerra. A equação dessa reação é:



. Se uma pessoa inalar 198 mg de fosgênio, qual é a massa em mg de ácido clorídrico que se forma nos pulmões? **R: 146**

9. Calcule o máximo de massa de água que se pode obter partindo de 8,0 g de hidrogênio e 32,0 g de oxigênio. Indique qual o reagente em excesso e quanto sobre do mesmo. **R: 36 g de água; excesso de 4g de  $\text{H}_2$ .**

10. Considere a reação  $\text{FeS} + \text{HCl} \rightarrow \text{FeCl}_2 + \text{H}_2\text{S}$ . Qual é a massa de cloreto ferroso obtida quando 1100 g de sulfeto ferroso de 80 % de pureza reagem com excesso de ácido. **R: 1270 g.**



11.  $\text{CaCO}_3$  contido numa peça de mármore reage com  $\text{HCl}$ . Para formar cloreto de cálcio,  $\text{CaCl}_2$ , água e dióxido de carbono. Se fazem reagir 10 g de mármore com suficiente  $\text{HCl}$  para produzir 3,3 g de gás. Determine a percentagem de  $\text{CaCO}_3$  contida no mármore. **R: 75.**

12. Considere que são queimados 6 gramas de etano com suficiente quantidade de oxigénio para que a combustão seja completa a, a 25 °C e 1 atm. de pressão.

a) Que compostos se formam na reação e que quantidade de moles se produz de cada um deles?

b) Quantos litros de oxigénio são consumidos na combustão?

c) Qual deveria ser a estequiometria da reação para que unicamente se produza monóxido de carbono e água? Calcule as moles de oxigénio que se consumiram na reação. Dados:  $R = 0,082 \text{ atm.L.mol.K}$ ; Massas atómicas  $C = 12,0$ ;  $O = 16$ ;  $H = 1,0$ .

13. Sabendo que a massa molecular do hidrogénio é 2, e a do oxigénio 32, responda e justifique as seguintes questões:

a) Quem ocupará maior volume, 1 mol de hidrogénio ou 1 mol de oxigénio nas mesmas condições de temperatura e pressão?

b) Quem terá maior massa, 1 mol de hidrogénio ou 1 mol de oxigénio?

c) Aonde haverá mais moléculas, em 1 mol de hidrogénio ou em 1 mol de oxigénio?

#### Constantes e factores de conversão úteis:

Constante de Clapeyron:

$$R = 0,082 \text{ atm.L/mol.K}$$

$$R = 8,314 \text{ J/mol.K}$$

$$R = 1,987 \text{ cal/mol.K}$$

Número de Avogadro:  $6,02 \cdot 10^{23}$

Pressão:

$$1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHg} = 101325 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ Torr} = 1 \text{ mmHg}$$

Volume:

$$1\text{mL} = 1\text{cm}^3$$

$$1\text{dm}^3 = 1\text{L} = 1000\text{mL}$$

Massa:

$$1000\text{Kg} = 1\text{ton}$$

$$1\text{Kg} = 1000\text{g}$$

$$1\text{g} = 1000\text{mg}$$

$$\text{Comprimento: } 1\text{nm} = 1.10^{-9}\text{m}$$

**Fórmula para cálculo do número de mols (n):**

$$n = \frac{m}{MM}$$

Onde:

$$n = \text{número de mols}$$

$$m = \text{massa (g)}$$

$$MM = \text{massa molar (g/mol)}$$

## CAPÍTULO V - CINÉTICA QUÍMICA E EQUILÍBRIO QUÍMICO

### 5.1 Cinética química

Definição: é o estudo da velocidade de uma reacção sob várias condições. A palavra cinética sugere movimento ou mudança.

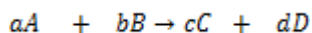
Existem vários motivos para se estudar a velocidade de uma reacção. Existe uma curiosidade intrínseca sobre a razão pela qual as reacções têm velocidades tão diversas. Alguns processos, tais como a fotossíntese, têm lugar numa escala de tempo da ordem de  $10^{-12}$  a  $10^{-6}$  s. Processos como a solidificação do cimento e a conversão da grafite em diamante, levam anos ou milhões de anos para se completarem. Do ponto de vista prático, o conhecimento das velocidades de reacção é útil na concepção de fármacos, no controlo da poluição entre outros. Na maioria dos casos, a indústria química está mais interessada no aumento da velocidade da reacção do que na maximização do seu rendimento.

#### 5.1.1 Velocidade de uma reacção

Definição: é a variação da concentração de um reagente ou produto com o tempo.

Velocidade inicial: velocidade para  $t=0$ , a velocidade da reacção imediatamente após a mistura dos reagentes.

Velocidade média: alteração da concentração de reagentes da reacção num dado intervalo de tempo.



$$v = -\frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{b} \frac{\Delta[B]}{\Delta t} = \frac{1}{c} \frac{\Delta[C]}{\Delta t} = \frac{1}{d} \frac{\Delta[D]}{\Delta t}$$

Unidades:  $\text{mol.l}^{-1}.\text{s}^{-1}$

Onde  $\Delta[A]$ ,  $\Delta[B]$ ,  $\Delta[C]$  e  $\Delta[D]$  são as variações de concentração (molaridade) durante o intervalo de tempo  $\Delta t$ . Uma vez que a concentração de A e de B decresce com o tempo,  $\Delta[A]$  e  $\Delta[B]$  é uma quantidade negativa. Mas como a velocidade de uma reacção é uma quantidade positiva, torna-se necessário introduzir na equação da velocidade um sinal negativo. Por outro lado, a velocidade de formação do produto não necessita do sinal menos, uma vez que  $\Delta[C]$  e  $\Delta[D]$  é uma quantidade positiva

(a concentração de B e C aumenta com o tempo). Estas velocidades são valores médios porque são médias sobre um certo intervalo de tempo  $\Delta t$ .

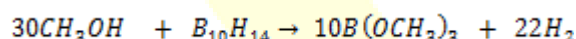
**Velocidade instantânea:** derivada da concentração do reagente em ordem ao tempo.

$$v = -\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{a} \frac{\Delta[A]}{\Delta t} = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt}$$

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}$$

É importante perceber como se obtém experimentalmente a velocidade de uma reacção. Sabe-se, por definição, que para determinar a velocidade de uma reacção tem de se medir a concentração dos reagentes (ou produtos) em função do tempo.

**Exemplo 5.1** – Determine a velocidade da seguinte reacção nos intervalos de 0 – 5min e 5 – 15 min.



Tempo (min)	0	5	15
$[\text{CH}_3\text{OH}]$ (mol/l)	20,0	10,0	2,5

A velocidade desta reacção é expressa como:

$$v = -\frac{1}{30} \frac{\Delta[\text{CH}_3\text{OH}]}{\Delta t} = -\frac{\Delta[\text{B}_{10}\text{H}_{14}]}{\Delta t} = \frac{1}{10} \frac{\Delta[\text{B}(\text{OCH}_3)_3]}{\Delta t} = \frac{1}{22} \frac{\Delta[\text{H}_2]}{\Delta t}$$

Usando os dados listados na tabela acima, podemos calcular a velocidade média durante o intervalo de tempo requerido

Intervalo de 0 – 5 minutos

$$v = -\frac{1}{30} \times \frac{(10 - 20)\text{mol.l}^{-1}}{(5 - 0)\text{min}} = 0,067 \text{ mol.l}^{-1}\text{min}^{-1}$$

Intervalo de 5 – 15 minutos

$$v = -\frac{1}{30} \times \frac{(2,5 - 10)\text{mol.l}^{-1}}{(15 - 5)\text{min}} = 0,025 \text{ mol.l}^{-1}\text{min}^{-1}$$

Assim a velocidade média da reacção nos intervalos de 0 – 5 minutos e 5 – 15 minutos são **0,067 mol.l<sup>-1</sup>min<sup>-1</sup>** e **0,025 mol.l<sup>-1</sup>min<sup>-1</sup>** respectivamente. Note aqui que uma diminuição na concentração dos reagentes conduz a uma redução na velocidade da reacção.

### 5.1.1.2 Factores que afectam a velocidade de uma reacção

**Natureza química dos reagentes:** Normalmente a velocidade segue esta ordem: gases > soluções > líquidos puros > sólidos. Devido ao aumento da superfície específica.

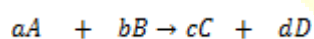
- ✓ **Concentração dos reagentes:** o aumento da concentração dos reagentes tende a aumentar a velocidade da reacção.
- ✓ **Temperatura:** o aumento de temperatura aumenta não só a frequência das colisões entre as moléculas reagentes, mas também a energia com que ocorrem as colisões, aumentando a

velocidade do processo químico. Outra forma de ver a influência da temperatura na velocidade das reacções está na termodinâmica: o aumento de temperatura causa o aumento da energia cinética média das moléculas. Dessa forma, a fracção de moléculas que possuem energia cinética mínima necessária para que ocorra a reacção cresce, elevando a velocidade da reacção.

- ✓ **Presença de catalisadores ou inibidores:** Catalisador acelera e inibidor diminui a velocidade de uma reacção química.

### 5.1.2 Equação cinética

**Equação Cinética = Lei de Velocidade da Reacção:** exprime a relação entre as concentrações dos reagentes e a velocidade da reacção.



$$v = k[A]^x[B]^y$$

Onde x e y são números, que têm de ser determinados experimentalmente. Note que em geral, x e y não são iguais aos coeficientes estequiométricos a e b. Pode-se usar a equação cinética para calcular a velocidade da reacção quando se conhece os valores de x, y e k, bem como as concentrações de A e B.

**Constante de velocidade (k):** constante de proporcionalidade entre a velocidade da reacção e a concentração dos reagentes.

- ✓ k é independente da concentração dos reagentes.
- ✓ k é dependente da temperatura.

### 5.1.3 Ordem da reacção

**Ordem parcial:** potência a que a concentração de um dado reagente se encontra elevada na equação cinética da reacção.

- ✓ Para a equação cinética acima: a reacção é de ordem x em relação a A, e ordem y em relação a B.

**Ordem global:** soma dos valores das potências a que as concentrações de reagentes se encontram elevadas na equação cinética da reacção.

- ✓ Para a equação cinética acima: ordem da reacção = x + y
- ✓ A ordem da reacção é sempre definida em relação às concentrações dos reagentes (e não dos produtos).
- ✓ A ordem da reacção tem de ser determinada experimentalmente.

- ✓ Não existe nenhuma relação entre os coeficientes estequiométricos da equação da reacção e os expoentes  $x$  e  $y$ .

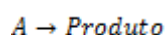
A ordem de uma reacção apresenta um significado sob a velocidade da reacção, assim em função do expoente podemos ter as conclusões listadas na tabela abaixo.

Ordem da Reacção	
Expoente	Significado
Nº inteiro	A velocidade da reacção aumenta com o aumento da concentração do reagente.
Nº fraccionário	
Nº negativo	À medida que a concentração da espécie aumenta, a velocidade da reacção diminui.
Zero	A velocidade da reacção é independente da concentração do reagente.

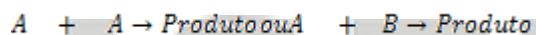
Para algumas reacções a equação cinética é tão complexa que não é possível definir uma ordem.

#### 5.1.4 Relação entre a concentração de reagente e o tempo

**Reacção de 1ª ordem:** reacção cuja velocidade depende da concentração de reagente elevada à potência unitária.



**Reacção de 2ª ordem:** reacção cuja velocidade depende da concentração de reagente elevada ao quadrado ou das concentrações de dois reagentes diferentes, cada uma delas elevada à unidade.



À medida que a reacção avança, a concentração do(s) reagente(s) diminui. Uma outra medida da velocidade de reacção que relaciona a concentração com o tempo é o Tempo (ou período) de meia-vida (ou de semitransformação).

**Tempo de meia-vida ( $t_{1/2}$ ):** tempo necessário para que a concentração de um reagente diminua para a metade do seu valor inicial.

As reacções de 1ª e 2ª ordem são as mais comuns mas podemos encontrar reacções de ordem diferente.

### Ordens de reacção mais comuns

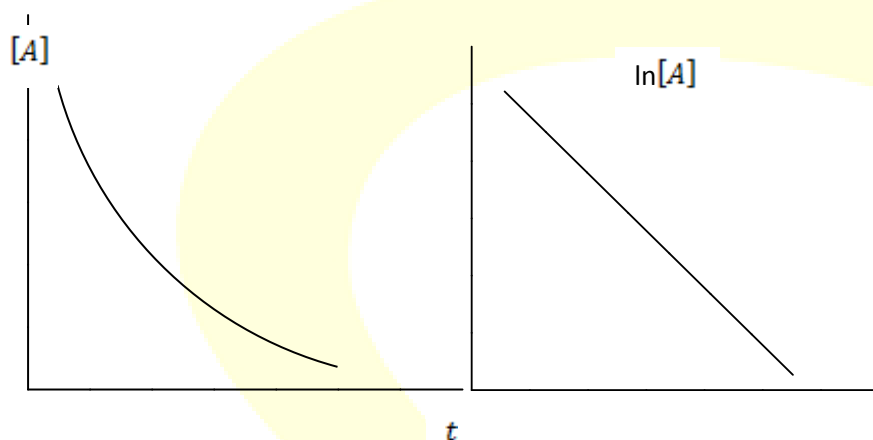
Ordem	Equação Cinética	Equação Concentração - Tempo	Tempo de meia Vida
0	$v = k$	$[A] = [A]_0 - kt$ ✓ Relação linear: $y = mx + b$ $y = [A]; \quad x = t;$ $m = -k; b = [A]_0$ ✓ Gráfico: $[A] \text{ vs } t$ ✓ Recta de declive: -k	$t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k}$  ✓ Dependente da Concentração inicial do reagente.
1	$v = k[A]$	$\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$ ✓ Relação linear: $y = mx + b$ $y = \ln[A]; \quad x = t;$ $m = -k; \quad b = \ln[A]_0$ ✓ Gráfico: $\ln [A] \text{ vs } t$ ✓ Recta de declive: -k	$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k} = \frac{0,693}{k}$ ✓ Independente da Concentração inicial do reagente.
2	$v = k[A]^2$	$\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt$ ✓ Relação linear: $y = mx + b$ $y = 1/[A]; \quad x = t;$ $m = k; \quad b = 1/[A]_0$ ✓ Gráfico: $1/[A] \text{ vs } t$ ✓ Recta de declive: k	$t_{1/2} = \frac{1}{k[A]_0}$ ✓ Dependente da Concentração inicial do reagente.
	$v = k[A][B]$	$\ln \left( \frac{[A]_0[B]}{[A][B]_0} \right) = ([B]_0 - [A]_0)kt$	

- ✓ As reacções de ordem zero são muito raras, normalmente ocorrem em gases.
- ✓ Para gases substitui-se  $[A]$  e  $[A]_0$  por  $P$  e  $P_0$  respectivamente.
- ✓ Reacções rápidas k grande:  $t_{1/2}$  pequeno.
- ✓ Reacções lentas k pequeno:  $t_{1/2}$  grande.

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## GRÁFICOS

**REACÇÃO DE 1ª ORDEM:** Comportamentos característicos de uma reacção de 1ª ordem.

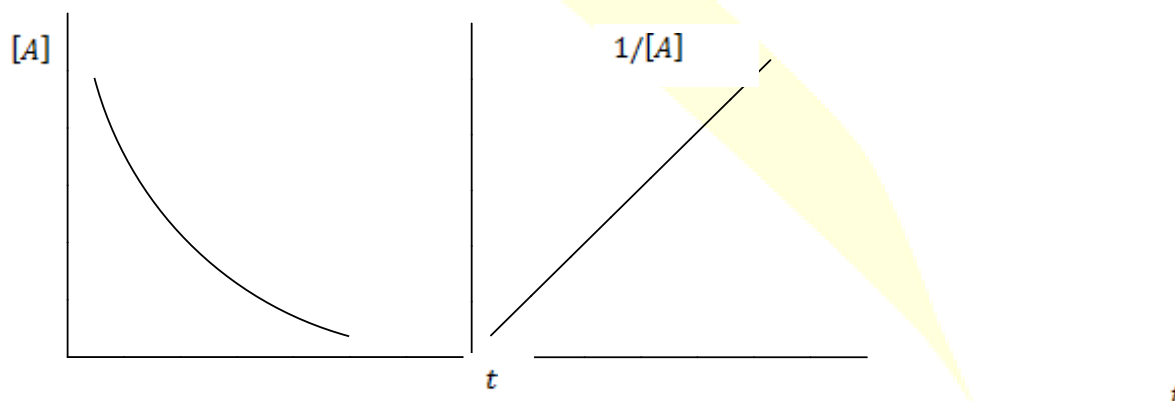


✓ Variação de [reagente] com o tempo

✓ Relação linear de  $\ln[A]$  em função do tempo

REAÇ

**REAÇÃO DE 2ª ORDEM:** Comportamentos característicos de uma reacção de 2ª ordem.

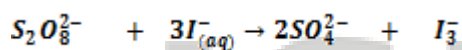


✓ Variação de [reagente] com o tempo;

✓ Relação linear de  $1/[A]$  em função do tempo;

Exe

**Exemplo 5.2** – A reacção entre o ião peroxidissulfato ( $S_2O_8^{2-}$ ) e o ião  $I^-$  é descrita por:



- Determine a lei de velocidade;
- Calcule a constante de velocidade para esta reacção a partir dos seguintes resultados, obtidos a uma mesma temperatura;

Experiência	$[S_2O_8^{2-}]$ (M)	$[I^-]$ (M)	Velocidade (M/s)
1	0,04	0,017	$1,1 \cdot 10^{-4}$
2	0,04	0,0085	$5,5 \cdot 10^{-5}$
3	0,08	0,0085	$1,1 \cdot 10^{-4}$



São dadas três conjuntos de valores de concentração e de velocidades de reacção e pretende-se determinar a lei de velocidade e o valor da constante de velocidade para a reacção.

a) A lei de velocidade é:

$$v = k[S_2O_8^{2-}]^x[I^-]^y$$

Para as três experiências temos o seguinte:

$$1. \quad 1,1 \cdot 10^{-4} = k(0,04M)^x(0,017M)^y$$

$$2. \quad 5,5 \cdot 10^{-5} = k(0,04M)^x(0,0085M)^y$$

$$3. \quad 1,1 \cdot 10^{-4} = k(0,08M)^x(0,0085M)^y$$

Fazendo a razão das velocidades de reacção para estas duas experiências teremos:

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{1,1 \cdot 10^{-4}}{5,5 \cdot 10^{-5}} = \frac{k(0,04M)^x(0,017M)^y}{k(0,04M)^x(0,0085M)^y}$$

$$2 = \frac{(0,017M)^y}{(0,0085M)^y}$$

$$2 = 2^y \rightarrow y = 1$$

$y = 1$  ou seja, a reacção é de 1ª ordem em relação ao ião iodeto  $I^-$ .

Para determinar o valor de  $x$ , fazemos a razão entre  $v_3/v_2$

$$\frac{v_3}{v_2} = \frac{1,1 \cdot 10^{-4}}{5,5 \cdot 10^{-5}} = \frac{k(0,08M)^x(0,0085M)^y}{k(0,04M)^x(0,0085M)^y}$$

$$2 = 2^x \rightarrow x = 1$$

$x = 1$  ou seja, a reacção é de 1ª ordem em relação ao ião peroxidissulfato. O que mostra que a ordem global é dada (1+1) ou seja a reacção é de 2ª ordem global.

b) A constante de velocidade  $k$  pode agora ser calculada usando os valores de qualquer uma das experiências. Rearranjando a expressão da lei de velocidade, obtém-se:

$$k = \frac{v}{[S_2O_8^{2-}]^x[I^-]^y}$$

$$k = \frac{1,1 \cdot 10^{-4}}{(0,08M)^x(0,0085M)^y} \rightarrow k = 0,16 M^{-1} s^{-1}$$

### 5.1.5 Teorias de velocidades das reacções

Geralmente a velocidade de uma reacção aumenta com o aumento da temperatura.

**Regra empírica:** a velocidade da reacção aumenta por um factor de cerca de 2 ou 3 por cada 10°C de aumento de temperatura (para reacções com  $E_a = 50 kJ mol^{-1}$ ).

A teoria cinética dos gases postula que as moléculas de um gás colidem frequentemente umas com as outras. Assim, será logico admitir o que é em geral verdadeiro, que as reacções químicas ocorrem como consequência de colisões entre moléculas dos reagentes.

**Teoria das colisões:** a velocidade de uma reacção é proporcional ao número de colisões efectivas por segundo entre as moléculas do reagente.

**Colisão efectiva:** colisão que resulta na produção de moléculas de produto.

Para que uma reacção ocorra tem de existir uma dada:

- ✓ Orientação Molecular: quando as moléculas de reagente colidem têm de estar correctamente orientadas para que a reacção ocorra.
- ✓ Energia de Activação: para que as moléculas que colidem possam reagir têm de possuir uma energia cinética total maior ou igual do que a energia de activação.

**Energia de activação ( $E_a$ ):** energia mínima necessária para que se inicie uma dada reacção.

- ✓ Para que as mesmas condições de concentração e temperatura: quanto menor  $E_a$ , maior a velocidade da reacção.
- ✓ Para a mesma  $E_a$ : quanto maior a temperatura, maior a velocidade da reacção.

**Teoria do Estado de Transição = Teoria do Complexo Activado**

**Complexo activado:** espécie formada transitoriamente pelas moléculas de reagentes, como resultado da colisão, antes da formação do(s) produto(s).

### 5.1.6 Equação de Arrhenius

A dependência da constante de velocidade de uma reacção, relativamente à temperatura pode ser expressa pela seguinte equação, conhecida como equação de Arrhenius.

Equação de Arrhenius:  $k = Ae^{-E_a/RT}$

Onde:

$E_a$  – Energia de activação ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )

A – Factor de frequência (constante de proporcionalidade), que representa a frequência de colisões, e pode ser considerado constante para um dado sistema reacional numa gama de temperaturas bastante alargada.

R – Constante dos gases perfeitos.

T – Temperatura.

- ✓ Factor  $e^{-E_a/RT}$  é sempre menor que 1: corresponde à fracção de moléculas com energia mínima necessária para a reacção ocorrer.
- ✓ A equação de Arrhenius mostra que a constante de velocidade é directamente proporcional a **A** e, portanto, à frequência das colisões.

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

**Forma logarítmica da equação de Arrhenius**

$$\ln k = \left(-\frac{E_a}{R}\right)\left(\frac{1}{T}\right) + \ln A$$

✓ Relação linear:  $y = mx + b$

$$y = \ln k; \quad x = 1/T; m = -E_a/R; \quad b = \ln A$$

✓ Gráfico:  $\ln k$  vs  $1/T$

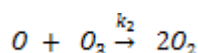
✓ Recta de declive:  $-E_a/R$

✓ Ordenada na origem  $\ln A$

**Forma alternativa equação de Arrhenius**

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

**Exemplo 5.3** – Dados a energia de activação  $E_a = 19,1 \text{ kJ mol}^{-1}$ , calcule o valor de  $k$  da reacção abaixo, à temperatura de  $100^\circ\text{C}$ , a partir do seu valor a  $298\text{K}$  que é igual a  $5,1 \cdot 10^6 \text{ l. mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ .



Para calcular constante de velocidade  $k$  à  $100^\circ\text{C}$ , podemos recorrer a forma alternativa da equação de Arrhenius que relaciona a energia de activação com duas constantes de velocidades.

$$\ln \frac{k_1}{k_2} = \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

Substituindo os valores dados temos:

$$\ln \frac{5,1 \cdot 10^6 \text{ l. mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}}{k_2} = \frac{19,1 \cdot 10^3 \text{ J mol}^{-1}}{8,3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}} \left( \frac{1}{373\text{K}} - \frac{1}{298\text{K}} \right)$$

$$\ln 5,1 \cdot 10^6 \text{ l. mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} - \ln k_2 = -1,55$$

$$\ln k_2 = 16,99 \rightarrow k_2 = e^{16,99} \rightarrow k_2 = 2,4 \cdot 10^7 \text{ l. mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

**5.1.7 Mecanismos reaccionais**

Uma equação química global com estequiometria correcta não nos dá grande informação sobre o modo como se processa uma determinada reacção química. Em muitos casos, essa equação não é mais do que a soma de um conjunto de reacções simples usualmente chamadas de reacções elementares ou etapas elementares.

**Reacção elementar:** soma de um conjunto de reacções simples que representam o progresso da reacção global ao nível molecular.

**Mecanismo da reacção:** conjunto de passos individuais que conduzem à reacção global observada. O mecanismo da reacção é comparável ao itinerário seguido durante uma viagem, enquanto a equação química global especifica apenas a origem e o destino da viagem.

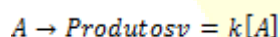
**Espécie intermediária:** espécie que surge no mecanismo da reacção, isto é nas etapas elementares, mas não na equação que representa o processo global.

**Molecularidade:** número de espécies (moléculas, iões ou radicais) que intervêm numa etapa elementar.

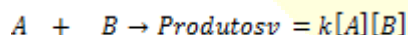
- ✓ A molecularidade de uma reacção elementar é igual à sua ordem; mas não existe qualquer relação entre a molecularidade e a ordem para a reacção global.

O conhecimento das etapas elementares de uma reacção permite-nos deduzir a sua lei de velocidade.

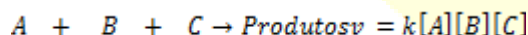
**Reacção unimolecular:** etapa elementar em que participa apenas uma molécula de reagentes.



**Reacção bimolecular:** etapa elementar em que estão envolvidas duas espécies.

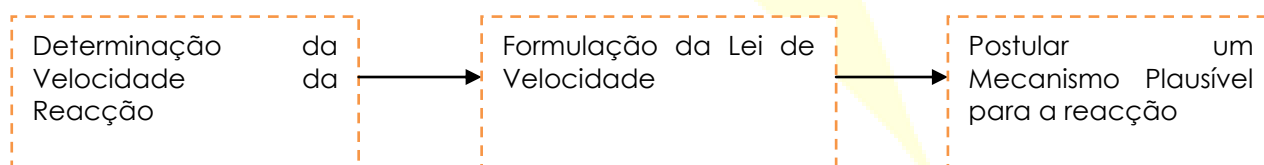


**Reacção trimolecular:** reacção que envolve a participação de três moléculas numa etapa elementar.



**Passo determinante da velocidade de uma reacção:** passo mais lento da sequência de etapas que conduz à formação de produtos.

#### Sequência de etapas no estudo do mecanismo de uma reacção



A soma das etapas elementares tem de reproduzir a equação global da reacção.

A equação cinética correspondente ao passo determinante da velocidade deve ser idêntica à equação cinética determinante experimentalmente.

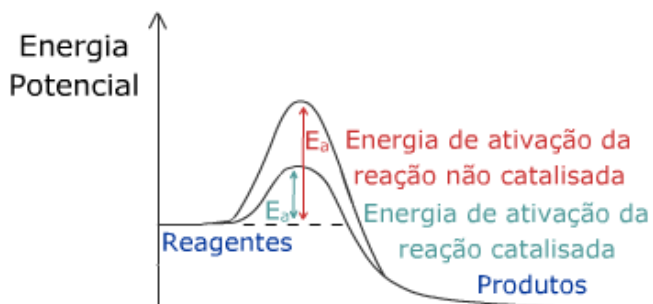
#### 5.1.8 Catálise

**Catalisador:** espécie que aumenta a velocidade de uma reacção química sem ser consumida durante essa reacção.

- ✓ Altera o mecanismo da reacção.
- ✓ Pode reagir de modo a formar um intermediário, mas é regenerado numa etapa subsequente da reacção.
- ✓ Não entra na reacção global.
- ✓ Permite um conjunto de etapas alternativas, com uma cinética mais favorável do que as etapas que ocorrem na sua ausência.

$$v_{\text{reação catalisada}} = v_{\text{reação não catalisada}}$$

O catalisador baixa a energia de activação.



#### Reacção catalisada

- ✓ Produtos mais estáveis que reagentes; **res:**
- ✓ Reacção exotérmica

#### Reacção não catalisada

- ✓ Reagentes mais estáveis que produtos;
- ✓ Reacção endotérmica

O  
catalis

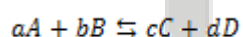
ador não afecta nem a energia total dos reagentes nem a energia total dos produtos.

**Catálise homogénea:** os reagentes, produtos e catalisador encontram-se dispersos numa única fase, normalmente líquida. A catálise ácida e a catálise básica constituem os mais importantes tipos de catálise homogénea em solução líquida.

**Catálise heterogénea:** os reagentes e o catalisador encontram-se em fases diferentes. Normalmente o catalisador é uma superfície sólida e os reagentes são gases ou líquidos. A catálise heterogénea é de longe o mais importante tipo de catálise na indústria química, especialmente na síntese de produtos químicos essenciais.

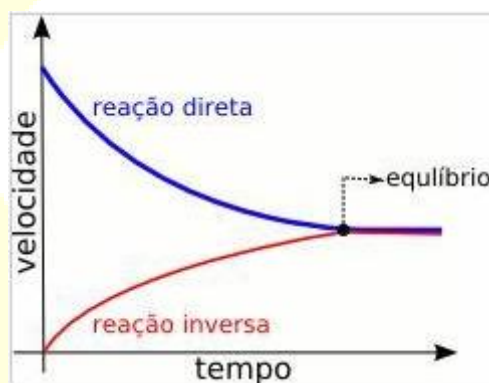
## 5.2 Equilíbrio químico

Em tese, qualquer reacção química pode ocorrer nos dois sentidos, até certo ponto. Na prática, isso não se verifica na maioria das vezes. Com frequência, a força motriz de uma reacção favorece um sentido de uma forma tão intensa que a reacção no sentido oposto não pode ser medida. A força motriz de uma reacção é a variação na energia livre que acompanha a reacção, e é uma medida exacta da tendência de ser completada.



**Definição:** situação de equilíbrio numa reacção química em que não se observa nenhuma transformação efectiva (embora uma actividade contínua se verifique ao nível molecular).

- Verifica-se uma situação de equilíbrio quando as velocidades das reacções directa e inversa são iguais e as concentrações dos reagentes e dos produtos não variam com o tempo.



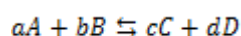
Velocidade das reacções directa e inversa em função do tempo

- No equilíbrio, a reacção processa-se simultaneamente nos dois sentidos (directo e inverso) com a mesma velocidade.

### 5.2.1 Constante de equilíbrio

Para estudar o estado de um sistema, precisa-se definir o quociente de reacção  $K$ .

**Lei do equilíbrio químico:** o quociente entre o produto das concentrações dos produtos da reacção (elevadas aos coeficiente estequiométricos) é constante.



$$\text{Constante de equilíbrio: } K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Relaciona as concentrações dos reagentes e dos produtos no equilíbrio.

- ✓ O valor de  $K$  é característico de qualquer estado de equilíbrio do sistema, dependendo da natureza da reacção e da temperatura.
- ✓  $K$  é uma grandeza adimensional quando não há variação da quantidade de substância durante a reacção;  $K$  é uma grandeza dimensional quando há variação de quantidade de substância durante a reacção.

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

Para a reacção:  $cC + dD \rightleftharpoons aA + bB$  temos:  $K' = \frac{[A]^a [B]^b}{[C]^c [D]^d}$

Logo  $K' = K^{-1}$

Para a reacção:  $ncC + ndD \rightleftharpoons naA + nbB$  temos:  $K^n$

### Ordem de Grandeza de K

$K \gg 1$	Quantidade de reagentes é inferior à quantidade de produtos presentes no equilíbrio.
$K \ll 1$	Quantidade de reagentes é superior à quantidade de produtos presentes no equilíbrio.
$K = 1$	Quantidade de reagentes e produtos presentes no equilíbrio são da mesma ordem de grandeza.

- ✓ Quanto maior for o valor de K, mais favorecida é a formação de produtos no equilíbrio.

**Exemplo 5.4** – A 1130°C, a constante de equilíbrio  $K_c$  da reacção

$2H_2S_{(g)} \rightleftharpoons 2H_{2(g)} + S_{2(g)}$  é  $2,25 \cdot 10^{-4}$ . Se  $[H_2S] = 4,84 \cdot 10^{-3} M$  e  $[S_2] = 2,34 \cdot 10^{-3} M$ . Calcule  $[S_2]$ .

A expressão da constante de equilíbrio desta reacção é dada pela seguinte equação:

$$K_c = \frac{[H_2]^2 [S_2]}{[H_2S]^2}$$

Substituindo os valores dados temos:

$$2,25 \cdot 10^{-4} = \frac{[H_2]^2 (2,3 \cdot 10^{-3} M)}{(4,84 \cdot 10^{-3} M)^2} \rightarrow [H_2]^2 = 2,25 \cdot 10^{-6} M \rightarrow [H_2] = 1,50 \cdot 10^{-3} M$$

**Equilíbrio homogéneo:** equilíbrio químico que ocorre em reacções que todas as espécies envolvidas se encontram na mesma fase. Um exemplo de um equilíbrio homogéneo é a dissociação de  $N_2O_4$ .

Reacções em Fase Gasosa:  $N_2O_{4(g)} \rightleftharpoons 2NO_{2(g)}$

$$K_p = \frac{P_{NO_2}^2}{P_{N_2O_4}} K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$$

Com

$$\Delta n = \{ \text{total produto no estado gasoso} \} - \{ \text{número total reagentes no estado} \}$$

Onde:

$P_i$  = pressão parcial de i (atm);

$K_p$  = constante de equilíbrio expressa em termos de pressões;

$K_c$  = constante de equilíbrio expressa em termos de concentrações;

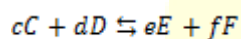
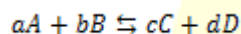
$R$  = constante dos gases =  $0,08206 \text{ Latm mol}^{-1} K^{-1}$ .

- ✓ Solventes: as concentrações de solvente nunca aparecem na expressão da constante de equilíbrio.
- ✓ Nunca se inclui  $[H_2O]$  na expressão da constante de equilíbrio porque, por convenção, este valor está incluído no valor de K.

**Equilíbrio heterogéneo:** equilíbrio químico que ocorre em reacções envolvendo reagentes e produtos em fases diferentes.

- ✓ Reacções Com Sólidos Puros (Ou Líquidos Puros): a concentração molar de um sólido puro (ou de um líquido puro) nunca aparece na expressão da constante de equilíbrio.

**Equilíbrio múltiplo:** se uma reacção puder ser expressa como soma de duas ou mais reacções, a constante de equilíbrio da reacção global é dada pelo produto das constantes de equilíbrio das reacções individuais.



Assim tem-se:

$$K' = \frac{[A]^a [B]^b}{[C]^c [D]^d} K'' = \frac{[E]^e [F]^f}{[C]^c [D]^d} K = \frac{[E]^e [F]^f}{[A]^a [B]^b} K = K' \times K''$$

### Método de cálculo das concentrações de equilíbrio ou do K:

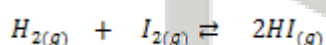
Se conhecermos a constante de equilíbrio de uma dada reacção, podemos calcular as concentrações da mistura no equilíbrio a partir do conhecimento das concentrações iniciais. Assim, para o cálculo das concentrações de equilíbrio devemos:

- ✓ Expressar as concentrações de todas as espécies no equilíbrio em termos das concentrações iniciais e de uma única incógnita  $x$ , que representa a variação da concentração:

$A \rightleftharpoons B$		
Início	$[A]_0$	0
Reacção	$-x$	$+x$
Equilíbrio	$[A]_0 - x$	$x$

- ✓ Escrever a constante de equilíbrio em termos das concentrações no equilíbrio; sabendo o valor de  $K$ , resolver em ordem a  $x$ ; sabendo o valor das concentrações no equilíbrio, calcular o  $K$ .

**Exemplo 5.5** – Durante uma experiência no Laboratório de Química do ISPTec, introduziu-se num recipiente de aço inox, com capacidade de 3L, uma mistura de 1,5mol de  $H_2$  e 1,5mol de  $I_2$  à temperatura de 430°C. A constante de equilíbrio da reacção:



é 54,3, a esta temperatura. Calcule as concentrações de  $[H_2]$ ,  $[I_2]$  e  $[HI]$  no equilíbrio.

São dadas as quantidades iniciais dos gases (em moles) num recipiente de volume conhecido (3L), por isso pode-se calcular as suas concentrações molares, assim teremos  $1,5/3 \text{ mol/l} = 0,5M$ . Inicialmente, não se encontra presente nenhum HI, o sistema não pode estar em equilíbrio no início. Assim, certa quantidade de  $H_2$  reage com a mesma quantidade  $I_2$  para formar HI até estabelecer o equilíbrio.



De acordo com a estequiometria da reacção, 1 mol de  $H_2$  reage com 1 mol de  $I_2$  para formar 2 mol de HI. Seja x a quantidade de que diminui a concentração mol/l de  $H_2$  e de  $I_2$  no equilíbrio. Então a concentração de HI no equilíbrio deve ser 2x.

$H_{2(g)} + I_{2(g)} \rightleftharpoons 2HI_{(g)}$			
Início (M)	0,5	0,50	0,00
Reacção (M)	-X	-X	+2
Equilíbrio	0,50 - X	0,50 - X	2X

A constante de equilíbrio é dada pela seguinte equação:

$$K_c = \frac{[HI]^2}{[H_2][I_2]}$$

Substituindo, obtemos:

$$54,3 = \frac{(2X)^2}{(0,50 - X)(0,50 - X)}$$

Determinando a raiz quadrada de ambos os membros da equação obtemos:

$$7,37 = \frac{2X}{(0,50 - X)} \rightarrow X = 0,393M$$

No equilíbrio as concentrações são:

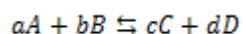
$$[H_2] = (0,50 - 0,393)M = 0,107M$$

$$[I_2] = (0,50 - 0,393)M = 0,107M$$

$$[HI] = 2 \times 0,393M = 0,786M$$

### 5.2.2 Previsão do sentido de uma reacção

**Quociente reaccional (Q):** quantidade que se obtém substituindo as concentrações iniciais na expressão da constante de equilíbrio.



$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

As expressões de Q não são necessariamente concentrações de equilíbrio (como para K).

**Previsão do sentido de uma reacção**

$Q < K$	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ A razão entre as concentrações iniciais dos produtos e as concentrações iniciais dos reagentes é muito pequena.</li> <li>✓ O sistema evolui no sentido directo (<math>\rightarrow</math>).</li> </ul>
$Q = K$	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ As concentrações iniciais dos produtos e as concentrações iniciais dos reagentes são as concentrações de equilíbrio.</li> <li>✓ O sistema está em equilíbrio (<math>\rightleftharpoons</math>).</li> </ul>
$Q > K$	<ul style="list-style-type: none"> <li>✓ A razão entre as concentrações iniciais dos produtos e as concentrações iniciais dos reagentes é muito grande.</li> <li>✓ O sistema evolui no sentido inverso (<math>\leftarrow</math>).</li> </ul>

**5.2.4 Factores que afectam o equilíbrio químico**

O equilíbrio químico representa um balanço entre a reacção directa e a inversa. Na maioria dos casos este equilíbrio é bastante sensível. A ocorrência de variações nas condições experimentais pode perturbar o equilíbrio e deslocar a respectiva posição, dando origem a uma maior ou menor quantidade do produto desejado. Quando se diz que a posição do equilíbrio se desloca para a direita, por exemplo, isso significa que a reacção que ocorre é da esquerda para a direita.

Os factores que determinam um equilíbrio são:

- ✓ Concentração
- ✓ Volume
- ✓ Pressão
- ✓ Temperatura

Há uma regra geral que ajuda a prever o sentido em que uma dada reacção evoluirá para o equilíbrio quando ocorre uma variação de concentração, pressão, volume ou temperatura. Esta regra, conhecida por **Princípio de Le Chatelier**, diz “uma alteração em qualquer dos factores que determinam um equilíbrio provoca um ajuste no sistema de modo a reduzir o efeito da alteração”.

**1. Variação da concentração**

Aumento da [Reagentes] ou Diminuição Da [Produtos]	Deslocamento do equilíbrio no sentido directo ( $\rightarrow$ )
Aumento da [Produtos] ou Diminuição da [Reagentes]	Deslocamento do equilíbrio no sentido inverso ( $\leftarrow$ )

**2. Variação do volume e da pressão**

Aumento do volume $\leftrightarrow$ Diminuição da pressão	Deslocamento do equilíbrio no sentido de um aumento do número total de moles de gases.
Aumento da pressão $\leftrightarrow$ Diminuição do volume	Deslocamento do equilíbrio no sentido de uma diminuição do número total de moles de gases.

- ✓ Quanto maior for a pressão, menor é o volume (e vice-versa).

**3. Variação da temperatura**

Aumento da temperatura	Favorece reacções endotérmicas.
Diminuição da temperatura	Favorece reacções exotérmicas.

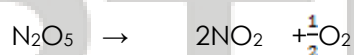
- ✓ Uma variação na temperatura altera a constante de equilíbrio.

**EXERCÍCIOS PROPOSTOS****CINÉTICA QUÍMICA****Expressões da lei e velocidade**

1. Se as concentrações fossem medidas em mols por litro e o tempo em segundo, quais seriam as unidades das constantes de velocidade para os seguintes casos:

- Uma reacção de primeira ordem?
- Uma reacção da segunda ordem?
- Uma reacção da terceira ordem?

2. A decomposição do  $\text{N}_2\text{O}_5$  é, frequentemente, escrita como:



Se esta reacção fosse de primeira ordem e se o tempo de meia-vida, a  $25^\circ\text{C}$ , fosse igual a 5,71 horas, qual seria o valor da constante de velocidade  $k$  desta reacção em unidades de  $\text{s}^{-1}$ ? Se a reacção fosse expressa por:



Qual seria a constante de velocidade de reacção, em unidade de  $\text{s}^{-1}$ .

3. Considerando-se a reacção,  $2\text{O}_3 \rightarrow 3\text{O}_2$

Qual é a relação entre  $d[O_3]/dt$ ,  $d[O_2]/dt$  e a velocidade da reação da maneira como foi escrita?

**Resposta:**  $Velocidade = -(1/2) d[O_3]/dt = (1/2) d[O_3]/dt = (1/3) d[O_2]/dt =$

4. Determinou-se que a lenta oxidação do  $Fe^{2+}$  pelo  $O_2$  dissolvido na solução, segue a lei de velocidade  $-\frac{d[Fe^{2+}]}{dt} = k[Fe^{2+}]^2 P(O_2)$ .

A constante de velocidade  $k$  é igual a  $3,7 \times 10^{-3} \text{ L mol}^{-1} \text{ atm h}^{-1}$ , quando a reação é efetuada em  $HClO_4$  0,5 M e à temperatura de  $35^\circ\text{C}$ . Considere que  $P(O_2)$  é constante e igual a 0,2 atm e calcule o tempo de meia-vida (em dias) de uma solução 0,1 M de  $Fe^{2+}$ , em  $HClO_4$  0,5 M, expostos ao ar. Quantos dias seriam necessários para que a concentração de  $Fe^{2+}$  diminuísse para 0,01 M, à temperatura constante de  $35^\circ\text{C}$ ? **Resposta:**  $5,6 \times 10^2$  dias,  $5,1 \times 10^3$  dias

5. As constantes de velocidade de reação



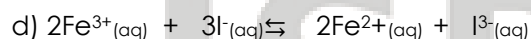
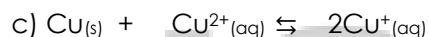
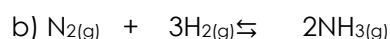
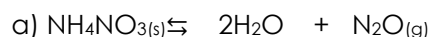
em função da temperatura, são dadas tabela abaixo.

T(K)	k(S <sup>-1</sup> )	T(K)	k(S <sup>-1</sup> )
338	$4,87 \times 10^{-3}$	308	$1,35 \times 10^{-4}$
328	$1,50 \times 10^{-3}$	298	$3,46 \times 10^{-5}$
318	$4,98 \times 10^{-4}$	273	$7,87 \times 10^{-7}$

Use os valores das constantes de velocidades, à 338 e 273 K, para calcular a  $E_a$  da reação. **Resposta:**  $104 \text{ kJ mol}^{-1}$

### EQUILÍBRIO QUÍMICO

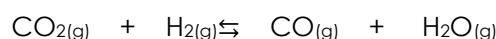
1. Dê os quocientes de reação para cada uma das seguintes reações. Para gases, use as pressões  $P_i$  e para os solutos, as concentrações  $[i]$ .



2. As constantes de equilíbrio para as seguintes reações foram medidas a 823 K:

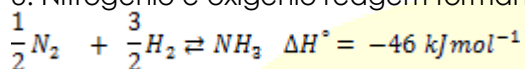


A partir desses dados, calcule a constante de equilíbrio da reação



medidas a 823 K. **Resposta:** 0,137

3. Nitrogênio e oxigênio reagem formando amônia segunda reação

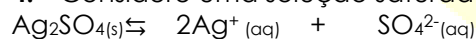


Se uma mistura dos três gases estivesse em equilíbrio, qual seria o efeito sobre a quantidade de  $NH_3$  se ocorresse o seguinte:

- a) A mistura fosse comprimida.
- b) A temperatura fosse elevada.
- c) Mais  $H_2$  fosse introduzido.

**Resposta: a) Mais formado; b) Menos formado; c) Mais formado**

4. Considere uma solução saturada com  $Ag_2SO_4(s)$ , de acordo com o equilíbrio



Como a quantidade de  $Ag_2SO_4$  sólido em equilíbrio seria afetada em cada uma das seguintes situações?

- a) Adição de mais água
- b) Adição de  $AgNO_3 (s)$
- c) Adição de  $NaNO_3 (s)$
- d) Adição de  $NaCl(s)$  (Nota: precipitará algum  $AgCl$ .)

**Resposta: a) Menos sólido; b) Mais sólido; c) Inalterado; d) Menos sólido;**

5. Sabendo-se que  $NO_2$  é vermelho-castanho, enquanto que  $N_2O_4$  é incolor, a pressão parcial de  $NO_2$  pode ser determinada por absorção de luz. Se a  $35^\circ C$  a pressão total de sistema em equilíbrio é de 2,00 atm e  $P_{NO_2} = 0.65$  atm, qual de  $K_p$  nessa temperatura? **Resposta  $K_p = 0,31$ .**

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## CAPÍTULO VI - TEORIAS ACIDO-BASE

### 6.1 Ácidos e bases: uma breve revisão

Ácidos: têm gosto azedo e fazem com que os corantes mudem de cor.

Bases: têm gosto amargo e são escorregadias.

O ião  $H^+$  em água

O ião  $H^+_{(aq)}$  é simplesmente um próton sem electrões. (O H tem um próton, um electrão e nenhum neutrão.) Em água, o  $H^+_{(aq)}$  forma aglomerados.

O aglomerado mais simples  $H_3O^+_{(aq)}$ . Aglomerados maiores são  $H_5O_2^+$  e  $H_9O_4^+$ . Geralmente usamos  $H^+_{(aq)}$  e  $H_3O^+_{(aq)}$  de maneira intercambiável.

#### 6.1.1 A definição de Arrhenius

**Ácido:** substância contendo hidrogénio que produz iões hidrogénio ( $H^+$ ) em solução.

**Base:** substância que produz iões hidróxido ( $OH^-$ ) em solução.

A neutralização foi descrita por Arrhenius como a combinação destes iões para formar água:  $H^+_{(aq)} + OH^-_{(aq)} \rightarrow H_2O$

#### 6.1.2 Ácidos e bases de Lewis

O ácido de Brønsted-Lowry é um doador de prótons. Focando nos electrões: um ácido de Brønsted-Lowry pode ser considerado um receptor de par de electrões.

Ácido de Lewis: receptor de par de electrões.

Base de Lewis: doador de par de electrões.

Observe: os ácidos e as bases de Lewis não precisam conter prótons. Consequentemente, a definição de Lewis é a definição mais geral de ácidos e bases.

### 6.1.3 A definição de Bronsted-Lowry

Definição protônica: uma reação ácido-base é uma reação de transferência de prótons.

**a)Ácido:** é uma espécie que tende a doar um próton.

**b)Base:** é uma espécie que tende a receber um próton.

Reações de transferência de prótons; nos focaremos na espécie  $H^+_{(aq)}$ .

Brønsted-Lowry: o ácido doa  $H^+$  e a base recebe  $H^+$ .

A base de Brønsted-Lowry não precisa conter  $OH^-$ .

Considere  $HCl_{(aq)} + H_2O_{(aq)} \rightarrow H_3O^+_{(aq)} + Cl^-_{(aq)}$ :

– o  $HCl$  doa um próton para a água. Consequentemente, o  $HCl$  é um ácido.

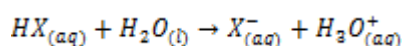
– a  $H_2O$  recebe um próton do  $HCl$ . Consequentemente, a  $H_2O$  é uma base.

A água pode se comportar tanto como ácido quanto como base.

As substâncias anfóteras podem se comportar tanto como ácidos quanto como bases.

### 6.2 Pares ácido-base conjugados

Em qualquer equilíbrio ácido-base tanto a reação direta (para a direita) quanto a reação inversa (para a esquerda) envolve transferências de próton. Por exemplo, considere a reação de um ácido, que denominamos  $HX$ , com água.



Na reação direta  $HX$  doa um próton para  $H_2O$ . Consequentemente,  $HX$  é um ácido de Bronsted-Lowry, e  $H_2O$  é uma base de Bronsted-Lowry. Na reação inversa o íon  $H_3O^+$  doa um próton para o íon  $X^-$ , logo  $H_3O^+$  é o ácido e  $x^-$  é a base. Quando o ácido  $HX$  doa um próton, ele deixa para trás uma substância,  $x^-$ , que pode atuar como uma base.

Semelhantemente, quando  $H_2O$  age como uma base, ela gera  $H_3O^+$ , que pode atuar como um ácido. Um ácido e uma base como  $HX$  e  $X^-$ , que diferem apenas na presença ou ausência de um próton, são chamados par ácido-base conjugado. Cada ácido tem uma base conjugada, formada pela remoção de um próton de seu ácido. Por exemplo,  $OH^-$  é a base conjugada de  $H_2O$ , e  $A^-$  é a base conjugada de  $HX$ . Analogamente, cada base tem associada a ela um ácido conjugado, formado pela adição de um próton à base. Assim,  $H_3O^+$  é o ácido conjugado de  $H_2O$ , e  $HX$  é o ácido conjugado de  $x^-$ .

Em muitas reações ácido-base (transferência de próton), podemos identificar dois conjuntos de pares ácido-base conjugado. Por exemplo, considere a reação entre o ácido nitroso ( $HN0_2$ ) e a água:

O que quer que tenha sobrado do ácido após o protão ter sido doado é chamado de sua base conjugada.

- Similarmente, o que quer que tenha sobrado da base após ela ter recebido o protão é chamado de um ácido conjugado.

- Considere  $HA_{(aq)} + H_2O_{(l)} \rightarrow H_3O^+_{(aq)} + A^-_{(aq)}$

– Após o HA (ácido) perder seu protão ele é convertido em  $A^-$  (base).

Consequentemente o HA e o  $A^-$  são pares ácido-base conjugados.

– Após a  $H_2O$  (base) receber um protão, ela é convertida em  $H_3O^+$  (ácido). Consequentemente, a  $H_2O$  e o  $H_3O^+$  são pares ácido-base conjugados.

- Os pares ácido-base conjugados diferem entre si apenas em um protão.

### 6.3 Produto iónico da água

No estudo das reações ácido-base, a concentração do ião hidrogénio é fundamental; o seu valor indica a acidez ou basicidade de uma solução. Uma vez que apenas uma pequena fração das moléculas da água está ionizada, a concentração da água,  $[H_2O]$ , permanece praticamente inalterada. Portanto, a constante de equilíbrio para a autoionização da água, de acordo com a equação é:

$$K_c = [H_3O^+] [OH^-]$$

Uma vez que usamos  $H^+_{(aq)}$  e  $H_3O^+_{(aq)}$  indistintamente para representar o protão hidratado, a constante de equilíbrio também pode ser expressa como

$$K_c = [H^+] [OH^-]$$

Para indicar que a constante de equilíbrio se refere a auto-ionização da água, substituímos  $K_c$  por  $K_w$

$$K_w = [H_3O^+] [OH^-] = [H^+] [OH^-] \quad (\text{equação 01})$$

Onde  $K_w$  é a constante do produto iónico da água, que é o produto das concentrações molares dos iões  $H^+$  e  $OH^-$  a uma dada temperatura.

Em água pura a 25°C, as concentrações de  $H^+$  e  $OH^-$  são iguais e têm os valores  $[H^+] = 1.0 \times 10^{-7} M$  e  $[OH^-] = 1.0 \times 10^{-7} M$ . Assim, da equação 01, a 25°C obtém-se:

$$K_w = (1.0 \times 10^{-7})(1.0 \times 10^{-7}) = 1.0 \times 10^{-14}$$

Quer se trate de água pura ou de uma solução aquosa diluída de uma dada espécie química, observa-se sempre a seguinte relação, a 25°C:

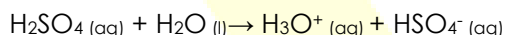
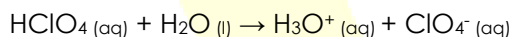
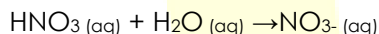
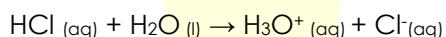
$$K_w = [H^+] [OH^-] = 1.0 \times 10^{-14}$$

Sempre que  $[H^+] = [OH^-]$ , diz-se que a solução aquosa é neutra. Em uma solução ácida, há excesso de iões  $H^+$  e  $[H^+] > [OH^-]$ . Em uma solução básica, há excesso de iões hidróxido, portanto,  $[H^+] < [OH^-]$ .



#### 6.4 Forças relativas de ácidos e bases

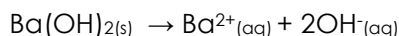
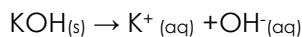
Ácidos fortes são eletrólitos fortes que, para efeitos práticos, se consideram completamente ionizados em água. A maioria dos ácidos fortes é ácida inorgânica: ácidos clorídrico (HCl), ácido nítrico (HNO<sub>3</sub>), ácido perclórico (HClO<sub>4</sub>) e ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>)



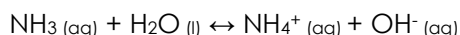
A maior parte dos ácidos são ácidos fracos que, em soluções aquosas, estão parcialmente ionizados. No equilíbrio, as soluções aquosas de ácidos fracos contêm uma mistura de moléculas do ácido não ionizado, H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> e a base conjugada. O ácido fluorídrico (HF), o ácido acético (CH<sub>3</sub>COOH) e o ião amónio (NH<sub>4</sub><sup>+</sup>) são exemplos de ácidos fracos.

Tal como os ácidos fortes, as bases fortes são eletrólitos fortes que se ionizam completamente em água. Hidróxidos de metais alcalinos e de certos metais alcalino-terrosos são bases fortes.

Alguns exemplos de base fortes são:



As bases fracas, como os ácidos fracos, são eletrólitos fracos. A amónia é uma base fraca que ioniza-se muito pouco em água:



1. Se um ácido é forte, a sua base conjugada não tem força mensurável. Assim, o ião Cl<sup>-</sup>, que é a base conjugada do ácido forte HCl, é uma base extremamente fraca.

2. H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> é o ácido forte que pode existir em solução aquosa. Ácidos mais fortes que H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> reagem com a água para formar H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> e as suas bases conjugadas. Assim, HCl, que é um ácido mais forte que H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>, reage completamente com a água para produzir H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> e Cl<sup>-</sup>:



Ácidos mais fracos que H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> reagem muito menos com a água

	ÁCIDO	BASE	
100% ionizado em H <sub>2</sub> O	<b>Forte</b>	Cl <sup>-</sup>	<b>Desprezível</b>
	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	
	HNO <sub>3</sub>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	
	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> (aq)	H <sub>2</sub> O	
Força ácida aumenta ↑	<b>Fraco</b>	HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	<b>Fraco</b>
		SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	
		H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	
		H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	
		HF	
		F <sup>-</sup>	
		HC <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	
		C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> <sup>-</sup>	
		H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	
		HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	
		H <sub>2</sub> S	
		HS <sup>-</sup>	
		H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	
		HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	
		NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	
		NH <sub>3</sub>	
		HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	
		CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	
		HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	
		PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	
	H <sub>2</sub> O	OH <sup>-</sup>	
<b>Desprezível</b>	OH <sup>-</sup>	O <sup>2-</sup>	<b>Forte</b>
	H <sub>2</sub>	H <sup>-</sup>	
	CH <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub> <sup>-</sup>	
			100% protonado em H <sub>2</sub> O

Força básica aumenta ↓

#### 6.4.1 pH- uma medida de acidez

Uma vez que as concentrações de H<sup>+</sup> e OH<sup>-</sup> em soluções aquosas são frequentemente números muito pequenos e, portanto, inconvenientes de lidar, em 1909 propôs uma medida mais prática, chamada Soren Sorensen de pH. O pH de uma solução é definido como o logaritmo da concentração do ião hidrogênio (em mol/L), com sinal negativo:

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] \text{ ou } \text{pH} = -\log [\text{H}^+]$$

Uma vez que o pH é simplesmente um modo de exprimir a concentração hidrogeniônica, as soluções ácidas e básicas a 25°C, as podem ser distinguidas pelos seus valores de pH como segue:

Soluções ácidas:  $[\text{H}^+] > 1,0 \times 10^{-7} \text{ M}$ ,  $\text{pH} < 7,00$

Soluções básicas:  $[\text{H}^+] < 1,0 \times 10^{-7} \text{ M}$ ,  $\text{pH} > 7,00$

Soluções neutras:  $[\text{H}^+] = 1,0 \times 10^{-7} \text{ M}$ ,  $\text{pH} = -\log (1,0 \times 10^{-7}) = -(-7,00) = 7,00$

Na maioria das soluções a  $[\text{H}^+]_{(\text{aq})}$  é bem pequena.

Em água neutra a 25 °C,  $\text{pH} = \text{pOH} = 7,00$ .

Quanto mais alto o pH, mais baixo é o pOH e mais básica a solução.

A maioria dos valores de pH e de pOH está entre 0 e 14.

Não há limites teóricos nos valores de pH ou de pOH. (por exemplo, o pH de HCl 2,0 mol/L é -0,301.)

#### 6.4.2 Outras escalas 'p'

Em geral, para um número  $X$ ,

$$pX = -\log X$$

Por exemplo,

$$pK_w = -\log K_w.$$

$$K_w = [H^+][OH^-] = 1.0 \times 10^{-14}$$

$$pK_w = -\log([H^+][OH^-]) = 14 \quad -\log[H^+] + (-\log[OH^-]) = -\log K_w = 14$$

$$pH + pOH = 14$$

	Faixa de pH para a variação de cor							
	0	2	4	6	8	10	12	14
Violeta de metila	Amarelo		Violeta					
Azul de timol	Vermelho		Amarelo	Amarelo		Azul		
Alaranjado de metila		Vermelho		Amarelo				
Vermelho de metila			Vermelho		Amarelo			
Azul de bromotimol			Amarelo		Azul			
Fenolftaleína				Incolor		Rosa		
Amarelo de alizarina R					Amarelo		Vermelho	

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## 6.5 Ácidos e bases fortes

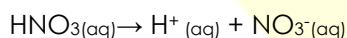
### 6.5.1 Ácidos fortes

Os ácidos comuns mais fortes são HCl, HBr, HI, HNO<sub>3</sub>, HClO<sub>4</sub>, e H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.

Ácidos fortes são eletrólitos fortes. Todos os ácidos fortes ionizam completamente em solução:

$\text{HNO}_{3(\text{aq})} + \text{H}_2\text{O}_{(\text{l})} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+_{(\text{aq})} + \text{NO}_3^-_{(\text{aq})}$ . Uma vez que H<sup>+</sup> e H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> são usados de maneira intercambiável,

Escrevemos:



Em soluções, o ácido forte é geralmente a única fonte de H<sup>+</sup>. (Se a concentração em quantidade de matéria do ácido é menor do que 10<sup>-6</sup> Mol/L, a auto-ionização da água precisa ser considerada.)

Assim, o pH da solução é a concentração em quantidade de matéria inicial do ácido.

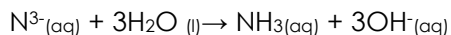
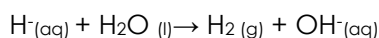
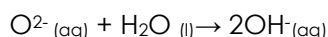
### 6.5.2 Bases fortes

A maioria dos hidróxidos iônicos são bases fortes (por exemplo, NaOH, KOH, e Ca(OH)<sub>2</sub>).

As bases fortes são eletrólitos fortes e dissociam-se completamente em solução.

O pOH (e, conseqüentemente, o pH) de uma base forte é dado pela concentração em quantidade de matéria inicial da base. *Tenha cuidado com a estequiometria.*

Para um hidróxido ser uma base, ele deve ser solúvel. As bases não têm que conter o ião OH<sup>-</sup>:

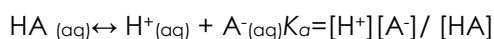
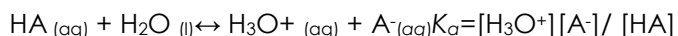


### 6.5.3 Ácidos fracos

Os ácidos fracos são apenas parcialmente ionizados em solução.

Existe uma mistura de iões e ácido não-ionizado em solução.

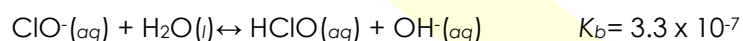
Conseqüentemente, os ácidos fracos estão em equilíbrio:



$K_a$  é a constante de dissociação de ácido. Observe que a  $[H_2O]$  é omitida na expressão de  $K_a$ . (a  $H_2O$  é um líquido puro.) Quanto maior o  $K_a$ , mais forte é o ácido (neste caso, mais iões estão presentes no equilíbrio em relação às moléculas não-ionizadas). Se  $K_a \gg 1$ , o ácido está completamente ionizado e o ácido é um ácido forte.

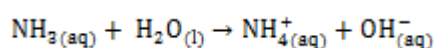
#### 6.5.4 Bases fracas

As bases geralmente têm pares solitários ou cargas negativas para atacar os prótons. As bases fracas mais neutras contêm nitrogênio. As aminas estão relacionadas com a amônia e têm uma ou mais ligações N-H substituídas por ligações N-C (por exemplo,  $CH_3NH_2$  é a metilamina). Os ânions de ácidos fracos também são bases fracas. Exemplo:  $OCl^-$  é a base conjugada do  $HOCl$  (ácido fraco):



As bases fracas removem prótons das substâncias. Existe um equilíbrio entre a base e os iões resultantes:

Exemplo:

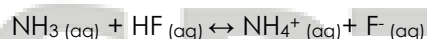


A constante de dissociação da base,  $K_b$ , é definida como

$$K_b = \frac{[NH_4^+][OH^-]}{[NH_3]}$$

#### EXERCÍCIOS

1. Indique os pares ácido-base conjugado na reação entre a Amônia e o ácido fluorídrico em solução aquosa



R.a) Estratégia : Lembre-se de que uma base conjugada tem sempre um átomo de H a menos e uma carga negativa a mais (ou uma carga positiva) do que a fórmula do ácido correspondente.

Resolução :  $NH_3$  tem um átomo de H a menos e uma carga positiva a menos que  $NH_4^+$ .  $F^-$  tem um átomo de H a menos e uma carga negativa a mais do que  $HF$ . Portanto, os pares ácido-base conjugados são (1)  $NH_4^+$  e  $NH_3$ ;  $HF$ /  $F^-$

2. Qual é a base conjugada de cada um dos seguintes ácidos:

$HClO_4$ ;  $H_2S$ ;  $HCO_3^-$  **Sol:  $ClO_4^-$ ;  $HS^-$ ;  $PH_3$  e  $CO_3^{2-}$**

3. Qual é o ácido conjugado de cada um das seguintes bases:

CN<sup>-</sup>; SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>; H<sub>2</sub>O; HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> **R:HCN; HSO<sub>4</sub><sup>-</sup>; H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> e H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>**

Observe que o ião hidrogenocarbonato (HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>) é anfótero; pode agir como ácido ou como base

4. Escreva a fórmula para a base conjugada de cada ácido.

- a) H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> / **HSO<sub>4</sub><sup>-</sup>**
- b) H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> / **H<sub>2</sub>BO<sub>3</sub><sup>-</sup>**
- c) HF / **F<sup>-</sup>**
- d) HCO<sup>+</sup> / **CO**
- e) NH<sub>4</sub><sup>+</sup> / **NH<sub>3</sub>**
- f) HPO<sub>4</sub><sup>2-</sup> / **PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>**

5. Escreva a fórmula para o ácido conjugado de cada base.

- a) OH<sup>-</sup> / **H<sub>2</sub>O**
- b) HS<sup>-</sup> / **H<sub>2</sub>S**
- c) NH<sub>3</sub> / **NH<sub>4</sub><sup>+</sup>**
- d) C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>O<sup>-</sup> / **C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH**
- e) CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> / **HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>**
- f) HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> / **H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>**

6. A concentração de iões OH<sup>-</sup> em uma certa solução de amónia de limpeza doméstica é 0.0025 M. Calcule a concentração de iões H<sup>+</sup>

Estratégia :

É dada a concentração de iões e pede-se para calcular [H<sup>+</sup>]. A relação entre [H<sup>+</sup>] e [OH<sup>-</sup>] na água ou em uma solução aquosa é dada pelo produto iónico da água, K<sub>w</sub>.

Resolução Rearranjando a equação de K<sub>w</sub>

$$[H^+] = K_w / [OH^-] = 1,0 \times 10^{-14} / 0.0025 = 4,0 \times 10^{-12} \text{ M}$$

7. Calcule os valores de [H<sup>+</sup>] e [OH<sup>-</sup>] em uma solução neutra a 25°C,

**Sol. Em uma solução neutra [H<sup>+</sup>] = [OH<sup>-</sup>]**

$$K_w = [H^+] [OH^-] = 1,0 \times 10^{-14} = (X) (X)$$

$$X^2 = 1,0 \times 10^{-14}; X = 1,0 \times 10^{-7} \text{ mol/L} = [H^+] = [OH^-]$$

8. Indique se as soluções com cada uma das seguintes concentrações iónicas é neutra, ácida ou básica: (a) [H<sup>+</sup>] = 4 × 10<sup>-4</sup> mol/L; (b) [OH<sup>-</sup>] = 1 × 10<sup>-7</sup> mol/L; (c) [OH<sup>-</sup>] = 7 × 10<sup>-13</sup> mol/L.

**Sol. (a) Básica; (b) neutra (c) ácida**

9. Calcule a concentração de  $H^+$  (aq) uma solução na qual  $[OH^-]$  é 0,010 mol/L; (b) uma solução na qual  $[OH^-]$  é  $1,8 \times 10^{-9}$  mol/L.

**Sol. (a)  $[H^+][OH^-] = 1,0 \times 10^{-14}$**

$$[H^+] = K_w / [OH^-] = 1,0 \times 10^{-14} / 0,010 = 1,0 \times 10^{-12} \text{ mol/L}$$

**Essa solução é básica porque  $[OH^-] > [H^+]$**

**(b) Nessa instância**

$$[H^+] = K_w / [OH^-] = 1,0 \times 10^{-14} / 1,8 \times 10^{-9} = 5,0 \times 10^{-6} \text{ mol/L.}$$

**Esta solução é ácida porque  $[H^+] > [OH^-]$**

10. Calcule a concentração de  $OH^-(aq)$  em uma solução na qual (a)  $[H^+] = 2 \times 10^{-6}$  mol/L ; (b)  $[H^+] = [OH^-]$ ; (c)  $[H^+] = 100 \times [OH^-]$

**Sol. (a)  $5 \times 10^{-9}$  mol/L ; (b)  $1,0 \times 10^{-7}$  mol/L ; (c)  $1,0 \times 10^{-8}$  mol/L.**

11. A concentração de íons  $H^+$  em uma garrafa de vinho de mesa era  $3,2 \times 10^{-4}$  M logo depois de remover a rolha. Somente metade do vinho foi consumida. A outra metade, depois de ter sido guardada em contato com o ar durante um mês, tinha uma concentração de íon hidrogênio igual a  $1,0 \times 10^{-3}$  M. Calcule o pH do vinho nestas duas ocasiões.

Estratégia É dada a concentração do íon  $H^+$  e pede-se para calcular o pH da solução. Qual é a definição de pH.

Resolução

De acordo com a Equação (0000),  $pH = -\log [H^+]$ . Quando a garrafa foi aberta,  $[H^+] = 3,2 \times 10^{-4}$ , que substituímos na equação

$$pH = -\log [H^+] = -\log (3,2 \times 10^{-4}) = 3,49$$

Na segunda ocasião,  $[H^+] = 1,0 \times 10^{-3}$  M, de modo que

$$pH = -\log (1,0 \times 10^{-3}) = 3,00$$

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

12. O pH da água da chuva recolhida em uma certa região do Nordeste dos Estados Unidos em um dado dia era 4,82. Calcule a concentração do íon  $H^+$  da água da chuva

**Estratégia** : Aqui é dado o pH de uma solução e pede-se para calcular  $[H^+]$ . Uma vez que o pH é definido como  $pH = -\log [H^+]$ , obtemos  $[H^+]$  pelo antilogaritmo do pH; isto é,  $[H^+] = 10^{-pH}$

**Resolução**

$$pH = -\log [H^+] = 4,82$$

$$\text{Então, } \log [H^+] = -4,82$$

Para calcular  $[H^+]$ , temos que aplicar o antilogaritmo a -4,82

$$[H^+] = 10^{-4,82} = 1,5 \times 10^{-5} \text{ M}$$

5. Em uma solução de NaOH,  $[OH^-]$  é  $2,9 \times 10^{-4} \text{ M}$ . calcule o pH da solução.

**Estratégia**

A resolução deste problema tem duas etapas. Primeiro calculamos o pOH. Depois calcular o pH da solução.

**Resolução**

$$pOH = -\log[OH^-] = -\log(2,9 \times 10^{-4}) = 3,54$$

$$pH + pOH = 14,00$$

$$pH = 14,00 - 3,54 = 10,46$$

13. A seguir, são apresentadas as faixas de pH para vários materiais biológicos humanos. A partir do pH no ponto médio de cada faixa, calcule para cada material: I) a  $[H_3O^+]$ ; II) o pOH; III) a  $[OH^-]$ .

a) Leite, pH 6,6 – 7,6 **Sol. (a)= $1,0 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$  ; (b) =7; (c) =  $1,0 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$**

b) Clara do ovo, pH 7,3 – 7,5 **Sol. (a)= $1,0 \times 10^{-8} \text{ mol/L}$  ; (b)=6,8 ; (c)=  $1,0 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$**

c) Saliva, pH 6,5 – 7,5 **Sol. (a)= $1,0 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$  ; (b) =6; (c) =  $1,0 \times 10^{-8} \text{ mol/L}$**

d) Banana, pH 4,8 – 5,4 **Sol. (a)= $1,0 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$  ; (b) =10; (c)=  $1,0 \times 10^{-10} \text{ mol/L}$**

e) Plasma sanguíneo, pH 7,35 – 7,45 **Sol. (a)= $1,0 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$  ; (b)=7 ; (c)=  $1,0 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$**

14. Calcular o pH de uma solução básica, na qual  $[OH^-] > 1,0 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$ . Suponha que  $[OH^-] = 2,0 \times 10^{-3} \text{ mol/L}$ .

$$\text{Sol. } [H^+] = K_w / [OH^-] = 1,0 \times 10^{-14} / 2,0 \times 10^{-3} = 5,0 \times 10^{-12} \text{ mol/L;}$$

$$pH = -\log (5,0 \times 10^{-12}) = 11,30$$

15. Uma amostra de suco de maçã que foi espremido recentemente tem pH de 3,76. Calcule  $[H^+]$ .

$$\text{Sol. } pH = -\log [H^+] = 3,76$$

$$\text{Assim } \log [H^+] = -3,76$$

$$[H^+] = \text{antilog} (-3,76) = 10^{-3,76} = 1,7 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$$



16. Uma solução formada pela dissolução de um comprimido antiácido tem pH de 9,18. Calcule  $[H^+]$ .

**Sol.  $[H^+] = 6,6 \times 10^{-10} \text{ mol/L}$**

17. (a) Em amostra de suco de limão  $[H^+]$  é  $3,8 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$ . Qual é o pH?

(b) Uma solução para limpar janelas comumente disponível tem  $[H^+]$  de  $5,3 \times 10^{-9} \text{ mol/L}$ . Qual é o pH?

**Sol. (a) 3,42 (b) 8,28**

18. Qual é o pH de uma solução 0,040 mol/L de  $HClO_4$ ?

**Sol.  $pH = -\log(0,040) = 1,40$**

19. Uma solução aquosa de  $HNO_3$  tem pH de 2,34. Responda:

Qual a concentração de  $H^+$ ? **Sol.  $0,0046 \text{ mol/L}$**

20. Qual é o pH de:

a) Uma solução de 0,28 mol/L de NaOH;

**Sol.  $-[H^+] = 1,0 \times 10^{-14} / 0,28 = 3,57 \times 10^{-13} \text{ mol/L}$   $pH = -\log(3,57 \times 10^{-13}) = 12,45$**

**$-pOH = -\log(0,28) = 1,55$**

**$pH = 14,00 - pOH = 12,45$**

b) Uma solução 0,011 mol/L de  $Ca(OH)_2$ ?

**Sol.  $-[H^+] = 1,0 \times 10^{-14} / 0,022 = 4,55 \times 10^{-12} \text{ mol/L}$   $pH = -\log(4,55 \times 10^{-12}) = 11,34$**

**$-pOH = -\log(0,022) = 2,66$**

**$pH = 14,00 - pOH = 11,34$**

21. Qual é a concentração de uma solução de:

a) **KOH** para a qual o pH é 11,89; **Sol. (a)  $7,8 \times 10^{-3} \text{ mol/L}$**

b) **Mg(OH)<sub>2</sub>** para a qual o pH é 11,68; **Sol. (b)  $2,4 \times 10^{-3} \text{ mol/L}$**

### Exercícios propostos

1. Faça a associação correta:

I —  $[H^+] = [OH^-]$

II —  $[H^+] > [OH^-]$

III —  $[H^+] < [OH^-]$

a) Refrigerante

b) Água destilada

c) Limpa-forno à base de soda cáustica

d) Suco gástrico

e) Amoníaco

f) Suco de laranja

g) Solução de bateria de automóvel

h) Chuva ácida **sol. a-II ; b-I ; c-III ; d-II ; e-III ; f-II ; g-II ; h-II**

2. Entre os líquidos da tabela:

	$[H^+]$	$[OH^-]$
leite	$1,0 \cdot 10^{-7}$	$1,0 \cdot 10^{-7}$
Água do mar	$1,0 \cdot 10^{-8}$	$1,0 \cdot 10^{-6}$
Coca-Cola	$1,0 \cdot 10^{-3}$	$1,0 \cdot 10^{-11}$
Café preparado	$1,0 \cdot 10^{-5}$	$1,0 \cdot 10^{-9}$
Lágrima	$1,0 \cdot 10^{-7}$	$1,0 \cdot 10^{-7}$
Água de lavadeira	$1,0 \cdot 10^{-12}$	$1,0 \cdot 10^{-2}$

Quais têm caráter ácido? **Sol. Coca-Cola ; café**

3. Calcule o pH, pOH e  $[OH^-]$  de uma solução aquosa cuja concentração hidrogeniônica  $[H^+]$  é  $10^{-2}$  mol/L.

**Sol.  $[H^+] = 10^{-2}$  mol/L  $\Rightarrow [OH^-] = 10^{-12}$  mol/L  $\Rightarrow pOH = 12 \Rightarrow pH = 2$**

4. Calcule o pH,  $[H^+]$  e  $[OH^-]$  de uma solução aquosa de pOH = 6.

**Sol.  $[OH^-] = 10^{-6}$  mol/L  $\Rightarrow [H^+] = 10^{-8}$  mol/L  $\Rightarrow pH = 8 \Rightarrow pOH = 6$**

5. Observe o pH, a 25 °C, de alguns materiais presentes em nosso cotidiano:

Materiais	pH
Vinagre	3,0
Vinho	3,5
Água com gás	4,0
Cerveja	4,5
Café	5,0

Indique os materiais de menor e maior concentração hidroxiliônica.

**Sol. maior  $[OH^-]$  = cerveja      menor  $[OH^-]$  = Vinagre**

6. Relacione os itens seguintes com os conceitos: ácido, básico e neutro.

- 1) Uma Coca-Cola tem um pH igual a 3.
- 2) Um tablete de um antiácido dissolvido num copo d'água tem  $[OH^-] = 10^{-5}$  M.
- 3) Uma xícara de café tem  $[H^+] = 10^{-5}$  M.
- 4) Uma solução em que  $[H^+] = [OH^-]$ :
  - a) 1) básico, 2) básico, 3) ácido, 4) neutro.
  - b) 1) ácido, 2) básico, 3) neutro, 4) neutro.
  - c) 1) neutro, 2) ácido, 3) básico, 4) ácido.
  - d) 1) ácido, 2) neutro, 3) básico, 4) básico.
  - e) 1) ácido, 2) básico, 3) ácido, 4) neutro. **Sol. E**

7. Dada a afirmação:

"A urina é uma solução aquosa que apresenta pH = 5." Podemos concluir que:

- a) a solução tem caráter básico.
- b) a concentração hidrogeniônica é  $10^{-5}$  mol/L. **Sol. b**
- c) a concentração hidroxiliônica é de  $10^{-7}$  mol/L.
- d) a constante de ionização da água é  $10^{-5}$ .
- e) a urina é uma solução não-eletrolítica.

8. Dada uma solução  $1,0 \cdot 10^{-4}$  M de um ácido forte HX, é correto afirmar que esta solução tem:

- a) pH = 1,0 e  $[X^-] = 10^{-4}$  M.
- b) pH = 4,0 e  $[X^-] = 1,0$  M.
- c) pH = 4,0 e  $[X^-] = 10^{-1}$  M.
- d) pH = 4,0 e  $[X^-] = 10^{-4}$  M. **Sol.d**
- e) pH = 1,0 e  $[X^-] = 1,0$  M.

9. O acidente ocorrido recentemente com o navio *Bahamas* provocou o vazamento de milhares de toneladas de ácido sulfúrico na lagoa dos Patos. Em determinados locais, foram registrados valores de pH entre 3 e 4. Podemos afirmar que, nesses locais, a concentração aproximada de íons hidroxila, em mol/L, foi:

- a) maior que  $10^{-11}$ . **Sol. a**
- b) maior que  $10^{-9}$ .
- c) maior que  $10^{-7}$ .
- d) maior que  $10^{-5}$ .

10. Adicionou-se hidróxido de sódio a uma solução diluída de ácido clorídrico, suficiente para diminuir a acidez dessa solução de pH = 4 para pH = 6. Qual o valor da relação  $[H^+]$  inicial /  $[H^+]$  final? **Sol. 100**

11. Ao tomar água, um indivíduo diluiu seu suco gástrico (solução contendo ácido clorídrico), de pH = 2, de 50 mL para 500 mL. O pH da solução resultante, logo após a ingestão de água, é igual a:

a) 0. b) 2. c) 3. d) 4. e) 6. **Sol. C**

12. Determine a massa de hidróxido de potássio que deve ser dissolvida em 0,500 mL de água para que a solução resultante tenha um pH  $\approx 13$  a 25 °C. (massa molar do KOH = 56 g mol<sup>-1</sup>)

**Sol. 2,8mg**

13. Escreva a fórmula para a base conjugada de cada ácido.

- a) H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> / **HSO<sub>4</sub><sup>-</sup>**
- b) H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> / **H<sub>2</sub>BO<sub>3</sub><sup>-</sup>**
- c) HF / **F<sup>-</sup>**
- d) HCO<sup>+</sup> / **CO**
- e) NH<sub>4</sub><sup>+</sup> / **NH<sub>3</sub>**
- f) HPO<sub>4</sub><sup>2-</sup> / **PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>**

14. Uma solução formada pela dissolução de um comprimido antiácido tem pH de 9,18. Calcule [H<sup>+</sup>].

**Sol. [H<sup>+</sup>] = 6,6 x 10<sup>-10</sup> mol/L**

15.(a) Em amostra de suco de limão [H<sup>+</sup>] é 3,8 x 10<sup>-4</sup> mol/L. Qual é o pH?

(b) Uma solução para limpar janelas comumente disponível tem [H<sup>+</sup>] de 5,3 x 10<sup>-9</sup> mol/L. Qual é o pH?

**Sol.(a) pH= 3,42      (b) pH= 8,28**

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## CAPÍTULO VII - TROCAS DE ENERGIA EM REAÇÕES QUÍMICAS

As reacções químicas ocorrem, na sua maioria, com produção de variações de energia que se manifestam sob a forma de calor.

A termoquímica estuda quantitativamente as variações térmicas que ocorrem nas reacções químicas e, por consequência, a transferência de calor tanto associado a reacções químicas como a mudanças de estado físico da substância.

É importante referir que a energia é uma propriedade do corpo mas o calor não o é. O calor é a energia em movimento entre os objectos ou sistemas que estão a temperaturas diferentes e em contato um com o outro. O calor libertado ou absorvido por um sistema que sofre uma reacção química é determinado em aparelhos chamados calorímetros.

Os calorímetros são aparelhos capazes de medir o calor de uma reacção química. Esta variação de calor numa reacção química é calculada por meio da expressão seguinte:

$$Q = mC\Delta t$$

Onde: Q = quantidade de calor liberado ou absorvido pela reacção (caloria ou joule); m = massa de substância (gramas) presente no calorímetro;

c = calor específico do líquido presente no calorímetro;

$\Delta t$  = variação de temperatura sofrida pela massa de substância devido à ocorrência da reacção (graus Celsius).

### 7.1 Calor associado à variação de temperatura

A capacidade calorífica de um corpo é definida pela quantidade de calor necessária à elevação de 1 Kelvin (K) a temperatura desse corpo. A capacidade calorífica a volume constante, é representada por  $C_v$  e a capacidade calorífica a pressão constante por  $C_p$ .

A transferência de calor, a volume constante que ocorre numa substância é definida como

$$q_v = U = C_v \Delta T$$

e a transferência de calor, a pressão constante, é

$$q_p = H = C_p \Delta T$$

com :

$\Delta t$  = variação de temperatura

U=energia interna

H=entalpia

Calor de reacção ,que é igual à entalpia da reacção(se se estiver a pressão constante), é o nome dado à quantidade de calor liberado ou absorvido numa reacção química.

Numa reacção química ou mudança de estado físico, existem processos que fornecem ou libertam calor.

Assim sendo, a entalpia (H), é uma grandeza termodinâmica que avalia as trocas de energia térmica ocorridas num processo químico, mantendo-se a pressão constante. A entalpia (H) é definida a partir da energia interna(U) , pressão (P) e volume (V)

$$H = U + PV$$

A energia interna é o somatório da energia dos átomos, moléculas, interacções moleculares e ligações químicas.

A variação de entalpia ( $\Delta H$ ) apenas depende do estado final e inicial do processo pois é uma função de estado:

$$\Delta H = H_{\text{produtos}} - H_{\text{reagentes}}$$

Nem entalpia nem a energia energia interna absolutas dos compostos podem ser medidas . Estes valores são apenas obtidos recorrendo à diferença entre a entalpia do fim e do início do processo. Esta entalpia é igual ao calor absorvido ou libertado pelo sistema ,a pressão constante.A Unidade SI da entalpia é o Joule (J).

Quando a variação de energia é positiva considera-se que a reacção é endotérmica.

Na reacção endotérmica a entalpia dos reagentes é inferior à entalpia dos produtos, pois o sistema absorve energia durante a reacção que lhe é fornecida pelo exterior (vizinhança).

$$\Delta H = H_{\text{produtos}} - H_{\text{reagente}} > 0$$

Quando a variação de entalpia é negativa diz-se que a reacção é exotérmica.

Na reacção exotérmica a entalpia dos reagentes é superior à entalpia dos produtos pois o sistema liberta energia para o exterior(vizinhança).

$$\Delta H = H_{\text{produtos}} - H_{\text{reagente}} < 0$$

Por cada tipo de reacção existe uma entalpia associada à qual se dá o nome da própria reacção. Assim sendo:

Entalpia formação padrão - é a variação de entalpia associada à formação de uma mole de uma substância a partir de seus elementos constituintes, na forma de substâncias simples mais estável e no estado padrão (em geral estado padrão é a 1atm e 25°C). A entalpia de formação é representada por  $\Delta H^{\circ}_f$  e por convenção qualquer elemento na sua forma mais estável tem variação de entalpia de formação zero.

Entalpia de mudança de fase - energia necessária para que uma mol de substância nas condições padrão de temperatura e pressão mude de estado físico. São entalpias de mudança de fase :entalpia de fusão ( entalpia da passagem do estado sólido a liquido) entalpia de vaporização (entalpia da passagem do estado liquido a vapor); entalpia de sublimação( entalpia da passagem do estado solido a vapor)

Entalpia de reacção padrão - é a entalpia de uma reacção realizada nas condições padrão

- Entalpia de combustão: é a entalpia associada à reacção de combustão, no estado padrão, de uma mole de uma substância.
- Entalpia de dissolução: é a entalpia associada à dissolução de 1 mol de uma substância em água suficiente para preparar um solução diluída.

Entalpia de ligação - a entalpia de ligação é a variação de entalpia verificada na quebra de 1mol de uma determinada ligação química, sendo que todas as substâncias estejam no estado gasoso, a 25° C e 1atm. Durante as reacções químicas, as ligações químicas dos reagentes e produtos são alteradas. Podemos calcular o  $\Delta H$  pela análise desses novos rearranjos

## 7.2 Cálculo da entalpia de uma reacção e lei de Hess

### 7.2.1 Cálculo da entalpia de uma reacção de forma directa

Sabendo as entalpias de formação de cada reagente e produto chega-se à entalpia de formação do produto pela equação:

$$\Delta H^{\circ}_{\text{Reacção}} = \sum \Delta H_f(\text{Produtos}) - \sum \Delta H_f(\text{Reagentes})$$

### 7.2.2 Cálculo da entalpia de uma reacção de forma indirecta, recorrendo à lei de Hess

Lei de Hess-O calor liberado ou absorvido numa reacção química depende apenas dos estados intermediários pelos quais a reacção passa. Isto é, a variação de entalpia numa reacção onde os reagentes se transformam nos produtos depende apenas do estado inicial e final e o seu valor é o mesmo quer a transformação se de numa ou várias etapas

De acordo com essa lei é possível calcular a variação de entalpia de uma reacção através da soma algébrica de equações químicas que envolvam os compostos intrevinientes na reacção.

A variação de entalpia de uma reacção é a soma das entalpias de formação dos produtos menos a soma das entalpias de formação dos reagentes, sendo cada valor de variação de entalpia de formação multiplicado pelo coeficiente estequiométrico da respectiva substância na equação balanceada.

#### Exercícios resolvidos

1. A energia da ligação C — H é 100 kcal/mol.

Determine a variação de entalpia da reacção  $\text{CH}_4(\text{g}) \rightarrow \text{C}(\text{g}) + 4\text{H}(\text{g})$

Resolução:

Cada molécula de  $\text{CH}_4$  tem 4 ligações C-H logo  $\Delta H = 4 \times 100 (\text{kcal/mol}) = +400 \text{ kcal/mol}$

2. Qual a variação de entalpia que ocorre para quando uma amostra de 100g de cobre é aquecida de 10 a 100 °C ?

Dados:

$C_p(\text{Cobre}) = 0,389 \text{ J/gK}$

Resolução:

$H = m C_p \Delta T = 100(\text{g}) \times 0,389 (\text{J/gK}) \times (100-10) (\text{K}) = 3,5 \times 10^3 \text{ J}$

3. Calcule a entalpia de formação do metano

Dados:

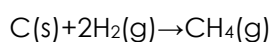
i)  $\text{C}(\text{s}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) \quad \Delta H = -393 \text{ kJ/mol}$

ii)  $\text{H}_2 + 0,5 \text{ O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{l}) \quad \Delta H = -285,8 \text{ kJ/mol}$

iii)  $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CO}_2(\text{g}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) \quad \Delta H = -889,5 \text{ kJ/mol}$

Resolução:

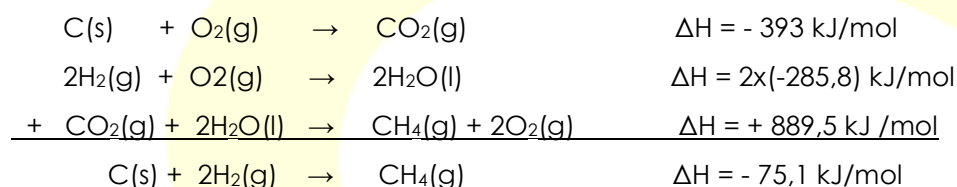
A entalpia de formação pretendida é a da reacção



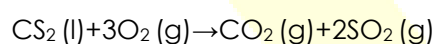


Para se obter esta equação temos de:

- multiplicar toda a reacção ii por 2
- inverter a reacção iii
- somar as equações algébricamente



4. Determine a entalpia padrão da reacção :



Dados:

$$\Delta H_f^\circ(\text{O}_2) = 0 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{CS}_2) = 87,9 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{CO}_2) = -393,5 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{SO}_2) = -296,1 \text{ kJ/mol}$$

Resolução:

$$\Delta H_r^\circ = [\Delta H_f^\circ(\text{CO}_2) + 2 \times \Delta H_f^\circ(\text{SO}_2)] - [\Delta H_f^\circ(\text{CS}_2) + 3 \times \Delta H_f^\circ(\text{O}_2)]$$

$$\Delta H_r^\circ = [-393,5 + 2 \times (-296,1)] - (87,9 - 3 \times 0) = -1073,6 \text{ kJ/mol}$$

5. O valor da entalpia da reacção seguinte  $\text{H}_2(\text{g}) + \text{Cl}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{HCl}(\text{g})$  é  $\Delta H = - 42 \text{ kcal/mol}$ .

Calcule o valor da energia da ligação H-Cl.

Dados:

Energia da ligação H-H é 104 kcal /mol

Energia da ligação Cl-Cl é 60 kcal /mol

Resolução:

Seja Y a energia da ligação HCl



A variação da entalpia da reacção  $\Delta H = -42 \text{ kcal/mol}$

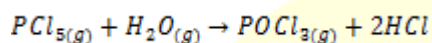
Pela lei de Hess  $\Delta H = \Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 \Leftrightarrow$

$$-42 = 104 + 60 - 2Y$$

$$Y = 103 \text{ kcal/mol}$$

**Exercícios propostos:**

1. Determine a variação de entalpia padrão da seguinte reacção:



Solução:  $\Delta H^0 = -126,4 \text{ kJ}$

2. Qual o aumento de temperatura de 100g de água quando se fornece 1kJ de calor.

Dados

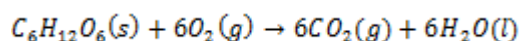
$C_p(\text{água}) = 75 \text{ J/K.mol}$

Solução: 2,4 kJ

3. A entalpia de formação da água líquida, a 25°C e 1 bar, tem o valor - 285,8kJ/mol. Qual a entalpia de dissociação da água?

Solução: 285,8 kJ/mol

4. A combustão da glucose dá-se segundo a reacção



Calcule a variação da entalpia da reacção.

Dados	
Compostos	$\Delta H^0_f(\text{kJ/mol})$
$C_6H_{12}O_6(s)$	- 1274,0
$CO_2(g)$	- 393,5
$H_2O(l)$	- 285,8

Solução:  $\Delta H^0_r = - 2801,8 \text{ kJ/mol}$

5. A entalpia de combustão do acetileno gasoso,  $C_2H_2(g)$ , a 25 °C, é -1299,58 kJ/mol. Determine a entalpia de formação do acetileno.

Solução:  $\Delta H^0_f = +226,73 \text{ kJ/mol}$

6. Quando a temperatura de 100g de água passa de 20 a 80 °C a pressão constante qual a variação da entalpia?

Dados

$C_p(\text{água}) = 75 \text{ J/K.mol}$

Solução: 25kJ

7. Determine o  $\Delta H^0$  da reacção  $CaC_2(s) + H_2O(l) \rightarrow C_2H_2(g) + Ca(OH)_2(s)$ .

Dados

$\Delta H^0_f(Ca(OH)_2(s)) = -986,1 \text{ kJ/mol}$

Solução: -127,9 kJ/mol

8. Das expressões que se seguem escolha a correcta:

- a) a combustão é sempre exotérmica e isotérmica.
- b) a combustão é sempre exotérmica.
- c) a combustão é sempre endotérmica.
- d) a combustão é sempre endotérmica e isotérmica.

Solução: b)

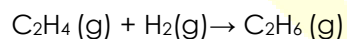
10. Quando uma gordura típica ( $C_{57}H_{107}O_6$ ) é metabolizada no corpo humano dá-se a reacção desta com oxigénio originando água e dióxido de carbono. Nesta reacção libertam-se 37,8 kJ de energia por cada grama de gordura convertida.

Calcule a entalpia de formação padrão desta gordura.

Dados	
Compostos	$\Delta H^{\circ}_f$ (kJ/mol)
$CO_2$ (g)	-393,5
$H_2O$ (l)	-285,8

Solução:  $\Delta H^{\circ}_f(C_{57}H_{107}O_6) = -3876 \text{ kJ/mol}$

11. Os calores de combustão de etano e etileno com produção de dióxido de carbono e água são -1559,8 e -1410,9 kJ/mol respectivamente. Determine o  $\Delta H^{\circ}$  da reacção:



Solução: -136,9 kJ/mol

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## CAPÍTULO VIII - HIDROCARBONETOS

## 8.1 Nomenclatura

Os hidrocarbonetos são compostos orgânicos constituídos exclusivamente por carbono e hidrógeno. Possuem a fórmula geral  $C_xH_y$ .

Os hidrocarbonetos podem ser aromáticos ou alifáticos. Apenas dos últimos trataremos neste resumo. Os hidrocarbonetos podem ser entre outros: alcanos, alcenos e alcinos.

No sistema IUPAC, um nome químico tem pelo menos três partes principais: Prefixo, infixo e sufixo. O prefixo indica o número de átomos de carbono da cadeia principal. O infixo indica o tipo de ligação entre os átomos de carbono. E o sufixo o grupo funcional principal.

Nos hidrocarbonetos alifáticos:

Prefixos: Indica o número de átomos de carbono da cadeia principal.

met-	et-	prop-	but-	pent-	hex-	hept-	oct-	non-	dec-
1C	2C	3C	4C	5C	6C	7C	8C	9C	10C

Infixos: Indica o tipo de ligação entre os átomos de carbono.

Todas simples = an	Uma dupla = en	Uma tripla = in
Duas duplas = dien	Tres duplas = trien	Duas triplas = diin

Sufixo: Para los hidrocarbonetos alifáticos sempre é a terminação -ano.

Nos hidrocarbonetos ramificados: Grupos alquilos.

CH <sub>3</sub> - Metil	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> - Etil	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> - Propil	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> - Butil
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> - Pentil	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{CH}- \end{array}$ Isopropil	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}- \end{array}$ Isobutil	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{CHCH}_2- \end{array}$ Secbutil

### 8.1.1 Regras da IUPAC

1. - A cadeia principal é a cadeia carbonica mais longa.
2. - Numerar a cadeia principal de forma que os substituintes recebam os menores números possíveis.
3. - Os substituintes se nomeam em ordem alfabética, precedidos dos números que indicam sua posição na cadeia principal.
4. - Se há mais de um substituinte da mesma classe, os números se separam por vírgulas.
5. - Depois do número se adiciona um hífen, para separar-o da palavra.

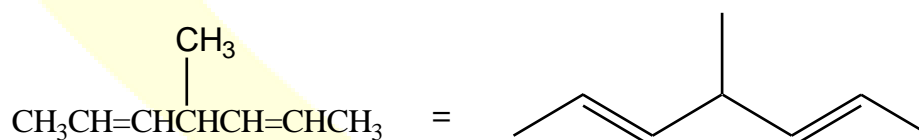
ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

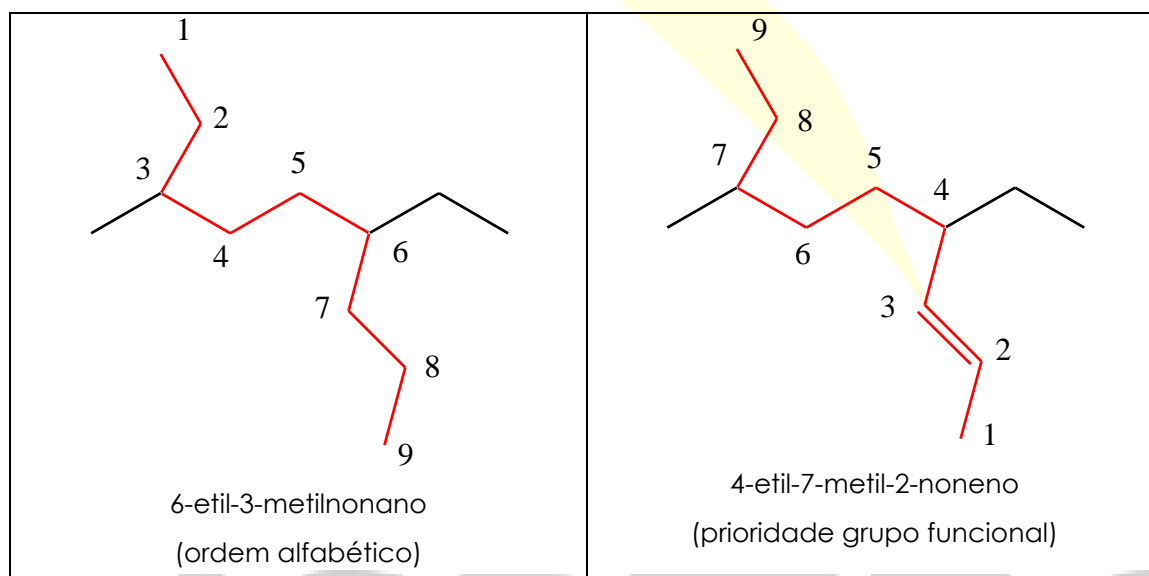
Exemplos:

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ hexano	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHCH}_3 \end{array}$ metilhexano	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{CH}_3 \\   \quad   \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3 \end{array}$ 2,4-dimetilhexano
$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ 2-hexeno	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCHCH}_2\text{CH}_3 \end{array}$ metil-2-hepteno	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCHCH}=\text{CHCH}_3 \end{array}$ etil-2,5-heptadieno

As moléculas podem representar-se das seguintes maneiras:



Algumas vezes é complicado determinar a cadeia mais longa e qual o primeiro átomo de carbono:



## 8.2 Isomeria

Os isômeros são compostos diferentes que apresentam a mesma fórmula molecular.

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

### 8.2.1 Isomeria plana

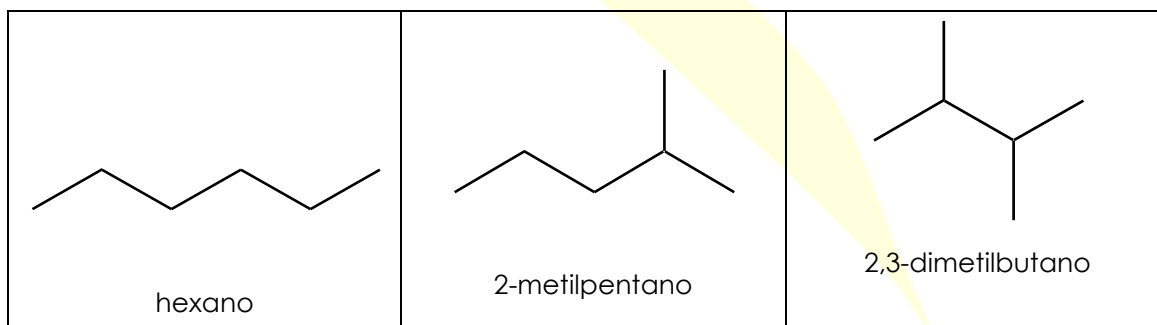
- a) Isomeria de Cadeia;
- b) Isomeria de Posição;
- c) Isomeria de Função;
- d) Isomeria de Compensação ou Metameria;
- e) Isomeria Dinâmica ou Tautomeria.

Apenas dos quatro primeiros trataremos neste resumo.

### 8.2.2 Isomeria de Cadeia

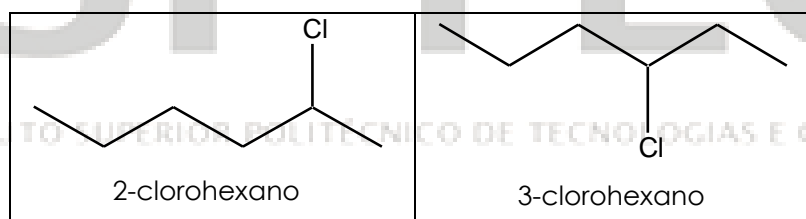
É quando os isômeros pertencem a mesma função química, mas possuem cadeias carbonicas diferentes

São isômeros de cadeia os seguintes compostos



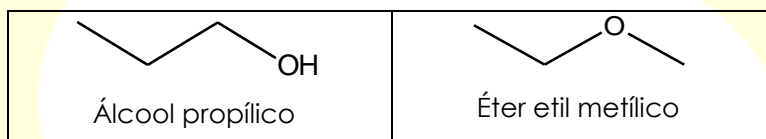
### 8.2.3 Isomeria de posição

É quando os isômeros pertencem a mesma função, têm o mesmo tipo de cadeia, mas apresentam diferença na posição de uma insaturação, de uma ramificação ou de um grupo funcional.



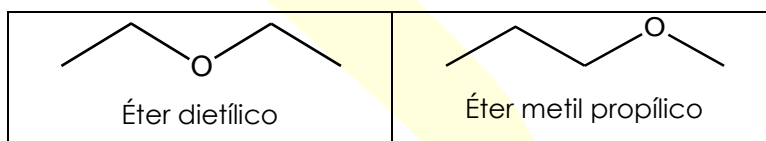
### 8.2.4 Isomeria de função

É quando os compostos isômeros pertencem a funções químicas diferentes. Os três casos de isomeria de função são os álcoois e os éteres, os aldeídos e as cetonas e os ácidos e ésteres



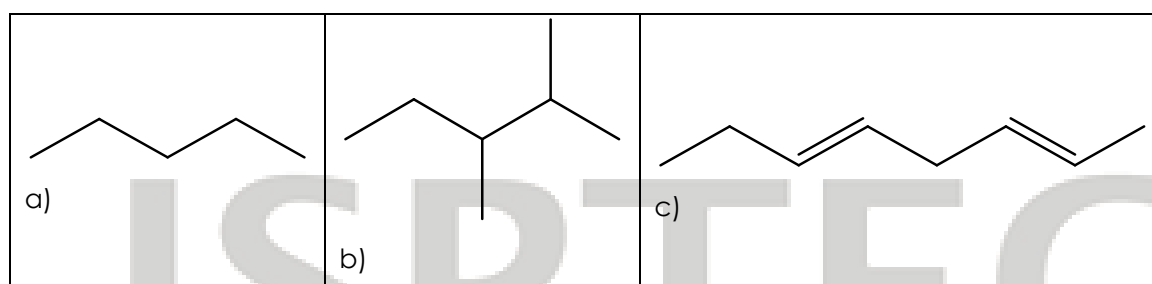
### 8.2.5 Isômeros de compensação ou metâmeros

Os compostos diferem pela posição do heteroátomo na cadeia de carbonos.



### Grau dificuldade baixo

Dê os nomes ou a fórmula segundo a IUPAC, dos seguintes compostos:

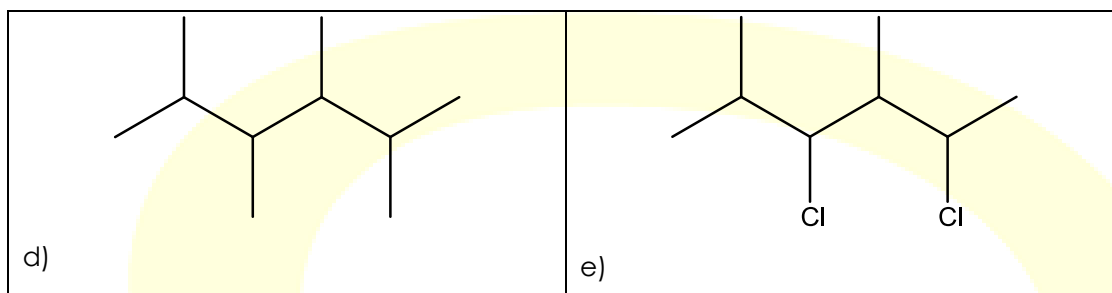


- 1.- Desenhe as fórmulas de um isômero de posição do propanol.
- 2.- Desenhe a fórmula de um isômero de função do propanol.



### Grau dificuldade médio

Dê os nomes ou a fórmula segundo a IUPAC, dos seguintes compostos:



a) 2,2-dimetil-4-propiloctano

Diga que tipo de isomeria apresentamos seguintes pares de compostos.

- 2-metil pentano e 3-metil pentano.
- 2 metil hexano e 2,3-dimetil pentano

### Grau dificuldade alto

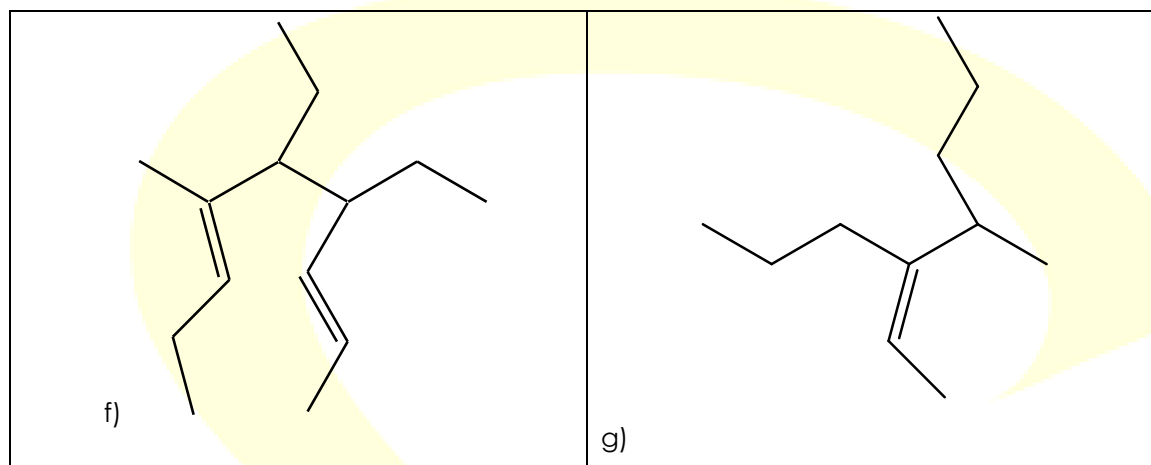
Diga que tipo de isomeria apresentam os seguintes pares de compostos.

- 2-octeno e 3-octeno
- Clopentano e penteno.

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

Dê os nomes ou a fórmula segundo a IUPAC, dos seguintes compostos:



a. 4-cloro-2-hepteno

3.- Desenhe a fórmula de um isómero de cadeia do pentano.

4.- Diga que tipo de isomeria apresentam os seguintes pares de compostos.

- c) 2-metil pentano e 3-metil pentano.
- d) 2 metil hexano e 2,3-dimetil pentano.
- e) 2-octeno e 3-octeno
- f) Clopentano e penteno.

# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS

## **CAPÍTULO IX - BIBLIOGRAFIA**

A ser publicada.



# ISPTEC

INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE TECNOLOGIAS E CIÊNCIAS