

Cálculos básicos em química

Química Geral Teórica

Prof. Guilherme Duarte, Ph. D.

1 O número de Avogadro e o mol

Na última aula vimos que átomos têm massas características e que moléculas são formadas a partir da combinação de um determinado número de átomos. Por exemplo, a água (H_2O) é formada por dois átomos de hidrogênio e um átomo de oxigênio; o metano (CH_4) é formado por um átomo de carbono e quatro átomos de hidrogênio. Por lógica, podemos dizer que a massa molecular é a soma das massas atômicas dos seus constituintes. Assim, no caso da molécula de água:

$$m_{\text{H}_2\text{O}} = m_{\text{O}} + 2m_{\text{H}}. \quad (1)$$

Conferindo uma tabela periódica, vemos que $m_{\text{O}} = 15.999$ u.a.m. e $m_{\text{H}} = 1.0078$ u.a.m., o que resulta, para a molécula de água, uma massa $m_{\text{H}_2\text{O}} = 18.015$ u.a.m.

Utilizar unidades atômicas não é algo prático no dia a dia de um profissional, pois uma unidade de massa atômica é igual a 1.66054×10^{-27} kg. De forma geral, procura-se expressar as quantidades em grandezas que conseguimos mensurar. Em química, usa-se uma unidade chamada mol. A quantidade de uma substância cuja massa em gramas é numericamente igual à sua massa molecular é chamada de mol. 1 mol é definido como a **quantidade de matéria** que contém tantos objetos quanto 12 g de ^{12}C isotopicamente puro. Esse número é conhecido como **constante de Avogadro** (N_A , Equação 2). Assim 1 mol de ^{12}C indica a existência de $\approx 6.02 \cdot 10^{23}$ átomos de ^{12}C .

$$N_A = 6.0221415 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1} \quad (2)$$

Chamamos de **massa molar** (M) a massa, em gramas, de exatamente um mol de determinado composto. Por exemplo, um átomo de cloro tem massa atômica igual a 35.5 u.a.m., portanto 1 mol de átomos de cloro tem 35.5 g; de forma análoga, se uma molécula de água tem massa atômica igual a 18.015 u.a.m., 1 mol tem 18.015 g. A massa molar em gramas de qualquer substância é numericamente igual a sua massa em unidades atômicas de massa. Como não podemos contar molécula por molécula mas podemos pesar materiais com balanças, saber operar com massas molares nos permite pesar uma quantidade de substância e convertê-la imediatamente em **quantidade de matéria**, que é essencial para operar equações químicas.

Considere a seguinte equação química:



A Equação 3 representa a reação entre o ácido clorídrico e o hidróxido de bário para formar cloreto de bário e água. A equação química carrega a informação que duas unidades de HCl reagem com uma unidade de $\text{Ba}(\text{OH})_2$ para formar uma unidade de BaCl_2 e duas unidades de H_2O . Em um primeiro momento, somos tentados a usar apenas as massas para orientar uma reação, mas isso seria um erro. Sabendo que $M_{\text{HCl}} = 36.46 \text{ g mol}^{-1}$ e $M_{\text{Ba}(\text{OH})_2} = 171.34 \text{ g mol}^{-1}$, se tentarmos reagir 2 g de HCl com 1 g de $\text{Ba}(\text{OH})_2$:

$$2 \text{ g HCl} = 0.05486 \text{ mol}$$

$$1 \text{ g Ba}(\text{OH})_2 = 0.0058363 \text{ mol}$$

Como a unidade 1 mol expressa um número específico de partículas (constante de Avogadro), observamos que pesar massas iguais não evita excesso de um componente em relação a outro. Considerando a reação expressa pela Equação 3, 1 g de $\text{Ba}(\text{OH})_2$ (0.005 836 3 mol) somente consegue reagir com 0.011 673 mol de HCl , fazendo restar 0.043 187 mol de ácido, aproximadamente 79 % do material inicial. Esse exemplo deixa claro que massas iguais de substâncias diferentes possuem quantidades de matéria diferentes. O hidróxido de bário é chamado, nesse exemplo, é chamado de **reagente limitante** da reação e o ácido clorídrico está em **excesso**. Note que os coeficientes da equação química (mais conhecidos como **coeficientes estequiométricos**) podem ser interpretados como a quantidade de matéria necessária para a reação química.

Uma fórmula para memorizar é a relação entre a massa (m) de uma substância e a quantidade de matéria (n) presente em si:

$$\frac{m}{M} = n, \quad (4)$$

onde M é a massa molar. Não é incomum se referir a n como “o número de mols” de uma dada substância. Essa fórmula pode ser rapidamente descoberta por meio de análise dimensional, pois:

$$\frac{\text{unidade}[m]}{\text{unidade}[M]} = \frac{\text{g}}{\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}} = \frac{1}{\text{mol}^{-1}} = \text{mol} = \text{unidade}[n].$$

2 Análise elementar e fórmulas empíricas

Chamamos de **fórmula empírica** a fórmula química que expressa o número relativo de elementos em uma substância. Por exemplo, a glicose, um carboidrato importante, é uma molécula de fórmula molecular $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$. Sua fórmula empírica revela as proporções entre os átomos, $6 : 12 : 6 = 1 : 2 : 1$, logo é CH_2O . A fórmula empírica não carrega informação estrutural, apenas as proporções entre os elementos.

Considere uma combinação entre mercúrio (Hg) e cloro (Cl) cuja massa é 76 % mercúrio e 26 % cloro. Se tivermos uma amostra de 100.0 g desse composto teríamos exatamente 76.0 g de mercúrio e 26 g de cloro. Usando a massa molar de cada componente, podemos encontrar as quantidades de matéria de cada componente usando a equação 4:

$$n_{\text{Hg}} = \frac{m_{\text{Hg}}}{M_{\text{Hg}}} = \frac{74.0\text{g}}{200.6\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 0.369 \text{ mol}$$

$$n_{\text{Cl}} = \frac{m_{\text{Cl}}}{M_{\text{Cl}}} = \frac{26.0\text{g}}{35.45\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}} = 0.733 \text{ mol}$$

Para descobrir a razão entre os dois componentes, basta dividir o maior valor pelo menor valor:

$$\frac{n_{\text{Cl}}}{n_{\text{Hg}}} = \frac{0.733 \text{ mol}}{0.369 \text{ mol}} = 1.99 \approx 2.$$

Assim, podemos afirmar que a fórmula empírica do composto de mercúrio e cloro é HgCl_2 . Podemos sistematizar esse procedimento por meio da seguinte sequência de passos:

1. Dada as percentagens em massa de cada elemento, assume-se uma amostra de peso 100.0 g e calcula-se as massas de cada elemento. Observe que se o problema oferecer massas diferentes de 100.0 g, o problema se resolve da mesma forma.

2. Use a massa molar e a Equação 4 para calcular a quantidade de matéria (“número de mols”) de cada elemento.
3. Calcule a razão entre os valores de n de cada elemento dividindo todos pelo menor deles e encontre a fórmula empírica.

Para encontrar a fórmula molecular a partir da fórmula empírica, basta descobrir o múltiplo inteiro que, ao multiplicar a massa molecular da fórmula empírica resulta a massa molecular conhecida.

3 Alguns tipos de reações químicas

Nós já estudamos um pouco sobre a natureza da matéria, sobre medição e agora aprendemos um pouco sobre a relação entre a massa e a quantidade de matéria de uma amostra. Agora nos voltamos às reações químicas, os principais objetos de estudo da disciplina. Alguns tipos de reações químicas convém serem mencionados: reações de combinação, de decomposição, de troca única e de troca dupla. Há outros tipos de reação, mas esses são comuns o suficiente para serem notáveis.

Reações de combinação são aquelas em que os reagentes se combinam para formar um único produto. Por exemplo, a reação de oxidação do alumínio é uma reação desse tipo:



assim como as reações de combustão do carbono e do enxofre:



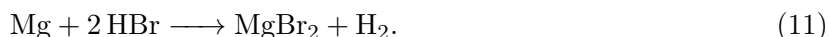
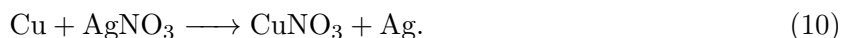
Reações de decomposição são aquelas em que uma substância é transformada em duas ou mais substâncias menos complexas. Por exemplo, carbonatos famosamente se decompõem em temperaturas altas:



Airbags de carros também dependem de uma reação de decomposição para serem efetivos:



Em **reações de troca única**, um elemento de um composto é trocado por outro. Esse tipo de reação também é conhecido como reações de **substituição**:



Em **reações de troca dupla**, os constituintes dos reagentes se reorganizam para formar novos compostos. É uma reação comum em processos de precipitação, isto é, que formam sólidos.



4 Cálculos em reações químicas

Na maioria das vezes os componentes de uma reação química não estão presentes exatamente na sua proporção estequiométrica. É comum colocar excesso de um componente para maximizar a produção do composto de interesse. Por exemplo, considere a reação de combustão do metano (CH_4), o principal componente do gás natural:



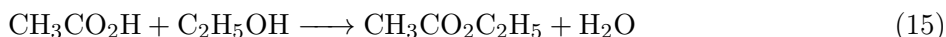
Normalmente as usinas trabalham com excesso de O_2 , pois somente a quantidade de metano determinará a quantidade dos produtos formados. Se tivermos 10 mol de metano, produziremos, no máximo, apenas 10 mol de dióxido de carbono e 20 mol de água, independentemente da quantidade de oxigênio. O metano, assim como o hidróxido de bário no exemplo da Equação 3, é o **reagente limitante** da reação. No laboratório, o controle da presença ou não de excesso se dá na hora da medição da massa do material.

Outro cálculo bastante comum é a quantificação do rendimento de uma reação. A quantidade de produto que se espera que seja formada quando todo o reagente limitante é consumido é chamada de **rendimento teórico**. A quantidade de produto realmente formada é chamada de **rendimento real**. Uma quantidade frequentemente reportada em artigos e demais trabalhos de natureza científica é o **rendimento percentual** (η):

$$\eta = \frac{\text{rendimento real}}{\text{rendimento teórico}} \times 100\% \quad (14)$$

O rendimento frequentemente é diferente de 100 % por diversas razões: os reagentes podem não ter estado o suficientemente disseminados no reator (mistura de reação não homogênea), as condições experimentais podem não ter sido ideais, a reação pode ser reversível, pode ter ocorrido a formação de subprodutos indesejados, material pode ter sido perdido na purificação etc. O rendimento é uma medida da eficiência da reação.

Considere a reação abaixo:



São usados 120 g de $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$ e 230 g de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, formando 132 g de $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5$. Qual é o rendimento da reação?

Primeiramente nós calculamos as massas molares de cada um dos componentes:

$$M_{\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}} = 2M_{\text{C}} + 4M_{\text{H}} + 2M_{\text{O}} \approx 60 \text{ g mol}^{-1}$$

$$M_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}} = 2M_{\text{C}} + 6M_{\text{H}} + 1M_{\text{O}} \approx 46 \text{ g mol}^{-1}$$

$$M_{\text{CH}_3\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5} = 4M_{\text{C}} + 8M_{\text{H}} + 2M_{\text{O}} \approx 88 \text{ g mol}^{-1}$$

A partir das massas molares, podemos calcular as quantidades de matéria de cada componente usando a Equação 4:

$$n_{\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}} = 2.0 \text{ mol}$$

$$n_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}} = 5.0 \text{ mol}$$

$$n_{\text{CH}_3\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5} = 1.5 \text{ mol}$$

Observe que, pela Equação 15, o $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ é o reagente que está em excesso e o $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$ é o reagente limitante. Assim, em uma reação ideal 2.0 mol de cada reagente reagiria para formar 2.0 mol de cada produto. Vimos, entretanto, que só foi formado 1.5 mol de produto, assim, o rendimento da reação é:

$$\eta = \frac{1.5 \text{ mol}}{2.0 \text{ mol}} \times 100\% = 75\%.$$

5 Exercícios de Fixação

1. Calcule as massas molares dos compostos a seguir:

- (i) C_8H_{18}
- (ii) $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$
- (iii) $\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2$
- (iv) $\text{Ba}(\text{MnO}_4)_2$

2. Calcule a fórmula empírica dos compostos a seguir:

- (i) Composto que contém 88.79 % oxigênio e 11.19 % hidrogênio.
- (ii) Composto contendo 64.80 % carbono, 13.62 % hidrogênio e 21.58 % oxigênio.
- (iii) Composto formado pela combinação de 1.926 g de enxofre e 2.233 g de ferro.

3. Considere a reação de decomposição da azida de sódio ($2 \text{NaN}_3 \longrightarrow 2 \text{Na} + 3 \text{N}_2$).

- (i) Quantos mols de N_2 são formados pela decomposição de 50 g de NaN_3 ?
- (ii) Quantos gramas de NaN_3 são necessários para formar 30 g de N_2 ?

4. Se 3.00 g de titânio reage com 6.00 g de gás cloro para formar 7.7 g de TiCl_4 conforme a equação não balanceada abaixo, qual é o rendimento percentual (η) da reação?

