# Substâncias

#### **Gabriel Braun**

Colégio e Curso Pensi, Coordenação de Química



# Sumário

1	O mol e as massas molares		1
	1.1	O mol	1
	1.2	A massa molar	1
2	A determinação da composição		2
	2.1	A composição percentual em massa	3
	2.2	A determinação das fórmulas empíricas	3
	2.3	A composição percentual em massa A determinação das fórmulas empíricas A determinação das fórmulas moleculares	3
3	Os estados da matéria		4
	3.1	A natureza dos gases	4
	3.2	A lei dos gases ideais	4
	3.3	O volume molar e a densidade dos gases	5

## 1 O mol e as massas molares

Números astronômicos de moléculas ocorrem mesmo em pequenas amostras: 1 mL de água contém  $3\times 10^{22}$  moléculas, um número superior ao das estrelas do universo visível. Como você pode determinar esses números e registrá-los de modo simples e claro? Para não perder de vista números enormes de átomos, íons ou moléculas de uma amostra, precisamos de um modo eficiente de determinar e apresentar esses números.

#### 1.1 0 mol

Os químicos descrevem os números de átomos, íons e moléculas em termos de uma unidade chamada **mol**. 1 mol de objetos contém um determinado número de objetos igual ao número de átomos que existe em precisamente 12 g de carbono-12.

A massa do átomo de carbono-12 foi determinada por espectrometria como cerca de  $2\times10^{23}$  g. Isso significa que o número de átomos em exatamente 12 g de carbono-12 é

$$\text{N(carbono-12)} = \frac{12\,\text{g}}{2\times 10^{23}\,\text{g}} = 6\times 10^{23}$$

Como o mol é igual a este número, você pode aplicar a definição a qualquer objeto, não apenas a átomos de carbono. **1 mol** de qualquer objeto corresponde a  $6 \times 10^{23}$  desse objeto.

O mol é a unidade utilizada para medir a propriedade física formalmente chamada de **quantidade de substância**, n. Esse nome, porém, é pouco usado pelos químicos, que preferem referirse a ela, coloquialmente, como **número de mols**.

**Unidades** Como qualquer unidade SI, o mol pode ser usado com prefixos. Por exemplo,  $1\,\mathrm{mmol} = 1 \times 10^{-3}\,\mathrm{mol}$  e  $1\,\mathrm{nmol} = 1 \times 10^{-9}\,\mathrm{mol}$ . Os químicos encontram essas quantidades pequenas quando utilizam produtos naturais raros ou muito caros e fármacos.

O número de objetos por mol,  $6\times 10^{23}\,\mathrm{mol}^{-1}$ , é chamado de **constante de Avogadro**,  $N_A$ . A constante de Avogadro é usada na

conversão entre a quantidade química,  $\mathfrak n$  e o número de átomos, íons ou moléculas,  $\mathsf N$ 

$$N = nN_A$$

**Unidades** A constante de Avogadro *tem unidades*. Ela não é um número puro. Você ouvirá as pessoas se referirem com frequência ao número de Avogadro: elas estão se referindo ao número puro  $6 \times 10^{23}$ .

**EXEMPLO 1** Conversão de número de átomos a mols

Um dispositivo de armazenamento de hidrogênio é capaz de estocar  $1.2 \times 10^{24}$  átomos do elemento.

Calcule a quatidade de hidrogênio no dispositivo.

Etapa 1. De 
$$n = N/N_A$$

$$n = \frac{1,2 \times 10^{24} \text{ H}}{6 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} = \boxed{2 \text{ mol H}}$$

As quantidades de átomos, íons ou moléculas de uma amostra são expressas em mols e a constante de Avogadro é usada para a conversão entre o número de partículas e o número de mols.

#### 1.2 A massa molar

Como você determina a quantidade de átomos presente em uma amostra, já que não é possível contá-los diretamente? Você pode calcular essa quantidade se conhecer a massa da amostra e a **massa molar**, M, a massa por mol de partículas.

- a. A massa molar de um *elemento* é a massa por mol de seus *átomos*.
- b. A massa molar de um *composto molecular* é a massa por mol de suas *moléculas*.
- c. A massa molar de um composto iônico é a massa por mol de suas fórmulas unitárias.

A unidade de massa molecular é sempre gramas por mol  $(g \, mol^{-1})$ . A massa da amostra é a quantidade (em mols) multiplicada pela massa por mol (a massa molar). Assim, se representarmos a massa total da amostra por m, podemos escrever

$$\mathfrak{m}=\mathfrak{n}M$$

Disso decorre que  $\mathfrak{n}=\mathfrak{m}/M$ . Isto é, para encontrar a quantidade de mols,  $\mathfrak{n}$ , divida a massa,  $\mathfrak{m}$ , da amostra pela massa molar da espécie presente.

EXEMPLO 2 Cálculo do número de átomos em uma amostra

Calcule o número de átomos de flúor em 22,8 g de F<sub>2</sub>.

**Etapa 1.** De n = m/M

$$n(F_2) = \frac{22.8 \, \text{g}}{38 \, \text{g mol}^{-1}} = 0.6 \, \text{mol} \, F_2$$

Etapa 2. De  $n = N/N_A$ 

$$N(F_2) = (0.6 \text{ mol } F_2) \times (6 \times 10^{23})$$
  
=  $3.6 \times 10^{23} F_2$ 

Etapa 3. Como cada molécula de F<sub>2</sub> contém dois átomos de F

$$N(F) = 3.6 \times 10^{23} F_2 \times \frac{2 F}{1 F_2}$$
$$= \boxed{7.2 \times 10^{23} F}$$

As massas molares dos elementos são determinadas por espectrometria de massas, que mede as massas dos isótopos e suas abundâncias relativas. A massa por mol dos átomos é a massa de um átomo multiplicada pela constante de Avogadro (o número de átomos por mol):

$$M = m_{\text{átomo}} N_A$$

Quanto maior for a massa de um átomo, maior será a massa molar da substância. Porém, a maior parte dos elementos ocorre na natureza como uma mistura de isótopos. Na química, você quase sempre trata de amostras de elementos naturais, que têm a abundância natural dos isótopos. A massa média do átomo é determinada calculando a média ponderada, a soma dos produtos das massas de cada isótopo,  $m_{isótopo}$ , multiplicada por sua abundância relativa em uma amostra natural,  $f_{isótopo}$ .

$$m_{\text{\'atomo, m\'edia}} = \sum_{is\'otopos}^{\Sigma \text{ significa: soma dos membros a seguir}} f_{is\'otopo} m_{isotopo}$$

A massa molecular média correspondente é

$$M = m_{\text{átomo, média}} N_A$$

Assim, podemos escrever

$$M = \sum_{is\acute{o}topos} f_{is\acute{o}topo} M_{isotopo}$$

#### EXEMPLO 3 Cálculo da massa molar média

O cloro possui dois isótopos naturais: cloro-35 e cloro-37. A massa molar de um átomo de cloro-35 é  $35\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$  e a de um átomo de cloro-37 é  $37\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$ . A composição de uma amostra natural típica de cloro é cerca de 75% de cloro-35 e 25% de cloro-37.

Calcule a massa molar de uma amostra típica de cloro.

Etapa 1. De 
$$M = f_{cloro-35} M_{cloro-35} + f_{cloro-37} M_{cloro-37}$$

$$M = 0.75 \times 35 \,\mathrm{g} \,\mathrm{mol}^{-1} + 0.25 \times 37 \,\mathrm{g} \,\mathrm{mol}^{-1}$$
$$= \boxed{35.5 \,\mathrm{g} \,\mathrm{mol}^{-1}}$$

**Ponto para pensar** Apesar de existir apenas um isótopo natural do iodo, o iodo-127, sua massa molar é  $126,9 \,\mathrm{g}\,\mathrm{mol}^{-1}$ .

Para calcular as massas molares de compostos moleculares e iônicos, use as massas molares dos elementos presentes: a massa molar de um composto é a soma das massas molares dos elementos que constituem a molécula ou a fórmula unitária. É preciso levar em conta o número de átomos ou íons na fórmula molecular ou na fórmula unitária do composto iônico. Assim, 1 mol do composto iônico  $Al_2(SO_4)_3$  contém 2 mols de Al, 3 mols d

$$\begin{split} M(Al_2(SO_4)_3) &= 2M(Al) + 3M(S) + 12M(O) \\ &= 2(27\,g\,mol^{-1}) + 3(32\,g\,mol^{-1}) + 12(16\,g\,mol^{-1}) \\ &= \boxed{346\,g\,mol^{-1}} \end{split}$$

A massa molar é importante quando queremos saber o número de átomos de uma amostra. Seria impossível contar  $6\times 10^{23}$  átomos de um elemento, mas é muito fácil medir uma massa igual à massa molar do elemento em gramas.

EXEMPLO 4 Cálculo da massa a partir do número de mols

Calcule a massa de 0,1 mol de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.

Etapa 1. A massa molar do H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> é:

$$\begin{split} M &= 2M(H) + M(S) + 4M(O) \\ &= 2(1\,g\,mol^{-1}) + (32\,g\,mol^{-1}) + 4(16\,g\,mol^{-1}) \\ &= 98\,g\,mol^{-1} \end{split}$$

**Etapa 2.** Converta a quantidade em massa (m = nM).

$$m = (0,1 \text{ mol}) \times (98 \text{ g mol}^{-1}) = \boxed{9.8 \text{ g}}$$

Usa-se a massa molar de um composto, isto é, a massa por mol de suas moléculas ou fórmulas unitárias, para a conversão entre a massa de uma amostra e o número de moléculas ou fórmulas unitárias que ela contém.

# 2 A determinação da composição

A **fórmula empírica** de um composto expressa o número relativo de átomos de cada elemento do composto. Assim, por exemplo, a fórmula empírica da glicose, CH<sub>2</sub>O, mostra que os átomos de carbono, hidrogênio e oxigênio estão na razão 1 : 2 : 1. Os elementos estão nessa proporção independentemente do tamanho da amostra. A fórmula molecular dá o número real de átomos de cada elemento da molécula. A **fórmula molecular** da glicose,

C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>6</sub>, mostra que cada molécula de glicose contém 6 átomos de carbono, 12 átomos de hidrogênio e 6 átomos de oxigênio.

Como a fórmula empírica informa apenas as proporções dos números de átomos de cada elemento, compostos distintos com fórmulas moleculares diferentes podem ter a mesma fórmula empírica. Assim, o formaldeído CH<sub>2</sub>O, (o preservativo das soluções de formol), o ácido acético,  $C_2H_4O_2$  (o ácido do vinagre), e o ácido lático,  $C_3H_6O_3$  (o ácido do leite azedo), têm todos a fórmula empírica (CH<sub>2</sub>O) da glicose, mas são compostos diferentes com propriedades diferentes.

# 2.1 A composição percentual em massa

Para determinar a fórmula empírica de um composto, começase por medir a massa de cada elemento presente na amostra. O resultado normalmente é apresentado na forma da composição percentual em massa, isto é, a massa de cada elemento expressa como uma percentagem da massa total:

$$f = \frac{massa~do~elemento~na~amostra}{massa~da~amostra} \label{eq:f}$$

Como a composição percentual em massa não depende do tamanho da amostra é uma propriedade **intensiva** - ela representa a composição de qualquer amostra da substância. A principal técnica de determinação da composição percentual em massa de compostos orgânicos desconhecidos é a análise por combustão.

A classificação das propriedades As propriedades são classificadas segundo sua dependência do tamanho da amostra. - Uma propriedade extensiva depende do tamanho (extensão) da amostra. - Uma propriedade intensiva não depende do tamanho da amostra.

Se a fórmula química de um composto já é conhecida, a composição percentual em massa pode ser obtida a partir daquela fórmula.

**EXEMPLO 5** Cálculo da fração mássica de um elemento em um composto

Calcule a fração mássica de hidrogênio na água.

Etapa 1. De 
$$f(H) = \mathfrak{m}(H)/\mathfrak{m}(H_2O)$$

$$\begin{split} f(H) &= \frac{(2\,\text{mol }H) \times (1\,\text{g mol}^{-1})}{(1\,\text{mol }H_2\text{O}) \times (18\,\text{g mol}^{-1})} \\ &= 0,\!112 \\ &= \boxed{11,\!2\%} \end{split}$$

A composição percentual em massa é obtida pelo cálculo da fração devida a cada elemento presente na massa total de um composto. O resultado é expresso em percentagem.

# 2.2 A determinação das fórmulas empíricas

Para converter a composição percentual em uma fórmula empírica, converta as percentagens em massa de cada tipo de átomo no número relativo de átomos de cada elemento. O procedimento mais simples é imaginar que a amostra tem exatamente 100 g

de massa. Desse modo, a composição percentual em massa dá a massa em gramas de cada elemento. Então, a massa molar de cada elemento é usada para converter essas massas em mols e, depois, encontrar o número relativo de mols de cada tipo de átomo.

**Dica** Sempre que precisarmos calcular uma propriedade intensiva podemos utilizar uma base de cálculo.

**EXEMPLO 6** Determinação da fórmula empírica a partir da composição percentual em massa

Uma amostra de um composto desconhecido foi enviada a um laboratório para uma análise de combustão. A composição encontrada foi 40,9% de carbono, 4,58% de hidrogênio e 54,5% de oxigênio.

**Determine** a fórmula empírica do composto.

**Etapa 1**. A massa de cada elemento em 100 g do composto é igual a sua percentagem em massa em gramas.

$$m(C) = 40.9 g$$
  
 $m(H) = 4.58 g$   
 $m(O) = 54.5 g$ 

**Etapa 2.** Converta cada massa em quantidade de átomos usando a massa molar do elemento.

$$n(C) = \frac{40.9 \text{ g}}{12 \text{ g mol}^{-1}} = 3,41 \text{ mol C}$$

$$n(H) = \frac{4,58 \text{ g}}{1 \text{ g mol}^{-1}} = 4,54 \text{ mol H}$$

$$n(O) = \frac{54,5 \text{ g}}{16 \text{ g mol}^{-1}} = 3,41 \text{ mol O}$$

**Etapa 3**. Divida cada quantidade de átomos pela menor quantidade (3,41 mol).

C: 
$$\frac{3,41 \text{ mol}}{3,41 \text{ mol}} = 1,00$$
  
H:  $\frac{4,54 \text{ mol}}{3,41 \text{ mol}} = 1,33 = \frac{4}{3}$   
O:  $\frac{3,41 \text{ mol}}{3,41 \text{ mol}} = 1,00$ 

**Etapa 4.** Como um composto só pode conter um número inteiro de átomos, multiplique pelo menor fator que gere um número inteiro para cada elemento (3).

$$3\times (C_1H_{4/3}O_1) = \boxed{C_3H_4O_3}$$

A fórmula empírica de um composto é determinada a partir da composição percentual em massa e da massa molar dos elementos presentes.

# 2.3 A determinação das fórmulas moleculares

Outra informação, a massa molar, é necessária para você descobrir a fórmula molecular de um composto molecular. Para encontrar

a fórmula molecular, você precisará decidir quantas fórmulas unitárias empíricas são necessárias para explicar a massa molar observada.

**EXEMPLO 7** Determinação da fórmula molecular a partir da fórmula empírica

A espectrometria de massas realizada em laboratório mostrou que a massa molar da amostra desconhecida com fórmula empírica  $C_3H_4O_3$  é  $176\,\mathrm{g\,mol}^{-1}$ .

**Determine** a fórmula molecular do composto.

**Etapa 1.** Calcule a massa molar de uma fórmula unitária de  $C_3H_4O_3$ .

$$\begin{split} M(C_3H_4O_3) &= 3M(C) + 4M(H) + 3M(O) \\ &= 3(12\,g\,\text{mol}^{-1}) + 4(1\,g\,\text{mol}^{-1}) + 3(16\,g\,\text{mol}^{-1}) \\ &= 88\,g\,\text{mol}^{-1} \end{split}$$

**Etapa 2.** Divida a massa molar do composto pela massa da fórmula unitária empírica.

$$x = \frac{176 \,\mathrm{g \, mol}^{-1}}{88 \,\mathrm{g \, mol}^{-1}} = 2$$

**Etapa 3**. Multiplique os coeficientes na fórmula empírica pelo fator 2 para obter a fórmula molecular.

$$2\times (C_3H_4O_3)= \boxed{C_6H_8O_6}$$

# 3 Os estados da matéria

As substâncias e a matéria, em geral, podem assumir diferentes formas, chamadas de estados da matéria. Os três estados da matéria mais comuns são sólido, líquido e gás:

- a. Um sólido é uma forma da matéria que retém sua forma e não flui.
- b. Um líquido é uma forma fluida da matéria, que tem superfície bem definida e que toma a forma do recipiente que o contém.
- Um gás é uma forma fluida da matéria que ocupa todo o recipiente que o contém.

O termo **vapor** é usado para indicar que uma substância, normalmente sólida ou líquida, está na forma de gás. Por exemplo, a água existe nos estados sólido (gelo), líquido e vapor.

## 3.1 A natureza dos gases

As amostras de gases suficientemente grandes para serem estudadas são exemplos de **matéria em grosso** (*bulk*), isto é, matéria formada por um número muito grande de moléculas. Suas propriedades são consequência do comportamento coletivo dessas partículas. No caso de um gás, por exemplo, quando você pressiona o êmbolo de uma bomba para encher o pneu de sua bicicleta, você sente que o ar é compressível – isto é, que ele pode ser confinado em um volume menor do que o inicial. O ato de reduzir o volume de uma amostra de gás é chamado de compressão. A

observação de que os gases são mais compressíveis do que os sólidos e líquidos sugere que existe muito espaço livre entre as moléculas dos gases.

## 3.2 A lei dos gases ideais

A lei dos gases ideais

$$PV = nRT$$

A constante R é chamada de **constante dos gases** e é *universal*, já que tem o mesmo valor para todos os gases. Em unidades SI (pressão em pascals, volume em metros cúbicos, temperatura em kelvins e quantidade em mols), R é obtido em joules por kelvin por mol:

$$R = 8,31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

para valores de volume e pressão expressos em outras unidades.

$$R = 0.0821 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 62.3 \text{ Torr L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

A lei dos gases ideais é um exemplo de **equação de estado**, isto é, uma expressão que mostra como a pressão de uma substância se relaciona com a temperatura, o volume e a quantidade de substância na amostra.

**Leis-limite** Um gás hipotético que obedece à lei dos gases ideais sob todas as condições é chamado de **gás ideal**. Todos os gases reais obedecem à equação com precisão crescente à medida que a pressão é reduzida até chegar a zero. A lei dos gases ideais, portanto, é um exemplo de uma **lei-limite**, isto é, uma lei que só é válida dentro de certos limites, neste caso, quando  $P \rightarrow 0$ . Embora a lei dos gases ideais seja uma lei-limite, ela é, na realidade, razoavelmente correta em pressões normais, logo, podemos usá-la para descrever o comportamento de muitos gases nas condições normais.

EXEMPLO 8 Cálculo da pressão de uma amostra

Uma tela de plasma possui células de 0,03 mm<sup>3</sup> contendo 10 ng de gás neônio a 34 °C.

Calcule a pressão no interior das células.

**Etapa 1.** Organize os dados. Converta a massa em quantidade (n = m/M) e a temperatura de graus Celsius em kelvins (adicione 273).

$$\begin{split} n &= \frac{10 \times 10^{-9}\,\text{g}}{20\,\text{g mol}^{-1}} = 5 \times 10^{-10}\,\text{mol} \\ T &= (34 + 273)\,\text{K} = 307\,\text{K} \\ V &= 0,\!03\,\text{mm}^3 \times \frac{1\,\text{L}}{10^6\,\text{mm}^3} = 3 \times 10^{-8}\,\text{L} \end{split}$$

**Etapa 2.** Rearranje PV = nRT para P = nRT/V e substitua os dados, selecionando um valor de R expresso em atm e litros:

$$P = \underbrace{\frac{(5 \times 10^{-10} \, \text{mol}) \times \overbrace{(0,082 \, \text{atm} \, \text{L} \, \text{K}^{-1} \, \text{mol}^{-1})}^{R} \times \overbrace{(307 \, \text{K})}^{T}}_{(3E - 8L)}$$

$$= \underbrace{0,4 \, \text{atm}}$$

As leis dos gases podem ser usadas, separadamente, nos cálculos em que uma só variável é alterada, como o aquecimento de uma quantidade fixa de gás sob volume constante. A lei dos gases ideais permite predições quando duas ou mais variáveis são alteradas simultaneamente.

$$\underbrace{\overbrace{\frac{P_1V_1}{n_1T_1}}^{P_1V_1}}_{\text{condições iniciais}} = \underbrace{\overbrace{\frac{P_1V_1}{n_1T_1}}^{\text{condições finai}}}_{\text{condições finai}}$$

Esta expressão é denominada **lei dos gases combinada**. Ela é uma consequência direta da lei dos gases ideais, não uma nova lei.

A lei dos gases ideais, PV = nRT, resume as relações entre a pressão, o volume, a temperatura e a quantidade de moléculas de um gás ideal e é usada para avaliar o efeito das mudanças nestas propriedades. Ela é um exemplo de lei-limite.

## 3.3 O volume molar e a densidade dos gases

A lei dos gases ideais também pode ser usada para calcular o volume molar de um gás ideal sob qualquer condição de temperatura e pressão

$$V_m = \frac{V}{n} = \frac{nRT/P}{n} = \frac{RT}{P}$$

Em **condições normais de temperatura e pressão** (CNTP), isto é, exatamente 0 °C (273 K) e 1 atm, o volume molar de um gás ideal é  $22,4 \,\mathrm{L\,mol}^{-1}$ . A 25 °C (298 K) e 1 atm, as condições normalmente usadas para relatar dados químicos, o volume molar de um gás ideal é  $24,5 \,\mathrm{L\,mol}^{-1}$ .

A densidade de massa, d, do gás, ou simplesmente **densidade**, como em qualquer outra substância, é a massa da amostra dividida por seu volume, d=m/V. De modo geral, a densidade dos gases é expressa em gramas por litro. Por exemplo, a densidade do ar é aproximadamente 1,6 g L $^{-1}$  nas CNTP. A densidade é inversamente proporcional ao volume molar e, em determinada temperatura, é proporcional à pressão.

$$d = \frac{m}{V} = \frac{nM}{nV_m} = \frac{M}{V_m} = \frac{PM}{RT}$$

Essa equação mostra que - Em determinados valores de pressão e temperatura, quanto maior for a massa molar do gás, maior é a densidade. - Quando a temperatura é constante, a densidade de um gás aumenta com a pressão (a pressão aumenta devido à adição de material ou à redução do volume). - O aquecimento de um gás livre para se expandir sob pressão constante aumenta o volume ocupado pelo gás e, portanto, reduz sua densidade.

**Ponto para pensar** Por que os balões de ar quente flutuam no ar?

**EXEMPLO 9** Cálculo da massa molar de um gás a partir de sua densidade

O composto orgânico volátil geraniol é um componente do óleo de rosas. A densidade de seu vapor a 260 °C e 103 Torr é  $0,48~\rm g~L^{-1}$ .

Calcule a massa molar do geraniol.

**Etapa 1**. Organize os dados. Converta a temperatura de graus Celsius em kelvins.

$$d = 0,48 g L^{-1}$$
  
 $P = 103 Torr$   
 $T = (260 + 273) K = 103 Torr$ 

Etapa 2. Rearranje a equação da densidade de um gás ideal (d = PM/RT) para o cálculo da massa molar

$$M = dRT/P$$

**Etapa 3**. Calcule a massa molar. Selecione um valor de R expresso em torr e litros:

$$\begin{split} M = & \underbrace{\frac{\overset{d}{(0,48\,\text{g}\,L^{-1})} \times \overbrace{(62,4\,L\,\text{Torr}\,K^{-1}\,\text{mol}^{-1})}^{R} \times \overbrace{(533\,K)}^{T}}_{\text{p}} \\ = & \underbrace{\frac{(103\,\text{Torr})}{\text{155}\,\text{g}\,\text{mol}^{-1}}} \end{split}$$

As condições normais de temperatura e pressão (CNTP) são (273 K) e 1 atm. As concentrações molares e as densidades dos gases aumentam quando eles são comprimidos, mas diminuem quando eles são aquecidos. A densidade de um gás depende de sua massa molar.