

Estequiometria

Gabriel Braun

Colégio e Curso Pensí, Coordenação de Química



Sumário

1	As equações químicas	1
1.1	A representação das reações químicas	1
1.2	As equações químicas balanceadas	1
2	As estequiometria das reações	2
2.1	As predições mol a mol	2
2.2	As predições massa a massa	2
3	Os limites da reação	3
3.1	O rendimento da reação	3
3.2	Os reagentes limitantes	3
4	A análise gravimétrica	4
4.1	A análise por combustão	4
4.2	A análise térmica	5

1 As equações químicas

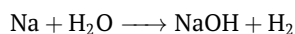
O crescimento de uma criança, a produção de polímeros a partir do petróleo e a digestão da comida são o resultado de **reações químicas**, processos nos quais uma ou mais substâncias se convertem em outras substâncias. Este tipo de processo é uma mudança química. Os materiais iniciais são chamados de **reagentes**. As substâncias formadas são chamadas de **produtos**. Os produtos químicos disponíveis no laboratório também são chamados de reagentes.

1.1 A representação das reações químicas

Uma reação química é simbolizada por uma seta:



O sódio, por exemplo, é um metal mole e brilhante, que reage vigorosamente com água. Quando uma pequena quantidade do metal sódio é colocada em um recipiente com água, ocorre uma reação violenta, com formação rápida de gás hidrogênio e hidróxido de sódio que permanece em solução. Esta reação pode ser descrita como:



Esse tipo de expressão é chamado de **equação simplificada**, porque mostra o essencial da reação (as identidades dos reagentes e dos produtos) em termos de fórmulas químicas. Uma equação simplificada é um resumo *qualitativo* de uma reação química.

Para resumir as reações quantitativamente, é preciso reconhecer que os átomos não são criados nem destruídos em uma reação química: eles simplesmente mudam de parceiros. A principal evidência para essa conclusão é que não há mudança na massa total quando uma reação ocorre em um recipiente selado. A observação de que a massa total é constante durante uma reação química é chamada de **lei de conservação das massas**. Uma vez que átomos não podem ser criados ou destruídos, as fórmulas químicas de uma equação simplificada precisam ser multiplicadas por fatores que igualem os números de determinado átomo

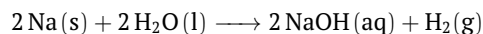
em cada lado da seta. Diz-se que a expressão resultante está balanceada e é chamada de **equação química**. Então, a equação balanceada é



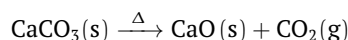
Agora, existem quatro átomos de H, dois átomos de Na e dois átomos de O em cada lado da equação, de acordo, portanto, com a lei de conservação das massas. Os números que multiplicam todas as fórmulas químicas de uma equação química (por exemplo, o 2 que multiplica H_2O) são denominados **coeficientes estequiométricos** da substância. Um coeficiente 1 (como no caso de H_2) não é escrito explicitamente.

Atenção Atenção para não confundir coeficientes com subscritos. Os subscritos em uma fórmula dizem quantos átomos daquele elemento estão presentes em uma molécula. Os coeficientes mostram quantas fórmulas unitárias ou moléculas estão presentes.

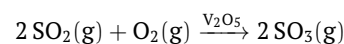
Uma equação química normalmente indica também o estado físico de cada reagente e produto, usando um símbolo associado aos **estados da matéria**: sólido (s), líquido (l), gás (g) e solução em água (aq). Para a reação entre o sódio e a água líquida, por exemplo, a equação química completa e balanceada é, portanto,



Quando é importante enfatizar que uma reação requer temperatura elevada, a letra grega Δ (delta) é escrita sobre a seta. Assim, por exemplo, a conversão de calcário em cal ocorre em cerca de 800°C e podemos escrever



Algumas vezes, um **catalisador**, uma substância que acelera uma reação mas não é consumida, é adicionado. Assim, o pentóxido de vanádio, V_2O_5 , é um catalisador usado em uma etapa do processo industrial de produção de ácido sulfúrico. A presença de um catalisador é indicada escrevendo-se a fórmula do catalisador sobre a seta da reação:

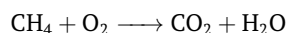


Uma equação química balanceada simboliza as mudanças qualitativas e quantitativas que ocorrem em uma reação química. Os coeficientes estequiométricos resumem as quantidades relativas (números de mols) dos reagentes e produtos que participam da reação.

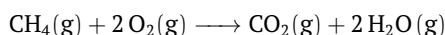
1.2 As equações químicas balanceadas

Uma boa estratégia para equações mais complexas consiste em balancear um elemento por vez, começando com aquele que aparece no menor número de fórmulas, e balanceando os elementos

não combinados no final. Por exemplo, suponha que você precise balancear a equação da combustão do metano. A combustão se refere à queima no ar, mais especificamente, à reação com oxigênio molecular. Neste caso, os produtos são o dióxido de carbono e a água. Primeiro, escreva a equação simplificada:



É mais fácil balancear inicialmente o carbono e o hidrogênio, deixando o oxigênio para o final. Depois de balancear a equação, especifique os estados da matéria. Se água for produzida nas condições do experimento, a equação é escrita como:



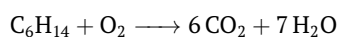
EXEMPLO 1 Balanceamento de uma equação química

Balanceie a equação química da combustão de hexano líquido, C_6H_{14} , em dióxido de carbono gasoso e água gasosa.

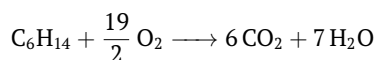
Etapa 1. Escreva a equação simplificada.



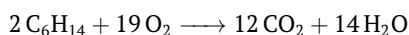
Etapa 2. Balanceie o carbono e o hidrogênio



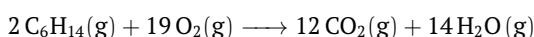
Etapa 3. Balanceie agora o oxigênio. Neste caso, um coeficiente estequiométrico fracionário será necessário.



Etapa 4. A equação está balanceada. Multiplique por 2 para eliminar a fração e obter os menores coeficientes inteiros possíveis.



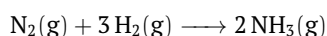
Etapa 5. Informe os estados da matéria.



Uma equação química expressa uma reação química em termos das fórmulas químicas. Os coeficientes estequiométricos são escolhidos de modo a mostrar que os átomos não são criados nem destruídos na reação.

2 As estequiometria das reações

Algumas vezes precisamos saber que quantidade de produto esperar em uma reação ou quanto reagente precisamos utilizar para fabricar a quantidade desejada de produto. Para fazer este tipo de cálculo, você vai usar o aspecto quantitativo das reações químicas, denominado estequiometria das reações, na qual os coeficientes estequiométricos em uma reação química balanceada são interpretados com base nas quantidades relativas que reagem ou são produzidas. Logo, os coeficientes estequiométricos na reação

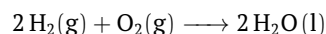


indicam que, quando 1 mol de N_2 reage, 3 mols de H_2 são consumidos e produzem-se 2 mol de NH_3 . As quantidades relativas de reagentes e produtos envolvidos em uma reação química são resumidas como **relações estequiométricas**.

$$\frac{n(\text{N}_2)}{1} = \frac{n(\text{H}_2)}{3} = \frac{n(\text{NH}_3)}{2}$$

2.1 As predições mol a mol

A estequiometria tem aplicações importantes, como a estimativa da quantidade de produto que se forma em uma reação. Por exemplo, em algumas células a combustível usadas para gerar eletricidade, o oxigênio reage com o hidrogênio para produzir água. Vejamos como calcular a quantidade de água formada quando 0,25 mol de O_2 reage com o gás hidrogênio. A equação química da reação é



A informação de que 1 mol de O_2 reage para formar 2 mol de H_2O é resumida, escrevendo a relação estequiométrica entre o oxigênio e a água:

$$\frac{n(\text{O}_2)}{1} = \frac{n(\text{H}_2\text{O})}{2}$$

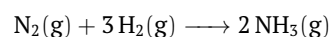
Essa relação permite relacionar a quantidade de moléculas de O_2 à quantidade de moléculas de H_2O produzidas.

$$n(\text{H}_2\text{O}) = 0,25 \text{ mol} \times \frac{2}{1} = 0,5 \text{ mol}$$

EXEMPLO 2 Cálculo da quantidade de produto que pode ser obtida de uma dada quantidade de reagente

Calcule a quantidade de amônia, NH_3 , que é produzida a partir de 6 mol de gás hidrogênio na reação com gás nitrogênio.

Etapa 1. Balanceie a equação química.



Etapa 2. Use a relação estequiométrica para converter a quantidade de H_2 na quantidade de NH_3 .

$$n(\text{NH}_3) = 6 \text{ mol} \times \frac{2}{3} = \boxed{4 \text{ mol}}$$

A equação química balanceada de uma reação serve para estabelecer a relação estequiométrica, o fator usado para converter a quantidade de uma substância na quantidade de outra.

2.2 As predições massa a massa

Para determinar a massa de produto que pode ser formada a partir da massa conhecida de um reagente, a massa do reagente é convertida em quantidade em mols utilizando sua massa molar. Após, a relação estequiométrica da equação balanceada é utilizada para estimar a quantidade de produto em mols. Por fim, esta quantidade de produto é convertida em massa utilizando sua massa molar.

EXEMPLO 3 Cálculo da massa de produto que pode ser obtida de uma dada massa de reagente

Em uma siderúrgica, o óxido de ferro(III), Fe_2O_3 , presente no minério de ferro é reduzido por monóxido de carbono ao metal ferro e ao gás dióxido de carbono em um alto-forno.

Calcule a massa de óxido de ferro necessária para produzir 7 kg de ferro.

Etapa 1. Balanceie a equação química.



Etapa 2. Converta a massa de ferro em quantidade utilizando sua massa molar ($n = m/M$). A massa molar do Fe é 56 g mol^{-1} .

$$n(\text{Fe}) = \frac{7 \text{ kg}}{56 \text{ g mol}^{-1}} = 125 \text{ mol}$$

Etapa 3. Use a relação estequiométrica para converter a quantidade de Fe na quantidade de Fe_2O_3 .

$$n(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 125 \text{ mol} \times \frac{1}{2} = 62,5 \text{ mol}$$

Etapa 4. Converta a quantidade de Fe_2O_3 em massa utilizando sua massa molar ($m = nM$). A massa molar do Fe_2O_3 é 160 g mol^{-1} .

$$m(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 62,5 \text{ mol} \times 160 \text{ g mol}^{-1} = \boxed{10 \text{ kg}}$$

Em um cálculo massa a massa, converta a massa fornecida em quantidade de mols, aplique relação estequiométrica para obter a quantidade desejada e, por fim, converta a quantidade de mols em massa da substância desconhecida.

expressa como percentagem:

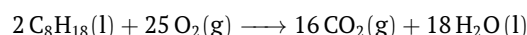
$$\eta = \frac{\text{rendimento real}}{\text{rendimento teórico}}$$

EXEMPLO 4 Cálculo do rendimento percentual de um produto

A combustão incompleta do combustível em um motor mal calibrado pode produzir monóxido de carbono, tóxico, junto com o dióxido de carbono e a água normalmente obtidos. No teste de um motor, 684 g de octano foram incinerados sob certas condições, obtendo-se 1,9 kg de dióxido de carbono.

Calcule o rendimento percentual da formação de dióxido de carbono.

Etapa 1. Balanceie a equação química.



Etapa 2. Converta a massa de octano dada em gramas em quantidade utilizando sua massa molar ($n = m/M$). A massa molar do C_8H_{18} é 114 g mol^{-1} .

$$n(\text{C}_8\text{H}_{18}) = \frac{684 \text{ g}}{114 \text{ g mol}^{-1}} = 6 \text{ mol}$$

Etapa 3. Use a relação estequiométrica para converter a quantidade de C_8H_{18} na quantidade de CO_2 .

$$n(\text{CO}_2) = 6 \text{ mol} \times \frac{16}{2} = 48 \text{ mol}$$

Etapa 4. Converta a quantidade de CO_2 em massa usando a massa molar ($m = nM$). A massa molar do CO_2 é 44 g mol^{-1} .

$$m(\text{CO}_2) = 48 \text{ mol} \times 44 \text{ g mol}^{-1} = 2,11 \text{ kg}$$

Etapa 5. Calcule o rendimento percentual de dióxido de carbono, sabendo que somente 1,9 kg foi produzido, não 2,11 kg.

$$\eta(\text{CO}_2) = \frac{1,9 \text{ kg}}{2,11 \text{ kg}} = 0,9 = \boxed{90\%}$$

3 Os limites da reação

Os cálculos estequiométricos da quantidade de massa de produto formado em uma reação baseiam-se em uma visão ideal do mundo. Eles supõem, por exemplo, que as substâncias reagem exatamente como está escrito em uma equação química. Na prática, isso nem sempre acontece. Uma parte dos reagentes pode ser consumida em reações competitivas, isto é, reações que têm a mesma duração da que você está estudando e usam alguns dos mesmos reagentes. Outra possibilidade é que a reação não esteja completa quando as medidas são feitas. Uma terceira possibilidade é que muitas reações não se completam. Aparentemente, elas se interrompem quando certa parte dos reagentes foi consumida. Portanto, a quantidade real do produto pode ser inferior à que foi calculada a partir da estequiometria da reação.

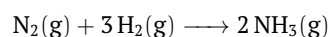
3.1 O rendimento da reação

O **rendimento teórico** de uma reação é a quantidade *máxima* (mols, massa ou volume) de produto que pode ser obtida a partir de uma determinada quantidade de reagente. O **rendimento percentual**, η , é a fração do rendimento teórico de fato produzida,

3.2 Os reagentes limitantes

O **reagente limitante** de uma reação é o reagente que determina o rendimento máximo do produto. Um reagente limitante é como uma peça com pouco estoque em uma fábrica de motocicletas. Imagine que só existam oito rodas e sete chassis de motos. Como cada chassi requer duas rodas, só existem rodas suficientes para quatro motos. Em outras palavras, as rodas fazem o papel de reagente limitante. Quando todas as rodas forem usadas, três chassis permanecerão sem uso porque há chassis em excesso.

Em alguns casos, o reagente limitante não é tão óbvio e precisa ser encontrado por cálculos. Por exemplo, para identificar o reagente limitante na reação



é preciso comparar o número de mols de cada elemento fornecido com coeficientes estequiométricos. Assim, vamos supor que você tenha disponíveis 1 mol de N_2 , mas somente 2 mol de H_2 . Como a

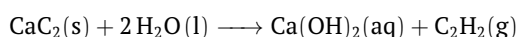
quantidade de hidrogênio é menor do que o necessário, segundo a relação estequiométrica, o hidrogênio é o reagente limitante, mesmo estando presente em quantidade maior. Uma vez identificado o reagente limitante, é possível calcular a quantidade de produto que pode se formar. Você também pode calcular a quantidade de reagente em excesso no final da reação.

EXEMPLO 5 Identificação do reagente limitante

O carvão de cálcio, CaC_2 , reage com água para formar hidróxido de cálcio e o gás inflamável etino, C_2H_2 . Em um experimento, 100 g de água reagem com 100 g de carvão de cálcio.

- Calcule massa de etino que pode ser obtida.
- Calcule massa do reagente em excesso que permanece após o término da reação.

Etapa 1. Balanceie a equação química.



Etapa 2. Converta as massas em quantidade usando a massa molar ($n = m/M$). As massas molares do CaC_2 e da H_2O são 64 g mol^{-1} e 18 g mol^{-1} , respectivamente.

$$n(\text{CaC}_2) = \frac{100 \text{ g}}{64 \text{ g mol}^{-1}} = 1,56 \text{ mol}$$

$$n(\text{H}_2\text{O}) = \frac{100 \text{ g}}{18 \text{ g mol}^{-1}} = 5,55 \text{ mol}$$

Etapa 3. Para cada reagente, calcule quantos mols de produto (C_2H_2) ele forma.

Para o CaC_2 :

$$n(\text{C}_2\text{H}_2) = 1,56 \text{ mol} \times \frac{1}{1} = 1,56 \text{ mol}$$

Para a H_2O :

$$n(\text{C}_2\text{H}_2) = 5,55 \text{ mol} \times \frac{1}{2} = 2,78 \text{ mol}$$

O CaC_2 só pode produzir 1,56 mol de C_2H_2 . Portanto, ele é o reagente limitante.

Etapa 4. Converta a quantidade de C_2H_2 em massa usando a massa molar ($m = nM$). A massa molar do C_2H_2 é 26 g mol^{-1} .

$$m(\text{C}_2\text{H}_2) = 1,56 \text{ mol} \times 26 \text{ g mol}^{-1} = \boxed{40,6 \text{ g}}$$

Etapa 5. O reagente em excesso é a H_2O . Como 5,55 mol H_2O foram fornecidos e 3,12 mol H_2O foram consumidos, a quantidade de água que sobrou é $5,55 \text{ mol} - 3,12 \text{ mol} = 2,43 \text{ mol}$. Portanto, a massa do reagente em excesso ao final da reação é

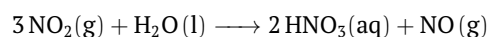
$$m_{\text{final}}(\text{H}_2\text{O}) = 2,43 \text{ mol} \times 18 \text{ g mol}^{-1} = \boxed{43,8 \text{ g}}$$

EXEMPLO 6 Cálculo do rendimento percentual de um reagente limitante

O processo Ostwald é usado para a produção de ácido nítrico a partir da amônia. Na última etapa do processo, 267 kg de dióxido de nitrogênio reagiram com 72 kg de água para produzir óxido nítrico, NO , e 245 kg de ácido nítrico, HNO_3 .

Calcule o rendimento percentual da formação de ácido nítrico.

Etapa 1. Balanceie a equação química.



Etapa 2. Converta as massas em quantidade usando a massa molar ($n = m/M$). As massas molares do NO_2 e da H_2O são 46 g mol^{-1} e 18 g mol^{-1} , respectivamente.

$$n(\text{NO}_2) = \frac{267 \text{ kg}}{46 \text{ g mol}^{-1}} = 6 \text{ kmol}$$

$$n(\text{H}_2\text{O}) = \frac{72 \text{ kg}}{18 \text{ g mol}^{-1}} = 4 \text{ kmol}$$

Etapa 3. Para cada reagente, calcule quantos mols de produto (HNO_3) ele forma.

Para o NO_2 :

$$n(\text{HNO}_3) = 6 \text{ kmol} \times \frac{2}{3} = 4 \text{ kmol}$$

Para a H_2O :

$$n(\text{HNO}_3) = 4 \text{ kmol} \times \frac{2}{1} = 8 \text{ kmol}$$

O NO_2 só pode produzir 4 kmol de HNO_3 . Portanto, ele é o reagente limitante.

Etapa 4. Converta a quantidade de HNO_3 em massa usando a massa molar ($m = nM$). A massa molar do HNO_3 é 77 g mol^{-1} .

$$m(\text{HNO}_3) = 4 \text{ kmol} \times 77 \text{ g mol}^{-1} = 308 \text{ kg}$$

Etapa 5. Calcule o rendimento percentual de dióxido de carbono, sabendo que somente 245 kg foram produzidos, não 308 kg.

$$\eta(\text{HNO}_3) = \frac{245 \text{ kg}}{308 \text{ kg}} = 0,8 = \boxed{80\%}$$

O reagente limitante de uma reação é o reagente que está em quantidade menor do que o necessário, segundo a relação estequiométrica entre os reagentes.

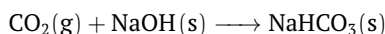
4 A análise gravimétrica

4.1 A análise por combustão

Uma técnica usada nos laboratórios químicos modernos é a determinação das fórmulas empíricas pela análise por combustão. Queima-se a amostra em um tubo por onde passa um fluxo abundante de oxigênio. O excesso de oxigênio assegura que o reagente limitante é a amostra. Todo o hidrogênio do composto converte-

se em água, todo o carbono converte-se em dióxido de carbono e todo o nitrogênio converte-se em gás nitrogênio.

Na versão clássica da técnica os produtos da combustão são passados por um tubo contendo pentóxido de fósforo, P_4O_{10} , que absorve toda a água e em seguida por um tubo contendo hidróxido de sódio, $NaOH$, que absorve todo o dióxido de carbono conforme a reação



Os aumentos de massa no primeiro e no segundo tubos indicam as massas de água e de dióxido de carbono, respectivamente, formadas na combustão.

Na versão moderna da técnica, os gases produzidos são separados por cromatografia e suas quantidades relativas são determinadas pela medida da condutividade térmica dos gases que saem do aparelho. Esses instrumentos permitem analisar compostos contendo enxofre e halogênios. Todo enxofre é convertido a dióxido de enxofre e todos os halogênios, X, são convertidos aos respectivos haletos de hidrogênio, HX .

Sob excesso de oxigênio, cada átomo de carbono do composto transforma-se em uma molécula de dióxido de carbono. Portanto,

$$n(C)_{\text{amostra}} = n(CO_2)_{\text{produto}}$$

Por isso, ao medir a massa de dióxido de carbono produzida e converter em mols, obtém-se o número de mols de átomos C da amostra original.

De maneira semelhante, cada átomo de hidrogênio do composto contribui, sob excesso de oxigênio, para a formação de uma molécula de água durante a combustão.

$$n(H)_{\text{amostra}} = 2 \times n(H_2O)_{\text{produto}}$$

Por isso, conhecendo-se a massa de água produzida quando o composto queima sob excesso de oxigênio, obtém-se a quantidade de H da amostra original.

Muitos compostos orgânicos também contêm oxigênio. Se o composto só contém carbono, hidrogênio e oxigênio, é possível calcular a massa de oxigênio inicialmente presente ao subtrair as massas de carbono e hidrogênio da massa original da amostra. A massa de oxigênio pode ser convertida em quantidade de O usando a massa molar dos átomos de oxigênio.

EXEMPLO 7 Determinação de uma fórmula empírica pela análise por combustão

Uma amostra de 1,61 g de um composto recém-sintetizado, do qual se sabia que continha somente C, H e O foi analisado por combustão. As massas de água e dióxido de carbono produzidas foram 1,9 g e 3,1 g, respectivamente.

Determine a fórmula empírica do composto.

Etapa 1. Converta a quantidade de CO_2 produzida em quantidade e massa de C na amostra. As massas molares do C e da CO_2 são 12 g mol^{-1} e 44 g mol^{-1} , respectivamente.

$$n(C) = n(CO_2) = \frac{3,1 \text{ g}}{44 \text{ g mol}^{-1}} = 0,07 \text{ mol}$$

$$m(C) = 0,07 \text{ mol} \times 12 \text{ g mol}^{-1} = 0,84 \text{ g}$$

Etapa 2. Converta a quantidade de H_2O produzida em quantidade e massa de H na amostra. As massas molares do H e da H_2O são 1 g mol^{-1} e 18 g mol^{-1} , respectivamente.

$$n(H) = 2 \times n(H_2O) = 2 \times \frac{1,9 \text{ g}}{18 \text{ g mol}^{-1}} = 0,21 \text{ mol}$$

$$m(H) = 0,21 \text{ mol} \times 1 \text{ g mol}^{-1} = 0,21 \text{ g}$$

Etapa 3. Calcule a massa de oxigênio da amostra a partir da diferença entre a massa da amostra e a massa total de C e H. Converta a massa de O na amostra em quantidade usando a massa molar. A massa molar do O é 16 g mol^{-1} .

$$m(O) = 1,61 \text{ g} - 0,84 \text{ g} - 0,21 \text{ g} = 0,56 \text{ g}$$

$$n(O) = \frac{0,56 \text{ g}}{16 \text{ g mol}^{-1}} = 0,035 \text{ mol}$$

Etapa 4. Divida a quantidade de C, H e O pela menor quantidade (0,035 mol).

$$n(C) : \frac{0,07 \text{ mol}}{0,035 \text{ mol}} = 2$$

$$n(H) : \frac{0,21 \text{ mol}}{0,035 \text{ mol}} = 6$$

$$n(O) : \frac{0,035 \text{ mol}}{0,035 \text{ mol}} = 1$$

Por fim, a fórmula empírica é: C_2H_6O

Em uma análise por combustão, as quantidades de átomos de C, H e O na amostra de um composto e, portanto, sua fórmula empírica, são determinadas a partir das massas de dióxido de carbono e água produzidas quando o composto queima sob excesso de oxigênio.

4.2 A análise térmica

Na **análise termogravimétrica** (TGA) a amostra a ser analisada é aquecida e sua massa é medida em função da temperatura.