

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 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 3×10^{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 O 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 2×10^{-23} g. Isso significa que o número de átomos em exatamente 12 g de carbono-12 é

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

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 6×10^{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 referir-se a ela, coloquialmente, como **número de mols**.

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

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

conversão entre a quantidade química, n e o número de átomos, íons ou moléculas, 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 6×10^{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 quantidade 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 massa molar de um *elemento* é a massa por mol de seus átomos.
- A massa molar de um *composto molecular* é a massa por mol de suas moléculas.
- 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

$$m = nM$$

Disso decorre que $n = m/M$. Isto é, para encontrar a quantidade de mols, n , divida a massa, 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_2 .

Etapas 1. De $n = m/M$

$$n(F_2) = \frac{22,8 \text{ g}}{38 \text{ g mol}^{-1}} = 0,6 \text{ mol } F_2$$

Etapas 2. De $n = N/N_A$

$$N(F_2) = (0,6 \text{ mol } F_2) \times (6 \times 10^{23}) \\ = 3,6 \times 10^{23} F_2$$

Etapas 3. Como cada molécula de F_2 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, $m_{\text{isótopo}}$, multiplicada por sua abundância relativa em uma amostra natural, $f_{\text{isótopo}}$.

Σ significa: soma dos membros a seguir

$$m_{\text{átomo, média}} = \sum_{\text{isótopos}} f_{\text{isótopo}} m_{\text{isótopo}}$$

A massa molecular média correspondente é

$$M = m_{\text{átomo, média}} N_A$$

Assim, podemos escrever

$$M = \sum_{\text{isótopos}} f_{\text{isótopo}} M_{\text{isótopo}}$$

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 g mol^{-1} e a de um átomo de cloro-37 é 37 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.

Etapas 1. De $M = f_{\text{cloro-35}} M_{\text{cloro-35}} + f_{\text{cloro-37}} M_{\text{cloro-37}}$

$$M = 0,75 \times 35 \text{ g mol}^{-1} + 0,25 \times 37 \text{ g mol}^{-1} \\ = \boxed{35,5 \text{ g mol}^{-1}}$$

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

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 de S e 12 mols de O. Portanto, a massa molar do $Al_2(SO_4)_3$ é

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

A massa molar é importante quando queremos saber o número de átomos de uma amostra. Seria impossível contar 6×10^{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_2SO_4 .

Etapas 1. A massa molar do H_2SO_4 é:

$$M = 2M(H) + M(S) + 4M(O) \\ = 2(1 \text{ g mol}^{-1}) + (32 \text{ g mol}^{-1}) + 4(16 \text{ g mol}^{-1}) \\ = 98 \text{ g mol}^{-1}$$

Etapas 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_2O , 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, $C_6H_{12}O_6$, 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_2O , (o preservativo das soluções de formol), o ácido acético, $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ (o ácido do vinagre), e o ácido láctico, $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$ (o ácido do leite azedo), têm todos a fórmula empírica (CH_2O) da glicose, mas são compostos diferentes com propriedades diferentes.

2.1 A composição percentual em massa

Para determinar a fórmula empírica de um composto, começa-se 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:

$$f = \frac{\text{massa do elemento na amostra}}{\text{massa da amostra}}$$

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 $f(\text{H}) = m(\text{H})/m(\text{H}_2\text{O})$

$$\begin{aligned} f(\text{H}) &= \frac{(2 \text{ mol H}) \times (1 \text{ g mol}^{-1})}{(1 \text{ mol H}_2\text{O}) \times (18 \text{ g mol}^{-1})} \\ &= 0,112 \\ &= \boxed{11,2\%} \end{aligned}$$

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.

$$\begin{aligned} m(\text{C}) &= 40,9 \text{ g} \\ m(\text{H}) &= 4,58 \text{ g} \\ m(\text{O}) &= 54,5 \text{ g} \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} n(\text{C}) &= \frac{40,9 \text{ g}}{12 \text{ g mol}^{-1}} = 3,41 \text{ mol C} \\ n(\text{H}) &= \frac{4,58 \text{ g}}{1 \text{ g mol}^{-1}} = 4,54 \text{ mol H} \\ n(\text{O}) &= \frac{54,5 \text{ g}}{16 \text{ g mol}^{-1}} = 3,41 \text{ mol O} \end{aligned}$$

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

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

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).

$$3 \times (\text{C}_1\text{H}_{4/3}\text{O}_1) = \boxed{\text{C}_3\text{H}_4\text{O}_3}$$

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 g mol^{-1} .

Determine a fórmula molecular do composto.

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

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

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

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

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

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

3.2 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.

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:

- Um **sólido** é uma forma da matéria que retém sua forma e não flui.
- 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.

EXEMPLO 8 Cálculo da pressão de uma amostra

Uma tela de plasma possui células de $0,03 \text{ mm}^3$ contendo 10 ng de gás neônio a 34°C .

Calcule a pressão no interior das células.

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

$$n = \frac{10 \times 10^{-9} \text{ g}}{20 \text{ g mol}^{-1}} = 5 \times 10^{-10} \text{ mol}$$

$$T = (34 + 273) \text{ K} = 307 \text{ K}$$

$$V = 0,03 \text{ mm}^3 \times \frac{1 \text{ L}}{10^6 \text{ mm}^3} = 3 \times 10^{-8} \text{ L}$$

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

$$\begin{aligned} P &= \frac{\overbrace{(5 \times 10^{-10} \text{ mol})}^n \times \overbrace{(0,082 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1})}^R \times \overbrace{(307 \text{ K})}^T}{\underbrace{(3 \times 10^{-8} \text{ L})}_V} \\ &= \boxed{0,4 \text{ atm}} \end{aligned}$$

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 previsões quando duas ou mais variáveis são alteradas simultaneamente.

$$\frac{\overbrace{P_1 V_1}^{\text{condições iniciais}}}{n_1 T_1} = \frac{\overbrace{P_1 V_1}^{\text{condições finais}}}{n_1 T_1}$$

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 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 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 g L⁻¹.

Calcule a massa molar do geraniol.

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

$$d = 0,48 \text{ g L}^{-1}$$

$$P = 103 \text{ Torr}$$

$$T = (260 + 273) \text{ K} = 533 \text{ K}$$

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:

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

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.