

CÁLCULOS QUÍMICOS.

1 – Introdução

Para pesar um determinado objeto basta dispor de uma balança adequada e fazer a leitura correspondente. Pesar um único átomo ou molécula, no entanto, é uma tarefa evidentemente mais difícil, em virtude de suas reduzidas dimensões e massas.

Para expressar a massa dos átomos foi criada uma escala relativa. Nela, a massa de um átomo é sempre comparada à massa de certo átomo escolhido como padrão. Atualmente, o padrão utilizado é o isótopo 12 do átomo de carbono (o mais freqüentemente encontrado na natureza). A massa desse isótopo é cerca de $1,992 \cdot 10^{-23} \text{g}$ e ficou convencionado que esse valor corresponde a 12 unidades de massa atômica (12u).

Obs.1: Uma unidade de massa atômica (1u) é a massa correspondente de um átomo do isótopo 12 do carbono, ou seja, $1,66 \cdot 10^{-24} \text{g}$.

2 – Massa Atômica (MA):

é um número que indica quantas vezes a massa de um átomo de determinado elemento químico é maior que um doze avos da massa de um átomo do isótopo 12 do carbono.

3 – Massa Molecular (MM):

é a soma das massas atômicas de todos os átomos que fazem parte de uma molécula de determinada substância.

$$\text{Ex.: } \text{H}_2\text{O} \Rightarrow M = 2 \cdot 1\text{u} + 1 \cdot 16\text{u} = 18\text{u}$$

$$\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11} \Rightarrow M = 12 \cdot 12\text{u} + 22 \cdot 1\text{u} + 11 \cdot 16\text{u} = 342\text{u}$$

$$\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \Rightarrow M = 2 \cdot 27\text{u} + 3 \cdot 32\text{u} + 12 \cdot 16\text{u} = 342\text{u}$$

Obs.2: As massas atômicas ou moleculares de todos os elementos, quando “expressas em gramas”, contêm sempre o mesmo número de átomos ou moléculas.

4 – Número de Avogadro (N_A):

é o número de átomos de carbono contidos em 12g de isótopo do carbono 12. Seu valor é constante e igual a $6,02 \cdot 10^{23}$.

O ferro, por exemplo, tem massa atômica 56u, e 56g de ferro contêm $6,02 \cdot 10^{23}$ átomos. A água, por sua vez, tem massa molecular 18u, e 18g de água contêm $6,02 \cdot 10^{23}$ moléculas.

Obs.3: Qualquer múltiplo ou submúltiplo dessas massas também conterá átomos ou moléculas em número múltiplo ou submúltiplo do número de Avogadro.

5 – Mol e quantidade de matéria:

- A quantidade de matéria refere-se ao número de partículas (átomos, moléculas) que constitui uma amostra de substância. É medida em mol, uma unidade especial de medida (cujo símbolo também é mol).

- Um mol é a quantidade de matéria de um sistema que contém um número de partículas igual ao número de átomos contidos em 12g do isótopo 12 do carbono, ou ainda, $6,02 \cdot 10^{23}$ partículas.

6 – Massa Molar (M_1):

é a massa, em gramas, de qualquer amostra de substância, cuja quantidade de matéria seja igual a 1 mol.

Obs.4: A massa de qualquer substância é sempre o valor numérico da massa atômica ou molecular seguido da unidade g/mol.

Ex.:Elemento Massa Atômica Massa Molecular

Fe	56u	56g/mol
H ₂ O	18u	18g/mol
NaCl	58,5u	58,5g/mol

Fórmulas Químicas

1 – Conceito: é a representação da união de átomos de elementos iguais ou diferentes entre si.

2 – Tipos de Formulas:

2.1 – Formula percentual (ou composição centesimal):

indica a porcentagem em massa de cada elemento que forma uma substância.

Ex.: NaOH (Na = 23 + O = 16 + H = 01 => 40u)

Na = 57,5%, O = 40%, H = 2,5%.

2.2 – Formula Mínima (ou empírica):

indica a menor proporção, em números inteiros, de átomos (mol) dos elementos que formam uma substância.

Ex.: H₂O₂ = HO

2.3 – Formula Molecular:

indica a quantidade de átomos de cada elemento que forma uma molécula de determinada substância.

Ex.: H₂O

A - Relação entre fórmula molecular e fórmula mínima:

$$\text{fórmula molecular} = (\text{fórmula mínima})_n$$

em que n é sempre um número inteiro que multiplica os índices da fórmula mínima.

O valor numérico de n pode ser calculado de duas maneiras:

$$n = \frac{\text{massa molecular (u)}}{\text{massa da fórmula mínima (u)}}$$

Ou então:

$$n = \frac{\text{massa molar (g/mol)}}{\text{massa molar correspondente á fórmula mínima}}$$

XVI. Cálculo Estequiométrico

Estequiometria: É o estudo das relações quantitativas (átomos, moléculas, massa, volume) entre as substâncias que participam de uma reação química.

A quantidade de matéria em mol pode ser expressa em outras grandezas, tais como: massa em gramas, volume de gases e, ainda, número de moléculas.

$$1 \text{ Mol} \begin{cases} 6,02 \times 10^{23} \\ \text{Massa (g)} \\ 1 \text{ coeficiente} \\ \text{CNTP } 22,4 \text{ L} \end{cases}$$

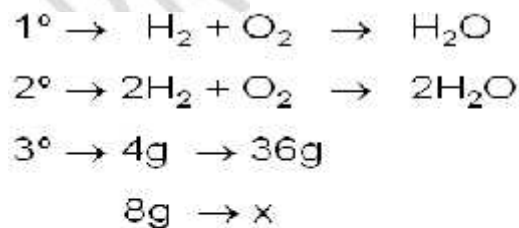
Conhecendo as massas atômicas do nitrogênio (N = 14) e do hidrogênio (H = 1), pode-se interpretar a equação de formação da amônia de várias maneiras:

Cálculo Estequiométrico: Para resolver uma questão envolvendo cálculo estequiométrico devemos seguir três passos:

- 1º → conhecer a equação;
- 2º → Ajustar os coeficientes;
- 3º → Armar uma Regra de três;

Relação Massa-Massa

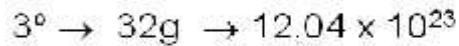
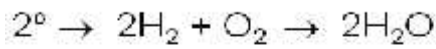
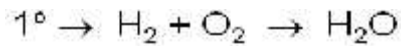
Ex.: Qual a massa de água dada em gramas, produzida a partir de 8g de hidrogênio gás?



$$x = \frac{8 \cdot 36}{4} = 72\text{g}$$

Relação Massa-Moléculas

Ex.: Quantas Moléculas de água são produzidas a partir de 16g de oxigênio gás?

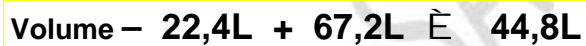
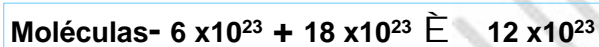


$$x = \frac{16 \cdot 12,04 \times 10^{23}}{32} = 6,02 \times 10^{23}$$

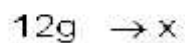
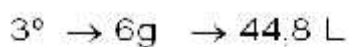
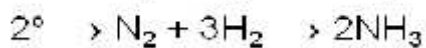
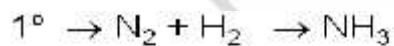
Relação Massa-Volume

Ex.: Qual o volume de Amônia produzido nas CNTP por 12g de H₂ que reage com N₂

Relações Molares



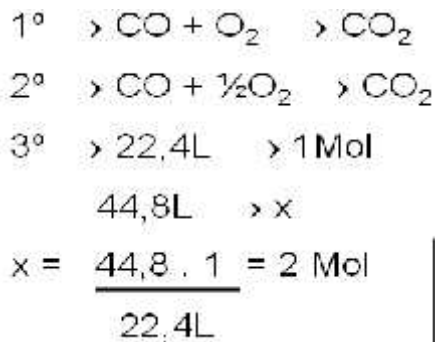
suficiente?



$$x = \frac{12 \cdot 44,8}{6} = 89,6 \text{ L}$$

Relação Mol -Volume

Ex.: Quantos Moles de CO₂ são produzidos a partir de 44,8L de CO?



Rendimento

Na prática, quando realizamos uma reação química, mesmo utilizando quantidades estequiométricas dos reagentes, nem sempre conseguimos obter a quantidade máxima possível dos produtos. Isso acontece por vários fatores. Assim, é comum que a reação ocorra com um rendimento real menor que o rendimento teórico (100%).

Para determinar a porcentagem de rendimento real, devemos determinar antes o rendimento teórico, a partir das quantidades estequiométricas.

EX1.: (CESAGRANRIO/95) - A combustão de 36g de grafite (C) provocou a formação de 118,8g de gás carbônico. Qual foi o rendimento da reação ? (C = 12; O = 16)

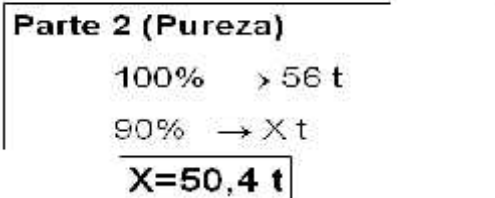
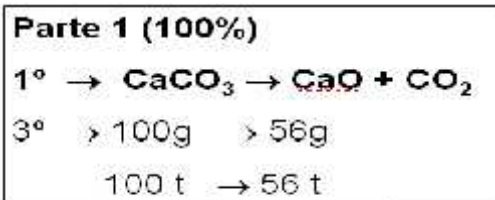
Parte 1 (100%)	
1°	$\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$
2°	$\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$
3°	$12\text{g} \rightarrow 44\text{g}$
	$36\text{g} \rightarrow 132\text{g}$
Parte 2 (Rendimento)	
	$132\text{g} \rightarrow 100\%$
	$118,8\text{g} \rightarrow X\%$
	X=90%

Grau de pureza

Quando for preciso calcular a massa de produto obtido a partir de uma amostra impura, devemos inicialmente calcular a parte pura dessa amostra e efetuar os cálculos com o valor obtido.

EX.: (U.E. MARINGÁ/SP/96) - A decomposição térmica do CaCO_3 , se dá de acordo com a equação. Quantas toneladas de óxido de cálcio serão produzidas através da decomposição de 100 toneladas de carbonato de cálcio com 90% de pureza?

(Ca = 40; O = 16; C = 12)



Reagente Limitante

Quando misturamos dois reagentes que não estão em proporção estequiométrica, um deles será consumido totalmente, sendo denominado reagente limitante. O outro reagente, do qual restará certa quantidade sem reagir, será denominado reagente em excesso.

Para resolver questões que envolvem reagentes limitantes e em excesso, podemos seguir as etapas abaixo:

- considere um dos reagentes como limitante e determine quanto de produto seria formado;
- repita o procedimento para o outro reagente;
- a menor quantidade de produto encontrada corresponde ao reagente limitante e indica a quantidade de produto formada.

EX.: (PUCSP/96) - 10,00g de ácido sulfúrico são adicionados a 7,40g de hidróxido de cálcio. Sabe-se que um dos reagentes está em excesso. Após completar a reação, restarão:

