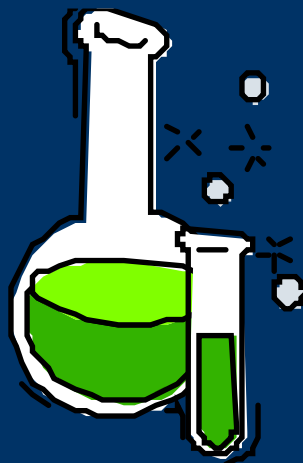


Reações Químicas (cont.)



Cálculos estequiométricos

- Conhecendo a **quantidade de reagentes** numa reação, será possível saber a **quantidade de produtos** de reação?
- Que **quantidade de reagente** terá de ser usado para obter uma dada **quantidade de produto**?

Cálculos estequiométricos

A **estequiometria** de uma reação química representa as **relações mássicas** entre **reagentes** e **produtos**.

Por exemplo, na reação:



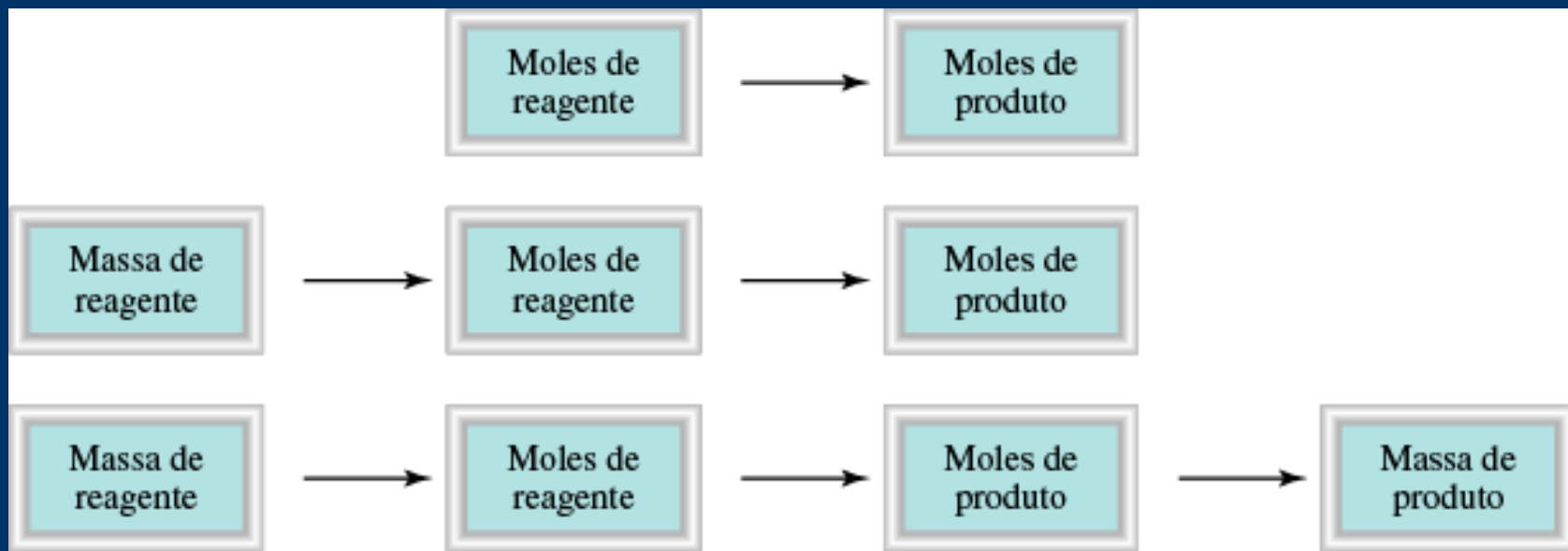
2 moles de monóxido de carbono reagem com 1 mole de oxigénio originando 2 moles de dióxido de carbono

Cálculos Estequiométricos – passos

- 1) Escrever corretamente as fórmulas químicas dos reagentes e produtos e acertar a equação resultante.**
- 2) Converter a quantidade das substâncias (reagentes ou produtos) em moles.**
- 3) Calcular o n° de moles desconhecido a partir dos coeficientes estequiométricos (equação acertada).**
- 4) Converter o n° de moles calculado para a unidade requerida.**
- 5) Verificar se o resultado tem significado físico.**

(Não é a única maneira de resolver os problemas: aconselha-se a resolução caso-a-caso – sem “receitas”)

Alterações de Massa em Reações Químicas



1. Escreva a equação química acertada.
2. Converta as quantidades de substâncias conhecidas em moles.
3. Utilize os coeficientes das equações acertadas para calcular o número de moles da quantidade procurada.
4. Converta as moles de quantidade procurada nas unidades desejadas.

Exemplo: O metanol arde no ar de acordo com a equação



Se 209 g de metanol são utilizadas na combustão,
que massa de água é produzida?

gramas CH_3OH $\longrightarrow$ moles CH_3OH $\longrightarrow$ moles H_2O $\longrightarrow$ gramas H_2O

massa molar
 CH_3OH

coeficientes
equação química

massa molar
 H_2O

$$209 \text{ g } \cancel{\text{CH}_3\text{OH}} \times \frac{1 \cancel{\text{ mol CH}_3\text{OH}}}{32,0 \text{ g } \cancel{\text{CH}_3\text{OH}}} \times \frac{4 \cancel{\text{ mol H}_2\text{O}}}{2 \cancel{\text{ mol CH}_3\text{OH}}} \times \frac{18,0 \text{ g } \cancel{\text{H}_2\text{O}}}{1 \cancel{\text{ mol H}_2\text{O}}} =$$

235 g H_2O

Exemplo 1

Calcular o volume de H_2SO_4 (18 mol/L) e a massa de ferro necessárias para produzir 10,0 g de hidrogénio.

Resolução:

1º Escrever e acertar a equação química



2º Converter os dados em nº moles

$$\text{MM}(\text{H}_2) = 2,016 \text{ g/mol} \qquad m(\text{H}_2) = 10,0 \text{ g}$$

$$n = 10,0 / 2,016 = 4,96 \text{ mol de H}_2$$

3º Pela estequiometria da reação determinar a quantidade de H_2SO_4 e de Fe necessárias:

1 mole de ácido reage com 1 mole de ferro originando 1 mole de hidrogénio: $n \text{ H}_2 = n \text{ H}_2\text{SO}_4 = 4,96 \text{ mol} = n \text{ Fe} = 4,96 \text{ mol}$

4º Converter a quantidade de substância calculada nas unidades requeridas

$$n (\text{H}_2\text{SO}_4) = 4,96 \text{ mol} \quad [\text{H}_2\text{SO}_4] = 18 \text{ mol/L}$$

$$V (\text{H}_2\text{SO}_4) = 4,96 / 18 = 0,28 \text{ L}$$

$$n (\text{Fe}) = 4,96 \text{ mol}$$

$$\text{MM} (\text{Fe}) = 55,85 \text{ g/mol}$$

$$m (\text{Fe}) = 4,96 \times 55,85 = 277 \text{ g}$$

5º Verificar o significado físico do resultado

É extremamente importante criticar os valores obtidos, verificando se têm significado físico.

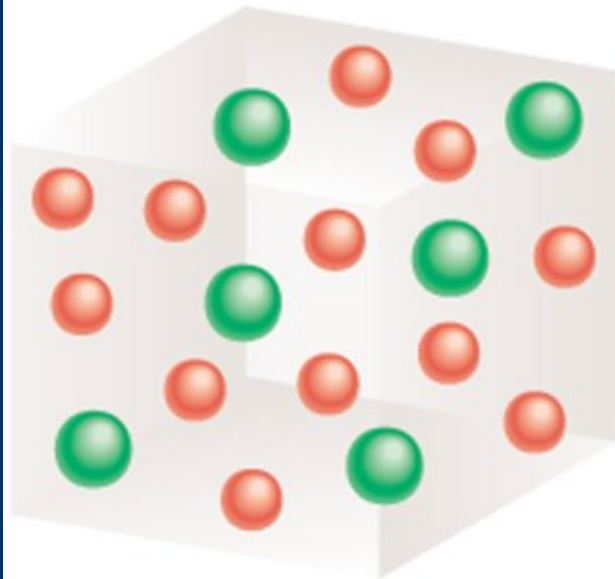
Reagente limitante

- **Reagente** que está presente em **defeito**, relativamente às proporções estabelecidas pela equação química (**proporções estequiométricas**).
 - É **consumido totalmente** (quando o **rendimento** é **100%**) e em 1º lugar. Quando este reagente se esgota não se formam mais produtos.
- 
- O **reagente limitante**, condiciona a **quantidade máxima** dos **outros reagentes** que são **consumidos** e dos **produtos** formados.

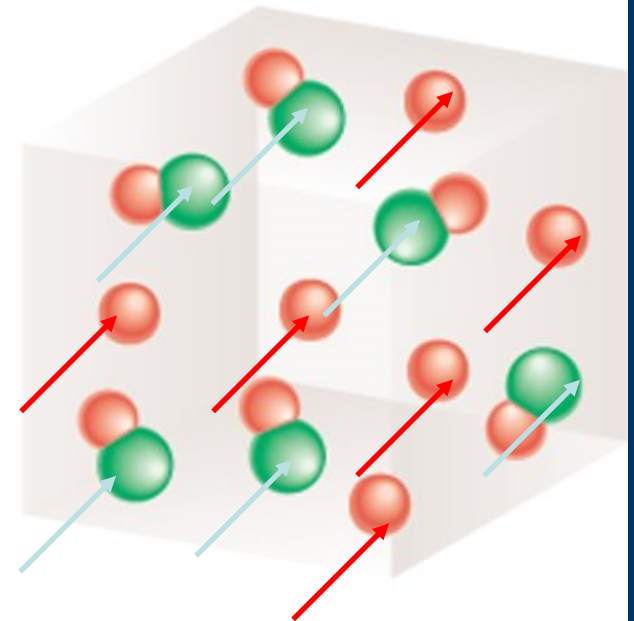
Reagente Limitante

Antes do início da reacção

Depois da reacção estar completa



 Reagente limitante
 Reagente em excesso

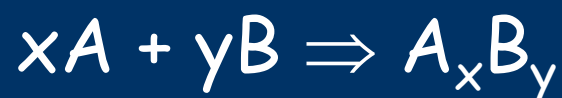


6 verdes são consumidos

6 vermelhos não são consumidos

Cálculo do reagente limitante

Considerando a reação genérica:



- $\frac{n\text{ A}}{x} < \frac{n\text{ B}}{y} \quad \Rightarrow \text{Reagente A é limitante}$
- $\frac{n\text{ A}}{x} > \frac{n\text{ B}}{y} \quad \Rightarrow \text{Reagente B é limitante}$

Cálculo do reagente limitante

Exemplo:



Juntaram-se 0,5 mol de metano com 0,4 mol de oxigénio.
Qual é o reagente limitante?

Para calcular o reagente limitante calcula-se:

$$\frac{n \text{ CH}_4}{1} \quad e \quad \frac{n \text{ O}_2}{2}$$

$$0,5/1 = 0,5 \quad 0,4/2 = 0,2 \quad \Rightarrow \quad \text{O O}_2 \text{ é o reagente limitante}$$

O menor quociente corresponde ao reagente limitante

Exercício 1

Considere a reação: **$\text{CO (g)} + \text{O}_2 \text{ (g)} \rightarrow \text{CO}_2 \text{ (g)}$**

Misturaram-se 3,0 mol de CO com 5,0 mol de O₂ num recipiente fechado.

a) Acerte a equação química.

Resolução:

a) $2 \text{ CO (g)} + \text{O}_2 \text{ (g)} \rightarrow 2 \text{ CO}_2 \text{ (g)}$

b) Quantas moles de cada reagente se gastaram, quantas moles de CO₂ se formaram e quantas moles de reagentes sobraram?

Resolução:

b) $n(\text{O}_2) = 5,00 \text{ mol} \rightarrow 5,0/1 = 5$

$n(\text{CO}) = 3,00 \text{ mol} \rightarrow 3,0/2 = 1,5 < 5,0$ logo **CO é o reag. limitante**

Formam-se 3,0 mol de CO₂ pois $n(\text{CO}_2)_{\text{formado}} = n(\text{CO})_{\text{consumido}}$

Gastam-se 3,0 mol de CO e $(3,0 \times 1)/2 = 1,5 \text{ mol}$ de O₂, logo, sobram $5,0 - 1,5 = 3,5 \text{ mol}$ de O₂ e sobram 0,0 moles de CO.

c) Calcule a quantidade em gramas de CO₂ formado.

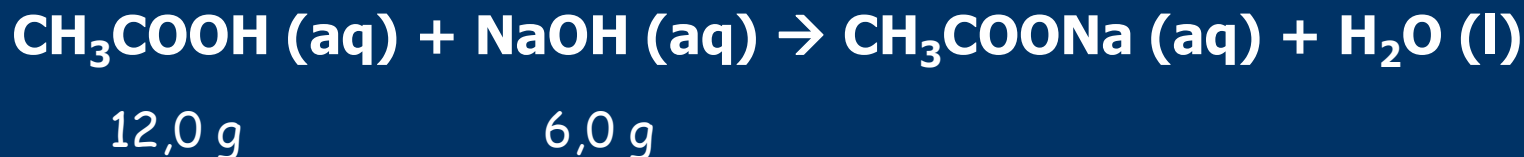
Resolução:

c) $\text{massa (CO}_2) = n(\text{CO}_2) \times \text{MM(CO}_2) = 3,00 \text{ mol} \times 44,0 \text{ g/mol} = 132 \text{ g}$

Exercício 2

Qual é o reagente limitante na reação entre 12,0 g de ácido acético e 6,0 g de hidróxido de sódio? Quantas moles se formam de acetato de sódio?

Resolução



Massas molares:

MM (CH₃COOH)= 60,0 g/mol;

MM (NaOH)= 40,0 g/mol;

MM (CH₃COONa)=82,0 g/mol

$$n(\text{CH}_3\text{COOH}) = 12,0 \text{ g} / 60,0 \text{ g.mol}^{-1} = 0,200 \text{ mol}$$

$n(\text{NaOH}) = 6,0 \text{ g} / 40,0 \text{ g.mol}^{-1} = 0,15 \text{ mol} \rightarrow$ **reagente limitante** (os coeficientes estequiométricos de ambos os reagentes são 1, pelo que não é necessário dividir)

Resolução:**Antes de**

reação :	0,200 mol	0,15 mol	0,00 mol
-----------------	------------------	-----------------	-----------------

Após a	0,200 - 0,15	0,15 - 0,15	0 + 0,15
---------------	---------------------	--------------------	-----------------

reação :	0,05 mol	0,00 mol	0,15 mol
-----------------	-----------------	-----------------	-----------------



**sobra CH₃COOH:
reagente em excesso**



**o NaOH esgota-se:
reagente limitante**

Exercício 3

Num processo, 124 g de Al reagem com 601 g de Fe_2O_3



Calcule a massa de Al_2O_3 formada.

g Al $\longrightarrow$ mol Al $\longrightarrow$ mol Fe_2O_3 necessárias $\longrightarrow$ g Fe_2O_3 necessárias

g Fe_2O_3 $\longrightarrow$ mol Fe_2O_3 $\longrightarrow$ mol Al necessárias $\longrightarrow$ g Al necessárias

$$\cancel{124 \text{ g Al}} \times \frac{\cancel{1 \text{ mol Al}}}{\cancel{27,0 \text{ g Al}}} \times \frac{\cancel{1 \text{ mol Fe}_2\text{O}_3}}{\cancel{2 \text{ mol Al}}} \times \frac{160 \text{ g Fe}_2\text{O}_3}{\cancel{1 \text{ mol Fe}_2\text{O}_3}} = 367 \text{ g Fe}_2\text{O}_3$$

Início 124 g Al $\longrightarrow$ 367 g Fe_2O_3 necessárias

Como **temos mais de Fe_2O_3 (601 g)**, o Al é o **reagente limitante**

Utilize o **reagente limitante (Al)** para calcular a quantidade de produto que pode ser formada.



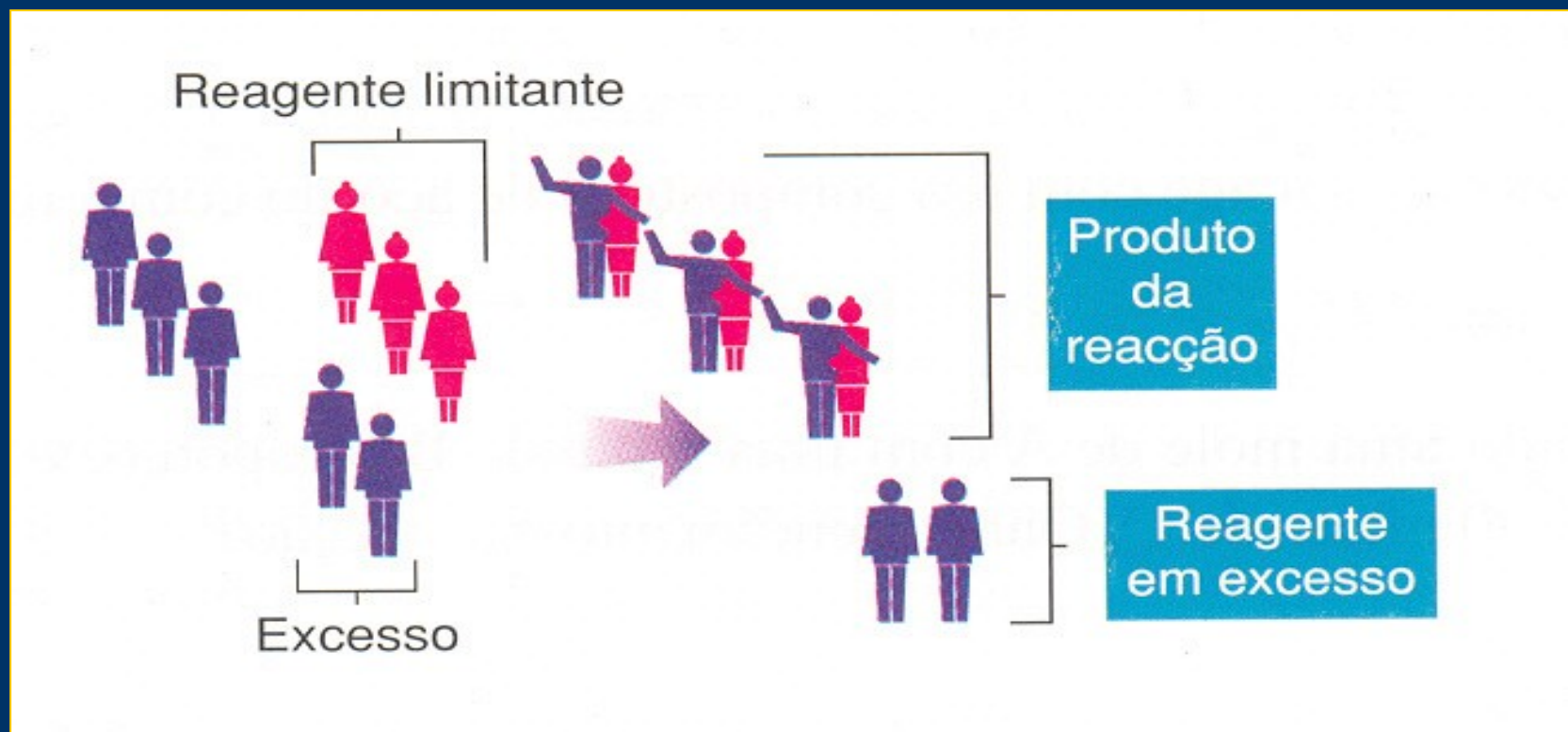
$$\cancel{124 \text{ g Al}} \times \frac{\cancel{1 \text{ mol Al}}}{\cancel{27.0 \text{ g Al}}} \times \frac{\cancel{1 \text{ mol Al}_2\text{O}_3}}{\cancel{2 \text{ mol Al}}} \times \frac{102 \text{ g Al}_2\text{O}_3}{\cancel{1 \text{ mol Al}_2\text{O}_3}} = 234 \text{ g Al}_2\text{O}_3$$



Reações Completas

Reações completas - Completamente deslocadas no sentido dos produtos (esgota-se pelo menos um dos reagentes)

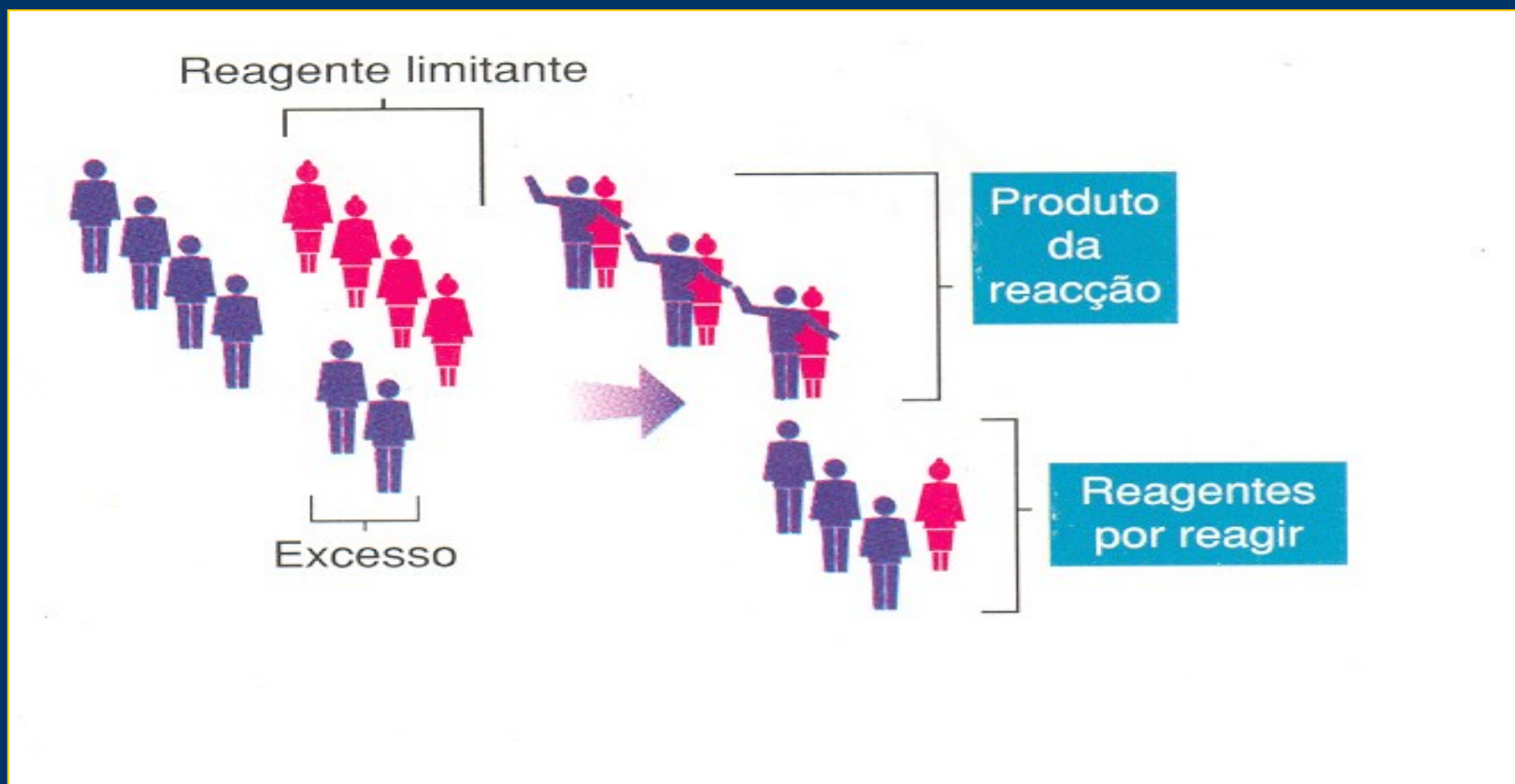
Esquema de uma reação completa



Reações não Completas

Reações não completas - Não se esgota nenhum reagente, nem o reagente limitante

Esquema de uma reação não completa



Rendimento de uma reação

Rendimento - proporção da conversão na prática – (quantidade de produto obtido, rendimento real) em relação à conversão máxima (quantidade de produto se a reação fosse completa, rendimento teórico)

$$\text{Rendimento} = \frac{\text{Quantidade de produto obtido}}{\text{Quantidade de produto obtido se a reação fosse completa}} \times 100\%$$

- **Rendimento teórico** é a quantidade de produto que se forma se todo o reagente limitante for consumido durante a reação.
- **Rendimento real** é a quantidade de produto obtido na reação química.

$$\% \text{ rendimento} = \frac{\text{Rendimento real}}{\text{Rendimento teórico}} \times 100$$

Rendimento de uma reação

- Numa reação completa a conversão dos reagentes em produtos é total → **Rendimento 100%**
- **Conversão máxima** (rendimento máximo): quantidade de produto que se espera obter quando **todo o reagente limitante foi consumido**.
- Na prática, a **conversão de reagentes em produtos** é **sempre inferior** à conversão **máxima** devido a:
 - reações reversíveis;
 - produtos reagem entre si, formando novos produtos;
 - reações laterais

Exercício 4

Decompuseram-se termicamente (pirólise) 200,0 g de calcário, recolhendo-se 70,86 g de dióxido de carbono.

Calcule o rendimento da reação.

Resolução:

$$\text{MM} (\text{CaCO}_3) = 100,09 \text{ g/mol}$$

$$\text{MM} (\text{CO}_2) = 44,01 \text{ g/mol}$$

reação que representa a decomposição térmica:



$$m (\text{CaCO}_3) = 200,0 \text{ g}$$

$$n (\text{CaCO}_3) = 200,0 / 100,09 = 1,998 \text{ mol}$$

$$m (\text{CO}_2) \text{ no caso conversão total} = 1,998 \times 44,01 = 87,93 \text{ g}$$

$$\text{Rendimento} = (70,86/87,93) \times 100 = 80,59 \%$$

Pureza dos Reagentes

- Qualquer composto é sempre acompanhado por maior ou menor quantidade de outras substâncias - **impurezas**.
- A quantidade de impurezas é bastante variável.
- É possível diminuir a % de impurezas através de diversos processos de purificação, (diferentes graus de pureza) o que vai condicionar o custo do composto.
- Nos **reagentes não puros**, começa-se por determinar a quantidade efetiva (**pura**) da substância reagente.

Pureza dos Reagentes

- Os valores para os **graus de pureza** expressos nos recipientes ou embalagens e nos catálogos são **percentagens mássicas**.
- Nos problemas que envolvam um ou mais reagentes com impurezas, começa-se sempre por calcular a **massa do composto puro** e depois o **nº de moles**.

Exercício 5

Qual a massa de uma amostra que contém 277 g de ferro (puro) com 5,0 % de impurezas?

Resolução:

$$m(\text{Fe}) = 277 \text{ g}$$

$$\text{pureza } 95,0\% (100\% - 5,0\%)$$

$$\begin{array}{rcl} 277 \text{ g} & - & 95 \% \\ X \text{ (g)} & - & 100 \% \end{array}$$

massa total de reagente = massa de reagente puro / pureza

$$\text{massa total de reagente} = 277 / 0,950 = 292 \text{ g}$$