Universidade de São Paulo
Centro de Energia Nuclear na Agricultura

CEN5806

Fundamentos de Química Aplicados à Agricultura e ao Ambiente

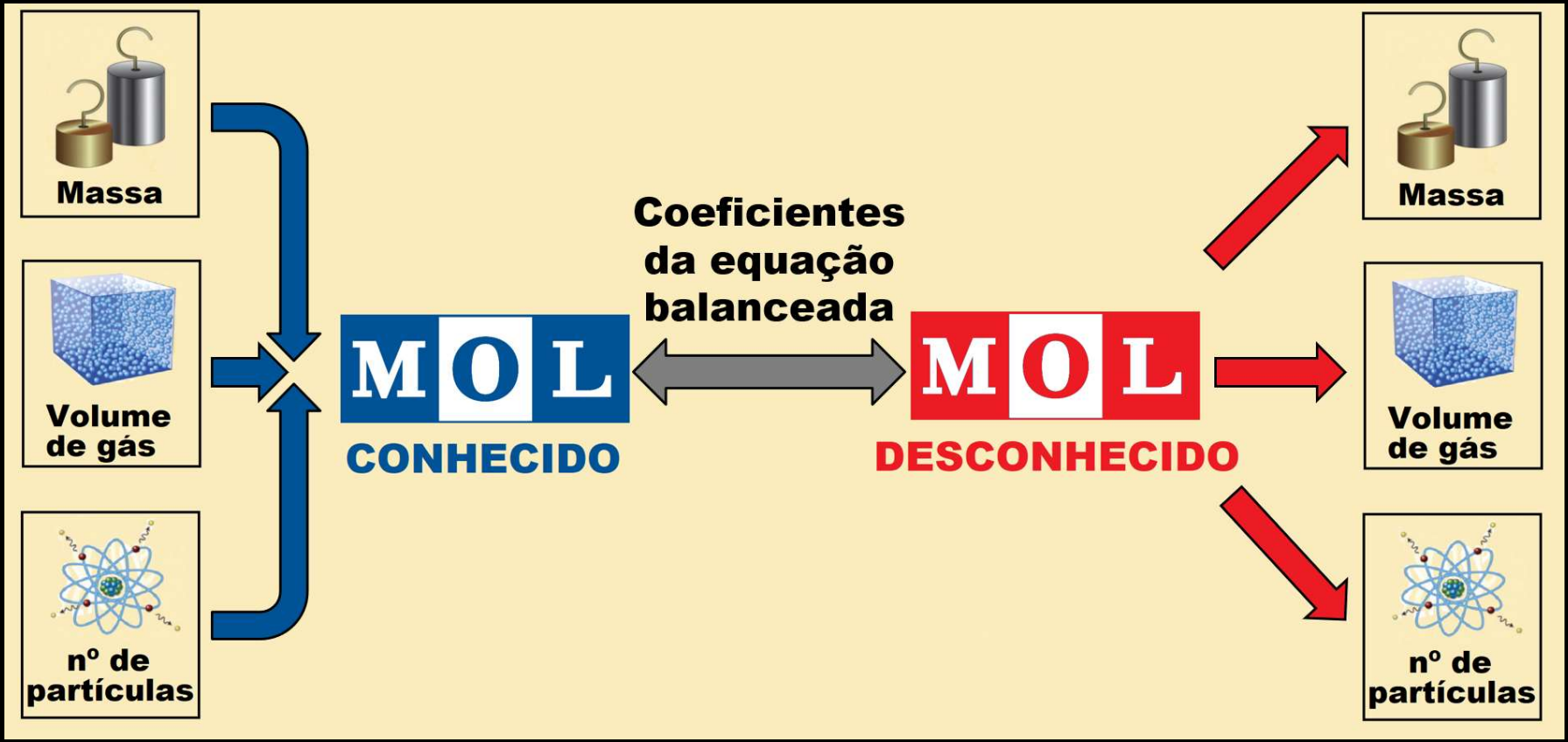
Prof. Alex Virgilio

alexvirgilio@cena.usp.br

2°Sem
2020

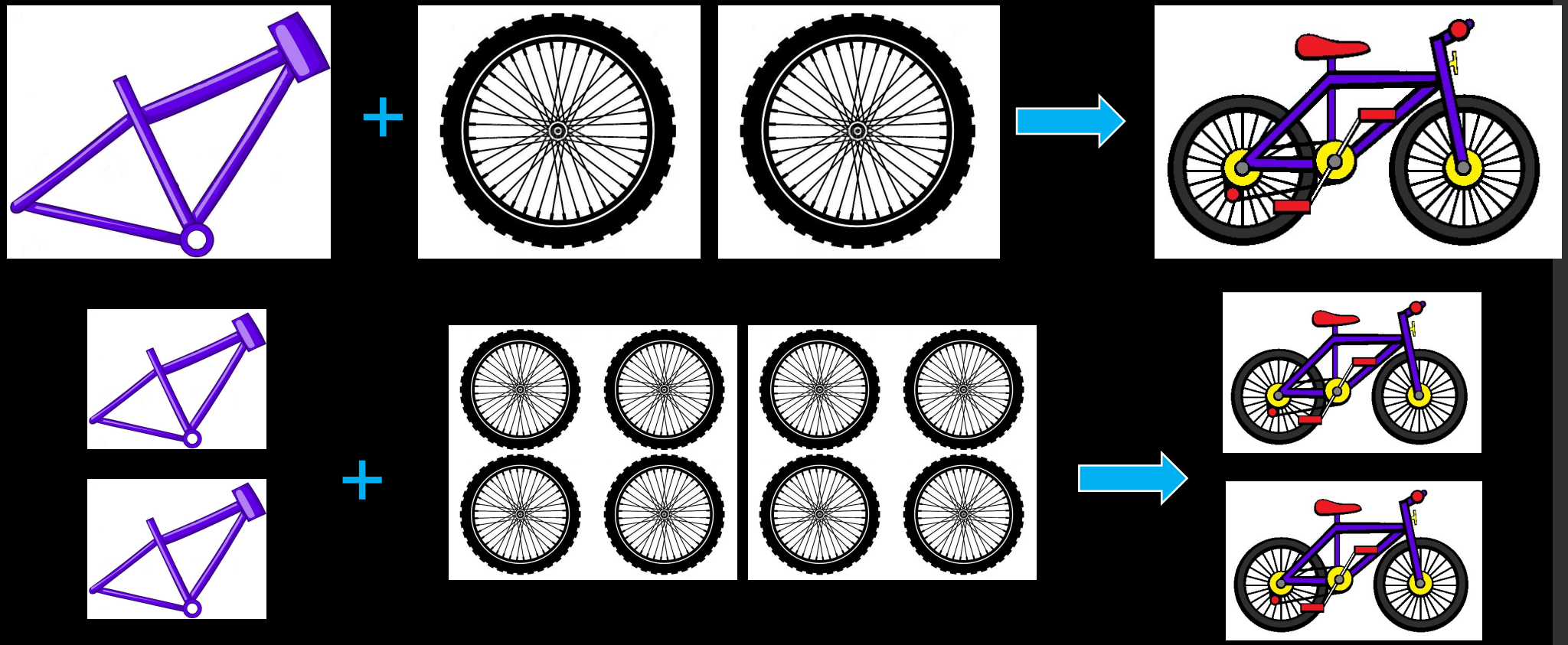
Tópico 6

Cálculos Estequiométricos: Casos particulares



- As quantidades adicionadas dos reagentes são exatas
- Os reagentes utilizados são 100% puros
- Os reagentes são convertidos totalmente em produtos

Caso particular: Excesso e limitante

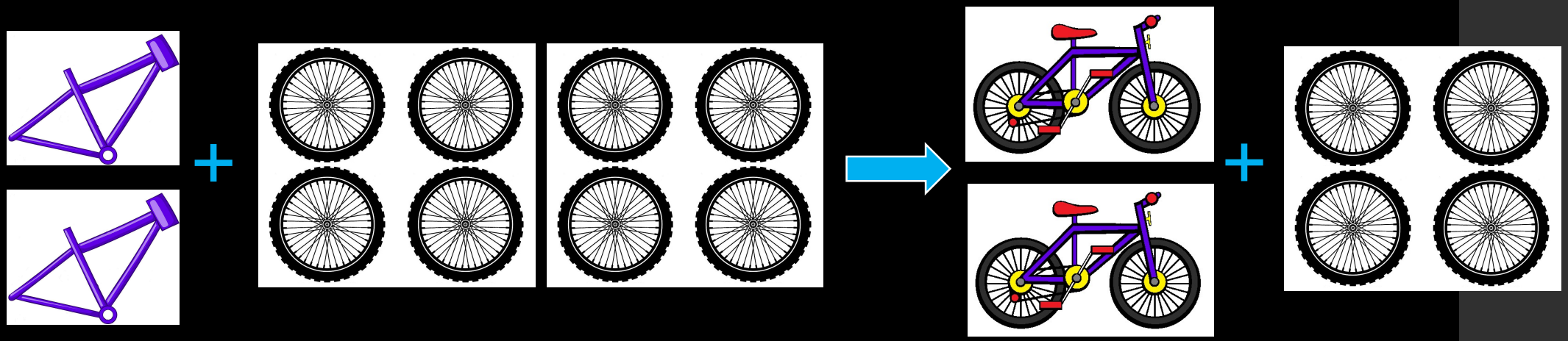


Quem está limitando a quantidade de produto?
Quem está em excesso?

Reagente em excesso e reagente limitante

Quando um dos reagentes não está em quantidade estequiométrica exata:

- Um deles será totalmente consumido (limitante)
- Um deles irá restar uma parte sem reagir (excesso)



LIMITANTE EXCESSO

Reagente em excesso e reagente limitante: mol

Na produção da ureia [$(NH_2)_2CO$] foram colocados para reagir 3 mols de NH_3 e 2 mols CO_2. Determine: a-) o reagente limitante e a quantidade de ureia formada b-) a quantidade do excesso de reagente

	$2\ NH_3$	+ $1\ CO_2$	→ $1\ (NH_2)_2CO$	+ $1\ H_2O$
Estequiometria:	2 mols	1 mol	1 mol	1 mol
Para NH_3:	**3 mols**	x = 1,5 mol	x = 1,5 mol	x = 1,5 mol
Para CO_2:	y = 4 mols	**2 mols**	y = 2 mol	y = 2 mol

- NH_3 é o **limitante**, pois a partir dele forma-se **menos produtos**
- A quantidade de ureia formada é dada pelo limitante (1,5 mol)
- Como havia 2 mols de CO_2 e apenas 1,5 reagiram, o excesso é de 2,0 – 1,5 = 0,5 mol de CO_2

Exercício em aula

Num recipiente foram colocados para reagir 9 mols de CO e 6 mols de O_2.

a-) Quem é o reagente limitante?

b-) Quem está em excesso?

C-) Quais as quantidades de reagente excedente e produto formado

$$CO + O_2 \rightarrow CO_2$$

	$2\ CO$	$+$	$1\ O_2$	$\rightarrow$	$2\ CO_2$	
Estequiometria:	2 mols		1 mol		2 mols	
Para CO:	9 mols		x = 4,5 mol		x = 9 mol	(LIMITANTE)
Para O_2:	y = 12 mols		6 mols		y = 12 mols	(EXCESSO)

Produto = 9 mols de CO_2

Excesso = 6 – 4,5 = 1,5 mols de O_2

Reagente em excesso e reagente limitante: massa

Foram misturados 40g de H_2 e 40g de O_2 para produção de H_2O. Determine:
a-) o reagente limitante e a quantidade de agua formada
b-) a quantidade do excesso de reagente

	$2\ H_2$	+ $1\ O_2$	→ $2\ H_2O$
Estequiometria:	2 mols	1 mol	2 mols
	4 g	32 g	36 g
Para H_2:	**40 g**	x = 320 g	x = 360 g
Para O_2:	y = 5 g	**40 g**	y = 45 g

- O_2 é o **<u>limitante</u>**, pois a partir dele forma-se **<u>menos produtos</u>**
- A quantidade de água formada é dada pelo limitante (45 g)
- Como havia 40 g de H_2 e apenas 5 g reagiram, o excesso é de 40 – 5 = 35 g de H_2

Exercício em aula

Num recipiente foram colocados para reagir 14 g de Fe e 4,8 g de O_2.

a-) Quem é o reagente limitante?

b-) Quem está em excesso?

c-) Quais as massas de reagente excedente e produto formado

Dados: Fe = 56 g/mol e O = 16 g/mol

$$Fe + O_2 \rightarrow Fe_2O_3$$

	$4\ Fe$	$+$	$3\ O_2$	$\rightarrow$	$2\ Fe_2O_3$	
Estequiometria:	4 mols		3 mol		2 mols	
Estequiometria:	224 g		96 g		320 g	
Para Fe:	14 g		x = 6 g		x = 20 g	(EXCESSO)
Para O_2:	y = 11,2 g		4,8 g		y = 16 g	(LIMITANTE)

Produto = 16g de Fe_2O_3

Excesso = 14 – 11,2 = 2,8 g de Fe

Caso particular: Pureza

Água Régia – Dissolução de Ouro
3 HCl : 1 HNO_3

$$1\ Au_{(s)} + 4\ HCl_{(aq)} + 1\ HNO_3 \rightarrow 1\ HAuCl_{4(aq)} + 1\ NO_{(g)} + 2\ H_2O_{(l)}$$

Qual a massa de Au, dissolvida na forma de $HAuCl_4$, pode ser obtida a partir de 985g de ouro 18k ? E de ouro 24k ?

Massa a partir da pureza

Qual a massa de Au, dissolvida na forma de $HAuCl_4$, pode ser obtida a partir de 985g de ouro 18k ? E de ouro 24k ?

985 g de Ouro 18k; Pureza = 75% = 0,75

100 g material ------ 75g de Au
985 g material ------- x
x = 739 g Au puro

$1\ Au_{(s)} + 4\ HCl_{(aq)} + 1\ HNO_3 \rightarrow 1\ HAuCl_{4(aq)} + 1\ NO_{(g)} + 2\ H_2O_{(l)}$

197 g — 340 g
739 g — x g

x = 340 x 739 / 197
x = 1.275 g de $HAuCl_4$

OU

$1\ Au_{(s)} + 4\ HCl_{(aq)} + 1\ HNO_3 \rightarrow 1\ HAuCl_{4(aq)} + 1\ NO_{(g)} + 2\ H_2O_{(l)}$

197 g — 340 g
985 g x Pureza — x g

x = 340 x 985 x 0,75 / 197
x = 1.275 g de $HAuCl_4$

Massa a partir da pureza

Qual a massa de Au, dissolvida na forma de $HAuCl_4$, pode ser obtida a partir de 985g de ouro 18k ? E de ouro 24k ?

985g de Ouro 24k; Pureza = 100% (p = 1,0)

$$1\ Au_{(s)} + 4\ HCl_{(aq)} + 1\ HNO_3 \rightarrow 1\ HAuCl_{4(aq)} + 1\ NO_{(g)} + 2\ H_2O_{(l)}$$

197 g — 340 g

985 g — x g

x = 340 x 985 / 197

x = 1.700 g de $HAuCl_4$

OU

$$1\ Au_{(s)} + 4\ HCl_{(aq)} + 1\ HNO_3 \rightarrow 1\ HAuCl_{4(aq)} + 1\ NO_{(g)} + 2\ H_2O_{(l)}$$

197 g — 340 g

985 g x Pureza — x g

x = 340 x 985 x 1,00 / 197

x = 1.700 g de $HAuCl_4$

Pureza a partir da massa

A hematita, Fe_2O_3, é uma das principais riquezas minerais do Brasil. Esse mineral é empregado na obtenção de ferro metálico, pela seguinte equação não balanceada:

$$\mathbf{Fe_2O_{3(s)} + C_{(s)} \rightarrow Fe_{(s)} + CO_{(g)}}$$

Calcule a pureza do minério, sabendo que a partir de 800 kg de hematita foram obtidos 392 kg de Fe. Dados: C = 12 g/mol; O = 16 g/mol; Fe = 56 g/mol).

$$\mathbf{1\ Fe_2O_{3(s)} + 3\ C_{(s)} \rightarrow 2\ Fe_{(s)} + 3\ CO_{(g)}}$$

	160 kg	36 kg	112 kg	84 kg
Se 100% pureza:	800 kg		560 kg	
Pureza ?:	800 kg x P		392 kg	

P = 0,7 ou 70%

OU

560 kg -------- 100% de pureza
392 kg --------- P

P = 70%

Exercício em aula

O calcário é um material rochoso à base de $CaCO_3$ que é muito empregado como corretivo da acidez do solo. Após uma análise de solo, verificou-se que o mesmo precisa ser corrigido e que são necessários 600 kg de HCO_3^-. Sabendo que um agrônomo dispõe de um insumo de calcário com 80% $CaCO_3$, calcule a massa necessária desse material para realizar uma correção apropriada.

$CaCO_3 + H_2O \rightarrow Ca^{2+} + HCO_3^- + OH^-$

$CaCO_3$ = 100 g/mol ; HCO_3^- = 61 g/mol

100 kg — 61 kg

x kg — 600 kg

x = 984 kg de $CaCO_3$

100 kg corretivo ------ 80 kg $CaCO_3$

x kg corretivo ------- 984 kg $CaCO_3$

x = 1.230 kg corretivo

OU

$CaCO_3 + H_2O \rightarrow Ca^{2+} + HCO_3^- + OH^-$

100 kg — 61 kg

x kg . P — 600 kg

x = 600 . 100 / 61 . 0,8

x = 1.230 kg do material

Pureza de reagentes

Calcule a massa de KOH (pureza 99%) necessária para neutralizar 200 mL de uma solução 3 mol/L de HCl.

$$\mathbf{1\ KOH + 1\ HCl \rightarrow 1\ KCl + 1\ H_2O}$$

$n_{HCl} = M \cdot V = 3x0{,}2 = 0{,}6$ mols

1 KOH ——————— 1 HCl

$n_{HCl} = n_{KOH} = 0{,}6$ mol

$m_{KOH} = n_{KOH} \times MM_{KOH}$

$m_{KOH} = 0{,}6 \times 56 = 33{,}6$ g

33,6 g ---------- 100%

m ---------- 99%

Note que a relação é inversamente proporcional

↓ pureza, ↑ massa necessária

m = 33,6 x 100 / 99

m = 33,9 g de KOH

Exercício em aula

A aspirina contém ácido acetilsalicílico ($C_9H_8O_4$, MM=180g/mol) o qual pode ser sintetizado a partir da reação do ácido salicílico ($C_7H_6O_3$, MM=138g/mol) com o anidrido acético. Sabendo o ácido salicílico apresenta pureza de 95%, determine a massa a ser adicionada desse reagente para produzir uma cartela com 10 comprimidos de 500 mg de AAS.

$$C_7H_6O_3 + C_4H_6O_3 \rightarrow C_9H_8O_4 + C_2H_4O_2$$

AAS = 10 x 500 mg = 5.000 mg ou 5g

$$C_7H_6O_3 + C_4H_6O_3 \rightarrow C_9H_8O_4 + C_2H_4O_2$$

138 g 180 g

x 5 g

x = 3,83 g de AS

3,83 g de AS ---------- 100%

m g de AS ---------- 95%

m = 4,03 g de AS

OU

$$C_7H_6O_3 + C_4H_6O_3 \rightarrow C_9H_8O_4 + C_2H_4O_2$$

138 g 180 g

m . 0,95 5 g

m = 4,03 g de AS

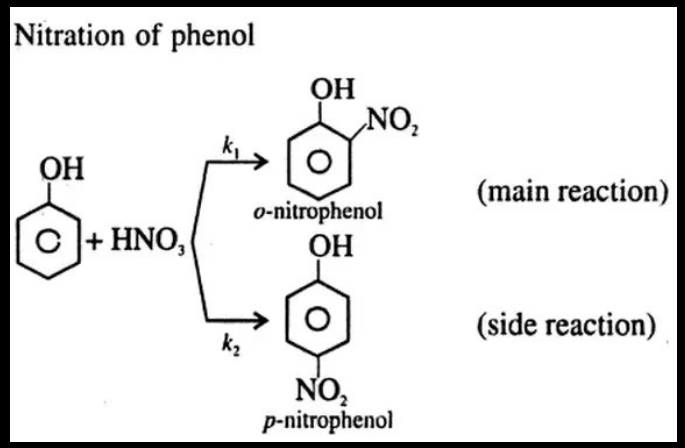
Caso particular: Rendimento

• Na prática, mesmo com quantidades exatas, muitas vezes não obtemos a quantidade máxima de produtos:

- Reações paralelas e formação de produtos indesejáveis

- Reação pode ser incompleta (reversível)

- Podem ocorrer perdas de produto durante a reação



$$A + B \underset{\text{Reação Inversa}}{\overset{\text{Reação Direta}}{\rightleftharpoons}} C + D$$

Cálculo do Rendimento

Rendimento teórico: Calculado (= 100%)

Rendimento real: Experimental (< 100%)

$$Rendimento\ \% = \frac{\text{Quantidade Obtida}}{\text{Quantidade Esperada}} \times 100$$

Num experimento, 2g de H_2 reagiram com 16 g de O_2 e a massa de H_2O produzida foi de 14,4 g. Qual o rendimento da reação?

	$2\ H_2$	+ $1\ O_2$	→ $2\ H_2O$
Estequiometria:	4 g	32 g	36 g
	2 g	16 g	18 g (se 100%)
Experimental:	2 g	16 g	14,4 g (experimental)

18 g -------- 100% rendimento

14,4 g ------- x % rendimento

x = 80%

Massa a partir do rendimento

A produção industrial de Fe a partir do Fe_2O_3 apresenta um rendimento de 75%. A partir de 4 ton de Fe_2O_3, qual a massa de Fe que pode ser produzida?

$$\mathbf{1\ Fe_2O_{3(s)} + 3\ C_{(s)} \rightarrow 2\ Fe_{(s)} + 3\ CO_{(g)}}$$

Estequiometria:	160 ton	36 ton	112 ton	84 ton
Rendimento Teórico:	4 ton		2,8 ton (se 100%)	
Experimental:	4 ton		x (real)	

2,8 ton -------- 100% rendimento

x ------- 75 % rendimento

x = 2,1 ton de Fe

Exercício em aula

A chuva ácida tem origem na formação de ácidos a partir da água e de óxidos de S e N presentes na atmosfera, segundo:

I-) $SO_2 + O_2 + H_2O \rightarrow H_2SO_4$ II-) $NO_2 + H_2O \rightarrow HNO_3 + NO$

a-) Sabendo que a reação I apresenta rendimento de 90%, determine a massa de H_2SO_4 formado a partir de 6 mols de SO_2 . Dado: MM_{H2SO4} = 98 g/mol

b-) Qual o rendimento da reação II se a partir de 56 L de NO_2 (nas CNTP) produziu-se 100 g de HNO_3 Dado: MM_{HNO3} = 63 g/mol

I-) $2SO_2 + 1O_2 + 2H_2O \rightarrow 2H_2SO_4$

Est. 2 mol 2mol

Teor. 6 mol 6 mol

II-) $3\ NO_2 + 1\ H_2O \rightarrow 2\ HNO_3 + 1NO$

Est. 67,2 L(3 mols) 2mol

Teor. 56 L (2,5 mol) 1,67 mol

6 mol -------- 100% R
x ------- 90 % R
x = 5,4 mols de H_2SO_4

1 mol -------- 98 g
5,4 mol ------- x
m = 529 g H_2SO_4

1 mol -------- 63 g
1,67 mol ------- c
x = 105,2 g HNO_3

105,2 g -------- 100% R
100 g ------- x
x = 95,2% R

Reatividade: Termodinâmica e Cinética