

# Química Geral

Prof. Sofia Nikolaou

**AULA 07 – estequiometria**

P. Atkins & L. Jones, Princípios da Química, 5o edição, editora Bookman

F85 – F104

# Cálculo estequiométrico

- É a análise quantitativa das reações químicas a partir de suas equações balanceadas
- Uma reação química TEM estequiometria
- Quem **MANDA** no cálculo estequiométrico é a estequiometria observada na **EQUAÇÃO QUÍMICA BALANCEADA**

- **Relações importantes**

$$C \text{ (g L}^{-1}\text{)} = \frac{m \text{ (g)}}{V \text{ (L)}}$$

$$M \text{ (mol L}^{-1}\text{)} = \frac{n \text{ (mol)}}{V \text{ (L)}}$$

$$n \text{ (mol)} = \frac{m \text{ (g)}}{MM \text{ (g mol}^{-1}\text{)}}$$

$$d \text{ (g mL}^{-1}\text{)} = \frac{m \text{ (g)}}{V \text{ (mL)}}$$

1. Não esquecer de balancear a equação
2. Não esquecer de fazer análise dimensional

# Cálculo estequiométrico

Predição Mol a Mol pg. F86

Que quantidade de  $\text{NH}_3$  é produzida a partir de 2,0 mols de  $\text{H}_2$  na reação  
 $\text{N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NH}_3(\text{g})$ ?

3 mol de  $\text{H}_2 \rightarrow 2$  mol de  $\text{NH}_3$

2 mol de  $\text{H}_2 \rightarrow x$  mol de  $\text{NH}_3$

$$x = 2,00 \text{ mol de } \text{H}_2 \times \frac{2 \text{ mol de } \text{NH}_3}{3 \text{ mol de } \text{H}_2}$$

$$= 1,3 \text{ mol de } \text{NH}_3$$

## Cálculo estequiométrico - Predição massa a massa, pg. F87

Que massa de óxido de ferro(III),  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , presente no minério de ferro, é necessária para produzir 10,0 g de ferro ao ser reduzida por monóxido de carbono ao metal ferro e ao gás dióxido de carbono em um alto-forno?

O dióxido de carbono produzido também deve ser monitorado para proteção do ambiente.

Que massa de dióxido de carbono é liberada na produção de 10,0 g de ferro?

**ESCREVER REAÇÃO BALANCEADA**  $\text{Fe}_2\text{O}_3(\text{s}) + 3\text{CO}(\text{g}) \rightarrow 2\text{Fe}(\text{s}) + 3\text{CO}_2(\text{g})$

$$\text{MM Fe}_2\text{O}_3 = (2 \times 55,8) + (3 \times 16) \\ = 159,6 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{MM CO} = 28,0 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{MM Fe} = 55,8 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{MM CO}_2 = 44,0 \text{ g mol}^{-1}$$

| 159,6 | 3 x 28 | 2 x 55,8 | 3 x 44 |
|-------|--------|----------|--------|
|-------|--------|----------|--------|

|   |  |      |  |
|---|--|------|--|
| x |  | 10,0 |  |
|---|--|------|--|

|  |  |      |   |
|--|--|------|---|
|  |  | 10,0 | x |
|--|--|------|---|

159,6 g de  $\text{Fe}_2\text{O}_3 \rightarrow 111,6 \text{ g de Fe}$

x  $\rightarrow 10 \text{ g}$

x = 14,3 g de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$

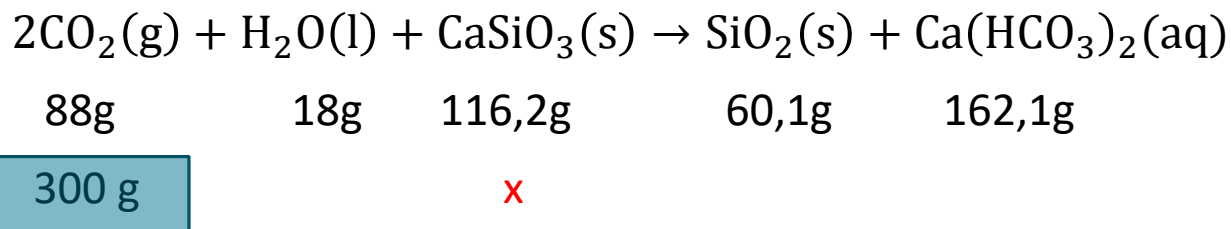
111,6 g de Fe  $\rightarrow 132 \text{ g de CO}_2$

10 g  $\rightarrow x$

x = 11,8 g de  $\text{CO}_2$

## Cálculo estequiométrico - Predição massa a massa, pg. F88

O dióxido de carbono pode ser removido das gases emitidos por uma usina termoelétrica combinando-o com uma emulsão de silicato de cálcio em água:  $2\text{CO}_2(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{CaSiO}_3(\text{s}) \rightarrow \text{SiO}_2(\text{s}) + \text{Ca}(\text{HCO}_3)_2(\text{aq})$ . Que massa de  $\text{CaSiO}_3$  (massa molar  $116,2 \text{ g mol}^{-1}$ ) é necessária para reagir completamente com **0,300 kg** de dióxido de carbono?



MM  $\text{CO}_2 = 44,0 \text{ g mol}^{-1}$

MM  $\text{H}_2\text{O} = 18,0 \text{ g mol}^{-1}$

MM  $\text{CaSiO}_3 = 116,2 \text{ g mol}^{-1}$

MM  $\text{SiO}_2 = 60,1 \text{ g mol}^{-1}$

MM  $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2 = 162,1 \text{ g mol}^{-1}$

88 g de  $\text{CO}_2 \rightarrow 116,2 \text{ g de CaSiO}_3$

300 g  $\rightarrow$  **x**

**x** = 396,1 g de  $\text{CaSiO}_3$

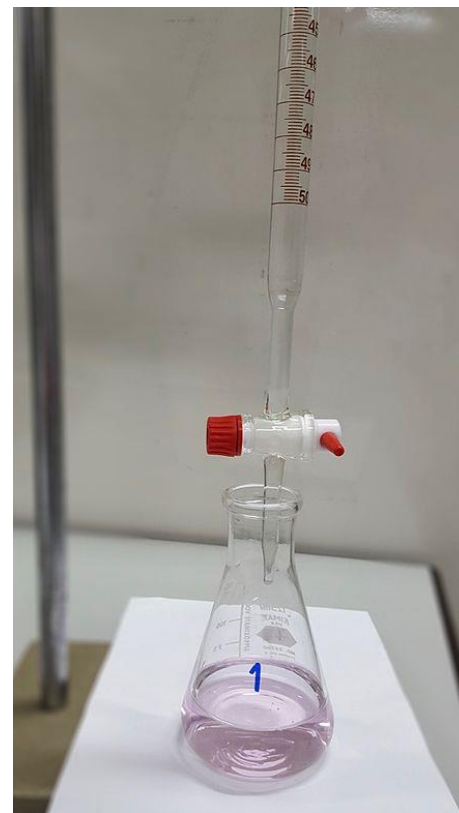
# Cálculo estequiométrico - Titulação

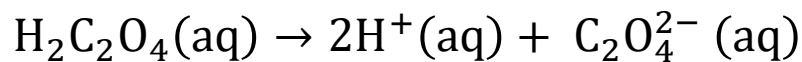
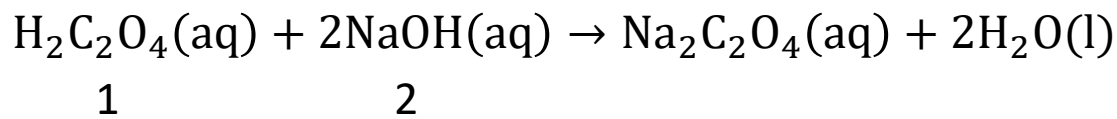
Titulação: determina-se a **concentração desconhecida** de uma solução  $X$  (que contem o analito) através da adição de **quantidade conhecida** de uma solução de **concentração conhecida** (o titulante) à um **volume conhecido** da solução  $X$

Titulação, pg. F90

Suponha que 25,00 mL de uma solução de ácido oxálico,  $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ , que tem dois hidrogênios ácidos, foi titulada com uma solução 0,100 M de  $\text{NaOH}(\text{aq})$  e que o ponto estequiométrico foi atingido após a adição de 38,0 mL da solução de base. Determine a molaridade da solução de ácido oxálico.

$$M (\text{mol L}^{-1}) = \frac{n (\text{mol})}{V (\text{L})}$$





### 1) Quantidade de NaOH adicionada

$$\begin{array}{l} [\text{NaOH}] = 0,100 \text{ M} \\ V = 38 \text{ mL} \end{array} \quad \longrightarrow \quad M (\text{mol L}^{-1}) = \frac{n (\text{mol})}{V (\text{L})}$$

$$\begin{aligned} n_{\text{NaOH}} &= 38,0 \cdot 10^{-3} \text{ L} \times 0,100 \text{ mol L}^{-1} \\ &= 3,8 \times 10^{-3} \text{ mol} \end{aligned}$$

### 2) Quantidade de mols de $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$

$$\begin{array}{l} 1 \text{ mol de } \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 \rightarrow 2 \text{ mols de NaOH} \\ \quad \quad \quad \times \quad \quad \quad 3,8 \times 10^{-3} \text{ mols de NaOH} \\ \quad \quad \quad x = 1,9 \text{ mol de } \text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4 \end{array}$$

### 3) Concentração da solução de $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$

$$\begin{array}{l} V = 25 \text{ mL} \\ n = 1,9 \times 10^{-3} \end{array} \quad \longrightarrow \quad M (\text{mol L}^{-1}) = \frac{n (\text{mol})}{V (\text{L})}$$

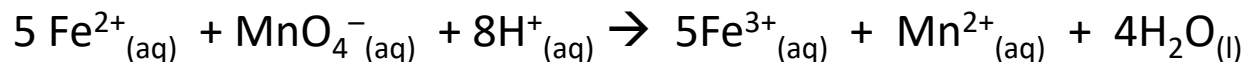
$$\begin{aligned} M &= \frac{1,9 \times 10^{-3} (\text{mol})}{0,025 (\text{L})} \\ &= 0,076 \text{ M} \end{aligned}$$

# Cálculo estequiométrico – Determinação de Pureza

- Se uma amostra NÃO ESTA PURA, a amostra é uma mistura, ou seja, a massa (ou volume) total da amostra é MAIOR do que a massa (ou volume) da espécie química de interesse
- Portanto, a quantidade de matéria correspondente à espécie de interesse é MENOR que a quantidade total de amostra

Pureza, pg. F91

A concentração de ferro em minérios pode ser determinada por titulação de uma amostra com uma solução de permanganato de potássio,  $\text{KMnO}_4$ . O minério é dissolvido em ácido clorídrico e formam-se íons ferro(II), que reagem com  $\text{MnO}_4^-$ .



O ponto estequiométrico é atingido quando todo o  $\text{Fe}^{2+}$  reagiu e a detecção é feita porque a cor do íon permanganato persiste. Uma amostra de massa 0,202 g de minério foi dissolvida em ácido clorídrico, e a solução resultante utilizou 16,7 mL de 0,0108 M (aq) em  $\text{KMnO}_4$  para atingir o ponto estequiométrico.

Qual é a massa de íons ferro(II) presente na amostra?

Qual é a percentagem em massa de ferro na amostra de minério?

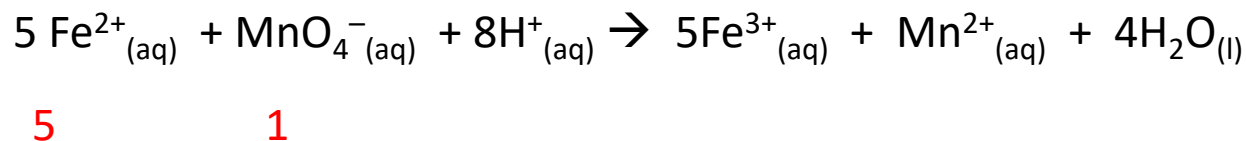


### 1) Quantidade de $\text{MnO}_4^-$

$$\begin{array}{l} [\text{KMnO}_4] = 0,0108 \text{ M} \\ V = 16,7 \text{ mL} \end{array} \quad \rightarrow \quad M (\text{mol L}^{-1}) = \frac{n (\text{mol})}{V (\text{L})}$$

$$\begin{aligned} n(\text{MnO}_4^-) &= \frac{0,0108 \text{ mol MnO}_4^-}{1 \text{ L}} \times 1,67 \cdot 10^{-2} \text{ L} \\ &= 1,8 \times 10^{-4} \text{ mol MnO}_4^- \end{aligned}$$

### 2) Quantidade de $\text{Fe}^{2+}$ a partir da estequiometria



$$n(\text{Fe}^{2+}) = 9 \times 10^{-4} \text{ mol Fe}^{2+}$$

### 3) Massa de $\text{Fe}^{2+}$

$$1 \text{ mol Fe} \rightarrow 55,8 \text{ g}$$

$$9 \times 10^{-4} \text{ mol Fe} \rightarrow \textcolor{red}{x}$$

$$X = 0,05 \text{ g de Fe}$$

### 4) Porcentagem em massa

$$0,202 \text{ g amostra} \rightarrow 100\%$$

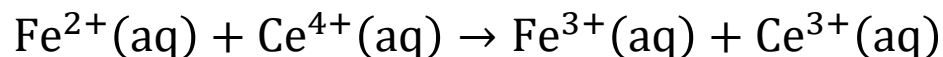
$$0,05 \text{ g de Fe} \rightarrow X$$

$$X = 24,8\%$$

# Cálculo estequiométrico – Determinação de Pureza

Pureza, pg. F92

Uma amostra de calcário de massa 20,750 g, para uso em cerâmica, foi analisada para a determinação de conteúdo de ferro. O calcário foi lavado com ácido clorídrico e o ferro convertido em íons ferro(II). A solução resultante foi titulada com uma solução de sulfato de cério(IV):



Na titulação foram gastos 13,45 mL de uma solução 1,340 M em  $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2(\text{aq})$  para atingir o ponto estequiométrico. Qual é a percentagem de massa de ferro no calcário?

# Cálculo estequiométrico – Reagente limitante, Reagente em excesso e Rendimento da reação

- Reação “simples”, exemplo:

Ácido forte + base forte  $\rightarrow$  neutralização total



- É sempre assim? **NÃO!!!!**

As reações químicas não tem 100% de rendimento basicamente por que:

1. Os equilíbrios estão mais deslocados para um lado do que para o outro
2. Ocorrem reações paralelas que fazem com que parte dos reagentes sejam consumidos SEM formar o produto de interesse
3. Um dos reagentes se encontra em quantidade inferior (REAGENTE LIMITANTE) à quantidade estequiométrica necessária para a conversão total em produto.  
O outro reagente está, portanto, em EXCESSO

# Cálculo estequiométrico – Reagente limitante e Reagente em excesso e rendimento

## RECEITA DE BOLO

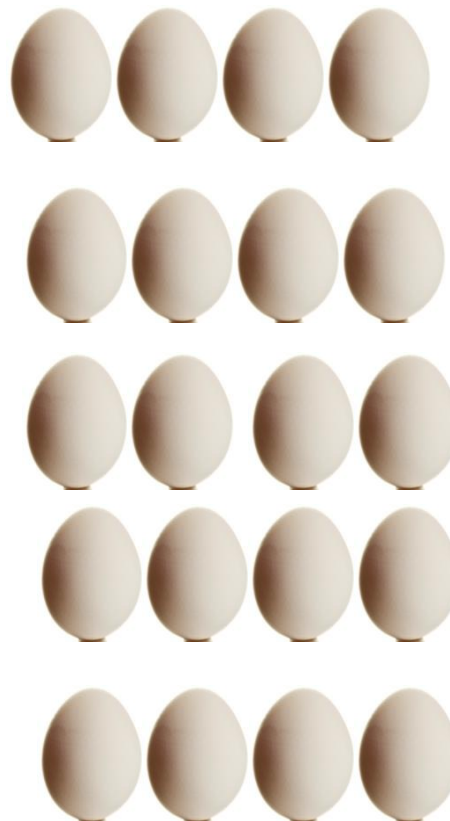
1 xícara de leite

4 ovos

**Estequiometria da reação**

6 xíc. de leite

20 ovos



**REAGENTE  
LIMITANTE**

**REAGENTE EM  
EXCESSO**

**RENDIMENTO: 5 BOLOS**

?



Só consigo fazer 5 bolos.  
Portanto, o reagente que  
MANDA na reação é  
aquele que está em  
menor quantidade

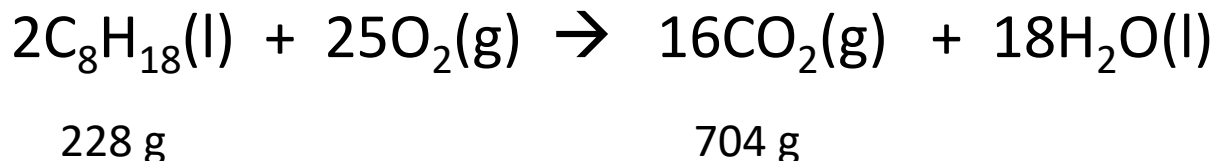
# Cálculo estequiométrico – Reagente limitante, Reagente em excesso e Rendimento da reação

Rendimento, pg. F95, M1

A combustão incompleta de combustível em um motor mal calibrado pode produzir monóxido de carbono, tóxico, juntamente com o dióxido de carbono e água normalmente obtidos. No teste de um motor de automóvel para acompanhar a combustão de 1,00 L de octano (massa de 702 g) sob certas condições, obteve-se 1,84 kg de dióxido de carbono. Qual é o rendimento percentual da formação de dióxido de carbono?

$$\text{MM C}_8\text{H}_{18} = 114 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{MM CO}_2 = 44 \text{ g mol}^{-1}$$



1) Rendimento teórico

$$228 \text{ g de C}_8\text{H}_{18} \rightarrow 704 \text{ g de CO}_2$$

$$702 \text{ g de C}_8\text{H}_{18} \rightarrow \text{ x }$$

$$\text{X} = 2167,6 \text{ g (2,17 kg)}$$

2) Rendimento percentual

$$2,17 \text{ kg} \rightarrow 100\%$$

$$1,84 \text{ kg} \rightarrow \text{ x }$$

$$\text{X} = 84,8 \%$$

# **Cálculo estequiométrico – Reagente limitante, Reagente em excesso e Rendimento da reação**

Reagente limitante, pg. 97, M2

O carbeto de cálcio,  $\text{CaC}_2$ , reage com água para formar hidróxido de cálcio e o gás inflamável etino (acetileno). Essa reação já foi usada para lâmpadas de bicicletas, porque os reagentes são facilmente transportados.

Qual é o reagente limitante quando 100 g de água reagem com 100 g de carbeto de cálcio?

Que massa de etino pode ser produzida?

Que massa do reagente em excesso permanece depois que a reação se completa?

Imagine que o carbeto de cálcio está puro e que todo o etino produzido é coletado. A equação química é



## **Cálculo estequiométrico – Reagente limitante, Reagente em excesso e Rendimento da reação**

Reagente limitante, pg. F98, M3

Uma etapa importante no refino do metal alumínio é a manufatura da criolita,  $\text{Na}_3\text{AlF}_6$ , a partir de fluoreto de amônio, aluminato de sódio e hidróxido de sódio em água:



Infelizmente, podem-se formar subprodutos, o que reduz o rendimento. Em uma pesquisa do processo em laboratório, 100,0 g de  $\text{NH}_4\text{F}$  foram misturados com 82,6 g de  $\text{Na}[\text{Al}(\text{OH})_4]$  e 80,0 g de  $\text{NaOH}$ . A massa de  $\text{Na}_3\text{AlF}_6$  produzida foi igual a 75,0 g. Qual foi o rendimento percentual da reação?

**CÁLCULO DO RENDIMENTO DEVE SER FEITO COM BASE NO REAGENTE  
LIMITANTE**

## 0) Determinar massas molares

$$\text{NH}_4\text{F}: 37,04 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{NH}_4[\text{Al}(\text{OH})_4]: 118,00 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{NaOH}: 80,00 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{Na}_3\text{AlF}_6: 209,95 \text{ g mol}^{-1}$$

## 1) Calcule a quantidade de cada reagente

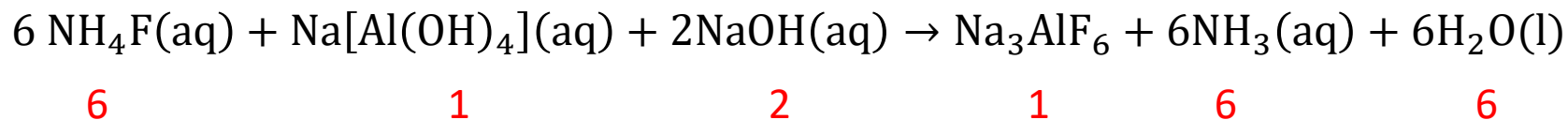
$$\begin{array}{l} 1 \text{ mol NH}_4\text{F} \rightarrow 37,04 \text{ g} \\ \quad \quad \quad \times \quad \rightarrow 100 \text{ g} \end{array} \qquad n(\text{NH}_4\text{F}) = 100,0 \text{ g} \times \frac{1 \text{ mol NH}_4\text{F}}{37,04 \text{ g}} = 2,700 \text{ mol NH}_4\text{F}$$

$$n(\text{NH}_4[\text{Al}(\text{OH})_4]) = 82,6 \text{ g} \times \frac{1 \text{ mol NH}_4[\text{Al}(\text{OH})_4]}{118,0 \text{ g}} = 0,700 \text{ mol NH}_4[\text{Al}(\text{OH})_4]$$

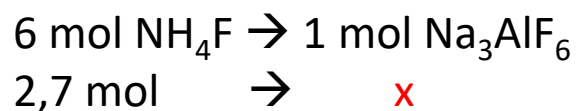
$$n(\text{NaOH}) = 80,0 \text{ g} \times \frac{1 \text{ mol NaOH}}{40,0 \text{ g}} = 2,00 \text{ mol NaOH}$$



2) Identifique o reagente limitante como o reagente que pode produzir a menor quantidade de produto



$\text{NH}_4\text{F}$ :



$$\begin{aligned} n(\text{Na}_3\text{AlF}_6) &= 2,700 \text{ mol NH}_4\text{F} \times \frac{1 \text{ mol Na}_3\text{AlF}_6}{6 \text{ mol NH}_4\text{F}} \\ &= 0,450 \text{ mol Na}_3\text{AlF}_6 \end{aligned}$$

$\text{NH}_4[\text{Al}(\text{OH})_4]$ :

$$\begin{aligned} n(\text{Na}_3\text{AlF}_6) &= 0,700 \text{ mol NH}_4[\text{Al}(\text{OH})_4] \times \frac{1 \text{ mol Na}_3\text{AlF}_6}{1 \text{ mol NH}_4[\text{Al}(\text{OH})_4]} \\ &= 0,700 \text{ mol Na}_3\text{AlF}_6 \end{aligned}$$

$\text{NaOH}$ :

$$\begin{aligned} n(\text{Na}_3\text{AlF}_6) &= 2,000 \text{ mol NaOH} \times \frac{1 \text{ mol Na}_3\text{AlF}_6}{2 \text{ mol NaOH}} \\ &= 1,00 \text{ mol Na}_3\text{AlF}_6 \end{aligned}$$

$\text{NH}_4\text{F}$  é o reagente limitante

3) Calcule o rendimento teórico em massa de  $\text{Na}_3\text{AlF}_6$

$$\begin{array}{lcl} 1 \text{ mol Na}_3\text{AlF}_6 & \rightarrow & 209,95 \text{ g mol}^{-1} \\ 0,450 \text{ mol} & \rightarrow & \textcolor{red}{x} \end{array}$$

$$\begin{aligned} m(\text{Na}_3\text{AlF}_6) &= 0,450 \text{ mol} \times 209,95 \text{ g mol}^{-1} \\ &= 94,5 \text{ g} \end{aligned}$$

4) Calcule o rendimento percentual

$$\begin{array}{lcl} 94,5 \text{ g} & \rightarrow & 100\% \\ 75 \text{ g} & \rightarrow & \textcolor{red}{x} \end{array}$$

$$\frac{75,0 \text{ g}}{94,5 \text{ g}} \times 100\% = 79,4\%$$

## Cálculo estequiométrico – Análise por combustão

Essa análise envolve a queima de amostra em atmosfera oxidante de  $O_{2(g)}$ .  
Decompõe a amostra “liberando” C na forma de  $CO_2$  e H na forma de  $H_2O$ .  
Obtêm-se informação sobre composição em termos de % em massa

Determinação de fórmula empírica, pg F101, M4

Fez-se a análise por combustão de 1,621 g de um composto recém-sintetizado, do qual se sabia que continha somente C, H e O. As massas de água e dióxido de carbono produzidas foram 1,902 g e 3,095 g, respectivamente. Qual é a fórmula empírica do composto?

## 0) Massas molares

$$\text{CO}_2: 44,01 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{H}: 1,008 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{C}: 12,01 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\text{H}_2\text{O}: 18,02 \text{ g mol}^{-1}$$

1) Converta a massa de  $\text{CO}_2$  produzida em quantidade de C na amostra

$$\begin{array}{l} 1 \text{ mol CO}_2 \rightarrow 44,01 \text{ g} \rightarrow 1 \text{ mol C} \\ 3,095 \text{ g} \rightarrow \textcolor{red}{x} \end{array}$$

$$\begin{aligned} n(\text{C}) &= \frac{3,095}{44,01} \\ &= 0,0703 \text{ mol C} \end{aligned}$$

2) Calcule a massa de carbono na amostra

$$\begin{array}{l} 1 \text{ mol C} \rightarrow 12,01 \text{ g} \\ 0,0703 \text{ mol C} \rightarrow \textcolor{red}{x} \end{array}$$

$$m(\text{C}) = 0,0703 \times 12,01 = 0,8446 \text{ g}$$

3) Converta a massa de H<sub>2</sub>O produzida em quantidade de H na amostra

$$\begin{array}{l} 1 \text{ mol H}_2\text{O} \rightarrow 18,02 \text{ g} \rightarrow 2 \text{ mol H} \\ 1,902 \text{ g} \rightarrow \textcolor{red}{x} \end{array} \quad n(\text{H}) = \frac{1,902 \times 2}{18,02}$$
$$= 0,2111 \text{ mol H}$$

4) Calcule a massa de hidrogênio na amostra

$$\begin{array}{l} 1 \text{ mol H} \rightarrow 1,008 \text{ g} \\ 0,2111 \text{ mol H} \rightarrow \textcolor{red}{x} \end{array} \quad x = 0,2128 \text{ g}$$

5) A partir da massa total e das massas de C e H, determine a massa de O

$$\begin{aligned} m(\text{O}) &= 1,621 \text{ g} - 0,8446 \text{ g} - 0,2128 \text{ g} \\ &= 0,564 \text{ g} \end{aligned}$$

6) Converta a massa de O em quantidade de mols de O

1 mol O  $\rightarrow$  16 g  
X  $\rightarrow$  0,564 g

$$n(\text{O}) = \frac{0,564}{16} = 0,0352 \text{ mol}$$

7) Escreva a razão das quantidades de cada elemento na amostra

$$\text{C:H:O} = 0,0703: 0,2111: 0,0352 \quad \text{Divida pelo menor número}$$

$$\text{C:H:O} = 2,00: 6,00: 1,00$$

Fórmula mínima  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$