

ESTEQUIOMETRIA DE REAÇÕES QUÍMICAS – CÁLCULOS ESTEQUIOMÉTRICOS

META

Mostrar como se realizam cálculos estequiométricos de reações em que um dos reagentes encontra-se em excesso, além de calcular o rendimento de reações químicas.

OBJETIVOS

Ao final desta aula, o aluno deverá:

aplicar os conceitos e métodos de balanceamento de equações químicas; realizar cálculos estequiométricos em presença de reagentes limitantes; e determinar o rendimento de uma reação química.

PRÉ-REQUISITOS

Equações químicas.



(Fonte: <http://www.airo.oestedigital.pt>).

INTRODUÇÃO

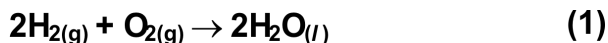
Em termos práticos, quando um químico executa uma reação, normalmente visa produzir uma maior quantidade possível de um composto. Geralmente, para garantir que um dos reagentes seja completamente consumido, é necessário que um dos reagentes esteja em excesso em relação às quantidades estequiométricas. A quantidade máxima de produtos que pode ser obtida oriunda de uma reação é o que definimos como rendimento teórico; no entanto, o rendimento experimental de um determinado composto é menor que o rendimento teórico, pois, durante os processos reacionais realizados em laboratório ou na indústria, sempre ocorre perda de produto durante a purificação, ou, em alguns casos, as reações não ocorrem completamente, ou até mesmo as reações tornam-se complicadas devido à formação de subprodutos indesejados.



(Fonte: <http://dequim.ist.utl.pt>).

CÁLCULOS ESTEQUIOMÉTRICOS ENVOLVENDO REAGENTE LIMITANTE

Considere a equação balanceada da reação entre o oxigênio e o hidrogênio para formação da água:



De acordo com a relação estequiométrica, a razão entre o número de moléculas, ou mols de hidrogênio e oxigênio é 2:1. Esta razão é o que definimos de **razão estequiométrica** entre os reagentes. Caso um dos reagentes seja adicionado em quantidade superior à razão estequiométrica, este excesso permanecerá sem reagir. Observe a reação de preparação de tricloreto de fósforo representada pela equação química balanceada (2):



Suponha que uma quantidade muito superior à razão estequiométrica de Cl_2 seja adicionada à reação. Ao fim do processo todo, P_4 será convertido em produto; no entanto, ainda restará o excesso de Cl_2 . Neste caso, a quantidade de PCl_3 formado dependerá da quantidade de P_4 presente no início da reação e não da quantidade de Cl_2 , pois o cloro encontra-se em excesso. Neste exemplo é fácil identificar que o **reagente limitante** é o P_4 , pois limita a quantidade de PCl_3 .

Exemplo 1:

Suponha que 750g de P_4 seja misturado com 750 g de Cl_2 . Determine qual dos reagentes é o limitante, quanto de PCl_3 será formado e quanto do reagente em excesso permanecerá sem reagir?

Etapa 1:

Calcular o número de mols de cada reagente e comparar com a razão estequiométrica dada pela equação balanceada (2).

$$750 \text{ g de } \text{P}_4 \times \frac{1 \text{ mol de } \text{P}_4}{124 \text{ g}} = 6,05 \text{ mols de } \text{P}_4$$

$$750 \text{ g de } \text{Cl}_2 \times \frac{1 \text{ mol de } \text{Cl}_2}{71 \text{ g}} = 10,6 \text{ mols de } \text{Cl}_2$$

Etapa 2:

Determinar se os reagentes estão dentro da razão estequiométrica fornecida pela equação química balanceada da reação.

Relação estequiométrica fornecida pela equação química balanceada:

$$\frac{6 \text{ mols de } \text{Cl}_2}{1 \text{ mols de } \text{P}_4} = 6$$

Razão dos reagentes disponíveis:

$$\frac{10,6 \text{ mols de } \text{Cl}_2}{6,05 \text{ mols de } \text{P}_4} = 1,75$$

A divisão entre o número de mols de reagentes disponíveis é muito menor que a razão estequiométrica definida pela equação química bal-

Razão estequiométrica

Fator que correlaciona os números de mols dos reagentes ao número de mols dos produtos e vice-versa.

Reagente limitante

Reagente que limita a formação do produto; reagente que não está em excesso; reagente que é totalmente consumido.

anceada. Portanto, não há Cl_2 suficiente para consumir todo o P_4 disponível, logicamente, o Cl_2 é o reagente limitante da reação.

Etapa 3:

Calcular a quantidade de produto formado baseado no reagente limitante.

$$10,6 \text{ mols de } \text{Cl}_2 \times \frac{4 \text{ mols de } \text{PCl}_3}{6 \text{ mols de } \text{Cl}_2} = 7,07 \text{ mols de } \text{PCl}_3$$

Etapa 4:

Calcular a massa de produto formado.

$$7,07 \text{ mols de } \text{PCl}_3 \times \frac{137,33 \text{ g de } \text{PCl}_3}{1 \text{ mol de } \text{PCl}_3} = 974,2 \text{ g de } \text{PCl}_3$$

Etapa 5:

Calcular a quantidade de P_4 necessária.

$$10,6 \text{ mols de } \text{Cl}_2 \times \frac{1 \text{ mol de } \text{P}_4}{6 \text{ mols de } \text{Cl}_2} = 1,77 \text{ mols de } \text{P}_4$$

Etapa 6:

Calcular o excesso de P_4 .

$$\text{P}_{4(\text{excesso})} = 5,06 \text{ mols } \text{P}_{4(\text{disponível})} - 1,77 \text{ mols } \text{P}_{4(\text{necessário})} = 3,30 \text{ mols de } \text{P}_{4(\text{excesso})}$$

Etapa 7:

Calcular a massa do excesso de P_4 .

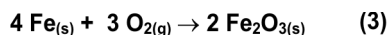
$$3,30 \text{ mols de } \text{P}_4 \times \frac{124 \text{ g de } \text{P}_4}{1 \text{ mol de } \text{P}_4} = 409,2 \text{ g de } \text{P}_{4(\text{excesso})}$$

Exemplo 2:

Admita que 245 g de Fe reagem com 280 g de O_2 . Determine o reagente limitante, calcule quanto de Fe_2O_3 será produzido.

Etapa 1:

Inicialmente escreva a equação balanceada da reação química.



Etapa 2:

Calcular o número de mols dos reagentes disponíveis.

$$245 \text{ g de Fe} \times \frac{1 \text{ mol de Fe}}{55,845 \text{ g de Fe}} = 4,4 \text{ mols de Fe}$$

$$280 \text{ g de } \text{O}_2 \times \frac{1 \text{ mol de } \text{O}_2}{32 \text{ g de } \text{O}_2} = 8,75 \text{ mols de } \text{O}_2$$

Etapa 3:

Comparar a razão estequiométrica com a razão dos reagentes disponíveis.

Relação estequiométrica fornecida pela equação química balanceada:

$$\frac{3 \text{ mols de O}_2}{4 \text{ mol de Fe}} = 0,75$$

Razão dos reagentes disponíveis:

$$\frac{9,06 \text{ mols de O}_2}{4,4 \text{ mols de Fe}} = 2,06$$

Como a relação dos reagentes disponíveis é maior que a razão estequiométrica, o reagente limitante é o ferro.

Etapa 4:

Calcular o número de mols do Fe_2O_3 baseado no reagente limitante disponível.

$$4,4 \text{ mols de Fe} \times \frac{2 \text{ mol de Fe}_2\text{O}_3}{4 \text{ mols de Fe}} = 2,2 \text{ mols de Fe}_2\text{O}_3$$

Etapa 5:

Converter o número de mols de Fe_2O_3 em massa.

$$2,2 \text{ mols de Fe}_2\text{O}_3 \times \frac{159,7 \text{ g de Fe}_2\text{O}_3}{1 \text{ mol de Fe}_2\text{O}_3} = 351,34 \text{ g de Fe}_2\text{O}_3$$

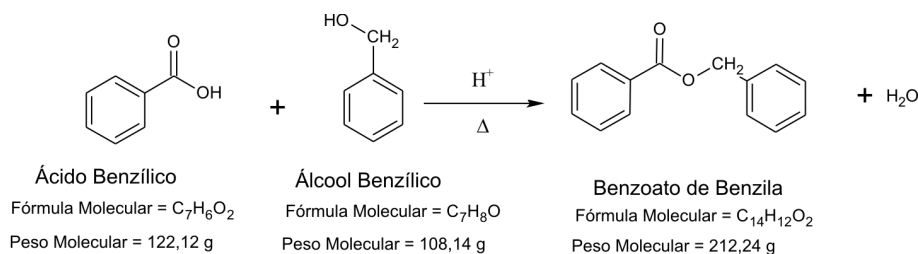
RENDIMENTO PERCENTUAL DE UMA REAÇÃO QUÍMICA

Durante uma reação química, sempre ocorrem perdas, seja durante o isolamento e purificação do produto, ou devido a aspectos termodinâmicos desfavoráveis que fazem com que a reação não processe completamente, ou devido à complexidade da reação que permita a formação de outros produtos normalmente indesejados. Logo, para melhor informar os outros profissionais que desejarem repetir a reação, é bastante comum relatar o rendimento em termos percentuais de acordo com a equação 4:

$$\text{Rendimento Percentual} = \frac{\text{Rendimento Experimental}}{\text{Rendimento Teórico}} \times 100\%$$

Exemplo 3:

O éster benzoato de benzila pode ser preparado de acordo com a reação mostrada abaixo:



Suponha que a quantidade de ácido benílico disponível é de 250 g, que o álcool benílico está em excesso e que foi obtido 350 g do éster benzoato de benzila. Calcule o rendimento percentual do benzoato de benzila na reação.

Solução:

Etapa 1:

Calcular o número de mols do reagente limitante.

$$250 \text{ g de } C_7H_6O_2 \times \frac{1 \text{ mol de } C_7H_6O_2}{122,12 \text{ g}} = 2,05 \text{ mols de } C_7H_6O_2$$

Etapa 2:

Calcular o número de mols de benzoato de benzila baseado no reagente limitante.

$$2,05 \text{ mols de } C_7H_6O_2 \times \frac{1 \text{ mol de } C_{14}H_{12}O_2}{1 \text{ mol de } C_7H_6O_2} = 2,05 \text{ mols de } C_{14}H_{12}O_2$$

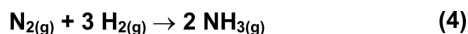
Etapa 3:

Calcular a quantidade máxima em massa de benzoato de benzila.

$$2,05 \text{ mols de } C_{14}H_{12}O_2 \times \frac{212,24 \text{ g de } C_{14}H_{12}O_2}{1 \text{ mol de } C_{14}H_{12}O_2} = 435,1 \text{ g de } C_{14}H_{12}O_2$$

Etapa 4:

Calcular o rendimento percentual do benzoato de benzila.



Exemplo 4:

Sob determinadas condições o nitrogênio gasoso reage com o hidrogênio para formar amônia de acordo com a equação balanceada (5).

Admita que 2,5 toneladas de N₂ reajam com 2,5 toneladas de H₂ produzindo NH₃ com o 12% de rendimento. Calcule:

- O reagente limitante;
- A quantidade adicional do reagente em excesso;

c) A quantidade real de amônia produzida.

Solução:

a) Calcular o número de mols dos reagentes e determinar a razão dos reagentes disponíveis e comparar com a razão estequiométrica.

$$2,5 \cdot 10^6 \text{ g de } N_2 \times \frac{1 \text{ mol de } N_2}{28 \text{ g de } N_2} = 8,93 \cdot 10^4 \text{ mols de } N_2$$

$$2,5 \cdot 10^6 \text{ g de } H_2 \times \frac{1 \text{ mol de } H_2}{2 \text{ g de } H_2} = 1,25 \cdot 10^6 \text{ mols de } H_2$$

Relação estequiométrica fornecida pela equação química balanceada:

$$\frac{3 \text{ mols de } H_2}{1 \text{ mol de } N_2} = 3$$

Razão dos reagentes disponíveis:

$$\frac{1,25 \cdot 10^6 \text{ mols de } H_2}{8,93 \cdot 10^5 \text{ mol de } N_2} = 14$$

O N_2 é o reagente limitante

b) Calcular a massa de H_2 necessária.

$$8,93 \cdot 10^4 \text{ mols de } N_2 \times \frac{3 \text{ mol de } H_2}{1 \text{ mol de } N_2} \times \frac{2 \text{ g de } H_2}{1 \text{ mol de } H_2} = 5,4 \cdot 10^5 \text{ g de } H_2$$

Determinar excesso de H_2

$$2,5 \cdot 10^6 \text{ g de } H_{2(\text{disponível})} - 5,4 \cdot 10^5 \text{ g de } H_{2(\text{necessário})} = 1,96 \cdot 10^6 \text{ g de } H_{2(\text{excesso})}$$

c) Determinar a massa de NH_3 produzida de acordo com o reagente limitante.

$$8,93 \cdot 10^4 \text{ mols de } N_2 \times \frac{2 \text{ mols de } NH_3}{1 \text{ mol de } N_2} \times \frac{17 \text{ g de } NH_3}{1 \text{ mol de } NH_3} = 3,04 \cdot 10^6 \text{ g de } NH_3$$

Calcular a massa de amônia produzida baseado no rendimento experimental da reação.

$$\frac{NH_{3(\text{Exp.})}}{3,04 \cdot 10^6 \text{ g de } NH_{3(\text{Teórico})}} \times 100\% = 12,00\%$$

$$\frac{3,04 \cdot 10^6 \text{ g de } NH_{3(\text{Teórico})} \times 12,00}{100} = 3,65 \cdot 10^5 \text{ g de } NH_{3(\text{Exp.})}$$

CONCLUSÃO

Em uma reação química, o objetivo é normalmente produzir a maior quantidade possível de um determinado produto a partir de certas quantidades de reagentes. Observamos que, para garantir que um dos reagentes seja completamente consumido durante o processo reacional, utiliza-se um outro reagente em excesso. Ao final da reação, a quantidade de produto formado é determinada pelo reagente limitante, ou seja, o reagente que não está em excesso na reação química. O rendimento teórico de uma reação química é a quantidade máxima de produto que pode ser obtido; no entanto, o rendimento experimental de uma reação é menor que o rendimento teórico, pois sempre ocorrem perdas durante os processos de purificação e isolamento, além de algumas delas não ocorrerem até o fim.

RESUMO

Nas reações químicas que envolvem reagente em excesso, a quantidade de produto é limitada pelo reagente limitante. A razão estequiométrica consiste de um fator que correlaciona os mols de reagentes ou produtos em uma equação química balanceada e é, através das razões estequiométricas, que se reconhece o reagente limitante de uma reação química. Como, durante uma reação química podem ocorrer perdas é possível determinar os rendimentos percentual utilizando os dados do rendimento experimental e teórico.

ATIVIDADES

1. Com relação à reação entre o ferro e o cloro representada na equação química (5) mostrada abaixo, responda:



a) Se, hipoteticamente, 200 g de Fe estivesse em presença 750 g de Cl_2 , quanto de Cloreto de ferro (III) seria formado?

Resposta= 579,6 g de FeCl_3

b) Identifique o reagente limitante da reação baseado nas razões estequiométricas.

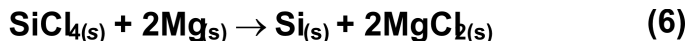
Resposta: Fe

c) Se, no fim da reação, fossem formados 250g de FeCl_3 , qual seria o rendimento da reação?

Resposta: 43,13 %



2. O Silício usado na produção de chips de computadores é produzido de acordo com a reação (6):



a) Se, hipoteticamente, 850 g de SiCl_4 e Mg reagissem, qual seria o reagente limitante?

Resposta: SiCl_4

b) Se, hipoteticamente, 650 g de SiCl_4 e 900g de Mg reagissem, qual seria o reagente limitante?

Resposta: SiCl_4

c) Se, hipoteticamente, 195 g de SiCl_4 e 50 g de Mg reagissem, qual seria o reagente limitante?

Resposta: Mg

d) Se, ao fim da reação, em que 850 de SiCl_4 e Mg reagissem, fosse obtido 85 g de Si, de qual é o rendimento experimental da reação?

Resposta: 59,03 %

e) Se a reação tivesse rendimento experimental de 65%, qual seria a massa de Silício produzido?

Resposta: 93,6 g

COMENTÁRIO SOBRE AS ATIVIDADES

Para determinar o reagente limitante, observe a equação (7).



Baseado na equação (7), temos:

Quando a razão dos reagentes disponíveis é MENOR que a razão estequiométrica:

$$\frac{\text{n}^\circ \text{ de mols B (disponível)}}{\text{n}^\circ \text{ de mols A (disponível)}} < \frac{3}{2} \quad \text{O composto B é o reagente.}$$

Quando a razão dos reagentes disponíveis é MAIOR que a razão estequiométrica:

$$\frac{\text{n}^\circ \text{ de mols B (disponível)}}{\text{n}^\circ \text{ de mols A (disponível)}} > \frac{3}{2} \quad \text{O composto A é o reagente.}$$

Seguir os procedimentos utilizados nos exemplos 1 ao 4



PRÓXIMA AULA

Na próxima aula, você estudará as Forças Intermoleculares e Ligação de Hidrogênio.

REFERÊNCIAS

Kotz, John C.; Treichel Jr., Paul M. **Química Geral 1 e reações químicas**. v. 1. São Paulo: Thomson Learning/Pioneira, 2005.

RUSSEL, John B. **Química Geral**. São Paulo: Makron Books, 1994. 2v.