

# 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 da 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>).

**E**m 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

## INTRODUÇÃO

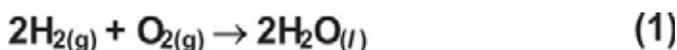
reagentes esteja em excesso em relação às quantidades estequiométricas. A quantidade máxima de produtos que pode ser obtida oriunda de uma reação é o que definimos como rendimento teórico; no entanto, o rendimento experimental de um determinado composto é menor que o rendimento teórico, pois, durante 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  $\text{Cl}_2$  seja adicionada à reação. Ao fim do processo todo,  $\text{P}_4$  será convertido em produto; no entanto, ainda restará o excesso de  $\text{Cl}_2$ . Neste caso, a quantidade de  $\text{PCl}_3$  formado dependerá da quantidade de  $\text{P}_4$  presente no início da reação e não da quantidade de  $\text{Cl}_2$ , pois o cloro encontra-se em excesso. Neste exemplo é fácil identificar que o **reagente limitante** é o  $\text{P}_4$ , pois limita a quantidade de  $\text{PCl}_3$ .

### Exemplo 1:

Suponha que 750g de  $\text{P}_4$  seja misturado com 750 g de  $\text{Cl}_2$ . Determine qual dos reagentes é o limitante, quanto de  $\text{PCl}_3$  será formado e quanto do reagente em excesso permanecerá sem reagir?

## CÁLCULOS ESTEQUIOMÉTRICOS

### 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.

**Etapa 1:**

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

$$\cancel{750 \text{ g de } P_4} \times \frac{1 \text{ mol de } P_4}{\cancel{124 \text{ g}}} = 6,05 \text{ mols de } P_4$$

$$\cancel{750 \text{ g de } Cl_2} \times \frac{1 \text{ mol de } Cl_2}{\cancel{71 \text{ g}}} = 10,6 \text{ mols de } Cl_2$$

**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:

$$\frac{6 \text{ mols de } Cl_2}{1 \text{ mol de } P_4} = 6$$

Razão dos reagentes disponíveis:

$$\frac{10,6 \text{ mols de } Cl_2}{6,05 \text{ mols de } P_4} = 1,75$$

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

$$\cancel{10,6 \text{ mols de } Cl_2} \times \frac{4 \text{ mols de } PCl_3}{\cancel{6 \text{ mols de } Cl_2}} = 7,07 \text{ mols de } PCl_3$$

**Etapa 4:**

Calcular a massa de produto formado.

$$\cancel{7,07 \text{ mols de } PCl_3} \times \frac{137,33 \text{ g de } PCl_3}{\cancel{1 \text{ mol de } PCl_3}} = 972,8 \text{ g de } PCl_3$$

**Etapa 5:**

Calcular a quantidade de  $P_4$  necessária.

$$10,6 \text{ mols de } Cl_2 \times \frac{1 \text{ mol de } P_4}{6 \text{ mols de } Cl_2} = 1,77 \text{ mols de } P_4$$

**Etapa 6:**

Calcular o excesso de  $P_4$ .

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

**Etapa 7:**

Calcular a massa do excesso de  $P_4$ .

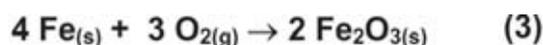
$$3,30 \text{ mols de } P_4 \times \frac{124 \text{ g de } P_4}{1 \text{ mol de } P_4} = 409,2 \text{ g de } P_{4(\text{excesso})}$$

**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.

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

$$280 \text{ g de } O_2 \times \frac{1 \text{ mol de } O_2}{32 \text{ g de } O_2} = 8,75 \text{ mols de } O_2$$

**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  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  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  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  em massa.

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

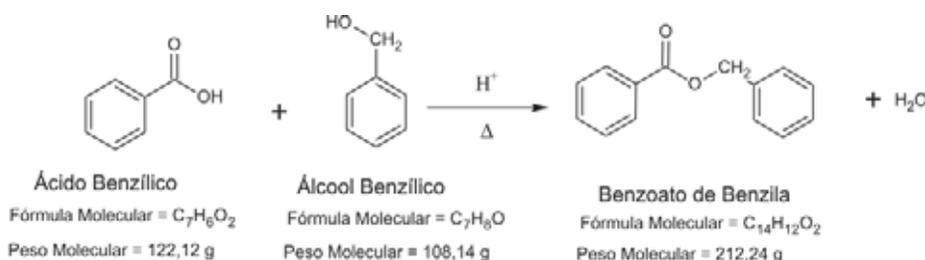
## RENDIMENTO PERCENTUAL DE UMA REAÇÃO QUÍMICA

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.

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

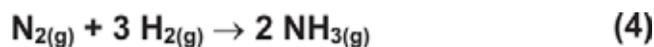
**Etapa 4:**

Calcular o rendimento percentual do benzoato de benzila.

$$\frac{350 \text{ g de } C_{14}H_{12}O_2 \text{ (Exp.)}}{435,1 \text{ g de } C_{14}H_{12}O_2 \text{ (Teórico)}} \times 100\% = 80,44\% \text{ de rendimento}$$

**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  $N_2$  reajam com 2,5 toneladas de  $H_2$  produzindo  $NH_3$  com o 12% de rendimento. Calcule:

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

$$\frac{1,25 \cdot 10^6 \text{ mols de } H_2}{8,93 \cdot 10^4 \text{ mol de } N_2} = 14$$

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.

$$\frac{\text{NH}_3 \text{ (Exp.)}}{3,04 \cdot 10^6 \text{ g de NH}_3 \text{ (Teórico)}} \times 100\% = 12,00 \%$$

$$\frac{3,04 \cdot 10^6 \text{ g de NH}_3 \text{ (Teórico)} \times 12,00}{100} = 3,65 \cdot 10^5 \text{ g de NH}_3 \text{ (Exp.)}$$

**E**m 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

## CONCLUSÃO

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  $\text{Cl}_2$ , quanto de Cloreto de ferro (III) seria formado?

Resposta= 579,6 g de  $\text{FeCl}_3$

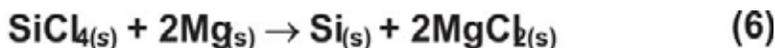
b) Identifique o reagente limitante da reação baseado nas razões estequiométricas.

Resposta: Fe

c) Se, no fim da reação, fossem formados 250g de  $\text{FeCl}_3$ , 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  $\text{SiCl}_4$  e Mg reagissem, qual seria o reagente limitante?

Resposta:  $\text{SiCl}_4$

b) Se, hipoteticamente, 650 g de  $\text{SiCl}_4$  e 900g de Mg reagissem, qual seria o reagente limitante?

Resposta:  $\text{SiCl}_4$

c) Se, hipoteticamente, 195 g de  $\text{SiCl}_4$  e 50 g de Mg reagissem, qual seria o reagente limitante?

Resposta: Mg

d) Se, ao fim da reação, em que 850 de  $\text{SiCl}_4$  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:

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

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

Seguir os procedimentos utilizados nos exemplos 1 ao 4

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

### 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.