

ASPECTOS QUANTITATIVOS

Reações químicas

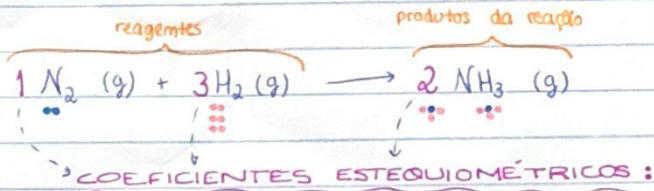
estados físicos:

(g) - gasoso

(l) - líquido

(s) - sólido

(aq) - em solução aquosa



- indicam a proporção de combinação das moléculas dos reagentes e de formação das moléculas dos produtos.

cálculos estequiométricos:

1 mol (N₂) $\rightarrow$ 2 mol (NH₃)

y mol (N₂) $\rightarrow$ x mol (NH₃)

exemplo: H₂O

1 molécula de água:

- 2 átomos de H
- 1 átomo de O

18g de água:

- 2g de H
- 16g de O

1 mole de moléculas de água:

- 2 moles de átomos de H
- 1 mole de átomos de O

Lei de Lavoisier

equações químicas devem ser acertadas!

$\rightarrow$ há conservação da massa.

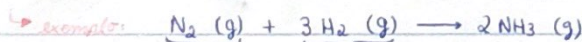
• Reagente limitante: é o que se esgota em primeiro lugar.

$\neq$

Reagente(s) em excesso

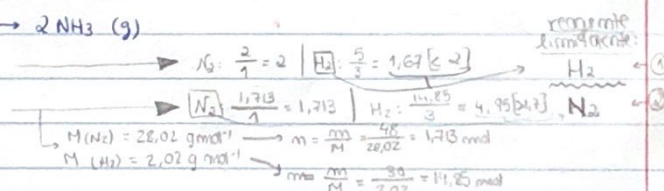
* É a quantidade de reagente limitante que permite prever a quantidade de produto obtida.

$$\text{menor } F = \frac{m}{\text{coeficiente esteq.}}$$



ex.^o 1: 2 mol 5 mol

ex.^o 2: 48g 30g



Grau de pureza de uma amostra:

$$GP(\%) = \frac{m_{\text{subst. pura}}}{m_{\text{total da amostra}}} \times 100\%$$

* Quando há um reagente limitante, ou quando há o esgotamento de pelo menos um dos reagentes, a reação é **COMPLETA**.

$\neq$

incompleta: nenhum dos reagentes se esgota completamente.

NOTA:
Começa-se sempre por calcular a(s) quantidade(s) de reagente(s) puro(s), pois só ele(s) podem reagir segundo a reação proposta.

rendimento:

$$\eta = \frac{\text{quantidade de produto obtida}}{\text{quantidade de produto prevista}} \times 100\%$$

causas:

- perdas físicas (evaporação, ...);
- perdas químicas (reações secundárias, ...);
- erros sistemáticos/acidentais;
- reações incompletas (nenhum reagente se esgota).

determinada pela estequiometria da reação

QUÍMICA VERDE: tem o intuito de prevenir / reduzir a poluição causada por processos químicos.

↳ desenvolver (tecnologias / metodologias / processos) que usem e gerem menor quantidade de materiais, nomeadamente tóxicos e/ou inflamáveis.

Economia Atômica Percentual (EA) = $\frac{\text{massa dos átomos de reagentes incorporados no produto desejado}}{\text{massa total de átomos nos reagentes}} \times 100\%$
 [> EA → ⊕ verde]

Ex: p. 35

EQUILÍBRIO

químico

REAÇÃO

completa

esgotamento de, pelo menos, um dos reagentes.

ex: ácido clorídrico com magnésio

incompleta

no final, existe uma mistura de todos os reagentes e todos os produtos da reação.

irreversível

processa-se num só sentido.

(→)

reversível

produtos da reação reagem entre si

regenerando os reagentes (⇌)

Equilíbrio químico

homogêneo

todos os constituintes estão na mesma fase / estado físico
 [l = aq]

heterogêneo

constituintes estão em fases diferentes

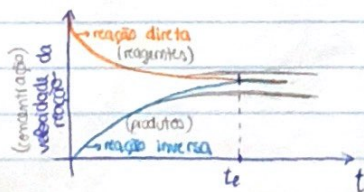
reação direta e inversa continua a processar-se a igual velocidade

diminuem

↳ não acontece nada macroscopicamente

↳ microscopicamente continua a haver reações

concentrações das substâncias mantêm-se constantes



grandeza **constante de equilíbrio** a uma dada temperatura:
 (adimensional)

$$K_c = \frac{[c]_e^c \times [d]_e^d}{[A]_e^a \times [B]_e^b}$$

reação reversível: $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$

(a, b, c, d → coef. estequiom.)

• Nos equilíbrios heterogêneos, só se consideram para o cálculo de K_c os componentes que se encontrem em (g) ou (aq).

Extensão de uma reação:

$K_c \gg 1$ → muito maior quantidade de produtos da reação

extensão da reação direta > extensão da reação inversa

$K_c \ll 1$ → muito maior quantidade de reagentes

extensão da reação direta < extensão da reação inversa

quociente de reação } $Q_c = \frac{[C]^c \times [D]^d}{[A]^a \times [B]^b}$

• $Q_c = K_c$: sistema está em equilíbrio

• $Q_c \neq K_c$

se $Q_c < K_c \rightarrow$ + produtos / - reagentes (evolui no sentido da reação direta)
se $Q_c > K_c \rightarrow$ - produtos / + reagentes (evolui no sentido da reação inversa)

FATORES que alteram o equilíbrio químico

(em sistemas gasosos)
pressão / volume

concentração

temperatura

evolui para um novo estado de equilíbrio → mesma K_c

PRINCÍPIO de Le Châtelier → Se num sistema em equilíbrio se introduzir uma perturbação, o sistema vai reagir no sentido de contrariar essa perturbação e atingir um novo estado de equilíbrio.

CONCENTRAÇÃO

diminuição da concentração de produto / aumento da concentração de reagente
sentido direto

diminuição da concentração de reagente / aumento da concentração de produto
sentido inverso

PRESSÃO / volume (componentes gasosos)

aumento da pressão / diminuição do volume

sentido que origina menor n° de moles de moléculas gasosas

diminuição da pressão / aumento do volume

sentido que origina maior n° de moles de moléculas gasosas

TEMPERATURA

aumento da temperatura → absorção da energia → sentido da reação
 $\Delta H > 0$ ← endotérmica

diminuição da temperatura → retira-se energia → sentido da reação
 $\Delta H < 0$ ← exotérmica

EQ em processos industriais:

* Síntese do amoníaco

↳ > pressão / < temperatura /

/ excesso de N_2 (reagente)

↳ reação direta

↳ catalisador

* Preparação do ácido sulfúrico

↳ combustão do enxofre

↳ oxidação do dióxido de enxofre

↳ reação do trióxido de enxofre em água

⚠ temperaturas / pressões muito baixas / muito elevadas ⇒ muitos custos, reações lentas

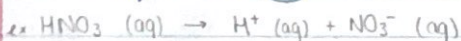
REAÇÕES ácido-base

- são, em geral, pouco solúveis em água;
 - são eletrólitos;
 - têm sabor azedo;
 - avermelham a tintura azul de tornesol;
 - são corrosivos
 - reagem com metais ($\nearrow H$)
 - reagem com o carbonato de cálcio ($\nearrow CO_2$)
 - são, em geral, pouco solúveis em água;
 - são eletrólitos;
 - têm sabor amargo;
 - tornam cor-de-rosa a solução alcoólica de fenoftaleína;
 - são corrosivos
 - são escorregadios ao tato
- alta condutividade térmica

TEORIA de Arrhenius

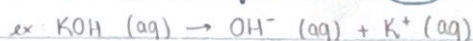
ÁCIDO

- substância que, em solução aquosa, origina iões H^+

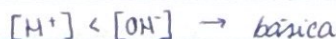


BASE

- substância que contém grupos hidroxila e, em solução aquosa, origina iões OH^-



NUMA SOLUÇÃO AQUOSA:



TEORIA de Brønsted-Lowry

ÁCIDO

- espécie que cede prótons H^+ a uma base
- aumenta a concentração de H_3O^+
($H_2O + H^+ \rightleftharpoons H_3O^+$) não hidrônio ou oxônio

BASE

- espécie que aceita prótons H^+ de um ácido
- aumenta a concentração de OH^-

ESPECIES

anfóteras ou

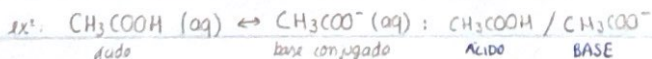
anfóteros ou anfiproticos

espécies químicas que, em certas condições, se comportam como ácidos e, noutras, como bases.

PAR CONJUGADO
ácido-base

um ácido só se comporta como tal na presença de uma base, e vice-versa

duas espécies químicas que diferem num próton (ácido tem próton a mais)



△ água pura = neutra!

AUTOIONIZAÇÃO da água

→ pequena condutividade elétrica



substância anfiprotica

água é neutra, formam-se em simultâneas

produto iônico / constante de ionização da água

reação endotérmica: ↑ T, sentido direto, ↑ Kw (↑ H₃O⁺, OH⁻)

$$K_w = [H_3O^+][OH^-] = K_c [H_2O]^2$$

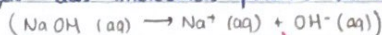
reação pouco extensa

• a 25°C, Kw = 1,00 × 10⁻¹⁴

$$\hookrightarrow [H_3O^+] = [OH^-] = 1,00 \times 10^{-7} \rightarrow \text{neutra}$$

Dissociação → separação dos íons do soluto (iônico)

por ação das moléculas polares do solvente



dissociação

solvatação: união entre íons do soluto e moléculas polares do solvente

íons solvatos
↳ hidratados (se solvente for a água)

• em qualquer solução aquosa:

- [H₃O⁺] = [OH⁻] → neutra

- [H₃O⁺] > [OH⁻] → ácida

- [H₃O⁺] < [OH⁻] → básica

Ionização → formação de íons do soluto a partir das respectivas moléculas polares, por ação do solvente polar



$$\text{fração de ionização} = \frac{n_{\text{ionizados}}}{n_{\text{dissolvidos total inicial}}} (\times 100\%)$$

Quanto maior a percentagem de ionização, mais forte é o ácido.

ÁCIDO FORTE → ionização praticamente completa!!

Constante de acidez

Quanto mais forte for o ácido, maior o valor de K_a e mais extensa é a ionização do ácido.

íons solvatos
↳ hidratados (se solvente for a água)

e de basicidade

Quanto mais forte for a base, maior o valor de K_b e mais extensa é a ionização da base.

ácido monoprótico

so tem um próton para ceder

$$K_a \times K_b = K_w$$

muito fraco

fraco

ÁCIDO

forte

BASE

fraco

muito fraco

pH

$$\begin{cases} pH = -\log [H_3O^+] \\ [H_3O^+] = 10^{-pH} \\ pOH = -\log [OH^-] \\ [OH^-] = 10^{-pOH} \end{cases}$$

→ Quanto mais ácida for a solução, menor o valor de pH.

(*) ver página 105 - 109!

$$pH + pOH = pK_w$$

(a 25°C: pH + pOH = 14)

$$\hookrightarrow K_w = [H_3O^+][OH^-] (= 1 \times 10^{-14} = 10^{-pH} \times 10^{-pOH} (= 10^{-14} = 10^{-pH-pOH} \hookrightarrow pH + pOH = 14$$

SOLUÇÕES AQUOSAS de sais

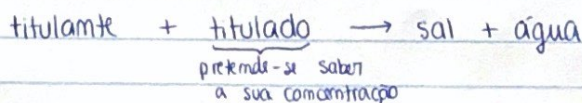
sal

ânion (-)	cation (+)	
comj. de ácido forte	c.d. base forte	Solução neutra
c.d. ácido forte	c.d. base fraca	Solução ácida
c.d. ácido fraco	c.d. base forte	Solução básica
c.d. ácido fraco	c.d. base fraca	$K_a(\text{catão}) = K_b(\text{ânion})$ - solução neutra $K_a(\text{catão}) > K_b(\text{ânion})$ - solução ácida $K_a(\text{catão}) < K_b(\text{ânion})$ - solução básica

Reação de neutralização:



TITULAÇÃO
ácido - base



$\hookrightarrow$ ponto de equivalência:

$n_{\text{base}} = n_{\text{ácido}}$

(base e ácido monopróticos)

$\hookrightarrow$ na variação brusca do pH

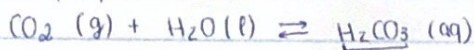
⊗ bom indicadores: zona de viragem contém variação brusca do pH (= ponto de equivalência)

para conjugados não reagem	solução titulada	solução titulante	íões do sal formado	pH (a 25°C)
	ácido forte	base forte	Não reagem com a água.	7 - NEUTRO
	base forte	ácido forte		
	ácido fraco	base forte	O ânion reage com a água.	> 7 - BÁSICO
$\hookrightarrow$ por conjugado pode reagir (ácido)	base fraca	ácido forte	O catião reage com a água.	< 7 - ÁCIDO

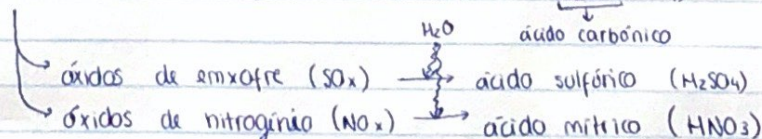
Formação de chuvas ácidas:

$\text{pH} < 5,6$

acidificação das chuvas:



ácido carbônico



Consequências:

- acidificação dos solos e águas subterrâneas e superficiais;
- destruição de florestas;
- problemas respiratórios (peixes e outros);
- corrosão de metais (monumentos).

Soluções: redução da emissão de poluentes atmosféricos (CO_2 ; NO_x ; SO_2) e neutralização de ácidos

SOLUÇÕES

DISSOLUÇÃO: processo espontâneo de dispersão de um soluto num solvente, que conduz à formação de uma solução: soluto(s) + solvente = solução

solubilidade, Δ : valor da concentração da solução saturada

↳ quantidade máxima de soluto que se pode dissolver em 100g de solvente, a dada temperatura

$$\Delta = \frac{m_{\text{soluto}}}{m_{\text{solvente}}} \times 100\%$$

$$\Delta = \frac{m_{\text{soluto}}}{V_{\text{solução/solvente}}} \quad \text{e} \quad \Delta = \frac{m}{V}$$

(mol/dm³)
ou
g/dm³

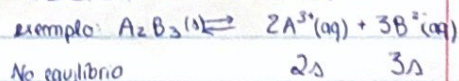
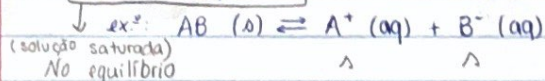
Solução $\left\{ \begin{array}{l} \text{saturada} \\ \text{não saturada} \\ \text{sobressaturada} \end{array} \right.$

* A temperatura pode influenciar a solubilidade. *

NOTA: solúveis em água → todos os sais de Na⁺, K⁺ e NH₄⁺, todos os nitratos, cloretos, brometos e iodetos

↳ exceções: AgX, Hg₂X₂, PbX₂ (X = Cl⁻, Br⁻ ou I⁻)

Tal como em todos os casos, também os sais se dissolvem totalmente, atingindo o equilíbrio químico. Nestes casos, considera-se a equação de dissociação



$$K_s = [A^+]^x [B^-]^y = \Delta^2 \text{ (ex)} \quad K_s = \Delta$$

$$K_s = (2\Delta)^2 \times (3\Delta)^3 = 108\Delta^5$$

produto de solubilidade

Nem sempre quando o $K_s > \Delta$ o sal é mais solúvel. As combinações têm de ser iguais.

Formação de precipitados

- $Q_s < K_s \Rightarrow$ não há formação de precipitado (sol. não sat.)
 - $Q_s = K_s \Rightarrow$ solução está saturada
 - $Q_s > K_s \Rightarrow$ há formação do precipitado
- sentido direto
sentido inverso

* ver p 169 para exercício

ALTERAÇÃO DA SOLUBILIDADE DE SAIS

PRINCÍPIO DE LE CHÂTELIER

• Temperatura

Solubilização

exotérmica
endotérmica

$\Delta > T$
solubilidade diminui (s sat)
solubilidade aumenta (s dr)

$\Delta < T$
solubilidade aumenta (s dr)
solubilidade diminui (s sat)

diminui temperatura dos produtos → energia que a água ganha

• Concentração

↳ Efeito da íon comum (aumento da C de um íon)

→ sentido inverso → solubilidade diminui

↳ Efeito da adição de ácidos (diminui a C do anião)

→ sentido direto → solubilidade aumenta

↳ Efeito da formação de íons complexos (diminui C de íons)

DUREZA DE UMA ÁGUA: concentração de cátions metálicos (Ca^{2+} e Mg^{2+})

→ pode ser: macia (< 75), medianamente dura ($75-150$), dura ($150-300$) ou muito dura (> 300)

minimização:

- adição de agentes precipitantes
- adição de agentes complexantes
- utilização de resinas de troca iônica

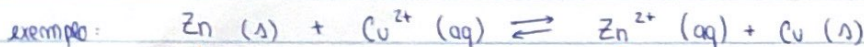
remoção de poluentes de águas:

condições para que os íons dos elementos prejudiciais presentes na água formem compostos insolúveis através de reações de precipitação.

REAÇÕES DE Oxidação-redução ou "REDOX"

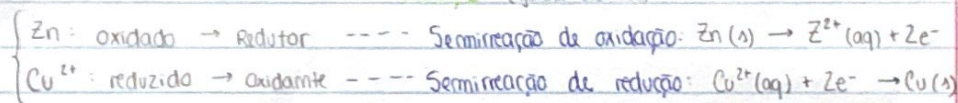
ocorrem por transferência de elétrons

- ser oxidado: perder elétrons ("dá/cede") $\Rightarrow$ REDUTOR
- ser reduzido: ganhar elétrons ("recebe") $\Rightarrow$ OXIDANTE



OXIDAÇÃO (perde elétrons)

REDUÇÃO (ganha elétrons)



Números de oxidação: estado de oxidação de um elemento, i.e., a carga que tem em relação ao átomo neutro

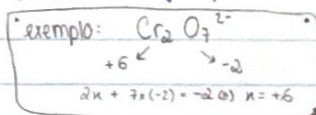
1-) Elementos do grupo 1 (TP) $\Rightarrow$ m.o. = +1

2-) Elementos do grupo 2 (TP) $\Rightarrow$ m.o. = +2

3-) m.o. (H) = +1 $\rightarrow$ exceto nos hidretos: m.o. (H) = -1 (ex: NaH)

4-) m.o. (O) = -2 $\rightarrow$ exceto nos peróxidos (m.o. = -1) e no fluoreto de oxigênio (m.o. = +2)

5-) m.o. (F) = -1

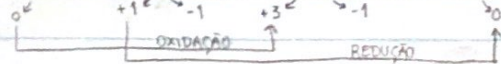
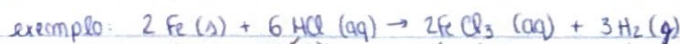


1-) Substância elementar / estado livre $\Rightarrow$ m.o. = 0

2-) Íon monoatômico $\Rightarrow$ m.o. = respectiva carga (ex: m.o. (Mg^{2+}) = +2)

3-) Soma dos m.o. dos átomos numa molécula = 0

4-) Íon poli-atômico $\Rightarrow$ soma dos m.o. = carga do íon (ex: m.o. (O_2^{2-}) = $\frac{-2}{2} = -1$)



$\Delta \text{m.o. (Fe)} = 3 - 0 = 3 \rightarrow \text{m.o. aumenta: OXIDAÇÃO}$
 $\Delta \text{m.o. (H)} = 0 - 1 = -1 \rightarrow \text{m.o. diminui: REDUÇÃO}$

IDENTIFICAÇÃO DE REAÇÕES REDOX

- átomo oxid-se $\Rightarrow$ n.o. aumenta
- átomo reduz-se $\Rightarrow$ n.o. diminui

FORÇA RELATIVA DE OXIDANTES E REDUTORES

↳ Pares de oxidação-redução (Pares redox): $\begin{array}{c|c} \text{oxidado} & \text{reduzido} \\ \text{redutor} & \text{oxidante} \end{array}$ ($\text{Zn}^{2+} / \text{Zn}$)

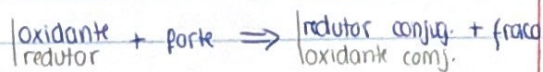
± Poder redutor: cede elétrons ± facilmente

± Poder oxidante: recebe elétrons ± facilmente

COMPARAÇÃO dos "PODERES":

↳ com o mesmo oxidante,

↳ mas mesmas condições.



Série eletroquímica: permite prever se ocorre uma reação de oxidação-redução.

↳ um agente oxidante pode oxidar um agente redutor com menor poder oxidante

↳ um agente redutor pode reduzir um agente oxidante com menor poder redutor