

Átomos, Moléculas e Estequiometria

Química Geral Teórica

Prof. Guilherme Duarte, Ph. D.

1 Tipos de materiais

A palavra material é usada para se referir a qualquer tipo de matéria, seja ela homogênea ou heterogênea. Um material homogêneo possui as mesmas propriedades ao longo de sua extensão, enquanto materiais heterogêneos possuem partes com propriedades distintas. A água líquida é um material homogêneo, por exemplo, enquanto um bloco de granito é heterogêneo, pois possui três constituintes distintos, o quartzo, o feldspato e a mica. Alguns materiais são heterogêneos mas só podem ser identificados como tal mediante inspeção em microscópio, como o leite e o sangue. Materiais heterogêneos são sempre classificados como tipos de mistura; materiais homogêneos podem ser inteiramente substâncias puras ou misturas homogêneas.

Ao isolar os constituintes desses materiais encontramos **substâncias**. Químicos definem substâncias como uma espécie homogênea de matéria com uma composição razoavelmente definida. São substâncias a água pura, o sal puro, o açúcar puro, ferro puro etc. Uma substância pura é quimicamente caracterizada por um **ponto de fusão** e um **ponto de ebulição** definido. Misturas, por sua vez, possuem **faixas de fusão e ebulição** devido à mistura de diversos componentes.

Por composição definida, quer-se dizer que a unidade mínima identificável como característica de uma substância possui proporções constantes de elementos. Por exemplo, a água é uma substância cuja molécula, a sua unidade mínima identificável, contém dois elementos, oxigênio e água. A água é chamada de **substância composta** por conter em si dois tipos distintos de elementos. O gás oxigênio, por sua vez, é formado por pequenas unidades feitas apenas do elemento oxigênio, sendo uma **substância simples**. Materiais cristalinos são identificados pela composição da sua célula (ou cela) unitária, isto é, a menor estrutura que pode descrever um cristal.

Átomos são as unidades básicas de um elemento químico, podendo se combinar para formar substâncias diferentes. A água, por exemplo, é uma substância formada por unidades chamadas moléculas de água, cuja estrutura contém dois átomos de hidrogênio e um átomo de oxigênio. Disso se deriva a representação da **fórmula molecular**, H_2O (Figura 1).



Figura 1: Uma molécula de água.

2 O modelo atômico de Dalton

Apesar de variar bastante em suas propriedades, os materiais são compostos por combinações de cerca de 100 tipos diferentes de átomos. À medida que químicos aprenderam a medir as quantidades de elementos que reagem entre si para formar novas substâncias, foi criado o ambiente propício para a discussão da existência de átomos. John Dalton (1766-1844), propôs quatro postulados:

1. Cada elemento é formado de partículas extremamente pequenas denominadas átomos.
2. Todos os átomos de um elemento são idênticos, mas os átomos de um elemento são diferentes dos átomos de todos os demais elementos.
3. Átomos de um elemento não podem ser transformados em átomos de um elemento diferente por meio de reações químicas; átomos não são criados e nem destruídos em uma reação química.
4. Compostos são formados quando átomos de um ou mais elementos se combinam. Um dado composto sempre tem o mesmo número relativo de tipos de átomos.

Por meio desses quatro postulados, Dalton conseguiu explicar a lei da composição constante (“em um determinado composto, os números relativos e os tipos de átomos são constantes”) e a lei de conservação das massas (“a massa total dos materiais presentes depois de uma reação química é a mesma da massa total presente antes da reação”), além de deduzir a lei das proporções múltiplas:

Lei das proporções múltiplas: Se dois elementos A e B se combinam para formar mais de um composto, as massas de B que podem se combinar com uma dada massa de A estão na razão de pequenos números inteiros

Por exemplo, ao formar água, 8.0 g de oxigênio se combina com 1.0 g de hidrogênio. O peróxido de hidrogênio, por sua vez, exige 16.0 g de oxigênio para cada 1.0 g de hidrogênio. Usando o raciocínio empregado por Dalton, é fácil concluir que o peróxido de hidrogênio contém duas vezes mais oxigênio do que a água.

3 Introdução à estrutura atômica

O átomo de Dalton, apesar de suficiente para explicar fenômenos envolvendo a massa dos compostos em um processo químico, não conseguia explicar os fenômenos de natureza elétrica e nem a radioatividade descobertos no século XIX. Dois foram os modelos que buscaram explicar a estrutura interna do átomo: J. J. Thomson sugeriu o chamado modelo do pudim de ameixas (“*plum pudding model*”) em que partículas carregadas negativamente, os elétrons, estão suspensas em um meio positivamente carregado. Ernest Rutherford e seu aluno Ernest Marsden provaram, entretanto, que o átomo não podia ser conforme Thomson havia predito. Sob a orientação de Rutherford, Marsden montou um aparato (Figura 2 em que uma fonte de partículas alfa, que possuem carga positiva, bombardeava uma folha de ouro fina, de alguns átomos de espessura. Se o modelo de Thomson estivesse correto,

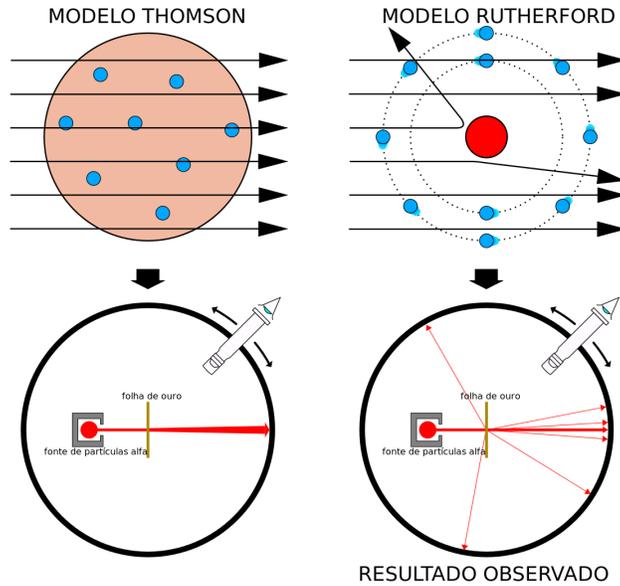


Figura 2: Experimento de Marsden e modelos atômicos de Thomson e de Rutherford.

as partículas alfa atravessariam a folha devido à natureza do meio em que os elétrons supostamente estariam mergulhados. O que Marsden e Rutherford observaram foi um resultado característico de espalhamento de partículas. Boa parte das partículas atravessaram a folha, mas foram observados muitos sinais de espalhamento em ângulos não explicáveis pelo modelo de Thomson: houve ângulos de espalhamento sinalizando o retorno das partículas alfa em direção à sua fonte. Rutherford explicou os resultados ao propor o modelo nuclear do átomo, que seria formado por um núcleo denso e positivo rodeado por elétrons orbitantes. O modelo de Rutherford é a base do entendimento contemporâneo da natureza dos átomos.

Experimentos subsequentes mostraram que o núcleo atômico é formado por prótons, partículas carregadas positivamente, e nêutrons, partículas neutras. Um átomo neutro possui um número idêntico de prótons e de elétrons e a identidade química do elemento é definida pelo número de prótons no núcleo, o chamado **número atômico** (Z). A carga total de um núcleo é igual a:

$$q_{\text{núcleo}} = +Ze, \quad (1)$$

onde e é chamada de carga elementar. A carga de um elétron é igual a $-e$. Se somarmos o número de prótons (Z) e o número de nêutrons (N) de um átomo, temos o **número de massa** (A) de um átomo:

$$A = Z + N \quad (2)$$

O número de nêutrons pode variar dentro de um mesmo elemento químico. Por exemplo, o hidrogênio é encontrado em três formas, prótio, deutério e trítio, que, apesar de terem o mesmo número atômico ($Z = 1$), possuem números de massa distintos ($A_{\text{prótio}} = 1$, $A_{\text{deutério}} = 2$, $A_{\text{trítio}} = 3$). Átomos de um mesmo elemento com números de massa distintos são chamados de *isótopos*. Diferenciamos isótopos diferentes por meio da notação:

$${}^A_Z X \quad \text{ou} \quad {}^A X, \quad (3)$$

onde X é o elemento em questão. Observe que incluir o número atômico é desnecessário se o elemento X for identificado.

Cuidado! O número de massa não necessariamente é igual à massa atômica presente em uma tabela periódica. Considere a entrada para o átomo de hélio (He) na tabela periódica (Figura 3). Observe que a massa atômica é diferente do número de massa. Isso ocorre porque o número de massa apenas expressa a quantidade de prótons e nêutrons no núcleo. A massa, expressa em unidades atômicas (u.a.) ou em daltons (Da), apesar de numericamente próxima, não é igual a A porque as massas dos prótons e nêutrons não são perfeitamente iguais à unidade ($m_{p^+} = 1.0073$ u.a. e $m_{n^0} = 1.0087$ u.a.) e também porque a existência de isótopos diferentes faz com que a massa atômica seja uma média ponderada das massas de cada isótopo.

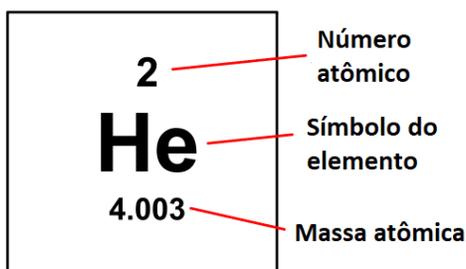


Figura 3: Informações sobre o átomo de hélio retirados da tabela periódica.

4 Uma equação química deve ser balanceada

Como demonstrado por Dalton, moléculas são formadas por combinações de átomos. Chamamos de **fórmula molecular** a representação unidimensional de uma molécula da qual conseguimos extrair informação sobre a composição do sistema. Por exemplo, a água é representada por H_2O porque, em sua composição, para cada átomo de oxigênio, há dois átomos de hidrogênio. Sílica, o principal componente do vidro, tem fórmula molecular SiO_2 e, de forma análoga, possui dois átomos de oxigênio para cada átomo de silício. A formação dessas moléculas pode ser representada por **equações químicas**:



Do lado esquerdo da equação, antes da seta, estão os reagentes, isto é, as moléculas que reagirão entre si para formar algo. Do lado direito, são colocados os produtos. No caso da Equação 4, somente há dois reagentes e dois produtos, mas o número de componentes de uma equação química pode ser variado. Uma análise criteriosa da Equação 4 causa uma certa estranheza, pois aparenta indicar que uma dada quantidade de H_2 reage com uma mesma quantidade de O_2 para formar a mesma quantia de água. Usando a **lei da composição constante**, verificamos algo estranho:

- (i) Uma quantidade-padrão de água contém duas quantidades-padrão de hidrogênio e uma de oxigênio ($1 \text{H}_2\text{O} \equiv \text{H} + \text{O} + \text{H}$).
- (ii) Uma quantidade-padrão de hidrogênio contém duas quantidades-padrão de hidrogênio ($1 \text{H}_2 \equiv \text{H} + \text{H}$).

- (iii) Uma quantidade-padrão de oxigênio contém duas quantidade-padrão de oxigênio ($1 \text{ O}_2 \equiv \text{O} + \text{O}$)

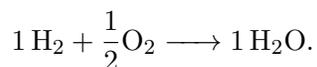
Se considerarmos a Equação 4 com as quantidades lá presente, fica sobrando oxigênio. Para deixar a equação química representativa da reação que descreve, devemos **balanceá-la**. A princípio, o processo pode parecer complicado, mas com o tempo, é possível fazê-lo sem muito esforço. Aqui algumas dicas para efetuar o **balanceamento da equação**:

1. A quantidade de átomos de um elemento no lado dos reagentes deve ser igual a quantidade de átomos desse elemento no lado dos produtos.
2. Comece o processo de balanceamento pelo elemento que somente se encontra em um componente nos produtos ou nos reagentes. Assim é possível definir o **coeficiente**, isto é, a quantidade desse componente e dar início ao balanceamento.
3. Tendo definido o primeiro coeficiente, é possível deduzir as quantidades das demais espécies por meio da conservação do número de átomos ao longo de um processo químico.

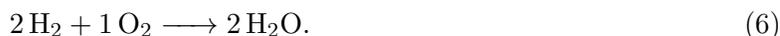
A equação química de formação da água é relativamente simples de se balancear. A cada quantidade de água contém 2 partes de átomos de hidrogênio, assim, se o coeficiente da água for 1, o coeficiente do H_2 também deve ser 1.



Observe na Equação 5 que falta somente determinar o coeficiente a que define a quantidade de partes de átomos de oxigênio usados. Como a molécula de água somente tem 1 átomo de oxigênio e a molécula do gás oxigênio contém dois átomos do elemento, então, para preservar o número de átomos em ambos lados da equação química, a deve ser $1/2$:



É bastante comum representar equações químicas de forma que todos os coeficientes sejam inteiros, logo:



Observe que, do lado esquerdo da Equação 6, temos 4 átomos de hidrogênio e 2 átomos de oxigênio, o que é replicado do lado esquerdo da equação. Vamos trabalhar um exemplo um pouco mais complicado:



A Equação 7 representa a combustão do octano, um dos componentes da gasolina. Esse problema pode ser pela forma chamada “tentativa e erro” (eu prefiro chamá-la de forma intuitiva), pela qual balanceamos a equação da formação da água:

Tentativa e erro: Primeiramente observamos os dois lados da equação e escolhemos um elemento que esteja unicamente em um dos componentes. Na Equação 7, temos duas opções: (i) podemos escolher o carbono, que nos reagentes está presente apenas no C_8H_{18} e nos produtos, apenas no CO_2 . (ii) podemos escolher o hidrogênio, que nos reagentes está presente apenas no C_8H_{18} e nos

produtos, apenas na água (H_2O). Por conveniência, escolheremos iniciar balanceando os átomos de carbono.

Cada molécula de C_8H_{18} contém 8C, logo cada quantidade-padrão de C_8H_{18} gerará 8 quantidades-padrão de CO_2 :



Cada molécula de C_8H_{18} contém 18H, logo, como cada molécula de H_2O tem 2H:



Já temos a Equação 7 quase completamente balanceada.



Falta determinar o número de moléculas de oxigênio, o que é mais fácil já que sabemos completamente o número de átomos no lado dos produtos. O número total de átomos de oxigênio no lado dos produtos é igual a $8 \times 2 + 9 \times 1 = 25$, uma vez que cada CO_2 contém dois átomos de oxigênio e cada H_2O . Como cada molécula de oxigênio contém dois átomos, então $b = 25/2$. Tornando números inteiros todos os coeficientes, temos que:



5 Exercícios de Fixação

1. O que diferencia uma substância simples de uma substância composta?
2. Preencha as lacunas
 - (i) Isótopos possuem o mesmo _____.
 - (ii) Os números de prótons, nêutrons e elétrons no átomo neutro de $^{199}_{80}\text{Hg}$ são _____.
3. Uma massa conhecida de calcário (CaCO_3) foi aquecida, produzindo cal (CaO). A massa medida do produto foi menor que a do reagente. Houve violação da lei da conservação das massas?
4. Balanceie as equações químicas abaixo:
 - (i) $\text{H}_3\text{PO}_4 + \text{Mg}(\text{OH})_2 \longrightarrow \text{Mg}_3(\text{PO}_4)_2 + \text{H}_2\text{O}$
 - (ii) $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
 - (iii) $\text{C} + \text{SO}_2 \longrightarrow \text{CS}_2 + \text{CO}$
 - (iv) $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 + \text{SiO}_2 + \text{C} \longrightarrow \text{CaSiO}_3 + \text{CO} + \text{P}$