



Reações Químicas

Reinaldo Calixto de Campos

Este documento tem nível de compartilhamento de acordo com a licença 3.0 do [Creative Commons](http://creativecommons.org).



Reações Químicas

As reações químicas são processos pelos quais um tipo de matéria se transforma em outro. Algumas reações são evidentes, uma vez que, claramente, após o processo, as propriedades das substâncias obtidas são nitidamente diferentes das propriedades das substâncias de partida. Vários são os indicativos da ocorrência de uma reação química: mudanças de cor, emissão de luz, absorção ou liberação de calor, liberação de gases ou formação de sólidos onde antes não havia etc. Pode-se dizer que a tentativa de entender, explicar e controlar as reações químicas é o principal objeto da Química e, na verdade, bem antes mesmo da existência da Química, o Homem tentava entender essas transformações. Hoje, ao contrário dos antigos, temos à disposição a teoria atômica, uma teoria poderosa, que explica a estrutura da matéria. Será, pois, baseados nela, que vamos discutir por que e como ocorrem as reações químicas.

1) Como compreendemos hoje uma reação química: uma visão molecular.

1.1) Entendendo a matéria (e aproveitando para entender as leis ponderais e a estequiometria)

Como compreendemos hoje uma reação química? Bem, muita coisa mudou desde o tempo das primeiras idéias (água, terra, fogo e ar) de Aristóteles ([384 a.C.-322 a.C.](#)) sobre as transformações da matéria e, nessa caminhada, foram muitas as observações e reflexões que nos levaram à visão que temos hoje. Foi uma construção passo a passo, com idas e vindas, um longo processo de descobertas, que lentamente se articularam, com a contribuição de pessoas de diferentes épocas. Como as reações químicas referem-se às transformações da matéria, a primeira coisa a elucidar é como, nos dias de hoje, entendemos a matéria. Talvez a frase mais simples e direta seja: a matéria é formada por átomos! Esta é uma afirmação tão importante para a ciência, que um grande físico do século XX, prêmio Nobel de Física em 1965, chamado Richard Feynman (1918-1988), afirmou que se tivéssemos que deixar, após uma hecatombe nuclear, uma única frase para que as gerações posteriores pudessem retomar a civilização, esta frase deveria ser "a matéria é formada por átomos".

É bem verdade que filósofos gregos também já haviam formulado uma hipótese atômica, sendo os mais representativos desta visão Leucipo (~ 500 a. C.), Demócrito (460 a.C.-370 a.C.) e Epicuro (341 a.C.-[271 a.C.](#)). De acordo com estes filósofos, a matéria seria formada por átomos minúsculos (e por isso, invisíveis), providos de constante movimento, e irreduzíveis, ou seja, seriam a menor porção característica da matéria. Os átomos seriam indestrutíveis e sempre deveriam haver existido, implicando em um Universo não criado. Eles seriam responsáveis pelas propriedades observadas nos corpos que formavam, por causa das suas diferentes formas, arranjos ou posição. Os átomos seriam infinitos em

número e dispersos no vácuo. Seu constante movimento levaria a choques, que poderiam implicar na combinação dos átomos, formando corpos compostos, embora a identidade dos átomos fosse mantida. Veja que, em vários aspectos, esta formulação é bastante próxima da atual. Porém, havia uma outra visão concorrente, aquela defendida por Aristóteles e seus discípulos, que acreditava que a matéria era formada por 4 elementos básicos (água, terra, fogo e ar) e quatro qualidades (quente, frio, seco e úmido).

As idéias dos filósofos gregos difundiram-se pela Antiguidade, principalmente nas terras que foram suas colônias. Posteriormente, a Grécia Antiga foi dominada por Roma, mas a sua cultura era tão forte que os romanos terminaram por assimilá-la, de modo que o pensamento e as escolas de filosofia grega sobreviveram ao longo do Império Romano. Só quando o Cristianismo se tornou a religião oficial de Roma, já quase no fim do Império, é que a filosofia grega foi banida e suas escolas fechadas, após terem existido por cerca de 1000 anos. Porém, muito do conhecimento grego foi herdado e expandido pelos árabes, e terminou, por eles, voltando ao mundo ocidental. Assim, quando no Ocidente, mais exatamente na Europa, as condições voltaram a ser mais propícias para o renascimento da Filosofia, lá estavam, novamente disponíveis, as idéias gregas. E, no que diz respeito a teorias sobre a matéria, tanto as idéias atomísticas, como as concepções de Aristóteles. Naquele momento (vamos dizer, lá pelo ano 1200) terminaram prevalecendo as idéias de Aristóteles, por uma série de motivos: elas pareciam mais evidentes ao senso comum, e também pareciam se coadunar melhor com as Escrituras, já que havia uma grande influência da religião nesta filosofia que retomava o seu impulso. Não se deve menosprezar o poder explicativo das idéias de Aristóteles, e também por isso, elas foram bem aceitas. Assim, por esses e outros motivos foram elas que sobreviveram ao longo da Idade Média até o início dos tempos modernos.

Com base na visão de Aristóteles, alquimistas islâmicos e europeus desenvolveram seus “programas de pesquisa”, sendo a transmutação (chumbo em ouro, por exemplo) um deles: afinal, a teoria dos quatro elementos e das quatro qualidades fornecia a base teórica de que tal era possível. Foram necessários muitos anos, muitos experimentos, muitas frustrações, ao longo de mais de mil anos, para que outra visão da estrutura da matéria evoluísse, e a visão Aristotélica fosse finalmente abandonada. Mas essa é outra história, e vamos ter que dar agora um grande salto no tempo para encontrar com John Dalton ([1766-1844](#)), no início do século XIX. Dalton foi o primeiro moderno a formular a hipótese atômica, em 1805. Ele postulou que a matéria era formada por átomos minúsculos, invisíveis, indestrutíveis, indivisíveis e iguais em massa para cada elemento. Mais ainda: as reações químicas envolviam a combinação ou separação destes átomos. Esses postulados não foram à toa. Na verdade, sua teoria procurava explicar alguns fatos observados e, se aceita, conseguiria realmente explicá-los bem. Um destes fatos era a lei da conservação da massa, descoberta por Lavoisier ([1743-1794](#)): a matéria poderia se transformar à vontade, de um tipo em outro, mas, se você não deixar nada “escapar” do sistema, a sua massa permanece a mesma antes e depois destas transformações. Esta afirmação pode ser

comprovada utilizando-se um instrumento bem simples: dois tubos ligados entre si, formando um “H”, aberto no topo de cada uma das pernas do H, conforme mostrado na Figura 1.

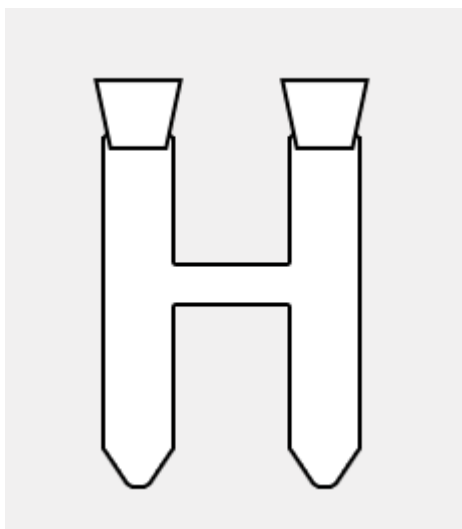


Figura 1: Tubo em forma de “H”, para verificar a lei da conservação da massa.

Deste modo, pode-se, com cuidado, colocar uma substância de um lado e outra substância do outro, sem que elas entrem imediatamente em contato (usualmente estas substâncias estão em solução). Tapando as entradas após a introdução das soluções e agitando o “H”, as soluções podem agora entrar em contato, permitindo que as reações ocorram, sem que haja perda de nada (o sistema está fechado). Bem, quaisquer que sejam as soluções, e quaisquer que sejam os produtos formados (sólidos, líquidos, ou gasosos), a massa do sistema (o tubo H, suas tampas, mais as substâncias lá colocadas) é sempre a mesma, antes ou depois da reação (sugestão: filmar o experimento, usando soluções de nitrato de chumbo e iodeto de potássio). Esta é a lei da conservação da massa. Uma das suposições de Dalton era que as transformações (reações químicas) observadas podiam ser explicadas admitindo-se que a matéria é formada por átomos, e que nas reações químicas ocorriam combinações ou “descombinações” desses átomos. A conservação da massa dever-se-ia ao fato de que tais átomos eram indestrutíveis. Ou seja, nas reações químicas o arranjo de átomos mudava, formando novas substâncias, mas a massa era mantida constante pelo fato dos átomos serem indestrutíveis! Sendo eles indestrutíveis e estando o sistema fechado (isto é, não entrando nem saindo átomos) a massa do sistema só poderia continuar a mesma.

Outra regularidade que se observa quando a matéria se transforma de um tipo em outro (isto é, nas reações químicas), é que há uma proporção constante nas massas que reagem entre si. Isto é até intuitivo: digamos que estamos fazendo um bolo e a receita diz: "para cada quilo de farinha, coloque 6 ovos". Vamos ao armário, mas só temos meio quilo de farinha. Logicamente, vamos usar só três ovos. Claro, vamos obter menos bolo no final, mas vai ser, mais ou menos, o mesmo bolo, com o mesmo sabor. E, se os convidados são muitos, precisamos de mais bolo, usaremos 2 quilos de farinha e... 12 ovos! Veja a proporção, nos três casos, entre o número de ovos e a massa de farinha é sempre a mesma: 6/1 (na receita), 3/0,5 e 12/2; isto é, igual a 6 em todos os casos. Nas reações químicas acontece algo semelhante. Por exemplo, no tempo de Lavoisier e Dalton, um produto importante na indústria química da época era a cal, obtida pelo aquecimento do carbonato de cálcio, que era encontrado em vários lugares:



Observava-se que, para cada cerca de 100 Kg de carbonato de cálcio, obtinham-se cerca de 56 Kg de cal. Se era para se obter o dobro de cal, tinha que ter o dobro de carbonato de cálcio. Quase sempre os valores exatos dessas proporções não eram muito claros, sendo que 100 Kg de carbonatos vindo de diferentes lugares podiam gerar um pouco mais ou um pouco menos de cal. Hoje sabemos que isso se deve ao fato de diferentes fontes de carbonato de cálcio apresentarem diferentes graus de pureza e que, para que essas proporções sejam exatamente conhecidas, é necessário que as substâncias envolvidas sejam puras. Uma situação parecida se dava na produção da pólvora e de tantas outras coisas que envolviam misturar certos produtos para se obter outros. Porém, pouco a pouco, foi ficando claro que estas proporções eram mesmo constantes, dependendo de quão puros fossem os reagentes usados. Bem...como Dalton explicou estas proporções constantes? Admitindo, como já vimos, que a matéria era formada por átomos, indestrutíveis, indivisíveis, e que, nas reações químicas, os átomos se combinavam ou "descombinavam". Mas, mais que isso, admitiu que átomos de um mesmo elemento tinham todos a mesma massa, ou seja, os átomos que formavam um elemento "X" tinham todos a mesma massa, m_x . Para tentar explicar melhor, vamos escolher uma reação química relativamente simples, aquela entre o zinco e o enxofre, formando um produto que vamos chamar aqui de blenda. Moendo com cuidado o zinco e o enxofre, de modo que eles fiquem na forma de pó, misturando-os e aquecendo-os com cuidado, forma-se a blenda, um pó branco (conseguem-se resultados melhores na ausência do oxigênio). Nosso primeiro objetivo é saber o quanto destes reagentes (zinco e enxofre) precisamos misturar para que não sobre nem zinco nem enxofre ao fim da reação. Para isso, vamos misturar uma mesma massa de zinco com massas crescentes de enxofre e fazer reagir. Vamos dizer que começamos misturando 10 gramas de zinco com 10 g de enxofre. Fazendo a reação com todo o cuidado, vamos verificar que todo o zinco será consumido e que 4,89 g de enxofre também serão

consumidos, formando-se 14,89 g de blenda e sobrando $10 - 4,89 = 5,11$ g de enxofre. Se dobrarmos a massa de zinco, será consumido o dobro da massa de enxofre e formado o dobro de blenda. Repetindo experimentos semelhantes, teríamos resultados como os mostrados na Tabela 1:

1	2	3	4	5	6	7
Massa inicial de zinco (g)	Massa inicial de enxofre (g)	Massa de blenda formada (g)	Massa de enxofre que sobrou (g)	Massa de zinco que sobrou (g)	Massa de zinco consumida (g)	Massa de enxofre consumida (g)
10	10	14,89	5,11	-	10	4,89
20	10	29,78	0,22	-	20	9,78
30	10	30,45	-	9,55	20,45	10
40	10	30,45	-	19,55	20,45	10

Tabela 1: Resultados observados na reação de massas crescentes de zinco com uma mesma massa de enxofre.

O que podemos tirar dessa tabela? Várias coisas. Por exemplo, vemos que aumentando apenas a massa de um dos reagentes (o zinco), mas mantendo a do outro sempre a mesma (isto é, constante), a quantidade de produto formado (coluna 3) aumenta até certo ponto, mas depois não aumenta mais. Ou seja, se quisermos aumentar a massa do produto a partir daí, teremos que aumentar a massa do outro reagente também. Outra coisa muito interessante pode ser vista ao longo de qualquer uma das linhas da tabela: a soma das massas antes (colunas 1 e 2) e depois (colunas 3, 4 e 5) da reação sempre se igualam. Ou seja, vemos aí a lei da conservação das massas. Outra coisa interessante é que a razão entre as massas efetivamente consumidas na reação (colunas 6 e 7) é sempre a mesma, no caso, massa de zinco/massa de enxofre é igual a 2,045. Colocando em termos de fórmulas, $m_{\text{zinco}}/m_{\text{enxofre}} = 2,045$. Isto significa que, se tivéssemos 50 g de zinco e quiséssemos saber a massa de enxofre que iria reagir por completo com esta massa de zinco, teríamos $50/m_{\text{enxofre}} = 2,045$, ou seja, $m_{\text{enxofre}} = 24,45$ g. É exatamente o que ocorre.

Como estes resultados nos induzem a acreditar na existência de átomos? Porque podemos explicá-los admitindo os átomos tal como descritos por Dalton. Senão, vejamos: vamos analisar apenas a primeira linha da nossa tabela. A observação de que a massa antes e depois das reações é a mesma [$(m_1 + m_2) = (m_3 + m_4 + m_5)$] pode ser explicada pela admissão de que os átomos são indestrutíveis. Bem, isso é fácil, e até já vimos. Mas, por que a razão entre as massas que reagem completamente entre si formam uma razão (2,045) constante? Vamos lá. Você lembra que Dalton sugeriu que, além dos átomos serem indestrutíveis, eram indivisíveis, e que os átomos de um mesmo elemento eram todos iguais entre si, inclusive tendo a mesma massa. Ademais, uma reação química dava-se pela combinação de átomos, formando novas unidades combinadas. Então, vamos considerar que, em 10 g de zinco temos n átomos de zinco, cada um com uma massa M_{Zinco} . A massa de enxofre necessária para reagir completamente com 10 g de zinco é de 4,89 g (linha 1, coluna 7). Se admitirmos que 1 átomo de zinco junta-se com 1 átomo de enxofre para formar o novo composto, a blenda, então, o número de átomos em 10 g de Zn é igual ao número de átomos em 4,89 g de enxofre. Ou seja, em 10 g de zinco temos n átomos de zinco e em 4,89 g de enxofre também temos n átomos de enxofre! Podemos dizer que a massa total de zinco é o número total de átomos de zinco (n) x a massa de 1 átomo de zinco, ou seja, $10 \text{ g} = n \times M_{\text{Zinco}}$. Igualmente, para o enxofre, $4,89 \text{ g}$ (massa de enxofre que reage) = $n \times M_{\text{enxofre}}$, onde M_{enxofre} é igual a massa de 1 átomo de enxofre. A razão entre as massas que reagem totalmente é $10/4,89$, que é igual a $n \times M_{\text{Zinco}} / n \times M_{\text{enxofre}}$; cortando o n no numerador e denominador, teremos $10/4,89 = M_{\text{Zinco}} / M_{\text{enxofre}} = 2,045$. Isto quer dizer que a razão entre as massas que reagem por completo, sem deixar "sobras", é a própria razão entre as massas dos átomos individuais (ou, de outra forma, poderíamos dizer que um átomo de zinco pesa 2,045 vezes mais que 1 átomo de enxofre).

Veja como isso tudo se encaixa na suposição de Dalton de que as massas de todos os átomos de um mesmo elemento eram iguais entre si, e diferente da de outro elemento! Veja também que o raciocínio desenvolvido só pode funcionar se os átomos forem indivisíveis, e se as reações químicas realmente ocorrerem por combinação entre átomos. Bem, no caso, tivemos que admitir que os átomos se combinassem 1 a 1. Mas esta também foi uma proposição de Dalton, de que as combinações se davam em proporções simples.

A Figura 2 procura sintetizar nosso raciocínio:

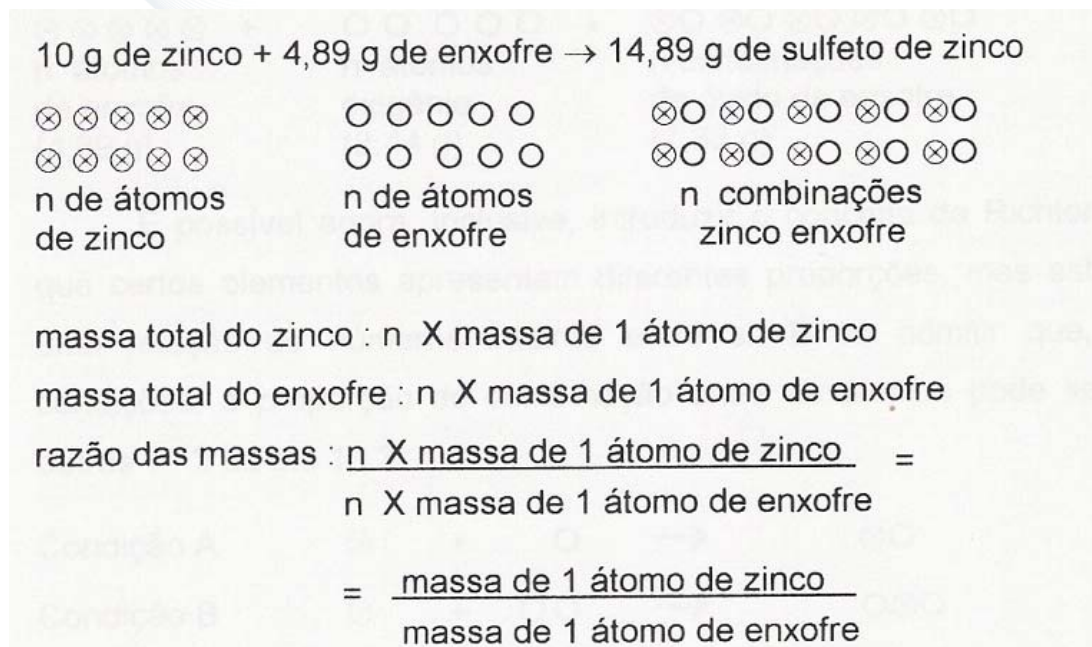
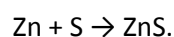


Figura 2: Esquema explicativo da relação entre a lei das proporções constantes e a teoria atômica de Dalton.

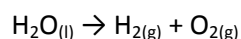
Tal como fizemos aqui, Dalton também representou os átomos de diferentes elementos com diferentes tipos de “bolinhas”, como se vê na. Entretanto, esta representação é bastante trabalhosa, e haja imaginação para inventar bolinhas.

Mas, para nossa alegria, um químico sueco, chamado Berzelius (1779-1848), sugeriu uma notação que usamos hoje, baseada nas iniciais dos nomes dos elementos. O zinco, por exemplo, passou a ser simbolizado como Zn, o enxofre (do latim sulphur), passou a ser simbolizado como S. Portanto, a representação da reação que discutimos acima passa a ser

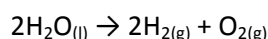


E, se quisermos dar mais informações ainda, podemos indicar o estado físico das substâncias em questão, por meio dos índices (s), (l) e (g), para sólido, líquido e gasoso, respectivamente. No caso da nossa reação, o produto formado, a blenda, é resultante da combinação de átomos de zinco e enxofre entre si, e à blenda damos o nome de sulfeto de zinco.

Para que qualquer representação das reações químicas seja adequada, ela deve manter a conservação da massa e os postulados da teoria atômica de Dalton. Por exemplo, verifica-se que a eletrólise da água (cuja fórmula sabemos ser H_2O), gera hidrogênio gasoso (H_2) e oxigênio gasoso (O_2). A equação química para esta reação seria, em princípio,



Mas, olhe com atenção: se deixarmos assim, não estaremos obedecendo aos postulados do Dalton. Do modo que está, estamos indicando que, antes da reação, existem dois átomos de hidrogênio para cada átomo de oxigênio ($H_2O_{(l)}$) e, depois da reação, esta proporção muda para dois átomos de hidrogênio para dois átomos de oxigênio ($H_{2(g)}$ e $O_{2(g)}$). Ou seja, “surgiu” um átomo de oxigênio do nada. Ora, de acordo com Dalton, átomos não podem ser destruídos nem criados, eles estão sempre lá, se o sistema for fechado. Assim, para que as coisas ocorram de acordo com nossa teoria, a proporção entre os reagentes e produtos deve ser

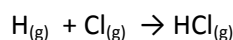


Observe que agora temos 4 átomos de hidrogênio para 2 átomos de oxigênio, tanto antes como depois da reação.

Este processo, a que chamamos de equilibrar a equação, significa apenas que estamos obedecendo à lei da conservação da massa. Ou seja, se o modelo atômico de Dalton está correto, então, na eletrólise da água devemos obter o dobro de moléculas de hidrogênio em comparação com as moléculas de oxigênio. E é realmente o que ocorre! Assim, o modelo atômico de Dalton nos leva à necessidade de que as equações químicas sejam balanceadas, ou seja, o número de átomos de um lado da equação (ou seja, nos reagentes), deve ser igual ao número de átomos no outro lado (isto é, nos produtos). Equações químicas balanceadas permitem prever as massas de reagentes necessárias para formar uma massa de determinado produto, nos cálculos que chamamos de estequiometria. Isto é extremamente importante, inclusive comercialmente, pois podemos prever o quanto devemos dispor de um determinado reagente para obter um determinado produto. Vamos voltar à estequiometria adiante.

Mas não pense que a teoria atômica de Dalton foi aceita imediatamente. Os métodos químicos de análise, no início do século XIX, ainda não tinham a precisão e exatidão que têm hoje, e as substâncias disponíveis não eram assim tão puras. Por isso, alguns químicos importantes da época não acreditavam na teoria atômica, apontando que as proporções não eram tão constantes assim, sem perceberem que

eram as impurezas ou outros problemas operacionais que muitas vezes faziam com que as proporções parecessem variar. Para dizer a verdade, mesmo cem anos depois, já no início do século XX, químicos importantes como Ostwald (1853-1932), prêmio Nobel de Química em 1909, ainda não acreditavam nos átomos, achando que a teoria atômica era apenas uma maneira prática de resolver determinados problemas da Química. Mas, desde o trabalho de Dalton, a teoria atômica foi sendo cada vez mais aceita entre a maioria dos químicos. Contribuiu fortemente para isso o trabalho de Amadeo Avogadro (1776-1856), que foi divulgado e defendido por Canizzaro (1826 -1910), no primeiro Congresso Internacional de Química, em 1860, em Karlsruhe, na Alemanha. Este trabalho relacionava-se às reações entre gases, que pareciam contrariar a teoria atômica. Por exemplo, vamos ver o que acontece na reação entre o hidrogênio e o cloro, ambos gasosos, formando gás clorídrico. Pensava-se, inicialmente, que a equação química desta reação seria:

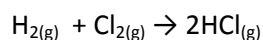


Isto é, pensava-se que tanto o hidrogênio como o cloro eram gases monoatômicos. Você deve lembrar da lei geral dos gases, $PV=nRT$, onde P é a pressão; V , o volume; T , a temperatura, n o número de mols do gás e R uma constante. Ela pode ser reescrita como:

$$V= nRT/P$$

Se a pressão e a temperatura forem mantidas constantes, teremos que o volume é proporcional ao número de mols, n , como realmente é (ver texto teoria cinética). Então, olhando a equação química tal como está, vemos dois mols de reagentes (H e Cl) formariam 1 mol de produto (HCl). Portanto, era de se esperar que, por exemplo, 1 litro de hidrogênio reagisse com 1 L de cloro, levando à formação de 1 L de HCl (todos gasosos). Mas não é o que acontece! Na verdade, formam-se 2 L de HCl! Como explicar? Foi Avogadro quem deu uma boa resposta. Ele admitiu, primeiramente, que os gases eram formados por pequenas partículas, invisíveis, em constante movimento, e propôs que volumes iguais de quaisquer gases contém o mesmo número de partículas, desde que estejam todos na mesma pressão e temperatura. Ou seja, 1 L de hidrogênio conteria o mesmo número de partículas que 1 L de cloro, que 1 L de oxigênio, e assim por diante, desde que todos nas mesmas pressão e temperatura. Veja que, se temos conhecimento da lei geral dos gases, $PV=nRT$, esta hipótese surge naturalmente, como vimos acima. Mas, mais ainda, para explicar as relações de volume das reações entre os gases, propôs que o gás hidrogênio, ao invés de ser formado por átomos de hidrogênio isolados, era, sim, formado por

átomos de hidrogênio, mas ligados dois a dois, formando partículas diatômicas do tipo H-H, ou H₂. O mesmo era válido para o cloro. Assim, a reação entre os dois gases deveria ser escrita como:



Veja que, neste caso, 1 L de hidrogênio conteria “n” partículas moléculas de H₂, assim como 1 L de cloro conteria também “n” moléculas de Cl₂, e a reação formaria 2 n moléculas de HCl. Deste modo, 1 L do hidrogênio reage com 1 L do cloro, formando 2 litros (2n) de HCl, tal como realmente observado. Assim, Avogadro introduziu o conceito de molécula, só que cedo demais (1811).

Graças a seu discípulo Canizzaro, houve, no Congresso de Karlsruhe, atenção para as ideias de Avogadro que, além de resolver o impasse dos volumes envolvidos nas reações entre gases, ofereceu um novo conceito, o de moléculas, como chamamos estas partículas atômicas “associadas”.

Outro desenvolvimento importante que utilizava da existência de átomos foi a própria teoria cinética dos gases, que conseguia explicar o comportamento dos gases, admitindo que eles fossem formados por partículas infinitesimais, com massa e movimento constante. Naturalmente, estas partículas eram as mesmas moléculas propostas por Avogadro, moléculas estas formadas por átomos. E lembre-se que Mendeleiev (1834-1907) propôs sua tabela periódica, com a qual conseguiu prever, com incrível precisão, as propriedades dos elementos, baseando-se nas massas atômicas, ou seja, ele também partiu da premissa de que a matéria era realmente formada por átomos que tinham massas definidas e que as reações químicas eram resultado de combinações desses átomos, conforme discutido acima. Ou seja, o sucesso da tabela periódica também foi o sucesso da teoria atômica de Dalton.

Assim, lá pelo fim do século XIX, a grande maioria dos cientistas estava convencida de que a matéria era mesmo formada por átomos, como proposto por Dalton. Tinha sido possível medir a massa relativa dos átomos associados a cada um dos elementos, sabendo-se que o hidrogênio era o elemento mais leve. Foram descobertas as fórmulas de grande parte das substâncias, e os cálculos estequiométricos previam, com grande precisão, as massas de reagentes necessárias para se obter uma dada massa de um determinado produto. Ou seja, um grande avanço em termos de Química. Todos (exceto alguns poucos recalcitrantes) estavam muito felizes com a teoria atômica. A Química havia, ao longo de cem anos, se livrado de vez dos fluidos, humores, flogistos e calóricos, de influência alquímica, e se tornado uma ciência com base material definida e capaz de previsões quantitativas precisas.

Imaginem, então, quando depois deste esforço todo, algumas cientistas começaram a desconfiar que o átomo era...divisível! Esta história está bem contada no texto “Teoria Atômica” mas, de um modo resumido, essas dúvidas de que o átomo era divisível começaram com as experiências das ampolas, que

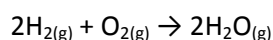
revelaram o que passou a se chamar de “raios catódicos”. Em ampolas de vidro, onde se fazia vácuo, eram colocados dois eletrodos, um catodo e um anodo, aos quais se aplicava uma grande diferença de potencial. Se o vácuo e a diferença de potencial eram suficientemente altos, observava-se que surgiam raios, que partiam do catodo em direção ao anodo. Vários experimentos foram realizados (ver o texto teoria atômica), sendo então verificado que esses raios eram formados por partículas materiais e que tinham carga negativa. Mas, o mais importante para nós aqui era a seguinte observação: independentemente do material do catodo, os raios catódicos tinham sempre as mesmas propriedades. Imagine só: raios catódicos originados de catodos de alumínio, de ferro, de cobre, tinham todos as mesmas propriedades.

Em 1895, em um experimento controlado com essas ampolas, J. J. Thomson (1856-1940) determinou que a massa das partículas que formavam estes raios catódicos devia ser bem menor do que a massa do átomo mais leve, o hidrogênio, cerca de 2000 vezes menor! As partículas que formavam os raios catódicos foram então chamadas de elétrons. Ora, partículas 2.000 vezes mais leves que o átomo mais leve, e que advinham de eletrodos formados por diferentes materiais. A que conclusão poder-se-ia chegar? Só uma: que estas partículas faziam parte da composição da matéria, de todo tipo de matéria, e que, como a matéria era formada por átomos, estas partículas deveriam fazer parte dos átomos. Ou seja, os átomos não eram mais indivisíveis. Mas, seja como for, essas partículas tinham uma massa muito pequena, e os átomos, mesmo que perdessem ou ganhassem estas partículas, não mudavam muito sua massa, e as conclusões do modelo atômico de Dalton não eram afetadas significativamente. Thomson sugeriu que os elétrons estavam encravados no átomo como passas encravadas em um bolo. Os elétrons seriam negativos e o restante do bolo, positivo, de modo que o conjunto era neutro. Este foi o modelo do “bolo de passas”.

Mas, alguns anos depois, em 1905, Rutherford (1871-1937) realizou, junto com seu estudante Marsden (1889-1970), a famosa experiência em que bombardeia folhas de ouro bem finas com partículas alfa. Os resultados mostraram (ver de novo o texto “Teoria atômica”) que a maior parte da matéria nos átomos concentrava-se em um núcleo positivo, e a saída foi admitir um modelo atômico, onde havia um núcleo positivo, contendo a maior parte da massa do átomo, e os elétrons, bem mais leves, orbitavam em torno deste núcleo, como planetas em torno do Sol. Bem, não é o objetivo do presente texto entrar em detalhes profundos sobre a evolução do modelo atômico, que pode ser encontrado no texto de teoria atômica, mas apenas chegar mesmo até aqui, um modelo atômico onde os átomos apresentam uma estrutura, com a massa concentrada em um núcleo positivo, cercado por uma eletrosfera negativa, para, a partir dele, mostrarmos como entendemos hoje, o que se passa em uma reação química.

1.2) Olhando uma reação química bem de perto

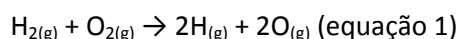
Para isso, vamos voltar à água, mas agora não mais sua decomposição, mas à sua síntese, a partir do hidrogênio e oxigênio, cuja equação química seria então:



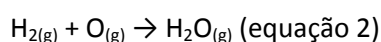
Façamos um experimento imaginário: colocamos em uma garrafa, suficientemente rígida, os gases hidrogênio e oxigênio nas proporções corretas, conforme mostrada pela equação. Se pudéssemos “enxergar” em nível microscópico, veríamos moléculas de hidrogênio, H_2 , e moléculas de oxigênio, O_2 , deslocando-se em alta velocidade, chocando-se contra as paredes do recipiente e chocando-se entre si.

As moléculas de hidrogênio e oxigênio se aproximam, e colidem, mas como ambas tem uma camada negativa externa (a eletrosfera), estas eletrosferas se repelem (ambas são negativas) e as moléculas se afastam. Ou seja, nada acontece, as moléculas se preservam. E, se assim deixássemos, as moléculas iriam colidir, colidir, colidir, mas nada aconteceria além das colisões. Agora, porém, dentro de nosso recipiente, fazemos passar uma fagulha elétrica. Essa fagulha repassa a algumas moléculas de hidrogênio e oxigênio uma energia extra, e estas moléculas começam a se deslocar com maior velocidade. Elas se chocam com suas vizinhas e, com esta energia extra, os choques levam à quebra das ligações, e à formação de átomos livres de hidrogênio e oxigênio.

Se descrevermos o fenômeno na forma de uma equação, teremos:



Bem, foram formados átomos livres de hidrogênio e oxigênio (H e O). O que vai acontecer com eles agora? Eles estão em constante movimento, cercados de moléculas de H_2 e O_2 , também em movimento. Naturalmente, vão se chocar com estas moléculas. Vemos o que ocorre quando um átomo livre de oxigênio (O) choca-se com uma molécula de H_2 : há a formação de água. A equação química para esta transformação é dada por:



Esta reação libera energia (pois se forma uma ligação química a mais; compare o número de ligações químicas antes e depois desta reação), que é repassada às moléculas em torno na forma de calor, isto é, as moléculas em torno aumentam sua energia cinética, o que causa o aparecimento de mais moléculas suficientemente energéticas para que os choques entre si levem ao rompimento das ligações, formando mais átomos livres (eq 1). Estes novos átomos livres, por sua vez, reagem com outras moléculas, formando, no caso, mais água (eq 2), o que libera mais calor, mais átomos livres são formados (eq 1), que reagem formando mais moléculas de água (eq 2) e a coisa continua assim, até que, nesse caso, todo o H_2 e o O_2 tenham se transformado em H_2O . Ou seja, a reação precisa de uma energia inicial (a fagulha) mas, uma vez que ela começa, ela própria libera a energia suficiente para que se formem novas moléculas com energia extra que vão dar continuidade a reação.

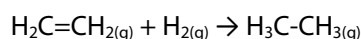
Em síntese, no exemplo mostrado a reação química ocorreu quando moléculas dos reagentes se chocaram, com quebra de suas ligações e outros choques levaram a formação de novas ligações, isto é, a formação de novas moléculas, isto é, dos produtos. Esta é uma boa visão geral do que é uma reação química.

1.3) Olhando de perto também a energia de ativação e a catálise

A energia necessária para iniciar a reação é chamada energia de ativação, um nome bem apropriado, não é? Vamos investigar um pouco mais esse conceito, o de energia de ativação: a combustão da madeira é uma reação química que ocorre espontaneamente, ou seja, uma vez iniciada, ela segue adiante sem que seja necessário continuar dando energia ao sistema. Mas ela precisa de uma energia de ativação: é preciso a energia de uma chama já acesa, por exemplo, para que a madeira comece a pegar fogo. Ou seja, a madeira não está aí pegando fogo toda hora, indistintamente. É preciso alguma energia para iniciá-la. Que bom que é assim, pois, se assim não fosse, nós mesmos, que somos feitos de matéria combustível, de repente começaríamos a pegar fogo...Ou seja, uma reação é espontânea se ela consegue seguir sozinha, uma vez iniciada. Mas, mesmo reações espontâneas precisam de uma energia para começá-las: a energia de ativação. Por que a necessidade desta energia de ativação? Observe que, no nosso exemplo da formação da água, a energia inicial dada (a fagulha), permitiu que algumas moléculas ganhassem energia suficiente para que causassem choques que levassem à quebra de ligações. E é isso mesmo, a energia de ativação é aquela energia necessária para quebrar as primeiras ligações químicas dos reagentes, o que virá a permitir que novas ligações se formem.

Algumas reações têm energias de ativação tão pequenas, que parecem não ter energia de ativação. Quando jogamos um comprimido de vitamina C efervescente em um copo d'água, há uma reação imediata. Não parece haver necessidade de uma energia de ativação. Mas, não se engane: o copo de água está a certa temperatura, a temperatura ambiente, e a agitação das moléculas nesta temperatura já é suficiente dar a energia de ativação necessária para iniciar a reação. Outras reações têm energias de

ativação tão grandes, que nem parecem possíveis. É o caso da síntese da amônia, a partir do nitrogênio (N_2) e do hidrogênio (H_2). Por causa de sua alta energia de ativação, são necessárias temperaturas muito altas. Isso se dá porque, como vimos, antes de formarem as novas ligações relativas aos produtos (no caso, NH_3), é necessário quebrar as ligações originais (no caso, N_2 e H_2). O nitrogênio (N_2) tem uma ligação tripla entre os dois átomos de nitrogênio ($N\equiv N$), o que torna esta molécula extremamente estável (ou seja, difícil de ter sua ligação rompida). Daí, a necessidade de temperaturas muito altas, para que a reação possa se iniciar. Essas altas temperaturas são até possíveis de serem alcançadas no laboratório, mas tornariam a síntese comercial impossível, pelo gasto de energia para alcançá-las e pela inexistência de materiais acessíveis que resistam a elas, com os quais possam ser construídos os reatores. Isto significa que, em muitos casos como este, temos que procurar um meio de diminuir a energia de ativação para torná-la viável. Ou seja, procurar um meio que facilitasse o rompimento das ligações originais, diminuindo a energia de ativação. Estas substâncias que, por diminuírem a energia de ativação das reações as facilitam são chamadas de catalisadores! Os catalisadores atuam de vários modos para baixar a energia de ativação. Vamos explorar dois casos importantes. Um é na chamada reação de saturação, uma reação importantíssima na indústria do petróleo e de alimentos (você lembra das “gorduras saturadas”?). Vários compostos orgânicos têm ligações duplas entre átomos de carbono, e nas reações de saturação o hidrogênio gasoso (H_2) reage com estas ligações duplas, e átomos de hidrogênio são adicionados ao composto. Para exemplificar, vamos olhar o que acontece com o mais simples composto de carbono com ligações duplas: o eteno (C_2H_4 , ou, deixando claro onde está a ligação dupla, $H_2C=CH_2$). Em sua reação de saturação, o eteno reage com o hidrogênio, formando etano:



Ou seja, a molécula de hidrogênio (H_2) se quebra, e cada um dos hidrogênios se liga a cada um dos carbonos do eteno. Então veja que, de novo, o passo inicial é romper a ligação entre os dois átomos do hidrogênio molecular (H_2), para o que se precisa de energia -- a energia de ativação. Se, tivermos a presença de uma substância que enfraqueça a ligação entre os dois átomos de hidrogênio na molécula H_2 , a reação vai ser favorecida, pois sua energia de ativação diminuirá. Esse efeito pode ser alcançado pela adição de níquel metálico em pó ao meio reacional. Veja na Figura 8a: duas moléculas, eteno ($H_2C=CH_2$) e hidrogênio (H_2) se aproximam. Elas vão se chocar, e se o choque for energético o suficiente haverá a reação. Ou seja, a energia cinética envolvida no choque tem que ser suficiente para quebrar a ligação H-H da molécula H_2 , para que depois se possam formar as novas ligações C-H. Na Figura 8b, a reação ocorre na presença do catalisador. Veja que a molécula de H_2 agora está sobre a superfície do catalisador (níquel), e seus átomos interagem com os átomos de níquel. Esta interação faz com que a ligação entre os dois átomos de hidrogênio enfraqueça um pouco. Assim, o choque de uma molécula

de eteno contra esta molécula de H_2 , presa à superfície do níquel, vai ter mais chance de levar a uma reação, ou seja, de ser efetivo.

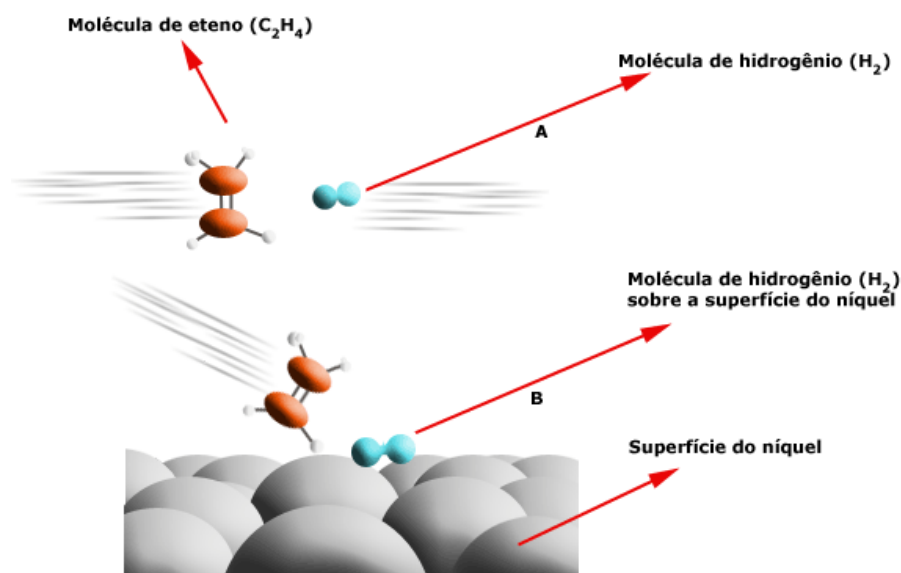
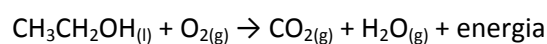


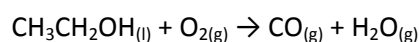
Figura 3

Daí que entendemos também porque é importante pulverizar o níquel em sua ação como catalisador: quanto mais pulverizado ele estiver, maior será a superfície de níquel exposta (pense nisto), mais moléculas de H_2 estarão ligadas a ele, aumentando a chance de choques efetivos. Veja, também, que o catalisador substitui o aumento de temperatura: aumentar a temperatura seria uma possibilidade de aumentar a frequência de choques efetivos, mesmo na ausência de catalisador. Entretanto, o catalisador aumenta o número de choques efetivos, sem necessitar do aumento de temperatura. E o resultado do aumento do número de choques efetivos é aumentar a velocidade de reação. Em resumo, o catalisador, ao diminuir a energia de ativação, aumenta a velocidade da reação. O mesmo efeito eventualmente poderia ser alcançado pelo aumento de temperatura, mas a custo energético maior, às vezes, proibitivamente maior. No caso da síntese da amônia, uma síntese industrialmente muito importante, pois é a base de toda a indústria de fertilizantes, sem o uso de catalisadores, ela não seria economicamente viável. Na verdade, o mecanismo da reação entre o eteno e o hidrogênio sem catalisadores é um pouco mais complexo, mas não é o caso de discuti-lo aqui.

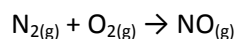
Outra forma de catalisadores aumentarem a frequência de choques efetivos (isto é, aqueles choques entre as moléculas que realmente levam à reação), é permitir um melhor alinhamento das moléculas. Nosso exemplo agora é o conversor catalítico existente no escapamento dos automóveis. Ele é formado por uma mistura de metais, como platina, paládio e ródio. O objetivo do conversor, entre outros, é evitar a emissão pelos automóveis de óxido nítrico, NO, prejudicial ao ambiente. Como o NO é formado? Bem, o motor do automóvel funciona com um combustível (gasolina, álcool, diesel), que queima dentro dos seus cilindros. Esta queima é realizada injetando-se, além do combustível, ar no motor. O oxigênio do ar é usado, então, para reagir com o combustível, formando gás carbônico (CO₂) e água (H₂O), e liberando energia. Para o álcool (CH₃CH₂OH), teríamos (veja que a equação não está balanceada):



Como nem sempre a queima é tão completa assim, forma-se também algum monóxido de carbono:



Acontece que o ar também tem nitrogênio (N₂). Este nitrogênio também entra nos cilindros do motor e, lá dentro, como as pressões e temperaturas são muito altas, algum nitrogênio termina por reagir com o oxigênio (ambos do ar), formando NO:



Portanto, os gases de exaustão são formados por uma mistura de vapor d'água, dióxido de carbono (CO₂), monóxido de carbono (CO), e algum NO (tem também outros gases, mas fiquemos nestes, por aqui). Este NO é prejudicial ao meio ambiente, e deve-se evitar que ele alcance a atmosfera. Assim, em algum ponto do coletor de exaustão (tubo por onde saem os gases de queima do motor) é soldado um recipiente metálico, contendo platina, ródio e paládio no seu interior, na forma de bolinhas ou formando minidutos, como uma colmeia (pense na superfície de contato...), conforme mostrado na Figura 9. Os gases de exaustão, ao passarem pelo conversor catalítico, sofrem a ação catalítica dos metais. E como se dá esta ação catalítica?

A Figura 4 procura mostrar o mecanismo de funcionamento do conversor catalítico em nível molecular. O que se deseja é que a molécula de NO volte a ser N_2 e O_2 , isto é, a reação inversa de sua formação. O catalisador provavelmente age alinhando as moléculas de NO lado a lado, de modo que os átomos de nitrogênio de duas moléculas fiquem mais próximos entre si, assim como os de oxigênio. Assim alinhados fica mais fácil a reação de transformação do NO em N_2 e O_2 !

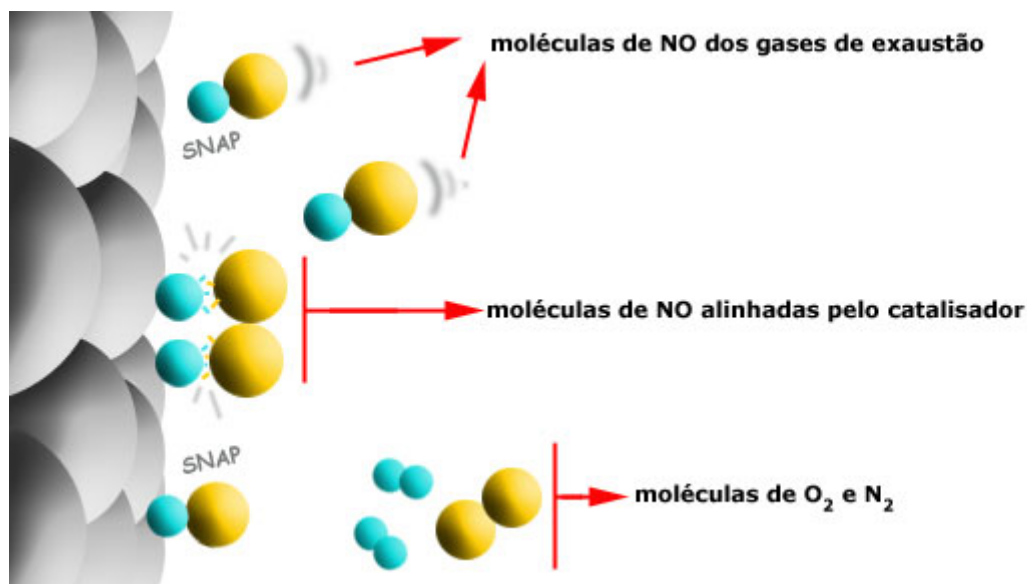


Figura 4: Esquema do mecanismo de conversão do $NO_{(g)}$ em $O_{2(g)}$ e $N_{2(g)}$ em um conversor catalítico.

O conversor catalítico não apenas ajuda na reconversão do NO em N_2 e O_2 , como também na conversão do monóxido de carbono (CO) ou outro produto de combustão incompleta (HC, na Figura 9, em gás carbônico (CO_2)). Veja (Figura 9) que o conversor é colocado logo após a saída dos gases do motor, onde eles ainda estão quentes, o suficiente para que o processo se dê com bom rendimento. Isto é, o posicionamento do conversor catalítico é importante, pois nesta posição, os gases passarão por ele ainda quentes, melhorando o rendimento da conversão.

Há vários exemplos de catalisadores, inclusive na natureza. Especialmente importantes são as enzimas existentes em todos os organismos vivos, que também agem alinhando as moléculas que vão reagir, de modo que as reações ocorram mais facilmente.

2) Reações químicas e equilíbrio químico

Outro conceito importante, associado às reações químicas, é o de equilíbrio. Muitas vezes aprendemos que existem reações químicas reversíveis e irreversíveis, como se algumas reações químicas conseguissem ir “até o fim” e outras não. Na verdade, o que ocorre é mais sutil. Para começar, vamos examinar o que se passa quando fazemos alguns experimentos com um frasco cheio de um gás marrom, chamado dióxido de nitrogênio, NO_2 . Este é um gás marrom, que pode ser formado quando, por exemplo, se reage ácido nítrico com cobre metálico. Vamos produzir este gás, realizando a reação em um balão com uma saída lateral, recolhendo o NO_2 (g) em uma garrafa, e retirando-o em parte da garrafa com uma seringa, como mostrado na Figura 5.

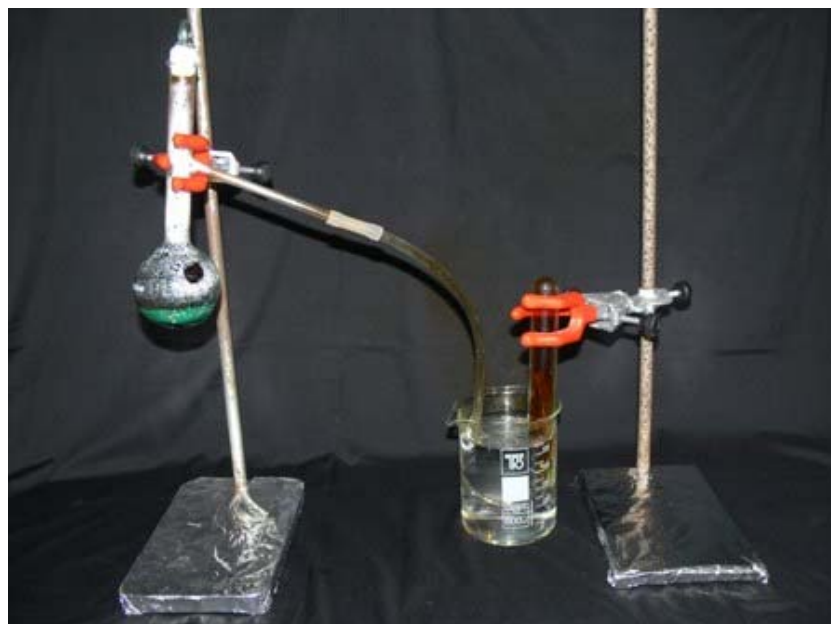


Figura 5: Produção e recolhimento do óxido nitroso, NO_2 .

De posse do gás dentro da seringa, fechamos a sua entrada, e (i) observamos a cor marrom do gás dentro da seringa: ela não varia com o tempo. Agora, passamos a fazer alguns testes interessantes: (ii) mergulhar a seringa contendo o gás em água fria: a cor marrom do gás irá esmaecendo e até desaparece, dependendo de quão fria esteja a água. Se retirarmos a seringa da água fria, e deixarmos reaquecer, ele volta, pouco a pouco, a recuperar a cor marrom; (iii) vamos, agora, comprimir o êmbolo da seringa: também veríamos a cor marrom ir esmaecendo, até sumir. Descomprimindo o êmbolo, a cor marrom voltaria, com a intensidade anterior. Vamos, agora, tentar organizar nossa informação:

(i) Inicialmente, temos uma seringa contendo um gás de cor marrom; esta cor não varia com o tempo. Como a cor é associada à presença do gás (NO_2), o fato de a cor não variar com tempo significa que a sua concentração não está variando com o tempo.

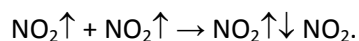
(ii) Ao resfriarmos o gás, a cor esmaeceu, o que significa que a concentração de NO_2 diminuiu, isto é, ele se transformou em outra coisa. Ao aquecermos de volta, o retorno da intensidade da cor mostra que o NO_2 reapareceu; voltando à temperatura inicial, a intensidade da cor volta a ser a mesma, isto é, a concentração do NO_2 volta a ser a mesma.

(iii) Se pressionarmos o êmbolo, a cor tende a desaparecer; se relaxarmos a pressão, a cor volta; ou seja, diminuindo o volume, o NO_2 desaparece; fazendo o êmbolo retornar à posição anterior, a cor (isto é, o NO_2) reaparece.

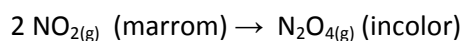
Fica claro que a temperatura e o volume parecem influir na existência ou não do NO_2 dentro da seringa. E, para tornar as coisas mais estranhas, todas estas transformações parecem desobedecer a lei dos gases! Como assim? Você deve se lembrar que, quando diminuimos o volume no qual o gás está contido, a pressão deve aumentar. É a lei de Boyle, que diz que $PV = \text{constante}$, ou seja, se diminuimos V , P aumenta, de modo que o produto PV permanece constante. Esta lei está bem discutida no texto de teoria cinética. Mas, no caso da nossa experiência aqui, se estivéssemos medindo a pressão dentro da seringa, íamos notar que, ao diminuirmos o volume (V), a pressão (P) não aumentaria na proporção esperada. Por exemplo, se diminuíssemos o volume à metade, a pressão não iria dobrar. Como o experimento está sendo feito à temperatura constante, só nos resta uma explicação: na experiência, ao diminuirmos o volume, a pressão não está aumentando na proporção esperada porque o número de mols de gás dentro do recipiente está diminuindo! Lembre-se que $PV = nRT$, e como T está constante, o único jeito de explicarmos que levando o volume V à metade, a pressão (P) não dobra, é admitirmos que n também diminuiu! Mas o que quer dizer “ n ”, o número de mols estar diminuindo? O gás está escapando? Não, porque já discutimos que nosso sistema é fechado, não entra nem sai nada (fechamos a ponta da seringa, lembra?). Ou seja, parece mesmo que o NO_2 , ao empurrarmos o êmbolo, vai desaparecendo...e quando relaxamos a pressão, ele volta! Mas ele não pode desaparecer.

Já aprendemos também que os átomos são indestrutíveis, e a matéria não pode simplesmente desaparecer e reaparecer...em um sistema fechado. Logo, só nos resta uma saída: tanto a diminuição da temperatura como a diminuição do volume estão levando o NO_2 a se transformar em outra coisa, de tal modo que o número de moléculas diminui! E, esta outra “coisa” só pode envolver átomos de N e O, que são os átomos que formam a molécula de NO_2 , os únicos presentes no sistema, e os átomos são indestrutíveis... Olhando agora para a estrutura eletrônica do NO_2 , vemos que é uma molécula com uma característica incomum: ela tem um número ímpar de elétrons! Ou seja, um dos elétrons está

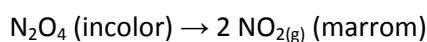
desemparelhado. Poderíamos representar a molécula como $\text{NO}_2\uparrow$, onde \uparrow simboliza o elétron desemparelhado. Se duas moléculas de NO_2 se aproximam, bem que seria possível que esses elétrons desemparelhados se emparelhassem, formando uma nova molécula, junção de duas moléculas de NO_2 :



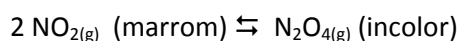
Esta nova molécula teria a fórmula N_2O_4 , sendo um dímero da molécula de NO_2 . Finalmente, essa transformação pode ser descrita como



Veja que o que escrevemos está de acordo com os fatos observados: são duas moléculas de NO_2 a se transformar em uma N_2O_4 . Isso significa que é uma transformação que diminui o número de moléculas dentro do recipiente, tal como esperado. Assim, quando forçamos o volume ocupado pelo gás a ser menor, a pressão não aumenta como era de se esperar, porque o número de moléculas diminui, uma vez que duas moléculas de NO_2 se transformam em uma molécula de N_2O_4 ! Mas, ao mesmo tempo, quando a pressão sobre o gás é relaxada, as moléculas de NO_2 voltam a se formar:



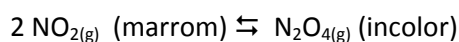
Isto é, dependendo das condições (maior ou menor pressão, maior ou menor temperatura), a reação pode tender para um lado ou outro. Outra maneira então de equacionar o fenômeno seria, então:



Isto é, temos uma situação em que tanto moléculas de NO_2 podem formar moléculas de N_2O_4 como moléculas de N_2O_4 podem se decompor em NO_2 , o que é indicado pela seta dupla, cada seta apontando para direções opostas. O mesmo ocorreu com a variação de temperatura: em baixas temperaturas, a cor

sumiu porque moléculas de $\text{NO}_2(\text{g})$ (marrom) se transformaram em $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g})$ (incolor)! Aumentando a temperatura ao seu valor inicial, dá-se o processo inverso. Assim, parece que podemos “brincar” de formar e decompor o NO_2 e o $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g})$!

Como explicar isso? Explicamos pelo equilíbrio dinâmico, que é onde queremos chegar: Primeiro, lembre-se que estes gases são formados por moléculas, muitas milhões, bilhões, “infinitezinhos” de moléculas em constante movimento, em todas as direções. Posto isso, agora vem a novidade: mesmo inicialmente, quando observávamos que não havia mudança de cor e tudo parecia estático, há mudanças! Moléculas de NO_2 estão constantemente se associando, formando N_2O_4 , e as moléculas de N_2O_4 estão constantemente se decompondo em NO_2 . Só que, se não variarmos nem temperatura e nem pressão, o número de moléculas de N_2O_4 que se forma é igual ao número de moléculas que se decompõe. O resultado é que não há mudança líquida nenhuma; e, como as moléculas são em número muito grande e infinitamente pequenas, então, macroscopicamente, não vemos qualquer mudança individual das moléculas, e a aparência macroscópica do conjunto como um todo (cor marrom do gás dentro da seringa) permanece a mesma. Este sistema é dito em equilíbrio dinâmico: ou seja, um sistema em que mudanças ocorrem permanentemente, mas elas se anulam e, no todo, é como se o sistema permanecesse o mesmo. Expressamos esta situação como:



E como explicar o efeito observado da temperatura e da pressão? Quando diminuimos a temperatura, a velocidade média das moléculas diminui, e a proporção de choques que são efetivos para causar uma reação química também diminui. O resultado é que nessas temperaturas mais baixas diminui o número de choques energéticos, o suficiente para romper a ligação $\text{NO}_2\text{-NO}_2$ da molécula de N_2O_4 , a reação no sentido da esquerda fica mais difícil de acontecer, e menos moléculas de N_2O_4 se decompõem. O resultado é que temos uma situação em que o número de moléculas de NO_2 diminuirá, enquanto o de N_2O_4 aumentará. Em outras palavras, o equilíbrio se desloca para a direita. Mas sempre haverá alguns choques que serão efetivos, e sempre algum N_2O_4 vai se decompor em NO_2 , só que com menor chance de isso acontecer. O resultado é que, em menor temperatura, a proporção de moléculas de N_2O_4 existentes em um dado momento vai aumentar (e a de NO_2 , diminuir, claro!). Porém, se aumentarmos a temperatura, a energia cinética das moléculas volta a aumentar, os choques capazes de quebrar a ligação do dímero serão mais frequentes, e um maior número de moléculas de NO_2 será formado, com o N_2O_4 diminuindo. Se voltarmos à temperatura original, voltaremos às proporções originais de NO_2 e N_2O_4 .

E, como explicar o efeito da pressão? Da mesma forma, baseando-nos na teoria cinética: se forçamos o volume a diminuir, estaremos aumentando a frequência dos choques entre as moléculas, mas sem aumentar a energia cinética dessas moléculas (não estamos mantendo a temperatura constante?). Isto vai fazer com que mais moléculas de NO_2 se encontrem com mais frequência e possam formar mais dímero. Portanto, teremos um aumento do número de moléculas dímeras (N_2O_4) e uma diminuição do NO_2 . Se voltarmos ao volume inicial, a situação se recompõe, ou seja, as proporções voltam a ser exatamente as que eram. Um sistema em equilíbrio dinâmico pode ser perturbado pelo aumento ou diminuição de pressão ou pelo aumento ou diminuição de temperatura. Mas, voltando-se à situação original de temperatura e pressão, o sistema volta também à situação original.

Outra coisa interessante é que, mesmo com tanto caos envolvido (moléculas para lá e para cá, formando-se e decompondo-se), há uma grande ordem, e esta ordem é expressa pela constante de equilíbrio. Em uma dada pressão e temperatura, não importando a massa total que você tenha dentro do sistema, haverá sempre uma relação constante entre as concentrações das substâncias em equilíbrio. No nosso caso, $[\text{N}_2\text{O}_4]/[\text{NO}_2]^2$ será sempre constante. Por exemplo, se colocarmos 0,01 mol de NO_2 na seringa, a uma dada pressão e temperatura, algum N_2O_4 será formado. Se esperarmos para o sistema alcançar o equilíbrio (o que poderá ser caracterizado, no caso, pela constância da cor marrom), e então medirmos as concentrações de N_2O_4 ($[\text{N}_2\text{O}_4]$) e de NO_2 ($[\text{NO}_2]$), acharemos um certo valor para a relação $Q = [\text{N}_2\text{O}_4]/[\text{NO}_2]^2$. Se agora injetarmos no sistema mais NO_2 no sistema, a sua concentração vai subir momentaneamente, mais depois irá caindo, até alcançar um valor tal que a relação $Q = [\text{N}_2\text{O}_4]/[\text{NO}_2]^2$ volte ao mesmo valor de antes (veja que, quando injetamos o NO_2 , o valor da relação momentaneamente diminui). E assim por diante: em mesmas pressão e temperatura, a relação $[\text{N}_2\text{O}_4]/[\text{NO}_2]^2$ terá sempre o mesmo valor, não importa se partimos só do NO_2 , só de N_2O_4 ou de qualquer proporção entre eles. A Figura 6 ilustra o que estamos discutindo. A posição do equilíbrio é a mesma, ou melhor, é sempre tal que a $[\text{N}_2\text{O}_4]/[\text{NO}_2]^2$ tem o mesmo valor, desde que não estejamos variando a temperatura.

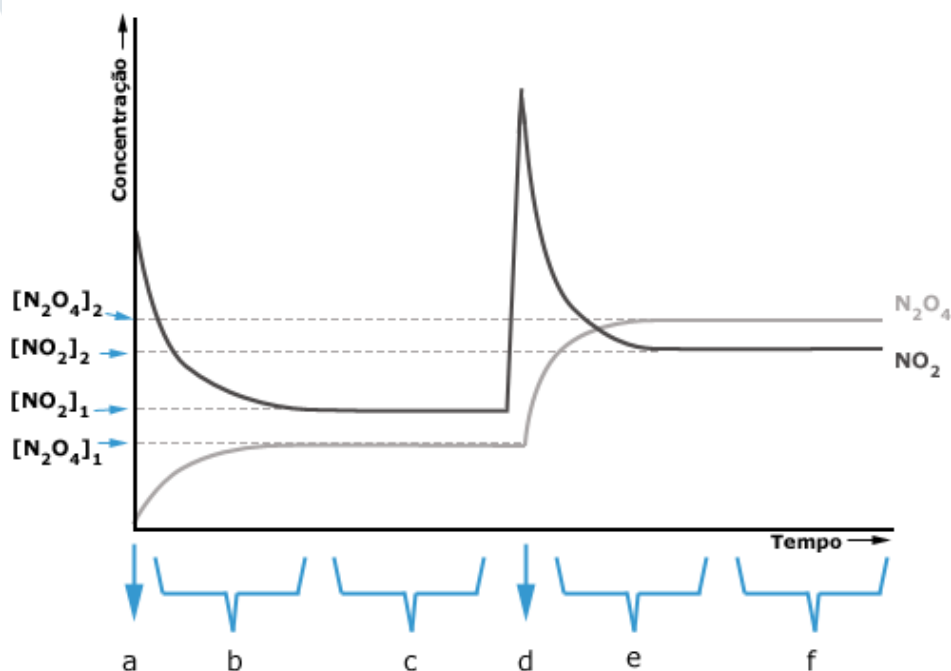


Figura 6: Evolução das concentrações de NO_2 e N_2O_4 ao longo de um experimento de estudo do equilíbrio (todas as substâncias no estado gasoso): (a) no início, adiciona-se apenas NO_2 ao frasco: a concentração de NO_2 tem certo valor e a de N_2O_4 é zero; (b) o equilíbrio desloca-se no sentido da formação de N_2O_4 , e a sua concentração aumenta, enquanto a de NO_2 diminui concomitantemente; (c) o sistema alcança o equilíbrio, não há mais variação das concentrações com o tempo, passando o NO_2 a ter uma concentração igual a $[\text{NO}_2]_1$ e o N_2O_4 uma concentração igual a $[\text{N}_2\text{O}_4]_1$; (d) mais NO_2 é introduzido no sistema, sua concentração sobe, e o sistema sai momentaneamente do equilíbrio; (e) o equilíbrio desloca-se novamente no sentido da formação de N_2O_4 , e a concentração de NO_2 cai concomitantemente; (f) o sistema alcança uma nova posição de equilíbrio, não há novamente variação das concentrações com o tempo, mas agora a concentração de NO_2 passa a ser $[\text{NO}_2]_2$ e a do N_2O_4 igual a $[\text{N}_2\text{O}_4]_2$.

No exemplo que acabamos de discutir, tomamos a reação $2 \text{NO}_{2(g)} \rightleftharpoons \text{N}_2\text{O}_{4(g)}$ como exemplo. Mas equilíbrios dinâmicos ocorrem em todo sistema químico fechado: transformações acontecendo em nível molecular, mas imperceptíveis, pois elas se anulam no balanço final, em nível macroscópico. O equilíbrio pode ser perturbado, seja por introduzirmos mais reagentes no sistema, ou se fizermos variar a pressão ou a temperatura. A introdução de mais reagentes no sistema perturba o equilíbrio, mas o sistema termina por voltar a uma situação onde os valores de concentração são tais que a constante de equilíbrio é recuperada. Se fizermos variar a pressão ou a temperatura, a posição do equilíbrio muda (ou seja, muda a constante). Mas, se voltarmos aos valores de temperatura e pressão iniciais, a constante reassume seu valor original. Quem estudou detalhadamente o comportamento de sistemas químicos em equilíbrio foi o físico-químico francês, Le Chatelier (1850-1836).

Existem algumas regras do que vai acontecer quando perturbamos um equilíbrio, e que podem ser facilmente entendidas se tivermos a visão microscópica que procuramos desenvolver aqui:

- (i) Em uma reação, se em um dos lados da reação, temos um maior número de mols de produtos gasosos do que do outro, o aumento de pressão vai fazer com que o equilíbrio se desloque no sentido do menor número de mols. *Foi o exemplo aqui, onde o aumento de pressão fez com que mais N_2O_4 se formasse, ou seja, deslocamento no sentido de onde se encontra o menor número de mols. O aumento da pressão gera um deslocamento do equilíbrio que, por diminuir o número total de moléculas, tende a compensar este aumento. O mecanismo já foi explicado.*
- (ii) Quando uma reação é exotérmica, a reação no sentido contrário será endotérmica; neste caso, o aumento da temperatura faz com que o equilíbrio se desloque no sentido da absorção do calor. Vice-versa para a diminuição da temperatura. *Foi também o que aconteceu no exemplo do equilíbrio estudado, já que a formação do N_2O_4 é exotérmica, uma vez que se forma uma ligação que não havia.*
- (iii) Se o equilíbrio é perturbado pela adição ao sistema de uma das substâncias envolvidas no equilíbrio, o equilíbrio é retomado pelo consumo de parte deste excesso, ou seja, o equilíbrio se desloca no sentido do consumo do excesso adicionado. *Isto é fácil de explicar, já que o aumento da concentração de um dos reagentes aumenta a sua frequência de choques, aumentando o seu consumo.*

É importante lembrar que a presença de um catalisador faz com que o equilíbrio seja alcançado mais rapidamente, mas não muda, por si, a posição de equilíbrio. Ou seja, o catalisador não muda a constante de equilíbrio.

3) Estado físico e reações químicas

O estado físico influi na facilidade com que uma substância reage. Geralmente, corpos sólidos são mais difíceis de reagir. Isto se deve ao fato de que, uma reação química, ser favorecida pelo maior contato entre os reagentes. Os corpos sólidos têm pouca superfície relativa de contato. Por isso, pulverizamos os corpos sólidos para fazê-los reagir mais rapidamente. Um exemplo bem simples: compare o tempo que leva para dissolver um comprimido de vitamina C em certa quantidade de água com a dissolução do mesmo comprimido, mas quebrado em 4 pedaços. O comprimido quebrado dissolve muito mais rapidamente, porque a superfície de contato entre a água (um dos reagentes) e o comprimido é bem maior (se você quiser fazer um interessante problema de geometria, calcule a área total de um comprimido com 2 cm de diâmetro e 0,5 cm de espessura; depois, calcule a área total do mesmo

comprimido, se ele for quebrado em 4 pedaços iguais). Por isso, se queremos que duas substâncias sólidas reajam o mais rapidamente possível, pulverizamos ao máximo estas substâncias, e, é claro, misturamos muito bem. Um exemplo são os foguetes auxiliares que ajudam a levar o ônibus espacial ao espaço. Eles contêm uma mistura de alumínio e perclorato de amônio pulverizados, fixados em um polímero, que reagem entre si, liberando grande quantidade de energia, ajudando a lançar o ônibus espacial. Mas, cuidado, o fato de uma substância ser sólida e não pulverizada não significa que, necessariamente, ela não possa reagir rápida e violentamente. Um exemplo: quando se lança um pedaço de sódio sólido em um recipiente com água, observa-se uma reação verdadeiramente explosiva, imediata. Isto ocorre por que a reatividade do sódio com a água (e não só com a água) é tão grande, que mesmo ele estando sólido, em um único pedaço, com superfície de contato relativamente pequena, ele reage rapidamente.

Outra maneira de fazer sólidos reagirem mais rapidamente entre si é transformá-los em líquidos, por aquecimento. Como os líquidos se misturam mais efetivamente, normalmente as reações ocorrem mais facilmente. Assim, por exemplo, obtemos as ligas, que são compostos formados por dois ou mais metais, sendo que os metais devem ser fundidos e seus líquidos misturados. O fato de os reagentes serem líquidos apenas facilita a ocorrência das reações.

O estado gasoso permite uma maior exposição das moléculas uma às outras, o que é um fator positivo em relação à ocorrência de reações. Entretanto, neste estado, as moléculas estão relativamente afastadas uma das outras, ou seja, "diluídas" no vazio. Daí que o aumento de pressão, que equivale a aproximar mais as moléculas umas das outras, facilita a ocorrência da reação, principalmente quando o número de mols (de gases) formados for menor que o número de mols que reagiu (um dos princípios de Le Chatelier). O aumento de temperatura é um fator também importante, pois aumenta a probabilidade de choques efetivos entre as moléculas dos gases que reagem, pois as moléculas de um gás, em maior temperatura, passam a se deslocar mais rapidamente, isto é, têm maior energia cinética, e aumenta, então, a frequência de choques que envolvem energia suficiente para romper as ligações químicas das moléculas envolvidas, o que, como já vimos, é o primeiro passo para a ocorrência das reações. Mas, um conjunto muitíssimo importante de reações químicas, que inclui aquelas diretamente relacionadas com os sistemas vivos, ocorre em solução. Uma solução você conhece: quando você dissolve açúcar em água ou sal de cozinha em água, forma-se uma solução. Para entendermos o que é (e como se forma) uma solução, vamos ficar exatamente nestes dois exemplos. No caso do açúcar, temos um composto formado por moléculas de fórmula $C_{12}H_{22}O_{11}$. Esta molécula tem uma fórmula estrutural conforme mostrada na Figura 7.

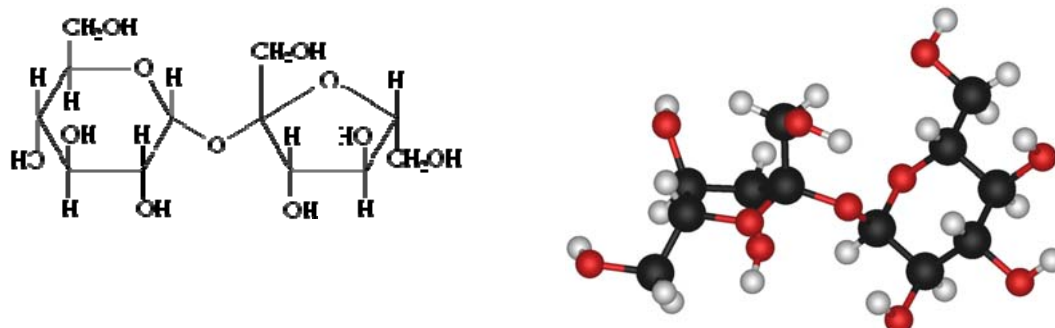


Figura 7: Representações da molécula de sacarose. Na representação pau e bola (à direita), os átomos de carbono estão em preto, os átomos de oxigênio em vermelho e os átomos de hidrogênio em branco.

O açúcar sólido é formado por essas moléculas, agrupadas lado a lado, sendo as moléculas mantidas juntas por meio de forças intermoleculares. Estas forças são de natureza elétrica, e não são tão intensas quanto as forças que mantêm unidos os átomos dentro de uma mesma molécula. Isto é, as forças que mantêm unidos os átomos de uma mesma molécula são, em geral, muito mais fortes do que as forças intermoleculares, ou seja, aquelas que mantêm unidas as moléculas umas às outras. E como aparecem as forças intermoleculares? Por exemplo, algumas ligações dentro de uma molécula podem ser polares, ou seja, o par eletrônico da ligação química não é distribuído igualmente entre os dois átomos que o compartilham. É o caso, por exemplo, das ligações entre o oxigênio e o hidrogênio dos grupos O-H existentes na molécula de açúcar (sacarose). Como o átomo de oxigênio é muito mais eletronegativo do que o átomo de hidrogênio, o par eletrônico é mais atraído para o oxigênio. Deste modo, embora o conjunto O-H permaneça neutro, dentro dele o átomo de oxigênio fica mais negativo do que o de hidrogênio. Representamos isso através do símbolo δ^- , onde o sinal sobre ele indica a carga: δ^+ significa uma densidade de carga positiva e δ^- , uma densidade de carga negativa. Formam-se, conforme indicado na Figura 8, dipolos ($\delta^+\delta^-$). Ora, se existem dipolos na molécula, a parte positiva do dipolo de uma molécula atrai a parte negativa do dipolo de outra molécula. Essas atrações entre os dipolos de diferentes moléculas ajudam a manter as moléculas unidas entre si. Aliás, além da atração entre os dipolos (interação dipolo-dipolo), há outros tipos de forças intermoleculares, mas que não serão discutidos aqui.

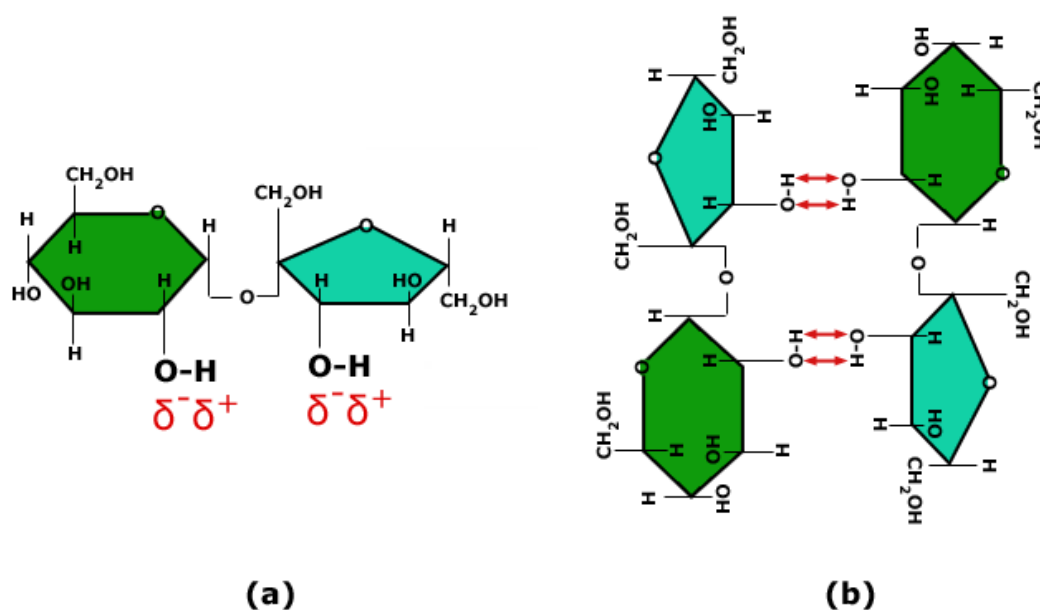


Figura 8: Molécula de sacarose com destaque para os dipolos entre dois grupos OH (a) e (b) atração entre os dipolos de duas moléculas de sacarose distintas.

Bem, então já sabemos que o açúcar é formado por moléculas de fórmula $C_{12}H_{22}O_{11}$, e que estas moléculas têm dipolos que as fazem atrair uma às outras, formando o açúcar sólido, um empacotamento destas moléculas. Este empacotamento tem até um ordenamento que leva à formação de belos cristais de açúcar.

Bem, mas o açúcar, ao ser misturado com água, se dissolve. É como se ele deixasse de ser sólido....E, de certa forma, é isso mesmo: o açúcar dissolve em água porque, de um modo que vamos ver, a água consegue separar as moléculas de açúcar umas das outras, e assim separadas elas se misturam à água. Mas, o que acontece, exatamente? Para sabermos, temos que examinar como é a estrutura da água. Ora, a água, sabemos ser formada por moléculas de H_2O . Olhando um pouco mais estruturalmente, na molécula de água cada átomo de oxigênio liga-se a dois de hidrogênio: H-O-H. Mais ainda: a molécula de água não é linear, mas angular, conforme mostrado na Figura 9. Como já vimos, na ligação O-H, o par de elétrons da ligação está mais próximo do oxigênio, formando um dipolo. Então, a molécula da água terá dois dipolos, e ela será uma molécula polar. Tendo dipolos, as moléculas irão atrair umas às outras, e esta atração, com o oxigênio de uma das moléculas (a parte negativa do dipolo) atraindo um dos hidrogênios de outra molécula (a parte positiva do dipolo), conforme mostrado na Figura 9.

Isto quer dizer que, se pudéssemos enxergar a água em nível molecular, não veríamos moléculas de água individuais, mas cadeias de moléculas de água, ligadas entre si. Aliás, por isso a água é líquida, e não gasosa, e sua fórmula deveria ser $(H_2O)_n$, com "n" simbolizando as várias moléculas ligadas entre si.

Na verdade, estas ligações entre o oxigênio de uma molécula e o hidrogênio de outra vai além de apenas uma atração eletrostática entre os dois dipolos, e é chamada "ponte de hidrogênio".

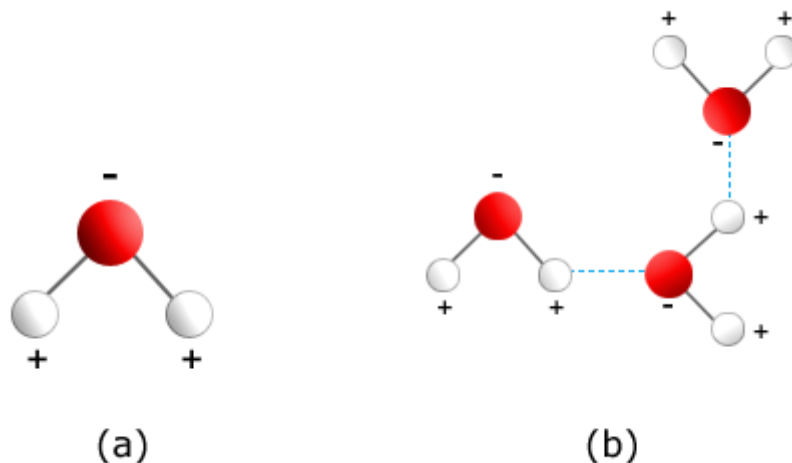


Figura 9: Representações da molécula de água (a) mostrando os seus dipolos e (b) as interações entre os dipolos de moléculas diferentes, formando, no caso, pontes de hidrogênio. Os átomos de oxigênio estão representados como círculos vermelhos e os de hidrogênio como círculos brancos.

O que acontece quando o açúcar sólido entra em contato com a água? Os dipolos da água vão ser atraídos pelos dipolos da molécula de açúcar! Assim, moléculas de água vão se ligar às moléculas de açúcar, por um lado, mas também estarão ligadas a outras moléculas de água. Como as moléculas de água estão em constante movimento, esta energia será transmitida às moléculas de açúcar, que terminarão por "desprender-se" do sólido. Ao desprenderem-se, serão imediatamente "cercadas" por mais moléculas de água, atraídas pelos dipolos da molécula de açúcar que passaram a estar expostos. O processo continua ocorrendo com mais moléculas de açúcar, até que todas elas tenham sido separadas e estejam cercadas por moléculas de água. Isto pode ocorrer até certo ponto, ou melhor, até certa concentração de moléculas de açúcar na água. A Figura 10 procura ilustrar o processo. Desse modo, podemos visualizar a solução de açúcar em água como moléculas de açúcar isoladas umas das outras, cercadas por moléculas de água, as quais se ligam pelos dipolos. Olhando de outro modo, o açúcar se dissolveu na água porque a interação entre moléculas de açúcar e moléculas de água é maior do que das moléculas de açúcar entre si. Vê-se, assim, que uma solução não é formada por moléculas do soluto (o açúcar) apenas dispersas no solvente, isoladas, mas há uma evidente interação entre o soluto e o solvente, que explica o processo de dissolução.

A dissolução do açúcar em água é representativa da dissolução de um composto polar (o açúcar, que é polar, pois tem vários dipolos) por um solvente polar (a água).

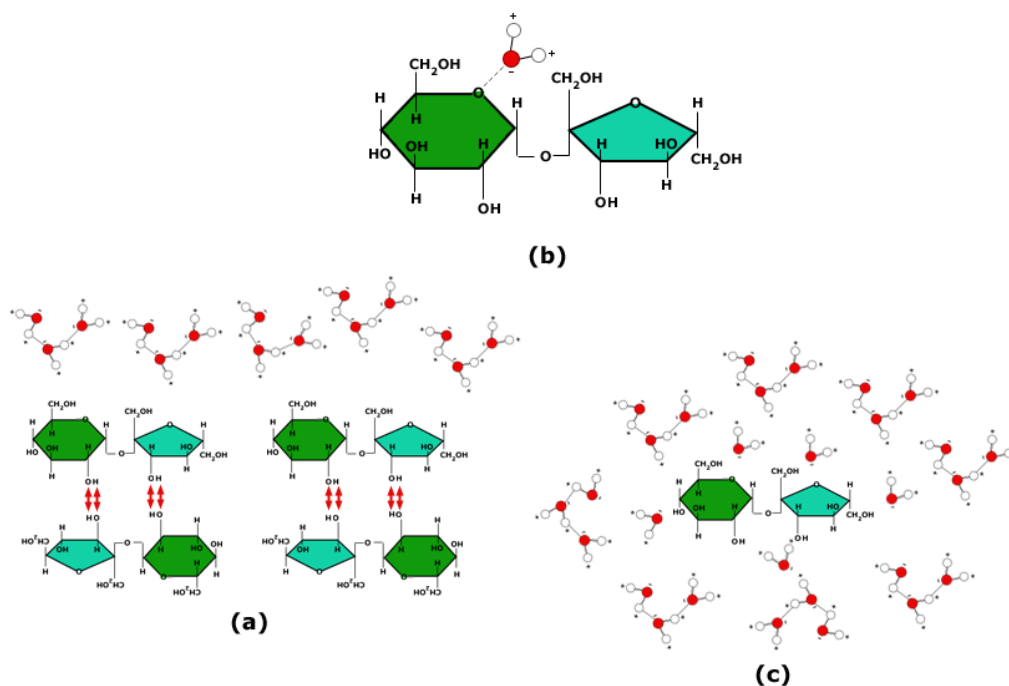


Figura 10: Moléculas de sacarose agrupadas, formando o açúcar sólido, com moléculas de água nas proximidades, esquematizando a interface entre o açúcar sólido e o solvente, água; (b) detalhe de uma possível interação entre o dipolo da água e um dipolo do sacarose; (c) molécula de sacarose em solução, cercada por moléculas de água, com as quais interage. Nas moléculas de água, os átomos de oxigênio estão em vermelho, e os de hidrogênio, em branco.

Agora podemos entender por que as moléculas em solução tendem a reagir mais facilmente: o processo de dissolução libera as moléculas de sua estrutura sólida, que é mais compactada, deixando-as mais disponíveis para interagir com outras moléculas.

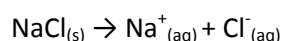
No caso da dissolução do sal de cozinha, para entender o processo, temos que nos lembrar que este é um composto iônico, formado por íons sódio (Na^+) e íons cloreto (Cl^-).

Você poderá visualizar as figuras do sal de cozinha, cloreto de sódio (NaCl), mostrando os íons sódio (Na^+) como bolas azuis e os íons cloreto (Cl^-) como bolas verdes em

[http://pt.wikipedia.org/wiki/Ficheiro:Halite\(Salt\)USGOV.jpg](http://pt.wikipedia.org/wiki/Ficheiro:Halite(Salt)USGOV.jpg) e
<http://pt.wikipedia.org/wiki/Ficheiro:Sodium-chloride-3D-ionic.png>

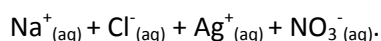
A dissolução, nesse caso, vai se dar, novamente, pela interação do solvente com o soluto, cloreto de sódio (NaCl), por meio dos dipolos: as moléculas de água orientarão a parte positiva de seu dipolo para os íons negativos (Cl^-), e a parte negativa para os íons positivos (Na^+). Parte de sua energia cinética será transferida aos íons, alguns vão se libertar da rede cristalina, serão cercados por moléculas de água com os dipolos devidamente orientados, e assim permanecerão em solução. A Figura 19 mostra o processo.

Outra representação do processo de dissolução do NaCl é:

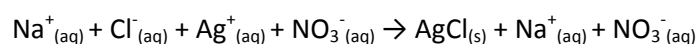


$\text{Na}^+_{(aq)}$ e $\text{Cl}^-_{(aq)}$ representam os íons solvatados. Assim, quando o NaCl em solução reage, são seus íons solvatados que estão na verdade reagindo! A dissolução do NaCl aqui discutida é representativa da dissolução de um sólido iônico (o NaCl, no caso), em um solvente polar (a água).

Vamos examinar agora a reação do cloreto de sódio (NaCl) com o nitrato de prata (AgNO_3), que também é um sólido iônico, que se dissolve bem em água. Primeiro, preparamos uma solução de NaCl, dissolvendo um pouco de cloreto de sódio sólido em água: $\text{NaCl}_{(aq)} \rightarrow \text{Na}^+_{(aq)} + \text{Cl}^-_{(aq)}$. Depois, preparamos uma solução de nitrato de prata, (AgNO_3), dissolvendo um pouco deste sal em água: $\text{AgNO}_{3(aq)} \rightarrow \text{Ag}^+_{(aq)} + \text{NO}_3^-_{(aq)}$. Ao misturarmos as duas soluções, teremos, por um breve momento, a seguinte situação:

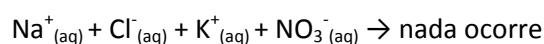


O que vai ocorrer? A formação de um sólido branco que, por análise, é determinado como AgCl! Todo o resto continua em solução:



Isto é, apenas os íons $\text{Ag}^+_{(\text{aq})}$ e o íon $\text{Cl}^-_{(\text{aq})}$ realmente reagiram, entre si, e os íons $\text{Na}^+_{(\text{aq})} + \text{NO}_3^-_{(\text{aq})}$ não reagiram, em absoluto. Eles são, por isso, chamados de íons espectadores. Assim, quando temos soluções iônicas, as espécies que reagem (ou não) são os íons. No caso, os íons $\text{Ag}^+_{(\text{aq})}$ e $\text{Cl}^-_{(\text{aq})}$ reagiram formando um composto (AgCl) que a água não consegue solubilizar, e por isso forma-se o sólido. Muitas vezes, quando soluções iônicas são misturadas, nada acontece, porque os íons não formam qualquer composto que a água não consiga solubilizar, pelo menos nas concentrações alcançadas.

É o caso, por exemplo, quando misturamos uma solução de NaNO_3 com uma solução de KCl , já que tanto o NaCl quanto o KNO_3 são bem solúveis em água: isto é, nenhuma associação dos íons existentes leva à formação de compostos insolúveis:



Haveria mais o que falar de soluções e solubilidade, mas não é objetivo do presente texto. Mais informações podem ser encontradas no texto "Solubilidade". O que quisemos abordar aqui são alguns aspectos das soluções que se relacionam com as reações químicas.

4) Reações químicas e energia

4.1) Entendendo a energia de ligação, para entender porque reações químicas podem liberar ou absorver calor.

Imagine um sistema formado por dois átomos de hidrogênio, inicialmente infinitamente afastados (Figura 11). Se estiverem infinitamente afastados não há interação, ou seja, não haverá entre eles nem forças de repulsão nem de atração, uma vez que você sabe que essas forças são inversamente proporcionais à distância. Nesta situação, vamos definir que o sistema tem energia potencial zero. Vamos agora aproximando esses dois átomos. À medida que isso acontece, a eletrosfera de um átomo (que é negativa), é atraída pelo núcleo do outro átomo, enquanto os núcleos e as eletrosferas dos dois átomos, respectivamente, se repelem. A resultante dessas interações, até certa distância entre os átomos, é uma atração. Como resultado desta atração, a energia potencial do sistema cai. Porém, se os átomos se aproximam demais, as forças repulsivas se tornam mais intensas, e a energia potencial do sistema aumenta. Assim, existe uma distância entre os dois átomos em que a energia potencial do sistema é mínima, e essa energia é chamada de energia de ligação. Por quê? Porque quebrar uma ligação equivale a afastar os átomos infinitamente entre si, e para que isso ocorra temos que dar exatamente aquela quantidade de energia que foi perdida pelo sistema, quando os átomos se

aproximaram. Ou seja, quebrar a ligação é fazer o caminho de volta. Quanto mais energia se precisa fornecer para quebrar uma ligação, maior é a energia desta ligação. Por outro lado, quando a ligação se forma, esta energia é liberada pelo sistema. Assim, temos: quebrar ligações químicas implica em dar energia para o sistema; formar ligações químicas implica em o sistema liberar energia.

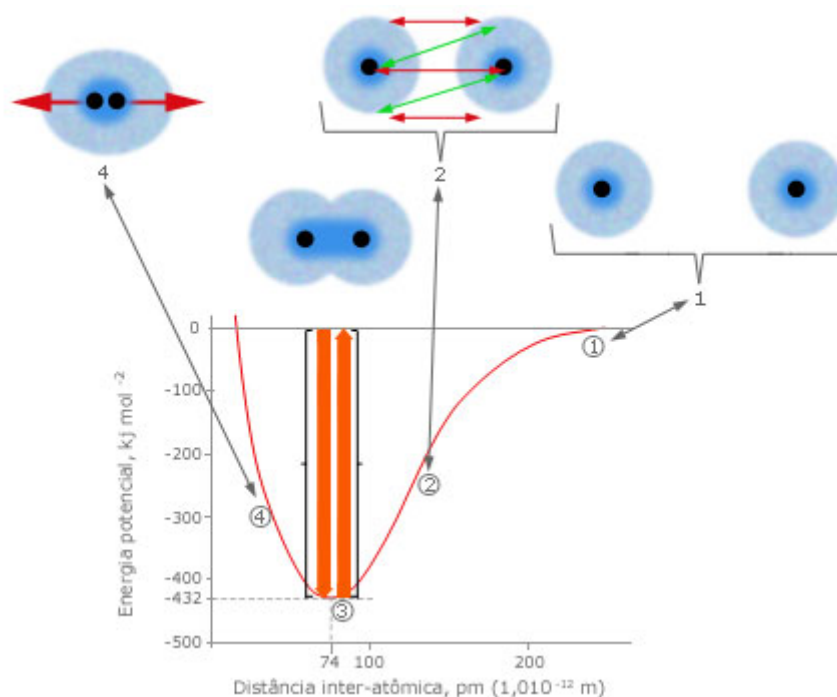


Figura 11: variação da energia potencial de um sistema formado por dois átomos de hidrogênio em função da distância entre eles: (1) os átomos estão a grande distância e não há praticamente interação (atração ou repulsão): a energia potencial do sistema é zero; (2) os átomos se aproximam e a resultante das forças de atração (em verde) e das forças de repulsão (em vermelho) é uma atração: a energia do potencial do sistema cai; (3) a uma certa distância entre eles, a atração alcança um máximo: a energia potencial do sistema alcança seu valor mínimo; (4) se os átomos são forçados a se aproximarem além desta distância, a energia potencial do sistema sobe, pois as forças de repulsão começam a aumentar mais intensamente que as de atração. O presente esquema vale para a formação de ligações entre quaisquer átomos.

4.2) Entendendo por que uma reação libera ou absorve energia

Agora podemos entender quando uma ligação libera energia: isso ocorre quando os reagentes têm ligações químicas mais fracas do que os produtos! O sistema vai precisar receber uma certa quantidade de energia para quebrar as ligações dos reagentes (a energia de ativação) mas, quando se formarem as ligações dos produtos, vai liberar mais energia do que recebeu! O resultado final será a liberação de energia pelo sistema. Um esquema do que ocorre está na Figura 12.



Figura 12: Variação da entalpia de um sistema contendo metano (CH_4) e oxigênio (O_2), que reagem entre si, formando gás carbônico (CO_2) e água (H_2O). O sistema, inicialmente, tem uma certa energia potencial (negativa), em função das ligações químicas existentes; uma fagulha ou descarga elétrica dá uma energia extra a algumas moléculas de reagentes, o que faz com que consigam então choques efetivos, isto é, choques que levem à quebra de suas ligações. Esta é a energia de ativação, E_a . Agora, novas ligações poderão se formar, levando à formação dos produtos cujas ligações são de maior energia. Há uma diferença (ΔH) de entalpia entre reagentes e produtos, que é o calor liberado na reação. Essas reações, em que ocorre liberação de calor, chamam-se exotérmicas. O próprio calor liberado na reação serve da energia de ativação para moléculas que ainda não reagiram, e a reação segue por si própria. Há algumas reações (espontâneas) nas quais os produtos têm energia de ligação mais fraca do que os reagentes; neste caso, há absorção de calor pelo sistema e as reações são chamadas de endotérmicas.

Um gráfico deste tipo também nos permite entender a ação dos catalisadores. Já vimos que os catalisadores facilitam o passo inicial das reações químicas, qual seja a quebra das ligações dos reagentes. O resultado disso é que, então, em um gráfico como o da Figura 2, a energia de ativação fica menor, tal como mostrado na Figura 13, para a situação II.

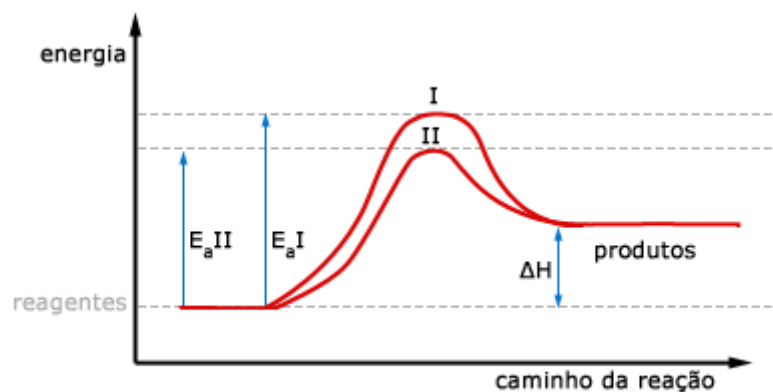


Figura 13: Situação de uma reação endotérmica, na ausência (I) e na presença de um catalisador. Em uma reação exotérmica, como a Fig 12, o catalisador tem o mesmo efeito, de baixar a energia de ativação. E_{aI} e E_{aII} são as energias de ativação sem e com catalisador.

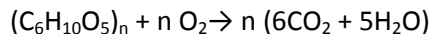
4.3) A combustão

Talvez a reação química mais fascinante ou mais carregada de simbolismo seja a combustão. O calor liberado na combustão serve, desde tempos imemoriais, para nos aquecer, para fabricar porcelanas, ligas metálicas, ou para cozinhar alimentos. Desde milênios nos reunimos em torno da fogueira, e podemos dizer que a combustão confunde-se com os primórdios da própria civilização. Vários materiais são combustíveis: a madeira, o papel, o petróleo e seus derivados, o carvão. Dizemos que vivemos na sociedade do petróleo mas, se formos olhar de outro modo, vivemos na sociedade da combustão: nos primórdios (e ainda hoje), queimamos madeira para nos tornar civilizados. O fogo permitiu que cozinássemos alimentos, fabricássemos as primeiras ligas, a porcelana e outros materiais, além de iluminar a noite. Hoje, queimamos combustíveis fósseis (carvão, petróleo e seus derivados) para manter nossa civilização. Queimamos para utilizar a energia liberada para aquecer residências nos países mais frios, para movermos nossos automóveis e caminhões e, na maioria dos países, para produzir eletricidade. O Brasil é uma das poucas exceções, pois aqui a maior parte da eletricidade, doméstica ou industrial, é produzida a partir de usinas hidrelétricas. Mas, nos outros países, especialmente nos países mais ricos, as usinas que produzem eletricidade são termoelétricas, ou seja, usinas que produzem eletricidade a partir da energia liberada da queima de combustíveis fósseis, principalmente carvão.

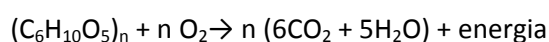
Vejamos um motor: ele move o automóvel que nos transporta ou o caminhão (ou o navio) usado no transporte de carga. Se você colocar um pouco de gasolina ou óleo diesel em um pires, e atear fogo (cuidado!) vai observar a queima do combustível. Há liberação de energia, na forma de calor e luz. Bem, um motor é uma máquina que consegue, de um modo muito bem bolado, utilizar esta mesma energia

para realizar movimento. Ou seja, o motor utiliza da energia liberada na combustão para produzir movimento, ou para, se quisermos ser mais exatos, realizar trabalho. Mas o motor não cria energia, apenas transforma uma forma de energia (calor liberado pela reação de combustão do combustível) em outro tipo de energia (energia cinética). Nenhum motor consegue aproveitar toda a energia liberada na combustão para realizar trabalho, uma parte sempre se perde na forma de calor. Isto é, nenhum motor tem 100% de rendimento. Mas, mesmo assim, ele tem um rendimento suficiente para que o mundo “ande” movido por motores a combustão.

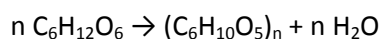
Muito se fala em formas alternativas de energia, do uso de energia solar, por exemplo. Mas, ironicamente, a energia liberada na combustão da gasolina ou do diesel é também, em última instância, energia solar. Como assim? Desde a formação do Sistema Solar, a Terra é continuamente irradiada pelo Sol. Chega até nós, todos os dias, uma enorme quantidade de energia vinda do Sol. Uma parte dessa energia (na verdade, uma fração bem pequena), é capturada pelas plantas que são capazes de realizar a fotossíntese. A fotossíntese é, na verdade, o contrário da reação de combustão. Na combustão da madeira, por exemplo, a celulose da madeira (cuja fórmula é mínima é $(C_6H_{10}O_5)_n$) reage com o oxigênio do ar (O_2) e se transforma em gás carbônico (CO_2) e água (H_2O):



Embora esta reação pareça complicada, ela se torna mais simples se lembrarmos que a celulose é um enorme polímero natural, formado por unidades de glicose ($C_6H_{12}O_6$), ligadas umas às outras. Ao ligarem-se umas às outras, há a perda de uma molécula de água, e assim a fórmula mínima da celulose é $(C_6H_{10}O_5)_n$, onde n significa que são muitas (n!) dessas unidades, conforme mostrado na Figura 23. Não se fixe muito no balanceamento da equação, apenas perceba que um composto carbônico complexo (a celulose), cheio de ligações carbono-carbono e carbono-hidrogênio, reagiu com o oxigênio (do ar, naturalmente), e se transformou em gás carbônico e água, liberando uma enorme quantidade de energia:



Na fotossíntese, temos a reação no sentido inverso, para o que vai ser necessária energia. Há a formação de glicose (o monômero), que depois vai ser usado para formar a celulose:



Essa energia, capturada pela clorofila, é fornecida pelo Sol, na forma de fótons (luz). Assim, quando queimamos madeira, estamos liberando a energia do Sol, capturada pelo processo de fotossíntese. Mesmo a energia que liberamos na queima de combustíveis fósseis (como o carvão e os derivados do petróleo) vem do Sol: você deve lembrar que o petróleo e o carvão foram formados a partir de material vivo, em épocas geologicamente muito antigas. Assim, toda (ou melhor, quase toda) a energia acumulada na Terra vem do Sol, direta ou indiretamente. São exceções a energia das marés (que vem da atração que a Lua exerce sobre a Terra) e a presença de elementos radioativos na crosta da Terra, que gera uma radioatividade natural que também ajuda a Terra a manter a sua temperatura atual.

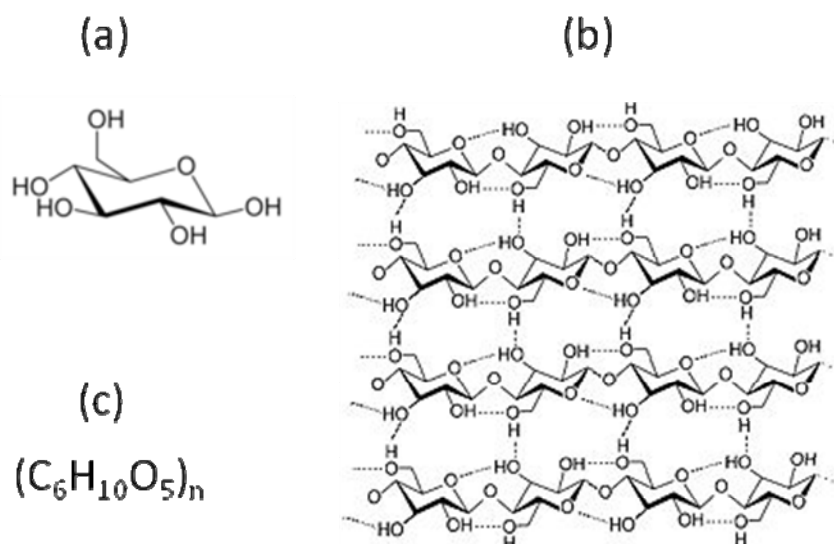
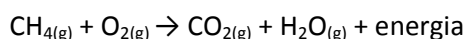


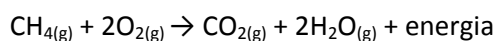
Figura 14: representações da celulose, mostrando (a) a glicose (b) cadeias com várias unidades de glicose interligadas e (c) a fórmula mínima da celulose.

4.5) Calculando a energia liberada ou absorvida em uma reação química.

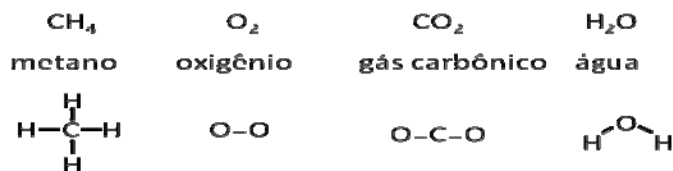
É possível medir, em laboratório, as energias de ligação, a partir da energia utilizada para quebrá-las. Desse modo, são disponíveis tabelas com estes valores, que podem ser utilizados para calcular a energia liberada ou absorvida por uma reação. Vamos examinar a reação de combustão do metano (CH₄), o mais simples hidrocarboneto:



O primeiro passo é equilibrar a reação, para que saibamos a proporção real dos reagentes e produtos em termos de número de mols:



Observando as fórmulas estruturais de cada uma das substâncias envolvidas, teremos:



Logo, do lado dos reagentes, temos quatro ligações C-H no metano e duas ligações O=O, uma em cada molécula de oxigênio; do lado dos produtos, temos duas ligações C=O (na molécula de gás carbônico) e quatro ligações O-H, duas em cada molécula de água. Olhemos agora a Tabela 2, com as energias de ligação:

Ligação	Energia (kJ mol ⁻¹)	Ligação	Energia (kJ mol ⁻¹)
H-H	436	C≡C	839
H-C	413	C-N	308
H-N	391	C-O	360
H-O	366	O-H	366
C-H	413	O=C	805
C-C	348	O-O	145
C=C	614	O=O	498

Tabela 2: Energias de ligação

Do lado dos reagentes, a energia total de ligação será $4 \times E_{C-H} + 2 \times E_{O=O}$. Do lado dos produtos, teremos: $2 \times E_{C=O} + 4 \times E_{O-H}$. Olhando na tabela os valores, teremos:

$$\text{Reagentes: } 4 \times E_{C-H} + 2 \times E_{O=O} = 4 \times 413 + 2 \times 498 = 1653 + 996 = 2649$$

$$\text{Produtos: } 2 \times E_{C=O} + 4 \times E_{O-H} = 2 \times 805 + 4 \times 366 = 1610 + 1464 = 3074$$

A diferença entre as energias de ligação entre produtos e reagentes é $3074 - 2649 = 425$. Isto significa que a queima completa de 1 mol de metano fornece 425 kJ, ou então, 425 kJ mol^{-1} . Voltando à Figura 12, este seria o valor de ΔH !

4.6) Entalpia e energia

Há certa confusão entre estes dois termos: em gráficos como o da Figuras 2, no eixo das ordenadas (eixo dos yy), ora aparece um, ora outro. Ora vemos ΔE , ora vemos ΔH . Vamos tentar aqui aclarar um pouco as coisas, embora não seja do nível deste texto uma discussão mais profunda. Imaginemos um gás perfeito, a zero Kelvin! Ele estará parado, ocupando um volume nulo. Se ele estivesse dentro de uma seringa cujo êmbolo deslizesse sem atrito, o êmbolo teria deslizado até a parede da seringa... Bem, vamos agora começar a aquecer este gás. Trata-se de um aquecimento em que todo o calor é transmitido ao gás, nada se perde. À medida que ele recebe calor, não só sua temperatura aumenta, mas ele também se expande, empurrando o êmbolo da seringa. Digamos que tudo isso se passe à pressão atmosférica, ou seja, sobre o êmbolo, atue a pressão atmosférica, e o gás, ao se expandir, tem que vencê-la. Assim, a energia transmitida pelo aquecimento ao gás é usada para duas coisas: aumentar

a temperatura do gás e fazê-lo expandir empurrando o êmbolo contra a pressão externa. Se o gás passa agora a ocupar um volume V (lembre-se que o volume original dele era zero), o trabalho realizado foi PV. Então, uma parte da energia dada realizou o trabalho PV, e a outra fez aumentar a energia interna do gás, ou seja, sua temperatura. Daí que todo o calor dado é a soma da energia associada ao aumento da temperatura do gás (E), com o trabalho realizado quando o gás se expandiu (PV). A esta soma, $E+PV$, chamamos de entalpia. Ela mede toda a energia recebida pelo sistema, para chegar ao estado de energia que chegou, tenha sido ela usada para aumentar a temperatura ou para realizar algum trabalho. De certo modo, é uma medida mais completa do estado de energia de um sistema, pois leva em consideração aquilo que foi gasto, ou recebido, pela realização de trabalho.

Uma vez que em muitas reações químicas há variação de volume entre produtos e reagentes, a entalpia deve ser usada na análise do sistema, pois ela leva em consideração as trocas de energia envolvidas nestas variações. Por exemplo, reação de decomposição do carbonato de cálcio:



Temos que a energia dada ao carbonato de cálcio, $\text{CaCO}_{3(s)}$, não foi usada apenas para quebrar ligações e liberar o CO_2 (veja que, como se trata de uma decomposição, energia foi dada ao sistema). Este CO_2 , uma vez liberado, tem que se expandir, e usa uma parte da energia dada ao sistema para realizar seu trabalho de expansão. Então, a variação de entalpia do sistema (ΔH), ou seja, a energia total dada ao sistema (o sistema, no caso, é o carbonato de cálcio sólido, $\text{CaCO}_{3(s)}$), incluirá a energia de ligação entre o CaO e o CO_2 , e o trabalho PV realizado pelo gás, contra a pressão externa P . No caso mais comum, a pressão externa, é a pressão atmosférica. Então, quando no laboratório, por exemplo, realizamos uma reação química em um béquer, e há liberação de gás, esse gás que vemos borbulhar está se expandindo, “empurrando” o ar à pressão atmosférica ao seu redor. Ou seja, trabalhando contra a pressão atmosférica. É o que acontece, por exemplo, quando uma pastilha de vitamina C reage em um copo com água. Uma situação em que a variação de entalpia iguala-se sempre à energia dada ao sistema, acontece quando a reação ocorre em volume constante. Nesse caso, a variação de volume é zero, o produto PV é zero, e a variação de entalpia é igual à energia repassada ao sistema. Seria o caso de aquecermos nosso carbonato de cálcio ($\text{CaCO}_{3(s)}$) em uma cápsula de aço, onde foi feito o vácuo, sem que o CO_2 pudesse aumentar o volume. Ou mesmo dissolver o comprimido de vitamina C em uma garrafa fechada. Naturalmente, a desvantagem de se trabalhar em volume constante é que a pressão aumenta (cada vez maior número de mols de gás, à medida que a reação procede), e aumentando a pressão o equilíbrio tende para o sentido oposto da reação (Lei de Le Chatelier), diminuindo o rendimento da reação.

4.7) Espontaneidade de uma reação química: entropia (ou seja, por que ocorrem reações endotérmicas)?

Usualmente, as reações químicas espontâneas são exotérmicas. Isto está de acordo com a observação que se faz na natureza de que transformações espontâneas são aquelas que vão do estado de maior energia para o de menor energia potencial. É o caso de uma bola descendo a ladeira: lá no alto, ela tinha maior energia potencial do que embaixo. Mas, em uma reação química, não é apenas a energia potencial que conta. Na verdade, em nenhuma transformação é só ela que conta. Há um outro fator: a entropia. Este não é um conceito simples, mas podemos discuti-lo qualitativamente como “grau de desordem”: quanto maior a desordem de um sistema, maior a sua entropia. Por exemplo, quando nosso sistema é sólido e ele passa para líquido, o grau de desordem aumenta: no sólido as moléculas estão ligadas umas às outras, formando sistemas ordenados, empacotados. Quando o sólido se liquefaz, a ordenação do sólido é perdida, as moléculas passam a estar mais livres para movimentarem-se em diferentes direções. Se continuamos aquecendo, e o líquido vaporiza-se, então a entropia do sistema ficará mais alta ainda, pois as moléculas de uma gás são quase totalmente livres para se movimentarem em qualquer direção. A água é um excelente exemplo. Veja na Figura 15 a água no estado sólido (gelo) apresenta uma estrutura bem organizada, com as moléculas de água ligadas uma às outras, em uma estrutura hexagonal. Isso acontece por um motivo que você já sabe: as moléculas de água são polares e formam pontes de hidrogênio. À medida em que a água vai resfriando, suas moléculas vão perdendo energia cinética, e as forças de atração entre elas vão dominando cada vez mais, até que, em uma dada temperatura (no ponto de fusão), elas se organizam definitivamente, em função das pontes de hidrogênio, formando a estrutura mostrada na Figura 15.

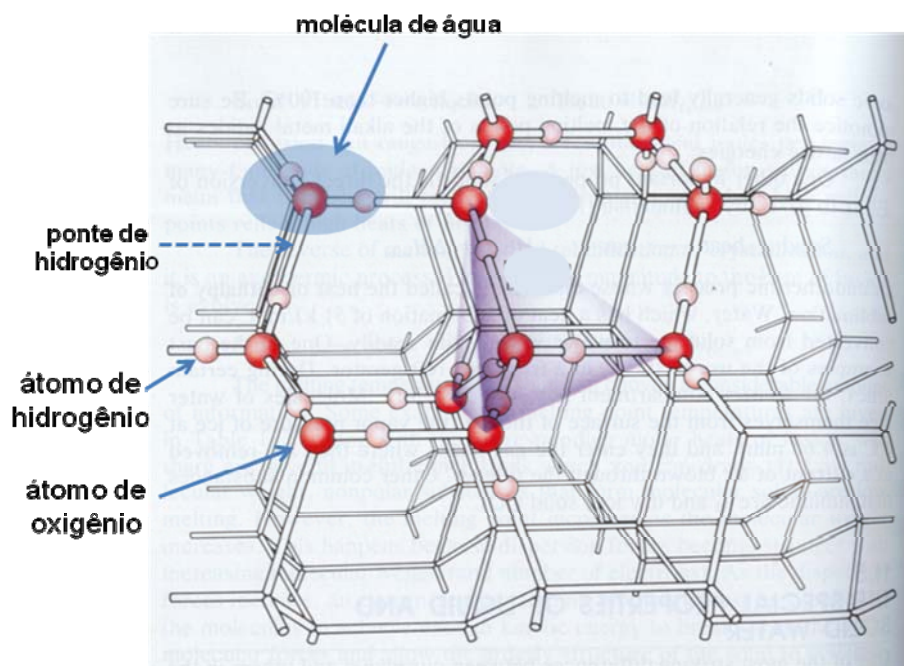
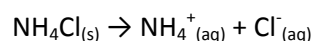


Figura 15: estrutura do gelo. Note que, ao alinharem-se em função das pontes de hidrogênio, as moléculas de água terminam formando uma estrutura com canais hexagonais, com bastante espaço no seu interior. Esses espaços vazios fazem com que a densidade do gelo seja menor do que a da água líquida, e o gelo flutua na água.

Já no estado líquido, essa estrutura não existe mais, as moléculas estão ligadas umas as outras sim, pelas forças intermoleculares, em cadeias de algumas moléculas, que se formam e desfazem continuamente, sem estrutura definida. Já no estado gasoso, as moléculas de água não guardam ligações entre si, movimentando-se livremente no espaço. Evidentemente, a desordem (ou seja, a entropia) do sistema aumenta, portanto, na medida em que passamos do estado sólido para o líquido e o gasoso. Agora, vejamos um processo simples de reproduzir no laboratório: a dissolução de um sal. Vamos dissolver o cloreto de amônio em água:



À medida que dissolvemos o sal, notamos que ele dissolve com facilidade (confirmando que é um processo espontâneo), mas a água (ou melhor, a solução) fica mais e mais fria. Ou seja, essa dissolução é um processo endotérmico! A temperatura da solução desce porque o processo, sendo endotérmico, retira calor da água. Mas, ao mesmo tempo, observe que a desordem (entropia) também aumenta, pois o grau de desordem do sal dissolvido é sempre maior que do sal sólido.

Assim, se no processo há absorção de calor, há também aumento de entropia e, neste caso, o aumento de entropia é suficiente para compensar o aumento de energia interna, ou de entalpia.

Então, podemos dizer que nas reações endotérmicas espontâneas, o aumento de energia ocasionado pela absorção de calor é compensado pelo aumento de entropia. É possível prever se uma reação ocorrerá ou não, fazendo-se uma análise da variação de entalpia e de entropia do sistema: se a reação é exotérmica e a entropia aumenta, a reação será espontânea. Se a reação é endotérmica e a entropia diminui, a reação não será espontânea. Se a reação é exotérmica, mas a entropia diminui, ou vice versa, aí dependerá do valor relativo da variação de uma e outra. Usualmente, nas reações químicas, as variações de entalpia envolvem uma quantidade de energia bem maior que a variação de entropia e, por isso, a variação de entalpia é, na maior parte dos casos, o fator determinante para definir a espontaneidade das reações. Por isso, a maioria das reações espontâneas são exotérmicas, e as reações endotérmicas, mais raras, são aquelas em que a variação de entalpia é relativamente pequena, ou seja, a quebra e formação de ligações envolvem ligações não muito fortes. Mas, cuidado, tal como já vimos, não podemos esquecer dos fatores que influem no equilíbrio, como pressão e temperatura, e assim, uma reação que é espontânea em um certo sentido numa dada pressão e temperatura, pode ser espontânea no sentido oposto em outra pressão e temperatura.

4.7) A entropia sempre aumenta

Talvez você já tenha escutado a frase “a entropia de Universo sempre aumenta”. Isso é verdade, e é uma formulação sintética do Segundo Princípio da Termodinâmica. Mas, se a entropia sempre aumenta, como pode haver reações onde a entropia diminui? Leia a frase com cuidado: a entropia que sempre aumenta é a do Universo, não a do sistema. Se analisarmos tudo, o sistema em estudo e as suas vizinhanças, veremos que, mesmo que a entropia do sistema em estudo diminua, o aumento de entropia nas vizinhanças compensa esta diminuição de entropia do sistema. Há inúmeros exemplos de processos espontâneos em que a entropia parece diminuir (ou seja, a ordem parece aumentar). A formação de gelo é um exemplo: é um processo espontâneo a 0 °C, e evidentemente as moléculas de água estão muito mais ordenadas na forma de gelo que na forma de água líquida. Mas, uma análise mais completa do processo, envolvendo não só o que ocorre com as moléculas de água, mostraria que o aumento da entropia das vizinhanças teria compensado a diminuição de entropia observada se considerarmos apenas o gelo formado.

Um exemplo mais radical são os seres vivos, que são sistemas altamente organizados. Como podemos relacionar a existência da vida com este aumento de entropia permanente? Um bebê que nasce é resultado da organização de inúmeras moléculas, ao longo dos nove meses de sua formação, formando células, tecidos, órgãos, etc. E todas estas moléculas estavam por aí, espalhadas, e foram, de uma forma

ou de outra, internalizadas pela mãe, na forma de alimento, formando o bebê. É como se tivéssemos realmente um quarto todo desordenado, e tivéssemos colocado, depois de um tempo, tudo no lugar.

Ora, evidentemente a ordem aumentou, ou seja, a entropia diminuiu. Mas, para arrumarmos o quarto, nós consumimos alimentos que estavam organizados em moléculas grandes (carboidratos, por exemplo, como o amido), e liberamos moléculas menores (CO_2 e H_2O), assim como calor. Ou, por este lado, a entropia aumenta. E, fazendo-se o balanço, o aumento da entropia é maior do que a sua diminuição. O mesmo acontece com o bebê: o organismo da mãe arruma as moléculas, formando o bebê. Mas a mãe precisa de energia para isso, que ela obtém dos alimentos e da respiração e, nesse processo, ela faz aumentar a entropia, e de novo, o balanço é tal que o aumento da entropia é maior do que a sua diminuição.

5) Voltando à estequiometria, em mais detalhes.

5.1) Entendendo as bases dos cálculos estequiométricos

Se existe uma coisa que caracteriza um Químico, esta é, certamente, sua capacidade de realizar cálculos estequiométricos. Os cálculos estequiométricos baseiam-se nas chamadas Leis Ponderais, sendo a primeira delas a Lei da Conservação da Massa, ou Lei de Lavoisier: em um sistema fechado, quaisquer que sejam as transformações químicas que tenham ocorrido, a massa do sistema permanece constante. Um sistema fechado é um sistema que não deixa entrar nem sair matéria. Então, o que a Lei de Lavoisier nos diz é que um dado conjunto de reagentes pode ser transformado em distintos produtos, mas a massa do sistema permanece a mesma, ou seja, a matéria se transforma, mas não é criada nem perdida. Embora essa lei hoje nos pareça evidente, nem sempre foi assim. Aliás, sua formulação foi uma verdadeira revolução na época, final do século XVIII. Lavoisier vivia em um mundo onde mesmo as pessoas instruídas acreditavam que a vida era criada por geração espontânea. Onde a saúde era consequência de equilíbrio de humores. Onde alguns ainda procuravam, seriamente, a transformação de chumbo em ouro. Era um mundo onde as pessoas tinham uma compreensão das coisas bem diferente da nossa. Tão diferente, que fica até difícil de imaginar. E nem tanto porque não havia telefone celular ou avião, mas porque a maneira de ver o mundo era diferente. Imagine-se, na época, dissolvendo um pedaço de metal em uma solução de ácido. O metal realmente parecia desaparecer. Ou queimando um pedaço de madeira. Como acreditar que a matéria não sumia, se sobravam apenas cinzas? Hoje sabemos que, na combustão, a matéria orgânica da madeira reagiu com o oxigênio e gerou gás carbônico e água. Mas, na época, era difícil acreditar que a madeira não havia simplesmente sumido..., pelo menos em parte. Ou seja, a experiência cotidiana dava a impressão que, em muitas transformações havia sumiço da matéria, enquanto em outras, formação. Apenas com experimentos cuidadosos, bem controlados, e após aprendermos a pesar os gases, foi possível determinar, com

clareza, que, em uma transformação química a massa é conservada, ou seja, a soma da massa dos reagentes é igual à soma da massa dos produtos.

Mais um outro aspecto importante nas transformações químicas era o da proporcionalidade das massas que reagiam. Esse conceito já estava claro, de algum modo, para as pessoas que trabalhavam com transformações químicas, fosse ele um fabricante de sabão ou um cozinheiro: para fazer uma determinada quantidade de um produto, precisava-se de certa quantidade de reagentes. Para se fazer o dobro da quantidade do mesmo produto, precisava-se do dobro dos reagentes. Assim, cozinheiros, fabricantes de sabão e outros práticos da química sabiam o quanto deviam misturar para obterem uma dada massa do produto desejado. E, se eram misturados dois reagentes, de nada adiantaria dobrar apenas a massa de um deles, pois ou o produto desandava, ou a massa total do produto era, no máximo, a mesma, e o que foi colocado a mais apenas sobrava. Entretanto, esta proporcionalidade, já conhecida na prática, foi estudada em detalhes por Richter (1762–1807), mais ou menos na mesma época em que Lavoisier fazia seus estudos, o que terminou fazendo com que a Lei das Proporções Constantes também ficasse conhecida como Lei de Richter. O que Richter enunciou é que se temos certa massa de substância A que reage com B, formando um produto C, para que A e B reajam entre si, sem sobrar nada, esta massa de A precisa de uma certa massa exata de B. Se dobrarmos a massa de A será também necessário o dobro de massa de B, para que toda a nova massa de A seja totalmente consumida. Na reação de neutralização completa do hidróxido de sódio (NaOH) pelo ácido sulfúrico (H_2SO_4), observa-se que 40 g de hidróxido de sódio precisam de 49 g de ácido sulfúrico. Se tivermos o dobro de hidróxido de sódio (80 g) vamos precisar do dobro de ácido sulfúrico (98 g). Ou seja, para a neutralização completa do hidróxido de sódio pelo ácido sulfúrico, eles devem estar presentes em uma proporção de massa de 40/49, isto é, uma proporção constante. Os químicos práticos há muito tempo sabiam disso e tinham, inclusive, tabelas com essas proporções, para poder calcular as quantidades que precisavam comprar de certos produtos necessários aos seus negócios.

Um outro aspecto da Química que foi ficando cada vez mais claro pelo trabalho de Lavoisier e outros, foi que a matéria era formada por certo número definido de elementos. O que seriam tais elementos? Podemos dizer que seriam formas básicas da matéria, irreduzíveis, ou seja, não poderiam ser decompostos em nada mais simples. Tomemos o peróxido de hidrogênio, por exemplo, que tem a fórmula H_2O_2 , e está presente na água oxigenada. É possível aquecê-lo, e obter água (H_2O) e oxigênio (O_2). Se submetermos a água à eletrólise, é possível decompô-la em hidrogênio (H_2) e oxigênio (O_2). A partir daí, nenhuma substância mais simples pode ser obtida por qualquer decomposição ulterior, sendo possível deduzir que tanto a água como a água oxigenada eram formadas pelas substâncias simples hidrogênio e oxigênio (na época, ainda não se desconfiava da existência das moléculas H_2 e O_2 , que só mais tarde foram inferidas). Essas substâncias simples, irreduzíveis a nada mais simples, seriam os elementos formadores de todas as formas de matéria, mais complexas. Esses elementos seriam, então, os constituintes básicos da matéria, não podendo se transformar nem sumir, para tudo estar de acordo

com a Lei da Conservação da Massa. Veja também que, ao admitirmos a existência de elementos, estas formas básicas de matéria, irreduzíveis a nada mais simples nem transformável um no outro, estamos, ao mesmo tempo, acabando com o sonho alquímico da transmutação dos elementos. Verifica-se, portanto, que era possível transformar uma substância em outra (peróxido de hidrogênio em água + oxigênio ou água em hidrogênio + oxigênio), mas não era possível transformar um elemento em outro (por exemplo, hidrogênio em oxigênio ou vice versa. Como ouro e chumbo eram ambas substâncias simples, não seria portanto possível transformar um no outro.

Logo, logo, um mestre escola (professor de nível médio) inglês, John Dalton, inferiu que a matéria era formada por átomos. Esses átomos seriam pequeníssimos e indestrutíveis, o que explicaria a Lei da Conservação da Massa: sendo a matéria formada por átomos, e sendo os átomos indestrutíveis, a matéria era indestrutível, apenas mudando de forma, por combinações específicas destes átomos. Mais ainda: os átomos de um mesmo elemento teriam uma mesma massa; massas iguais entre si, mas diferentes da massa de um outro elemento, e esses átomos seriam indivisíveis. E não poderiam se transformar um no outro. As transformações químicas envolveriam, então, a separação e a recombinação de átomos, transformando os reagentes em produtos pela recombinação dos átomos, mas com os átomos mantendo sua integridade. Assim, por exemplo, na reação do ferro com o enxofre, teríamos um átomo de ferro reagindo com um átomo de enxofre:

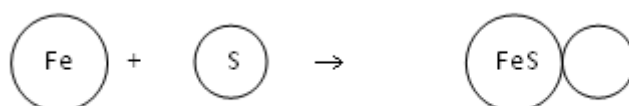


Figura 16

Digamos que a massa de um átomo de ferro fosse M_{Fe} e a massa de um átomo de enxofre, M_S . Agora, imaginemos muitos (n) átomos de ferro reagindo com muitos átomos de enxofre. Se temos n átomos de ferro, eles precisarão, evidentemente, de n átomos de enxofre:

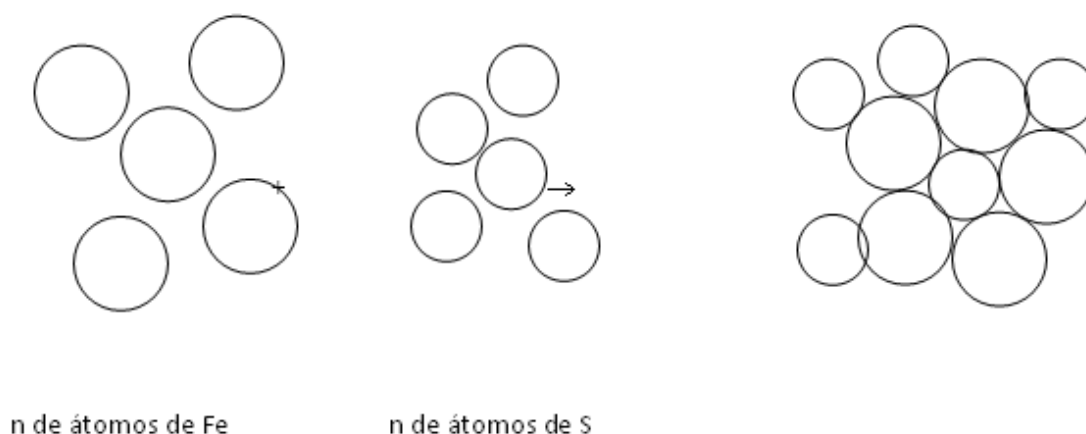


Figura 17

Se a massa de um átomo de ferro for M_{Fe} e a de um átomo de enxofre for M_S , n átomos de cada um pesarão, respectivamente, nM_{Fe} e nM_S . Veja, agora que a razão das massas de n átomos de ferro e enxofre que reagem entre si é nM_{Fe}/nM_S . Cortando n acima e abaixo na fração, teremos que a razão é M_{Fe}/M_S . Ou seja, a razão das massas que reagem entre si, aquelas que se pesam na balança do laboratório, é a própria razão da massa de cada átomo individualmente. Isto é, admitindo que átomos de um mesmo elemento tenham massas iguais entre si, e que são indivisíveis e indestrutíveis, podemos concluir que, numa reação química em que não sobre nenhum reagente, a proporção das massas dos reagentes é constante, igual à proporção das massas dos átomos (ou moléculas) que estão reagindo entre si. Deste modo, este modelo atômico (o de Dalton, com suas massas constantes para um mesmo elemento, indivisíveis e imutáveis) explica a proporção constante de massa nas reações químicas, e ao dizê-los indestrutíveis, explica-se a conservação de massa em uma reação química. Ou seja, é um modelo microscópico que explica fenômenos macroscópicos, as regularidades de massa em uma reação química.

Acontece que, apesar das substâncias reagirem em termos de átomos, as balanças não dizem, quando você deposita um pouco de ferro sobre ela, quantos átomos de ferro estão ali presentes. Muito menos para o enxofre. Então, como saber que quantidades certas a pesar, para fazer a reação na proporção certa? Ou, coloquemos o problema assim: que massa de enxofre deve ser misturada a uma dada massa de ferro, para que ambos reajam completamente, sem sobra de qualquer um deles? Esta é uma questão que, em princípio, só pode ser resolvida experimentalmente. Podemos começar por pesar muitas alíquotas de ferro, todas de, por exemplo, 10g, e adicionarmos massas crescentes de enxofre, a partir de 1 grama, de modo a vermos em que momento a quantidade de enxofre seria a certa. Note que, o raciocínio que vamos desenvolver aqui é o mesmo que já desenvolvemos no item 1.1, mas não custa repeti-lo, pois é um ponto central da nossa história. Se você entender bem o raciocínio desenvolvido

em torno da tabela 1, tudo aqui será fácil. Bem podemos tabelar os resultados encontrados, conforme mostrado na tabela 3:

Experimento	Antes da Reação		Depois da Reação		
	Massa de Ferro (g)	Massa de enxofre (g)	Massa de composto formado (g)	Massa de ferro que sobrou (g)	Massa de enxofre que sobrou (g)
1	10	1	2,75	8,25	-
2	10	2	5,5	6,50	-
3	10	3	8,25	4,75	-
4	10	4	11	3,00	-
5	10	5	13,75	1,25	-
6	10	6	15,7	-	0,3
7	10	7	15,7	-	1,3
8	10	8	15,7	-	2,3
9	10	9	15,7	-	3,3.
10	10	10	15,7	-	4,3

Tabela 3: resultados observados na reação entre o ferro e o enxofre

Em primeiro lugar, em qualquer um dos experimentos, as massas antes e depois da reação são iguais entre si (já tínhamos visto isto em relação à tabela 1). Veja também que a massa máxima de composto formado é 15,7 g, ou seja, não adianta ir aumentando apenas a massa de enxofre, pois há uma massa de enxofre capaz de consumir todo o ferro, a partir da qual não haverá formação de mais composto. Qual é esta massa? Deve ser uma massa entre 5 e 6 g, que é o intervalo onde começa a faltar ferro e sobrar enxofre. Tentemos o experimento 5: a massa de ferro é 10 g. A massa de enxofre colocada para reagir

foi de 5 g, e não sobrou nada. Então, todos os 5 g de enxofre reagiram; a massa de ferro colocada para reagir foi de 10 g, mas sobraram 1,25 g. Logo, a massa de ferro que realmente reagiu foi de $10 - 1,25 = 8,75$ g. Façamos o mesmo raciocínio no experimento 6: a massa de ferro colocada para reagir foi de 10 g, e não sobrou nada de ferro. Logo, todo esse ferro reagiu. A massa de enxofre colocada para reagir foi de 6 g, mas sobraram 0,3. Logo, a massa de enxofre que reagiu foi de $6 - 0,3 = 5,7$ g. Se fizermos esse mesmo raciocínio para cada um dos experimentos, teremos os resultados mostrados na tabela 4.

Experimento	Massa de ferro que realmente reagiu	Massa de enxofre que realmente reagiu	Razão entre as massa que realmente reagiram
1	$10,00 - 8,25 = 1,75$	$1,00 - 0 = 1,00$	$1,75/1,00 = 1,75$
2	$10,00 - 6,50 = 3,50$	$2,00 - 0,00 = 2,00$	$3,50/2,00 = 1,75$
3	$10,00 - 4,75 = 5,25$	$3,00 - 0,00 = 3,00$	$5,25/3,00 = 1,75$
4	$10,00 - 3,00 = 7,00$	$4,00 - 0,00 = 4,00$	$7,00/4,00 = 1,75$
5	$10,00 - 1,25 = 8,75$	$5,00 - 0,00 = 5,00$	$8,75/5,00 = 1,75$
6	$10,00 - 0 = 10,00$	$6,00 - 0,30 = 5,70$	$10,00/5,70 = 1,75$
7	$10,00 - 0 = 10,00$	$7,00 - 1,30 = 5,70$	$10,00/5,70 = 1,75$
8	$10,00 - 0 = 10,00$	$8,00 - 2,30 = 5,70$	$10,00/5,70 = 1,75$
9	$10,00 - 0 = 10,00$	$9,00 - 3,30 = 5,70$	$10,00/5,70 = 1,75$
10	$10,00 - 0 = 10,00$	$10,00 - 4,30 = 5,70$	$10,00/5,70 = 1,75$

Tabela 4: razões de massa observadas na reação entre o ferro e o enxofre

Fica claro que 10 g de ferro necessitam de 5,7 g de enxofre para reagirem por completo. Além disso, em todos os experimentos a razão entre as massas de ferro e de enxofre que efetivamente reagiram é de 1,75. E que razão é esta? É a razão entre a massa de 1 átomo de ferro e 1 átomo de enxofre

(considerando que 1 átomo de ferro reage com um átomo de enxofre). Quando pesamos 10 g de ferro, temos "n" átomos de ferro. Quando pesamos 5,70 g de enxofre, temos também n átomos de enxofre. Como a reação é 1 para 1, essas são as massas que se completam. E se tivéssemos 5,00 g de ferro? Ora, em 5,00 g, teríamos $n/2$ átomos de ferro, que precisariam de $n/2$ átomos de enxofre. E nós encontraríamos $n/2$ átomos de enxofre em $5,70/2=2,85$ g de enxofre. A razão entre as massas que reagem completamente continuaria sendo $5,00/2,85=1,75$. Bem, aí está a mesma razão, a razão constante, que é a razão das massas dos átomos que reagem entre si. Outra coisa que também fica clara no experimento descrito é que a massa de 1 átomo de ferro é 1,75 vezes maior que a massa de 1 átomo de enxofre, já que $M_{Fe}/M_S = 1,75$.

Mas o ferro não reage apenas com o enxofre. Ele reage com o oxigênio também, por exemplo. Se fizéssemos um experimento semelhante na reação entre o ferro e o oxigênio, também conseguiríamos achar a razão entre as massas de ferro e oxigênio que reagem entre si completamente, e esta seria, igualmente, a razão das massas dos átomos de ferro e de oxigênio, M_{Fe}/M_O , desde que um átomo de ferro estivesse reagindo com um átomo de enxofre. Se o experimento tivesse sido feito, o resultado encontrado teria sido $M_{Fe}/M_O=3,50$. Ora, sabendo esta relação, é possível tirar a razão entre as massas de enxofre e oxigênio:

$$M_{Fe}/M_S = 1,75 \rightarrow M_{Fe} = 1,75M_S;$$

$$M_{Fe}/M_O = 3,50 \rightarrow M_{Fe} = 3,50 M_O$$

Logo

$$1,75M_S = 3,50 M_O$$

$$M_S / M_O = 3,75 / 1,75 = 2$$

Assim, podemos dizer que a massa do átomo de ferro é 3,50 vezes maior do que o de oxigênio, e a do enxofre, duas vezes maior do que a do oxigênio. E, agora, podemos fazer previsões: por exemplo, qual seria a relação entre a massa de enxofre e a massa de oxigênio, se eles reagissem entre si em uma proporção 1:1: ($S + O \rightarrow SO$)? Seria a relação entre as massas de seus átomos, ou seja 2. E, realmente, é o que acontece. Se tivermos 10 g de enxofre, estes vão necessitar de 5 g de oxigênio para reagir completamente. Além disso, mudando-se as condições da reação, é possível fazer com que um átomo de enxofre reaja com dois átomos de oxigênio: $S + 2O \rightarrow SO_2$. Nesse caso, 10 g de enxofre necessitarão de 10 g de oxigênio, o dobro. Assim, se cuidadosamente formos fazendo experimentos deste tipo, reagindo elementos entre si, pesando as massas totalmente consumidas, achando as diversas razões de massa nas reações entre os elementos, poderemos construir uma tabela única, em que apareça a massa

relativa de todos os elementos, ou seja, qual o valor da massa do átomo de um elemento em relação à massa dos outros. No caso do nosso experimento com ferro, enxofre e oxigênio, se considerarmos a massa do oxigênio, o mais leve entre eles, igual a 1, a massa relativa do enxofre será 2 e a do ferro será 3,5. A tabela de massas atômicas que você conhece é exatamente uma tabela assim, que mostra as massas relativas dos elementos. A diferença é que o valor de referência, ao invés de ser a massa do oxigênio, é 1/12 da massa do carbono, mais exatamente, do isótopo 12 de carbono. Não vamos detalhar aqui a questão dos isótopos e como a existência deles afeta o cálculo da massa relativa. O importante é que você tenha entendido o conceito de massa relativa.

5.2) Realizando cálculos estequiométricos

Mas, qual era o nosso objetivo mesmo? Entender os cálculos estequiométricos e realizá-los! Para isso, vamos nos deslocar para um problema aparentemente infantil, mas que contém exatamente o conceito dos cálculos estequiométricos. Digamos que você descobriu uma fórmula única de um suco: ele é formado pelo sumo de 3 laranjas e pela polpa de 1 kiwi. O suco faz o maior sucesso na família. Aí, você resolve vendê-lo em uma carrocinha, e o suco continua fazendo o maior sucesso. Tanto sucesso, que você começa a vendê-lo em uma pequena lojinha de esquina. Cada freguês que chega, você pega 3 laranjas, espreme, descasca 1 kiwi, junta tudo no liquidificador, bate, e aí está. Às vezes, em dias de maior movimento, você chega a fazer dois, três, de uma vez, juntando para isso 6 (ou 9) laranjas, para 2 (ou 3) kiwis. Vinha tudo bem, até que você resolve industrializar seu suco (só você sabe a fórmula). E agora? Você terá de fazer centenas de litros. Será que você vai contar 3.000 laranjas, 1.000 kiwis para ter a mistura certa? E na hora de comprar laranjas e kiwis de seus fornecedores, vai também contar? Certamente que não! Você iria à falência gastando o tempo nesta contagem. Você iria pesar! Se o peso médio de uma laranja fosse 80 gramas e o do kiwi, 20, e você recebesse um caminhão com 120 kg de laranjas, qual a massa de kiwi que teria que misturar?

$$120 \text{ kg laranjas} = 120.000 \text{ gramas de laranjas} = 120.000/80 = 1.500 \text{ laranjas}$$

$$\text{Para o suco, 1 kiwi para 3 laranjas; logo, para 1.500 laranjas, } 1.500/3 = 500 \text{ kiwis}$$

$$1 \text{ kiwi pesa } 20 \text{ g; logo, } 500 \text{ pesarão } 500 \times 20 = 10.000 \text{ g, ou } 10 \text{ kg}$$

Ou seja, para 120 kg de laranjas, serão necessários 10 kg de kiwis. Veja como a razão entre as massas de laranjas e kiwis necessárias para fazer o suco é a mesma razão entre as massas de 3 laranjas (3×80) e da massa de 1 kiwi (20g): $120/10 = 3 \times 80/20$.

Uma maneira de esquematizar o cálculo acima é:

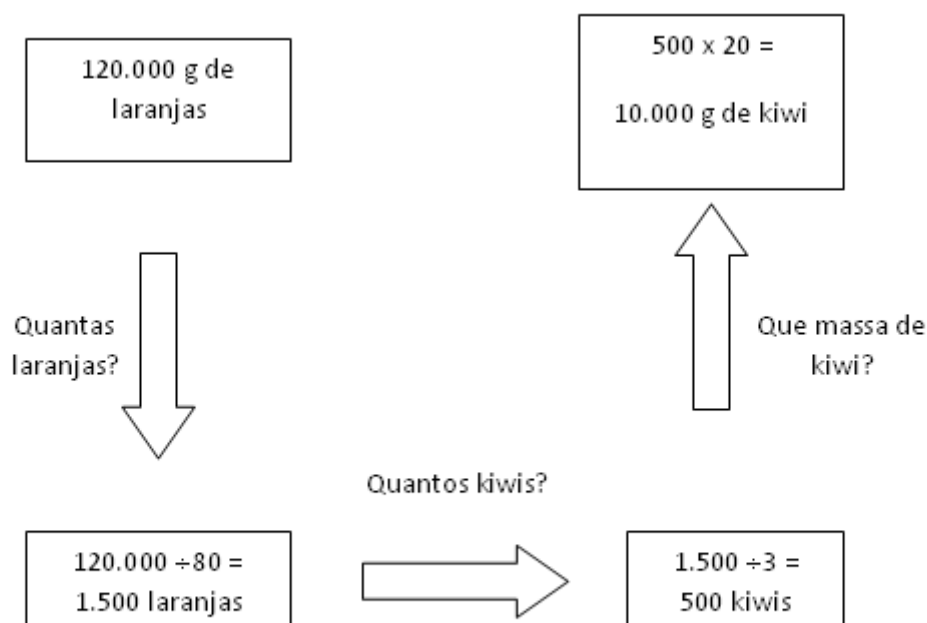


Figura 18

Observe que, na linha de cima, trabalhamos com massa; na linha de baixo, trabalhamos com unidades (número de laranjas e de kiwis); passamos da linha de cima para a de baixo, e vice-versa, porque conhecemos a massa de uma laranja e de um kiwi. Passamos de laranjas para kiwis, e, da esquerda para a direita, porque sabemos que para 3 laranjas, necessitamos de 1 kiwi (1 laranja + 3 kiwis).

Agora, imagine se você não dispusesse da massa exata de uma laranja, nem da massa exata de um kiwi, mas soubesse que uma laranja pesa quatro vezes mais do que um kiwi. Ou seja, numa escala relativa, em que o kiwi fosse 1, a laranja seria 4. Ou seja,

Nossa Escala de Pesos Relativos	
Kiwi	1
Laranja	4

Tabela 5

Será que, de posse desta escala, conseguiríamos fazer o mesmo cálculo?

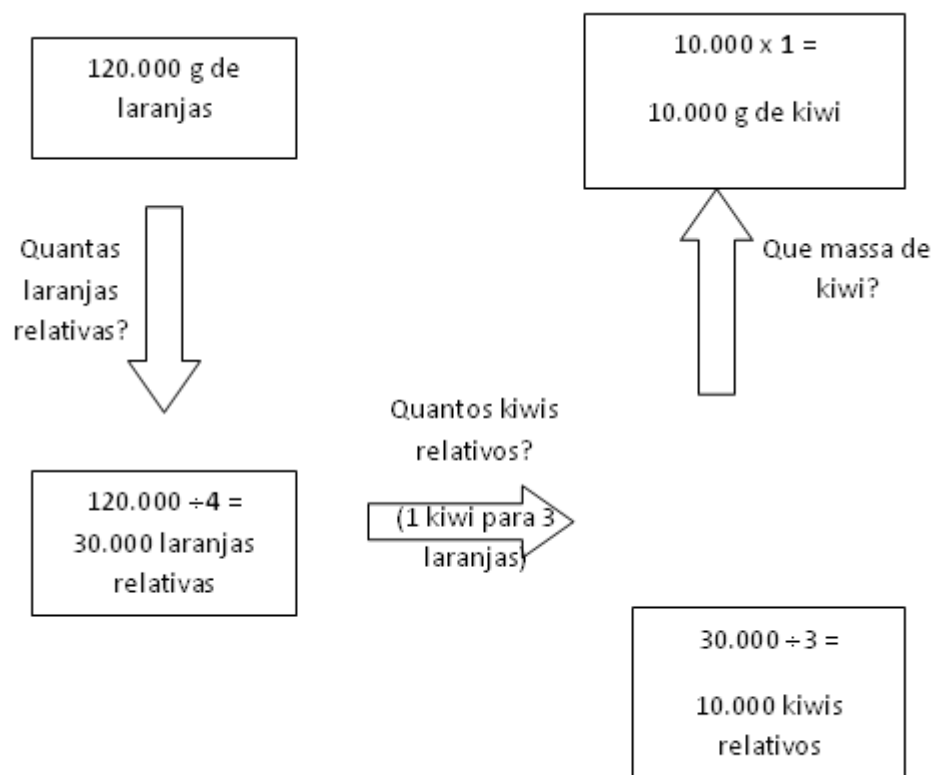


Figura 19

Marcamos em negrito os pesos relativos. Veja que não foi necessário saber a massa exata de 1 laranja e de 1 kiwi, mas apenas suas massas relativas, para encontrarmos a massa correta de kiwis a comprar. Bem, a analogia com o que ocorre em uma reação química é total. Poderíamos fazer exatamente o mesmo raciocínio para a reação do ferro com o enxofre. Lembre que na nossa escala relativa, o ferro valia 3,5, o enxofre, 2 e o oxigênio 1.

Veja que achamos exatamente o mesmo resultado. Para os cálculos estequiométricos, de uma maneira geral, ao invés de utilizarmos a tabela de massas relativas que construímos, utilizaremos a tabela de massas atômicas que, como já dissemos, foi construída de modo similar, apenas utilizando-se como referência (massa=1) 1/12 da massa do isótopo 12 de carbono.

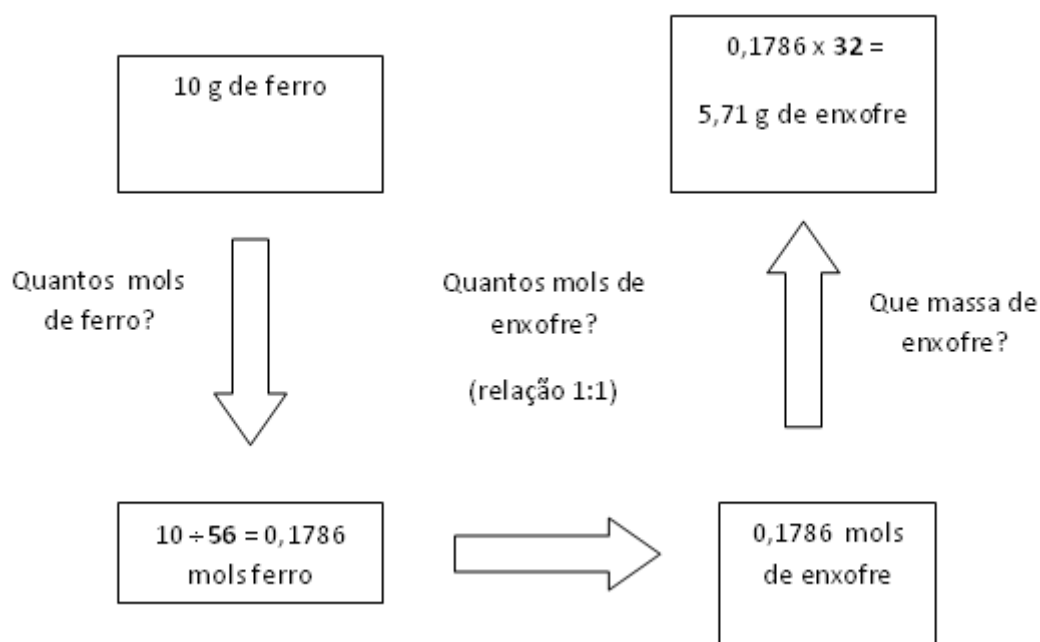
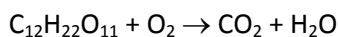


Figura 20

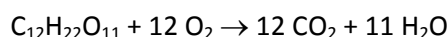
Achamos exatamente a mesma massa esperada. Há apenas uma nova terminologia, que é o número de mols. É como chamamos a razão entre a massa de uma substância e sua massa atômica relativa baseada no carbono 12. Qualquer que seja a reação química envolvida, a maneira de cálculo será a mesma: por exemplo, se quisermos saber qual a massa de oxigênio que nosso corpo necessita para consumir, por completo, 1 grama de sacarose?

Em primeiro lugar, é necessário conhecer a reação entre o oxigênio e a sacarose. Sabemos que é uma reação que leva à produção de CO_2 e H_2O :



Agora, é necessário equilibrar a equação, de modo que a lei de Lavoisier seja obedecida, ou seja, não desapareça nem se forme matéria, e os elementos não se transformem uns nos outros. Para isso, o mesmo número de átomos de um determinado elemento antes da reação tem que estar presente após a reação. A isso chamamos equilibrar a equação da reação química.

No caso, a reação equilibrada é:



Ou seja, cada molécula de sacarose precisa de 12 moléculas de oxigênio. A massa relativa da sacarose e do oxigênio são, respectivamente, $12 \times 12 + 22 \times 1 + 16 \times 11 = 342$ e $16 \times 2 = 32$. Agora, aplicando o mesmo raciocínio, teremos:

Ou seja, para retirarmos de 1 g de sacarose toda a energia possível, isto é, para consumi-la por completo, necessitaremos respirar 1,114 g de oxigênio. Se você quiser saber que volume de ar contém esta massa de oxigênio, lembre-se que $PV=nRT$ e que o ar contém cerca de 20% de oxigênio.

5.3) Estequiometria das soluções

Uma vez que muitas reações químicas importantes acontecem em solução, é importante também, fazer cálculos estequiométricos para estes casos. Aqui, mais uma vez, temos que as reações se dão entre moléculas ou íons. Mas, uma vez mais, não podemos pesar certo número de moléculas ou íons. Pesamos massa, normalmente em gramas. Ou seja, preparamos soluções dissolvendo certa quantidade de soluto em certa quantidade de solvente, de maneira que, em geral, as unidades de concentração se referem à relação entre a quantidade de soluto e o volume de **solução**. As unidades de concentração mais usuais são aquelas que se referem à (i) quantidade em gramas de soluto em cem mililitros de

solução (g/100 mL) conhecida como “porcentagem massa por volume ou % m/V”; (ii) quantidade em gramas de soluto em um litro de solução, conhecida como “concentração em título ou g/L ou g L⁻¹” e, ainda, (iii) quantidade em matéria de soluto (número de mols) em um litro de solução conhecida como “concentração em quantidade de matéria ou mol/L ou mol L⁻¹”.

Alguns pequenos exemplos de cálculo:

Qual a concentração de uma solução de NaCl, preparada pela dissolução de 10 g do sal em água e levada a 1 L de solução? Se falarmos em título (T), teremos $T = 10 \text{ g/L}$. Se falarmos em concentração em quantidade de matéria, teremos que calcular o número de mols existentes em dez g de NaCl, para o que basta dividir esta massa pelo valor de 1 mol, que no caso é $23+35,5=58,5 \text{ g}$. Então, o número de mols será $10 \text{ g} \div 58,5 \text{ g} = 0,171 \text{ mol}$. Assim, temos 0,171 mol de soluto dissolvidos em 1 L de solução, ou seja, a concentração da solução é $0,171 \text{ mol L}^{-1}$.

A concentração é, portanto, uma razão entre massa (que pode ser medida em gramas, ou em número de mols, por exemplo) e volume (que pode ser medido em litros, mililitros, etc).

Vejamos o diagrama adiante:

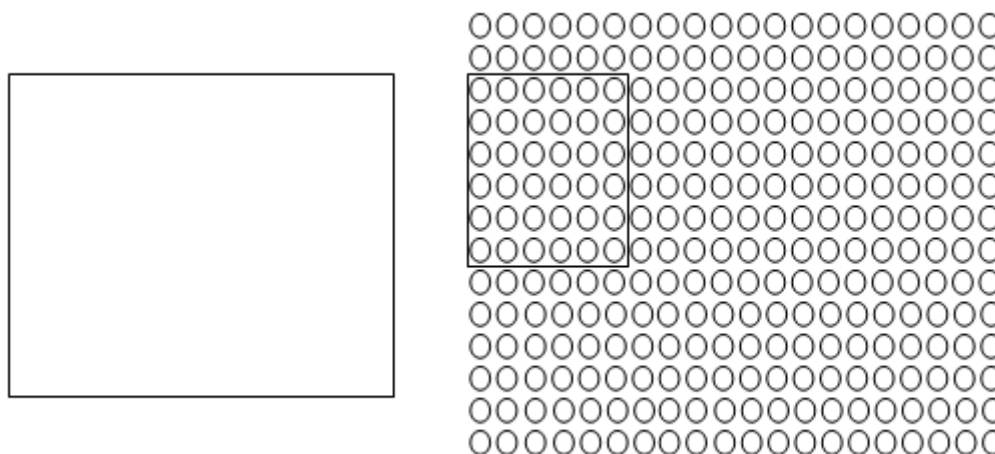


Figura 21

Neste diagrama, os círculos representam bolinhas esféricas, que podem ser pensadas como moléculas de um soluto. Em uma solução o soluto se distribui homogeneamente pela solução, tal como está no diagrama. Digamos que o quadrado à esquerda, no diagrama, tem um lado de 10 cm, de tal modo que um cubo desta dimensão equivale a 1 L ($10 \text{ cm} \times 10 \text{ cm} \times 10 \text{ cm} = 1000 \text{ cm}^3$). O quadrado à direita tem 20 cm de lado, e a mesma profundidade, 10 cm. Neste caso, o cubo terá um volume de $20 \times 20 \times 10 =$

4000 cm³ (4 L, isto é, quatro vezes mais). O desenho não está mostrado em profundidade, mas você pode imaginar os cubos, com bolinhas homogeneamente distribuídas para “trás”. Bem, quantas bolinhas (soluto) estão contidas em cada um dos cubos? Se você tiver paciência de contar, verá que há 36 bolinhas na superfície do primeiro cubo, e 144 na do segundo. Ambos os cubos terão um profundidade de 6 bolinhas, o que dá totais de 36 x 6 e 144 x 6 bolinhas respectivamente. Ou seja, o segundo cubo terá 4 vezes mais bolinhas. Ou ainda, para um volume 4 vezes maior, teremos 4 vezes mais bolinhas. Mas, a razão entre o número de bolinhas e o volume, nos dois casos, é a mesma: para 1000 cm³, tenho 36 x 6 = 216 bolinhas. A razão é 216/1000 = 0,216 bolinhas/cm³; já, para 4000 cm³, nos teríamos 144 x 6 = 864 bolinhas; a razão seria 864/4000 = 0,216 bolinhas/cm³. Isto é, a razão entre o número de bolinhas e o volume em que elas estão contidas é sempre a mesma. Veja que isso só faz sentido porque consideramos a distribuição de nossas bolinhas homogênea. Para uma solução, que é um sistema homogêneo, ou seja, onde o soluto está distribuído por igual na solução, vale o mesmo: a razão entre a massa de soluto e o volume de solução é a mesma, qualquer que seja o volume de solução que eu retire. Daí que a concentração de uma solução pode ser expressa por uma relação entre massa (g, mol) e volume (100 mL, L). Bem, essa é a idéia de concentração que, como já vimos, pode ser expressa como título (g L⁻¹), %m/v (g/100 mL) ou quantidade de matéria (mol L⁻¹). Agora, imagine um copo com uma solução de cloreto açúcar, que foi preparada pela dissolução de 10 g de açúcar em água, tendo sido o volume final levado a 100 mL. Sua concentração (em % m/v) será 10%. Se você pegar 50 mL desta mesma solução, sua concentração também será 10% m/v. O mesmo vai se dar com qualquer volume que você pegue desta solução. Mas, a massa de açúcar (o soluto) em da um dos casos, vai ser diferente: 10 g no caso do volume ter sido 100 mL, e 5 g, no caso do volume ter sido 50 mL. E, de novo, em ambas as situações a razão entre a massa e o volume é a mesma: 10/100 = 5/50! Isto significa que, dada uma solução, e conhecendo-se o seu volume, é possível calcular a massa do soluto. Exemplo: uma solução de açúcar em água tem concentração igual a 5% m/v (5g por 100 mL). Qual a massa de açúcar ingerida, caso se tome 20 mL desta solução? $5/100 = x/20$; $x = 1$ g!

Bem, indo agora para as reações em solução e sua estequiometria: qual a massa de oxigênio necessária para consumir a sacarose contida em um copo de água com açúcar? Sabe-se que a solução de açúcar em água foi preparada pela dissolução de duas colheres de sopa (50 g de açúcar) em água suficiente para o preparo de 500 mL de solução. O copo contém 200 mL da solução. Veja que a solução de partida tinha 50 g de sacarose em 500 mL de solução. O copo contém 200 mL da solução. Para calcular a massa de oxigênio a ser consumida, é necessário conhecer a massa de açúcar no copo de 200 mL. Como a distribuição do açúcar é homogênea, a relação entre massa e volume é a mesma. Uma vez, então, que a razão entre a massa e o volume é constante para uma dada solução, a massa em um dado volume pode ser achada por esta razão:

$$50 \text{ g} / 500\text{mL} = x \text{ g} / 200 \text{ mL}.$$

Daí, a massa de açúcar nos 200 mL (x) é dada por

$$x \text{ (g)} = 50 \cdot 200 / 500 = 20 \text{ g}$$

Sabendo a massa de sacarose, somos levados ao problema anterior, quando calculamos a massa de oxigênio necessária para “respirar” 1 g de oxigênio:

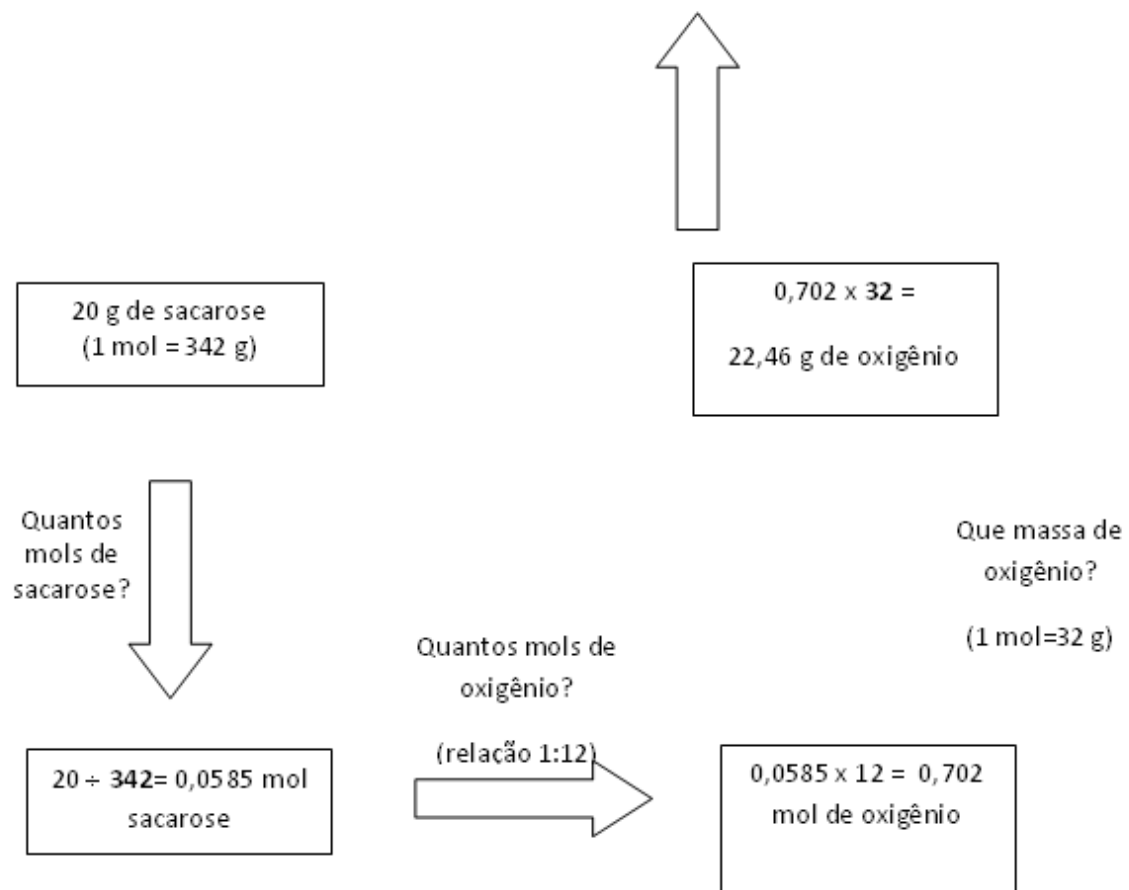


Figura 22

Podemos colocar todo o nosso raciocínio em um esquema só:

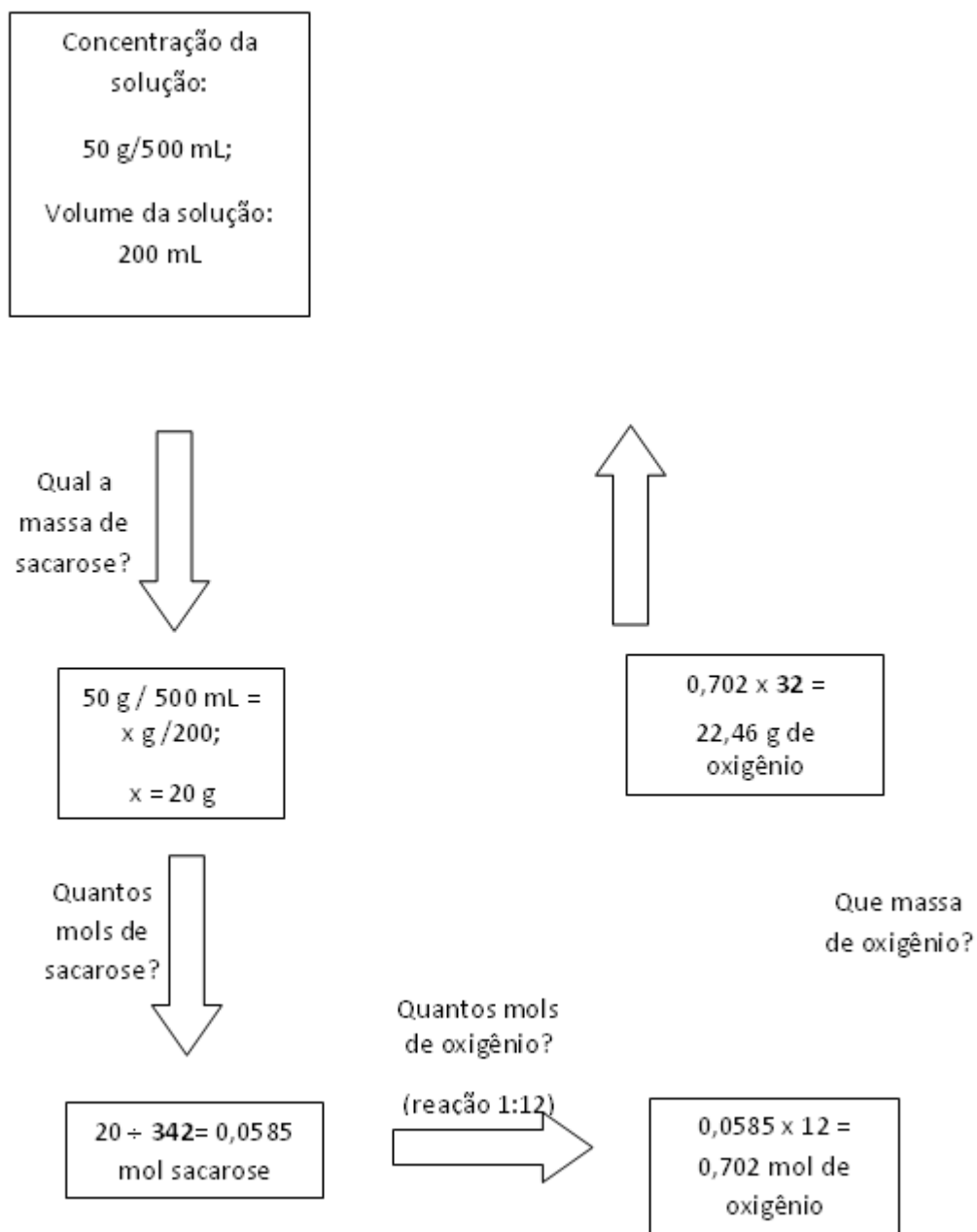


Figura 23

Veja que a concentração foi tratada como 50 g/500 mL. Mas, ela poderia ser dada como 10 g/100 mL, ou seja, 10% m/v (a razão é a mesma). Se o problema dissesse, então, que a concentração da solução era 10% m/v, teríamos o mesmo resultado para a massa de sacarose no copo:

$$10 \text{ g} / 100 \text{ mL} = x \text{ g} / 200 \text{ mL.}$$

$$x(\text{g}) = 10.200 / 100 = 20 \text{ g}$$

Ou seja, qualquer a unidade de concentração utilizada, o resultado é o mesmo.

Agora, veja o que ocorreria se a concentração da solução fosse dada em quantidade de matéria, ou seja, em mol por litro. Assim, digamos a solução fosse 0,2 mol L⁻¹:

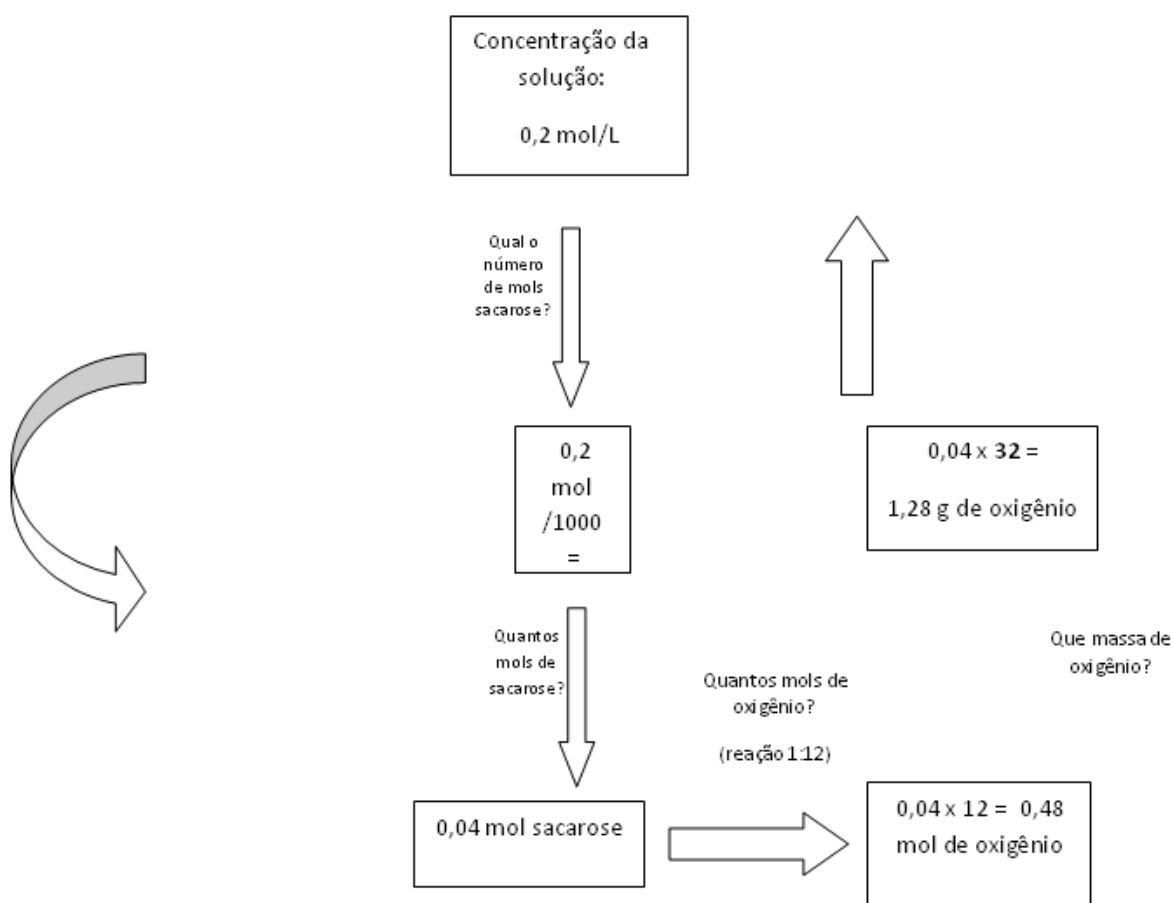


Figura 24

Veja que, quando a concentração é dada em mol por litro, é possível calcular, imediatamente, o número de mols em certo volume de solução, economizando uma etapa na solução do problema, conforme indicado pela seta. Ou seja, numa reação química, a relação entre produtos e reagentes é dada pela equação química balanceada, e esta dá a proporção correta entre os números de mols de produtos e reagentes. Assim, uma unidade de concentração em número de mols facilita o cálculo das quantidades envolvidas em uma reação química e, daí, a importância deste tipo de unidade de concentração. Veja que o que se mede em um laboratório é massa e volume. Assim, um esquema genérico para o cálculo estequiométrico, envolvendo soluções ou não, pode ser:

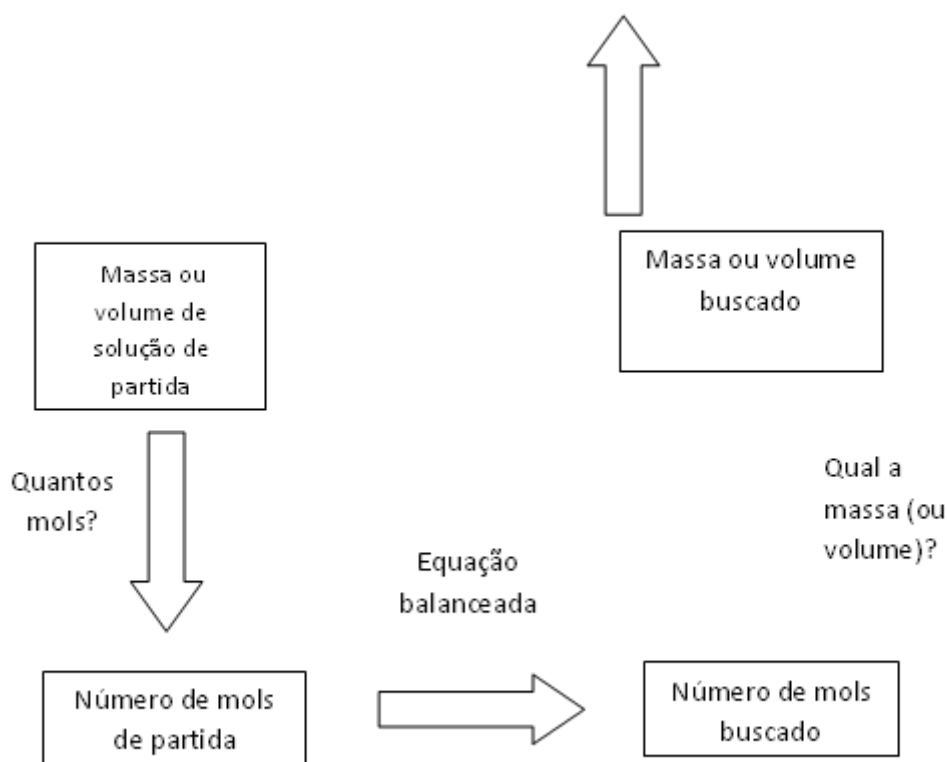
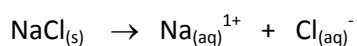


Figura 25

Convém ressaltar que, quando dissolvemos uma substância iônica, em realidade essa substância deixa de estar na sua forma original e o que se passa a ter no meio são os seus íons, sendo mais apropriado se referir às concentrações das espécies iônicas. Quando se dissolve, por exemplo, 1 mol de NaCl em água suficiente para o preparo de 1 L de solução, ocorre que 1 mol de NaCl se dissocia em 1 mol de Na^+ e 1 mol de Cl^- .



Dessa forma, quando se fala em $[\text{NaCl}] = 1 \text{ mol L}^{-1}$, deve-se entender que, em realidade, o que se tem é $[\text{Na}^+] = 1 \text{ mol L}^{-1}$ e $[\text{Cl}^-] = 1 \text{ mol L}^{-1}$.

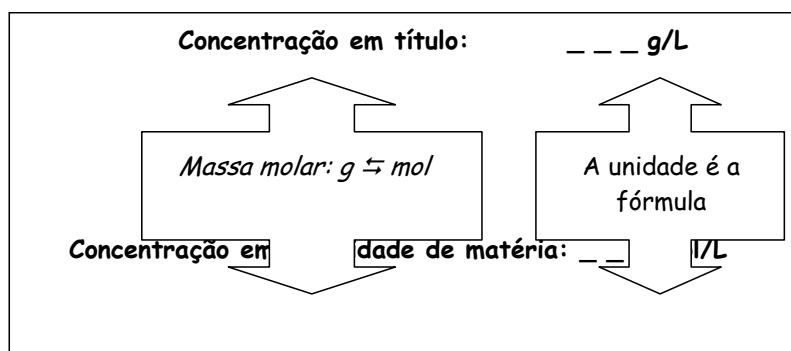


Figura 26

6) Ponto final (mas nem tanto)

Haveria ainda mais – muito mais – a falar das reações químicas. Na verdade, o que a Química, como ciência, busca, é exatamente entender as propriedades e as transformações da matéria, ou seja, entender exatamente por que e como acontecem as reações químicas. Reações químicas estas que estão se dando a toda hora, no seu corpo, no meio ambiente que nos cerca, nas indústrias (químicas ou não), na agricultura e tudo o mais. Por isso, para conhecer em detalhes tudo de reações químicas, você teria que estudar todas as áreas da Química, desde a Bioquímica, até a Físico-Química. O que procuramos mostrar aqui foi uma visão básica, o que é mais fundamental.

Muito conhecimento foi acumulado em muitos anos, para o qual contribuíram tanto as observações de homens práticos, que lidavam com reações químicas desde tempos imemoriais (fazer sabão, para ficarmos em uma só delas), como por homens de ciência, que conseguiram organizar este conhecimento e daí retirar alguns princípios comuns. Na sua tentativa de entender a natureza da matéria e de suas transformações, a Química tem uma ferramenta principal, que é a teoria atômico-molecular. Ela, junto com as leis da Termodinâmica, nos aponta o caminho a seguir, mas não dão necessariamente as respostas finais. Daí, ainda é necessário muito esforço e imaginação para prosseguir na busca do conhecimento químico.

Apresentamos aqui uma visão molecular das reações químicas, entendida em seu âmago como o encontro de moléculas (ou átomos), onde substâncias se transformam em outras porque os arranjos originais dos átomos são desfeitos, dando lugar a uma nova arrumação. Ou, em outras palavras, as ligações químicas das substâncias originais são desfeitas, dando lugar a novas ligações, das novas substâncias. Quais os limites dessa definição? Para a reação entre o nitrogênio (N_2) e o hidrogênio (H_2), formando amônia (NH_3), esta definição funciona bem, pois vemos claramente que as ligações existentes nas moléculas originais se desfazem (ligação tripla $N\equiv N$ entre os dois átomos de nitrogênio, no N_2 e ligações simples H-H no H_2), dando lugar a novas ligações, na amônia (3 ligações N-H, no NH_3). Uma vez que as novas substâncias têm novas propriedades (outra cor, outra densidade, outro estado físico, outro odor etc.), é possível, externamente, reconhecer uma reação química pela mudança de cor, pela liberação de gases, por novos cheiros, etc. Mas, como sempre, há fronteiras nebulosas. Veja a transformação do gelo em água. É classificada como um fenômeno físico, pois a integridade das ligações químicas da água é preservada. Mas, em verdade, há quebra de ligações, sim, ligações que prendem uma molécula de água a outra, no gelo, ligações intermoleculares, que no caso da água são chamadas de pontes de hidrogênio. E aí estas quebras de ligações intermoleculares podem ser relacionadas a uma reação química? Mais ainda: quando uma substância iônica se funde, as ligações eletrostáticas dos íons entre si são rompidas, e estas são ligações muito fortes e, ainda assim, o fenômeno é classificado de físico.

Olha, sabe de uma coisa? O melhor é ter em mente que todas as classificações são limitadas. Não devemos nos fixar demais nelas, pois você termina sempre encontrando ou uma exceção, ou um caso difícil de classificar. As classificações são feitas para nos ajudar a compreender a natureza, porque permitem que generalizemos alguns casos e não tenhamos que pensar caso a caso. Faz parte da natureza humana classificar e certamente há vantagens nisso, até evolutivas (fale com o seu professor de Biologia). Mas, se classificar é uma necessidade humana, isso não quer dizer que a natureza seja obrigada a seguir exatamente as classificações inventadas por nós. Por isso, não se ligue demais em classificar as coisas (fenômeno físico x fenômeno químico, por exemplo). Procure entender o fenômeno e, no caso da Química, entender os fenômenos pensando em termos de átomos e moléculas!

Referências

The Cartoon Guide to Chemistry, Larry Gonick and Craig Criddle, Harper Resource, First Edition 2005
New York.

[Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente - Peter Atkins e Loretta Jones. Bookman](#), terceira edição, 2006, S Paulo.