

A Redefinição do mol: avanços nas medições em química e biologia

Bruno Carius Garrido

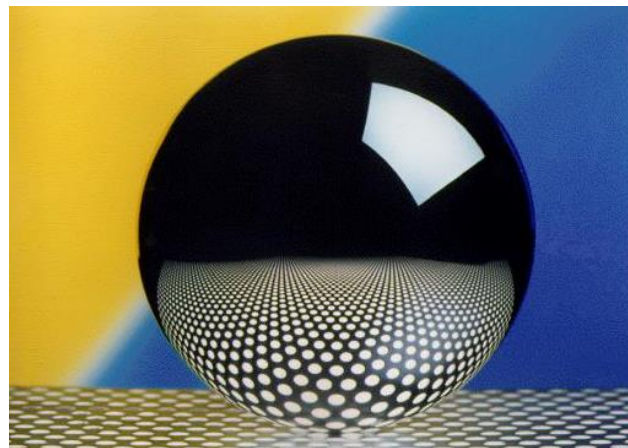
Chefe Substituto da Divisão de Metrologia Química e
Térmica (Dimqt)

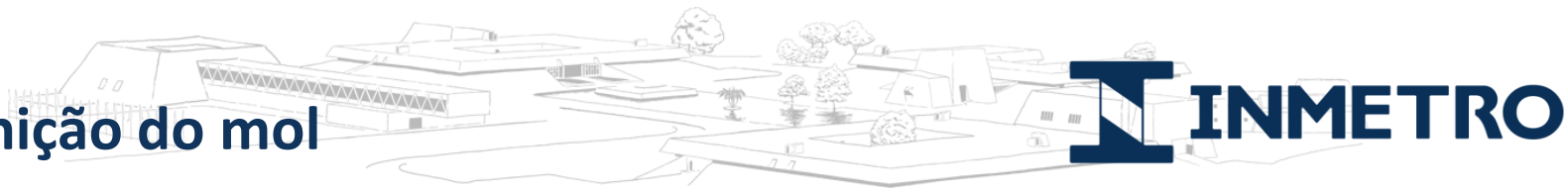


MINISTÉRIO DA
ECONOMIA

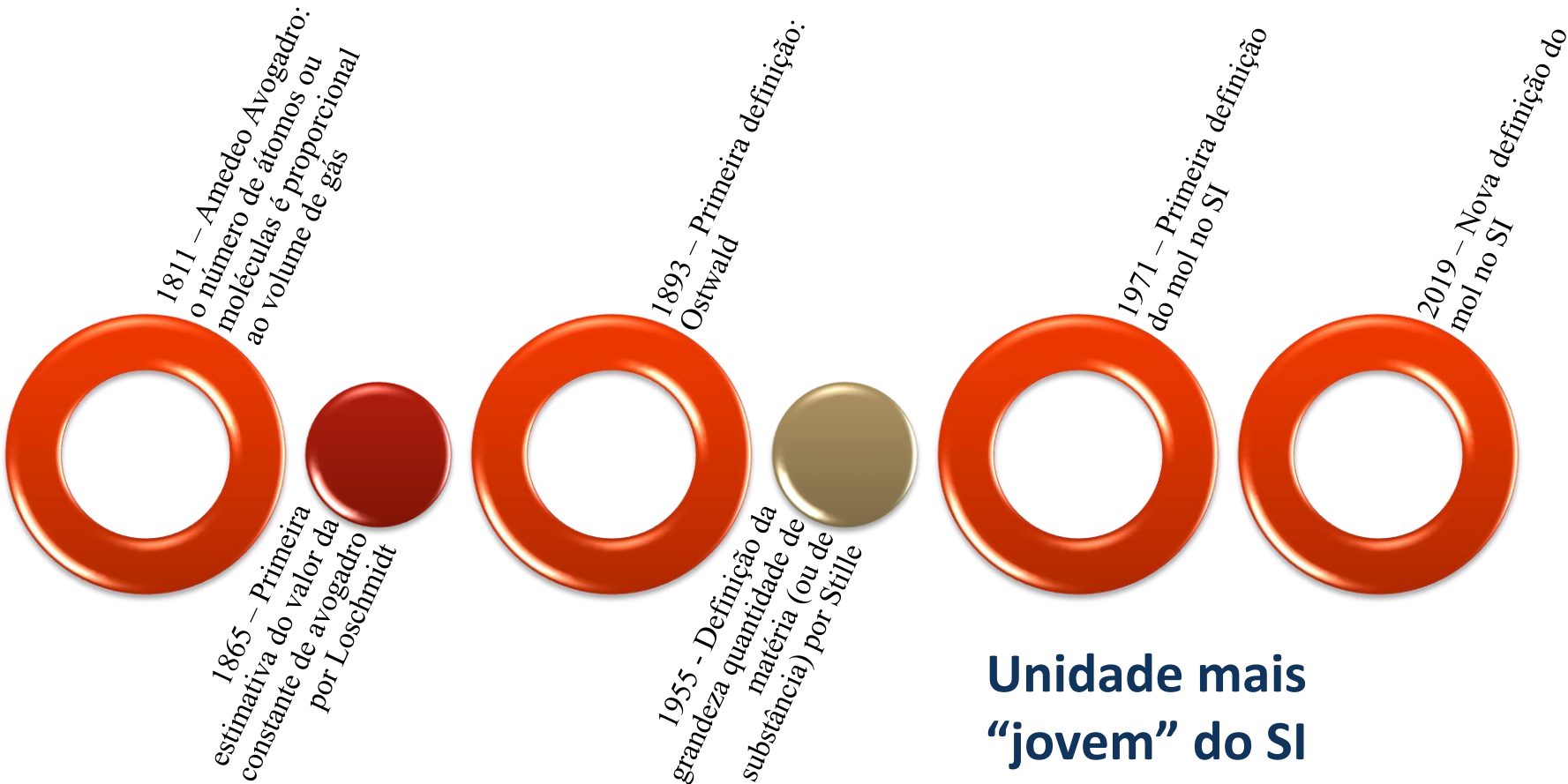


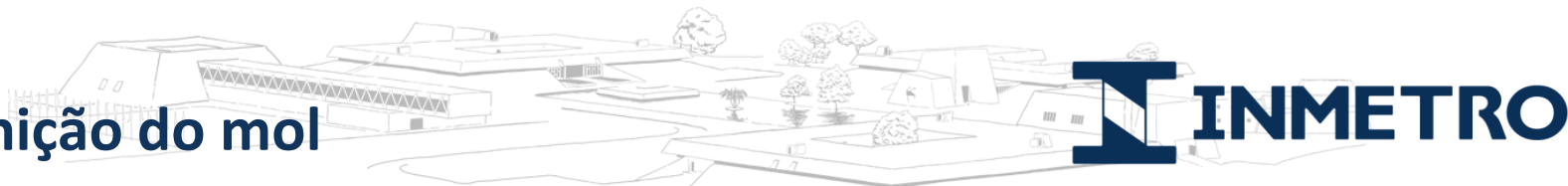
O mol – perspectiva histórica





O mol – perspectiva histórica





O mol – perspectiva histórica

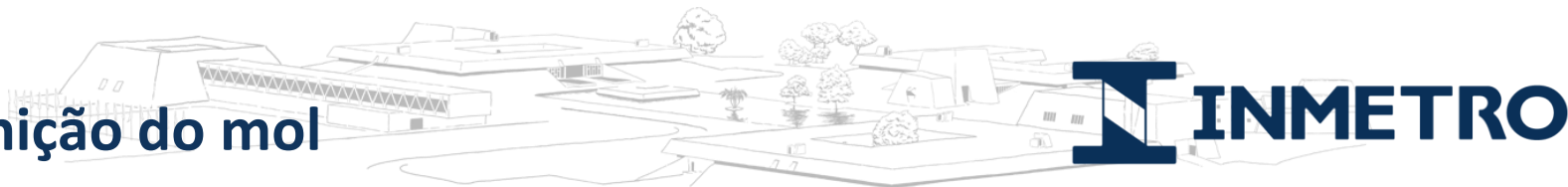
Definição de Ostwald (1893): *“permitamos de forma geral fazer referência à massa em gramas de uma substância que é numericamente igual ao peso molecular daquela substância como um mol”*



Definição “não atômica” do mol

Vantagens na época:

- Relação com o SI: kg
- Teve rápida aceitação global



O mol – perspectiva histórica

Stille (1955): “Primeiramente ele (o mol) é compreendido como uma massa química de acordo com a visão de Ostwald de um contínuo e tem um valor individual para cada tipo de molécula.

Outra forma de entender o “**mol**” é como o **número de átomos ou moléculas** contidos em um mol.”



“Se desejarmos encontrar uma descrição mais precisa, por exemplo pela introdução de uma grandeza de base “stoffmenge” (**quantidade de matéria**), o mol pode ser considerado como o valor numérico da quantidade de matéria.”

Redefinição do mol



O mol chegou ao SI apenas em 1971 como unidade base para a grandeza quantidade de matéria após “longas discussões entre físicos e químicos” com a seguinte definição:

Lors de la 14^e CGPM, en 1971, après de longues discussions entre physiciens et chimistes pour trouver une définition capable de satisfaire les deux communautés, la *mole* fut ajoutée au SI comme unité de base pour la quantité de matière, portant à sept au total le nombre d'unités de base du SI tel que nous le connaissons aujourd'hui.

(SI Brochure 8^e édition)

- 1. O mol é a quantidade de substância de um sistema que contém tantas entidades elementares quantos átomos existem em 0,012 kilograma de carbono 12; seu símbolo é “mol”.**
- 2. Quando se utiliza o mol, as entidades elementares devem ser especificadas, podendo ser átomos, moléculas, íons, elétrons, assim como outras partículas ou agrupamentos especificados de tais partículas.**

Nesta definição, entende-se que se faz referência aos átomos não ligados de carbono 12, em repouso e no seu estado fundamental.

Redefinição do mol



Essa definição é basicamente uma “atualização” da definição de Ostwald e 12 g de carbono 12 foram “*a massa em gramas de uma substância que é numericamente igual ao peso molecular daquela substância*”

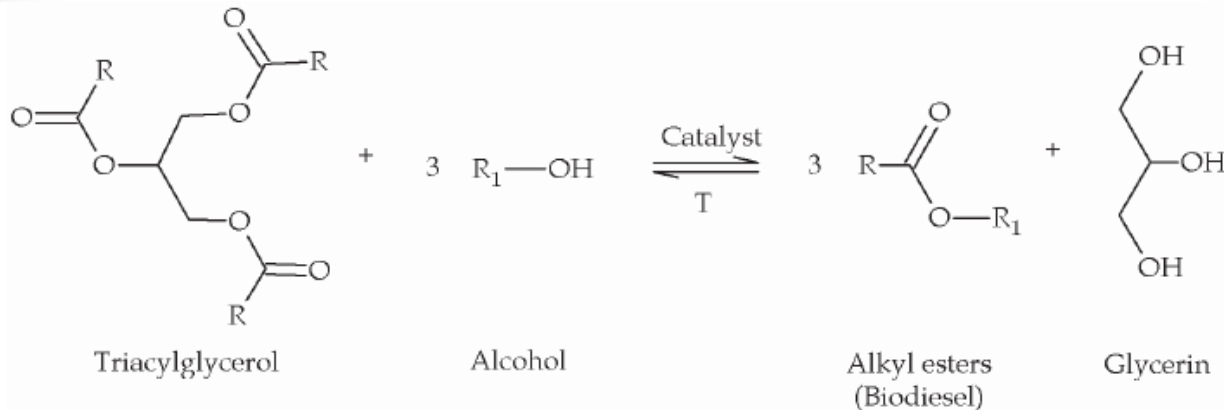
Mas a química não acontece em massa...



Reação de transesterificação de triacilglicerol para a formação de ésteres metílicos (Biodiesel)

Massas diferentes dependendo das cadeias de ácidos graxos presentes na estrutura

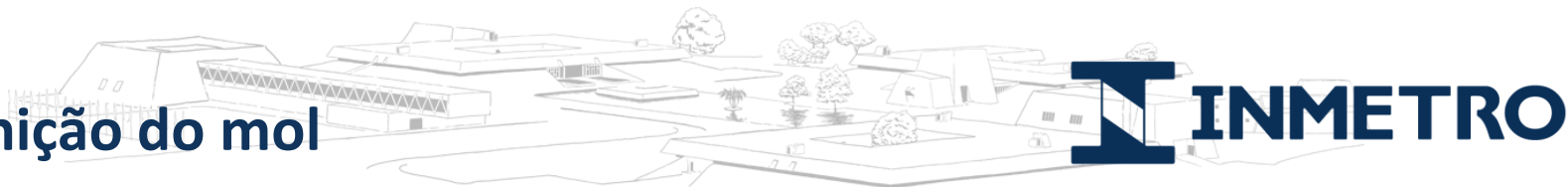
~~807,34 g (tripalmítico) + 96,12 g de metanol = 811,35 g 92,09 g~~



R, R₁: alkyl chain with different lengths and/or saturation degrees

1 mol (de qualquer TAG) + 3 mols de metanol = 3 mols de éster 1 mol de glicerol

Redefinição do mol



Essa definição é basicamente uma “atualização” da definição de Ostwald e 12 g de carbono 12 foram “a massa em gramas de uma substância que é numericamente igual ao peso molecular daquela substância”

Mas a química não acontece em massa...

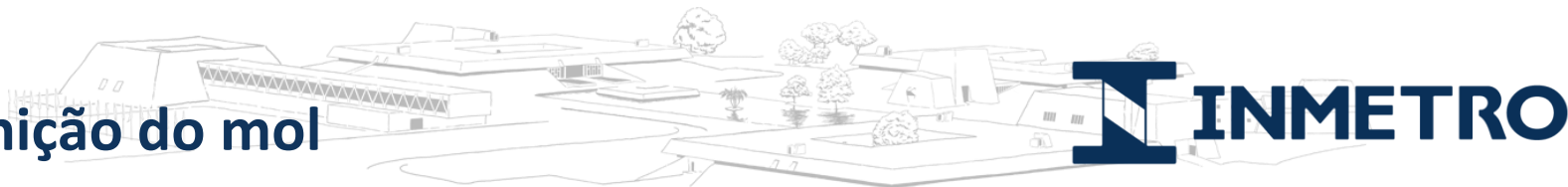
Outro problema: instabilidade do IPK afeta também o mol

Finalmente:

Nesta definição, entende-se que se faz referência aos átomos não ligados de carbono 12, em repouso e no seu estado fundamental.

Esse material não existe!!!





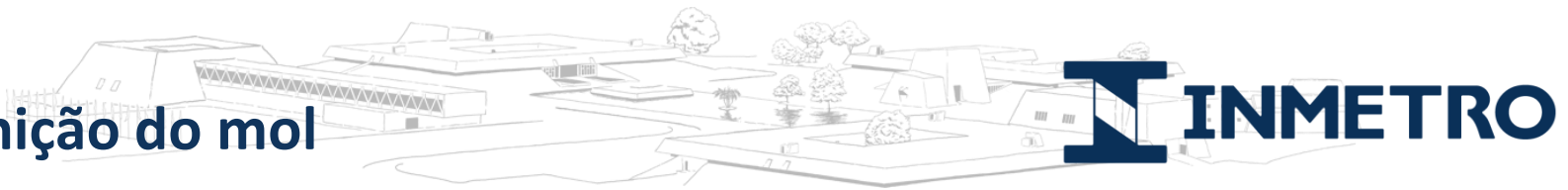
Tamanho incoerência da definição se reflete em termos didáticos:

Uma revisão de 18 livros de química geral para uso no primeiro ano da universidade de química (publicados entre 1989 – 2014)

- Quantidade de matéria no índice: **3/18**
- Quantidade de matéria corretamente explicada **4/18**
- N_A corretamente identificada como a constante de Avogadro com a unidade mol^{-1} **4/18**
- Definição do mol correta (SI) **0/18**
- Analogia explícita de N_A com uma **dúzia** **10/18**



Brynn Hibbert, President ACD
The position of the Analytical Chemistry Division
of IUPAC with some thoughts on 'teachability'



A revisão – anunciada em 2011 – Diretrizes:

- Fixar, sempre que possível, o valor das constantes fundamentais
- Definir as unidades com base nessas constantes
- Continuidade – não afetar as medições feitas pelo setor produtivo

No caso específico do mol:

A IUPAC foi ouvida com relação à organização didática da definição e clareza do texto



Definição do mol - 2019

O mol, símbolo mol, é a unidade do SI para quantidade de matéria. **Um mol contém exatamente $6,022\ 140\ 76 \times 10^{23}$ entidades elementares.** Esse número é o valor numérico fixo da constante de Avogadro N_A , quando expresso na unidade mol^{-1} e é chamado número de Avogadro.

Número de entidades

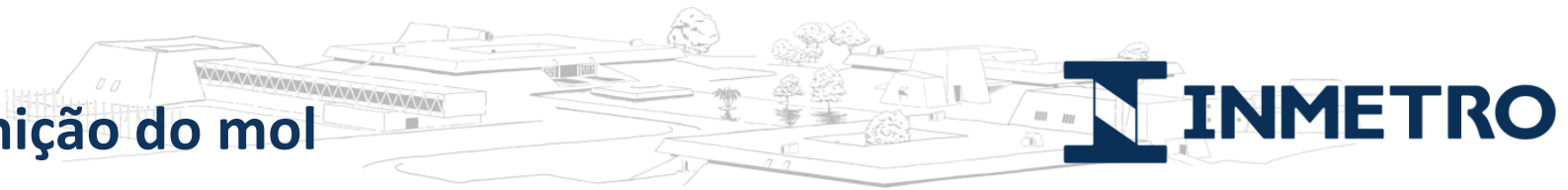
Constante de Avogadro

A quantidade de matéria, símbolo n , de um sistema é a medida do número de entidades elementares especificadas. Uma entidade elementar pode ser um átomo, uma molécula, um íon, um elétron, ou qualquer outra partícula ou grupo especificado de partículas.

Número de Avogadro

Quantidade de matéria

Redefinição do mol

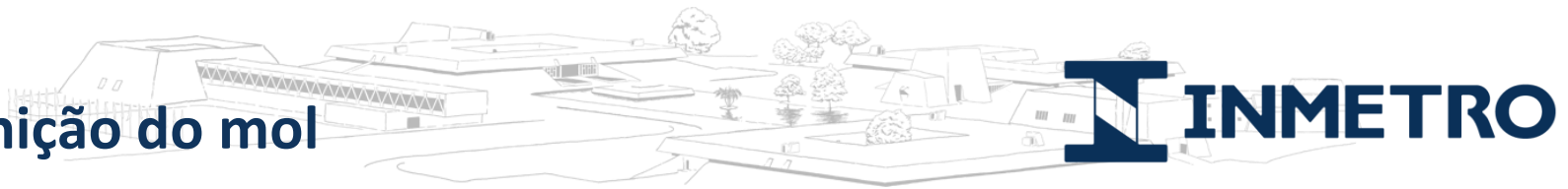


O mol, símbolo mol, é a unidade do SI para quantidade de matéria. Um mol contém exatamente $6,022\ 140\ 76 \times 10^{23}$ entidades elementares. Esse número é o valor numérico fixo da constante de Avogadro N_A , quando expresso na unidade mol^{-1} e é chamado número de Avogadro.

A quantidade de matéria, símbolo n, de um sistema é a medida do número de entidades elementares especificadas. Uma entidade elementar pode ser um átomo, uma molécula, um íon, um elétron, ou qualquer outra partícula ou grupo especificado de partículas.

Vantagens da nova definição:

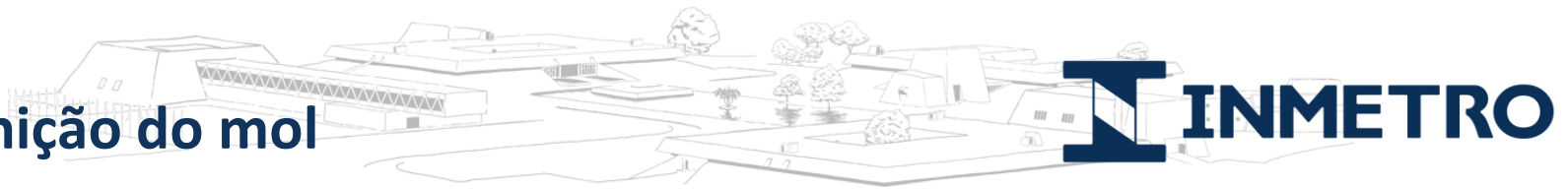
- Fica muito claro que o mol é uma **unidade de contagem** e não de massa
- Uso do termo genérico “entidades elementares” reforça que o primeiro passo em medições em química e biologia é a identificação



Implicação prática:

- Definição de 1971: peso atômico (ou molecular) em **Da** ou **u** é numericamente idêntico à massa molar em **g**.
- Definição de 2019: A constante que relaciona esses valores não é mais exatamente igual a 1, mas é próxima de 1 com uma diferença menor do que 1 parte em 10^9 .

CONTINUIDADE!!



Implicação prática 2:

Definição da IUPAC (*Gold Book*) sobre “entidade elementar”:

Qualquer objeto ou evento contável

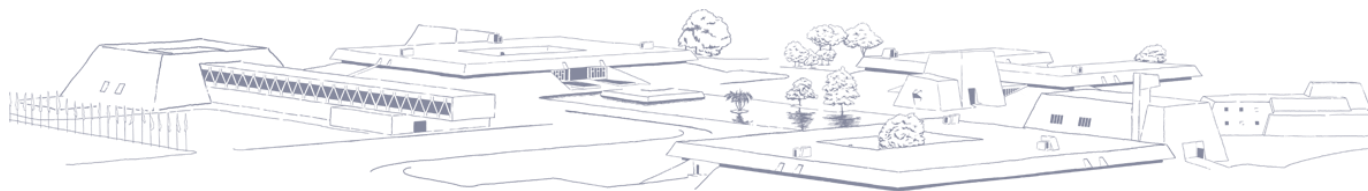
Potencialmente inclui: células, vírus, bactérias... Desde que sejam contáveis

Novas perspectivas para a rastreabilidade ao SI de medições em biologia

 **Ouvidoria:** 0800 285 1818

 inmetro.gov.br /  facebook.com/Inmetro

 youtube.com/tvinmetro /  twitter.com/Inmetro



MINISTÉRIO DA
ECONOMIA



PÁTRIA AMADA
BRASIL
GOVERNO FEDERAL