

Podstawowe pojęcia i prawa chemiczne, Obliczenia na podstawie wzorów chemicznych

1. Wielkości i jednostki stosowane do wyrażania ilości materii

1.1 Masa atomowa, cząsteczkowa, mol

Masa atomowa Atomy mają bardzo małe rozmiary i bardzo małe masy. Przykładem może być najlżejszy pierwiastek wodór, którego bezwzględna masa atomu wyrażona w kg ma wartość $- 1,67 \cdot 10^{-27}$ kg. Do wyznaczania tak małych mas nuklidów wykorzystuje się spektrometr masowy, który dokonuje pomiarów z trudno wyobrażalną precyzją rzędu 10 cyfr znaczących. Praktyczne posługiwanie się tak małymi bezwzględnymi wartościami mas atomów jest niedogodne, dlatego do określania mas atomów zdefiniowano wzorzec masy, którym jest *jednostka masy atomowej (u - unit)*.

Jednostka masy atomowej (u) jest równa 1/12 masy nuklidu $^{12}_6\text{C}$. Ponieważ masa atomu węgla wynosi odpowiednio $1,993 \cdot 10^{-26}$ kg, stąd $1u = 1/12 \text{ masy } ^{12}_6\text{C} = 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,6605 \cdot 10^{-24} \text{ g}$

Tutaj należy zwrócić uwagę na fakt, że odwrotnością jednostki masy atomowej jest *stała Avogadra*, czyli $6,02214 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Masy nuklidów wyrażone w atomowych jednostkach masy (u) nazywa się *względnymi masami atomowymi A_w* zwane też krótko *masami atomowymi*.

Praktycznie *masę atomową A_w* danego pierwiastka wyraża liczba określająca, ile razy masa atomu jest większa od 1/12 masy nuklidu $^{12}_6\text{C}$

$$\text{masa atomowa } A_w(u) = \frac{\text{masa atomu (kg)}}{1,66058 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}$$

Z podanej zależności wynika, że znając masę atomową pierwiastka można obliczyć masę jego atomu wyrażoną w kg.

$$m_a(\text{kg}) = A_w \cdot 1,6605 \cdot 10^{-27}$$

- **Przykład obliczenia masy atomu wapnia**
 $m_{\text{Ca}} = 40,08 \cdot 1,6605 \cdot 10^{-27} = 6,65 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$

Wartości mas atomowych A_w wyrażone w jednostkach mas atomowych (u) odczytujemy z układu okresowego pierwiastków

- **Przykład dla helu (He)**
Hel(He) - 4,003u.

Średnia masa atomowa Podane w układzie okresowym wartości mas atomowych są średnią wartością mas atomowych składu izotopowego naturalnych pierwiastków. Podaną wartość definiuje się jako **średnią masę atomową pierwiastków**, co zapisujemy wzorem.

$$A_{sr} = \frac{\sum p_i A_i}{100}$$

Symbole p_i i A_i oznaczają odpowiednio zawartość procentową i masę nuklidu i . Na przykład naturalny magnez składa się z mieszaniny trzech izotopów, tj. ^{24}Mg o masie atomowej $23,9850423 \text{ u}$ – 78,99%, ^{25}Mg o masie atomowej $24,9853874 \text{ u}$ – 10,00%, ^{26}Mg o masie atomowej $25,9825937 \text{ u}$ – 11,01%. Obliczona zgodnie z powyższym wzorem **średnia wartość masy atomowej wynosi – 24,305 u**.

Masa cząsteczkowa M_w - jest sumą **względnych mas atomowych** wszystkich atomów zgodnie ze wzorem sumarycznym jednostki danego związku chemicznego z uwzględnieniem indeksów przy symbolach pierwiastków

- **Przykład dla H_2SO_4**

2 atomy wodoru, jeden atom siarki, cztery atomy tlenu

$$M_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 2 \cdot 1,008 \text{ u} + 1 \cdot 32,06 \text{ u} + 4 \cdot 15,999 \text{ u} = 98,072 \text{ u}$$

Mol Ponieważ reakcje chemiczne przebiegają między atomami albo cząsteczkami, ale bada się je w skali makroskopowej, dlatego wprowadzono pojęcie **mola**.

Mol - określa liczbę atomów, cząsteczek, jonów, wolnych rodników, cząstek elementarnych lub grup atomów równą liczbie atomów zawartych w dokładnie **0,012 kg czystego nuklidu $^{12}_6\text{C}$** , czyli **$6,02214 \cdot 10^{23}$** .

- **Odpowiednio;**

w 1 molu węgla jest $6,02214 \cdot 10^{23}$ atomów węgla,

w 1 molu azotu N_2 jest $6,02214 \cdot 10^{23}$ cząsteczek azotu,

w 1 molu HCl jest $6,02214 \cdot 10^{23}$ atomów wodoru i $6,02214 \cdot 10^{23}$ atomów chloru

Liczba cząstek w molu, $6,02214 \cdot 10^{23}$, nazwano **stałą Avogadra**. Stała Avogadra N_A służy do przeliczania liczby cząstek na liczbę moli (i odwrotnie).

1.2 Masa molowa, objętość molowa

Masa 1 mola materii atomów lub cząsteczek nosi nazwę **masy molowej M ($\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$)**. **Wartość liczbowa masy molowej w $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ równa jest wartości liczbowej względnej masy atomowej pierwiastka lub względnej masy cząsteczkowej związku**.

$$M = A_w \quad M = M_w$$

- Przykład dla Mg

$$\text{Masa molowa magnezu } M(\text{Mg}) = 6,65 \cdot 10^{-23} \text{ g} \cdot 6,02214 \cdot 10^{23} = 40,08 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

gdzie: $6,65 \cdot 10^{-23} \text{ g}$ - masa atomu magnezu

Porównując otrzymaną wartość masy molowej z wartością liczbową umieszczoną w układzie okresowym, widzimy że co do wartości bezwzględnej są one równe i wynoszą 40,08.

- **Przykład obliczenia masy molowej dla $(\text{NH}_4)_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$**
zgodnie z napisanym wzorem chemicznym odczytujemy, że w 1 molu związku znajduje się;
 - 12 moli H
 - 6 moli C
 - 9 moli N
 - 1 mol Fe

odpowiednio obliczone masy pierwiastków wyniosą

- dla H - $12 \times 1,008 = 12,096$
- dla C - $6 \times 12,011 = 72,066$
- dla N - $9 \times 14,007 = 126,063$
- dla Fe - $1 \times 55,847 = 55,847$

Masa molowa związku $M((\text{NH}_4)_3[\text{Fe}(\text{CN})_6])$ jest sumą mas pierwiastków i wyniesie $266,070 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

Masa molowa obliczona na podstawie danych z układu okresowego nosi nazwę *średniej masy molowej*, ponieważ wartości mas atomowych umieszczone w układzie okresowym są *średnimi masami atomowymi*.

Objętość molowa V_m - określa objętość jednego mola gazu dowolnej substancji w warunkach normalnych i wynosi ona **$22,4 \text{ dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$**

- **Przykład**
1 mol NO , Cl_2 , N_2 , O_2 , H_2 , SO_3 , HCl , itd zajmują objętość w warunkach normalnych $22,4 \text{ dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

Zależność między objętością molową, masą molową i gęstością d określa równanie

$$V_m = M/d$$

Znajomość definicji objętości molowej pozwala nam na przeliczanie dla gazów, jednostek masy, ilości atomów, cząsteczek, moli na zajmowaną objętość i odwrotnie. Przy przekształceniach układa się równania na proporcję.

- **Przykład 1**
Ile cząsteczek tlenku węgla CO zawiera 448 cm^3 tego gazu w warunkach normalnych i jaka jest jego masa.

$$\begin{aligned} 1 \text{ mol CO} &- 22,4 \text{ dm}^3 \\ n \text{ moli CO} &- 448 \text{ cm}^3 \end{aligned}$$

$$n = 448 \text{ cm}^3 \times 1 \text{ mol} / 22,4 \text{ dm}^3 = 0,448 \text{ dm}^3 \times 1 \text{ mol} / 22,4 \text{ dm}^3 = 0,020 \text{ mola}$$

Ponieważ 1 mol zawiera $6,02214 \cdot 10^{23}$ cząsteczek, a więc w 0,020 mola tlenku węgla znajduje się

$$0,020 \text{ mola} \times 6,02214 \cdot 10^{23} \text{ cząsteczek/mol} = 1,20 \cdot 10^{23} \text{ cząsteczek}$$

Odpowiedź W warunkach normalnych 448 cm^3 CO zawiera $1,20 \cdot 10^{23}$ cząsteczek

Odpowiednio masa CO wyniesie

1 mol CO - 28 g/mol

0,02 mola - x g

$x = 0,02 \text{ mola} \times 28 \text{ g/mol} / 1 \text{ mol} = 0,56 \text{ g CO}$

Odpowiedź 448 cm³ CO ma masę 0,56 g

• **Przykład 2**

Jaką objętość zajmuje 56 g azotu N₂ oraz ile cząsteczek azotu znajduje się w tej ilości azotu.

Obliczamy masę molową azotu M(N₂)

$M(N_2) = 2 \times 14 \text{ g/mol} = 28 \text{ g/mol}$

1 mol N₂ - 28 g/mol

n moli N₂ - 56 g

$n = 1 \text{ mol N}_2 \times 56 \text{ g} / 28 \text{ g/mol} = 2 \text{ mole}$

1 mol N₂ - 22,4 dm³

2 mole N₂ - x dm³

$x = 2 \text{ mole N}_2 \times 22,4 \text{ dm}^3 / 1 \text{ mol N}_2 = 44,8 \text{ dm}^3$

Odpowiedź 56 g azotu N₂ zajmuje objętość 44,8 dm³

Ilość cząsteczek obliczmy

1 mol N₂ - 6,02214*10²³ cząsteczek/mol

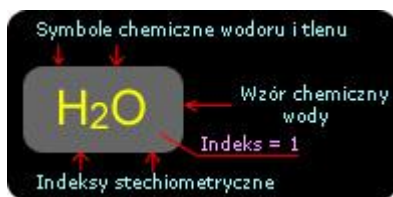
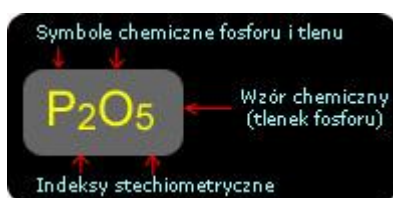
2 mole N₂ - x cząsteczek

$x = 12,04428 \times 10^{23} \text{ cząsteczek}$

Odpowiedź 56 g azotu zawiera 12,04428*10²³ cząsteczek

2. Obliczenia na podstawie wzorów chemicznych

Wzór chemiczny cząstki podaje jej skład a symbole chemiczne we wzorze mówią nam, jakie pierwiastki zawiera cząsteczka, a prawe dolne indeksy przy symbolach określają liczby atomów poszczególnych pierwiastków w cząsteczce.



Dolne wskaźniki (indeksy) umieszczone przy symbolu pierwiastka oznaczają jednostkę ilości połączonych pierwiastków. Na przykład dla P₂O₅ (tlenek fosforu) odczytamy, że związek o nazwie tlenek fosforu składa się z 2 atomów P (fosforu) i 5 drobin atomów O (tlenu).

Jeżeli przy symbolu pierwiastka nie występuje wskaźnik dolny (indeks), zawsze odczytujemy to jako **1**.

Dla podanego przykładu odczytamy, że związek o nazwie woda składa się z 2 atomów H (wodoru) i 1 atomu O (tlenu).

W przypadku związków cząsteczkowych lub jonowych zawierających jony wieloatomowe rozróżniamy *wzory empiryczne i wzory cząsteczkowe*.

Wzór empiryczny związku to wzór chemiczny określający względne zawartości atomów każdego pierwiastka za pomocą najmniejszych liczb całkowitych. Przykładem jest wzór glukozy – CH_2O .

Wzór cząsteczkowy określa rzeczywiste liczby atomów każdego pierwiastka w cząsteczce. Przykładem jest wcześniej wymieniona glukoza – $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$.

W oparciu o wzory chemiczne możemy wykonywać następujące obliczenia:

- *składu procentowego związku chemicznego*
- *zawartości pierwiastka w substancji zawierającej zanieczyszczenia*
- *równoważnych ilości substancji*
- *ustalić wzór empiryczny związku na podstawie składu elementarnego*

Przykład 1. Obliczanie składu procentowego związku chemicznego. W oparciu o wzór cząsteczkowy określ jaka jest procentowa zawartość miedzi w następujących połączeniach naturalnych: a) chalkozynie Cu_2S , w chalkopirycie CuFeS_2 , c) malachicie $\text{Cu}_2\text{CH}_2\text{O}_5$.

Rozwiązanie

Jako przykład wykorzystamy pierwszy związek o nazwie chalkozyn Cu_2S . Rozwiązujemy według następującego algorytmu:

- *na wstępie obliczamy masę molową Cu_2S ($M_{\text{Cu}_2\text{S}} = 159,15 \text{ g/mol}$).*
- *obliczamy masę miedzi w jednym molu Cu_2S ($m_{\text{Cu}} = 127,08 \text{ g/mol}$)*
- *obliczamy procentową zawartość miedzi w chalkozynie*

$$\% \text{Cu} = m_{\text{Cu}} * 100\% / M_{\text{Cu}_2\text{S}} = 127,08 * 100\% / 159,15 = 79,85\%$$

Przykład 2. Zawartość pierwiastka w substancji zawierającej zanieczyszczenia W jednej z rud żelaza znajduje się średnio 90% magnetytu Fe_3O_4 (10% stanowią domieszki nie zawierające żelaza). Oblicz procentową zawartość żelaza w rudzie.

Rozwiązanie

Rozwiązujemy według następującego algorytmu:

- *obliczamy procentową zawartość żelaza w czystym Fe_3O_4 (patrz przykład 1) ($\% \text{Fe} = 72,36\%$).*
- *Z kolei do obliczeń przyjmujemy podstawę bilansowania. Najdogodniej jest przyjąć, za podstawę bilansowania masę rudy w ilości $m = 100,0 \text{ g}$*
- *W tej masie rudy ($m = 100\text{g}$), którą zastosowaliśmy jako podstawę bilansowania obliczamy masę związku podstawowego m_1 . Z treści zadania wynika, że czystego magnetytu w rudzie jest 90%, a to oznacza, że w 100 g rudy znajduje się 90 g rudy ($m_1 = 90 \text{ g}$, tzn. $90,0\% * 100\text{g} = 90 \text{ g}$).*
- *Obliczamy masę m_2 żelaza w $m_1 \text{ g}$ Fe_3O_4*

$$m_2 = m_1 * \% \text{Fe} / 100 = 90,0 * 72,36 / 100 = 65,12 \text{ g Fe}$$

Ponieważ jest to masa żelaza w 100,0 g próbki (przyjęta podstawa bilansowania), zatem zawartość żelaza w rudzie wynosi **65,12 %**

Przykład 3. Obliczanie równoważnych ilości substancji Do nawożenia pola użyto 150 kg mocznika ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2$). Ile saletry amonowej należałoby użyć zamiast mocznika, aby dostarczyć do gleby takie same ilości azotu.

Rozwiązanie

Rozwiązujemy według następującego algorytmu:

- Obliczamy procentową zawartość azotu w moczniku metodą opisaną w przykładzie 1 ($\%N_1 = 46,6\%$).
- Obliczamy masę m_1 azotu znajdującą się w 150 kg mocznika.

$$m_1 = 150 \text{ kg} * 46,6\% = 69,9 \text{ kg}$$

- Obliczamy procentową zawartość azotu w saletrze amonowej (NH_4NO_3). Obliczona zgodnie z algorytmem z przykładu 1 otrzymamy - $\%N_2 = 35\%$
- Wykonujemy bilans azotu. W tym celu układamy równanie równoważnych mas azotu w zastosowanych nawozach i obliczamy masę m_2 saletry amonowej. Obliczona równoważna masa azotu wynosi 69,9 kg.

$$m_2 = m_1 * 100 / \%N_2 = 69,9 \text{ kg} * 100 / 35 = 199,71 \text{ kg}$$

Przykład 4 Ustalić wzór empiryczny związku na podstawie składu elementarnego Analiza pewnego związku wykazała, że zawiera on 5,88% wodoru i 94,12% tlenu. Ustal jego wzór elementarny, a następnie zaproponuj wzór sumaryczny istniejącego związku o danym wzorze empirycznym.

Rozwiązanie

Rozwiązujemy według następującego algorytmu:

- Zakładamy ogólny wzór empiryczny: H_xO_y (x, y – liczby naturalne nie mające wspólnego dzielnika).
- Ustalamy wyrażenia określające zawartości procentowe pierwiastków w jednym molu związku chemicznego.

$$\%H = x * M_H / M \quad \%O = y * M_O / M$$

gdzie: M_H i M_O – masy 1 mola atomów, odpowiednio wodoru i tlenu, M – masa molowa hipotetycznej cząsteczki.

- Rozwiązujemy równania względem niewiadomych x i y i dzielimy przez siebie parami otrzymane wyrażenia. Otrzymamy proporcję.

$$x : y = \%H / M_H : \%O / M_O$$

- Podstawiamy wartości liczbowe i obliczamy

$$x : y = 5,88 / 1,00 : 94,12 / 16,00 = 5,88 : 5,88 = 1 : 1$$

Wynik obliczeń wskazuje, że wartości indeksów x i y wynoszą odpowiednio: $x = 1$, $y = 1$ a wzór empiryczny ma postać **HO**. Związek chemiczny o takim wzorze nie jest znany, ale taki sam skład empiryczny mają wszystkie związki o wzorach sumarycznych $(HO)_n$, gdzie $n = 1, 2, \dots, n$. W oparciu o te dane na drodze „dopasowania” próbujemy ustalić wzór sumaryczny. Dla $n=2$ otrzymujemy wzór sumaryczny H_2O_2 , który odpowiada wodzie utlenionej. W przykładzie do wzoru sumarycznego doszliśmy na drodze „dopasowania”. Ułatwieniem w ustaleniu wzoru sumarycznego związku chemicznego jest znajomość **masy molowej substancji**.