

Chemické výpočty

Postupným rozpouštěním látky lze při jedné teplotě dosáhnout stavu, kdy se další množství látky již nerozpustí. V tom okamžiku se stává **roztok nasyceným**.

Nasycený roztok

a) stav roztoku, kdy po přidání dalšího množství tuhé látky, se tuhá látky nerozpouští při dané teplotě

b) je v rovnováze roztok a tuhá látka (pevná látka)

Nenasycený roztok obsahuje méně rozpouštěné látky, než je schopno se rozpustit za dané teploty ve zvoleném množství rozpouštědla. Pouze z nasycených roztoků lze provádět krystalizaci, která obvykle slouží k získání rozpouštěné látky z roztoku nebo k jejímu přečištění (předpokládáme-li, že krystaly obsahují právě jen čistou látku).

Rozpustnost

Nejvyšší možné množství rozpouštěné látky označujeme jako rozpustnost při dané teplotě. Rozpustnost závisí na teplotě rozpouštědla, má různou teplotní závislost a liší se pro každou látku. U většiny anorganických látek rozpustnost s teplotou roste, někdy se mění jen nepatrně a v některých případech naopak klesá. Hodnota rozpustnosti se obvykle uvádí v gramech látky na 100 g rozpouštědla.

Hmotnostní zlomek rozpuštěné látky v nasyceném roztoku vypočítáme snadno z údaje o rozpustnosti

$$w_{(A)} = \frac{m(A)}{100 + m(A)}$$

A – rozpuštěná látka
m(A) – rozpustnost ve 100 g rozpouštědla

(v tabulkách značeno např. m_{vaq}^{20} , kde 20 je teplota ve °C, vaq znamená rozpouštění ve vodě)

Příklad.

Údaj z tabulek: rozpustnost $m_v^{20} = 34,19$ g znamená rozpustnost látky (KCl) ve 100g vody při 20°C.

Hmotnostní zlomek vypočteme ze vztahu

$$w(\text{KCl}) = \frac{34,19}{100 + 34,19} = \underline{0,255}$$

Vypočítejte hmotnost heptahydrátu síranu železnatého k přípravě 200 g jeho nasyceného roztoku při 50 °C. Vypočítejte hmotnostní zlomek $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ a FeSO_4 v připraveném nasyceném roztoku.

Rozpustnost zadané soli při této teplotě $r(\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}, 50 \text{ °C}) = 149 \text{ g} / 100 \text{ g}$ vody. Z tohoto údaje plyne, že při použití 149 g soli vznikne 249 g nasyceného roztoku (149 g soli + 100 g vody).

Přímou úměrou přepočteme hmotnost na požadovaných 200 g roztoku jako

$$\begin{array}{ll} 149 \text{ g hydrátu} & \dots\dots\dots (100 + 149) \text{ g roztoku} \\ x \text{ g} & \dots\dots\dots 200 \text{ g roztoku} \end{array}$$

$$x = 149 \cdot 200 / 249 = 119,7 \text{ g hydrátu}$$

Hmotnostní zlomek heptahydrátu síranu železnatého v nasyceném roztoku při 50 °C je

$$w_h = m_h / m_{\odot}$$

$$w_h = 149 / (149 + 100) = 0,5984 = 59,84 \%$$

Hmotnostní zlomek bezvodé látky v nasyceném roztoku w přepočítáme přes hmotnostní zlomek $w(\text{FeSO}_4 / \text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O})$ následovně:

$$w = m / m_{\odot}$$

$$w = m \cdot [M(\text{FeSO}_4) / M(\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O})] / m_{\odot}$$

$$w = 149 [151,9 / 278,2] / (149 + 100) = 0,3267 = \underline{\underline{32,67 \%}}$$

Vypočítejte hmotnost chloridu sodného a objem vody, které se spotřebují při přípravě 250 g roztoku nasyceného při teplotě 20°C. Rozpustnost NaCl při teplotě 20 °C je 36,0 g ve 100 g vody.

$$m(\text{NaCl}) = 66,2 \text{ g}, V(\text{H}_2\text{O}) = 184 \text{ ml}$$

Vypočítejte hmotnostní zlomek $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ v roztoku nasyceném při a) 20°C; b) 60°C. Rozpustnosti: při 20°C => 12 g/100g vody, při 60°C => 43 g/100g vody.

$$\text{a) } w(\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7) = 0,107, \text{ b) } w(\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7) = 0,301$$

Má být připraveno 80 g roztoku $\text{CuCl}_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ nasyceného při teplotě 60°C. Vypočítejte hmotnost $\text{CuCl}_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ a objem vody ($\rho = 1,00 \text{ g/ml}$), které se použijí k přípravě roztoku. Rozpustnost při teplotě 60°C je 153 g ve 100 g vody.

$$m(\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}) = 48,4 \text{ g}, V(\text{H}_2\text{O}) = 31,6 \text{ ml}$$

Ze 150 g roztoku $\text{BaCl}_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ nasyceného při teplotě 20°C má být připraven roztok, v němž je $w(\text{BaCl}_2) = 2,0 \%$. Vypočítejte množství vody, jímž se nasycený roztok zředí. Rozpustnost $\text{BaCl}_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ při teplotě 20°C je 44,6 g ve 100 g vody

$$V(\text{H}_2\text{O}) = 1,8 \text{ l}$$

Vypočítejte množství vody, ve kterém se rozpustí 20,0 g $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ na roztok nasycený při teplotě 20 °C. Vypočítejte hmotnost připraveného roztoku. Rozpustnost $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ při 20 °C je 36,6 g ve 100 g vody.

$$V(\text{H}_2\text{O}) = 54,6 \text{ ml} \quad m(\text{roztok}) = 74,6 \text{ g}$$

Má být připraveno 120 g roztoku $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ nasyceného při teplotě 50 °C. Vypočítejte objem vody (lab. teplota) a hmotnost zelené skalice ($\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$), které použijete při přípravě roztoku, když:

- a) máme k dispozici čistý a suchý $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$
- b) výchozí heptahydrát obsahuje 7,0 % nerozp. nečistot
- c) výchozí heptahydrát obsahuje 7,0 % vlhkosti.

Rozpustnost $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ při 50 °C je 149 g ve 100 g vody.

a) $m(\text{skalice}) = 71,8 \text{ g}$; $V(\text{H}_2\text{O}) = 48,2 \text{ ml}$

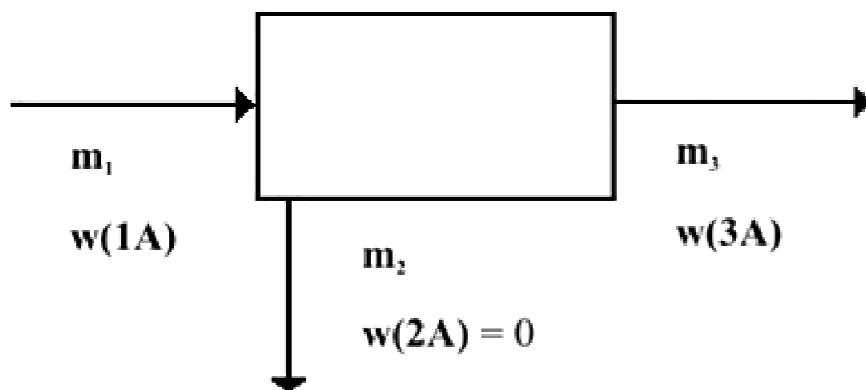
b) $m(\text{skalice}) = 77,2 \text{ g}$; $V(\text{H}_2\text{O}) = 48,2 \text{ ml}$

c) $m(\text{skalice}) = 77,2 \text{ g}$; $V(\text{H}_2\text{O}) = 42,8 \text{ ml}$

Volná krystalizace

- a) vyloučení krystalů odpařováním rozpouštědla při konstantní teplotě (lab. teplota)
- b) necháme na vzduchu

Volná krystalizace – krystalizace, látka A krystalizuje volným odpařením rozpouštědla B (např. vody)



m_1 – hmotnost vstupního nasyceného roztoku při dané teplotě

m_2 – hmotnost odpařeného rozpouštědla (obvykle vody)

m_3 – hmotnost krystalů

$w(1A)$ – hmotnostní zlomek rozpuštěné látky, vypočtený z rozpustnosti látky A

$w(2A)$ – hmotnostní zlomek látky A v odpařeném rozpouštědle – tedy hodnota rovná nule

$w(3A)$ – hmotnostní zlomek látky A v krystalu, může být roven 1 nebo poměru hmotnosti bezvodé látky ku hmotnosti krystalohydrátu, jestliže jej látka tvoří

Krystalizace CuCl_2 odpařováním (volná) probíhá z nasyceného roztoku při $80\text{ }^\circ\text{C}$. Hmotnost vstupního roztoku je 1580 g . Vypočtete:

- kolik vody je nutné odpařit, aby vznikly suché krystaly?
- hmotnost suchých krystalů?

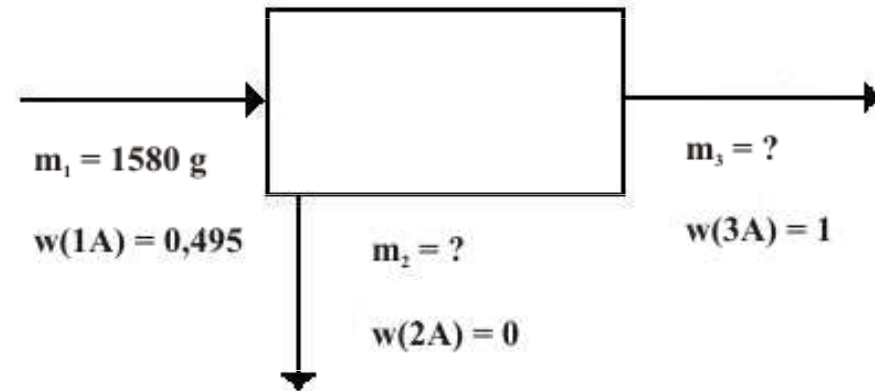
Označení A je CuCl_2 , B je H_2O .

$$w(1A) = \frac{m_{\text{vaq}}^{80}}{m_{\text{celk}}} = \frac{98,0}{198,0} = 0,495$$

$$m_3 = m_1 \cdot w(1A) = 1580 \cdot 0,495 = 782,1\text{ g CuCl}_2$$

$$m_2 = m_1 - m_3 = 1580 - 782,1 = 797,9\text{ g vody}$$

- a) Je třeba odpařit $797,9\text{ g}$ vody.
b) Vznikne $782,1\text{ g}$ krystalů CuCl_2 .



Kolik gramů krystalů vznikne po odpaření 50 g vody z 200 g nasyceného roztoku NaCl?

Rozpustnost chloridu sodného je 36 g / 100 g vody při 20 °C. Ve 200 g nasyceného roztoku při této teplotě je rozpuštěno

$$\begin{array}{l} 36 \text{ g NaCl} \dots\dots\dots (100 + 36) \text{ g nasyceného roztoku} \\ x \text{ g NaCl} \dots\dots\dots 200 \text{ g nasyceného roztoku} \\ x = 36 \cdot 200/136 = 52,94 \text{ g NaCl} \end{array}$$

Po odpaření 50 g vody budeme mít 150 g směsi nasyceného roztoku a krystalů NaCl. Hmotnost krystalů spočítáme z rozpustnosti – jaká hmotnost NaCl odpovídá odpařeným 50 g vody (tzn. jaké množství NaCl už nemá vodu na rozpuštění?):

$$\begin{array}{l} 36 \text{ g NaCl} \dots\dots\dots 100 \text{ g vody} \\ x \text{ g NaCl} \dots\dots\dots 50 \text{ g vody} \\ x = 36 \cdot 50/100 = 18 \text{ g NaCl} \end{array}$$

Po odpaření 50 g vody bude tedy 18 g NaCl ve formě krystalů a (52,94 - 18) g bude rozpuštěno v nasyceném roztoku.

Roztok obsahuje 36,5 g dusičnanu cesného. Vypočítejte na jakou hmotnost se má směs zahustit (odpařit), aby byl získán roztok nasycený při teplotě 100°C. Rozpustnost CsNO_3 při teplotě 100°C je 197 g ve 100 g vody.

$$m(\text{roztok}) = 55,0 \text{ g}$$

Ve 450 g roztoku je rozpuštěno 60,0 g $\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$. Vypočítejte hmotnost vody, která se musí z roztoku odpařit, aby zahuštěný roztok byl roztokem nasyceným při 25°C. Rozpustnost $\text{KCr}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ při teplotě 25°C je 24,4 g ve 100 g vody.

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 144 \text{ g}$$

Volnou krystalizací při teplotě 20°C má být z roztoku obsahujícího 60 g látky C a 180 g vody získáno 45 g látky C. Vypočítejte hmotnost vody, která se musí z roztoku odpařit. Rozpustnost látky C při teplotě 20°C je 45 g ve 100 g vody.

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 147 \text{ g}$$

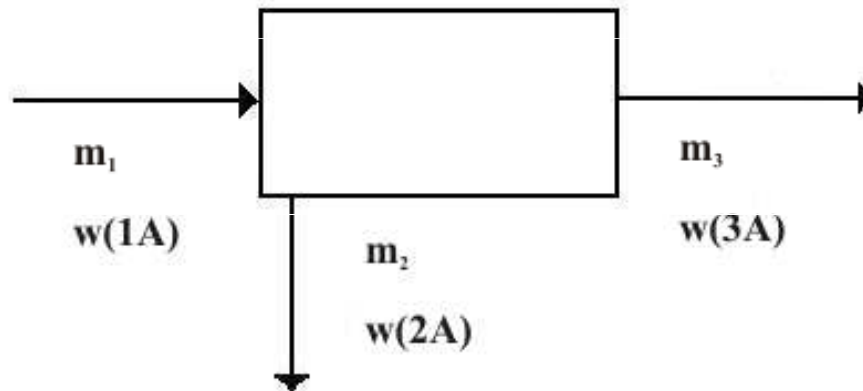
Rozpuštěním 52,0 g látky B ve vodě byl připraven roztok nasycený při teplotě 20°C. Vypočítejte hmotnost vody, která se musí odpařit, aby bylo volnou krystalizací získáno 30 g krystalů látky B. Rozpustnost látky B při teplotě 20°C je 47,3 g ve 100 g vody.

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 63,4 \text{ g}$$

Rušená krystalizace

- Ochlazení nasyceného roztoku látky se přebytečné množství látky vyloučí (rozpustnost se s rostoucí teplotou zvětšuje)
- vychladnutí -> krystal

Rušená krystalizace – krystalizace, kde se vstupní nasycený roztok při dané teplotě t_1 ochladí na teplotu t_2 , tím dojde ke změně rozpustnosti látky A a k rozdělení na fázi tuhou a kapalnou. Jsou možné i výjimky, kdy je třeba roztok zahřát.



m_1 – hmotnost vstupního nasyceného roztoku při teplotě t_1

m_2 – hmotnost výstupního nasyceného roztoku při teplotě t_2

m_3 – hmotnost krystalů

$w(1A)$ – hmotnostní zlomek rozpuštěné látky, vypočtený z rozpustnosti látky A při teplotě t_1

$w(2A)$ – hmotnostní zlomek rozpuštěné látky, vypočtený z rozpustnosti látky A při teplotě t_2

$w(3A)$ – hmotnostní zlomek látky A v krystalu, může být roven 1 nebo poměru hmotnosti bezvodé látky ku hmotnosti krystalohydrátu, jestliže jej látka tvoří.

Celková bilance – celková hmotnost vstupních a výstupních proudů:

$$m_1 = m_2 + m_3$$

tedy vstup (roztok) se rovná dvěma výstupním proudům (krystaly a zbytek, podle typu krystalizace).

Bilance složky A:

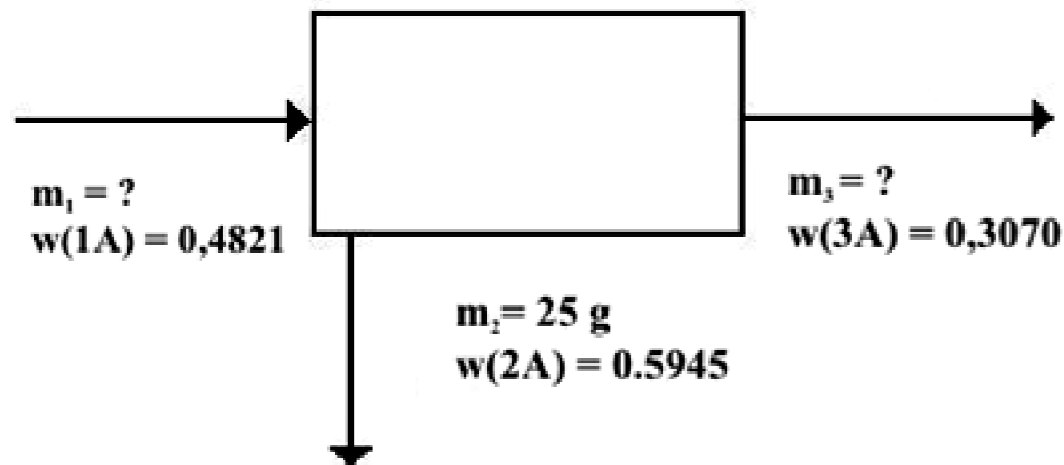
$$m_1 * w(1A) = m_2 * w(2A) + m_3 * w(3A)$$

Bilance složky B

$$m_1 * w(1B) = m_2 * w(2B) + m_3 * w(3B)$$

Z těchto 3 rovnic je matematicky možno vypočítat vstupní nebo výstupní množství látek A a rozpouštědla B.

Vypočtete hmotnost vstupního roztoku pro krystalizaci rušenou SrCl_2 , krystalizuje ve formě $\text{SrCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Ochlazení z $80\text{ }^\circ\text{C}$ na $0\text{ }^\circ\text{C}$. Výstupní hmotnost krystalů $\text{SrCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ je 25 g.



Označení A je SrCl_2 , B je H_2O .

$$w(1A) = \frac{93,1}{193,1} = 0,4821$$

$$w(2A) = \frac{158,53}{266,62} = 0,5945$$

$$w(3A) = \frac{44,3}{144,3} = 0,3070$$

$$m_1 = 25 + m_3$$

$$0,4821 * m_1 = 25 * 0,5945 + m_3 * 0,307$$

$$m_1 = 41,05\text{ g}$$

$$m_3 = 16,05\text{ g}$$

Pro získání 25 g krystalů $\text{SrCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ musíme připravit 41,05 g vstupního roztoku.

Rušenou krystalizaci lze například provést přečistění dusičnanu amonného. Jakou hmotnost krystalů získáme ochlazením roztoku nasyceného při 60 °C o hmotnosti 521 g na teplotu 20 °C?

Rozpustnosti dusičnanu při 60 °C a 20 °C jsou:

$$r(\text{NH}_4\text{NO}_3, 60 \text{ °C}) = 421 \text{ g} / 100 \text{ g vody}$$

$$r(\text{NH}_4\text{NO}_3, 20 \text{ °C}) = 192 \text{ g} / 100 \text{ g vody.}$$

Když se při vyšší teplotě rozpustí 421 g a při nižší jen 192 g (obojí na 100 g vody), pak rozdíl hmotností NH_4NO_3 vykrytalizuje při nižší teplotě v nasyceném roztoku dusičnanu amonného.

V nasyceném roztoku zůstane rozpuštěno právě 192 g. Výtěžek rušené krystalizace pak vypočítáme jako rozdíl rozpustnosti mezi těmito dvěma teplotami $421 - 192 = 229 \text{ g}$ (krystalů NH_4NO_3).

Výtěžek je možno převést i na procentní výtěžek z hmotnosti použité soli:
 $229 \text{ g} / 421 \text{ g} \sim 54,39 \%$.

Z roztoku dusičnanu měďnatého, jehož hmotnost je 124 g a hmotnostní zlomek $w(\text{Cu}(\text{NO}_3)_2) = 0,140$, má být volnou krystalizací při teplotě 20 °C získáno 10,0 g $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3 \text{H}_2\text{O}$. Vypočítejte hmotnost vody, která se z roztoku musí odpařit. Rozpustnost $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3 \text{H}_2\text{O}$ při teplotě 20°C je 252 g ve 100 g vody.

$$m(\text{H}_2\text{O}) = 96,7 \text{ g}$$

V laboratoři má být připraveno 22,5 g krystalů KNO_3 rušenou krystalizací – ochlazením výchozího roztoku, nasyceného při 50 °C, na teplotu 20 °C. Rozpustnost KNO_3 při uvedených teplotách činí 84,2 (50 °C), resp. 31,9 (20 °C) g KNO_3 na 100 g vody. Vypočtete hmotnost výchozího nasyceného roztoku dusičnanu draselného při teplotě 50 °C.

$$m \text{ roztoku} = 79,2 \text{ g.}$$

Vypočtete, kolik gramů heptahydrátu síranu železnatého se vyloučí, jestliže 255 gramů roztoku nasyceného při 50 °C ochladíme na 20 °C. Hodnoty rozpustnosti pro tyto dvě teploty činí 150,2 (při 50 °C) a 61,5 (při 20 °C) g $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ na 100 g vody.

$$m \text{ kryst.} = 90,4 \text{ g hydrátu}$$

Vypočtete, zda ochlazením roztoku chloridu sodného (v němž $w_{\text{NaCl}} = 0,254$) z teploty 100 °C na teplotu 10 °C vzniknou krystaly, a pokud ano, vypočtete jejich výtěžek. Rozpustnost chloridu sodného při teplotě 10 °C je 26,3 g NaCl na 100 g H₂O.

Krystaly vzniknou, výtěžek bude 22,8 %.

Vypočtete, kolik gramů krystalů heptahydrátu síranu železnatého vznikne ochlazením 948 gramů roztoku FeSO₄, nasyceného při 60 °C, na teplotu 20 °C. Jsou známy hodnoty rozpustnosti: při 60 °C je to 185,5 g FeSO₄ · 7 H₂O na 100 g vody, při 20 °C 61,5 g FeSO₄ · 7 H₂O na 100 g vody.

m kryst. = 412 g

Výchozí roztok chloridu barnatého o teplotě 60 °C, obsahující 25,5 hmotn. % BaCl₂, byl ochlazen na 20 °C, přičemž vzniklo 18,8 g krystalů BaCl₂ · 2 H₂O. Rozpustnost dihydrátu chloridu barnatého při 20 °C činí 38,4 g BaCl₂ · 2 H₂O na 100 g vody. Vypočtete hmotnost zbylého roztoku (nasyceného při 20 °C) a hmotnostní zlomek BaCl₂ v tomto roztoku.

m roztok = 608 g , $w_{\text{BaCl}_2} = 0,264$

Nasyčený roztok dusičnanu olovnatého o celkové hmotnosti 315 gramů a teplotě 80 °C, obsahující 52,7 hm % $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ byl ochlazen na teplotu 10 °C, přičemž se vyloučilo celkem 95,5 g krystalů $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$. Vypočtete hmotnostní zlomek a rozpustnost dusičnanu olovnatého v nasyceném roztoku při 10 °C a vyčíslete procentuální výtěžek rušené krystalizace.

$w = 0,321$; $r_{10^\circ\text{C}} = 47,3$ g PbNO_3 na 100 g vody ; výtěžek = 57,5 %

Výchozí roztok tetraboritanu sodného o teplotě 80 °C, který obsahuje 12,8 hmotn. % $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$, bude ochlazen na 20 °C. Zjistěte, zda se vyloučí krystaly a pokud ano, vypočtete jejich výtěžek. Tetraboritan sodný krystalizuje ve formě dekahydrátu, je známa hodnota jeho rozpustnosti při 20 °C: 4,97 g $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$ na 100 g vody.

krystaly se vyloučí, výtěžek = 84,5 %

Rušenou krystalizací má být připraveno 122 g krystalů pentahydrátu $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$. Výchozí roztok, nasycený při 80 °C, obsahuje 36,3 hmotn. % CuSO_4 . Po ochlazení na 30 °C bude zbylý nasycený roztok obsahovat 19,3 hmotn. % CuSO_4 . Vypočtete hmotnost výchozího nasyceného roztoku, výtěžek krystalů a hodnotu rozpustnosti $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ při 30 °C.

m roztok = 320 g , výtěžek % = 67,1 % , $r = 43,2$ g na 100 g vody .

Z výchozího roztoku síranu hořečnatého o teplotě 70 °C byly po ochlazení na teplotu 20 °C získány krystaly $\text{MgSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ o celkové hmotnosti 47,5 g. Ve zbylém roztoku byla zjištěna hustota $1,38 \text{ g cm}^{-3}$ a hmotnostní koncentrace MgSO_4 $346,4 \text{ mg cm}^{-3}$. Výtěžek krystalizace byl 55,8 %. Vypočtete hmotnost výchozího roztoku a určete, zda tento roztok byl nasycený. Rozpustnost $\text{MgSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ při teplotě 70 °C je 309,1 g $\text{MgSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$ na 100 g vody.

m roztok = 121 g , výchozí roztok nebyl nasycený ($w \text{MgSO}_4 = 0,344$)

Vypočtete výtěžek rušené krystalizace, jestliže výchozí roztok uhličitanu sodného o teplotě 70 °C a obsahu 29,8 hmotn. % Na_2CO_3 ochladíme a) na 50 °C, b) na 25 °C. Uhličitan sodný krystaluje jako dekahydrát a hodnoty rozpustnosti jsou 773 (50 °C), resp. 173 (25 °C) gramů $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$ na 100 g vody.

a) krystaly se nevyloučí (výtěžek 0 %)

b) výtěžek bude 58 %.