

Chemické výpočty

(výpočty z chem. vzorce,
výpočty z chem. rovnic,
ředění a směšování roztoků)

VÝPOČTY Z CHEMICKÉHO VZORCE

Při chemické analýze naprosto neznámé sloučeniny lze zjistit pouze zastoupení jednotlivých prvků ve vzorku a teprve podle jejich vzájemného poměru lze vypočítat skutečné složení sloučeniny. Pomocí experimentálně zjištěné molekulové hmotnosti pak lze odvodit sumární vzorec analyzované látky.

Výpočty z chemického vzorce vycházejí ze základního vztahu:

$$\text{Pro látku } A_xB_yC_z \text{ platí } x : y : z = \frac{w(A)}{M(A)} : \frac{w(B)}{M(B)} : \frac{w(C)}{M(C)}$$

Vzorové příklady:

Jaký je empirický vzorec sloučeniny, jestliže z její elementární analýzy vyplývá, že obsahuje 58,5 % uhlíku, 4,1 % vodíku, 11,4 % dusíku a 26,0 % kyslíku?

Značka prvku nebo sloučeniny	w(A)	M(A)	$\frac{w(A)}{M(A)}$		Zaokrouhleno na celá čísla
C	58,5	12	4,875	5,987	6
H	4,1	1	4,1	5,035	5
N	11,4	14	<u>0,8143 – nejmenší</u>	1	1
O	26,0	16	1,625	1,996	2

Empirický vzorec dané sloučeniny je $C_6H_5NO_2$ – nitrobenzen.

Pozn. Indexy upravíme na poměr celých malých čísel

Spálením 1,45 g uhlovodíku vzniklo 4,4 g oxidu uhličitého a 2,25 g vody. Jaký je molekulový vzorec této látky, je-li zjištěná molární hmotnost $54 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$?

Uhlovodík – obsahuje pouze atomy uhlíku a vodíku, kyslík ve spalinách pochází ze vzduchu.

Z hmotnosti spalin se zjistí faktická hmotnost uhlíku a vodíku, pomocí hmotnosti navážky uhlovodíku pak jejich hmotnostní zlomky.

Molekulový vzorec se ověří přepočtem na molární hmotnost.

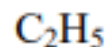
$$m(C) = \frac{Ar(C)}{Mr(CO_2)} \cdot m(CO_2) = \frac{12}{44} \cdot 4,4 = 1,2 \text{ g}$$

$$m(H) = \frac{2 \cdot Ar(H)}{Mr(H_2O)} \cdot m(H_2O) = \frac{2 \cdot 1}{18} \cdot 2,25 = 0,25 \text{ g}$$

$$w(C) = \frac{m(C)}{m(\text{uhlovodík})} = \frac{1,2}{1,45} = 0,82 \Rightarrow 82,7\%$$

$$w(H) = \frac{m(H)}{m(\text{uhlovodík})} = \frac{0,25}{1,45} = 0,173 \Rightarrow 17,3\%$$

C	82,7	12	<u>6,892 - nejmenší</u>	1	2
H	17,3	1	17,3	2,5	5



$$M(C_2H_5) = 27 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$M(\text{zadaná}) : M(\text{vypočítaná}) = 54 : 27 = 2$$

Molekulový vzorec zkoumaného uhlovodíku bude vypadat C_4H_{10} , jedná se o butan.

Kolik gramů dusíku, vodíku, síry a kyslíku je obsaženo v 264,32 gramech $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$?

Dusík: ve 132,08 g (NH₄)₂SO₄ 28,02 g N
v 264,32 g (NH₄)₂SO₄ x g N

$$x = \frac{264,32}{132,08} \times 28,02 = 56,07 \text{ g N}$$

Vodík: ve 132,08 g (NH₄)₂SO₄ 8 g H
v 264,32 g (NH₄)₂SO₄ x g H

$$x = \frac{264,32}{132,08} \times 8 = 16 \text{ g H}$$

Síra: ve 132,08 g (NH₄)₂SO₄ 32,06 g S
v 264,32 g (NH₄)₂SO₄ x g S

$$x = \frac{264,32}{132,08} \times 32,06 = 64,16 \text{ g S}$$

Kyslík: ve 132,08 g (NH₄)₂SO₄ 64 g O
v 264,32 g (NH₄)₂SO₄ x g O

$$x = \frac{264,32}{132,08} \times 64 = 128,08 \text{ g O}$$

Jakou hmotnost má olovo, které je obsaženo v 1000 g galenitu PbS?

Příklad řešíme pomocí přímé úměrnosti:

	<u>PbS</u>	<u>Pb</u>	
molární hmotnost (g mol ⁻¹)	239.....	207,2 g mol ⁻¹	

skutečná hmotnost (g)	1000.....	x	
-----------------------	-----------	---	--

$$\frac{x}{207,2} = \frac{1000}{239} \Rightarrow x = 866,1 \text{ g}$$

Olovo obsažené v 1000 g PbS má hmotnost 866,1 g.

1. Kolik procent vodíku obsahuje voda?
2. Uhlí v určitém ložisku obsahuje 3 % pyritu FeS_2 jako příměsi. Pro zjednodušení budeme předpokládat, že uhlí jiné příměsi neobsahuje. Vypočítejte obsah síry obsažené v 1 tuně tohoto uhlí.

Výpočty z chemických rovnic

Základní pravidla pro výpočty:

1. chemickou reakci vyjádříme vyčíslenou chemickou rovnicí;
2. u látek, které se účastní reakce, zapíšeme molární hmotnosti;
3. na základě těchto údajů příklad numericky vyřešíme.

Postup při výpočtech

A) dosazení hodnot do obecného vzorce

1. Zapišeme rovnici chemické reakce a vyčíslíme ji.
2. Chemickou látku, kterou známe označíme písmenem A, její hmotnost $m(A)$ a stechiometrický koeficient a .
3. Písmenem B označíme chemickou látku, jejíž hmotnost $m(B)$ zjišťujeme. Její stechiometrický koeficient je b .
4. Zjistíme molární hmotnost obou látek $M(A)$ a $M(B)$.
5. Dosazením do vzorce zjistíme hledaný údaj.

$$\frac{m(B)}{b \cdot M(B)} = \frac{m(A)}{a \cdot M(A)} \quad \rightarrow \quad m(B) = \frac{b}{a} \cdot \frac{M(B)}{M(A)} \cdot m(A)$$

Výhoda: nejjednodušší způsob

Nevýhoda: nutno znát vzorec nebo mít po ruce literaturu se vzorcem

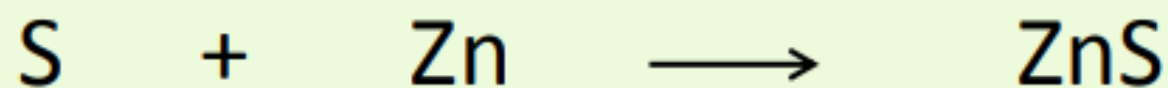
B) poměrem látkových množství výchozích látek a produktů.

- 1) Zapišeme rovnici chemické reakce a vyčíslíme ji.
- 2) Pod rovnici zapišeme stechiometrické koeficienty a látková množství.
- 3) Zjistíme molární hmotnosti obou látek $M(A)$ a $M(B)$.
- 4) Vypočítáme látkové množství $n(A)$ látky u které známé hmotnost ($M = m \cdot n$ $n = m \cdot M$)
- 5) Určíme látkové množství $n(B)$ neznámé látky.
- 6) Vypočítáme hmotnost neznámé látky.

C) trojčlenkou

- 1) Zapišeme rovnici chemické reakce a vyčíslíme ji.
- 2) Pod rovnici zapišeme stechiometrické koeficienty a látková množství.
- 3) Zjistíme molární hmotnosti obou látek $M(A)$ a $M(B)$.
- 4) Vypočítáme hmotnosti obou látek z M a n ($M = m \cdot n$ $m = M \cdot n$)
- 5) Pomocí trojčlenky vypočteme hledanou hmotnost.

Vypočtete potřebné množství práškového zinku k reakci 4 g síry za vzniku ZnS.



$$m(A) = 4\text{g}$$

$$m(B) = x\text{g}$$

$$a = 1$$

$$b = 1$$

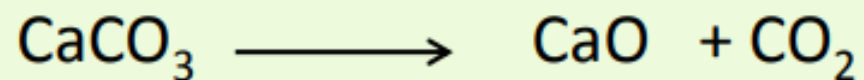
$$M(A) = 32,1\text{ g/mol}$$

$$M(B) = 65,4\text{ g/mol}$$

$$m(B) = \frac{b}{a} \cdot \frac{M(B)}{M(A)} \cdot m(A) = \frac{1}{1} \cdot \frac{65,4\text{ g/mol}}{32,1\text{ g/mol}} \cdot 4\text{g} = \underline{\underline{8,1\text{g}}}$$

Se 4g síry bude reagovat 8,1 g zinku.

Vypočítej hmotnost uhličitanu vápenatého CaCO_3 , který je potřeba tepelně rozložit, aby vzniklo 112,2 g oxidu vápenatého



1 mol

1 mol

$$M(\text{CaCO}_3) = 100,1 \text{ g/mol}$$

$$M(\text{CaO}) = 56,1 \text{ g/mol}$$

$$m(\text{CaCO}_3) = 1 \text{ mol} \cdot 100,1 \text{ g/mol}$$

$$m(\text{CaO}) = 1 \text{ mol} \cdot 56,1 \text{ g/mol}$$

$$56,1 \text{ g CaO} \dots\dots\dots 100,1 \text{ g CaCO}_3$$

$$\underline{112,2 \text{ g CaO} \dots\dots\dots x \text{ g CaCO}_3}$$

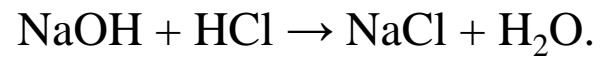
$$\frac{x}{100,1 \text{ g}} = \frac{112,2 \text{ g}}{56,1 \text{ g}}$$

$$x = 100,1 \text{ g} \cdot \frac{112,2 \text{ g}}{56,1 \text{ g}}$$

$$\underline{x = 200,2 \text{ g}}$$

Aby vzniklo 112,2g CaO je potřeba rozložit 200,2g CaCO₃.

Reakce NaOH s kyselinou chlorovodíkovou probíhá podle rovnice



Jaký objem NaOH o koncentraci $0,5 \text{ mol dm}^{-3}$ beze zbytku zreaguje s HCl obsaženou ve 20 cm^3 jejího roztoku o koncentraci 1 mol dm^{-3} ?

Ředění a směšování roztoků

Křížové pravidlo

Používá se pro výpočet poměru hmotnostních dílů dvou výchozích roztoků jejichž smícháním vznikne nový roztok. K výpočtu musí být zadány všechny tři koncentrace v hmotnostních procentech.

1. Příklad

V jakém hmotnostním poměru musíme smíchat 50% a 10% roztok kyseliny sírové abychom dostali 20% roztok?

Koncentrace výchozích roztoků si napíšeme na řádek kousek od sebe. Požadovanou koncentraci po smíchání napíšeme o řádek níž mezi obě čísla.

Křížem shora dolů vypočítáme rozdíly v absolutní hodnotě a zapíšeme na další řádek.

$$\begin{array}{cc} 50 & 10 \\ & 20 \\ 10 & 30 \end{array}$$

Pokud lze, výsledek vykrátíme. Přečteme hmotnostní poměr.

Smícháním 1 hmotnostního dílu 50% kyseliny sírové a tří hmotnostních dílů 10% kyseliny sírové získáme 20% kyselinu sírovou.

2. Příklad

Vypočítejte kolik g vody je potřeba přidat k 300 g 8% roztoku NaCl aby vznikl 5% roztok?

Koncentrace chloridu sodného v čisté vodě je nulová.

$$\begin{array}{ccc} 0 & & 8 \\ & 5 & \\ 3 & & 5 \end{array}$$

Křížovým pravidlem zjistíme, že musíme smísit 3 hmotnostní díly vody s 5 hmotnostními díly 8% roztoku NaCl.

Protože je v zadání 300 g 8% rozoku NaCl, představuje tato hmotnost 5 hmotnostních dílů. Jeden díl je tedy 60 g.

Tři hmotnostní díly vody jsou pak 180 g.

K 300 g 8% roztoku NaCl je potřeba přidat 180 g vody.

3. Příklad

Vypočítejte kolik g čistého pevného NaCl je potřeba přidat k 285 g 3% roztoku aby vznikl 5% roztok?

3. Příklad

Vypočítejte kolik g čistého pevného NaCl je potřeba přidat k 285 g 3% roztoku aby vznikl 5% roztok?

Koncentrace čistého, pevného chloridu sodného je 100%.

$$\begin{array}{cc} 100 & 3 \\ & 5 \\ 2 & 95 \end{array}$$

Křížovým pravidlem zjistíme, že musíme smísit 95 hmotnostních dílů 3% roztoku NaCl a 2 hmotnostní díly čistého, pevného chloridu sodného.

Protože je v zadání 285 g 3% roztoku NaCl, představuje tato hmotnost 95 hmotnostních dílů. Jeden díl jsou tedy 3 g.

Dva hmotnostní díly vody je 6 g.

K 285 g 3% roztoku NaCl je potřeba přidat 6 g čistého, pevného NaCl.

4. Příklad

Vypočítejte kolik g 5% roztoku NaOH a kolik g 30% roztoku NaOH je potřeba smíchat aby vzniklo 600g 10% roztoku NaOH?

4. Příklad

Vypočítejte kolik g 5% roztoku NaOH a kolik g 30% roztoku NaOH je potřeba smíchat aby vzniklo 600g 10% roztoku NaOH?

Koncentrace chloridu sodného v čisté vodě je nulová.

$$\begin{array}{cc} 5 & 30 \\ & 10 \\ 20 & 5 \end{array}$$

Poměr nejprve vykrátíme a zjistíme, že musíme smísit 4 hmotnostní díly 5% roztoku NaOH s jedním hmotnostním dílem 30% roztoku NaOH.

Protože podle zadání máme připravit celkem 600 g 10% roztoku NaOH, představuje tato hmotnost celkem 5 hmotnostních dílů. Jeden díl je tedy 120 g.

Čtyři hmotnostní díly 5% roztoku NaOH jsou pak 480 g.

Je potřeba smíchat 480 g 5% roztoku NaOH se 120 g 30% roztoku.

Směšovací rovnice

Používají se pro míchání dvou a více roztoků s koncentrací zadanou v hmotnostních zlomcích nebo procentech. Pro výpočet nemusí být zadány všechny koncentrace.

Bilance hmotností roztoků

$$m_1 + m_2 = m$$

m je hmotnost smíchaných roztoků

m_1 je hmotnost prvního roztoku

m_2 je hmotnost druhého roztoku

Bilance hmotnosti rozpuštěné látky

$$m_1 \cdot w_1 + m_2 \cdot w_2 = m \cdot w$$

kde $m_1 w_1$ je hmotnost látky rozpuštěné v prvním roztoku

$m_2 w_2$ je hmotnost látky rozpuštěné ve druhém roztoku

$m w$ je hmotnost látky rozpuštěné v roztoku po smíchání

4. Příklad

Vypočítejte kolikaprocentní bude roztok vzniklý smícháním 200 g 8% roztoku dusičnanu sodného s 300g 12% roztoku dusičnanu sodného?

4. Příklad

Vypočítejte kolikaprocentní bude roztok vzniklý smícháním 200 g 8% roztoku dusičnanu sodného s 300g 12% roztoku dusičnanu sodného?

$$m_1 + m_2 = m$$

$$m_1 \cdot w_1 + m_2 \cdot w_2 = m \cdot w$$

Hmotnosti roztoků dosadíme do první rovnice a vypočítáme m.

Dosadíme do druhé rovnice

$$200 \cdot 0,08 + 300 \cdot 0,12 = 500 \cdot w$$

$$16 + 36 = 500 \cdot w$$

$$w = 0,104$$

Roztok vzniklý smícháním bude 10,4 %.