

Chemické výpočty

Stechiometrický a sumární vzorec

Stechiometrický vzorec vyjadřuje základní složení sloučeniny, udává, ze kterých prvků se sloučenina skládá a v jakém poměru jsou atomy těchto prvků ve sloučenině zastoupeny

Sumární vzorec udává druh a počet atomů v molekule dané sloučeniny, může být totožný se stechiometrickým vzorcem, nebo je jeho celistvým násobkem.

Např.

peroxid vodíku má stechiometrický vzorec {HO} a sumární vzorec H_2O_2

Výpočet stechiometrického a sumárního vzorce

Atomový poměr prvků ve vzorku zjistíme, dělíme-li množství jednotlivých prvků v procentech jejich relativními atomovými hmotnostmi.

Stechiometrický vzorec získáme, pokud vydělíme poměr nejmenším z čísel.

Vzhledem k tomu, že ve sloučenině (v sumárním vzorci) jsou jednotlivé prvky v poměru celých čísel, snažíme se poměru celých čísel dosáhnout matematickými operacemi (násobením celým číslem).

K ověření „správnosti“ vypočteného vzorce lze využít: a) zpětný výpočet obsahu prvků; b) hodnotu DBE, která musí být celočíselná; c) NMR spektra.

Výpočet elementárního složení

Ze sumárního vzorce látky můžeme vypočítat **elementární složení** tak, že hmotnost jednotlivých prvků (počet molů daného prvku vynásobená molární hmotností) se vydělí celkovou hmotností molekuly (1 mol × molární hmotnost molekuly). Aby byl výsledek v %, je třeba ho vynásobit 100.

Např. $C_{12}H_{11}F_3N_2O_2$

$$\%C = \frac{12 * A_r(C) * 100}{M_r (C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 52,93$$

$$\%F = \frac{3 * A_r(F) * 100}{M_r (C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 20,95$$

$$\%H = \frac{11 * A_r(H) * 100}{M_r (C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 4,07$$

$$\%N = \frac{2 * A_r(N) * 100}{M_r (C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 10,29$$

$$\%O = \frac{2 * A_r(O) * 100}{M_r (C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 11,76$$

Výpočty z chemického vzorce

Při chemické analýze neznámé sloučeniny se zjišťuje zastoupení jednotlivých prvků ve vzorku a podle jejich vzájemného poměru se následně vypočítá skutečné složení sloučeniny. Pomocí experimentálně zjištěné molekulové hmotnosti pak lze odvodit sumární vzorec analyzované látky.

Výpočty z chemického vzorce vycházejí ze základního vztahu:

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

postup	příklad
Výpočet molární hmotnosti Fe_2O_3	$M(\text{Fe}) = 56 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$ $M(\text{O}) = 16 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$ $M(\text{Fe}_2\text{O}_3) = 56 \cdot 2 + 16 \cdot 3 = 112 + 48 = 160 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$
Sestavení trojčlenky a výpočet	\uparrow 160 g Fe_2O_3 100 % \uparrow \uparrow 56 · 2 = 112 g Fe x % \uparrow $\frac{x}{100} = \frac{112}{160}$ $x = 70 \%$
Odpověď	V hematitu je 70% železa.



Hematit

Vypočítejte stechiometrický vzorec sloučeniny se složením: 22,55 % Na; 30,38 % P a 47,07 % O. Jeden mol látky váží 407,85 g, jaký je sumární a strukturní vzorec látky?

Budeme potřebovat atomové hmotnosti celkem tří prvků:

Na	22,99
P	30,97
O	16,00

$$x : y : z = 22,55/22,99 : 30,38/30,97 : 47,07/16,00$$

$$x : y : z = 0,98 : 0,98 : 2,94$$

$$x : y : z = 1 : 1 : 3$$

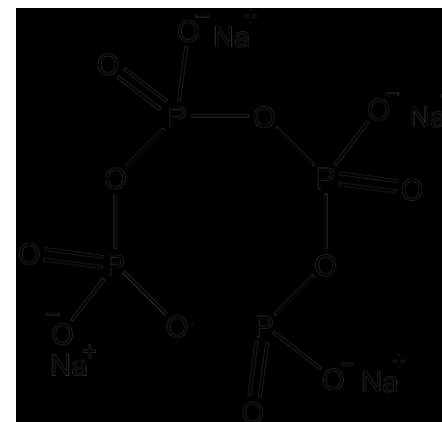
Stechiometrický vzorec je **{NaPO₃}**.

V zadání je uvedena molární hmotnost látky $M = 407,85 \text{ g/mol}$. Potřebujeme tedy zjistit kolikrát se nám hmotnost jednotky NaPO₃ ($M = 101,96 \text{ g/mol}$) vejde do zadané molární hmotnosti.

$$407,85 / 101,96 = 4,00$$

Látka obsahuje čtyři jednotky NaPO₃, její vzorec tedy bude Na₄P₄O₁₂.

Jedná se o *cyklo*-tetrafosforečnan sodný.



Určete stechiometrický vzorec sloučeniny, která obsahuje 14,27 % Na, 9,95 % S, 19,86 % O a 55,91 % H₂O

$$M[\text{Na}] = 22,99 \text{ g.mol}^{-1}$$

$$M[\text{S}] = 32,06 \text{ g.mol}^{-1}$$

$$M[\text{O}] = 16 \text{ g.mol}^{-1}$$

$$M[\text{H}_2\text{O}] = 18 \text{ g.mol}^{-1}$$

$$x:y:z = \frac{\%Na}{M[\text{Na}]} : \frac{\%S}{M[\text{S}]} : \frac{\%O}{M[\text{O}]} : \frac{\%H_2O}{M[\text{H}_2\text{O}]}$$

$$x:y:z = \frac{14,27}{22,99} : \frac{9,95}{32,06} : \frac{19,86}{15,9999} : \frac{55,91}{18}$$

$$x:y:z = 0,62 : 0,31 : 1,24 : 3,11$$

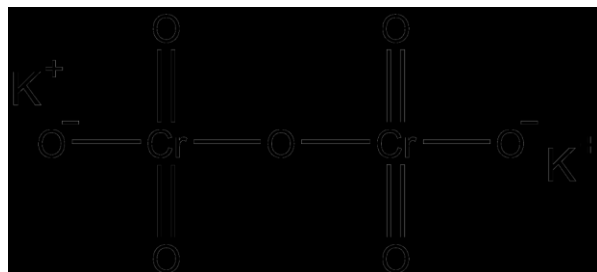
Indexy upravíme na poměr celých malých čísel

$$x:y:z = \frac{0,62}{0,31} : \frac{0,31}{0,31} : \frac{1,24}{0,31} : \frac{3,11}{0,31}$$

$$x:y:z = 2:1:4: 10 \Rightarrow \mathbf{Na_2SO_4 \cdot 10 H_2O}$$

Vypočítejte hmotnostní zlomek jednotlivých prvků v dichromanu draselném $K_2Cr_2O_7$?

V tomto příkladě jde o opačný případ: známe složení látky, ale zajímá nás teoretický výsledek elementární analýzy.



Atom/molekula	A_r/M_r
K	39,10
Cr	52,00
O	16,00
$K_2Cr_2O_7$	294,18

Výpočet procentuálního zastoupení je jednoduchý, stačí dát do poměru *hmotnost prvku* (nesmíme zapomenout na zastoupení prvku ve sloučenině) a *hmotnost sloučeniny*:

$$w(K) = 2 \cdot 39,10 / 294,18 = 0,2658$$

$$w(Cr) = 2 \cdot 52,00 / 294,18 = 0,3535$$

$$w(O) = 7 \cdot 16,00 / 294,18 = 0,3807$$

Dichroman draselný obsahuje 26,58 % K; 35,35 % Cr a 38,07 % O.

Jako rychlou kontrolu můžeme zkontrolovat součet procent, musí se rovnat 100

$$26,58 + 35,35 + 38,07 = 100$$

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 $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ 28,02 g N
v 264,32 g $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ x g N

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

Vodík: ve 132,08 g $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ 8 g H
v 264,32 g $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ x g H

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

Síra: ve 132,08 g $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ 32,06 g S
v 264,32 g $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ x g S

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

Kyslík: ve 132,08 g $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ 64 g O
v 264,32 g $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ x g O

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

Oxid uhličitý lze připravit reakcí s kyselinou chlorovodíkovou. Vypočítejte, která z uvedených látek bude, s ohledem na hmotnostní poměr oxidu uhličitého uvolněného z navážky 100 g uhličitanu, pro přípravu oxidu uhličitého nejvýhodnější. 1) CaCO_3 2) Na_2CO_3 3) K_2CO_3 4) NaHCO_3

Z jednoho molu všech čtyř látek vznikne vždy 1 mol CO_2 . Nejvýhodnější tedy bude látka, která má nejmenší molární hmotnost. Je na první pohled zřejmé, že to bude NaHCO_3 .

S ohledem na zadání vypočítáme látková množství jednotlivých solí:

$$1: n(\text{CaCO}_3) = 100/100 = 1 \text{ mol} , \text{ vznikne } 1 \text{ mol } \text{CO}_2.$$

$$2: n(\text{Na}_2\text{CO}_3) = 100/105,99 = 0,9434 \text{ mol}, \text{ vznikne } 0,9434 \text{ mol } \text{CO}_2$$

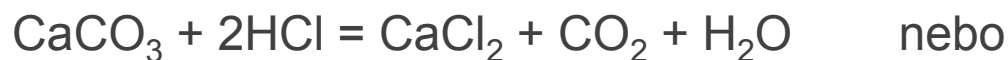
$$3: n(\text{K}_2\text{CO}_3) = 100/138,21 = 0,7235 \text{ mol}; \text{ vznikne } 0,7235 \text{ mol } \text{CO}_2$$

$$4: n(\text{NaHCO}_3) = 100/84,01 = 1,19 \text{ mol}, \text{ vznikne } 1,19 \text{ molu } \text{CO}_2.$$

U hydrogenuhličitanu bude navíc poloviční spotřeba HCl :



naproti tomu třeba u CaCO_3 to bude



Kupritová (Cu_2O) ruda obsahuje 36 % hlušiny. Kolik kg mědi se vyrobí ze 2,5 tuny této rudy?

1422 kg

Ze 2 tun rudy chalkosinu (Cu_2S) bylo vyrobeno 1,5 tuny mědi. Kolik % hlušiny obsahovala ruda?

6,25 %

Chromitová ($\text{FeO}\cdot\text{Cr}_2\text{O}_3$) ruda obsahuje 20 % hlušiny. Z kolika tun této rudy se vyrobí 6,5 tuny chromu?

17,5 t

Železná ruda obsahuje stejné hmotnostní podíly ($m_m/m_h = 1:1$) magnetitu (Fe_3O_4) a hematitu (Fe_2O_3). Z kolika tun této rudy lze vyrobit 41,3 tun železa?

58 t

Z 20,6 tuny manganové rudy, obsahující MnS a MnS_2 , bylo vyrobeno 11 tun manganu. Kolik tun MnS a kolik tun MnS_2 ruda obsahovala?

8,7 t MnS a 11,9 t MnS_2

Určete molární hmotnost plynu, je-li jeho hustota za normálních podmínek $1,43 \text{ g.dm}^{-3}$. Odhadněte, o který plyn se jedná.

32 g.mol^{-1} , O_2

Kolik m^3 vzduchu se spotřebuje za den v továrně na výrobu amoniaku, jestliže je denní spotřeba vzdušného dusíku 1250 tun. Předpokládejte, že vzduch obsahuje 80 obj. % dusíku).

$1\,250\,000 \text{ m}^3$

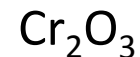
Kolik kg vzduchu je v místnosti o rozměrech $5 \text{ m} \times 4 \text{ m} \times 3 \text{ m}$ při teplotě 293 K a normálním tlaku ($101\,325 \text{ Pa}$)?

$72,4 \text{ kg}$

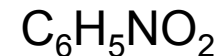
William Ramsay v roce 1894 izoloval plyn, který měl při teplotě $25 \text{ }^\circ\text{C}$ a tlaku 100 kPa hustotu $1,63 \text{ g.dm}^{-3}$. Který plyn Ramsay izoloval?

argon

Oxid chromu obsahuje 68,4 % chromu a 31,6 %. Určete stechiometrický vzorec oxidu.



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?



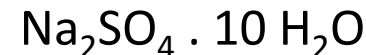
Minerál beryl obsahuje 13,96 % oxidu berylnatého, 18,97 % oxidu hlinitého a 67,07 % oxidu křemičitého. Jaký je jeho stechiometrický vzorec?



Kolik gramů krystalové vody obsahuje 13 gramů $\text{MgSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$?

6,65 g

Vzorek 16,1 g hydrátu síranu sodného byl žiháním zbaven veškeré krystalové vody. Úbytek hmotnosti činil 9 g. Určete vzorec hydrátu.



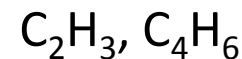
Úplným spálením 2,66 g látky vzniklo 1,54 g CO_2 a 4,48 g SO_2 . Odvodte vzorec látky.



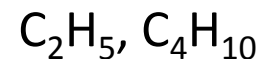
Spálením 1,54g plynného uhlovodíku vzniklo 4,24g CO_2 a 3,47 g H_2O . Určete vzorec uhlovodíku a pojmenujte ho.

CH_4 , metan

Jaký je molekulový vzorec sloučeniny, která obsahuje uhlík ($w = 88,8\%$) a vodík ($w = 11,2\%$). Jeden litr této plynné látky má za normálních podmínek hmotnost 2,41 g.



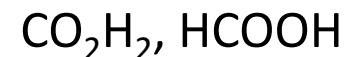
Dokonalým spálením 0,29 g organické látky obsahující uhlík a vodík vzniklo 0,88 g CO_2 a 0,45 g H_2O . Určete empirický a molekulový vzorec látky. Relativní molekulová hmotnost je 58.



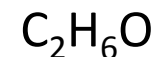
V neznámé organické sloučenině byl elementární analýzou stanoven obsah uhlíku ($w = 39,89\%$), vodíku ($w = 6,7\%$) a kyslík ($w = 53,01\%$). Relativní molekulová hmotnost látky je 185. Určete empirický a molekulový vzorec.



Jaký empirický a molekulový vzorec má látka složená z vodíku, kyslíku a uhlíku. Její relativní molekulová hmotnost je 46. 0,253 g látky poskytlo 0,242 g oxidu uhličitého a 0,099 g vody.



Úplným spálením 0,2036 g látky, obsahující uhlík, vodík a kyslík, bylo zjištěno 0,3895 g CO_2 a 0,2390 g H_2O . Určete empirický vzorec sloučeniny.



Dusičnan amonný a močovina jsou významná dusíkatá hnojiva. Ve které z těchto sloučenin je větší procentuální obsah dusíku?

Obsah dusíku je vyšší v močovině (46,7 %) než v dusičnanu amonném (35 %)

Analýzou neznámého vzorku A bylo zjištěno 82,35 % dusíku a 17,65 % vodíku, analýzou vzorku B bylo zjištěno 87,5 % dusíku a 12,5 % vodíku. Který ze vzorků obsahoval amoniak?

Vzorek A

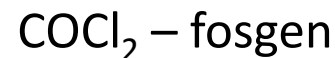
Vzorky dvou bezvodých uhličitánů A a B byly žíhány do konstantní hmotnosti. Hmotnost vzorku A poklesla z původní hmotnosti 2,5840 g na 1,4482 g, hmotnost vzorku B poklesla z původní hmotnosti 2,4585 g na 1,1753 g. Identifikujte oba vzorky víte-li, že jeden z nich obsahuje uhličitan hořečnatý a druhý uhličitan vápenatý.

A CaCO_3 , B MgCO_3

Určete relativní atomovou hmotnost a vzorec sloučeniny obsahující pouze kov, chlor a kyslík v molárním poměru 1:1:3. Sloučenina obsahuje 39,168 % kyslíku a molekulová hmotnost je menší než 150.

KClO_3

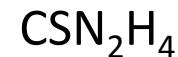
Jaký vzorec má látka složená z uhlíku, kyslíku a chloru sloučených v hmotnostním poměru 3:4:18. Jaký je její název?



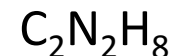
Spálením 0,0038 g jisté látky vznikne 0,0001 molu oxidu siřičitého a 1,12 ml oxidu uhličitého (za normálních podmínek). Určete hmotnostní poměr prvků ve sloučenině v nejmenších celých číslech a v procentech. Určete její vzorec.



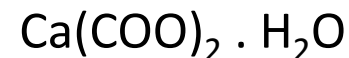
Analýzou 0,0019 g organické sloučeniny bylo zjištěno, že obsahuje 0,0003 g uhlíku, 0,0008 g síry, 0,0007 g dusíku a 0,0001 g vodíku. Určete empirický vzorec této sloučeniny. Znáte název sloučeniny?



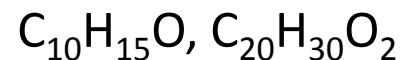
Určete molekulový vzorec organické sloučeniny, v jejíž molekule hmotnostní poměr C:N:H je 6:7:2 a víte-li, že molární hmotnost této látky je $60 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$.



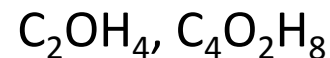
Hmotnostní poměr vápníku, uhlíku a kyslíku ve sloučenině je 5:3:8. Hydrát této sloučeniny obsahuje 12,36 % vody. Jaký je vzorec hydrátu?



K elementární analýze bylo vzato 15,9 mg látky. Spálením tohoto množství vzniklo 46,19 mg CO₂ a 14,28 mg H₂O. Relativní molekulová hmotnost sloučeniny je 302. Určete empirický a molekulový vzorec.



Spálením 0,33 g organické sloučeniny bylo získáno 336 cm³ oxidu uhličitého a 0,27 g vody. Objem látky je za normálních podmínek. Experimentálně určená relativní molekulová hmotnost je 88. Určete empirický a molekulový vzorec sloučeniny.



Spálením 0,7 g látky vzniklo 0,05 molu oxidu uhličitého a 0,05 molu vody. 0,1 g látky za normálních podmínek zaujímá objem 32 ml. Určete empirický a molekulový vzorec sloučeniny.



Oxidačním žíháním se 1 gram minerálu, který je tvořen železem, mědí a sírou, převede na oxidy. Oxid siřičitý unikl ze vzorku a tuhý zbytek o hmotnosti 0,869 g obsahoval 39,87 % mědi a 35,04 % železa. Určete empirický vzorec minerálu.



Oxid uhličitý a voda vznikající při spálení jistého uhlovodíku jsou v hmotnostním poměru 22:9. Normální hustota uhlovodíku $\rho_n = 1,88 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Jaký je jeho molekulový vzorec?

