Лекция №3 СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Основные понятия: химическая формула: простейшая (эмпирическая) и истинная (молекулярная), химическое уравнение; стехиометрический коэффициент, стехиометрическое соотношение; моль, количество вещества (число молей), молярная масса, молярный объем; выход продукта реакции.

Перечень умений: рассчитывать составы веществ и их смесей, выводить химические формулы по результатам анализа вещества, определять массы (а для газов – и объемы) веществ, вступивших в реакцию и образующихся при ее протекании, рассчитывать выход продуктов реакции.

В любой химической реакции соблюдаются законы сохранения массы и энергии. Общее число атомов элементов, входящих как в состав исходных веществ, так и продуктов реакции, в ходе реакции не изменяется. На этом основан подбор коэффициентов в уравнении реакции. Эти коэффициенты и проводимые с их использованием расчеты называют стехиометрическими (от греческих слов stoicheon – элемент, metreo – измеряю).

Любая химическая формула и любое химическое уравнение в явном виде (с помощью формульных индексов или стехиометрических коэффициентов) указывают молярные соотношения элементов, составляющих сложное вещество, или молярные соотношения различных участников реакции – исходных веществ и (или) продуктов. Все расчеты по химическим формулам и уравнениям основаны на использовании этих стехиометрических соотношений и связаны с нахождением количеств вещества (чисел молей).

Вспомним, что *моль* любого вещества содержит $6.02 \cdot 10^{23}$ частиц, его масса, выраженная в граммах, численно равна относительной атомной или молекулярной массе этого вещества, а в газообразном состоянии (в приближении идеального газа) объем одного моля при нормальных условиях V_{m0} составляет 22,4 л:

1 моль $6.02 \cdot 10^{23}$ (частиц) M (г/моль) $V_{\rm m0}$

Формулы для определения количества вещества (числа молей) вещества А при различных способах его указания:

1) если задана масса вещества m(A), г

$$n(A) = \frac{m(A)}{M(A)} \tag{1}$$

где M(A) – молярная масса, г/моль;

2) если задан объем газообразного вещества

$$n(A) = \frac{V(A)}{V_m} = \frac{V_0(A)}{V_{m0}}$$
 (2)

где V(A) — объем газа при заданных условиях, $V_0(A)$ — объем газа, приведенный к нормальным условиям, π ;

 $V_{\rm m}$ — молярный объем при заданных условиях, $V_{\rm m0}$ — молярный объем при нормальных условиях ($V_{\rm m0}=22,4$ л/моль);

3) если задано число частиц вещества N(A)

$$n(A) = \frac{N(A)}{N_A} \tag{3}$$

где N(A) – число Авогадро, моль⁻¹.

При расчетах по химическим формулам для установления стехиометрических соотношений используется задаваемый химической формулой молярный состав. Например, из формулы H_2SO_4 следует, что один моль серной кислоты содержит 2 моля

атомов водорода, 1 моль атомов серы и 4 моля атомов кислорода. По уравнениям (1) - (3) можно найти их массу, объем или число частиц. Если взять произвольное количество вещества, то соотношения чисел молей $n(H_2SO_4)$ и чисел молей n(H), n(S) и n(O) всегда будут равны стехиометрическим:

$$\frac{n(H_2SO_4)}{n(H)} = \frac{1}{2}, \qquad \frac{n(H_2SO_4)}{n(S)} = \frac{1}{1}, \qquad \frac{n(H_2SO_4)}{n(O)} = \frac{1}{4}$$

Или в общем виде:

$$\frac{n(A)}{n(\Im)} = \frac{1}{N(\Im)} \tag{4}$$

где n(A) – число молей сложного вещества;

n(3) – число молей атомов элемента, входящего в состав данного сложного вещества;

N(3) – число атомов элемента в формуле сложного вещества.

Часто встречается противоположная задача: по результатам анализа, т.е. по известному составу сложного вещества, найти его простейшую (эмпирическую) химическую формулу. Для этого необходимо определить число молей атомов каждого из элементов, приходящееся на какое-либо постоянное количество вещества, и выразить в явном виде их молярное (стехиометрическое) соотношение

$$n(A): n(B): n(C)... = x: y: z...$$
 (5)

где x, y, z — целые числа.

Для нахождения истинной (молекулярной) формулы необходимо дополнительно знать молекулярную массу вещества.

При стехиометрических расчетах по химическим уравнениям необходимо помнить, что коэффициенты в уравнениях реакций указывают как на соотношение числа частиц, участвующих в реакции, так и на соотношение числа молей вещества (а для газов – и на соотношение их объемов).

Для произвольной реакции

$$aA + bB + \dots = cC + dD + \dots$$

можно написать, например, такие стехиометрические соотношения:

$$\frac{n(A)}{n(B)} = \frac{a}{b}, \quad \frac{n(A)}{n(C)} = \frac{a}{c}, \quad \frac{n(B)}{n(D)} = \frac{b}{d}, \dots \text{ и т.д.}$$
 (6)

где a, b, c, d – стехиометрические коэффициенты в уравнении реакции.

Число молей n можно найти по уравнениям (1) - (3).

Если вещества заданы массами, то по уравнению (1):

$$n(A) = \frac{m(A)}{M(A)}, \qquad n(B) = \frac{m(B)}{M(B)}, \dots$$

Подставив в уравнение (6), получим:

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

$$\frac{m(A)}{m(B)} = \frac{a}{b} \cdot \frac{M(A)}{M(B)}$$
(7)

откуда

Таким образом, отношение масс веществ, участвующих в реакции, равно отношению их молярных масс, умноженных на стехиометрические коэффициенты.

Если в реакции принимают участие газообразные вещества, то по уравнению (2)

$$n(A) = \frac{V(A)}{V_m}, \qquad n(B) = \frac{V(B)}{V_m}$$

Подставив в уравнение (6), получим:

$$\frac{V(A) \cdot V_m}{V_m \cdot V(B)} = \frac{a}{b} \quad \text{или} \quad \frac{V(A)}{V(B)} = \frac{a}{b}$$
 (8)

т.е. отношение объемов, участвующих в реакции газов, равно отношению их стехиометрических коэффициентов.

Если количество одного из веществ (A) задано массой, а другого (B) – объемом, то аналогичным образом получим:

$$\frac{m(A)}{V(B)} = \frac{a}{b} \cdot \frac{M(A)}{V_m} = \frac{a}{b} \cdot \frac{M(A)}{22,4} \quad (при н.у.)$$
 (9)