Виведення формули речовини за масовими частками елементів

Виведення молекулярної формули речовин було однією з перших задач, що постали перед хіміками після того, як почали використовувати вимірювання в хімічних дослідженнях. Знаючи масові частки елементів у сполуці (як органічної, так і неорганічної), можна визначити її молекулярну масу, а отже, і її хімічну формулу. Для розв'язання таких задач можна використовувати різні алгоритми.

Виведення молекулярної формули речовини за відомою масовою часткою елемента у сполуці

Цей алгоритм найбільш доцільний для бінарних сполук (що складаються з атомів двох елементів), зокрема оксидів та вуглеводнів. Його можна застосовувати й для інших сполук, але через велике число невідомих величин це буде досить складно.

Цей алгоритм застосовують, якщо за умовою задачі відомо:

- що речовина є бінарною;
- з яких хімічних елементів складається речовина;
- масову частку одного з елементів.

Ви вже у 7 класі навчилися обчислювати масові частки елементів у сполуці за хімічною формулою. Тепер розв'яжемо зворотну задачу.

Масові частки елементів обчислюють за формулою:

$$w(\text{елемента}) = \frac{N(\text{елемента}) \cdot A_r(\text{елемента})}{M_r(\text{речовини})} \qquad (1)$$

де w — масова частка елемента, A_r — відносна атомна маса цього елемента, N — число атомів цього елемента в молекулі (формульній одиниці[1]), M_r — відносна молекулярна маса сполуки.

За цією формулою отримуємо формулу для розрахунку відносної молекулярної маси речовини:

$$M_r(\text{речовини}) = \frac{N(\text{елемента}) \cdot A_r(\text{елемента})}{w(\text{елемента})} \qquad (2)$$

Відносна атомна маса елемента (A_r) наведена в Періодичній системі, а його масова частка (w) відома за умовою задачі. Але лишається одна невідома величина — N. Ми знаємо, що зазвичай число атомів у молекулі є невеликим цілим числом, тому під час розв'язування задач припускаємо, що N дорівнює 1 або 2, 3 тощо.

Зверніть увагу! Для розв'язання задач, у яких дані наведені у відсотках, зручніше одразу перевести їх у частку від одиниці діленням на 100.

Задача 1. Визначте хімічну формулу сполуки Калію з Оксигеном, у якій масова частка Калію становить 83 %.

Розв'язання:
У формулу (2) підставляємо $A_r(\text{K}) = 39$ та $w(\text{K}) = 0{,}83$.
Припускаємо, що $N = 1$, та обчислюємо:

$$M_r(\text{речовини}) = \frac{N(\text{K}) \cdot A_r(\text{K})}{w(\text{K})} = \frac{1 \cdot 39}{0{,}83} = 47.$$

Оскільки ми припустили, що у сполуці один атом Калію, то з маси 47 на атоми Оксигену припадає різниця: 47 − 39 = 8. Це відповідає половині атома Оксигену, чого бути не може.
Припускаємо, що атомів Калію два, тобто $N = 2$, та обчислюємо:

$$M_r(\text{речовини}) = \frac{N(\text{K}) \cdot A_r(\text{K})}{w(\text{K})} = \frac{2 \cdot 39}{0{,}83} = 94.$$

Оскільки цього разу ми припустили, що у сполуці два атоми Калію, то від маси 94 віднімаємо масу двох атомів Калію. Отже, на атоми Оксигену припадає різниця $94 - 2 \cdot 39 = 16$. Це відповідає одному атому Оксигену. Отже, хімічна формула K_2O.
Відповідь: формула сполуки — K_2O.

Виведення молекулярної формули речовини за відомою відносною молекулярною масою речовини

Цей алгоритм застосовують, якщо за умовою задачі відомо:

- що речовина не обов'язково є бінарною;
- з яких хімічних елементів складається речовина;
- масові частки всіх елементів;
- відносна молекулярна або молярна маса речовини.

Для розв'язання задач такого типу також можна використовувати формулу для обчислення масової частки (1), але її необхідно перетворити так, щоб можна було розрахувати число атомів певного елемента:

$$N(\text{елемента}) = \frac{M_r(\text{речовини}) \cdot w(\text{елемента})}{A_r(\text{елемента})} \qquad (3)$$

Задача 2. Визначте молекулярну формулу органічної речовини з молярною масою 60 г/моль, у якій масова частка Карбону становить 40 %, Гідрогену — 6,67 %, інше припадає на Оксиген.

Розв'язання:
За умовою речовина складається з атомів Карбону, Гідрогену та Оксигену, тож її формулу умовно можна записати як $\text{C}_x\text{H}_y\text{O}_z$. Відносна молекулярна маса речовини чисельно дорівнює її молярній масі, тобто $M_r = 60$.
У формулу (3) підставляємо $M_r = 60$, $w(\text{C}) = 0{,}4$ та $A_r(\text{C}) = 12$.

$$N(\text{C}) = \frac{60 \cdot 0{,}4}{12} = 2.$$

Так само визначаємо число атомів Гідрогену: $N(\text{H}) = \frac{60 \cdot 0{,}067}{1} = 4$.
Число атомів Оксигену можна визначити за залишковим принципом. Від відносної молекулярної маси речовини віднімаємо відносні атомні маси всіх атомів Карбону та Гідрогену: $60 - 2 \cdot 12 - 4 \cdot 1 = 32$. Ця маса припадає на Оксиген та відповідає двом атомам. Отже, хімічна формула сполуки $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$.
Відповідь: формула сполуки — $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$.

Виведення молекулярної формули небінарної сполуки за відомими масовими частками

Цей алгоритм є універсальним і підходить для розв'язування будь-яких задач на виведення формул речовин (як органічних, так і неорганічних) за відомими масовими частками.

Цей алгоритм застосовують, якщо за умовою задачі відомо:

- що речовина необов'язково є бінарною;
- з яких хімічних елементів складається речовина;
- масові частки всіх елементів.

Алгоритм ґрунтується на одному з базових принципів хімії — стехіометрії. Ви пам'ятаєте, що і хімічна формула, і коефіцієнти в рівняннях реакцій показують співвідношення атомів чи молекул під час хімічної взаємодії. Можна впевнено стверджувати, що співвідношення індексів у хімічній формулі речовини таке саме, як і співвідношення кількості речовини (у молях) атомів у цій речовині.

Наприклад, для речовини $C_xH_yO_z$ справедливо:

$$x : y : z = n(\mathrm{C}) : n(\mathrm{H}) : n(\mathrm{O}) \qquad (4)$$

Оскільки кількість речовини прямо пропорційна масовій частці, то формулу (4) можна перетворити так:

$$x : y : z = \frac{w(\mathrm{C})}{M(\mathrm{C})} : \frac{w(\mathrm{H})}{M(\mathrm{H})} : \frac{w(\mathrm{O})}{M(\mathrm{O})} \qquad (5)$$

Зверніть увагу! У цю формулу масові частки можна підставляти як у відсотках, так і у частках від одиниці.

Наприклад, для співвідношення кількості речовини Карбону та Гідрогену

$$n(\mathrm{C}) : n(\mathrm{H}) = \frac{m(\mathrm{C})}{M(\mathrm{C})} : \frac{m(\mathrm{H})}{M(\mathrm{H})}$$

оскільки $m(\mathrm{C}) = w(\mathrm{C}) \cdot m(\text{речовини})$ та $m(\mathrm{H}) = w(\mathrm{H}) \cdot m(\text{речовини})$, то

$$n(\mathrm{C}) : n(\mathrm{H}) = \frac{w(\mathrm{C}) \cdot m(\text{речовини})}{M(\mathrm{C})} : \frac{w(\mathrm{H}) \cdot m(\text{речовини})}{M(\mathrm{H})} = \frac{w(\mathrm{C})}{M(\mathrm{C})} : \frac{w(\mathrm{H})}{M(\mathrm{H})}$$

Задача 3. Певна речовина містить Карбон (52,2 %), Гідроген (13 %) та Оксиген. Визначте її молекулярну формулу.

Розв'язання:

Записуємо умовну формулу речовини $C_xH_yO_z$.

Визначаємо масову частку Оксигену: $100\ \% - 52{,}2\ \% - 13\ \% = 34{,}8\ \%$.

У формулу (5) підставляємо масові частки та молярні маси елементів:

$$x : y : z = \frac{52,2}{12} : \frac{13}{1} : \frac{34,8}{16} = 4,35 : 13 : 2,175.$$

Тепер із цього співвідношення необхідно дізнатися індекси у формулі. Ураховуючи, що індекси можуть бути тільки цілими числами, то отримане співвідношення необхідно перетворити так, щоб усі числа в ньому були цілими. Для цього розділимо всі числа у співвідношенні на найменше серед них, у нашому випадку на 2,175:

$x : y : z = 4,35 : 13 : 2,175 = 2 : 6 : 1.$

Підставляємо обчислені індекси та отримуємо формулу C_2H_6O.

Відповідь: формула сполуки — C_2H_6O.

Задача 4. Визначте формулу вуглеводню, в якому масова частка Карбону становить 80 %.

Розв'язання:

Записуємо умовну формулу речовини, ураховуючи те, що ця сполука є вуглеводнем: C_xH_y. Визначаємо масову частку Гідрогену: 100 % − 80 % = 20 %. За формулою (5) визначаємо співвідношення індексів:

$$x : y = \frac{80}{12} : \frac{20}{1} = 6,67 : 20.$$

Визначаємо індекси у формулі. Перетворюємо співвідношення так, щоб усі числа в ньому були цілими. Для цього поділимо всі числа у співвідношенні на найменше серед них, у нашому випадку на 6,67:

$x : y = 6,67 : 20 = 1 : 3.$

Підставляючи індекси, отримуємо формулу сполуки CH_3. Але речовини з такою формулою існувати не може (оскільки валентність Карбону в органічних сполуках IV). За отриманим співвідношенням можна дізнатися індекси, якщо помножити його на ціле число (2, 3, 4 тощо) та вибрати індекси такі, що мають хімічний сенс. Наприклад, співвідношенню 1 : 3 дорівнює співвідношення 2 : 6. А з такими індексами існує речовина C_2H_6 (етан).

Відповідь: формула сполуки C_2H_6.