

Osnove kemijskog računa i stehiometrije

4



4.1. Kemijski račun

Prilikom kemijskog računanja treba poznavati sljedeće pojmove i njihove jedinice:

Fizikalna veličina	Oznaka	Jedinica SI
množina tvari	n	mol
masa	m	kg
masa atoma	m_a	kg
masa formulae jedinke ili molekule	m_f	kg
molarna masa	M	g/mol
relativna molekulska masa	M_r	
Avogadrova konstanta	N_A	$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
broj, brojnost	N	
volumen	V	m^3
standardni molarni volumen plina	V_m	$V_m = 22,4 \text{ dm}^3/\text{mol}$

Velike i male brojeve koji se javljaju u računanju prikazujemo u eksponencijalnom obliku.

$$1\,000\,000 = 10^6 \text{ dok je } 0,000\,001 = 10^{-6}.$$

Treba paziti i na preračunavanje jedinica:

$$1 \text{ kg} = 1000 \text{ g}, 1 \text{ L} = 1000 \text{ ml} = 1 \text{ dm}^3, 1 \text{ m}^2 = 10^4 \text{ cm}^2, 1 \text{ cm}^2 = 10^{-4} \text{ m}^2,$$

$$1 \text{ ml} = 1 \text{ cm}^3 = 0,001 \text{ dm}^3, 1 \text{ nm}^3 = 10^{-21} \text{ cm}^3$$

Faktor	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-6}	10^{-9}	10^{-12}	10^1	10^2	10^3	10^6	10^9	10^{12}
Prefiks	deci	centi	mili	mikro	nano	piko	deka	hekto	kilo	mega	giga	tera
Znak	d	c	m	μ	n	p	da	h	k	M	G	T

Dogovorena veličina za uspoređivanje mase atoma i molekule je atomska jedinica mase (u ili m_u ili Da – Dalton). To je 1/12 mase atoma ugljikova izotopa C-12. Dijeljenjem mase atoma s atomskom jedinicom mase dobijemo relativnu atomsku masu A_r . Dijeljenjem mase molekule s atomskom jedinicom mase dobijemo relativnu molekulska masu M_r (koju možemo izračunati i zbrajanjem relativnih atomskih masa atoma u molekuli).

Unificirana atomska jedinica mase, u	$u = \frac{1}{12} m_a(^{12}\text{C}) = 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$	
Relativna atomska masa, A_r	$A_r(X) = \frac{m_a(X)}{u}$	$m_a(X) = A_r(X) \cdot u$ m_a – masa atoma
Relativna molekulska masa, M_r	$M_r(XY) = A_r(X) + A_r(Y)$	$m_f(XY) = M_r(XY) \cdot u$ m_f – masa molekule
Molarna masa, M	$M(XY) = M_r(XY) \text{ g mol}^{-1}$ ili $M(X) = A_r(X) \text{ g mol}^{-1}$	

Prema latinskoj riječi *numerus* (broj) veliko slovo N koristi se kao oznaka za broj ili brojnost jedinica. Jedinke su atomi, ioni, formulske jedinice, molekule. Određivanje njihova broja u nekom uzorku računa se prema formuli:

$$N(\text{jedinka}) = \frac{m(\text{uzorak})}{m(\text{jedinka})}, \text{ odnosno } N(XY) = \frac{m(XY)}{m_f(XY)}.$$

Množina tvari, n , je fizikalna veličina kojom iskazujemo količinu tvari. Jedinica je **mol**. **Mol je količina uzorka koji sadrži onoliko jedinica koliko ima atoma u 0,012 kg ugljika C-12.** U 0,012 kg C-12 ima **Avogadrov broj** jedinica koji iznosi $6,022 \cdot 10^{23}$.

Izražavanje množine tvari poznatim veličinama (uz pomoć mase, brojnosti ili volumena):

$$n = \frac{m}{M} = \frac{N}{N_A} = \frac{V^0}{V_m^0}.$$

Avogadrov zakon temelji se na pretpostavci da jednaki volumeni plinova sadrže jednake brojeve plinovitih čestica pri istom tlaku i temperaturi pa time i jednake množine plinova. Nakon otkrića Avogadrova zakona bilo je jednostavno povezati volumen i množinu plina, tj. trebalo je odrediti volumen plina koji sadrži Avogadrov broj čestica – to je volumen jednog mola plina, tj. **molarni volumen** V_m .

Pri istom tlaku i temperaturi molarni volumen je jednak za sve plinove, jedinica u SI sustavu je $\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$, ali se češće koristi $\text{dm}^3 \text{ mol}^{-1}$. Pri standardnim uvjetima 1 mol plina zauzima volumen od $22,4 \text{ dm}^3$. Taj volumen se zove **standardni molarni volumen**,

$$V_m = 22,4 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$$

Normalni uvjeti za plin su: $t = 0 \text{ }^\circ\text{C}$ i $p = 101,3 \text{ kPa}$

$$V^0(x) = n(X) V_m^0.$$

Maseni udio pojedinog elementa u spoju A^2B , gdje je w – maseni udio jednog sastojka u ukupnoj masi smjese ili otopine, definiran je izrazom: $w(A, A_2B) = \frac{m(A)}{m(A_2B)}$.

Općenito:

$$w(A, A_xB) = \frac{x \cdot A_r(A)}{M_r(A_xB)}.$$



4.2. Zadatci iz kemijskog računa

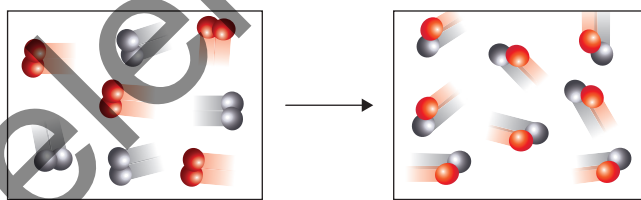
1. Za ugljikov dioksid (CO_2) izračunaj:
 - a) relativnu molekulsku masu
 - b) molarnu masu
 - c) masu jedne molekule.
2. Izračunaj relativnu molekulsku masu kalcijeva fosfata.
3. Izračunaj relativnu atomsku masu izotopa kalija ^{40}K ako je masa njegova atoma $66,42 \cdot 10^{-24}$ g.
4. Koliko je puta masa atoma broma veća od mase atoma litija?
5. Izračunaj masu jednog atoma kisika i odredi koliko je puta masa atoma kisika veća od mase atoma vodika.
6. Izračunaj masu 18 molekula sumporne kiseline.
7. Izračunaj množinu atoma željeza u 2,5 g željezova(III) sulfata.
8. Za uzorak amonijaka NH_3 mase 0,5 g odredi:
 - a) volumen pri s.u.
 - b) brojnost molekula amonijaka
 - c) brojnost atoma vodika.
9. Modra galica je hidratna sol u kojoj je vezano 5 molekula vode pa joj je formula $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$. U 50 g te soli izračunaj:
 - a) množinu soli (n)
 - b) broj formulačkih jedinica CuSO_4 (N)
 - c) broj molekula vode
 - d) množinu i broj atoma vodika.
10. U uzorku dušika mase 5 g izračunaj:
 - a) množinu molekula dušika
 - b) broj molekula dušika
 - c) volumen dušika pri s.u.
11. Odredi maseni udio željeza i kisika u željezovom(III) oksidu. Izračunaj masu kisika ako je masa željezova(III) oksida 5 kg.
12. Većina elemenata u prirodi je smjesa nuklida. Srebro ima dva izotopa: ^{107}Ag čiji je maseni udio 51,83 % i ^{109}Ag čiji je maseni udio 48,17 %. Relativna atomska masa izotopa ^{107}Ag je 106,9051 dok je A_r izotopa ^{109}Ag 108,9048. Izračunaj relativnu atomsku masu prosječnog atoma srebra.

Izotop	Maseni udio	A_r
^{107}Ag	51,83 %	106,9051
^{109}Ag	48,17 %	108,9048

13. Analizom je utvrđeno da je krom smjesa 4 izotopa. Relativna atomska masa atoma kroma je 51,98. Izračunaj maseni udio izotopa ^{54}Cr . Izračunaj masu prosječnog atoma kroma.

Izotop	Maseni udio	A_r
^{52}Cr	83,79 %	51,941
^{53}Cr	9,50 %	52,941
^{50}Cr	4,35 %	49,946
^{52}Cr	?	53,939

14. Odaberi točan odgovor relativne molekulske mase glukoze:
 a) 180,156 g b) $180,156 \text{ mol}^{-1}$ c) 180,156 mol d) 180,156.
15. Izračunaj maseni udio vode u uzorku kristalne sode $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$.
16. Koliki je broj atoma natrija u 100 g natrija?
17. Kolika se masa modre galice može dobiti iz 500 g elementarnog bakra?
18. Sljedeći prikaz predstavlja kemijsku reakciju između elemenata A (crveno) i B (sivo). Koja od navedenih reakcija najtočnije predstavlja prikazanu reakciju?



- a) $2A + 2B \rightarrow A_2 + B_2$ b) $A_2 + B_2 \rightarrow 2AB$
 c) $B_2 + 2AB \rightarrow 2B_2 + A_2$ d) $4A_2 + 4B_2 \rightarrow 8AB$
19. Koliko iona natrija sadrži uzorak natrijeva fosfata Na_3PO_4 mase 2 g?
 a) $7,35 \cdot 10^{21}$ b) $2,20 \cdot 10^{22}$ c) $7,35 \cdot 10^{22}$ d) $2,20 \cdot 10^{23}$
20. Koliko je molekula vodika potrebno za potpuno hidrogeniranje 0,1 mola etina?
 a) $3,01 \cdot 10^{22}$ b) $6,02 \cdot 10^{22}$ c) $1,2 \cdot 10^{23}$ d) $1,8 \cdot 10^{23}$
21. Koliki volumen zauzima 0,1 mol molekula kisika pri temperaturi od 25°C i tlaku od 1 bara?



4.3. Empirijska i molekulska formula spoja

Skup simbola koji prikazuje sastav kemijskoga spoja naziva se formulom kemijskoga spoja. **Najmanji omjer broja atoma** ili iona u nekome spoju naziva se **empirijskom formulom**, a može se odrediti samo eksperimentalno.

Da bismo odredili empirijsku formulu spoja, eksperimentalno odredimo omjer masa elemenata (ili maseni udio pojedinog elementa u spoju) koji se zatim prevede u omjer broja jedinici.

$$N(X) : N(Y) = \frac{w(X)}{A_r(X)} : \frac{w(Y)}{A_r(Y)} \quad A_r(X) = M(X)$$

Maseni udio pojedinog elementa podijeli se s A_r (M , *molarnom masom*) tog elementa. Ako dobijemo cijele brojeve, to je traženi omjer. Ako dobijemo decimalne brojeve, tada dijelimo s najmanjim dobivenim decimalnim brojem da bismo dobili cijeli broj.

Molekulska formula prikazuje **stvarni broj atoma** elemenata u molekuli ili formulskoj jedinici spoja. Ona može biti jednaka empirijskoj formuli, ali i ne mora. Molekulsku formulu spoja možemo odrediti iz njegove empirijske formule, samo trebamo poznavati njegovu relativnu molarnu masu.

(empirijska formula) $_x$ = molekulska formula

x = broj empirijskih jedinici (cijeli broj), x dobijemo dijeljenjem M_r (spoja) i E_r (empirijske formule).

$$x = \frac{M_r(\text{spoj})}{E_r(\text{jedinica})}$$

E_r = relativna masa empirijske jedinice.

Omjerom relativne molekulske mase spoja M_r i relativne mase empirijske jedinice odredi se molekulska formula. Ako je taj omjer jedan, empirijska formula ujedno je i molekulska formula spoja.

U nekim slučajevima kao kod H_2O , NH_3 , CH_4 empirijska i molekulska formula su jednake.

Kod poznate relativne molekulske mase spoja broj atoma u molekuli računa se prema izrazu:

$$N(X) = \frac{w(X, XY) \cdot M_r(XY)}{A_r(X)}$$

Preporuka je da se u molekulskoj formuli elementi navode prema abecednom redu.

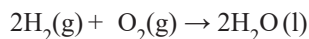
4.4. Zadatci iz empirijske i molekulske formule spoja

- Čileanska salitra je umjetno gnojivo. Analizom je utvrđeno da je maseni udio dušika u njoj 0,1648, a kisika 0,5647 dok je ostatak do 100 % natrij. Odredi empirijsku formulu čileanske salitre.
- Odredi empirijsku formulu spoja koji se sastoji od 2,4 % vodika, 39 % sumpora i 58,6 % kisika.
- Odredi empirijsku i molekulsku formulu spoja ako je analizom nađeno da se sastoji od 92,26 % ugljika i 7,74 % vodika. Relativna molekulska masa spoja je 78,108. Treba pronaći relativnu masu spoja te empirijsku formulu.
- Potpunim sagorijevanjem nekog ugljikovodika nastalo je 0,112 dm³ CO₂ i 0,09 g H₂O. Odredi empirijsku formulu tog ugljikovodika.
- Odredi empirijsku i molekulsku formulu ugljikovodika u kojem je maseni udio ugljika 85,7 %, a relativna molekulska masa spoja je 84.
- Pronađi najjednostavniju formulu spoja koja sadrži 12,1 % natrija, 11,4 % bora, 29,4 % kisika, a ostatak je voda.
- Zagrijavanjem 2,78 g FeSO₄ · x H₂O masa se smanji za 1,26 g zbog potpunog isparavanja vode. Koja je formula spoja?
 a) FeSO₄ · 2H₂O b) FeSO₄ · 5H₂O c) FeSO₄ · 7H₂O d) FeSO₄ · 3H₂O
- Analizom je ustanovljeno da je udio ugljika u spoju 92,25 %, a vodika 7,75 %. M_r spoja je 104,15. Odredi molekulsku formulu ugljikovodika.

4.5. Stehiometrija kemijskih reakcija

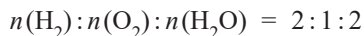
Stehiometrija kemijskih reakcija ili računanje na osnovu jednadžbe temelji se na zakonu o očuvanju mase (Lavoisierov zakon). **Ukupna masa reaktanata mora biti jednaka ukupnoj masi produkata, odnosno brojevi atoma pojedinog elementa lijevo i desno moraju biti jednaki.**

Reakcijom vodika i kisika nastaje voda što prikazujemo jednadžbom. Jednadžba daje i omjer broja jedinki u reakciji.

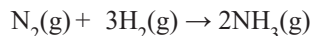


$$N(\text{H}_2) : N(\text{O}_2) : N(\text{H}_2\text{O}) = 2 : 1 : 2$$

Kako je **brojnost jedinki proporcionalna njihovoj množini**, jednadžba nam daje uvid i u omjere njihovih množina pa vrijedi:



U reakcijama među plinovima (npr. nastajanje amonijaka) **množina jedinki ili njihova brojnost proporcionalna je volumenu plina** pa slijedi:



$$N(\text{N}_2):N(\text{H}_2):N(\text{NH}_3) = n(\text{N}_2):n(\text{H}_2):n(\text{NH}_3) = V(\text{N}_2):V(\text{H}_2):V(\text{NH}_3) = 1:3:2$$

Ako jednog reaktanta nema dovoljno, množine produkata će biti onolike koliko dopušta taj reaktant. Produkt će nastajati dok se taj reaktant ne potroši pa ga zovemo **mjerodavnim reaktantom**. Mjerodavni reaktant je onaj koji proizvodi najmanju količinu produkta i potpuno se troši u reakciji.

Kod određivanja mjerodavnog reaktanta uvijek treba promatrati stehiometriju jednadžbe kemijske reakcije. Za sigurno određivanje mjerodavnog reaktanta dobro je dobivene množine reaktanata podijeliti s njihovim koeficijentom (stehiometrijskim brojem) u jednadžbi. Tako dobivena najmanja vrijednost predstavlja mjerodavni reaktant, a izračuna se doseg.

Stehiometrijski brojevi (v) za reaktante uvijek imaju negativni predznak jer se množina reaktanata smanjuje, a za produkte pozitivni jer im se množina u reakciji povećava za reakciju:



Stehiometrijski su brojevi:

$$v(\text{C}) = 1 \quad v(\text{A}) = -1 \quad v(\text{B}) = -2$$

Doseg reakcije (ξ) je množina reakcijskih pretvorbi, a može se izraziti i prekobrojnost reakcijskih pretvorbi.

$$\xi = n_r = \frac{N_r}{N_A} \quad \xi = n_r = \frac{\Delta n(x)}{v(x)} = \frac{n_{\text{konačno}} - n_{\text{početno}}}{v(x)}$$

Doseg iste reakcije isti je bez obzira za koju tvar mjerimo. Iz dosega računamo mjerodavni reaktant (onaj s manjim dosegom cijeli se potroši u reakciji pa je to mjerodavni reaktant). Pomoću množine mjerodavnog reaktant računamo množine ostalih sudionika reakcije.

Iskorištenje reakcije η je omjer mase (ili množine) produkta dobivenog reakcijom i teorijske mase koju predviđa stehiometrija reakcije.

$$\eta = \frac{m(\text{produkt, dobiveni})}{m(\text{produkt, teoretski})}$$

Računanje relativne pogreške:

$$P = \frac{V_E - V_L}{V_L} \cdot 100$$

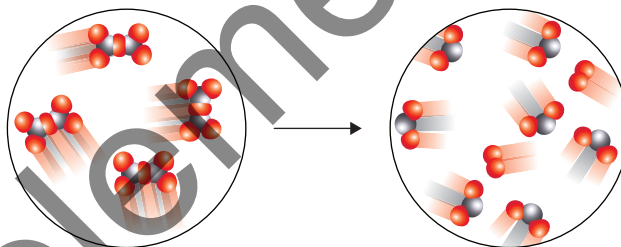
P – relativna pogreška mjerenja

V_E – eksperimentalno određena vrijednost

V_L – literaturna (teoretska) vrijednost.

4.6. Zadaci iz stehiometrije kemijskih reakcija

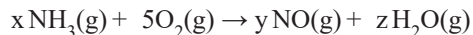
- Gorenjem pirita FeS_2 nastaju Fe_2O_3 i SO_2 . Kolika masa Fe_2O_3 nastaje potpunim izgaranjem 150 g pirita?
- U reakciji magnezija i kisika nastaje magnezijev oksid. U reakciju je ušlo 6 g magnezija i 2 g kisika. Odredi mjerodavni reaktant, izračunaj množinu reaktanta u suvišku te odredi masu nastalog magnezijeva oksida.
- Kolika je masa kalcijeva klorida potrebna da u reakciji sa srebrovim nitratom nastane 10 g srebrova klorida?
- Magnezijev nitrid nastaje reakcijom magnezija i dušika. Odredi volumen dušika potreban za nastajanje 50 g magnezijeva nitrida.
- Uvođenjem ugljikova dioksida u vapnenu vodu nastaje zamućenje od bijelog taloga CaCO_3 . Za pripremu vapnene vode utrošeno je 50 g kalcijeva hidroksida. Odredi:
 - volumen potrošenog ugljikova dioksida
 - broj molekula CO_2 .
- Napišite kemijsku reakciju prikazanu slikom! Sivi atomi su N atomi, a narančasti atomi su O atomi.



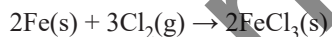
- Pri reakciji magnezija i sulfatne kiseline nastane 36 g magnezijeva sulfata. Kolike su mase kiseline i magnezija potrebne za reakciju?
- Koliko je grama aluminija (Al) potrebno da u reakciji sa SiO_2 nastane 5 mola aluminijeva oksida (Al_2O_3) ako je iskoristivost 80 %?
- U reakciji između dušika i vodika nastaje amonijak. Ako je u reakcijsku smjesu stavljeno 7 g dušika i 5 g vodika, odredi koji je reaktant mjerodavan i napiši jednadžbu reakcije.
- Žarenjem vapnenca nastaje kalcijev oksid, živo vapno i ugljikov dioksid. Izračunaj masu kalcijeva oksida i volumen ugljikova dioksida koji nastaju ako žariš 250 g vapnanca 95 %-tne čistoće.



11. Koji par navedenih stehiometrijskih koeficijenata produkata odgovara prikazanoj jednadžbi kemijske reakcije?



- a) $y = 5, z = 5$ b) $y = 2, z = 8$ c) $y = 6, z = 4$ d) $y = 4, z = 6$
12. Izračunaj doseg reakcije izgaranja glukoze ako se u reakciji potroši 50 g šećera.
13. U reakciji elementarnog fosfora i klora nastaje 225 g PCl_3 . Izračunaj:
- doseg reakcije i brojnost reakcijskih pretvorbi
 - volumen klora potrebnog za reakciju pri 25 °C i tlaku 1 atmosfera
 - masu fosfora koji je reagirao.
14. U reakciji 133 g Cr i 68 g O_2 nastaje Cr_2O_3 . Koristeći se dosegom reakcije odredi mjerodavni reaktant. Izračunaj masu nastalog produkta uz iskorištenje 91 %. Izračunaj masu neizreagirano reaktanta.
15. Početne su množine reaktanata koji sudjeluju u kemijskoj promjeni prikazanoj jednadžbom jednake i iznose 12 mol.



Izračunaj iskorištenje opisane kemijske reakcije ako je masa nastalog željezova(III) klorida 1103,5 g.

16. Bakar i sumpor su zagrijavani pa je sadržaj ohlađen.
- Odredi empirijsku formulu čvrstog produkta koji je nastao ako je kemijskom analizom određeno da je maseni udio bakra 0,80, a sumpora 0,2.
 - Koji je broj atoma u bakrenoj žici mase 3,16 g?
17. Kolike mase natrijeva klorida i sumporne kiseline trebaju reagirati za dobivanje 18,3 kg klorovodične kiseline? (Rješavati primjenom molne metode.)