

Нахождение молекулярной формулы вещества. Задание 40.

Зыбанова Людмила Григорьевна,
учитель химии МБОУ гимназии № 2

Задачи на вывод формул веществ

- Химической формулой называется, условная запись состава вещества с помощью химических знаков и индексов. Каждое вещество имеет качественный и количественный состав. Качественный состав отражают знаки химических элементов, входящих в это вещество, количественный состав — индексы, показывающие число атомов элемента, например, CH_4 , C_2H_4 , C_3H_6 , C_4H_8 . Все эти вещества состоят из углерода и водорода, т. е. имеют одинаковый качественный состав — углерод и водород, но отличаются числом атомов этих элементов в молекулах (имеют различный количественный состав).

Задачи на вывод формул веществ

- Рассмотрим количественный состав веществ. В 1 молекуле метана содержится 1 атом углерода и 4 атома водорода; в 1 моль молекул метана CH_4 содержится 1 моль атомов углерода и 4 моль атомов водорода. Отношение количества атомов элементов («числа молей» атомов) $n(\text{C}) : n(\text{H})$ — 1 : 4 для 1 моль этого вещества совпадает с отношением индексов (отношением числа атомов) в 1 молекуле метана и самими индексами.

Задачи на вывод формул веществ

Истинная формула вещества	Отношение количества атомов элементов	Простейшее отношение индексов	Простейшая формула вещества	Истинная молярная масса $M_{\text{ист.}}$	Молярная масса простейшей формулы $M_{\text{прост.}}$	$k = M_{\text{ист.}}/M_{\text{прост.}}$
CH_4	1:4	1:4	CH_4	16	16	1
C_2H_4	2:4	1:2	CH_2	28	14	2
C_3H_6	3:6	1:2	CH_2	42	14	3
CH_2O	1:2:1	1:2:1	CH_2O	30	30	1
$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$	6:12:6	1:2:1	CH_2O	180	30	6

- Из приведённых в таблице примеров видно, что простейшая (вычисленная) формула, составленная по соотношению количества вещества (числа молей) атомов элементов, может как совпадать с истинной формулой вещества, так и отличаться от неё числом атомов в несколько раз в соответствии с коэффициентом кратности, вычисляемым как отношение истинной молярной массы к молярной массе простейшей формулы.

Определение формулы по известному элементному составу

- В соответствии со сказанным, решение задачи по определению формулы вещества по его элементному составу (процентному составу) будет выполняться по следующему алгоритму:
 - 1) Определить качественный состав вещества.
 - 2) Определить количественный состав вещества, то есть найти количество вещества («число молей») атомов каждого элемента, содержащееся в определённой порции вещества.
 - 3) Определить простейшее отношение количества («числа молей») элементов, т.е. найти простейшие индексы, составить простейшую формулу вещества и вычислить её молярную массу ($M_{\text{прост.}}$).
 - 4) Определить истинную молярную массу ($M_{\text{ист.}}$), используя дополнительные сведения.
 - 5) Сравнить молярные массы ($M_{\text{ист.}}$ и $M_{\text{прост.}}$) и составить истинную формулу вещества.

Определение формулы по известному элементному составу

- Пример. Определить формулу вещества, содержащего 83,33% углерода и водород.

Решение.

Необходимо установить формулу C_xH_y , т.е. установить соотношение между молями атомов химических элементов, входящих в данную формулу неизвестного углеводорода.

Определение формулы по известному элементному составу

$$n(\text{Э}) = m(\text{Э}) / M(\text{Э});$$

Пусть $m(\text{C}_x\text{H}_y) = 100$ г, тогда $m(\text{Э}) = m(\text{в-ва}) \cdot w(\text{Э})$;

$$m(\text{C}) = 83,33 \text{ г}; m(\text{H}) = 100 - 83,33 = 16,67 \text{ г};$$

$$n(\text{C}) = 83,33 / 12 = 6,944 \text{ моль}; n(\text{H}) = 16,67 \text{ моль};$$

$$x:y = n(\text{C}):n(\text{H}); x:y = 6,944:16,67;$$

Означает: $x:y = 1:2,4 (\cdot 5)$;

В молекулах углеводородов не может быть количество атомов водорода нечетным или нецелым числом. Доводим количество атомов водорода до ближайшего целого четного числа и получаем формулу C_5H_{12}

Определение формулы по известному элементному составу

Содержание задач на определение молекулярной формулы вещества по известным массовым долям элементов чаще всего усложнены:

- Относительной плотностью данного вещества по другому веществу. Необходимо использовать формулу для относительной плотности газов:

$$D_2 = M_1 / M_2 = \rho_1 / \rho_2; \quad M_1 = D_2 \cdot M_2$$

- Удельной плотностью неизвестного определяемого вещества, т.е., применяется формула $m = \rho \cdot V$, если количество вещества берем 1 моль, то объем тогда будет молярным, т.е. V_m и формула приобретет следующий вид:

$$m = \rho \cdot V_m; \quad M = \rho \cdot V_m$$

Определение формулы по известному элементному составу

Пример. Относительная плотность углеводорода по водороду равна 21, массовая доля углерода равна 85,71%. Установите молекулярную формулу углеводорода.

Решение:

Пусть $m(C_xH_y)=100$ г; $m(C)=85,71$ г; $m(H)=14,29$ г;

$n(C)=85,71/12=7,143$ моль; $n(H)=14,29$ моль;

$x:y=7,143:14,29=1:2$; $M_{\text{прост.}}(CH_2) = 14$ г/моль;

$M_{\text{ист.}}(C_xH_y)=D_{H_2} \cdot M(H_2)=21 \cdot 2=42$ г/моль;

$M_{\text{ист.}}(C_xH_y)/M_{\text{прост.}}(CH_2)=42/14=3$;

Ответ: C_3H_6

Определение формулы по известному элементному составу

Пример. Установите молекулярную формулу углеводорода, массовая доля углерода в котором 82%, а плотность этого вещества (н.у) равна 1,97 г/л.

Решение:

Пусть $m(C_xH_y)=100$ г; $m(C)=82$ г; $m(H)=18$ г;

$n(C)=82/12=6,833$ моль; $n(H)=18$ моль;

$x:y=6,833:18=1:2,634=3\cdot 7,9=3:8$; $M_{\text{прост.}}(C_3H_8)=44$ г/моль;

$M_{\text{ист.}}(C_xH_y)=22,4\cdot 1,97=44$ г/моль;

$M_{\text{ист.}}(C_xH_y)/M_{\text{прост.}}(C_3H_8)=44/44=1$;

Ответ: C_3H_8

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Основные формулы для расчёта:

$$n = m_{\text{В-ВА}} / M_{\text{В-ВА}} ; \quad n_{\text{ГАЗ}} = V_{\text{ГАЗ}} / V_m ; \quad M_{\text{В-ВА}} = \rho \cdot V_m ; \quad D_2 = M_1 / M_2 ; \quad n = N / N_A$$

Применяем уравнение материального баланса.

Пример. При сгорании 24,6 г вещества образовалось 26,88 л углекислого газа (при н. у.), 9 г воды и 2,24 л азота (при н.у.). 1 литр паров этого вещества (при н.у.) имеет массу 5,491 г. Найти формулу вещества.

1) Так как в составе продуктов сгорания содержится:

- углекислый газ, то вещество обязательно имело в своём составе атомы углерода (С);
- вода, то вещество обязательно имело в своём составе атомы водорода (Н);
- азот, то вещество обязательно имело в своём составе атомы азота (N).

Возможно, что в состав вещества входил кислород, так как атомы кислорода могли попасть в молекулы углекислого газа, воды как из простого вещества кислорода при горении, так и из сложного органического вещества, если они входили в его состав, поэтому формулу вещества в общем виде следует записать в двух вариантах $\underline{C_xH_yN_z}$ и $\underline{C_xH_yN_zO_w}$.

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

В решении есть обязательное действие: необходимость проверки наличия кислорода в составе этого вещества, т.е. составление уравнения материального баланса.

2) Устанавливаем количественный состав образца:

$$\text{а) } n(\text{CO}_2) = 26,88 / 22,4 = \underline{1,2 \text{ моль}} = n(\text{C}); \quad m(\text{C}) = 1,2 \cdot 12 = \underline{14,4 \text{ г}};$$

$$\text{б) } n(\text{H}_2\text{O}) = 9 / 18 = \underline{0,5 \text{ моль}}; \quad n(\text{H}) = \underline{1 \text{ моль}}; \quad m(\text{H}) = 1 \cdot 1 = \underline{1 \text{ г}};$$

$$\text{в) } n(\text{N}_2) = 2,24 / 22,4 = \underline{0,1 \text{ моль}}; \quad n(\text{N}) = 0,1 \cdot 2 = \underline{0,2 \text{ моль}}; \quad m(\text{N}) = 0,2 \cdot 14 = \underline{2,8 \text{ г}};$$

г) проверяем, содержится ли в веществе кислород. Для этого составляем уравнение материального баланса:

$$m(\text{C}) + m(\text{H}) + m(\text{N}) + m(\text{O}) = m(\text{образца}); \quad 14,4 + 1,0 + 2,8 + m(\text{O}) = 24,6 \text{ г};$$

$$m(\text{O}) = 6,4 \text{ г}; \quad n(\text{O}) = 6,4 / 16 = \underline{0,4 \text{ моль}}.$$

3) Находим отношение моль атомов, т.е. индексов и простейшую формулу:

$$x:y:z:w = 1,2:1:0,2:0,4 = (1,2/0,2) : (1/0,2) : (0,2/0,2) : (0,4/0,2) = 6:5:1:2;$$

$$\text{Простейшая формула } \text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2; \quad M_{\text{прост.}}(\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2) = 123 \text{ г/моль}.$$

4) Находим истинную формулу вещества:

$$\text{а) } M_{\text{в-ва}} = \rho \cdot V_{\text{м}}; \quad M_{\text{ист.}} = 5,491 \cdot 22,4 = 123 \text{ г/моль};$$

$$\text{б) } M_{\text{ист.}} / M_{\text{прост.}} = 123 / 123 = 1; \text{ истинная формула } \text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2.$$

Ответ: $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Пример. При сжигании 1,74 г. органического вещества получено 5,58 г смеси углекислого газа и воды. Количество вещества углекислого газа и воды в продуктах сгорания равны. Относительная плотность вещества по кислороду равна 1,8125.

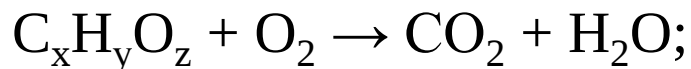
В ходе исследования химических свойств этого вещества установлено, что при его нагревании со свежеполученным гидроксидом меди(II) образуется осадок красного цвета.

На основании данных условий:

- 1) произведите необходимые вычисления;
- 2) установите молекулярную формулу исходного органического вещества;
- 3) составьте структурную формулу этого вещества, которая однозначно отражает порядок связи атомов в его молекуле;
- 4) напишите уравнение реакции этого вещества со свежеполученным гидроксидом меди(II).

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Решение:



$$M_{\text{ист.}}(C_xH_yO_z) = D_{O_2} \cdot M(O_2) = 1,8125 \cdot 32 = 58 \text{ г/моль};$$

$$m(CO_2) + m(H_2O) = 5,58;$$

$$\underline{n(CO_2)} = \underline{n(H_2O)};$$

$$44 \cdot n + 18n = 5,58;$$

$$62n = 5,58;$$

$$n = 5,58/62 = 0,09 \text{ моль};$$

$$n(CO_2) = n(C) = 0,09;$$

$$m(C) = 12 \cdot 0,09 = \underline{1,08 \text{ г}};$$

$$n(H_2O) = 0,09 \text{ моль};$$

$$n(H) = 0,18 \text{ моль};$$

$$m(H) = 0,18 \text{ г};$$

$$\underline{m(C) + m(H) + m(O) = 1,74};$$

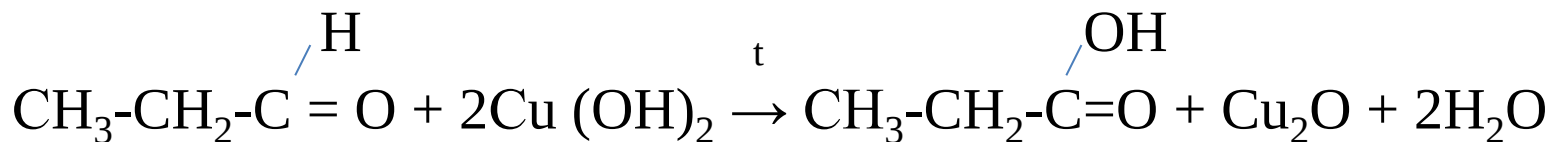
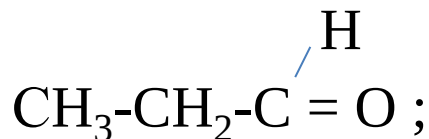
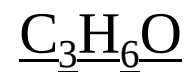
$$m(O) = 0,48 \text{ г};$$

$$n(O) = 0,48/16 = 0,03 \text{ моль};$$

$$x:y:z = 0,09:0,18:\underline{0,03} = 3:6:1;$$

$$M_{\text{прост.}}(C_3H_6O) = 58 \text{ г/моль};$$

$$M_{\text{ист.}}/M_{\text{прост.}} = 58/58 = 1;$$



Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Пример. При сжигании 6,45 г. органического вещества выделилось 4,48 л (н.у.) углекислого газа, 3,6 г воды и 3,65 г хлороводорода. Плотность паров вещества 2,879 г/л. Вещество реагирует со спиртовым раствором гидроксида калия; продукт последней реакции обесцвечивает бромную воду.

На основании данных условий:

- 1) произведите необходимые вычисления;
- 2) установите молекулярную формулу исходного органического вещества;
- 3) составьте структурную формулу этого вещества, которая однозначно отражает порядок связи атомов в его молекуле;
- 4) напишите уравнение реакции этого вещества со спиртовым раствором гидроксида калия.

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Решение:



$$n(CO_2) = 4,48/22,4 = \underline{0,2 \text{ моль}} = n(C);$$

$$m(C) = 0,2 \cdot 12 = \underline{2,4 \text{ г}};$$

$$n(H_2O) = 3,6/18 = 0,2 \text{ моль};$$

$$n(H) = 0,2 \cdot 2 = \underline{0,4 \text{ моль}};$$

$$n(HCl) = 3,65/36,5 = 0,1 \text{ моль}; \quad n'(H) = n(Cl) = \underline{0,1 \text{ моль}};$$

$$m(Cl) = 0,1 \cdot 35,5 = \underline{3,55 \text{ г}};$$

$$n(H) = 0,4 + 0,1 = \underline{0,5 \text{ моль}};$$

$$m(H) = \underline{0,5 \text{ г}};$$

Составляем уравнение материальные баланса:

$$m(C) + m(H) + m(Cl) + m(O) = 6,45;$$

$$2,4 + 0,5 + 3,55 + m(O) = 6,45;$$

$$\underline{m(O) = 0};$$

Вычисляем истинную молярную массу:

$$M_{\text{ист.}}(C_xH_yCl_z) = \rho \cdot V_m = 2,879 \cdot 22,4 = 64,5 \text{ г/моль};$$

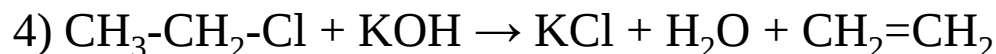
$$x:y:z = 0,2:0,5:\underline{0,1} = (0,2/0,1):(0,5/0,1):(0,1/0,1) = 2:5:1;$$

$$2) M_{\text{прост.}}(C_2H_5Cl) = 64,5 \text{ г/моль};$$

$$M_{\text{ист.}} / M_{\text{прост.}} = 64,5/64,5 = 1; \quad C_2H_5Cl$$

$$3) CH_3-CH_2-Cl;$$

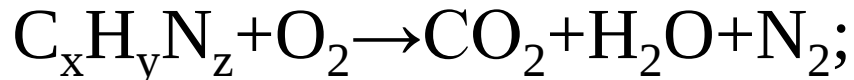
спирт, t



Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Пример. При сгорании вторичного амина симметричного строения выделилось 0,896 л (н.у) углекислого газа, 0,99 г воды и 0,112 л (н.у) азота. Установите молекулярную формулу этого амина.

Решение:



$$n(CO_2) = 0,896 / 22,4 = \underline{0,04 \text{ моль}} = n(C);$$

$$n(H_2O) = 0,99 / 18 = 0,055 \text{ моль};$$

$$n(H) = \underline{0,11 \text{ моль}};$$

$$n(N_2) = 0,112 / 22,4 = 0,005 \text{ моль};$$

$$n(N) = \underline{0,01 \text{ моль}};$$

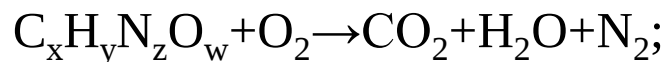
$$x:y:z = 0,04:0,11:\underline{0,01} = 4:11:1;$$



Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Пример. При сжигании органического вещества массой 1,78 г в избытке кислорода получили 0,28 г азота, 1,344 л CO₂ (н.у.) и 1,26 г воды. Определите молекулярную формулу этого вещества, зная, что в образце массой 1,78 г содержится $1,204 \cdot 10^{22}$ молекул.

Решение:



$$n(CO_2) = 1,344 / 22,4 = \underline{0,06} \text{ моль} = n(C);$$

$$m(C) = 0,06 \cdot 12 = \underline{0,72} \text{ г};$$

$$n(H_2O) = 1,26 / 18 = 0,07 \text{ моль}; \quad n(H) = \underline{0,14} \text{ моль};$$

$$m(H) = 0,14 \cdot 1 = \underline{0,14} \text{ г};$$

$$n(N_2) = 0,28 / 28 = 0,01 \text{ моль}; \quad n(N) = \underline{0,02} \text{ моль};$$

$$m(N) = \underline{0,28} \text{ г};$$

Составляем уравнение материальные баланса:

$$m(C) + m(H) + m(N) + m(O) = 0,72 + 0,14 + 0,28 + m(O) = 1,78;$$

$$m(O) = 1,78 - 1,14 = 0,64 \text{ г};$$

$$n(O) = 0,64 / 16 = \underline{0,04} \text{ моль};$$

$$x:y:z:w = 0,06:0,14:\underline{0,02}:0,04 = (0,06/0,02):(0,14/0,02):(0,02/0,02):(0,04/0,02) = 3:7:1:2;$$

$$M_{\text{прост.}}(C_3H_7NO_2) = 89 \text{ г/моль}; \quad n(\text{в-ва}) = N/N_A = 1,204 \cdot 10^{22} / 6,02 \cdot 10^{23} = 0,02 \text{ моль};$$

$$M_{\text{ист.}}(C_xH_yN_zO_w) = m/n = 1,78 / 0,02 = 89 \text{ г/моль}; \quad M_{\text{ист.}}/M_{\text{прост.}} = 89/89 = 1; \quad C_3H_7NO_2$$

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Пример. При монохлорировании углеводорода, содержащего 83,72% С и 16,28% Н, образовались два изомерных хлорпроизводных — первичное и третичное. Установите строение углеводорода, составьте формулы продуктов хлорирования, назовите вещества.

Решение:

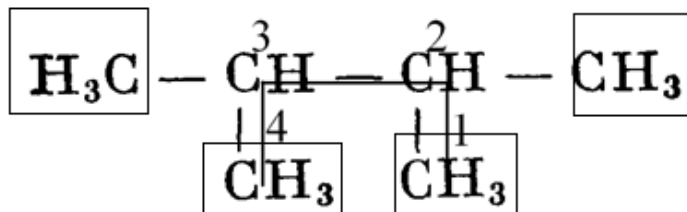
Пусть масса образца углеводорода равна 100 г:

$m(C_xH_y)=100$ г; $m(C)=83,72$ г; $n(C)=6,977$ моль;

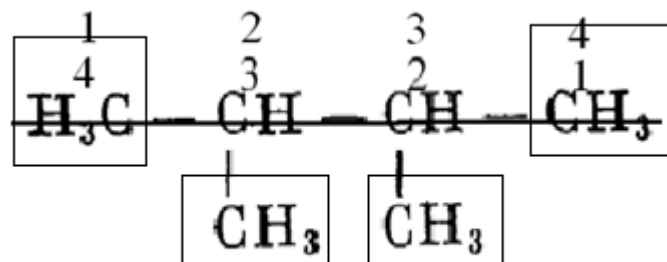
$m(H)=16,28$ г; $n(H)=16,28$ моль;

$x:y = 6,977:16,28 = 1:2,333 (\cdot 3) = \underline{3:7} = 6:14$;

C_6H_{14} , структурная формула



2,3-диметилбутан

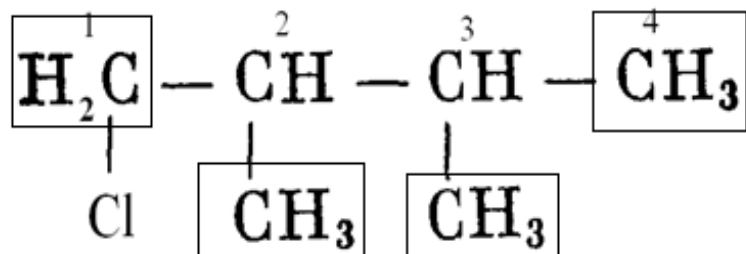


2,3-диметилбутан

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

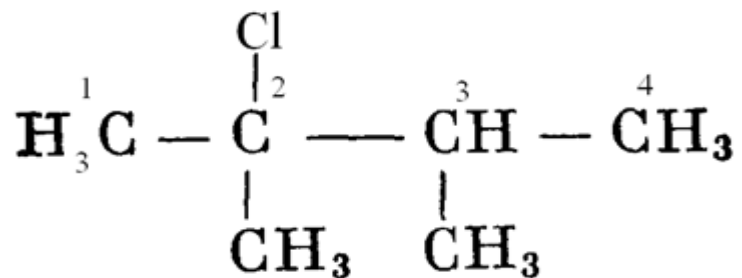
При монохлорировании образуется:

а) первичное хлорпроизводное



1-хлор-2,3-диметилбутан

б) третичное хлорпроизводное



2-хлор-2,3-диметилбутан

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Пример. Установите химическую формулу соли, если известно, что при нагревании ее с гидроксидом натрия образуется хлорид натрия, вода, а также газ, содержащий 38,71% углерода, 45,16% азота и 16,13% водорода. Приведите название образовавшегося газа, а также название исходной соли. Рассчитайте массу соли, необходимой для получения 3,1 г этого газа при 90%-ном выходе.

Решение:

Пусть масса образца газа $m(C_xH_yN_z)=100$ г;

$m(C)=38,71$ г;

$n(C)=3,226$ моль;

$m(H)=16,13$ г;

$n(H)=16,13$ моль;

$m(N)=45,16$ г;

$n(N)=45,16/14=3,226$ моль;

$x:y:z=3,226:16,13:3,226=1:5,05:1=1:5:1$;

Формула газа CH_5N или CH_3-NH_2 (метиламин);

$[CH_3-NH_3]Cl + NaOH \rightarrow NaCl + H_2O + CH_3-NH_2 \uparrow$;

0,111 моль

0,111 моль

$m_{\text{теор.}}(\text{газа})=m_{\text{практ.}} \cdot 100\%/90\%=3,44$ г;

$n(CH_3NH_2)=3,44/31=0,111$ моль;

$n(\text{соли})=0,111$ моль;

$m(\text{соли})=0,111 \cdot 67,5=7,49$ г $\approx 7,5$ г

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Пример. При сжигании 13,5 г кислородосодержащего органического соединения образовалось 19,8 г углекислого газа и 0,45 моль воды. При этом выделилось 210 кДж теплоты. Тепловой эффект реакции равен 2800 кДж. Выведите формулу этого соединения.

Решение:



$$n(CO_2)=19,8/44=0,45 \text{ моль}=n(C);$$

$$m(C)=0,45 \cdot 12=5,4 \text{ г};$$

$$n(H_2O)=0,45 \text{ моль};$$

$$n(H)=0,9 \text{ моль};$$

$$m(H)=0,9 \text{ г};$$

Составляем уравнение материального баланса:

$$m(C)+m(H)+m(O)=13,5;$$

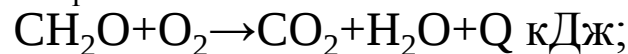
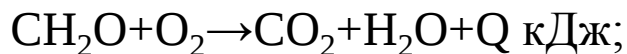
$$m(O)=13,5-5,4-0,9=7,2 \text{ г};$$

$$n(O)=7,2/16=0,45 \text{ моль};$$

$$x:y:z=0,45:0,9:0,45=(0,45/0,45):(0,9/0,45):(0,45/0,45)=1:2:1;$$

$$M_{\text{прост.}}(CH_2O)=30 \text{ г/моль};$$

Предположим, что это истинная формула, тогда $n_{\text{прост.}}(CH_2O)=13,5/30=0,45 \text{ моль};$



$$1 \text{ моль} \text{ ————— } 2800 \text{ кДж};$$

$$1 \text{ моль} \text{ ————— } 2800 \text{ кДж};$$

$$0,45 \text{ моль} \text{ ————— } 1260 \text{ кДж};$$

$$x \text{ моль} \text{ ————— } 210 \text{ кДж};$$

$$x=210/2800=0,075 \text{ моль};$$

$$M_{\text{ист.}}(C_xH_yO_z)=m/n=13,5/0,075=180 \text{ г/моль};$$

$$M_{\text{ист.}}/M_{\text{прост.}}=180/30=6;$$

Ответ: $C_6H_{12}O_6$ (глюкоза, фруктоза)

Определение формулы вещества по продуктам сгорания (разложения)

Пример. При сгорании 1,8 г некоторого первичного амина выделилось 0,448 л (н.у) азота. Установите молекулярную формулу этого амина.

Решение:

Важно знать, что любой первичный амин (предельный или непредельный) в уравнении реакции горения относится к азоту, как 2:1, например, предельный амин горит: $2C_nH_{2n+1}NH_2 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O + 1N_2$ или непредельный: $2C_nH_{2n-1}NH_2 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O + 1N_2$;

$n(N_2) = 0,448 / 22,4 = 0,02$ моль; $n(\text{первич.амина}) = 0,02 \cdot 2 = 0,04$ моль;

$M_{\text{ист.}} = m/n = 1,8 / 0,04 = 45$ г/моль;

$M(C_nH_{2n+1}NH_2) = \underline{12n + 2n + 17} = \underline{14n + 17} = 45$ г/моль; $14n = 28$; $n = 28 / 14 = 2$;

C_2H_7N или $C_2H_5NH_2$

Спасибо за внимание!