

# Προσδιορισμός χημικών τύπων

## ΣΚΟΠΟΣ

Ο σκοπός αυτής της ενότητας είναι να μάθουμε:

1. Τον τρόπο υπολογισμού της εκατοστιαίας περιεκτικότητας μιας ένωσης από τον τύπο της.

2. Να υπολογίζουμε την εκατοστιαία περιεκτικότητα μιας ένωσης από πειραματικά δεδομένα, όπως είναι τα δεδομένα καύσης μιας οργανικής ένωσης.

3. Τη μέθοδο προσδιορισμού του εμπειρικού και στη συνέχεια του μοριακού τύπου μιας ένωσης.

# Προσδοκώμενα αποτελέσματα

Όταν θα έχετε μελετήσει αυτό το κεφάλαιο, θα μπορείτε να:

- ❖ Ορίζετε την εκατοστιαία περιεκτικότητα κατά μάζα μιας ένωσης.
- ❖ Υπολογίζετε την εκατοστιαία περιεκτικότητα (ή σύσταση) μιας ένωσης από τον τύπο της.
- ❖ Υπολογίζετε τη μάζα ενός στοιχείου σε δεδομένη μάζα ένωσης.
- ❖ Βρίσκετε την περιεκτικότητα μιας οργανικής ένωσης σε C, H και O μετά από καύση.
- ❖ Εξηγείτε τι είναι ο εμπειρικός τύπος μιας ένωσης και να τον προσδιορίζετε από τις μάζες των στοιχείων της ή από την εκατοστιαία σύσταση της ένωσης.
- ❖ Κατανοείτε τη σχέση μεταξύ της μοριακής μάζας μιας ουσίας και του εμπειρικού τύπου της ουσίας.
- ❖ Προσδιορίζετε τον μοριακό τύπο από την εκατοστιαία σύσταση και τη μοριακή μάζα.

# Έννοιες κλειδιά

- ❖ Εμπειρικός τύπος
- ❖ Εκατοστιαία σύσταση ή εκατοστιαία περιεκτικότητα κατά μάζα
- ❖ Εμπειρικός τύπος
- ❖ Μέθοδος καύσης
- ❖ Μοριακός τύπος

## Ebbing – Gammon (Ενότητες)

3.3 Εκατοστιαία περιεκτικότητα από τον χημικό τύπο

3.4 Στοιχειακή ανάλυση: εκατοστιαία περιεκτικότητα σε άνθρακα, υδρογόνο και οξυγόνο

3.5 Προσδιορισμός τύπων

## 3.3 Εκατοστιαία περιεκτικότητα από τον χημικό τύπο

Εκατοστιαία περιεκτικότητα κατά μάζα του A: τα μέρη του A που υπάρχουν σε εκατό μέρη του συνόλου.

Γενικός τύπος

$$\text{Μάζα \% A} = \frac{\text{μάζα του A στο σύνολο}}{\text{μάζα του συνόλου}} \times 100\%$$

Το A μπορεί να είναι ένα στοιχείο σε μια ένωση ή μια ένωση σε κάποιο μίγμα!

Πόση είναι η εκατοστιαία περιεκτικότητα του H<sub>2</sub>O σε O και H;  
1 mol H<sub>2</sub>O έχει μάζα 18,0 g.  
Στα 18,0 g H<sub>2</sub>O, τα 16,0 g είναι οξυγόνο, άρα

$$\text{Μάζα \% οξυγόνου (O)} = \frac{\text{μάζα του O στο σύνολο}}{\text{μάζα του συνόλου}} = \frac{16,0 \text{ g}}{18,0 \text{ g}} = 0,889 \text{ ή } 88,9\%$$

$$\text{Μάζα \% υδρογόνου (H)} = 1,000 - 0,889 = 0,111 \text{ ή } 11,1\%$$

## Παράδειγμα 3.7

Υπολογισμός της % περιεκτικότητας ένωσης από τον τύπο της

Το αλοθάνιο,  $\text{CF}_3\text{CHBrCl}$ , είναι ένα αναισθητικό εισπνοής.

Πόση είναι η εκατοστιαία περιεκτικότητα κατά μάζα καθενός στοιχείου στο αλοθάνιο; (Τρία σημαντικά ψηφία.)

### Απάντηση

1 mol  $\text{CF}_3\text{CHBrCl}$  έχει μάζα 197,38 g: περιέχει 2 mol C ( $2 \times 12,01$  g), 3 mol F ( $3 \times 19,00$  g), 1 mol H (1,008 g), 1 mol Br (79,90 g) και 1 mol Cl (35,45 g)  $\Rightarrow$  γραμμομοριακή μάζα αλοθανίου = 197,38 g

$$\begin{aligned}\%C &= \frac{\text{μάζα C}}{\text{γραμμομοριακή μάζα } \text{CF}_3\text{CHBrCl}} = \frac{2 \times 12,01 \text{ g}}{197,38 \text{ g}} \times 100\% \\ &= 12,169\% = 12,2\%\end{aligned}$$

$$\%F = \frac{\text{μάζα F}}{\text{γραμμομοριακή μάζα } \text{CF}_3\text{CHBrCl}} = \frac{3 \times 19,00 \text{ g}}{197,38 \text{ g}} = 0,2888 = 28,9\%$$

Ομοίως: %Br = 40,5%

%Cl = 18,0%

%H = 0,511%

## Παράδειγμα 3.8

Υπολογισμός της μάζας ενός στοιχείου σε δεδομένη μάζα ένωσης

Ποιο περιέχει περισσότερο θείο, 40,8 g θειικού ασβεστίου ή 35,2 g θειώδους νατρίου;

Απάντηση

1 mol  $\text{CaSO}_4$  έχει μάζα 136,15 g, 1 mol  $\text{Na}_2\text{SO}_3$  έχει μάζα 126,05 g

Moles S στο  $\text{CaSO}_4$  =

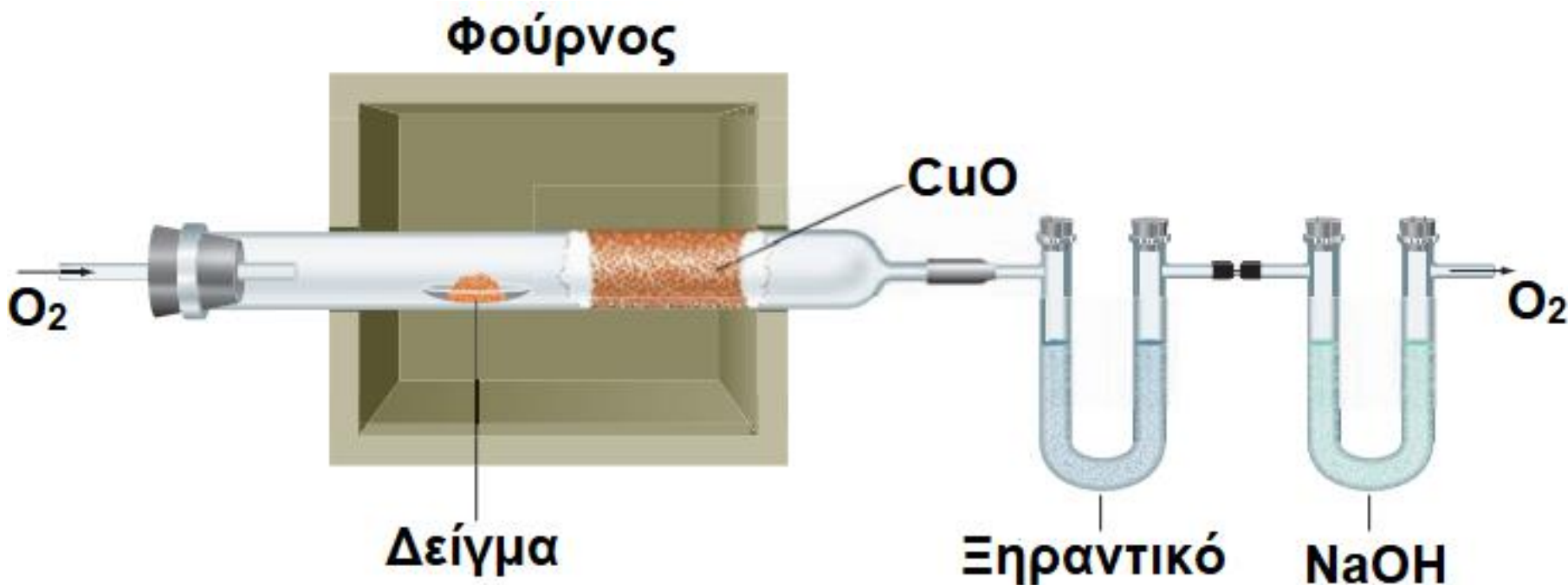
$$40,8 \text{ g CaSO}_4 \times \frac{1 \text{ mol CaSO}_4}{136,15 \text{ g CaSO}_4} \times \frac{1 \text{ mol S}}{1 \text{ mol CaSO}_4} = 0,300 \text{ mol S}$$

Moles S στο  $\text{Na}_2\text{SO}_3$

$$35,2 \text{ g Na}_2\text{SO}_3 \times \frac{1 \text{ mol Na}_2\text{SO}_3}{126,05 \text{ g Na}_2\text{SO}_3} \times \frac{1 \text{ mol S}}{1 \text{ mol Na}_2\text{SO}_3} = 0,280 \text{ mol S}$$

## 3.4 Στοιχειακή ανάλυση: % περιεκτικότητα σε C, H, O

Μέθοδος καύσης οργανικής ουσίας (π.χ. οξικού οξέος,  $\text{CH}_3\text{COOH}$ )



Ποια είναι τα προϊόντα της καύσης;

Ποιος είναι ο ρόλος του  $\text{CuO}$ , του ξηραντικού και του  $\text{NaOH}$ ;

Γιατί ζυγίζονται οι υοειδείς σωλήνες πριν και μετά την καύση;

## Παράδειγμα 3.9

Υπολογισμός της % περιεκτικότητας σε C και H μετά από καύση

Ένα δείγμα 3,87 mg ασκορβικού οξέος (βιταμίνης C) δίνει μετά από καύση 5,80 mg CO<sub>2</sub> και 1,58 mg H<sub>2</sub>O.

Πόση είναι η εκατοστιαία σύσταση αυτής της ένωσης.

Το ασκορβικό οξύ περιέχει μόνο C, H και O.

Απάντηση

Μετατροπές: μάζα CO<sub>2</sub> ⇒ moles CO<sub>2</sub> ⇒ moles C ⇒ g C

$$5,80 \times 10^{-3} \text{ g CO}_2 \times \frac{1 \text{ mol CO}_2}{44,01 \text{ g CO}_2} \times \frac{1 \text{ mol C}}{1 \text{ mol CO}_2} \times \frac{12,01 \text{ g C}}{1 \text{ mol C}} = 1,583 \times 10^{-3} \text{ g C}$$

$$1,58 \times 10^{-3} \text{ g H}_2\text{O} \times \frac{1 \text{ mol H}_2\text{O}}{18,02 \text{ g H}_2\text{O}} \times \frac{2 \text{ mol H}}{1 \text{ mol H}_2\text{O}} \times \frac{1,008 \text{ g H}}{1 \text{ mol H}} = 1,767 \times 10^{-4} \text{ g H}$$

$$\% \text{ C} = \frac{1,583 \text{ mg}}{3,87 \text{ mg}} \times 100\% = 40,9\% \quad \% \text{ H} = \frac{0,1767 \text{ mg}}{3,87 \text{ mg}} \times 100\% = 4,57\%$$

$$\% \text{ O} = 100,00\% - 40,9\% - 4,57\% = 54,5\% \quad \text{Βιταμίνη C: C}_6\text{H}_8\text{O}_6^8$$



## 3.5 Προσδιορισμός τύπων

### Εμπειρικός και μοριακός τύπος

**Εμπειρικός τύπος:** είναι ο χημικός τύπος της ένωσης γραμμένος με τους μικρότερους ακέραιους δείκτες.

**ΜΤ:**  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6$ ,  $\text{P}_4\text{O}_{10}$ ,  $\text{N}_2\text{H}_4$

**ΕΤ:**  $\text{HO}$ ,  $\text{CH}$ ,  $\text{CH}$ ,  $\text{P}_2\text{O}_5$ ,  $\text{NH}_2$

Ενώσεις με τον ίδιο ΕΤ έχουν την ίδια σύσταση κατά μάζα!

ΕΤ: βρίσκεται από την εκατοστιαία σύσταση της ένωσης

Μοριακός τύπος: δίνει τον ακριβή αριθμό ατόμων κάθε στοιχείου που περιέχεται στο μόριο (π.χ.  $\text{P}_4\text{O}_{10} \Rightarrow 4$  άτομα P, 10 άτομα O)

**ΜΤ:** είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του εμπειρικού τύπου και προσδιορίζεται από την % σύσταση και τη μοριακή μάζα.

**Μοριακή μάζα =  $n \times$  μάζα εμπειρικού τύπου**

**$n$  = αριθμός μονάδων ΕΤ που υπάρχουν στο μόριο της ένωσης**

**π.χ. βενζόλιο  $\text{C}_6\text{H}_6 = 6 \times \text{CH}$  ( $n = 6$ )**

**Μοριακή μάζα βενζολίου =  $6 \times$  μάζα  $\text{CH} = 6 \times 13,02 \text{ amu} = 78,12 \text{ amu}$**

**Η μοριακή μάζα προσδιορίζεται πειραματικά (π.χ. από φάσμα μάζας)**

## Παράδειγμα 3.10

**Προσδιορισμός ΕΤ** από τις μάζες των στοιχείων (δυναμική ένωση)

Το ένα από τα οξειδία του βολφραμίου (σύμβολο W) είναι ένα λαμπερό κίτρινο στερεό. Αν 5,34 g της ένωσης περιέχουν 4,23 g βολφραμίου, ποιος είναι ο εμπειρικός της τύπος;

**Απάντηση**

$$\text{Moles W: } 4,23 \text{ g W} \times \frac{1 \text{ mol W}}{183,85 \text{ g W}} = 0,02301 \text{ mol}$$

$$\text{Moles O: } (5,34 - 4,23) \text{ g O} \times \frac{1 \text{ mol O}}{16,00 \text{ g O}} = 0,06938 \text{ mol}$$

Θεωρητικά, ο τύπος είναι  $W_{0,02301}O_{0,06398}$

Ακέραιος δείκτης για το W:  $0,02301 \div 0,02301 = 1,000$

Ακέραιος δείκτης για το O:  $0,06938 \div 0,02301 = 3,015 \approx 3,0$

**Εμπειρικός τύπος:  $WO_3$**

# Παράδειγμα 3.11

Προσδιορισμός του ΕΤ από την % σύσταση (γενικά)

Η υδροκινόνη που χρησιμοποιείται ως φωτογραφικό υγρό εμφάνισης, περιέχει 65,4% C, 5,5% H και 29,1% O κατά μάζα. Ποιος είναι ο εμπειρικός τύπος της υδροκινόνης;

Απάντηση

Σε 100 g υδροκινόνης έχω: 65,4 g C, 5,5 g H και 29,1 g O

$$\text{Moles C: } 65,4 \text{ g C} \times \frac{1 \text{ mol C}}{12,01 \text{ g C}} = 5,445 \text{ mol}$$

$$\text{Moles H: } 5,5 \text{ g H} \times \frac{1 \text{ mol H}}{1,008 \text{ g H}} = 5,46 \text{ mol}$$

$$\text{Moles O: } 29,1 \text{ g O} \times \frac{1 \text{ mol O}}{16,00 \text{ g O}} = 1,819 \text{ mol (μικρότερη τιμή)}$$



Θέλω ακέραιους δείκτες

Ακέραιος δείκτης για το C:  $5,445 \div 1,819 = 2,99 \approx 3,0$

Ακέραιος δείκτης για το H:  $5,46 \div 1,819 = 3,0$

Ακέραιος δείκτης για το O = 1,0  $\Rightarrow$  Εμπειρικός τύπος:  $\text{C}_3\text{H}_3\text{O}$

# Παράδειγμα 3.12

**Προσδιορισμός του MT** από την % σύσταση και τη μοριακή μάζα

Το αδιπικό οξύ χρησιμοποιείται στην παραγωγή του νάιλον.

Η σύσταση του οξέος είναι 49,3% C, 6,9% H και 43,8% O (κατά μάζα), ενώ η μοριακή του μάζα είναι 146 amu. Ποιος είναι ο μοριακός του τύπος;

**Απάντηση**

Σε 100 g αδιπικού οξέος έχω: 49,3 g C, 6,9 g H και 43,8 g O

$$\text{Moles C: } 49,3 \text{ g C} \times \frac{1 \text{ mol C}}{12,01 \text{ g C}} = 4,105 \text{ mol}$$

Ομοίως βρίσκουμε: 6,85 mol H και 2,738 mol O (μικρότερη τιμή)

Διαιρούμε τους αριθμούς των moles με τον μικρότερο:

Προσωρινός δείκτης για τον C:  $4,105 \div 2,738 = 1,499 \approx 1,5$

Προσωρινός δείκτης για το H:  $6,85 \div 2,738 = 2,50$  ή 2,5

Προσωρινός δείκτης για το O:  $2,738 \div 2,738 = 1,000$  ή 1

**Για ακέραιους δείκτες, πολλαπλασιάζουμε επί 2  $\Rightarrow$  ET :  $(C_3H_5O_2)_n$**

Υπολογισμός του  $n$ : Τυπική μάζα ET =

$$(3 \times 12,01 \text{ amu}) + (5 \times 1,008 \text{ amu}) + (2 \times 16,00 \text{ amu}) = 73,07 \text{ amu}$$

$$n = 146 \text{ amu} \div 73,07 \text{ amu} = 1,998 \approx 2 \Rightarrow$$

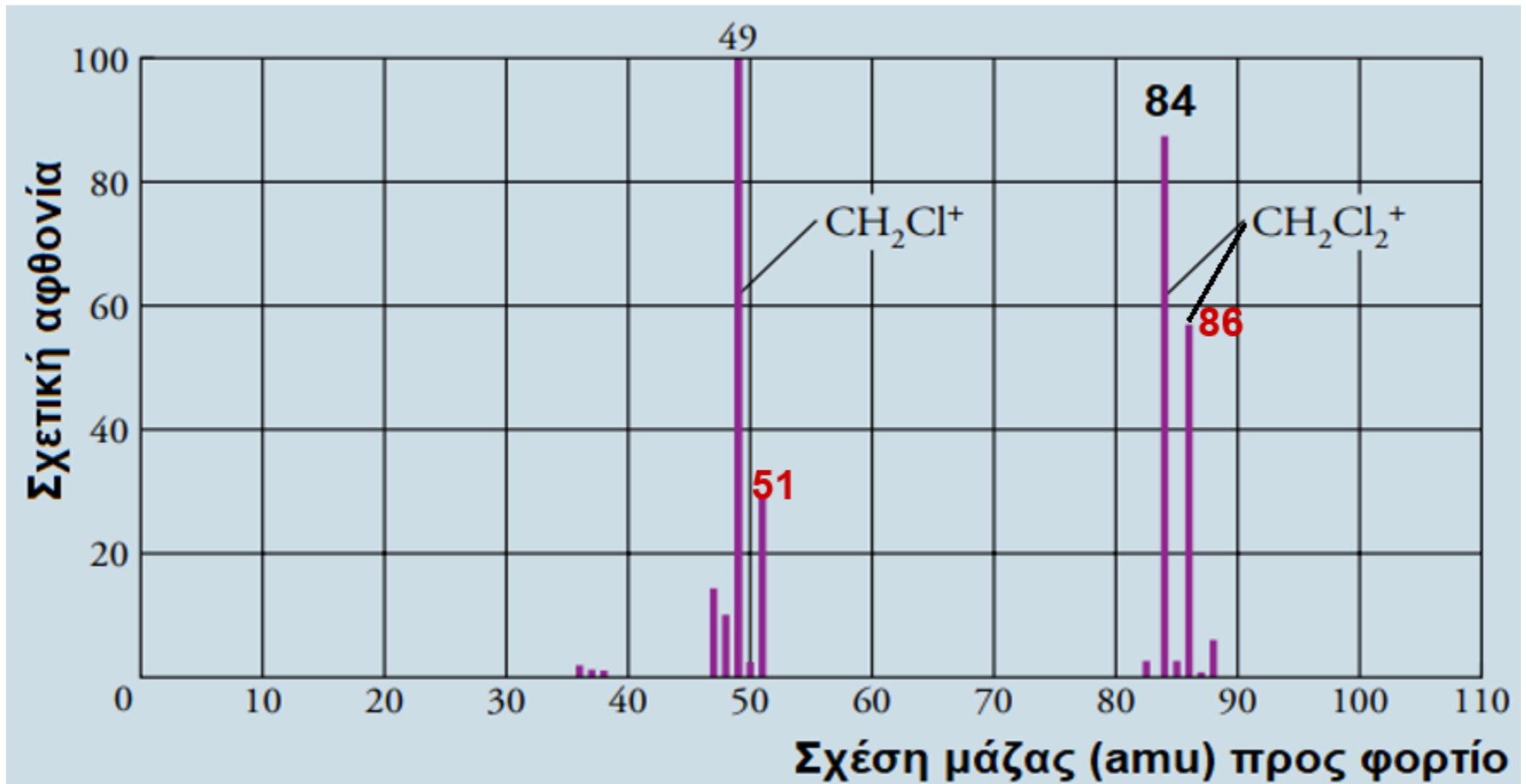
**Μοριακός τύπος αδιπικού οξέος  $(C_3H_5O_2)_2$  ή  $C_6H_{10}O_4$**

# Προσδιορισμός ΜΤ από το φάσμα μάζας της ένωσης

## Φάσμα μάζας του μεθυλενοχλωριδίου, $\text{CH}_2\text{Cl}_2$

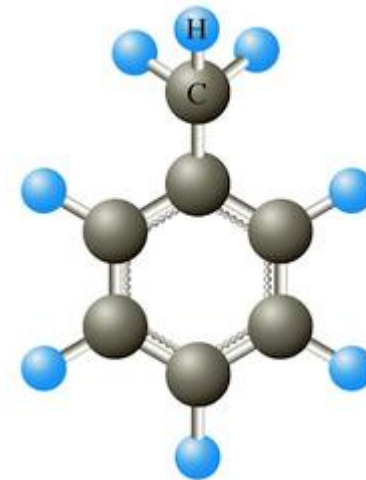
Οι κορυφές στις υψηλότερες τιμές μάζας αντιστοιχούν στα ιόντα  $\text{CH}_2\text{Cl}_2^+$  με διαφορετικά ισότοπα  $\text{Cl}$  ( $^{35}\text{Cl}$  και  $^{37}\text{Cl}$ )

Δεξιά, η υψηλότερη κορυφή αντιστοιχεί στη ΜΜ 84 amu (για τα ισότοπα με τη μέγιστη αφθονία:  $[12 + 2 + (2 \times 35)] \text{ amu} = 84 \text{ amu}$ )



# Ερωτήσεις – Ασκήσεις – Προβλήματα

3.6 Υπολογίστε την εκατοστιαία περιεκτικότητα κατά μάζα κάθε στοιχείου στο τολουόλιο, το οποίο παριστάνεται από το διπλανό μοριακό μοντέλο.



3.7 Ποιο περιέχει περισσότερο άνθρακα, 6,01 g γλυκόζης ( $C_6H_{12}O_6$ ) ή 5,85 g αιθανόλης ( $C_2H_6O$ );

3.8 Η φαινόλη, γνωστή και ως καρβολικό οξύ, χρησιμοποιήθηκε από τον Joseph Lister ως αντισηπτικό στη χειρουργική το 1865. Η κύρια χρήση της σήμερα είναι στην παραγωγή φαινολικών ρητινών και πλαστικών. Η καύση 5,23 mg φαινόλης δίνει 14,67 mg  $CO_2$  και 3,01 mg  $H_2O$ . Η φαινόλη περιέχει μόνο C, H και O. Ποια είναι η εκατοστιαία σύσταση της φαινόλης;

# Ερωτήσεις – Ασκήσεις – Προβλήματα

**3.9 Το μαγγανικό κάλιο είναι ένα πράσινο κρυσταλλικό στερεό, του οποίου η σύσταση είναι 39,6% K, 27,9% Mn και 32,5% O. Ποιος είναι ο εμπειρικός του τύπος;**

**3.10 Το καπροϊκό οξύ (caper = τράγος), ένα άχρωμο ελαιώδες υγρό με χαρακτηριστική δυσάρεστη οσμή που θυμίζει τράγο, περιέχει άνθρακα, υδρογόνο και οξυγόνο. Με ανάλυση καύσης, δείγμα 0,450 g καπροϊκού οξέος δίνει 0,418 g H<sub>2</sub>O και 1,023 g CO<sub>2</sub>. Αν η μοριακή μάζα του καπροϊκού οξέος είναι 116,2 amu, ο μοριακός τύπος του οξέος είναι:**

**(α) C<sub>7</sub>H<sub>16</sub>O      (β) C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>      (γ) C<sub>5</sub>H<sub>24</sub>O<sub>2</sub>      (δ) C<sub>4</sub>H<sub>18</sub>O<sub>2</sub>**