

Обчислення виходу продукту від теоретично можливого. Задачі на визначення рН.

1.Обчислення виходу продукту від теоретично можливого.

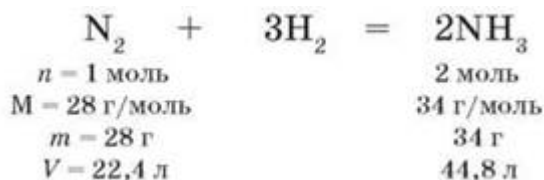
Вихід продукту є важливим показником ефективності виробничого процесу. Зокрема, на його основі роблять висновок про повноту використання сировини. Річ у тому, що в реальних умовах через оборотність багатьох реакцій і виробничі втрати вихід продукту завжди менший від того, який мав би утворитися згідно з рівнянням реакції (за законом збереження маси речовин). Отже, вихід продукту — це відношення реальної маси (об'єму чи кількості речовини) продукту (практичний вихід) до теоретично можливої, обчисленої за рівнянням реакції (теоретичний вихід); виражається у відсотках (%) або частках одиниці.

Позначимо вихід продукту грецькою літерою Π (вимовляється «ета»), m_1 (практ.) — фактично добута маса продукту, m_2 (теор.) — розрахована теоретично можлива маса того самого продукту.

Далі міркуємо так. Оскільки маса речовини пропорційна кількості речовини, то:

$$\eta = \frac{n_1(\text{практ.})}{n_2(\text{теор.})}, \text{ а для газів } \eta = \frac{V_1(\text{практ.})}{V_2(\text{теор.})}$$

У всіх випадках знаходимо одне й те саме значення шуканої величини. Наприклад, якщо в реакції синтезу амоніаку



його вихід становить 75 % ($\eta = 75\%$), то це означає, що з 1 моль, або 28 г, або 22,4 л (н.у.) азоту одержимо не 2 моль, або 34 г, або 44,8 л амоніаку (теоретичний вихід), а практично:

$$\eta = \frac{34 \text{ г} \cdot 75\%}{100\%} = 25,5 \text{ г, або } 1,5 \text{ моль, або } 33,6 \text{ л (н.у.)}$$

Особливість цих задач полягає в тому, що в умові зазначається маса або об'єм вихідної речовини та практична маса чи об'єм продукту реакції. На основі цих даних необхідно обчислити масову або об'ємну частку виходу продукту реакції за відношенням до теоретично можливого.

Відношення маси практично одержаного продукту до маси речовини, яку повинні одержати теоретично, називають *масовою часткою виходу продукту* і позначають грецькою літерою η (читається *ета*).

Практичний вихід – це маса, або об’єм продукту, який отримують в процесі виробництва або лабораторних дослідженнях.

Теоретичний вихід – це маса, або об’єм продукту, який можна було б отримати згідно з розрахунками за рівнянням хімічних реакцій.

Під час одержання продукту в газоподібному чи рідкому станах обчислюють *об’ємну частку виходу продукту*, яку позначають літерою ϕ (читається *фі*).

Опорні формули:

$$\eta(\mathbf{X}) = \frac{m(X_{\text{пр}})}{m(X_{\text{теор}})} \cdot 100\%; \quad \phi(\mathbf{X}) = \frac{V(X_{\text{пр}})}{V(X_{\text{теор}})} \cdot 100\%$$

Алгоритм

1. Записати повну і скорочену умову задачі.
2. Обчислити кількість вихідної речовини.
3. Обчислити за рівнянням реакції кількість продукту реакції.
4. Обчислити масу (об’єм) продукту реакції.
5. Обчислити вихід продукту реакції за відношенням до теоретичного.
6. Записати відповідь.

Розглянемо декілька прикладів задач.

Задача 1. Обчислити вихід амоніаку, якщо відомо, що після взаємодії азоту об’ємом 2,24 л (н.у.) із воднем утворився амоніак об’ємом 4,0 л.

Д а н о:
$V(\text{N}_2) = 2,24 \text{ л}$
$V(\text{NH}_3) = 4 \text{ л}$
$\eta(\text{NH}_3) = ?$

Р о з в ’ я з а н н я

1. Обчислимо об’єм амоніаку, який можна одержати з 2,24 л азоту.

Для цього проведемо розрахунки за рівнянням реакції:



За законом об'ємних відношень і рівнянням реакції $V_{\text{теор}}(\text{NH}_3) = 2 \cdot 2,24 \text{ л} = 4,48 \text{ л}$.
Обчислюємо вихід амоніаку. за формулою:

$$\eta = \frac{V(\text{практ.})}{V(\text{теор.})}; \eta = \frac{4 \text{ л}}{4,48 \text{ л}} = 0,89, \text{ або } 89 \%$$

В і д п о в і д ь. Вихід амоніаку становить 0,89, або 89 %.

Р о з в ' я з а н н я 1. Складаємо рівняння реакції $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 = 2\text{NH}_3$ За законом об'ємних відношень і рівнянням реакції знаходимо об'єм амоніаку, який можна одержати теоретично:

$$V_{\text{теор}}(\text{NH}_3) = 2 \cdot 0,68 \text{ л} = 1,36 \text{ л}$$

2. Знаходимо об'єм амоніаку, який утворився фактично. Використаємо для цього формулу:

Задача 2. Обчисліть об'єм амоніаку (н.у.), який можна одержати з азоту об'ємом 0,68 л і достатньої кількості водню, якщо вихід амоніаку становить 43 %.

Д а н о:
$V(\text{N}_2) = 0,68 \text{ л}$
$\eta(\text{NH}_3) = 43 \%$ (0,43)
$V(\text{NH}_3) = ?$

$$\eta = \frac{V(\text{практ.})}{V(\text{теор.})}, \text{ звідси } V(\text{практ.}) = \eta \cdot V(\text{теор.}),$$

$$V(\text{практ.}) = 0,43 \cdot 1,36 \text{ л} = 0,58 \text{ л}$$

В і д п о в і д ь. Можна одержати амоніак об'ємом 0,58 л (фактично утворюється 0,58 л амоніаку).

Отже, щоб обчислити вихід продукту від теоретично можливого, обчислюємо відношення між масами, об'ємами чи кількостями речовин, розрахованих за рівнянням реакції, і масами, об'ємами чи кількостями речовин, одержаних фактично. З цією метою можна скористатися формулами, наведеними в тексті.

2. Задачі на визначення рН.

Розрахунок рН розчинів відомого складу

Значення рН розчину рівне від'ємному десятковому логарифму від активності іонів гідроксонію:

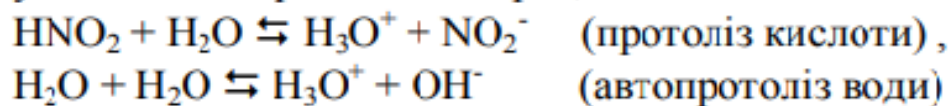
$$\text{pH} = -\lg a_{\text{H}_3\text{O}^+} .$$

Якщо іонна сила розчину невелика ($<10^{-3}$), то активність практично рівна рівноважній концентрації і можна користуватись такою рівністю:

$$\text{pH} = -\lg[\text{H}_3\text{O}^+] .$$

Щоб розрахувати рН розчину потрібно вміти обчислювати рівноважну концентрацію іонів гідроксонію. Для цього складають систему рівнянь, яка включає рівняння матеріального балансу, електронейтральності та вирази для констант рівноваг, які є у розчині. Розв'язком такої системи рівнянь знаходять концентрацію H_3O^+ .

Для прикладу розглянемо виведення формули для розрахунку рН водного розчину нітритної кислоти. У водному розчині HNO_2 відбуваються такі рівноважні процеси:



Складаємо систему рівнянь:

$$\left\{ \begin{array}{ll} K_{\text{a,HNO}_2} = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{NO}_2^-]}{[\text{HNO}_2]} & \text{(вираз для константи кислотності HNO}_2\text{)}, \\ K_{\text{H}_2\text{O}} = [\text{H}_3\text{O}^+][\text{OH}^-] & \text{(вираз для константи автопротолізу H}_2\text{O)}, \\ C_{\text{HNO}_2} = [\text{HNO}_2] + [\text{NO}_2^-] & \text{(рівняння матеріального балансу для HNO}_2\text{)}, \\ [\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] + [\text{NO}_2^-] & \text{(рівняння електронейтральності розчину)}. \end{array} \right.$$

Як бачимо, у цій системі рівнянь є 4 невідомих: $[\text{H}_3\text{O}^+]$, $[\text{OH}^-]$, $[\text{HNO}_2]$ і $[\text{NO}_2^-]$. Розв'язок щодо $[\text{H}_3\text{O}^+]$ дає таку рівність:

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = \frac{-K_{\text{a,HNO}_2} + \sqrt{K_{\text{a,HNO}_2}^2 + 4(K_{\text{H}_2\text{O}} + K_{\text{a,HNO}_2} C_{\text{HNO}_2})}}{2} .$$

Якщо $K_{a, HNO_2} \cdot C_{HNO_2} > 10^{-10}$, то можна користуватись простішою формулою:

$$[H_3O^+] = \frac{-K_{a, HNO_2} + \sqrt{K_{a, HNO_2}^2 + 4K_{a, HNO_2} C_{HNO_2}}}{2}$$

Детальне виведення формул для розрахунку рН розчинів протолітів можна знайти в [1]. Ми ж приведемо їх кінцевий вигляд та зазначимо умови застосування (табл. 1).

Таблиця 1

Формули для розрахунку рН та $[H_3O^+]$ водних розчинів протолітів

Протоліти	Умови	Формули
Сильні кислоти: HCl, HNO ₃ , HClO ₄ , H ₂ SO ₄	$C_{HA} \geq 10^{-6}$ М	$[H_3O^+] = C_{HA}$ $pH = -\lg a_{H_3O^+}$ Для двопротонних кислот: $[H_3O^+] = 2C_{H_2A}$ Якщо $\mu < 10^{-3}$, то $pH = -\lg C_{HA}$
	$C_{HA} < 10^{-6}$ М	$[H_3O^+] = \frac{C_{HA} + \sqrt{C_{HA}^2 + 4K_{H_2O}}}{2}$
Сильні основи (луги): NaOH, KOH, Ba(OH) ₂ , Ca(OH) ₂	$C_B \geq 10^{-6}$ М	$[OH^-] = C_B$ $pOH = -\lg a_{OH^-}$ Для основ M(OH) ₂ : $[OH^-] = 2C_B$ Якщо $\mu < 10^{-3}$, то $pH = 14 + \lg C_B$
	$C_B < 10^{-6}$ М	$[OH^-] = \frac{C_B + \sqrt{C_B^2 + 4K_{H_2O}}}{2}$
Слабкі кислоти: HNO ₂ , NH ₄ ⁺ , HF, CH ₃ COOH, HCN, H ₂ CO ₃ , H ₃ PO ₄ ,	$K_{a,HA} = 10^{-6} - 10^{-4}$ $C_{HA} > 10^{-6}$	$[H_3O^+] = \sqrt{K_{a,HA} \cdot C_{HA}}$, $pH = \frac{1}{2} pK_{a,HA} - \frac{1}{2} \lg C_{HA}$
	$K_{a,HA} > 10^{-4}$ $C_{HA} > 10^{-6}$	$[H_3O^+] = \frac{-K_{a,HA} + \sqrt{K_{a,HA}^2 + 4 \cdot K_{a,HA} \cdot C_{HA}}}{2}$
	$K_{a,HA} \cdot C_{HA} \leq 10^{-14}$	$[H_3O^+] = \sqrt{K_{H_2O} + K_{a,HA} \cdot C_{HA}}$

Протоліти	Умови	Формули
Слабкі основи: NH ₃ , CH ₃ NH ₂ , CO ₃ ²⁻ , N ₂ H ₄ , CH ₃ COO ⁻ ,	$K_{b,B} = 10^{-6} - 10^{-4}$ $C_B > 10^{-6}$	$[OH^-] = \sqrt{K_{b,B} \cdot C_B}$ $pOH = \frac{1}{2} pK_{b,B} - \frac{1}{2} \lg C_B$ $pH = 14 - \frac{1}{2} pK_{b,B} + \frac{1}{2} \lg C_B$
	$K_{b,B} > 10^{-4}$ $C_B > 10^{-6}$	$[OH^-] = \frac{-K_{b,B} + \sqrt{K_{b,B}^2 + 4 \cdot K_{b,B} \cdot C_B}}{2}$
	$K_{b,B} \cdot C_B \leq 10^{-14}$	$[OH^-] = \sqrt{K_{H_2O} + K_{b,B} \cdot C_B}$
Амфоліти: HCO ₃ ⁻ , H ₂ PO ₄ ⁻ , HPO ₄ ²⁻ , HSO ₃ ⁻	$K_{a,HA} \gg K_{H_2O}$ $C_{HA} > K_{a,HA}$	$[H_3O^+] = \sqrt{K_{a,H_2A} \cdot K_{a,HA}}$ $pH = \frac{pK_{a,H_2A} + pK_{a,HA}}{2}$
Буферні суміші: NH ₃ і NH ₄ ⁺ , CO ₃ ²⁻ і HCO ₃ ⁻ , HCO ₃ ⁻ і H ₂ CO ₃		$pH = pK_{a,HA} - \lg \frac{C_{HA}}{C_{A^-}}$ або $pH = pK_{a,HA} - \lg \frac{n_{HA}}{n_{A^-}}$ $\pi = 2,30 \frac{C_{HA} \cdot C_{A^-}}{C_{HA} + C_{A^-}}$ (буферна ємність)

Приклад. Розрахувати pH $2 \cdot 10^{-3}$ М розчину Na₂CO₃.

Натрію карбонат є слабкою основою. Для розрахунку pH спершу потрібно обчислити константу основності карбонат-іона:

$$K_{b,CO_3^{2-}} = \frac{10^{-14}}{K_{a,HCO_3^-}} = \frac{10^{-14}}{4,8 \cdot 10^{-11}} = 2,08 \cdot 10^{-4}.$$

Враховуючи значення K_b і концентрації основи вибираємо відповідну формулу і розраховуємо pH розчину:

$$pH = 14 - \frac{1}{2} pK_{b,CO_3^{2-}} + \frac{1}{2} \lg C_{CO_3^{2-}} = 14 - \frac{1}{2} (3,68) + \frac{1}{2} \lg 2 \cdot 10^{-3} = 10,81.$$

Приклад. Розрахувати pH $2 \cdot 10^{-8}$ М розчину NaOH.

Натрію гідроксид – сильна основа. Його концентрація надто мала, тому використовуємо формулу, яка враховує автопротоліз води:

$$[OH^-] = \frac{C_{NaOH} + \sqrt{C_{NaOH}^2 + 4K_{H_2O}}}{2} = \frac{2 \cdot 10^{-8} + \sqrt{(2 \cdot 10^{-8})^2 + 4 \cdot 10^{-14}}}{2} = 1,1 \cdot 10^{-7} \text{ М}$$

$$pH = 14 + \lg C_{OH^-} = 14 + \lg 1,1 \cdot 10^{-7} = 7,04.$$

Розрахунок рН розчинів невідомого складу

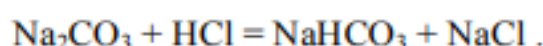
Для обчислення рН необхідно знати склад розчину, адже для різного типу протолітів використовують різні розрахункові формули. В багатьох задачах відсутня інформація про склад розчину, а натомість описно спосіб його одержання. Для вирішення таких задач спершу необхідно з'ясувати склад розчину, а вже потім розраховувати його рН.

Приклад 2. Розрахувати рН розчину, одержаного змішуванням 50 мл 10^{-3} М Na_2CO_3 і 100 мл $5 \cdot 10^{-4}$ М HCl .

Знаходимо початкові кількості вихідних речовин:

$$\begin{aligned}n_{\text{Na}_2\text{CO}_3} &= C_{\text{Na}_2\text{CO}_3} \cdot V_{\text{Na}_2\text{CO}_3} = 10^{-3} \cdot 0,05 = 5 \cdot 10^{-5} \text{ моль ,} \\n_{\text{HCl}} &= C_{\text{HCl}} \cdot V_{\text{HCl}} = 5 \cdot 10^{-4} \cdot 0,1 = 5 \cdot 10^{-5} \text{ моль .}\end{aligned}$$

За рівних кількостей вихідних речовин у кінцевому розчині буде натрію гідрогенкарбонат, який утвориться в результаті реакції:



Оскільки NaHCO_3 – амфоліт, то рН розраховуємо за такою формулою:

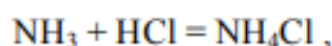
$$\text{pH} = \frac{\text{p}K_{a,\text{H}_2\text{CO}_3} + \text{p}K_{a,\text{HCO}_3^-}}{2} = \frac{6,35 + 10,32}{2} = 8,34 .$$

Приклад 3. Розрахувати рН розчину, одержаного змішуванням 100 мл 0,01 М розчину аміака і 50 мл хлоридної кислоти такої ж концентрації.

Знаходимо початкові кількості вихідних речовин:

$$\begin{aligned}n_{\text{NH}_3(\text{поч})} &= C_{\text{NH}_3} \cdot V_{\text{NH}_3} = 0,01 \cdot 0,1 = 10^{-3} \text{ моль ,} \\n_{\text{HCl}(\text{поч})} &= C_{\text{HCl}} \cdot V_{\text{HCl}} = 0,01 \cdot 0,05 = 5 \cdot 10^{-4} \text{ моль .}\end{aligned}$$

Оскільки кількості вихідних речовин різні ($n_{\text{NH}_3} > n_{\text{HCl}}$), то після взаємодії



у розчині залишиться певна кількість аміака:

$$n_{\text{NH}_3} = 10^{-3} - 5 \cdot 10^{-4} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ моль ,} \quad n_{\text{NH}_4\text{Cl}} = n_{\text{HCl}(\text{поч})} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ моль .}$$

Одержаний розчин є буферним, оскільки в ньому одночасно є слабка кислота (NH_4^+) і спряжена до неї основа (NH_3). Розраховуємо рН розчину:

$$\text{pH} = \text{p}K_{a,\text{NH}_4^+} - \lg \frac{n_{\text{NH}_4^+}}{n_{\text{NH}_3}} = 9,25 - \lg \frac{5 \cdot 10^{-4}}{5 \cdot 10^{-4}} = 9,25 .$$

Висновок:

1. Особливість цих задач полягає в тому, що в умові зазначається маса або об'єм вихідної речовини та практична маса чи об'єм продукту реакції. На основі цих даних необхідно обчислити масову або об'ємну частку виходу продукту реакції за відношенням до теоретично можливого. Відношення маси практично одержаного продукту до маси речовини, яку повинні одержати теоретично, називають масовою часткою виходу продукту і позначають грецькою літерою η (читається ета). Практичний вихід – це маса, або об'єм продукту, який отримують в процесі виробництва або лабораторних дослідженнях. Теоретичний вихід – це маса, або об'єм продукту, який можна було б отримати згідно з розрахунками за рівнянням хімічних реакцій.
2. Щоб розрахувати рН розчину потрібно вміти обчислювати рівноважну концентрацію іонів гідроксонію. Для цього складають систему рівнянь, яка включає рівняння матеріального балансу, електронейтральності та вирази для констант рівноваг, які є у розчині. Обов'язково для обчислення рН розчину необхідно знати склад розчину, адже для різного типу протолітів використовують різні розрахункові формули. В багатьох задачах відсутня інформація про склад розчину, а натомість описано спосіб його одержання. Для вирішення таких задач спершу необхідно з'ясувати склад розчину, а вже потім розрахувати його рН.

Список використаної літератури

1. <https://subject.com.ua/textbook/chemistry/10klas/36.html>
2. <https://naurok.com.ua/rozv-yazuvannya-zadach-obchislennya-vihodu-produktu-reakci-vid-teoretichno-mozhlivogo-25602.html>
3. Розв'язування задач з аналітичної хімії. Частина 1. Рівновага в гомогенній системі / Укл. І.О. Пацай. – Львів: Видавничий центр ЛНУ ім. І.Франка, 2006. – 34 с.