

# YHDISTEEN KAAVA KERTOO KOOSTUMUKSEN

IHMISEN JA ELINYM-  
PÄRISTÖN KEMIA, KE2

Kemiallisista kaavoista yksinkertaisin on **empiirinen kaava** eli **suhdekaava**. Se kertoo yhdisteessä olevien alkuaineiden ainemäärien suhteen (eli moolisuhteen) yksinkertaisimpia kokonaislukuja käyttäen.

**Huomautus** Empiirinen kaava *ei kerro* alkuaineiden *todellisia lukumääriä* yhdisteessä! Todelliset lukumäärät kertoo **molekyylikaava**.

**Esimerkki**    **a)**  $(C_2H_4)_x$     **b)**  $(C_4H_6ON_2)_x$ , missä x:n tilalla voi olla esim. n.

Empiirinen kaava saadaan ratkaistua, kun tiedetään

- 1) massatiedot, eli tyypillisimmin yhdisteen sisältämien alkuaineatomien massaprosenttiset osuudet,
- 2) yhdisteen palamisreaktiossa syntyvän hiilidioksidin ja veden määrä. (Palaminen oletetaan olevan puhdasta ja täydellistä.)

## 1. EMPIIRINEN KAAVA MASSATIEDOISTA

### ESIMERKKI 3

Laboratoriokokeessa hajotettiin erästä vetyä ja happea sisältävää yhdistettä sähköpurkauksen avulla. Koe tuotti 2,9 g vetykaasua  $H_2$  ja 23,5 g happikaasua  $O_2$ . Mikä on tämän vetyä ja happea sisältävän yhdisteen empiirinen kaava?

Ratkaisu:

Empiiriseen kaavaan tarvitaan alkuaineiden ainemäärien suhteet. **Moolin määritelmästä seuraa, että alkuaineatomien lukumääräsuhde on sama kuin alkuaineiden ainemäärien suhde.**

Yksi mooli vetykaasua sisältää kaksi moolia vetyatomeja, joten

$$n(\text{H}) = 2 \cdot n(\text{H}_2) = 2 \cdot \frac{m(\text{H}_2)}{M(\text{H}_2)} = 2 \cdot \frac{2,9 \text{ g}}{2 \cdot 1,008 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 2,8770 \text{ mol.}$$

Yksi mooli happikaasua sisältää kaksi moolia happiatomeja, joten

$$n(\text{O}) = 2 \cdot n(\text{O}_2) = 2 \cdot \frac{m(\text{O}_2)}{M(\text{O}_2)} = 2 \cdot \frac{23,5 \text{ g}}{2 \cdot 16,00 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 1,4688 \text{ mol.}$$

supistetaan pienimmällä

$$\text{Ainemäärien suhde } n(\text{H}) : n(\text{O}) = \frac{2,8770 \text{ mol}}{1,4688 \text{ mol}} = \frac{1,9587}{1} = 2 : 1$$

Hajotetun yhdisteen empiirinen kaava on  $(\text{H}_2\text{O})_x$ . Empiirinen kaava ei kerro alkuaineiden todellisia lukumääriä, joten yhdisteen tunnistaminen tässä vaiheessa on vielä mahdotonta.

## YHDISTEEN EMPIIRISEN KAAVAN LASKEMINEN

### ESIMERKKI 4

Alkuaineanalyysin perusteella eräs konepesuaineissa käytetty yhdiste sisältää 43,4 m-% natriumia, 11,3 m-% hiiltä ja 45,3 m-% happea. Mikä on yhdisteen empiirinen kaava?

Ratkaisu:

Prosenttilaskun helpottamiseksi tarkastellaan 100 g yhdistettä. 100 g yhdistettä sisältää 43,4 g natriumia, 11,3 g hiiltä ja 45,3 g happea.

Lasketaan alkuaineiden ainemäärät:

$$\begin{aligned} n(\text{Na}) &= \frac{43,4 \text{ g}}{22,99 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 1,887 \dots \text{ mol} & n(\text{O}) &= \frac{45,3 \text{ g}}{16,00 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \\ n(\text{C}) &= \frac{11,3 \text{ g}}{12,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,9409 \dots \text{ mol} & &= 2,831 \dots \text{ mol} \end{aligned}$$

Jaetaan kaikki ainemäärät pienimmällä eli  $n(\text{C}) = 0,9409$ :llä.

Tällöin

$$\frac{n(\text{Na})}{n(\text{C})} = \frac{1,887 \text{ mol}}{0,9409 \text{ mol}} = 2,006 \approx 2,$$

$$\frac{n(\text{C})}{n(\text{C})} = 1,$$

$$\frac{n(\text{O})}{n(\text{C})} = \frac{2,831 \text{ mol}}{0,9409 \text{ mol}} = 3,009 \approx 3.$$

Koska tehtävän lähtöarvot ovat kokeellisia likiarvoja, joissa on kolme merkitsevää numeroa, jaon jälkeiset luvut poikkeavat hieman kokonaisluvuista. Yhdisteen empiirinen kaava on  $(\text{Na}_2\text{CO}_3)_x$ .

## YHDISTEEN MASSAPROSENTTISEN ALKUAINEKOOSTUMUKSEN LASKEMINEN

Jos yhdisteen empiirinen kaava tunnetaan, sen avulla voidaan laskea, kuinka monta prosenttia yhdisteen massasta on tiettyä alkuainetta.

$$\text{Alkuaineen massaprosenttiosuus} = \frac{\text{kysytyn alkuaineen moolimassa(t) yhdisteessä}}{\text{yhdisteen moolimassa}} \cdot 100 \%$$

### ESIMERKKI 5

Kuinka monta milligrammaa rautaa ihminen saa syödessään yhden rautatabletin, joka sisältää 40 mg rautasulfaattia,  $\text{FeSO}_4$ ?

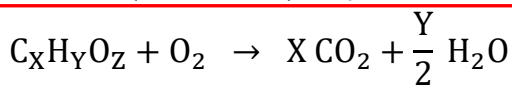
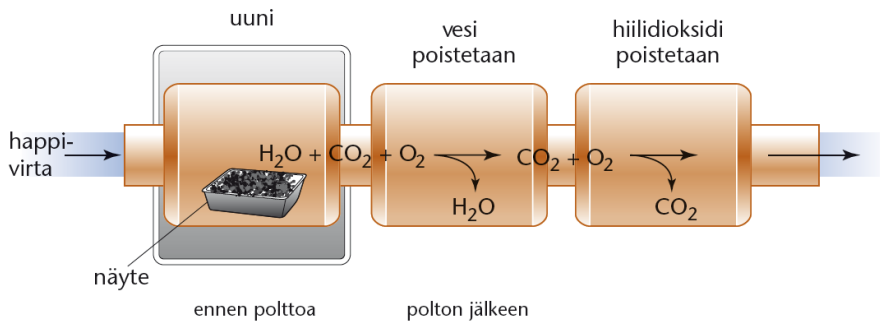
Ratkaisu:

Raudan massaprosenttiosuus m-% (Fe)

$$= \frac{55,85 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{(55,85 + 32,07 + 4 \cdot 16,00) \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \cdot 100 \% = 36,8 \%$$

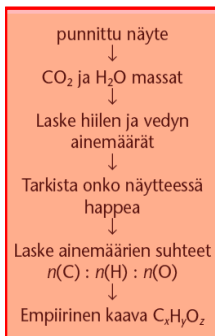
Tabletissa on rautaa  $0,368 \cdot 40 \text{ mg} = 14,7 \text{ mg} \approx 15 \text{ mg}$ .

## 2. POLTTOANALYYSI



**Tärkeä oivaltaa!**

Huomioi, että poltossa happea on ylimäärin.



**Lue huolella!**

### ESIMERKKI 6

Likaisten urheilusukkien ja lenkkareiden hajua aiheuttavaa yhdistettä saatiin eristettyä puhtaana 0,450 g. Tämä näyte tutkittiin polttoanalyysin avulla. Se tuotti 1,023 g hiilidioksidia ja 0,418 g vettä. Laske yhdisteen empiirinen kaava.

Ratkaisu:

1) Lasketaan hiilen ja vedyn ainemäärät.

Koska yhdisteen kaikki hiili palaa hiilidioksidiksi ja hiilidioksidi-molekyylissä CO<sub>2</sub> on yksi hiiliatomi, niin  $n(\text{C}) = n(\text{CO}_2)$ . Kaikki vety palaa vedeksi ja yhdessä vesimolekyylissä H<sub>2</sub>O on kaksi vetyatomia, joten  $n(\text{H}) = 2 \cdot n(\text{H}_2\text{O})$ .

$$n(\text{C}) = n(\text{CO}_2) = \frac{m(\text{CO}_2)}{M(\text{CO}_2)} = \frac{1,023 \text{ g}}{(12,01 + 2 \cdot 16,00) \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,02324 \text{ mol}$$

$$\begin{aligned} n(\text{H}) &= 2 \cdot n(\text{H}_2\text{O}) = 2 \cdot \frac{m(\text{H}_2\text{O})}{M(\text{H}_2\text{O})} \\ &= 2 \cdot \frac{0,418 \text{ g}}{2 \cdot 1,008 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 16,00 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,04640 \text{ mol} \end{aligned}$$

2) Tarkistetaan, onko näytteessä happea. Lasketaan hiilen ja vedyn massat näytteessä:

$$m(\text{C}) = n(\text{C}) \cdot M(\text{C}) = 0,02324 \text{ mol} \cdot 12,01 \text{ g/mol} = 0,2791 \text{ g},$$

$$m(\text{H}) = n(\text{H}) \cdot M(\text{H}) = 0,04640 \text{ mol} \cdot 1,008 \text{ g/mol} = 0,04677 \text{ g}.$$

Vähennetään nämä näytteen massasta:

$$m(\text{O}) = m(\text{näyte}) - m(\text{C}) - m(\text{H}) = 0,450 \text{ g} - 0,2791 \text{ g} - 0,04677 \text{ g} \\ = 0,1241 \text{ g eli näytteessä on myös happea.}$$

Lasketaan hapen ainemäärä:

$$n(\text{O}) = \frac{m(\text{O})}{M(\text{O})} = \frac{0,1241 \text{ g}}{16,00 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,007756 \text{ mol}.$$

3) Lasketaan alkuaineiden ainemäärien suhteet jakamalla kaikki pienimmällä ainemäärällä, eli  $n(\text{O})$ :lla:

$$\frac{n(\text{C})}{n(\text{O})} = \frac{0,02324 \text{ mol}}{0,007756 \text{ mol}} = 2,996 \approx 3,$$

$$\frac{n(\text{H})}{n(\text{O})} = \frac{0,04640 \text{ mol}}{0,007756 \text{ mol}} = 5,982 \approx 6,$$

$$\frac{n(\text{O})}{n(\text{O})} = \frac{0,007756 \text{ mol}}{0,007756 \text{ mol}} = 1.$$

4) Hajua aiheuttavan yhdisteen empiirinen kaava on  $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ .

## EMPIIRISEN KAAVAN JA MOLEKYYLIIKAAVAN YHTEYS

**Molekyylikaava** kertoo alkuaineiden todelliset lukumäärät yhdisteessä.

### ESIMERKKI 7

Esimerkissä 6 tarkasteltiin urheilusukkiin ja lenkkareihin hajua aiheuttavaa yhdistettä. Sen moolimassaksi mitattiin massaspektrometrillä 116,2 g/mol. Mikä on yhdisteen molekyylikaava?

Ratkaisu:

Yhdisteen empiirinen kaava oli  $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ , joten molekyylikaava on empiirinen kaava tai sen monikerta  $(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_n$ .

$$M[(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_n] = n \cdot [3 \cdot M(\text{C}) + 6 \cdot M(\text{H}) + 1 \cdot M(\text{O})]$$

$$116,2 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = n \cdot [3 \cdot 12,01 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 6 \cdot 1,008 \frac{\text{g}}{\text{mol}} + 1 \cdot 16,00 \frac{\text{g}}{\text{mol}}]$$

$$116,2 = n \cdot (36,03 + 6,048 + 16,00) = n \cdot 58,078$$

$$n = \frac{116,2}{58,078} = 2,0000$$

Yhdisteen molekyylikaava on  $(\text{C}_3\text{H}_6\text{O})_2 = \text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_2$ .

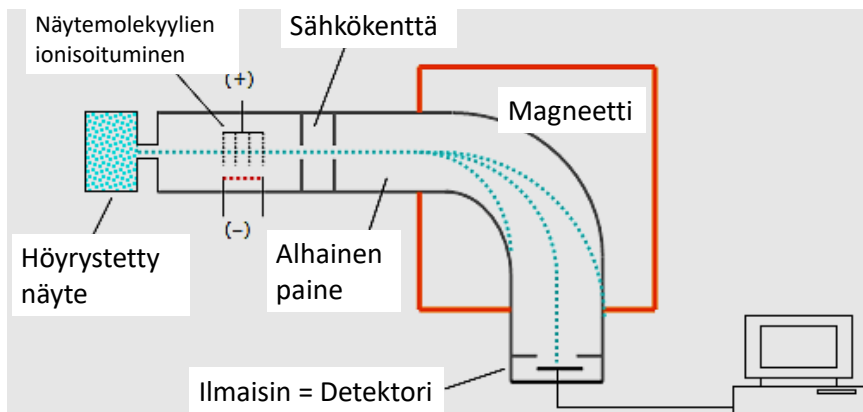
Yhdisteen molekyylikaava on  $(C_3H_6O)_2 = C_6H_{12}O_2$ .

Vaikka molekyylikaava kertoo yhdisteessä olevien alkuaineatomien todelliset lukumäärät, yhdisteen tunnistamiseen tarvitaan vielä lisätietoa sen rakenteesta.

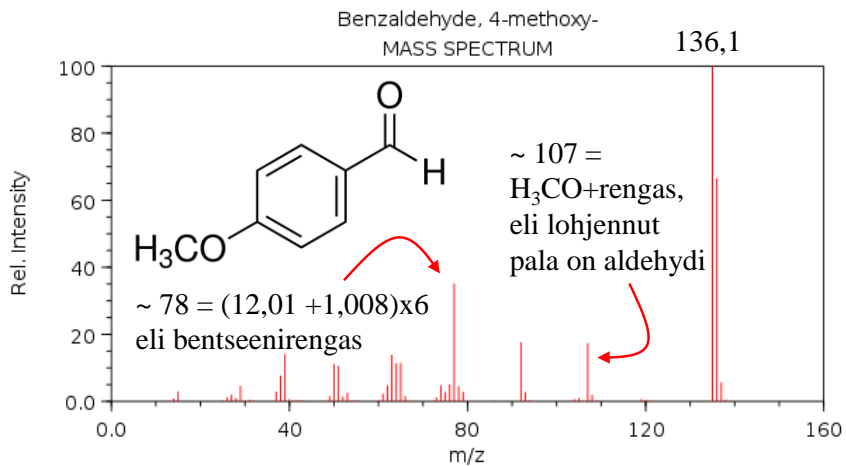
Edellisessä esimerkissä mitatusta massaspektristä voitiin päätellä, että yhdiste on suoraketjuinen happo. Hapon funktionaalisen ryhmän  $-COOH$  ja suoraketjuisen hiilirungon avulla voidaan päätellä, että happo on  $CH_3(CH_2)_4COOH$  eli heksaanihappo eli kapronihappo, joka aiheuttaa myös vuohen hajun.

Mistä sitten voi tietää esim. yhdisteen moolimassan, jotta voi lopulta määrittää molekyylikaavan. Tähän on vastauksena massaspektrometria.

Massaspektrometria perustuu varattujen hiukkasten käyttäytymiseen sähkö- ja magneettikentässä. Massaspektrometrissa hiukkaset, joilla on sama massa ja varaus, kulkevat detektorille = ilmaisimelle samaan pisteeseen. Alla kaaviokuva laitteesta.



Tuloksena on spektri, josta voidaan lukea molekyylistä lohkeavat palat, (näin siis karkeasti). Tähän massaspektriin (-spektrometriaan) palataan. Esim. anisaldehydi.



NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)