

## Výpočet stechiometrického a sumárního vzorce

### Stechiometrický (empirický) vzorec

- vyjadřuje základní složení sloučeniny
- udává, z kterých prvků se sloučenina skládá a v jakém poměru jsou atomy těchto prvků ve sloučenině zastoupeny

### Molekulový (souhrnný, sumární) vzorec

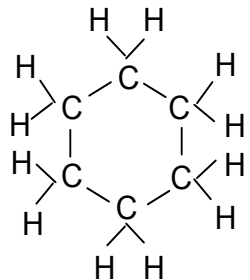
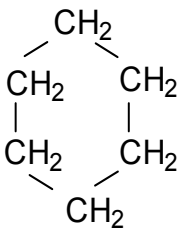
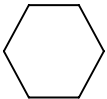
- udává druh a počet atomů v molekule dané sloučeniny
- může být totožný se stechiometrickým vzorcem, nebo je jeho celistvým násobkem

sloučenina	vzorec	
	stechiometrický	molekulový
Voda	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O
peroxid vodíku	HO	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
kyselina tetrahydrogendifosforičitá	H <sub>2</sub> PO <sub>3</sub>	H <sub>4</sub> P <sub>2</sub> O <sub>6</sub>
Ethan	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
Benzen	CH	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>
kyselina octová	CH <sub>2</sub> O	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>


### Strukturní vzorec

#### Konstituční vzorec

- vyjadřuje konstituci molekuly, to je pořadí a způsob, jakým jsou atomy v molekule vázány
- spojnice mezi symboly atomů nevyjadřují ani relativní délku vazby, ani úhly, které vazby v molekule svírají
- vzorce píšeme buď v rozvinuté nebo racionální podobě
- vzorce můžeme (pokud není konvencí určeno jinak) při psaní různě orientovat a stále představují tutéž sloučeninu

sloučenina	Vzorec		
	Rozvinutý	racionální	různě orientovaný
pentan	$  \begin{array}{ccccccccc}  & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\  &   &   &   &   &   & & & \\  \text{H} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{C} & - \text{H} & & \\  &   &   &   &   &   & & & \\  & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & &   \end{array}  $	CH <sub>3</sub> - CH <sub>2</sub> - CH <sub>2</sub> - CH <sub>2</sub> - CH <sub>3</sub>	$  \begin{array}{l}  \text{CH}_3 - \text{CH}_2 \backslash \\  \phantom{\text{CH}_3 - \text{CH}_2} \phantom{\backslash} \text{CH}_2 \\  \text{CH}_3 - \text{CH}_2 /  \end{array}  $
cyklohexan			

- konstituční vzorec umožňuje rozlišit látky se stejným souhrnným vzorcem, ale s různou konstitucí

Sloučenina	vzorec	
	souhrnný	konstituční
kyanatan amonný	$\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$	$\text{NH}_4\text{CNO}$
močovina	$\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$	$\text{NH}_2\text{-CO-NH}_2$
dimethyleter	$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$	$\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$
ethanol	$\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$	$\text{C}_2\text{H}_5\text{-OH}$
propen	$\text{C}_3\text{H}_6$	$\text{CH}_2=\text{CH-CH}_3$
cyklopropan	$\text{C}_3\text{H}_6$	
butyn	$\text{C}_4\text{H}_6$	$\text{CH}\equiv\text{C-CH}_2\text{-CH}_3$
butadien	$\text{C}_4\text{H}_6$	$\text{CH}=\text{CH-CH}=\text{CH}_2$

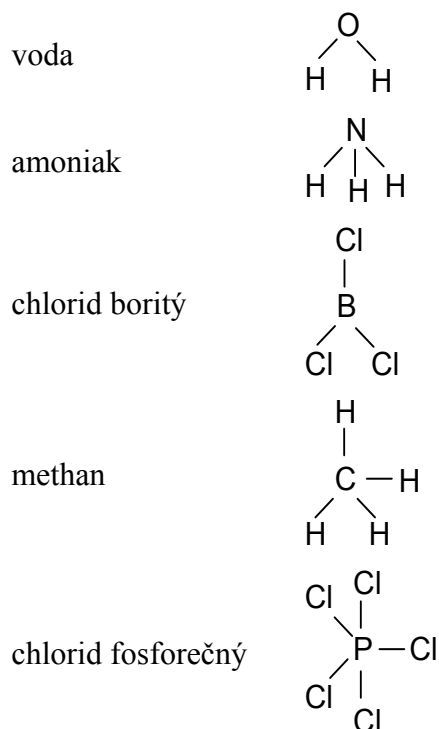
### Funkční vzorec

- racionální konstituční vzorce, v kterých se uvádějí funkční skupiny atomů
- př:
 

dusitan amonný	$\text{NH}_4\text{NO}_2$
kyselina mravenčí	$\text{HCOOH}$
methanol	$\text{CH}_3\text{OH}$
fenylhydrazin	$\text{C}_6\text{H}_5\text{-NH-NH}_2$

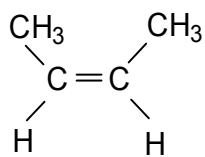
### Geometrický vzorec

- znázorňuje prostorové uspořádání atomů v molekule
- př:

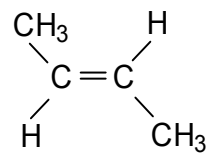


### Konfigurační vzorec

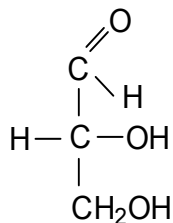
- znázorňuje různá prostorová uspořádání molekul sloučenin se stejnou konstitucí
- př:



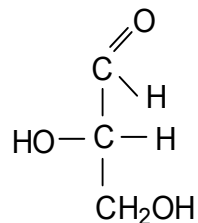
cis-but-2-en



trans-but-2-en



D-glyceraldehyd

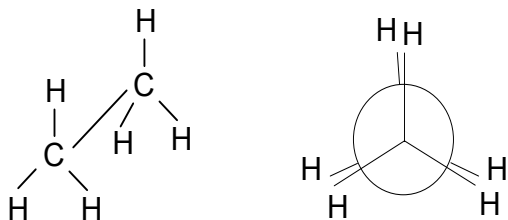


L-glyceraldehyd

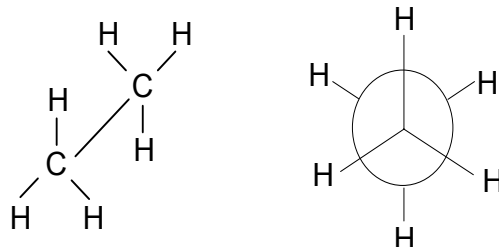
### Konformační vzorec

- vystihuje různá prostorová uspořádání molekul téže sloučeniny, vznikající rotací jejich částí kolem jednoduché vazby
- př:

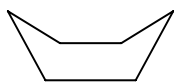
zákrytová konformace ethanu



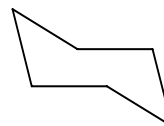
nezákrytová konformace ethanu



vaničková konformace cyklohexanu

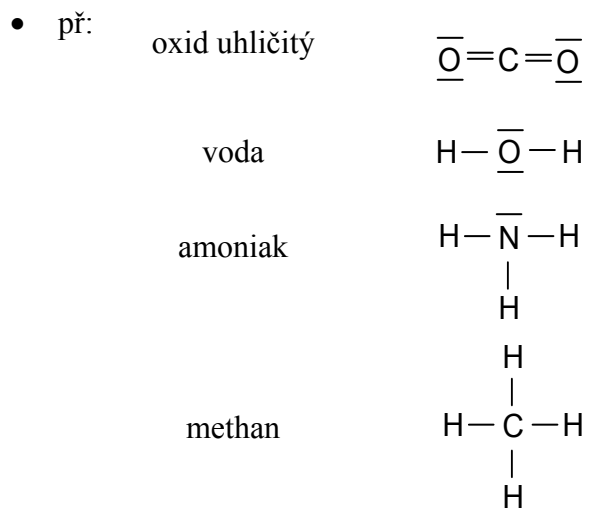


židličková konformace cyklohexanu



### Elektronový vzorec

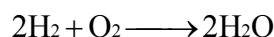
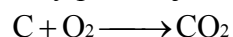
- znázorňuje valenční elektrony jednotlivých atomů



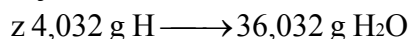
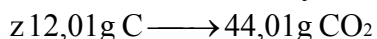
## Výpočet stechiometrického vzorce

Při kvantitativní analýze bylo spáleno 35 mg látky. Vzniklo 51,4 mg oxidu uhličitého a 20,8 mg vody. Fyzikální metodou byla zjištěna relativní molekulová hmotnost látky –  $M_r = 60$ . Určete stechiometrický a sumární vzorec látky.

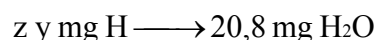
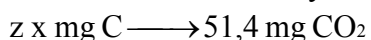
Při spalování látky probíhají reakce:



Po dosazení relativních atomových hmotností do rovnic zjistíme:



Poměry vypočítáme z kolika mg uhlíku a vodíku vznikla elementární analýzou zjištěná množství oxidu uhličitého a vody:



$$\begin{aligned} \text{v } 51,4\ \text{mg CO}_2 \text{ je } x &= \frac{12,01}{44,01} \cdot 51,4\ \text{mg C} = \\ &= 14\ \text{mg C} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{v } 20,8\ \text{mg H}_2\text{O} \text{ je } y &= \frac{4,032}{36,032} \cdot 20,8\ \text{mg H} = \\ &= 2,33\ \text{mg H} \end{aligned}$$

Dále určíme procentový obsah prvků ve vzorku:

$$35\ \text{mg látky} \longrightarrow 100\%$$

$$35\ \text{mg látky} \longrightarrow 100\%$$

$$14\ \text{mg C} \longrightarrow x\ \%$$

$$2,33\ \text{mg H} \longrightarrow y\ \%$$

$$x = \frac{14 \cdot 100}{35} \% = 40\%$$

$$y = \frac{2,33 \cdot 100}{35} \% = 6,66\%$$

Na kyslík připadá zbytek do 100% tj.  $100\% - 46,66\% = 53,34\%$

Procentový poměr prvků ve vzorku:

$$C : H : O = 40 : 6,66 : 53,34$$

Atomový poměr prvků ve vzorku zjistíme, dělíme-li procentové množství jednotlivých prvků jejich relativními atomovými hmotnostmi:

$$C : H : O = \frac{40}{12,01} : \frac{6,66}{1} : \frac{53,34}{16}$$

$$C : H : O = 3,33 : 6,66 : 3,33$$

Vzhledem k tomu, že ve sloučenině jsou jednotlivé prvky v poměru celých čísel, vydělíme atomový poměr nejmenším společným násobkem:

$$C : H : O = 1 : 2 : 1$$

Empirický vzorec sloučeniny je  $CH_2O$

Sumární vzorec může být kterýkoli celistvý násobek vzorce  $CH_2O$ , obecně  $(CH_2O)_n$ .

Index n vypočítáme, dělíme-li fyzikálně zjištěnou relativní molekulovou hmotnost látky součtem relativních atomových hmotností všech atomů prvků obsažených ve stechiometrickém vzorci.

$$n = \text{fyzikálně určená relativní molekulová hmotnost} / \text{Mr}(\text{CH}_2\text{O})$$

$$n = \frac{60}{30} = 2$$

Sumární vzorec sloučeniny je  $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2 = \text{CH}_3\text{COOH}$ . Analyzovanou látkou je kyselina octová

Chemickou analýzou látky bylo zjištěno, že obsahuje 1,5% vodíku, 56,4% arsenu a 42,1% kyslíku. Určete stechiometrický vzorec.

Sloučenina má stechiometrický vzorec  $\text{H}_x\text{As}_y\text{O}_z$ . Indexy x, y, z zjistíme dělením procentového zastoupení jednotlivých prvků jejich relativními atomovými hmotnostmi.

$$x : y : z = \frac{\% \text{H}}{\text{Ar}(\text{H})} : \frac{\% \text{As}}{\text{Ar}(\text{As})} : \frac{\% \text{O}}{\text{Ar}(\text{O})}$$

$$x : y : z = \frac{1,5}{1,008} : \frac{56,4}{74,922} : \frac{42,1}{15,999}$$

$$x : y : z = 1,488 : 0,753 : 2,631$$

Indexy upravíme na poměr celých malých čísel:

$$x : y : z = 4 : 2 : 7$$

Stechiometrický vzorec sloučeniny je  $\text{H}_4\text{P}_2\text{O}_7$  (kyselina tetrahydrogendifosforečná).