

中学化学计算 的原理和方法

王祖鳌
王孝耀
杨海宏
杨光禄
许勋和



福建教育出版社

中学生化学课外辅导读物

中学化学计算的原理和方法

王祖鑒等編

福建教育出版社出版

三明印刷厂印刷

福建省新华书店发行

开本787×1092 1/32 印张5.75 字数117千字

1985年10月第一版 1985年10月第一次印刷

印数：1—33,700

书号：7159·1012

定价：0.86元

前　　言

化学计算的要求是算得准、算得快。要做到这一点，首先要深刻理解和应用与计算有关的化学概念、化学理论和许多化学反应；其次必须掌握基本的计算方法。为此，本书向读者介绍“化学计算中的概念”、“应用化学反应的计算”、“化学计算题的类型和特点”、“计算技巧”四个部分。各部分的内容简明扼要，并选辑了典型范例。

对计算原理和方法的掌握还要通过练习。练习的目的是提高计算能力（审题与解题的能力），本书在各章节中都配有少量精选的习题，并附有答案，可供读者在自学中练习。

本书是中学生化学课外辅导读物的第三分册。承蒙福州市教师进修学院黄穆鹏、张淑铭、蔡抗生等老师作了审定，在此谨致谢意。

编　者

1983年8月

目 录

第一章 化学计算中的概念	(1)
第一节 原子量和分子量	(1)
第二节 摩尔	(8)
第三节 气态方程式	(14)
第四节 当量和当量定律	(23)
第五节 溶解度	(30)
第六节 溶液的浓度	(36)
第七节 反应热	(47)
第二章 化学反应与计算	(53)
第一节 根据摩尔关系的计算	(53)
第二节 根据当量关系的计算	(64)
第三节 混和物的计算	(76)
第四节 有关化工生产的计算	(88)
第三章 化学计算题的类型与特点	(96)
第一节 选择题	(96)
第二节 填空题	(106)
第三节 列式演算题	(114)
第四节 图解应用题	(123)
第五节 数据讨论题	(134)
第四章 计算技巧	(141)
第一节 审题与解题思路	(141)

第二节 观察法在计算中的应用	(148)
第三节 计算量的选择及处理	(154)
第四节 一题多解法的选择	(162)
第五节 计算结果的检验	(170)

第一章 化学计算中的概念

化学计算中要注意概念。许多化学概念有量的含义，通过计算，可加深对概念的理解和掌握。应用概念于计算，应注意它的应用范围、计算方法和格式。

第一节 原子量和分子量

一、原子量

原子有一定的大小和质量，但是由于它的绝对质量太小，如₆¹²C原子的质量只有 1.9927×10^{-23} 克，使用起来很不方便，因此国际上规定以₆¹²C原子的质量的 $\frac{1}{12}$ 作为标准，其它原子的质量跟它相比较所得的数值，就是该种原子的原子量。例如₁₇³⁵Cl原子的原子量是34.969；₁₇³⁷Cl原子的原子量是36.966。由于原子量是相对质量，所以没有单位。

许多种元素在自然界中存在同位素。因此现在应用的原子量是按各种天然同位素原子所占的一定百分比算出来的平均值，称为平均原子量，如₁₇³⁵Cl原子在自然界中占75.77%；₁₇³⁷Cl原子在自然界中占24.23%，这样氯元素的平均原子量是：

$$34.969 \times 75.77\% + 36.966 \times 24.23\% = 35.453$$

组成原子的微粒是核外的电子和原子核内的质子与中子。原子不显电性，因为电子数和质子数相等。由于电子的质量仅为质子的质量的 $\frac{1}{1836}$ ，近似地说，略去电子的质量，那么原子的质量主要集中在原子核上。

质子的质量为 1.6726×10^{-24} 克，中子的质量为 1.6748×10^{-24} 克，如果也以 $^{12}_6C$ 原子的质量的 $\frac{1}{12}$ 作为标准，那么质子和中子的相对质量分别是1.007和1.008，取它们的整数值为1，这样只要根据原子核里质子和中子的数目总和，即为该原子的质量数（又称近似原子量）。

∴原子的质量数（A）=质子数（Z）+中子数（N）
例如 $^{35}_{17}Cl$ ，原子的质量数是35，质子数是17，那么其中子数即为 $35 - 17 = 18$ 。

由原子的近似原子量和它们在自然界中的原子百分比，可计算该元素的平均近似原子量。如氯元素的平均近似原子量为：

$$35 \times 75.77\% + 37 \times 24.23\% = 35.5$$

以上计算要注意原子量、平均原子量、近似原子量和平均近似原子量这四者概念中的区别和联系。

二、分子量

构成物质的微粒可以是原子、离子或分子，它们可用化学式表示。对于稀有气体及原子晶体中的单质、金属晶体中的单质，均用元素符号表示其分子，因此它们的分子量用原

子量表示；对于原子晶体中的化合物、离子晶体化合物，均用最简式表示其组成中各元素原子或离子的个数比，通常也将这种最简式看成分子式，因此这些晶体的最简式的式量也就作为分子量。

这样，物质的分子量可从分子式直接求得，即等于分子式中各组成元素原子的原子量的总和。例如：

氧气(O_2)的分子量 = $16 \times 2 = 32$

硫酸(H_2SO_4)的分子量 = $1 \times 2 + 32 + 16 \times 4 = 98$

金刚石(C)的分子量 = 原子量 = 12

铁(Fe)的分子量 = 原子量 = 56

食盐(NaCl)的分子量 = $23 + 35.5 = 58.5$

结晶碳酸钠($Na_2CO_3 \cdot 10H_2O$)的分子量

$$= 23 \times 2 + 12 + 16 \times 3 + 10 \times 18 = 286$$

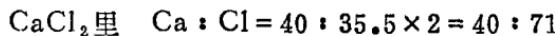
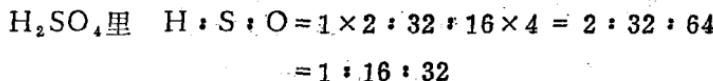
淀粉[($C_6H_{10}O_5$)_n] 的分子量 =

$$(12 \times 6 + 1 \times 10 + 16 \times 5) \times n = 162n$$

三、应用原子量与分子量的计算

1. 由分子式计算组成物质的各元素的质量比。

组成物质的各元素的质量比等于各组成元素的原子(或离子)个数乘以原子量的比。例如：



应用：当已知某物质组成元素的质量比和分子量，即可求出该物质的分子式。

【例1】已知硫酸各组成元素的质量比 $H : S : O =$

$1 : 16 : 32$, 硫酸的分子量是98, 试求硫酸的分子式。

$$\therefore H : S : O = 1 : 16 : 32$$

$$\therefore \text{原子个数比 } H : S : O = \frac{1}{1} : \frac{16}{32} : \frac{32}{16} = 1 : 0.5 : 2 \\ = 2 : 1 : 4$$

最简式是 H_2SO_4 , 式量 = 98

$$\because \text{式量} = \text{分子量}, \therefore \text{硫酸的分子式是 } H_2SO_4$$

2. 由分子式计算化合物中某一元素的百分含量。

化合物中某元素的百分含量 =

$$\frac{\text{化合物分子中某元素的原子个数} \times \text{原子量}}{\text{化合物的分子量}} \times 100\%$$

例如, NH_4NO_3 中氮元素的百分含量

$$N\% = \frac{2N}{NH_4NO_3} \times 100\% = \frac{2 \times 14}{80} \times 100\% = 35\%$$

应用 I: 求一定质量化合物里某元素的含量。

某元素的质量 = 化合物的质量 \times 某元素的百分含量

【例 2】 1 吨硝酸铵中含氮多少公斤?

$$\text{含氮量} = 1000 \text{ 公斤} \times 35\% = 350 \text{ 公斤}$$

应用 II: 求物质的纯度。

$$\text{物质的纯度} = \frac{\text{物质中某元素的实际含量}}{\text{物质中某元素的理论含量}} \times 100\%$$

【例 3】 经测定某硫铵样品中含氮20%, 试求其纯度。

$$\text{硫铵中氮的理论含量} = \frac{2N}{(NH_4)_2SO_4} \times 100\%$$

$$= \frac{2 \times 14}{132} \times 100\% = 21.2\%$$

$$\text{硫酸铵的纯度} = \frac{\text{实际含氮量}}{\text{理论含氮量}} \times 100\% = \frac{20\%}{21.2\%} \times 100\% = 94.3\%$$

应用Ⅲ：根据物质中各组成元素的百分含量，可求物质的最简式。

物质组成中各元素的原子个数比 =

各组成元素的百分含量除以原子量的比

【例4】 已知某物质中碳占40%，氢占6.67%，氧占53.3%。求其最简式。

$$\begin{aligned} C : H : O &= \frac{40\%}{12}, \frac{6.67\%}{1}, \frac{53.3\%}{16} \\ &= 3.32 : 6.67 : 3.33 = 1 : 2 : 1 \end{aligned}$$

\therefore 该物质的最简式为 CH_2O

应用Ⅳ：已知某元素在化合物中的百分含量，可求该元素的原子量。

【例5】 某主族元素R的气态氢化物中含氢5.88%，最高价氧化物中含氧60%。试计算R的原子量。

设R原子量为A，最高正价为+x，则最低负价为-(8-x)，那么R的气态氢化物分子式为 $\text{H}_{(8-x)}\text{R}$ ，R的最高价氧化物的分子式为 $\text{RO}_{\frac{x}{2}}$ 。

$$\frac{(8-x)\text{H}}{\text{H}_{(8-x)}\text{R}} \times 100\% = \frac{(8-x)}{(8-x)+A} \times 100\% = 5.88\%$$

$$(8-x)(1-0.0588) = 0.0588A \cdots \cdots \cdots (1)$$

$$\frac{\frac{x}{2}\text{O}}{\text{RO}_{\frac{x}{2}}} \times 100\% = \frac{\frac{x}{2} \times 16}{A + \frac{x}{2} \times 16} \times 100\% = 60\%$$

$$8 \times (1 - 0.6) = 0.6A \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (2)$$

联立(1)和(2)可解得 $x = +6$; $A = 32$

答: 此元素的原子量为32。

3. 由结晶水合物的分子式求结晶水的含量。

结晶水合物中结晶水的含量是一定的，因而有一定的分子式，可根据分子式求结晶水含量。

$$\text{结晶水的百分含量 H}_2\text{O} \% = \frac{\text{结晶水分子数} \times \text{水的分子量}}{\text{结晶水合物的分子量}} \times 100\%$$

$\times 100\%$ 例如，胆矾晶体中结晶水的含量是：

$$\begin{aligned} \text{H}_2\text{O} \% &= \frac{5 \times \text{H}_2\text{O}}{\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}} \times 100\% \\ &= \frac{5 \times 18}{160 + 5 \times 18} \times 100\% = 36\% \end{aligned}$$

应用：求结晶水合物的分子式。

【例6】 加热2.5克蓝色胆矾晶体后得到1.6克的白色无水硫酸铜粉末，试求胆矾晶体的分子式。

设胆矾的分子式为 $\text{CuSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$

$$\frac{\text{CuSO}_4}{\text{CuSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}} = \frac{160}{160 + 18x} = \frac{1.6\text{克}}{2.5\text{克}}$$

求得 $x = 5$

答：胆矾的分子式为 $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 。

4. 磷肥、钾肥中指定成分含量的计算。

磷肥、钾肥含量的表示方法常采用 $\text{P}_2\text{O}_5\%$ 和 $\text{K}_2\text{O}\%$ 表示，这里的 P_2O_5 、 K_2O 就是指定成分。这种类型的计算关键是 P_2O_5 （或 K_2O ）中的磷（或钾）原子个数与有关的化肥分子式中的磷（或钾）原子个数要配上系数使其相等。如求过磷酸钙和氯化钾的 $\text{P}_2\text{O}_5\%$ 、 $\text{K}_2\text{O}\%$ 的计算式分别是：

$$\text{P}_2\text{O}_5\% = \frac{\text{P}_2\text{O}_5}{\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 + 2\text{CaSO}_4} \times 100\% \\ = \frac{142}{506} \times 100\% = 28.1\%$$

$$\text{K}_2\text{O}\% = \frac{\text{K}_2\text{O}}{2\text{KCl}} \times 100\% = \frac{94}{2 \times 74.5} \times 100\% = 63.1\%$$

应用：有关物质的量和指定成分的含量可以通过分子式和分子量进行计算。

【例 7】 某二价金属M的氢氧化物跟足量的纯碱混和后溶于水中，生成白色沉淀，将此沉淀滤出，洗涤、烘干，称其质量为9.85克。高温灼烧此沉淀后，质量变为7.65克的白色粉末。求M的原子量。

设M的原子量为x。根据题意 MCO_3 9.85克， MO 7.65克，可列下式：

$$\frac{\text{MO}}{\text{MCO}_3} = \frac{7.65 \text{ 克}}{9.85 \text{ 克}} = \frac{x + 16}{x + 60}$$

$$\therefore x = 137$$

答：此金属M的原子量为137（Ba）。

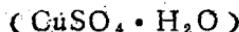
习 题

1. 在自然界中 $^{16}_8\text{O}$ 占99.759%， $^{17}_8\text{O}$ 占0.037%， $^{18}_8\text{O}$ 占0.204%，求氧的平均近似原子量。 (16)

2. 加热某+2价金属无水氯化物4.4克，得到氧化物为2.6克。该金属的原子量是多少？ (63.44)

3. 结晶硫酸铜25.0克，加热至100℃失去一部分结晶

水，质量变为17.8克，写出残留物的分子式。



4. 某过磷酸钙样品中含 $\text{P}_2\text{O}_5\%$ 为26%，一吨这种过磷酸钙可用多少公斤重过磷酸钙代替？（428.3公斤）

5*. 棉花（纤维素）跟浓硝酸（混有浓硫酸）发生酯化反应所得的硝酸纤维素酯中，若n为一定值，测得其含氮量为13.8%，那么其中含三硝酸纤维素酯的百分率是多少？

(97.6%)

第二节 摩 尔

一、摩尔

摩尔是国际单位制中的一种化学上常用单位，用以表示物质的量，可用“mol”表示。

某物质如果含有阿佛加德罗常数(6.02×10^{23})个微粒，这种物质的量就是1摩尔。例如：

6.02×10^{23} 个电子就是1摩尔电子；

6.02×10^{23} 个氢原子就是1摩尔氢原子；

6.02×10^{23} 个氢分子就是1摩尔氢分子；

6.02×10^{23} 个氢离子就是1摩尔氢离子。

摩尔这个单位除了可以表示物质的微粒数，还可以表示这些微粒聚集体的质量或其它物理量（如标准状况下气体的体积、键能等）。例如1摩尔氢分子含有 6.02×10^{23} 个氢分子，这些氢分子的质量为2克，在标准状况下占有约22.4升的体积，这些氢分子中共含有 6.02×10^{23} 个共价键，其键能

总和是104.2千卡。

二、摩尔质量

1摩尔物质的质量称为该物质的摩尔质量。物质的摩尔质量如何确定呢？

1摩尔任何原子的质量就是以克为单位，数值上等于该种原子的原子量；同理1摩尔任何分子的质量，就是以克为单位，数值上等于该种分子的分子量。计算离子的摩尔质量时，略去电子的质量。例如：

1摩尔氯原子的质量是35.5克；

1摩尔氯离子的质量也是35.5克；

1摩尔氯分子的质量是71.0克。

因此，物质的摩尔质量就是以克为单位，数值上等于该物质的原子量或分子量，单位是克/摩尔。

三、气体摩尔体积

在标准状况下，1摩尔任何气体所占的体积都约为22.4升，这个体积就叫做气体摩尔体积。为什么不同的气体在标准状况下都占有22.4升的体积呢？

气体的体积主要决定于气体分子间的平均距离，条件（温度、压强）相同时，不同气体分子间的平均距离相同，因此任何气态物质的气体摩尔体积都约是22.4升。这可以由气体的摩尔质量和该气体在标准状况下的密度计算出来。例如：

$$\text{氢气的摩尔体积} = \frac{2.016\text{克}/\text{摩尔}}{0.0899\text{克}/\text{升}} = 22.4\text{升}/\text{摩尔}$$

$$\text{氯气的摩尔体积} = \frac{70.90\text{克}/\text{摩尔}}{3.165\text{克}/\text{升}} = 22.4\text{升}/\text{摩尔}$$

$$\text{氯化氢的摩尔体积} = \frac{36.47\text{克}/\text{摩尔}}{1.608\text{克}/\text{升}} = 22.4\text{升}/\text{摩尔}$$

四、物质的量（摩尔）

物质的量用摩尔作单位。物质的量与物质的质量或标准状况下气态物质的体积关系如下：

$$\text{物质的量（摩尔）} = \frac{\text{物质的质量（克）}}{\text{物质摩尔质量（克/摩尔）}}$$

$$\text{物质的量（摩尔）} = \frac{\text{标况下气态物质的体积（升）}}{\text{气体摩尔体积（22.4升/摩尔）}}$$

如22克（或标准状况下11.2升）的CO₂是多少摩尔？

$$\text{CO}_2 \text{的物质的量} = \frac{22\text{克}}{44\text{克}/\text{摩尔}} = 0.5 \text{摩尔}$$

$$\text{或 CO}_2 \text{的物质的量} = \frac{11.2\text{升}}{22.4\text{升}/\text{摩尔}} = 0.5 \text{摩尔}$$

应用：对于气态物质，可根据摩尔质量和气体摩尔体积求出该气体在标准状况下的密度。

【例1】求标准状况下氧气、氮气和空气的密度。

$$\text{氧气的密度} = \frac{\text{氧气摩尔质量}}{\text{氧气摩尔体积}} = \frac{32\text{克}}{22.4\text{升}} = 1.43\text{克}/\text{升}$$

$$\text{氮气的密度} = \frac{\text{氮气摩尔质量}}{\text{氮气摩尔体积}} = \frac{28\text{克}}{22.4\text{升}} = 1.25\text{克}/\text{升}$$

$$\text{空气的密度} = \frac{\text{空气摩尔质量}}{\text{空气摩尔体积}} = \frac{29\text{克}}{22.4\text{升}} = 1.29\text{克}/\text{升}$$

五、摩尔在计算中的应用

应用摩尔作单位，给化学计算带来很大的方便。

1. 求一定量物质中的微粒数

【例2】54克铝中含有几个价电子？

1个铝原子里含有3个价电子。

$$\text{铝原子的物质的量} = \frac{54\text{克}}{27\text{克/摩尔}} = 2\text{摩尔}$$

\therefore 54克铝原子中价电子总数是 $2 \times 6.02 \times 10^{23} \times 3$, 等于 3.612×10^{24} 个。

【例3】 11.1克CaCl₂晶体中含有几个Ca²⁺离子，几个Cl⁻离子？

CaCl₂的摩尔质量是111克。

$$11.1\text{克CaCl}_2 \text{的物质的量} = \frac{11.1\text{克}}{111\text{克/摩尔}} = 0.1\text{摩尔}$$

Ca²⁺的摩尔数 = 0.1

Ca²⁺离子数 = $0.1 \times 6.02 \times 10^{23}$ (个)

Cl⁻的摩尔数 = 0.2

Cl⁻离子数 = $0.2 \times 6.02 \times 10^{23}$ (个)

2. 从物质的微粒数求物质的量

【例4】 含有 3.01×10^{23} 个分子的SO₂气体的质量是多少克？标准状况下的体积是多少升？

$$\text{SO}_2 \text{气体的物质的量} = \frac{3.01 \times 10^{23} \text{个}}{6.02 \times 10^{23} \text{个/摩尔}} = 0.5\text{摩尔}$$

SO₂的质量 = 0.5摩尔 \times 64克/摩尔 = 32克

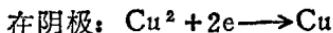
SO₂的体积 = 0.5摩尔 \times 22.4升/摩尔 = 11.2升

【例5】 电解精炼铜的生产中，若通入96500库仑的电量，问在阴极可析出多少克纯铜？

1个电子的电量是 1.6×10^{-19} 库仑

$$\therefore \frac{96500\text{库仑}}{1.6 \times 10^{-19}\text{库仑/个电子}} = 6.02 \times 10^{23} \text{个电子}$$

= 1摩尔电子



即每1摩尔铜离子需要得到2摩尔电子，才能还原析出1摩尔铜，因此1摩尔电子只能使0.5摩尔 Cu^{2+} 离子还原析出0.5摩尔铜。

$$\therefore \text{铜的质量} = 0.5 \text{摩尔} \times 64 \text{克/摩尔} = 32 \text{克}$$

3. 根据微粒个数比等于摩尔数比的计算

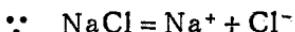
在物质的微粒数比例中，若均增大 6.02×10^{23} 倍，则微粒数比变为摩尔数比。

【例6】 欲使每100个水分子中溶有5个钠离子，问在90克水中至少应溶解多少克氯化钠晶体？

$$\text{Na}^+ \text{离子个数 : H}_2\text{O分子个数} = 5 : 100$$

$$\text{则 Na}^+ \text{离子的摩尔数 : H}_2\text{O分子的摩尔数} = 5 : 100$$

$$\therefore \frac{5}{100} = \frac{x}{\frac{90}{18}} \quad x = 0.25$$



\therefore 溶液中若溶有0.25摩尔 Na^+ 离子，则需0.25摩尔 NaCl 晶体， NaCl 晶体的质量是：

$$0.25 \text{摩尔} \times 58.5 \text{克/摩尔} = 14.6 \text{克}$$

4. 在一特定反应中，反应物、生成物之间微粒数比也等于摩尔数比，可由反应式中的系数判定。

【例7】 质量均为A克的 Na_2CO_3 和 NaHCO_3 ，分别与足量盐酸反应，标准状况下何者放出 CO_2 气体的体积多？

Na_2CO_3 和 NaHCO_3 与 HCl 反应的化学方程式分别为：

