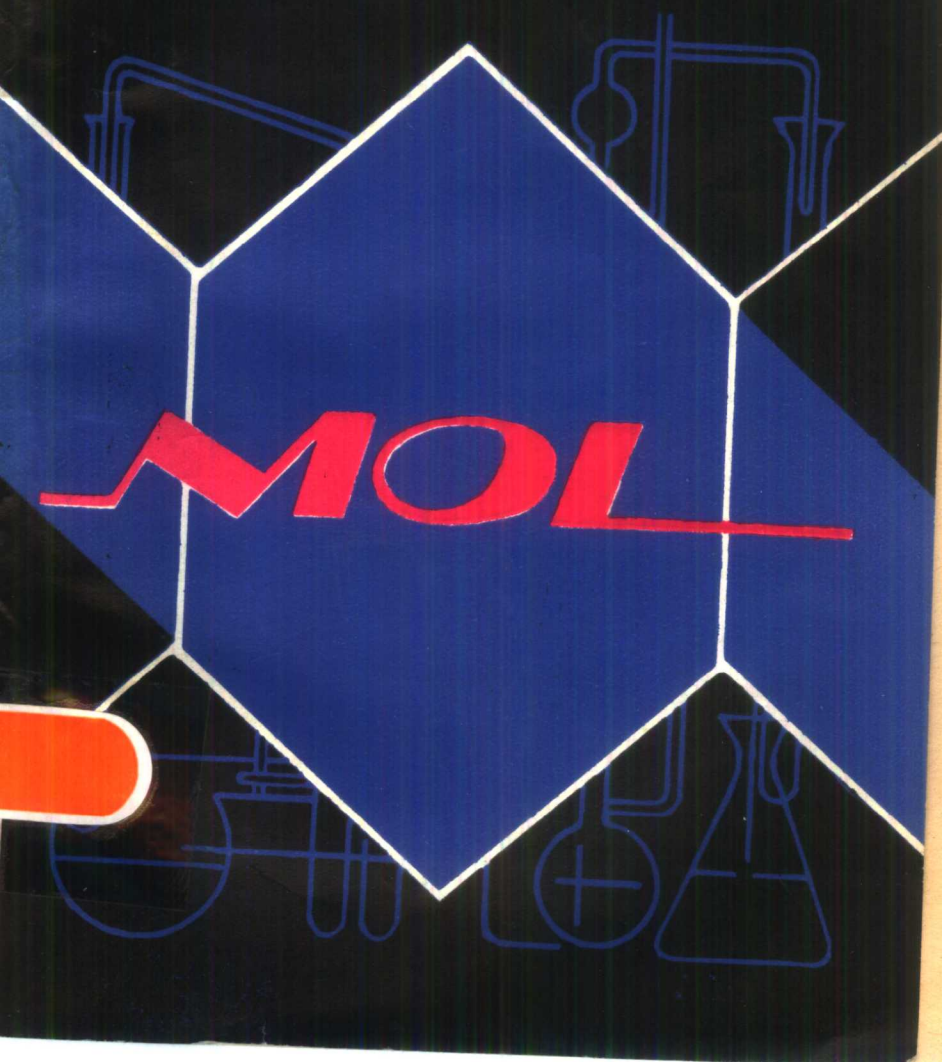


摩尔在化学计算中的运用

MOL



摩尔在化学计算中的运用

张海著 编著

云南人民出版社

一九八三年·昆明

内 容 简 介

“摩尔”是中学化学教学的一个重点。为帮助中学化学教师提高教学水平，也帮助中学生提高学习效果，作者根据自己多年的教学经验，以中学化学教材为基础编著了这本教学参考书。

书中阐明了与“摩尔”有关的基本概念、定律和理论；采用“关系式法”解题，解法科学、简捷；本书立足于中学化学教材，在深广度方面作了适当提高和扩充。所以本书对于中学化学教师不失为一本有用的教学参考书，对中学生则是一本较好的学习辅导书，同时也适于社会青年自学之用。

责任编辑：何 方

封面设计：蒋敏学

摩尔在化学计算中的运用

张 海 若

*

云南人民出版社出版

(昆明市书林街100号)

云南新华印刷二厂印装 云南省新华书店发行

*

开本：787×1092 1/32 印张：9.75 字数：216,000

1984年10月第一版 1984年10月第一次印刷

印数：1—4,000

统一书号：7116·1032 定价：0.78元

前 言

化学是一门精密的实验科学，也是一门理论科学。它的许多理论和应用都要求有不同精密程度的计算。从发展趋势来看，科学愈成熟，定量的东西就愈多，而化学也正向结构、微观、定量方向发展。因此，各种化学教科书，都对定量的要求有所提高，势必把微观的计算单位“摩尔”引入到化学教材中来，这样才能适应新形势的要求。“摩尔”是联系较广泛的，化学上常用的重要基本单位。为了适应四个现代化的需要，并根据教学的实践情况，必须及时改变化学计算题的解题思路，建立以“摩尔”为中心的解题方法，使化学计算问题结构化。这样才有利于培养学生的独立解题能力，是提高化学教学质量的关键性措施。

正是这种情况，促使我编写这本运用“摩尔”来解化学计算题的书籍；同时也是为了总结三十多年来运用“克分子”、“克原子”解化学计算题的经验，来适应新的化学教学大纲的要求。希望通过本书能对学习化学的人，提供一些解化学计算题的线索和方法，使他们能运用“摩尔”的含意，掌握解题的关键，借以获得解化学计算题的技巧。但由于水平有限，不当之处，请提出宝贵的意见。

书中有些内容，虽已超出中学化学教学的范围，但有助于自学提高之用；同时照顾到化学计算问题的系统性，有些问题

虽与摩尔关系不大也列入书中。

张海若 于昆明师专

1981年8月

目 录

第一章 摩尔	(1)
一、摩尔的定义	(2)
二、阿佛加德罗常数的测定	(34)
三、与摩尔有密切关系的几个重要概念	(38)
四、运用摩尔进行计算的特点	(56)
第二章 解化学计算问题的原理和方法	(65)
一、化学定律	(68)
二、化学计算题的解法	(97)
第三章 化学计算问题的基本类型	(116)
一、有关化学式的计算	(118)
二、有关溶液的计算	(114)
三、根据化学方程式的计算	(164)
四、热化学	(185)
五、有关化学反应速度和化学平衡的计算	(197)
六、电解质溶液和电离平衡	(221)
第四章 化学综合计算题	(259)
一、解化学综合计算题的方法	(259)
二、例题剖析	(263)

第一章 摩 尔

《全日制十年制学校中学化学教学大纲》中指出：“进行化学计算能使学生对量的方面来理解物质及其变化的规律，并获得化学计算的基本技能。在教学中教师要有目的、有计划地布置适当数量、富有启发性的综合题，并加强解题指导，严格要求学生独立完成，使学生在理解化学原理和化学知识的基础上进行计算，要注意计算的准确性。”

化学计算是中学化学教学中的一项重要任务，它不仅使学生获得必要的计算技能，而且还能使学生从量的方面加深对化学基本概念和基本原理的理解。深入了解化学基本概念和基本理论又可以更灵活更正确地进行计算，所以它们是相辅相成的。化学计算有别于其它各类型的化学习题，它是逻辑思维与数学运算在化学课程里的综合体现。

化学计算能促使理论与实际相结合，有助于巩固和加深课堂所学的基础知识以及培养分析和解决实际问题的能力；它不仅是考查学生知识质量的重要手段，也是学生今后从事实际生产和继续学习必须具备的技能之一。也就是说化学计算对化学教学、化工生产和科学研究都有重要的意义。特别是随着现代农业、现代工业、现代科学技术和现代国防的飞速发展，化学计算更加显示出它的重要性。

随着现代生产和科学技术的发展，迫切要求人们用宏观的量来量度微观粒子。由于分子、原子、离子、电子等粒子都很

小，致使人们不能借助于衡器和量器直接测量一个粒子的质量和体积，但是一定数目的这些微粒的集体的质量和体积都是可以测量的。因此，人们就采用了一个适宜的单位——摩尔来计量物质的量。

摩尔来源于拉丁文Moles，原意是大量和堆量。它是由物理化学家 奥斯瓦尔德 (W. F. Ostwald) 于1869年引入化学学科的。当时提出将质量以克计，等于分子量或原子量的物质的量称为“摩尔”。所以，这个概念是由“克”、“克原子”、“克分子”等概念发展而来的。因此，可以说“摩尔”既是一个旧概念，又是一个新概念，因为它早在本世纪初就已引进到化学领域里来，并在化学教科书里广泛使用它；而它又是在1971年10月第十四届国际计量大会才通过的决议，在国际单位制 (SI制) 里新增加的第七个基本单位。由于正确掌握和运用摩尔这一新概念，是学习化学计算和其它许多概念的基础，因此，必须深刻理解它的含意。

一、摩尔的定义

摩尔是物质质量的基本单位，它以结构微粒 (分子、原子、离子、电子等) 的数量来表示物质的量。科学上规定，这个数量等于0.012千克 ^{12}C 所含的碳原子个数，经实验测知，0.012千克 ^{12}C 所含的碳原子个数等于 6.023×10^{23} 。 6.023×10^{23} 是一个常数，这个常数叫做阿佛加德罗常数。由此可见，如果物质所含的结构微粒的数目为 6.023×10^{23} 时，就是1摩尔，通常用1 mol或1 摩尔表示。

为了统一化学上的克分子、克原子、克离子等概念，并进

而更广泛地应用物质系统的其它粒子（如电子、光子等）或这些离子的特定组合，才决定建立一个计量物质结构微粒的基本单位——摩尔。

第十四届国际计量大会关于摩尔的定义有如下两段规定：

（1）摩尔是一系统的物质的量，该系统中所包含的基本单元数与0.012千克（公斤）碳—12的原子数目相同。

（2）在使用摩尔时，基本单元应予指明，可以是原子、分子、离子、电子及其它粒子，或是这些粒子的特定组合体。

根据摩尔的定义，它的内容包含两个方面：一是摩尔定义的本身；另一方面是指应用摩尔这一概念时，要指明是什么微粒。在理解摩尔这一概念时，上面两段话应看作是一个整体。定义中的“基本单元”含意不够明确，就化学变化的特征来说，基本单元应指的是结构微粒，而实际上它的含意更为广泛，似乎用微观粒子更为恰当。由于微观粒子范围广泛，在使用时如不说明是哪一种微粒，则摩尔质量因各种物质而不同，那就不好应用摩尔来进行计算了。所以必须指明微观粒子是原子、分子、离子、电子以及这些粒子的特定组合。例如，通常我们用摩尔表示磷酸这种物质的量时，其基本单元就是指 H_3PO_4 分子，1摩尔磷酸就含有 6.023×10^{23} 个 H_3PO_4 分子，但对于 H_3PO_4 与 NaOH 的反应来说，研究其当量关系时，

$\left[\frac{1}{3}\text{H}_3\text{PO}_4\right]$ 就是1个基本单元（因为是1当量），这时，1摩

尔 $\left[\frac{1}{3}\text{H}_3\text{PO}_4\right]$ 就包含 6.023×10^{23} 个 $\left[\frac{1}{3}\text{H}_3\text{PO}_4\right]$ 。又如，通常

我们说1摩尔甲烷，指含有 6.023×10^{23} 个 CH_4 分子，但在研究甲烷的键能时，则以一个“C—H”键为一个基本单元，也

可用摩尔计量。由甲烷的分子结构可以知道一个甲烷分子中含有4个“C—H”键，这样，1摩尔CH₄则含有4摩尔的“C—H”键。在摩尔定义中有几个概念不易明确，如什么是物质的量？什么是阿佛加德罗常数？为什么用0.012千克碳-12含的原子数目做计量标准，而不直接用阿佛加德罗常数个微粒？这是值得我们思索的问题。关于摩尔定义的本身说摩尔是物质量的单位，可是，这个基本单位不同于其它的物理量的单位如体积、质量等，而是用一定微观粒子的数目来表示物质的量的单位。这个单位所采用的微观粒子数目是与0.012千克¹²C中所含的原子数目相等。并没有直接用 6.02×10^{23} 个微观粒子做计量单位，这是因为阿佛加德罗常数是极庞大的数值，尽管科学技术的发展能测得较为准确，然而它的数量级在 1×10^{23} ，如果把它作为标准来量度物质将十分不便，而用0.012千克¹²C为标准来度量物质那就比较精确，人们可以借助质谱仪来测定原子量，通过原子量来求得物质的摩尔质量，这样准确度就较高，同时也就可以明确摩尔定义中的两个内容了。

摩尔是一个单位，这是从来就没有争议的，在科学上规定摩尔这样一个新单位，正是科学发展的结果。而且事实也证明，摩尔是一个经得起实践考验的新单位，但对摩尔的定义，却有各种不同的理解。有人说：“摩尔有双重含意，它既能表示一种物质的质量，又能表示该物质所包含的基本单元数”。也有人说：“摩尔既非质量单位又非数量单位”等等。因此，必须统一对摩尔是什么单位的认识。不然就不能正确运用摩尔，而且还影响到一系列以摩尔为基本单位所表达的复合量。为此，我们必须弄清摩尔是什么单位。摩尔是一种计数单位，是对结构粒子计数的集合量的单位。摩尔既是基本物理量，“物质的

量”和长度、质量……一样，都各标志着物质或物体及其运动的量的属性在某一个方面的本质特征。长度标志线条长短的特征；质量标志物质所包含的质的大小的特征；……“物质的量”则标志结构粒子的集合数这一特征。摩尔是“物质的量”的名称，也是“物质的量”的单位。显然它不能称为质量单位。任何量的名称都是一种量词，很多量词也被用做单位名称。在实际计量中，都必须采取“数词+量词”的形式，形成数量，任何单位都是某种数量的标准，所以把摩尔称作数量单位也是不恰当的。随着现代科学技术的发展，人们迫切需要用宏观的量来度量微观粒子。从化学眼光看，化学变化是构成物质中原子或离子等构成物质微粒重新组合的过程。对摩尔这个计数单位中的“集合数”取值多少呢？集合数是人们对以个体形式存在的物质的一种计量方式，是为了适应简化计数的需要而产生的。我们受了克原子和克分子量的启示，取 6.023×10^{23} 个结构微粒做为“物质的量”，则达到简化计数，并与我们所熟悉的“克”、原子量、分子量等紧密联系了。试看下面的计算。摩尔定义中说，1摩尔所含的微粒数目等于12克 ^{12}C 中所含的碳原子数。下面我们来计算一下12克 ^{12}C 中所含的碳的原子个数：

科学上已经测定1个 ^{12}C 原子的质量 $=1.99 \times 10^{-23}$ 克

$$\therefore 12\text{克}^{12}\text{C}\text{所含的原子个数} = \frac{12\text{克}}{1.99 \times 10^{-23}\text{克}} = 6.02 \times 10^{23}$$

6.02×10^{23} (6.022169×10^{23}) 这个数目就叫做阿佛加德罗常数用“ N_A ”表示，也就是说，1摩尔的任何物质所含的微粒数目都相等，这些微粒数目就是 6.02×10^{23} 。

如1摩尔“O”含有 6.02×10^{23} 个氧原子；

1 摩尔 " O_2 " 含有 6.02×10^{23} 个氧分子；(因为 1 个氧分子由两个氧原子构成，所以 1 摩尔氧分子中含有 $2 \times 6.02 \times 10^{23}$ 个氧原子)；

由此类推：2 摩尔 " O_2 " 含有 $2 \times 6.02 \times 10^{23}$ 个氧分子；

.....

n 摩尔 " O_2 " 含有 $n \times 6.02 \times 10^{23}$ 个氧分子。

从上面推论，可以看出“摩尔”是用 6.02×10^{23} 个微粒当做“一堆”来度量微观粒子的。因此，把 6.02×10^{23} 个微粒叫做 1 摩尔。可是要明确“摩尔”与阿佛加德罗常数并不是一回事，摩尔是个基本单位，而阿佛加德罗常数只不过是一个为大家所熟悉的常数。摩尔作为物质的量的基本单位，是从物质所含微观粒子的数量方面来抓住了“物质的量”的本质。我们没有必要认为摩尔既是数量单位，又是质量单位，更不宜说摩尔既非质量单位又非数量单位。以摩尔表示的任何一个物质的量值，虽然都表示一定的基本单元的数目，但只是说明基本单元是阿佛加德罗常数的若干倍，并不能指出基本单元的真实数目，而在一般使用中，也不需要指出真实数目。因此，摩尔不能说成“数量”或“数量单位”，而应说它是一个量，是一个“物理量”，是一个用阿佛加德罗常数个微粒为计量单位表示物质多少的物理量。一切科学中的物理量的规定单位，都有一个客观标准，然而任何物理量的测定都受条件的限制，都只能是近似值。科学中，用阿佛加德罗常数的地方，到处皆是。用这个近似值代替真实值，已为科学实验所证明是可行的，为什么阿佛加德罗常数就不能表示微粒的真实数目呢？我们应该承认它的合理性。数字的表达方法，一般以 10^n 表示很大的或很小数字的“数量级”，数字部分只写一位整数。如结构粒子

5 mol的具体数字不写作 30.115×10^{23} ,而要写作 3.012×10^{24} ,
0.1mol的结构粒子数则写作 6.023×10^{22} 。把3.0115写作3.012
是由于阿佛加德罗常数以四位有效数表达的缘故。

摩尔是决定宏观物质质量计量方法的一个重要概念,它也是表达事物本质特征的、具有严格科学意义的概念。摩尔的内涵是阿佛加德罗常数即 6.023×10^{23} ;它的外延就是原子、分子、离子等结构微粒和这些粒子的特定组合,因此它有广泛的运用范围。

原子量与原子质量 在化学反应中,量的计算都是以原子数和原子量为依据的。尤其是在运用“摩尔”进行计算时,常需要掌握物质的摩尔质量,因此,就与物质的原子量、分子量等有密切关系了。这就需要搞清原子量这一重要概念。原子量与原子质量是化学和物理学中的基本的、重要的概念。自从道尔顿发表原子论以来,人们自然要考虑:一个原子究竟有多重?因为各种元素的原子都很小,质量又极轻,不必说早年的天平,无法直接称量一个原子的质量,就是近代的精细天平也办不到。但原子质量虽轻,如果一定数目(如 6.02×10^{23} 个)原子集合体的质量,就可直接用天平称量了。这样也就可以求得一个原子的质量了。采用这种方法所算得的原子量,叫做原子的绝对质量。那么它用什么做单位呢?如用“克”为单位来表示原子的绝对质量,数值太小(如氧原子的质量是 2.66×10^{-23} 克等)。对记忆和计算都不方便,因而就不得不选用某种元素的原子质量为标准,令其它元素的原子质量与之相比较,这样求得的原子质量,叫做原子的相对质量和相对原子量,简称原子量。既然原子量是选取某种元素的原子质量为比较标准而求得的,那么,选取任何元素的原子质量的任何倍数(正整数或分数)作

标准都可以，根据以上所述可列出求原子量的算式如下：

$$\frac{\text{某元素A 1个原子的质量}}{\text{某元素B 1个原子的质量}} = \frac{\text{某元素A的相对原子量}}{\text{某元素B的相对原子量}}$$

按照数学上比的道理，比只有比值，它是纯粹的数目字，而没有单位。因此，相对原子量也是没有单位的纯数，是没有量纲的物理量。总的说来，凡是相对量，一般都是没有单位的。自从同位素发现后，认为每种元素都有一定数目（一种或两种以上）的核素（核素指的是核，就是有一定数目质子和中子的一种不带电子层的原子核）。核素的质量，也称核素的原子质量、同位素的原子量或同位素的质量。这些都是同义词。平常所说的原子质量，就是指的核素的原子质量。核素的质量单位，已由国际计量局于1973年公布，我国也在1977年颁发过。它的中文代号是原子质量单位，国际代号是U。它的定义是：原子质量单位等于1个碳-12核素原子质量的1/12。

$$1 \text{ 原子单位} = 1.6605655 \times 10^{-24} \text{ 克。}$$

而 $1.6605655 \times 10^{-24}$ 是阿佛加德罗常数 6.0228×10^{23} 的倒数。那么实际单位“克”与“原子单位”的关系是： $1 \text{ 克} = 6.02 \times 10^{23}$ 原子单位。如果选取一个 $^{12}_6\text{C}$ 核素的原子质量的1/12为标准来测定原子质量则

$$\text{某元素的相对原子量(即原子量)} = \frac{\text{某元素 1 个原子的质量}}{^{12}_6\text{C核素原子质量} \times \frac{1}{12}}$$

这样就得到原子量的定义如下：

定同位素 $^{12}_6\text{C}$ 一个原子的质量为12.00000U时，各元素一个原子的相对质量，就叫该元素的原子量。也就是说，原子量是一种元素的一个原子的平均质量，对同位素 $^{12}_6\text{C}$ 一个原子的质

量的 $1/12$ 之比。如果把这个比的前项和后项都增大 6.02×10^{23} 倍则比值仍然不变得如下关系：

$$\text{某元素的相对原子量} = \frac{\text{某元素 1 摩尔质量}}{^{12}\text{C 核素 1 摩尔质量} \times \frac{1}{12}}$$

于是得原子量的新定义：原子量是一种元素 1 摩尔质量同核素 ^{12}C 1 摩尔质量 $\frac{1}{12}$ 的比值。

定义中所谓的一个原子的平均质量，是对一种元素含有几种同位素说的，它可按这些同位素的原子质量和丰度来计算。如果一种元素是以同位素混合物存在（大多数元素有两种以上的同位素；但钠元素只有一种核素— ^{23}Na ），在进行计算时，则需用平均原子量。例如碳在自然界有两种稳定核素 ^{12}C 和 ^{13}C ，经质谱仪测定 ^{12}C 的质量 = 12.00000U，丰度 = 98.892%； ^{13}C 的质量 = 13.0033U，丰度 = 1.108%。所以碳的同位素混合物的平均原子量是：

$$12.00000\text{U} \times 98.892\% + 13.0033\text{U} \times 1.108\% = 12.011\text{U}$$

这种平均原子量，在某些书上也称为化学原子质量、平均原子量或化学原子量。由于核素的质量是有单位的，所以元素的平均质量显然也是有单位的。

可见，原子量和平均原子质量这一对概念是有区别的，同一元素原子量和平均原子质量的数值相同，但平均原子质量有单位(U)，原子量则是一个没有单位的物理量。原子量与平均原子质量的关系和比重与密度的关系很相近。原子重量与原子质量二者的出发点更是不同的，元素的“原子量”和核素的“原子质量”，虽然都是以 ^{12}C 为基准，但是两个不同的概念，其区

别如下：

(1) 原子量是某元素一个原子的平均质量对 ^{12}C 核素一个原子的质量的 $\frac{1}{12}$ 之比，而原子质量是某核素一个原子的质量；原子量是讨论某元素天然存在的所有核素原子的平均质量，原子质量只讨论某元素一种核素原子的质量。

(2) 从数值看，一种元素只有一个原子量。除单一核素外，同种元素各核素原子质量不同。

(3) 对单一核素来说，它的原子量和原子质量数值相等，但原子量没有单位，而原子质量有单位（常用U）。

(4) 原子量与核素的丰度有关；原子质量与核素的丰度无关。

原子质量和质量数也是两个不同的概念，前者表示某核素原子的质量，后者表示某核素原子核中质子数与中子数之和。虽然质子和中子的质量接近于1U，但不等于1，再加上静质量亏损的原因，除 ^{12}C 核素的原子质量是整数、其数值恰好等于质量数之外，其余核素的原子质量都有小数，质量数则全是整数。

为什么要采用 ^{12}C 原子质量的 $\frac{1}{12}$ 作为国际原子量的标准呢？

自1803年道尔顿发表“原子论”以来，就有人开始致力于原子量的研究工作。道尔顿首先提出以最轻的氢元素 $\text{H}=1$ 为原子量标准（当时尚未发现同位素，因而认为同种元素的原子具有相同的质量）。某元素一个原子比氢原子重几倍，则原子量就是几。后来由于很多种元素都能与氧化合生成氧化物，它们的化合量可与氧直接比较，1826年改用 $\text{O}=100$ 为标准。

1860年又改用 $O = 16$ 作标准，这样可使原子量数值小些，同时保持氢元素原子量约等于1。而所有元素原子量都大于1。

到1929年发现了氧的同位素，自然界中的氧有三种同位素。随后人们通过实验证明氧的同位素丰度在自然界的分布是不均匀的，因而认识到用天然氧作原子量标准不够妥当。物理学界随即采用 ^{16}O 等于16作为原子量标准，但化学界仍然保持了天然氧原子量等于16的标准。从这时起就有了所谓化学原子量和物理原子量并行的两种标度。这两种标度之间的差别约为万分之三。1940年国际原子量委员会确定以1.000275为两种标度的换算因数：

$$\text{物理原子量} = 1.000275 \times \text{化学原子量}$$

实际上，由于天然氧的丰度是略有变化的，规定换算因数也不是一种妥善办法。由于两种原子量标准并存所引起的矛盾，自然就促进了统一原子量标准的要求。在化学工作中使用原子量的地方很多，因此化学界希望选择一个新标度，并希望这个新标度对原有的原子量数值改变越小越好。经过反复讨论， 1H 、 4He 、 ^{19}F 、 ^{12}C 、 ^{18}O 等均曾被考虑过作为新的原子量标准，最后由于以 ^{12}C 作为标准有许多好处：(1)碳-12在碳的天然同位素中所占的相对百分数比较固定，受地点影响不大；(2)最大的好处是，采用 ^{12}C 作为原子量的新标准，各元素的原子量变动不太大，仅比过去降低了0.0043%；(3)碳形成很多的高质量的“分子离子”和氢化物，利于测定质谱，而氧则无高质量离子。 ^{12}C 很容易在质谱仪中测定，而用质谱仪来测定原子量是现代最准确的方法；(4)碳在自然界分布较广，它的化合物特别是有机物种类繁多；(5)测得的结果，有些元素的原子量有效数字增多到7位或更多；(6)元素中最轻的元素的原子