

中学 化学 计算方法

陈道章

福建人民教育出版社

化学计算方法

(修订本)

陈道章

福建人民教育出版社

化学计算方法

(修订本)

陈道章

福建人民教育出版社出版

福建省新华书店发行

三明市印刷厂印刷

开本：787×1092毫米 1/32 6·375 印张 140千字

1963年5月第一版

1980年11月第二版 1980年11月第一次印刷

印数：1—27,000

统一书号：7159·319 定价：0.51元

前 言

现代化学是一门在原子、分子水平上研究物质的组成、结构与性质的辩证关系，研究能量、物质转化和合成规律的科学。一切物质都在永恒不断的变化中，世界上没有一种不变的物质。物质的变化是从量的逐渐变化到引起质的突变。化学计算正是从量的方面来理解物质变化的过程，它与国民经济的发展有着密切的联系，化学工业上的经济核算必须通过化学计算才能完成。工农业生产和科学研究经常使用到化学计算。目前计算化学已发展成为现代化学中较为突出的学科分支。因此，在举国努力实现农业、工业、国防和科学技术现代化的今天，化学计算更有它的重要意义。

在学习化学计算时，初学者常会碰到困惑的计算问题。本书根据这些问题的内容、性质及难易程度进行分析，希望能解除初学者的一些疑难。

初等化学计算通常根据分子式、化学方程式，应用算术或代数运算工具就可以解决，并不怎样艰深。但化学研究的是物质的各种错综复杂的变化，同样的反应物在不同条件下，会有不同的生成物。因此，初学者首先碰到的一个困难就是怎样分析题目的已知和未知条件，根据题意列出一个完整的、能够正确反映化学变化过程的化学方程式，作为计算的基本根据。其次，不同的化学问题，其所反映的化学过程、性质以及难易程度也都不一样。在解题过程中，应该怎样运用学过的化学知识、选定某种最简便的方法，才能迎刃

而解，初学者对此也颇费周折。此外，运算的技巧、数字的有效、单位的选择、思考的途径等，对于某些读者来说，也可能是一种困难。

分析与综合是逻辑上的两种基本思维方式，在解题的时候都要运用这两种方式中的一种或两种。解题时应注意从感性认识到理性认识的逐步深入。从物质的性质及变化，即从化学反应、反应的规律（反应能否进行到底）列出分子式、化学方程式，配平方程式，然后列出数据，按基本思维方式进行运算。本书对每一步骤都加以解释，希望帮助读者在错综复杂的化学变化中找出它的规律性，顺利通过化学计算中的第一道难关。其次，本书在每一章的开始，都对本章计算题所应具备的基础知识作简要的综述；在挑选例题方面，特别注意其典型意义；结合解题过程，根据题目的性质，对已知和未知条件进行必要的分析；尽可能做到一题多解，使读者能够对各种解法的优缺点有所比较、选择。对于一些比较难的同时又是初学者容易搞错的题目，特从正面、反面逐步剖析，冀能化难为易，有助于读者迅速掌握解题要点，从而提高解题能力；书中所列举的错误解法，可作前车之鉴，使读者以后碰到类似题目时不至重蹈复辙。

下面谈谈解题过程中的一些步骤、思考方法及注意点。

一、审题 弄清题目中提出的中心问题是什么？它跟哪些概念或具体物质知识有关？有哪些已知条件与未知条件？这是解决任何一种习题都必须经历的一个重要环节。审题的主要方法是认真阅读题目，仔细思考。当我们接触到一道较难的题目时，可能茫无头绪，难以下手，但一经冷静的思考，把题目所提出的问题和以前学过的有关知识联系起来，通过阅读、思考、再阅读、再思考，就会“云开日现”，各种解

题的方法也就会接踵而来。有时为了使题意能更加明显清晰，还可以把题目图解，或利用有关实物，作些简单的实验。总之，应想方设法更好地理解题意，掌握题目的全部内容。

二、作出解题计划 同一道题目，可能有各种各样的解题方法；从推理过程来说，有综合法、分析法或综合分析法；从所用的数学工具来说，有算术法、代数法……。不同的解题方法，其思考途径也就随着不同。要根据题目的具体条件，灵活掌握解题方法，选择最简捷的一种，以最少的精力求得准确的结果。之后，详细考虑各方面的联系，定出解题的具体步骤。

三、解题与验算 根据选定的解题方法，写出本题的具体算式。大部分化学计算题都是从列出参加化学变化的所有反应物及生成物的分子式以及反映这种变化的化学方程式开始；然后根据分子式或化学方程式列出算术比例式或代数方程式，逐步进行运算，求得结果。在运算过程中，有时还把各个公式化成一个总公式或关系式，代入数值进行计算。这样可能会简化一些计算步骤，这个办法当然不是任何情况下都适用。

在计算中，往往因为粗枝大叶、单位不统一、次序颠倒等原因导致错误。所以在初步得出计算结果之后，尽量检查演算过程中的每一个环节，或通过验算，验证答案是否正确。这一环节不容忽视。

四、讨论、分析 在已经灵活掌握多种解题方法的基础上，应该进一步学会对整个解题过程进行讨论、分析，以发挥创造性和提高独立工作能力。这项工作可以从多方面着手：判断答案是否合理，有无脱离实际；研究是否还有更加

简捷的解法；分析本题所得结果是否具有更加普遍的意义；能否进一步总结出更为普遍适用的方法或原则？如有余力，尚可以仿照习题拟出与实际生活有关的类似题目。

应该强调的是：化学计算题一般都是实践的产物，不是虚构的“空中楼阁”，但它也只能是从实践中抽象出来的，不可能都完全符合实际情况，因为有很多实际过程已经被大大地简化了。所以绝不能认为能够算好化学计算题，就已经完全掌握了解决实际化学问题的能力。做好化学计算题，只是化学理论知识联系实践的初步训练，更重要的还是把这些知识真正地应用于实践，在实践中受到考验、提高。

目 录

第一章 分子式	1
第一节 原子量 分子量	2
第二节 根据分子式求物质的组成	4
第三节 根据物质的组成求其分子式	8
第四节 化合价的求法与运用	11
习题一	15
第二章 摩尔及有关气体的计算	17
第一节 摩尔	17
第二节 气体的摩尔体积	19
第三节 理想气体定律	22
第四节 气体密度与气态物质的分子量	25
第五节 气体分子式的求法	28
习题二	30
第三章 化学方程式的配平	33
习题三	43
第四章 化学方程式的应用	44
第一节 质量求法	45
第二节 体积求法	50
第三节 反应物用量的剩余与不足	55
第四节 有关杂质及产率、利用率的计算	58
第五节 综合题	61
习题四	65
第五章 溶液	69
第一节 溶解度	69

第二节	质量百分比浓度	75
第三节	比例浓度与ppm浓度	84
第四节	摩尔浓度	86
习题五		89
第五节	当量与当量浓度	92
习题六		99
第六章	反应热及化学基础理论	101
第一节	热化学方程式和盖斯定律	101
第二节	原子结构和元素周期律	106
第三节	化学反应速度和化学平衡	108
第四节	电解质溶液	112
习题七		119
第七章	无机化学	113
第一节	卤族	123
习题八		124
第二节	氧族(硫、硫酸)	125
习题九		127
第三节	氮族	128
习题十		131
第四节	碳族	132
习题十一		134
第五节	碱金属	135
习题十二		137
第六节	碱土金属	138
习题十三		139
第七节	硼族	140
习题十四		143
第八节	钢铁	144
习题十五		147

第九节 过渡金属	148
习题十六	152
第八章 有机化学	154
第一节 烃	154
习题十七	157
第二节 烃的衍生物	158
习题十八	162
第三节 糖类 蛋白质	164
习题十九	165
第四节 高分子化合物	165
习题二十	166
第五节 土壤	167
总习题	169
习题答案	179
附录	185
I 计量单位换算表	185
II 国际原子量表	186
III 常见元素的常见化合价表	191
IV 常见原子团表	191
V 几种常见物质的溶解度表	192
VI 在18℃时一些碱溶液的密度	193
VII 在18℃时一些酸溶液的密度	194

第一章 分子式

分子式是用元素符号来表示物质分子组成的式子。它在化学理论和实践上具有十分丰富而重要的内容，在化学计算中经常使用到它。从物质的普通名称如水、硫酸、烧碱中，我们看不出什么，但从它们的分子式如 H_2O 、 H_2SO_4 、 NaOH 中，我们就可以看出它所表示的具体内容有：

1. 某一特定物质；
2. 物质中组成元素的种类及数目，即物质的成分；
3. 物质的一个分子、分子量等；
4. 组成物质的各元素的质量比。

表示事项 \ 分子式	H_2O	H_2SO_4	NaOH
表示物质的名称	水	硫酸	氢氧化钠
表示物质中组成元素的种类	H, O	H, S, O	Na, O, H
表示物质中组成元素的数目	二个氢原子 一个氧原子	二个氢原子 一个硫原子 四个氧原子	一个钠原子 一个氧原子 一个氢原子
表示物质的分子量	18	98	40
表示组成物质的各元素的质量比	$2\text{H}:\text{O} = 1:8$	$2\text{H}:\text{S}:4\text{O} = 1:16:32$	$\text{Na}:\text{O}:\text{H} = 23:16:1$

由此可见，分子式在化学计算中占有重要的地位，只有正确书写出物质的分子式，才能导出正确的答案。

第一节 原子量 分子量

1977年国际上规定：“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。”由这个定义可知原子量是原子的相对质量，是以 ^{12}C 的质量 $1/12$ 作为标准，其它元素的原子和它比较，得到的相对质量。原子量只是一个比值，没有单位。

单质的分子由相同的原子组成，化合物的分子由两种或两种以上不同的原子组成。所以计算物质的分子量，只要将一个分子中全部原子的原子量相加即得。

有效数字与近似计算

在计算时尽可能注意到数字的准确性。本书题目中给出的数据，有些是根据物理或化学方法测量得出的，有的摘录自文献资料，有的只是些假设。按准确数保留计算结果里所有数字，对初学者似无此必要。我们可运用近似数表示一个量的准确值，允许有一个不太大的误差。如氢的原子量为 1.0079，它最后一位数字准确至 ± 1 ，即它的准确值在于 1.0078 和 1.008 之间。锂的原子量为 6.941，最后一位准确至 ± 3 。最后一位数字是估计出来的，不是完全可靠的数字，但仍有意义。这种带一位不完全可靠数字的近似数叫有效数字。氢原子量的有效数位是五位，其它原子原子量有效数字有四位的，有的多达七位。一般采用四位有效数字（第五位按四舍五入办法略去），如氢 1.008，碳 12.01，氧 16.00。在精确度要求不高的计算中，可采用简化了的原子量即：氢 1，碳 12，氧 16。为了计算上的准确，在计算中要遵守有效

数字的规则:

一、不完全可靠数字部分与别的数字相加减或相乘除, 所得的结果也是不可靠的。

二、计算过程可以保留两位不完全可靠数字, 最后用四舍五入去其一, 只留一个数位的不完全可靠数字。

【例题 1】 1965年9月, 我国科学家合成了牛胰岛素。1971年测出了它的晶体结构, 测出分子式为 $C_{254}H_{377}N_{65}O_{75}S_6$ 。试问这种胰岛素分子的分子量是多少?

解 原子量采取四位有效数字, $C_{254}H_{377}N_{65}O_{75}S_6$ 的分子量为:

254C	$254 \times 12.01 = 3050.54$
377H	$377 \times 1.008 = 380.016$
65N	$65 \times 14.01 = 910.65$
75O	$75 \times 16.00 = 1200.00$
6S	$6 \times 32.06 = 192.36$
<hr/>	
$C_{254}H_{377}N_{65}O_{75}S_6$	$= 5733.566$
	$= 5733.57$

小数点后第二位数字是近似值, 已不完全可靠, 没有必要保留小数点后的第三位。

答: 牛胰岛素的分子量为5733.57。

【例题 2】 1799年, 科学家戴维吸入氧化氮气体, 不断发笑, 又发现吸入后减轻了牙痛, 由此而产生了新的麻醉学科。经测定“笑气”的分子量为44.02, 求它的分子式。

解 氧的原子量为16.00, 氮的原子量为14.01, “笑气”的分子量为44.02, 减去1个N和1个O的原子量后, 尚余:

$$44.02 - (16 + 14.01) = 14.01$$

剩余数刚好是一个氮的原子量，可知这种气体中有两个氮原子和一个氧原子。

答：笑气的分子式为 N_2O 。

第二节 根据分子式求物质的组成

分子式既然能够反映物质的量的组成，那么，根据分子式自然可以看出组成物质中各有关元素间的量的关系。比如组成水(H_2O)的有关元素氢与氧的质量比为1:8；显而易见，水的质量中氢占 $\frac{1}{9}$ ，氧占 $\frac{8}{9}$ 。一般均按照质量来计算物质的百分组成。

初学求物质百分组成的计算时，应作如下的思考：

第一步 代表该物质的分子式是什么？正确写出该物质的分子式。

第二步 根据分子式找出分子量及有关元素的总原子量。

第三步 计算有关元素的总原子量与分子量的比（即组成物质的有关元素的质量在物质的总质量中所占的比例）。

第四步 找出百分组成。

第五步 检查所得答案是否正确（有关各元素的百分数总和必须为100%）。

此外，也可以根据分子式来计算化合物中所含的某一组成元素的质量。

• 化合物里元素的百分组成：

$$\frac{\text{化合物里该元素的质量（原子数} \times \text{原子量）}}{\text{化合物的分子量}}$$

【例题 3】 各国采用水合二氧化钛 $\text{TiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (钛酸) 从海水中取铀, 得到一定的成功, 前景至为诱人。在有关计算中, 必须知道这种提取剂中各元素的百分组成, 请计算!

解 根据解题的思考过程, 逐步导出有关数字。

第一步 写出分子式: $\text{TiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 。

第二步 找出分子量 (有效数字四位):

$$\text{Ti} = 1 \times 47.88 = 47.88$$

$$2\text{H} = 2 \times 1.008 = 2.016$$

$$3\text{O} = 3 \times 16.00 = 48.00$$

$$\text{TiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O} \text{ 分子量} = 97.896$$

$$= 97.90$$

第三步 求各组成元素的总原子量与水合二氧化钛分子量的比:

$$\text{Ti} \quad \frac{\text{钛的总原子量}}{\text{TiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O} \text{ 的分子量}} = \frac{47.88}{97.90} = 0.4892$$

$$2\text{H} \quad \frac{\text{氢的总原子量}}{\text{TiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O} \text{ 的分子量}} = \frac{2 \times 1.008}{97.90} = 0.0206$$

$$3\text{O} \quad \frac{\text{氧的总原子量}}{\text{TiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O} \text{ 的分子量}} = \frac{3 \times 16.00}{97.90} = 0.4902$$

第四步 找出百分组成:

$$\text{Ti} \text{ 占 } 0.4892 \quad \text{即 } 48.92\%$$

$$2\text{H} \text{ 占 } 0.0206 \quad \text{即 } 2.06\%$$

$$3\text{O} \text{ 占 } 0.4902 \quad \text{即 } 49.02\%$$

第五步 验算答案是否正确:

$$\text{Ti} \quad 48.92\%$$

$$2\text{H} \quad 2.06\%$$

$$\begin{array}{r} 3\text{O} \qquad \qquad 49.02\% \\ \hline \text{TiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O} \quad 100.00\% \end{array}$$

答：水合二氧化钛中钛占 48.92%，氢占 2.06%，氧占 49.02%。

【讨论】 本题解法可以简化成：

$$\text{Ti} = 1 \times 47.88 = 47.88$$

$$\frac{47.88}{97.90} = 0.4892 = 48.92\%$$

$$2\text{H} = 2 \times 1.008 = 2.016$$

$$\frac{2.016}{97.90} = 0.0206 = 2.06\%$$

$$3\text{O} = 3 \times 16.00 = 48.00$$

$$\frac{48.00}{97.90} = 0.4902 = 49.02\%$$

【例题 4】 火箭、导弹及宇宙飞船上用到氮化硅 (Si_3N_4)，是耐高温、抗热震、低成本的新型材料。求 50.00 克这种材料中含有多少重的氮和硅？

解 本题精确度要求较高，使用有效数字不应低于四位

Si_3N_4 的分子量为 140.31，其中含：

$$\text{Si} \quad \frac{3 \times 28.09}{140.31} \times 100\% = 60.06\%$$

$$\text{N} \quad \frac{4 \times 14.01}{140.31} \times 100\% = 39.94\%$$

即 100.00 克氮化硅中含有 60.06 克硅和 39.94 克氮。

50.00 克氮化硅中含氮及硅量应按上各减半（或乘以 $\frac{1}{2}$ ）。

也可以一次列成下式计算：

$$\text{Si} \quad \frac{3 \times 28.09}{140.31} \times 100\% \times 50.00 = 30.03(\text{克})$$

$$\text{N} \quad \frac{4 \times 14.01}{140.31} \times 100\% \times 50.00 = 19.97(\text{克})$$

答：50.00克氮化硅中硅重30.03克，氮重19.97克。

【例题 5】 磁性录音带中使用到二氧化铬。今有一块带有杂质的二氧化铬，拟加以提纯利用，将此材料0.42克作定量分析，知道其中含铬0.21克。问此材料的纯度如何？

解法 1 第一步 由物质样品中求纯度。实质上就是求一定量的样品中该物质的质量百分组成。即：

$$\text{物质的纯度} = \frac{\text{样品中所含该物质的质量}}{\text{样品的质量}} \times 100\%$$

$$\text{第二步 已知} \quad \frac{\text{Cr 原子量}}{\text{CrO}_2 \text{ 分子量}} = \frac{52}{84}$$

在0.42克纯 CrO_2 中含Cr为：

$$\frac{52}{84} \times 0.42 = 0.26(\text{克})$$

第三步 0.42克纯 CrO_2 中含Cr 0.26克，可是该样品实际只含Cr 0.21克。该样品纯度为：

$$\frac{0.21}{0.26} \times 100\% = 81\%$$

解法 2 欲知0.42克 CrO_2 样品的纯度，必须知道该样品中纯 CrO_2 的含量。

$$\text{已知} \quad \frac{\text{Cr 原子量}}{\text{CrO}_2 \text{ 分子量}} = \frac{52}{84}$$

设 x 克的 CrO_2 中含Cr 0.21克，列关系式如下：

$$\frac{52}{84} = \frac{0.21}{x}$$