

BÖLÜM 2

KISIM 1

Kimyasal Hesaplamalar

BÖLÜM 2

KİMYASAL HESAPLAMALAR

(Mol Kavramı, atom kütlesi, mol kütlesi, en basit formül bulma, reaksiyon denklemleri, reaksiyon stokiyometrisi)

MOL

(Bir kimyasal türün miktarını ifade eden bir temel SI birimidir.)

Her zaman kimyasal formülle birlikte kullanılır.

MOL: 1 mol, tam 12,0000 g $^{12}_6\text{C}$ izotopunda bulunan, atom sayısı kadar molekül, atom veya iyon içeren madde miktarı olarak tanımlanır.

Avagadro sayısı ($6,02 \cdot 10^{23}$) kadar atom yada molekül içeren maddeye 1 mol denir.

^{12}C de Avagadro Sayısı ($6,022 \times 10^{23}$) kadar atom vardır.

MOL

Bir kimyasal türün 1 mol'ü, $6,022 \times 10^{23}$ atom, molekül, iyon veya iyon çiftidir.

Bir maddenin mol kütlesi (M), bu maddenin 1 mol'ünün gram olarak kütlesidir.

1 mol Ca atomu $6,022 \times 10^{23}$ Ca atomu ihtiva eder
1 mol Ca^{+2} iyonu $6,022 \times 10^{23}$ Ca^{+2} iyonu ihtiva eder
1 mol H_2O molekülü $6,022 \times 10^{23}$ H_2O molekülü ihtiva eder

MOL KÜTLESİ

Bir türün 1 mol'ünün veya $6,022 \times 10^{23}$ tane taneciğın gram olarak kütlesidir.

MİLİMOL

Mol'ün 1/1000'idir.

ATOMİK KÜTLE BİRİMİ (akb)-(u)

Herhangi bir elementin bir tek atomu o kadar küçüktür ki hiçbir şekilde tartılamaz. Bu nedenle bağıl atom kütleleri kullanılır.

1 akb → nötral tek bir ^{12}C atomunun kütlelerinin $1/12$ sidir.
(^{12}C izotopunun kütlesi 12 akb kabul edilmiştir).

SI birim sisteminde u (unit) ile gösterilir.

1 mol oksijen 16 g

CCl_4 molekül kütlesi = $12\text{u} + 4 \times 35,5\text{u} = 154\text{u}$

CCl_4 mol kütlesi = 154 g

Formaldehit mol kütlesi şöyle hesaplanır CH_2O

$$M_{\text{CH}_2\text{O}} = \frac{1\text{molC}}{\text{mol}_{\text{CH}_2\text{O}}} \times \frac{12,0\text{g}}{\text{molC}} + \frac{2\text{molH}}{\text{mol}_{\text{CH}_2\text{O}}} \times \frac{1,0\text{g}}{\text{molH}} + \frac{1\text{molO}}{\text{mol}_{\text{CH}_2\text{O}}} \times \frac{16,0\text{g}}{\text{molO}}$$

$$M_{\text{CH}_2\text{O}} = 30,0\text{g/molCH}_2\text{O}$$

Glikozun mol kütlesi şöyle hesaplanır $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$

$$M_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6} = \frac{6\text{molC}}{\text{mol}_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}} \times \frac{12,0\text{g}}{\text{molC}} + \frac{12\text{molH}}{\text{mol}_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}} \times \frac{1,0\text{g}}{\text{molH}} + \frac{6\text{molO}}{\text{mol}_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}} \times \frac{16,0\text{g}}{\text{molO}}$$

$$M_{\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6} = 180,0\text{g/molC}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$$

BİR MADDENİN MOL SAYISININ BULUNMASI

Kütle-mol ilişkisi

ÖRNEK

Saf benzoik asitin (122,1 g/mol) 2,00 gramının kaç mol olduğunu hesaplayınız.

$$\text{BA'in miktarı (mol)} = 2,00\text{gBA} \cdot \frac{1\text{molBA}}{122,1\text{gBA}} = 0,0164\text{molBA}$$

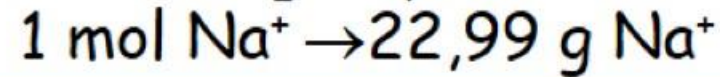
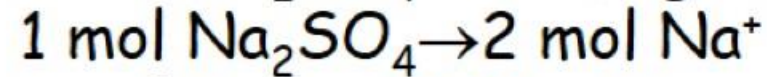
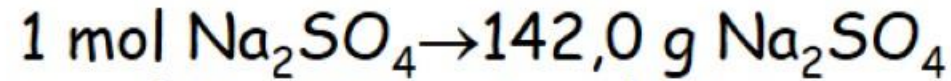
Veya

$$\begin{array}{r} 122,1 \text{ g BA} \\ 2 \text{ g BA} \end{array} \qquad \begin{array}{r} 1 \text{ mol} \\ X \end{array}$$

$$X = 0,0164 \text{ mol BA}$$

ÖRNEK

25,0 g Na_2SO_4 (142,0 g/mol) içerisinde kaç gram Na^+ (22,99 g/mol) bulunur?



$$\text{Na}^+ \text{ kütlesi} = 25 \text{ g Na}_2\text{SO}_4 \times \frac{1 \text{ mol Na}_2\text{SO}_4}{142,0 \text{ g Na}_2\text{SO}_4} \times \frac{2 \text{ mol Na}^+}{1 \text{ mol Na}_2\text{SO}_4} \times \frac{22,99 \text{ g Na}^+}{1 \text{ mol Na}^+}$$

$$\text{Na}^+ \text{ kütlesi} = 8,1 \text{ g}$$

Veya

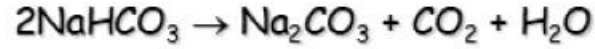
$$\begin{array}{l} 142,0 \text{ g Na}_2\text{SO}_4 \\ 25 \text{ g Na}_2\text{SO}_4 \end{array}$$

$$\begin{array}{l} 2 \times 22,99 \text{ g Na} \\ X \end{array}$$

$$X = 8,1 \text{ g Na}^+ \text{ vardır}$$

Örnek

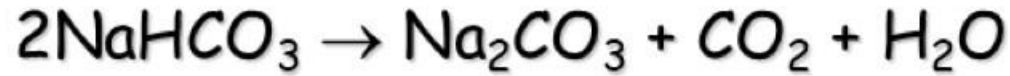
Kütlece % 40 saflıkta 42.0 g NaHCO_3 katısı ısıtılarak;



şeklinde parçalanması sonucu açığa çıkan CO_2 kaç mol dür?

Na:23; O: 16; C:12; H:1 g/mol

Çözüm



$$\begin{array}{r} 100\text{g} \quad 40 \\ 42\text{g} \quad X \\ \hline X=16.8\text{g saf } \text{NaHCO}_3 \text{ bulunur.} \end{array}$$

$$\begin{array}{r} 1 \text{ mol NaHCO}_3 \quad 84\text{g} \\ X \quad 16.8\text{g} \\ \hline X = 0.2 \text{ mol} \end{array}$$

$$\begin{array}{r} 2 \text{ mol } \text{NaHCO}_3 \quad 1 \text{ mol } \text{CO}_2 \\ 0.2 \text{ mol } \text{NaHCO}_3 \quad X \\ \hline X= 0.1 \text{ mol } \text{CO}_2 \text{ oluşur.} \end{array}$$

KİMYASAL FORMÜLLERİN BULUNMASI

Bileşiklerin kimyasal formülleri;

- 1) Element bileşimi,
- 2) Oluştuğu elementlerin bağıl atom sayıları,
- 3) Oluştuğu elementlerin gerçek atom sayıları,
- 4) Yapıları hakkında bilgi verir.

1-2 → bilgileri veren formüllere **en basit** formül

1-2-3 → bilgileri veren formüllere **molekül** formül

4 → bilgisini de veren formüle **yapı** formülü denir."

AMPIRİK FORMÜL (En basit formül)

Bir kimyasal bileşikteki atomların en basit tam sayılı oranlarını gösterir.

Ampirik formül= CH_2O

MOLEKÜL FORMÜLÜ

Böyle bir formülde, bir molekülde bulunan atomların gerçek sayıları verilir.

Bulunması için, türün mol kütlelerinin de bilinmesi gerekir.

Formaldehit(CH_2O), Asetik asit($\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$),

Gliseraldehit($\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$), Glikoz($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$)

Ampirik formül= CH_2O

YAPISAL FORMÜL

Molekül hakkında daha fazla bilgi veren bir formüldür.

Etanol($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$), Dimetileter(CH_3OCH_3)

Molekül formülü= Ampirik formül= $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$

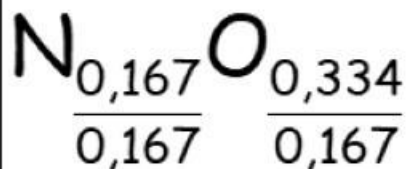
Örnek: Bir gazın 2,34 g N ve 5,34 g O içerdiği bulunmuştur. Bileşiğin en basit formülü nedir? Molekül kütlesi 92 g/mol ise molekül formülü nedir?

$$1 \text{ mol N} \rightarrow 14,0 \text{ g N}$$

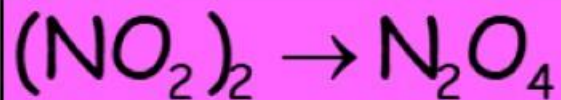
$$1 \text{ mol O} \rightarrow 16,0 \text{ g O}$$

$$(? \text{ mol N}) = (2,34 \text{ g N}) \cdot \left(\frac{1 \text{ mol N}}{14,0 \text{ g N}} \right) = 0,167 \text{ mol N}$$

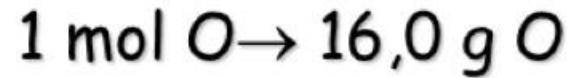
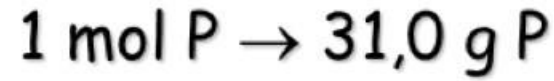
$$(? \text{ mol O}) = (5,34 \text{ g O}) \cdot \left(\frac{1 \text{ mol O}}{16,0 \text{ g O}} \right) = 0,334 \text{ mol O}$$



$$\text{NO}_2 \rightarrow 14 + (16 \times 2) = 46 \text{ g}$$
$$92/46 = 2$$



Örnek: % 43,7 P ve % 56,3 O içeren fosfor oksidin en basit formülü nedir? Molekül kütlesi 284 u ise molekül formülü nedir?



Çözüm

$\left(\frac{1 \text{ mol P}}{31 \text{ g}} \right) \times 43,7 \text{ g P} = 1,41 \text{ mol P}$	$\left(\frac{1 \text{ mol O}}{16 \text{ g}} \right) \times 56,3 \text{ g O} = 3,52 \text{ mol O}$
--	--

En basit formül $P_{1,41/1,41} O_{3,52/1,41} = PO_{2,5}$

Mol miktarlarının tamsayı olması istendiğinden en basit formül P_2O_5 dir.

Molekül formülü $284/142 = 2$
Molekül formülü P_4O_{10}

Örnek:

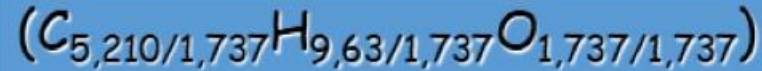
Dibütil süksinat ev karıncaları ve hamam böceklerine karşı kullanılan bir böcek kovucudur. Bileşimi %62,58 C, %9,63 H ve %27,79 O dir. Deneysel olarak bulunan molekül kütlesi 230 akb dir. Bu bileşiğine en basit ve molekül formülünü hesaplayınız.

Çözüm

$$n_C: 62,58/12= 5,210 \text{ mol}$$

$$n_H: 9,63/1= 9,63 \text{ mol}$$

$$n_O: 27,79/16= 1,737 \text{ mol}$$



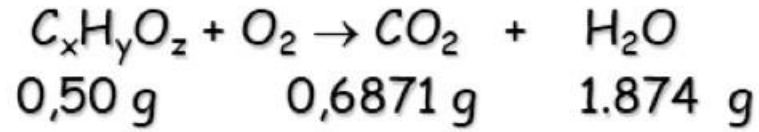
$$C_6H_{11}O_2= 12 \times 6 + 1 \times 11 + 16 \times 2 = 115$$

$$230/115 = 2 \text{ (} C_{12}H_{22}O_4 \text{) (Molekül For.)}$$

Örnek:

0,50 g'lık bir sitrik asit örneği yakma analizi sonucu 0,6871 g CO_2 ve 0,1874 g H_2O veriyor. Bileşiğin sadece C, H ve O içerdiği bilindiğine göre en basit formülü ve mol kütlesi 192 ise molekül formülü nedir.

Çözüm



$$\begin{array}{r} 44 \text{ g } CO_2 \text{ de } 12 \text{ g C} \\ 0,6871 \text{ } CO_2 \text{ de } x \text{ g C} \\ \hline x = 0,1874 \text{ g C} \end{array}$$

$$\begin{array}{r} 18,0 \text{ } H_2O \text{ de } 2 \text{ g H} \\ 0,1874 \text{ } H_2O \text{ de } x \text{ g H} \\ \hline x = 0,0208 \text{ g H} \end{array}$$

$$0,50 - (0,1874 \text{ g C} + 0,0208 \text{ g H}) = 0,2918 \text{ g O}$$

$$n_C: 0,1874/12 = 0,0156 \text{ mol}$$

$$n_H: 0,0208/1 = 0,0208 \text{ mol}$$

$$n_O: 0,2918/16 = 0,0182 \text{ mol}$$



$CH_{1,33}O_{1,16}$ (sabit sayı çıkması için 6 ile çarpılır.)



$$C_6H_8O_7 = 12 \times 6 + 1 \times 8 + 16 \times 7 = 192$$

Molekül kütlesi 192 olduğu için en basit formülü aynı zamanda molekül

REAKSİYONLAR, REAKSİYON DENKLEMLERİ

İçinde elektron bakımından değişme olan reaksiyonlara
Redoks Reaksiyonları
(Yükseltgenme-İndirgenme reaksiyonları) denir.

Yükseltgenme-İndirgenme için kısaca elektron alışverişi denir.

Yükseltgenme, bir atomun yükseltgenme sayısının (basamağının) artması (e^- kaybetmesi);

İndirgenme, bir atomun yükseltgenme sayısının (basamağının) azalması (e^- alması) olarak tanımlanır.

Yükseltgenme basamağı: Bir atomun sahip olmuş görüldüğü yüke denir.

Yükseltgenme e^- kaybetme

İndirgenme e^- alma

Yükseltgenme Sayısının Bulunması İçin Kurallar

1) Bir atomun bir elementte yükseltgenme sayısı sıfırdır.



2) Basit bir iyonun yükseltgenme sayısı, iyonun yüküne eşittir.



Bir kompleks iyonunun yükü atomlarının yükseltgenme sayıları toplamına eşittir.



3) Nötral bir bileşikte, atomların yükseltgenme sayıları toplamı sıfırdır.



4) Flor'un (F) bütün bileşiklerinde yükseltgenme sayıları -1 dir.



5) Hidrojen'in yükseltgenme sayısı metal hidrürlerinde -1 dir.



Bunun haricindeki diğer bileşiklerinde +1 dir.



6) Oksijen'in üç ayrıcalıklı durum dışında yükseltgenme sayısı -2 dir.



Bunun haricinde



7) IA grubu elementlerinin yükseltgenme sayıları +1 dir.



IIA grubu elementlerinin yükseltgenme sayıları +2 dir.



8) VIIA grubu elementlerinin metal halojenürlerinde yükseltgenme sayıları

-1 dir.

F, Cl, Br, I, At Y.S \rightarrow -1

NaI, FeBr, CrCl₃

Halojenürlerin diğer bileşiklerinde yükseltgenme sayısı değişir.

KClO Cl Y.S \rightarrow +1

KClO₂ Cl Y.S \rightarrow +3

KClO₃ Cl Y.S \rightarrow +5

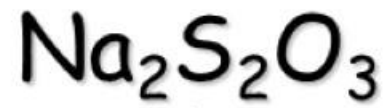
KClO₄ Cl Y.S \rightarrow +7

Örnek:

KNO₃

	+1	+5	-2
	↙	↓	↘
K		Y.S \rightarrow +1	
N		Y.S \rightarrow +5	
O		Y.S \rightarrow -2	

Örnek:



+1

+2

-2

Örnek:



+2

+5

-2