



TARTU ÜLIKOOL
teaduskool

MOLAARARVUTUSED REAKTSIOONIVÖRRANDITE JÄRGI

Õppematerjal

Katrin Kestav, Rein Pullerits

TARTU 2016

MOLAARARVUTUSED REAKTSIOONIVÖRRANDITE JÄRGI

1. Aine hulga arvutamise põhivalemid

Keemilise reaktsiooni võrrand näitab, mis on reaktsiooni lähteaine(d), mis produktid reaktsiooni käigus tekivad ning mis vahekorras nad omavahel reageerivad. Reaktsioonivõrrandi põhjal on võimalik arvutada reaktsioonist osavõtvate ainete ja saaduste hulka, massi ja ruumala.

Aine hulk (tähis: n) väljendab konkreetse aine osakeste arvu antud süsteemis. Aine hulga ühikuks on üks mool (1 mol), mis sisaldab Avogadro arv (tähis: N_A) aineosakesi ehk $6,02 \cdot 10^{23}$ aine osakest. Avogadro arv on nimetatud itaalia teadlase Amedeo Avogadro järgi, kes 19. sajandi alguses postuleeris Avogadro seaduse: erinevate gaaside samas ruumalaühikus on sama arv algosakesi (vt ideaalgaasi võrrandit). Siiski tegi Avogadro arvu arvulise väärtuse kindlaks 19. sajandi lõpu poole austria füüsik ja keemik Josef Loschmidt, kes kasutas selleks gaaside kineetilist teooriat.

Järgnevalt vaatleme aine hulga arvutamise kolme põhivalemit.

1. Aine hulk n ja osakeste hulk N on seotud järgmise valemiga (N_A on Avogadro arv):

$$n(\text{aine}) = \frac{N(\text{aine})}{N_A(\text{aine})}$$

Eelnevast põhivalemist saab tuletada järgmised seosed:

$$N_A(\text{aine}) = \frac{N(\text{aine})}{n(\text{aine})} \rightarrow N(\text{aine}) = n(\text{aine}) \cdot N_A(\text{aine})$$

2. Aine hulk ja mass on aga seotud järgmise valemiga (M on vaadeldava osakese molaarmass):

$$n(\text{aine}) = \frac{m(\text{aine})}{M(\text{aine})}$$

Eelnevast põhivalemist saab tuletada järgmised seosed:

$$M(\text{aine}) = \frac{m(\text{aine})}{n(\text{aine})} \rightarrow m(\text{aine}) = n(\text{aine}) \cdot M(\text{aine})$$

3. **Gaasilise** aine hulk ja ruumala on seotud järgmise valemiga (V_m on molaarruumala, mille väärtus normaaltingimustel, st 0 °C, 1 atm, on 22,4 dm³/mol):

$$n(\text{aine}) = \frac{V(\text{aine})}{V_m(\text{aine})}$$

Eelnevast põhivalemist saab tuletada järgmised seosed:

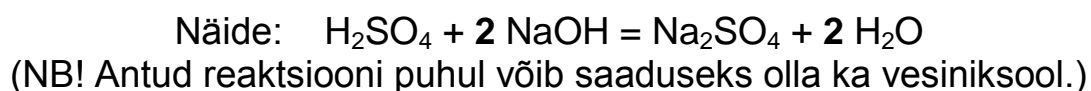
$$V_m(\text{aine}) = \frac{V(\text{aine})}{n(\text{aine})} \rightarrow V(\text{aine}) = n(\text{aine}) \cdot V_m(\text{aine})$$

NB! Neid seoseid saab kasutada ainult gaasiliste ainete korral!

2. Reaktsioonivõrrandite tasakaalustamine

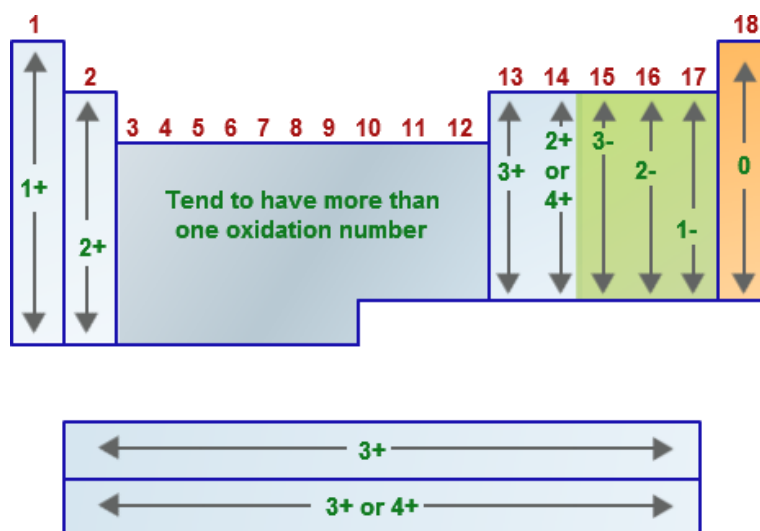
Esimeseks etapiks, et reaktsioonivõrrandi põhjal saaks hakata arvutama reageerivate aine(te) või saadus(t)e hulka, massi või ruumala, peab kirjutatud reaktsioonivõrrandi tasakaalustama ehk leidma reaktsioonivõrrandi koefitsiendid, mis näitavad reageerivate ainete moolvahekordi.

Lihtsamaid reaktsioonivõrrandeid väikeste koefitsientidega on võimalik tasakaalustada lihtsalt, lugedes kokku võrrandis mõlemal pool olevad aatomid.



Kuid kui koefitsiendid lähevad juba suuremaks, muutub antud tegevus liialt aeganõudvaks ning tuleb kasutada elektronbilansi meetodit. Siinkohal tuletaksime meelde mõned olulised mõisted:

- **Oksüdatsiooniaste** on formaalne suurus, mis näitab elemendi laengut ühendis eeldusel, et ühend koosneb üheaatomilistest ionidest. Elementide omased oksüdatsiooniastmed ühendites on toodud Joonis 1. Lihtainete oksüdatsiooniaste on 0!



Joonis 1. Perioodilisustabel koos elementidele tüüpiliste oksüdatsiooniastmetega ühendites.

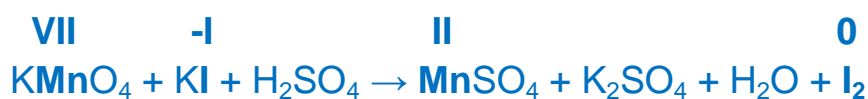
- **Redoksreaktsioon** on keemiline reaktsioon, mille käigus muutuvad elektronide ülekandmise käigus elementide oksüdatsiooniastmed. Oksüdatsiooniaste muutub, kui vähemalt üks aatom või ioon loovutab ja teine liidab elektrone, st toimub oksüdeerumine või redutseerumine.
- **Oksüdeerumine** on elektronide loovutamine, mille käigus elemendi oksüdatsiooniaste suureneb.
- **Redutseerumine** on elektronide liitmine, mille käigus elemendi oksüdatsiooniaste väheneb.
- **Oksüdeerija** liidab elektrone ning tema oksüdatsiooniaste väheneb.
- **Redutseerija** loovutab elektrone ning tema oksüdatsiooniaste suureneb.

Elektronbilansi meetodil tasakaalustamise võib jagada viieks etapiks:

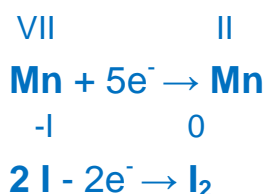
- 1) elementide oksüdatsiooniastmete määramine;
- 2) elektronide üleminekute poolvõrrandite kirjutamine elementide kohta, mille oksüdatsiooniaste muutub;
- 3) leida liidetavatele ja loovutatavatele elektronidele ühine kordaja ehk loovutatavate ning liidetavate elektronide arv peab olema sama;
- 4) koefitsientide kirjutamine võrrandisse ning ülejäänud võrrandi tasakaalustamine;
- 5) viimase etapina ei tohi mingil juhul ära unustada kontrollida, kas mõlemal pool võrrandit on sama arv kõiki elemente!

Näide 1:

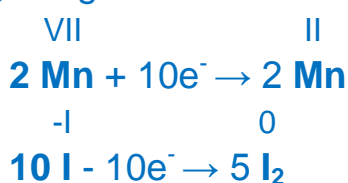
1) oksüdatsiooniastmete määramine:



2) elektronide üleminekute poolvõrrandid:



3) ühise kordaja leidmine (väikseim arv, mis jagub nii viie kui kahega on 10, seega esimese võrrandi peab korrutama 2-ga ja teise 5-ga):



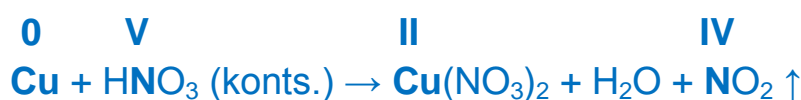
4) koefitsientide lisamine võrrandisse ja ülejäänud võrrandi tasakaalustamine:



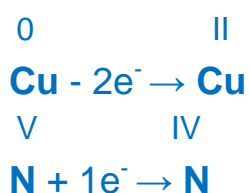
5) kontrollime, kas mõlemal pool võrrandit on sama arv kõiki elemente!

Näide 2:

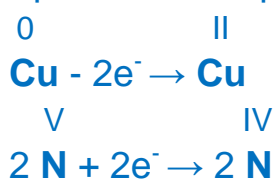
1) oksüdatsiooniastmete määramine:



2) elektronide üleminekute poolvõrrandid:



3) ühise kordaja leidmine (liidetakse ja loovutatakse 2 elektroni, seega teist poolvõrrandit peab korrutama 2-ga):



4) koefitsientide lisamine võrrandisse ja ülejäänud võrrandi tasakaalustamine (lämmastiku ette läheb 2):



5) kontrollime, kas mõlemal pool võrrandit on sama arv kõiki elemente!

3. Arvutused reaktsioonivõrrandite järgi

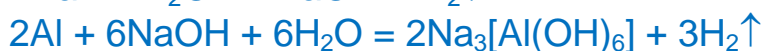
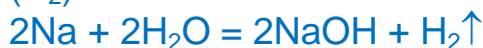
Seejärel peab teostama ainete moolsuhete analüüsi ning välja avaldama otsitava väärtuse. Kui on teada vähemalt ühe reaktsioonivõrrandis esineva aine hulk, on selle põhjal võimalik arvutada kõikide teiste, sh ka reageerivate ainete või saaduste hulka. Järgnevalt vaatleme erinevaid ülesande tüüpe:

3.1. Lähteainete koguste leidmine ühise saadusaine koguse järgi

Saadusaine kogus on esimesest ja teisest lähteainest moodustunud saadusaine koguste summa.

Näide 3.

Mitu mooli naatriumi ja alumiiniumi on nende metallide 10 moolis sulamis, kui selle sulami reageerimisel leelise vesilahusega eraldus 12 mooli vesinikku (H_2)?



Vastavused:

$$\text{I } 2\text{Na} \Leftrightarrow \text{H}_2 \quad n(\text{H}_2) = \frac{1}{2} \cdot n(\text{Na})$$

$$\text{II } 2\text{Al} \Leftrightarrow 3\text{H}_2 \quad n(\text{H}_2) = \frac{3}{2} \cdot n(\text{Al})$$

$$\text{I } n(\text{H}_2) + \text{II } n(\text{H}_2) = 12 \text{ mol}$$

$$\frac{1}{2} \cdot n(\text{Na}) + \frac{3}{2} \cdot n(\text{Al}) = 12 \text{ mol}$$

$$n(\text{Al}) = 10 \text{ mol} - n(\text{Na})$$

$$\frac{1}{2} \cdot n(\text{Na}) + \frac{3}{2} [10 \text{ mol} - n(\text{Na})] = 12 \text{ mol}$$

$$\frac{1}{2} n(\text{Na}) - \frac{3}{2} n(\text{Na}) = 12 \text{ mol} - 15 \text{ mol}$$

$$n(\text{Na}) = 3 \text{ mol}$$

$$n(\text{Al}) = 7 \text{ mol}$$

Näide 4.

Leida ortofosforhappe minimaalne ja maksimaalne hulk, mis kulub 12 mooli NaOH ja Ca(OH)₂ segu neutraliseerimiseks.



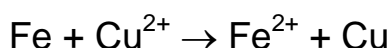
Minimaalne hulk hapet kulub, kui NaOH suhteline sisaldus segus läheneb 100%. Maksimaalne hulk hapet kulub, kui Ca(OH)₂ suhteline sisaldus segus läheneb 100%.

$$n_{\min}(\text{H}_3\text{PO}_4) = \frac{1}{3} \cdot 12 \text{ mol} = 4 \text{ mol}$$

$$n_{\max}(\text{H}_3\text{PO}_4) = \frac{2}{3} \cdot 12 \text{ mol} = 8 \text{ mol}$$

3.2. Moolide arvu leidmine masside järgi

Metallide aktiivsuse reas aktiivsem metall redutseerib lahuses oleva passiivsema elemendiiooni metalliks, ise oksüdeerudesiooniks



Näide 5.

Arvutada lahustatud veevaba vasksulfaadi (160 g/mol) mass, kui sinna sukeldatud raudplaadi mass kasvas kogu lahuses olnud vask(II)ioonide täieliku redutseerumise järel 15,253 grammilt 15,752 grammini. [$A_r(\text{Fe}) = 55,85$; $A_r(\text{Cu}) = 65,55$]



Olgu oksüdeerunud raua moolide arv n, siis vastavalt reaktsiooni võrrandile on redutseerunud vase moolide arv samuti n.

Fe mass kahanes n·55,85 g/mol ja moodustunud Cu mass on n·65,55 g/mol. Sukeldatud plaadi mass pärast reaktsiooni avaldub võrrandina:

$$15,752 \text{ g} = 15,253 \text{ g} + n \cdot 65,55 \text{ g/mol} - n \cdot 55,85 \text{ g/mol}$$

$$0,499 \text{ g} = n \cdot (65,55 \text{ g/mol} - 55,85 \text{ g/mol})$$

$$n = \frac{0,499 \text{ g}}{9,70 \text{ g/mol}} = 0,0514 \text{ mol}$$



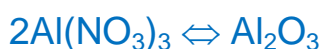
$$m(\text{CuSO}_4) = 0,0514 \text{ mol} \cdot 160 \text{ g/mol} = 8,23 \text{ g}$$

3.3. Reaktsioonis osalenud aine moolide arvu leidmine teise aine moolide arvu järgi

Kui saadusaine tekib mitme üksteisele järgneva reaktsiooni tulemusena, siis võime vastavuse üleskirjutamisel loobuda vaheetappidest, kuid me peame arvestama kõikide vaheetappide üleminekuteguritega.

Näide 6.

Avaldage alljärgnevatest vastavustest $n(\text{H}_2)$ alumiiniumoksiidi hulga järgi.



Vastavusest saame üleminekuteguri „mida otsid, mille järgi“

$$n(\text{H}_2) = \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{1} \cdot \frac{30}{8} \cdot \frac{2}{1} \cdot n(\text{Al}_2\text{O}_3)$$

Peale taandamist

$$n(\text{H}_2) = \frac{45}{4} \cdot n(\text{Al}_2\text{O}_3)$$

3.4. Reaktsioonis osalenud aine massi leidmine teise aine massi järgi

Antud ülesande tüübi lahendamine toimub samuti üle ainehulkade ning selleks on tarvis teada vaadeldavate ainete molaarmasse.

Näide 7.

Mitu grammi hapnikku kulub reageerimiseks 12,0 grammi süsinikmonoksiidiga? Kirjutage ja tasakaalustage toimuva reaktsiooni võrrand!



$$M(\text{CO})=28,0 \text{ g/mol}$$

$$M(\text{O}_2)=32,0 \text{ g/mol}$$

Variant 1:

$$n(\text{CO}) = \frac{12,0 \text{ g}}{28,0 \text{ g/mol}} = 0,429 \text{ mol}$$

$$n(\text{O}_2) = \frac{1}{2} \cdot 0,429 \text{ mol} \cdot 32,0 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 6,86 \text{ g}$$

Variant 2:

$$n(\text{O}_2) = \frac{1}{2} \cdot \frac{12,0 \text{ g} \cdot 32,0 \frac{\text{g}}{\text{mol}}}{28,0 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 6,86 \text{ g}$$

3.5. Reaktsioonis osalenud gaasilise aine ruumala leidmine teise gaasilise aine ruumala järgi

Antud ülesande tüübi lahendamiseks on vaja kasutada molaarruumala (V_m), mille väärtus:

- normaaltingimustel ($T = 0 \text{ }^\circ\text{C}$ (273 K) ja $P = 101\,325 \text{ Pa}$ ehk 1 atm) on $22,4 \text{ dm}^3/\text{mol}$ ja
- standardtingimustel ($T = 0 \text{ }^\circ\text{C}$ (273 K) ja $P = 100\,000 \text{ Pa}$ ehk 0,987 atm) on $22,8 \text{ dm}^3/\text{mol}$.

NB! Kui ülesandes pole toodud, mis tingimusi peab arvestama, eeldatakse automaatselt, et arvestate normaaltingimustega ning kasutate gaaside molaarruumala $22,4 \text{ dm}^3/\text{mol}$!

Näide 8.

Mitu kuupdetsimeetrit hapnikku on tarvis reageerimiseks 18,0 liitri lämmastikmonooksiidiga normaaltingimustel? Kirjutage ja tasakaalustage toimuva reaktsiooni võrrand!



$$V_m = 22,4 \text{ dm}^3/\text{mol}$$

$$\text{NB! } 1 \text{ l} = 1 \text{ dm}^3$$

Variant 1:

$$n(\text{NO}) = \frac{18,0 \text{ dm}^3}{22,4 \text{ dm}^3/\text{mol}} = 0,804 \text{ mol}$$

$$V(\text{O}_2) = \frac{1}{2} \cdot 0,804 \text{ mol} \cdot 22,4 \text{ dm}^3/\text{mol} = 9,00 \text{ dm}^3$$

Variant 2:

$$V(\text{O}_2) = \frac{1}{2} \cdot \frac{18,0 \text{ dm}^3 \cdot 22,4 \text{ dm}^3/\text{mol}}{22,4 \text{ dm}^3/\text{mol}} = 9,00 \text{ dm}^3$$

3.6. Reaktsioonis osalenud gaasilise aine ruumala leidmine teise aine massi järgi

Antud ülesande tüübi lahendamisel peab kasutama nii molaarruumala kui ka molaarmassi.

Näide 9.

Mitu kuupdetsimeetrit vesinikku on tarvis võtta reageerimiseks 180 grammi lämmastikuga? Kirjutage ja tasakaalustage toimuva reaktsiooni võrrand!



$$M(\text{N}_2) = 28,0 \text{ g/mol}$$

$$V_m = 22,4 \text{ dm}^3/\text{mol}$$

$$\text{NB! } 1 \text{ m}^3 = 1000 \text{ dm}^3$$

Variant 1:

$$n(\text{N}_2) = \frac{180 \text{ g}}{28,0 \text{ g/mol}} = 6,43 \text{ mol}$$

$$V(\text{H}_2) = \frac{3}{1} \cdot 6,43 \text{ mol} \cdot \frac{22,4 \text{ dm}^3}{\text{mol}} = 432 \text{ dm}^3 = 0,432 \text{ m}^3$$

Variant 2:

$$V(\text{H}_2) = \frac{3}{1} \cdot \frac{180 \text{ g} \cdot 22,4 \text{ dm}^3/\text{mol}}{28,0 \text{ g/mol}} = 432 \text{ dm}^3 = 0,432 \text{ m}^3$$

Nii olümpiaadil kui ka keemia lahtisel võistlusel võib igas vanuseastmes ja voores kohata nn ABC-tüüpi ülesandeid, kus ained on tähistatud tähtedega A, B, C, D jne (nippe ABC ülesannete lahendamiseks on toodud õppematerjalis „Anorgaaniliste ainete klasside vahelised seosed“). Tundmatute ainete puhul on sagedane olukord, kus ülesande lahendaja peab identifitseerima ühe või rohkem elemendi (sageli tähistatud X, Y jne) etteantud elemendi massiprotsendi järgi antud aines.

Sellised ülesanded on sageli üles ehitatud analoogselt: Aine **A** (sisaldab 54,25% ühendit **X**, 25,45% halogeeni **Y** ja 20,20% hapnikku) reageerimisel väävelhappega tekib aine mittelahustuv **C**. Identifitseerige elemendid **X** ja **Y** ning põhjendage oma valikut arvutustega!

Järgnevalt on toodud kaks ülesannet, kus tundmatu elemendi identifitseerimiseks ja molekulvalemi leidmiseks on kasutatud kahte erinevat lähenemist.

Näide (2015/2016 õ.a keemiaolümpiaadi lõppvooru 9. klassi ülesanne)

Vee mööduvat karedust põhjustavad metallide **X** ja **Y** vees lahustuvad vesinikkarbonaadid **A** (metalli **X** sisaldus 24,71%) ja **B** (metalli **Y** sisaldus 16,61%). Soolade **A** ja **B** hulka vees on võimalik kergesti määrata tiitrimisel vesinikloriidhappega (**reaktsioonid 1 ja 2**). Koduste vahenditega on mööduvast karedusest võimalik lahti saada näiteks vee keetmisega (**reaktsioonid 3 ja 4**).

Vee mööduva kareduse määramiseks võttis laborant 150 ml kraanivett ja tiitris seda 0,0551 M HCl lahusega. Stöhhiomeetriapunktis, kus kõik reaktsiooni lähteained olid ära reageerinud, oli kulunud 7,45 ml hapet.

a) i) Identifitseerige metallid **X** ja **Y** ning soolad **A** ja **B**. Kirjutage nende valemid ja nomenklatuursed nimetused. ii) Põhjendage arvutustega oma valikuid.

b) Kirjutage ja tasakaalustage reaktsioonivõrrandid 1-4.

c) Leidke analüüsitud kraanivee karedus väljendatuna soola **A** millimoolides ja milligrammides liitri vee kohta.

Lahenduskäik:

a) i) X - Ca, kaltsium

Y - Mg, magneesium

A - Ca(HCO₃)₂, kaltsiumvesinikkarbonaat

B - Mg(HCO₃)₂, magneesiumvesinikkarbonaat

ii) Vesinikkarbonaatiooni HCO₃⁻ molaarmass on 61,02 g/mol

Oletame, et soolas A on vesinikkarbonaatioonide arv 1:

$$M(\text{element X}) = \frac{61,02 \text{ g/mol}}{(1-0,2471)} \cdot 0,2471 = 20,03 \text{ g/mol}$$

Antud molaarmassile ei vasta ükski metall.

Oletame, et soolas A on vesinikkarbonaatioonide arv 2:

$$M(\text{element X}) = \frac{2 \cdot 61,02 \text{ g/mol}}{(1-0,2471)} \cdot 0,2471 = 40,05 \text{ g/mol} \rightarrow \text{metall X on Ca, kaltsium}$$

Oletame, et soolas B on vesinikkarbonaatioonide arv 1:

$$M(\text{element Y}) = \frac{61,02 \text{ g/mol}}{(1-0,1661)} \cdot 0,1661 = 12,15 \text{ g/mol}$$

Antud molaarmassile ei vasta ükski metall.

Oletame, et soolas A on vesinikkarbonaatioonide arv 2:

$$M(\text{element Y}) = \frac{2 \cdot 61,02 \text{ g/mol}}{(1-0,1661)} \cdot 0,1661 = 24,31 \text{ g/mol} \rightarrow \text{metall Y on Mg, magneesium}$$



$$V_{\text{kraanivesi}} = 150 \text{ ml}$$

$$c_{\text{HCl}} = 0,0551 \text{ M}$$

$$V_{\text{HCl}} = 7,45 \text{ ml}$$

$$c[\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2] = \frac{1}{2} \cdot \frac{0,0551 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 7,45 \text{ ml}}{150 \text{ ml}} = 0,001368 \text{ mol/l} \sim \mathbf{1,4 \text{ mmol/l}}$$

$$M[\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2] = 162,11 \text{ g/mol}$$

$$c[\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2] = 0,001368 \frac{\text{mol}}{\text{l}} \cdot 1 \text{ l} \cdot 162,11 \frac{\text{g}}{\text{mol}} \cdot \frac{1000 \text{ mg}}{1 \text{ g}} = 221,8 \text{ mg/l} \sim \mathbf{220 \text{ mg/l}}$$

Näide (2012/2013 õ.a keemiaolümpiaadi lõppvoor 9. klassi ülesanne)

Lõhkeaine **X** molekulid sisaldavad elemente **A** (37,8%), **B** (16,2%), **C** (43,2%) ja **D**. **A** on lihtaine koostises õhu peamine komponent. Elementi **B** leidub kõigis orgaanilistes ühendites. **C** on levinuim element maakoos. **X** molaarmass on 222,1 g/mol. Aine **X** molekul sisaldab ainult **A-A**, **A-B**, **B-D** ja **A-C** vahelisi sidemeid, kusjuures iga **A** aatomiga on seotud kolm teist aatomit ning molekulis on ka üks kuuest aatomist moodustunud tsükkel.

Aine **X** lagunemist saab kirjeldada lihtsustatud reaktsioonivõrrandiga, milles on ainult kolm saadust. Kaks neist on kaheaatomilised gaasid, millest üks koosneb elemendist **A** ja teine elementidest **B** ning **C**, ent kolmas saadus on kolmeaatomiline vedelik (n.t.).

- Leidke elementide **A**, **B**, **C** ja **D** sümbolid ja nimetused.
- Leidke arvutustega **i**) aine **X** empiiriline valem ja **ii**) aine **X** molekulivalem.
- Kirjutage aine **X** lagunemisreaktsiooni tasakaalustatud võrrand.
- Joonistage aine **X** struktuurivalem.

Lahenduskäik:

a) **A** – N, lämmastik; **B** – C, süsinik; **C** – O, hapnik; **D** – H, vesinik.

b) i) Kui võtta täpselt 100 g ainet **X**, siis sisaldab see

$$n(N) = 100 \text{ g} \cdot 0,378 \cdot \frac{1 \text{ mol}}{14,01 \text{ g}} \approx 2,70 \text{ mol}$$

$$n(C) = 100 \text{ g} \cdot 0,162 \cdot \frac{1 \text{ mol}}{12,01 \text{ g}} \approx 1,35 \text{ mol}$$

$$n(O) = 100 \text{ g} \cdot 0,432 \cdot \frac{1 \text{ mol}}{16,00 \text{ g}} \approx 2,70 \text{ mol}$$

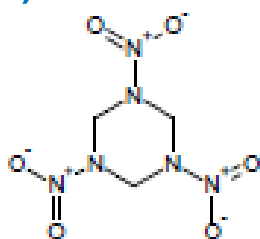
$$n(H) = 100 \text{ g} \cdot (1 - 0,378 - 0,162 - 0,432) \cdot \frac{1 \text{ mol}}{1,008 \text{ g}} \approx 2,78 \text{ mol}$$

$$\frac{n(N)}{n(C)} \approx \frac{n(O)}{n(C)} \approx \frac{n(H)}{n(C)} \approx 2 \text{ Seega on empiiriline valem } \text{CH}_2\text{N}_2\text{O}_2.$$

ii) Kuna $\frac{222,1 \text{ g/mol}}{(12,01 + 2 \cdot 1,008 + 2 \cdot 14,01 + 2 \cdot 16,00) \text{ g/mol}} \approx 3$, siis on molekulivalem $\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_6$.

c) $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_6\text{N}_6 \rightarrow 3\text{CO} + 3\text{H}_2\text{O} + 3\text{N}_2$

d)



Tiitrimine

Tiitrimine on teadaoleva kontsentratsiooniga lahuse (titrandi) lisamine tilkhaaval kindlale kogusele uuritavat ainet sisaldavale lahusele (tiitritav lahus) kuni uuritava aine täieliku reageerimiseni ehk stõhhiomeetriapunkti saabumiseni (tiitrimise lõpp-punkt, mis on määratav kas visuaalselt või sobivate seadmetega). Antud meetodiga määratakse teadaoleva kontsentratsiooniga lahuse abil uuritava lahuse kontsentratsiooni. Kuna tiitrimise käigus toimub keemiline reaktsioon, peab alati arvestama reageerivate ainete moolsuhtega:

Näide 10.

Tiitrimise käigus toimub reaktsioon $\text{H}_2\text{SO}_4 + 2\text{NaOH} = \text{Na}_2\text{SO}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$. Antud reaktsiooni puhul on H_2SO_4 ja NaOH moolsuhe 1:2 ehk naatriumhüdrokksiidi kulub väävelhappe neutraliseerimiseks 2 korda rohkem (nt 1 mol H_2SO_4 neutraliseerimiseks kulub 2 mol NaOH).

Järgnevalt vaatleme lähemalt hape-alus tiitrimist. Hape-alus tiitrimine põhineb neutralisatsioonireaktsioonil:



Hape-alus tiitrimise korral lisatakse kindlale kogusele happelahusele (või aluselahusele; tavaliselt 10 cm³) büretist kindla kontsentratsiooniga leeliselahust (või happelahust; nn standardlahus) seni, kuni hape on täielikult ära reageerinud (Joonis 2). Sel juhul on happe (või aluse) kindlale hulgalet lisatud temale reaktsioonivõrrandi järgi vastav (ekvivalentne) kogus leelist (või hapet). Seda momenti nimetatakse stõhhiomeetriapunktiks. Kuna neutralisatsioonireaktsiooniga ei kaasne väliseid muutusi, siis kasutatakse stõhhiomeetriapunkti kindlakstegemiseks värvindikaatoreid, mille värvus muutub lahuse pH muutumisega. Värvuse muutus peab toimuma järsult kitsas pH vahemikus, mida nimetatakse indikaatori pöördealaks. Indikaatori värvuse muutumine peab toimuma kas stõhhiomeetriapunktis või vahetult pärast selle saabumist.

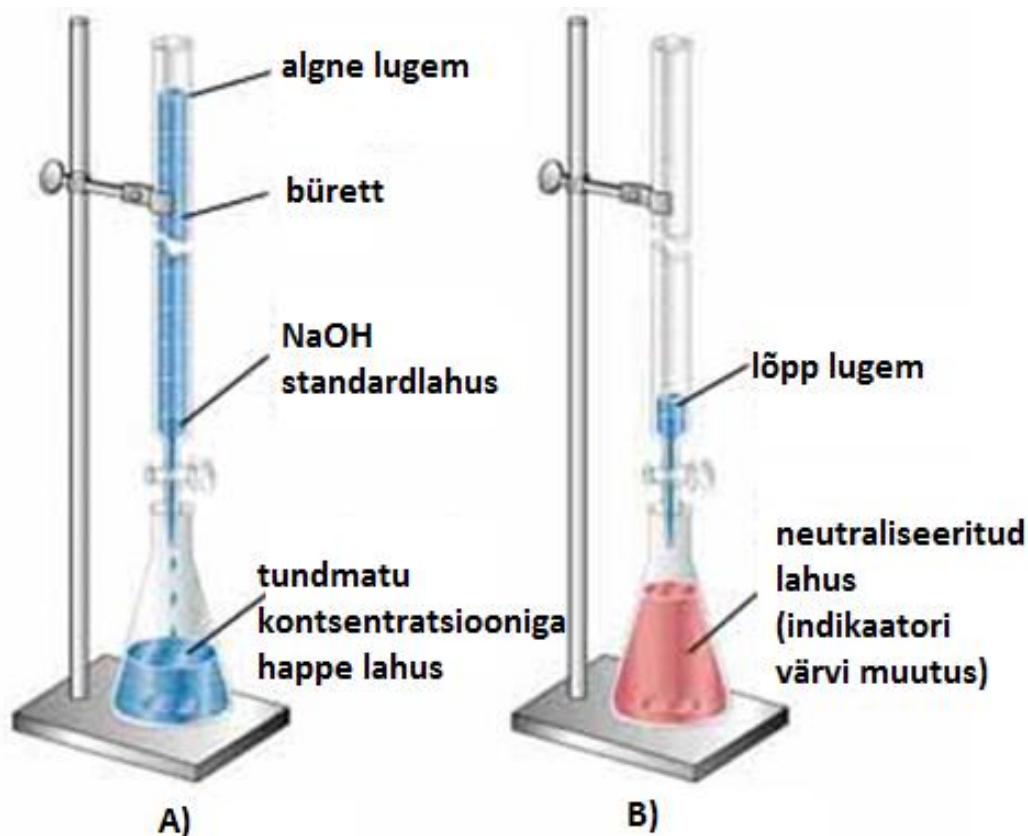
Enamkasutatavad indikaatorid, nende pöördealad ja värvused erineva pH-ga¹ lahustes on toodud tabelis 1.

¹ pH on negatiivne logaritm vesinikioonide kontsentratsioonist (mol/l) ehk $\text{pH} = -\log[\text{H}^+]$. pH skaala on tavaliselt vahemikus 0...14 ning selle kaudu väljendatakse lahuse happelisust: $\text{pH} < 7$ vastab happelisele lahusele, $\text{pH} > 7$ vastab aluselisele lahusele ja $\text{pH} = 7$ vastab neutraalsele lahusele.

Tabel 1. Indikaatorid koos nende värvustega erineva pH-ga lahustes ja pöördealadega.

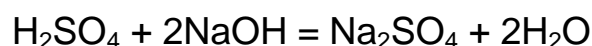
| <i>Indikaator</i> | <i>Pöördeala</i> | <i>Värvus madala pH juures ehk happelises lahuses</i> | <i>Värvus kõrge pH juures ehk aluselises lahuses</i> |
|-------------------|------------------|---|--|
| lakmus | 5,0 – 8,0 | punane | sinine |
| fenooltaleiin | 8,2 – 10,0 | värvusetu | vaarikapunane |
| metüüloranž | 3,1 - 4,4 | punane | kollane |
| metüülpunane | 4,4 – 6,2 | punane | kollane |

Näiteks metüüloranž on aluse lahuses kollane ning happe lisamisel kolvis olevale alusele muutub stöhhiomeetriapunktis kolvis oleva lahuse värvus kollasest roosaks; fenooltaleiin on happe lahuses värvusetu ning aluse lisamisel kolvis olevale happele muutub stöhhiomeetriapunktis kolvis oleva lahuse värvus värvusetust roosaks). Büreti alg- ja lõpplugemi vahest saab välja arvutada kulunud titrandi hulga ning selle järgi arvutada analüüsitava aine kontsentratsiooni.

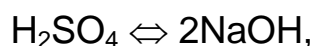


Joonis 2. Hape-alus tiitrimine. Joonisel A) on toodud tiitrimise algus ja joonisel B) tiitrimise lõpp-punkt.

H_2SO_4 - lahuse kontsentratsiooni määramisel NaOH - lahusega toimub reaktsioon



Reaktsioonivõrrandist saame vastavuse



mis võimaldab väävelhappe hulga avaldada naatriumhüdroksiidi hulga järgi

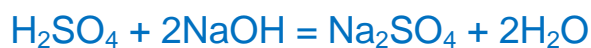
$$n(\text{H}_2\text{SO}_4) = \frac{1}{2} \cdot n(\text{NaOH})$$

Üleminekuteguriks ($\frac{1}{2}$) on vastavuse koefitsientide jagatis (mida otsid, mille järgi). Kui kontsentratsioon c on dimensiooniga mol/dm^3 ja lahuse ruumala V on dimensiooniga cm^3 , siis nende korrutis annab reagendi hulga millimoolides. Kontsentratsiooni arvutamiseks (mol/dm^3) ei ole ruumala cm^3 vaja ümber arvutada, sest ruumala dimensioon taandub. Tähistades väävelhappe kontsentratsiooni c_1 -ga ja uuritava H_2SO_4 lahuse ruumala V_1 -ga ning naatriumhüdroksiidi kontsentratsiooni c_2 -ga ja büretist kulunud NaOH lahuse ruumala V_2 -ga saame kirjutada võrduse:

$$2 \cdot c_1 \cdot V_1 = 1 \cdot c_2 \cdot V_2 \rightarrow c_1 = \frac{1}{2} \cdot \frac{c_2 \cdot V_2}{V_1}$$

Näide 11.

10,00 cm^3 H_2SO_4 lahuse tiitrimiseks kulus 14,35 cm^3 0,09965 M NaOH lahust. Leida väävelhappe lahuse molaarne kontsentratsioon.



$$10,00 \text{ cm}^3 \cdot c(\text{H}_2\text{SO}_4) = \frac{1}{2} \cdot 14,35 \text{ cm}^3 \cdot 0,09985 \text{ mol/dm}^3$$

$n(\text{H}_2\text{SO}_4)$, millimoolides

$n(\text{NaOH})$, millimoolides

$$c(\text{H}_2\text{SO}_4) = \frac{1}{2} \cdot 14,35 \text{ cm}^3 \cdot 0,09985 \text{ mol/dm}^3 \cdot \frac{1}{10,00 \text{ cm}^3} = \mathbf{0,07164 \text{ mol/dm}^3}$$

Märkus: Arvutuse täpsuse huvides antakse ümardamisest põhjustatud vigade vältimiseks molaarse kontsentratsiooni väärtus nelja tüvenumbriga, kuigi lähteandmed seda päris ei võimalda (büretilt saajandiku täpsusega lugemi saamine on üsna kahtlane).

Kirjandus:

Rein Pullerits, Maila Mölder. Keemiaülesannete lahendamine, Tallinn, Avita, 2000, 2001.

Peeter Atkins, Loretta Jones, Keemia alused. Teekond teadmiste juurde, Tartu, Tartu Ülikooli Kirjastus, 2013. Lk 70-76, 85-93, 101-109, 109-115, 122-124, 578-590.

Piltide allikad:

<http://images.tutorcircle.com/cms/images/44/p-table.png>

<http://wps.prenhall.com/wps/media/objects/3311/3390507/imag0406/AAAUA VI0.JPG>