

УДК 510.546

А.Ф. Хрусталеv*Севастопольский национальный технический университет**ул. Университетская, 33, г. Севастополь, 99053, Украина**E-mail: root@sevgtu.sebastopol.ua***ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ**

Предлагается критерий истинности стехиометрических коэффициентов и химического уравнения.

Ключевые слова: химическое уравнение, химическая реакция, стехиометрические коэффициенты

В учебном пособии [1, С. 56] отмечается, что при составлении химического уравнения «подбирают соответствующие коэффициенты перед формулами, чтобы число атомов каждого элемента в обеих частях уравнения было равным», а в книге [2, С. 90] приводится правило: «Чтобы превратить схему реакции в химическое уравнение, нужно подобрать коэффициенты для каждого вещества (в случае необходимости), записать их перед химическими формулами и заменить стрелку на знак равенства», которое нацеливает не на вычисление коэффициентов, а на их подбор.

В учебнике [3, С. 16] подобраны коэффициенты и записано химическое уравнение:



которое противоречит свойствам озона, описанным в этой же книге. Стехиометрические коэффициенты надо не подбирать, а определять, вычислять!

В указанном уравнении они подобраны так, что количества атомов Ag и O в левой и правой частях равенства одинаковы, однако это условие является необходимым для составления правильного уравнения, но, в данном случае, не достаточным.

Правильным будет уравнение:



поскольку окислительные свойства озона обусловлены образованием атомарного кислорода в соответствии с уравнением: $\text{O}_3 = \text{O} + \text{O}_2$, а это означает, что из каждой молекулы озона O_3 образуется одна молекула O_2 кислорода, т.е. коэффициенты при O_3 и O_2 должны быть равны.

Итак, определяем, сколько моль Ag реагирует с одним моль O_3 и сколько моль Ag_2O и O_2 при этом образуется, т.е. считая коэффициент при O_3 равным 1, вычисляем остальные. При этом коэффициент при O_2 , как указано выше, равен коэффициенту при O_3 , т.е. 1, а тогда на основе атомного баланса определяем коэффициент при Ag_2O , который равен 1 и, наконец, вычисляем коэффициент при Ag и находим, что он равен 2. Таким образом, считая коэффициент при O_3 равным 1, остальные найдены, на основе химизма реакции и атомного баланса, однозначно! Следовательно, химическое уравнение, соответствующее схеме реальной реакции, составлено правильно!

А подобрать для рассматриваемой схемы можно бесчисленное множество коэффициентов!



но только одно уравнение будет соответствовать реальной схеме!

В этой связи отметим, что, рассматривая уравнение



в [4, С. 50-51] сказано «В состав веществ, участвующих в реакции, входят четыре элемента: водород, сера, кислород и медь. Сравнивая количество этих элементов в правой и левой частях уравнения, мы видим:

	В левой части	В правой части
H	4	4
O	8	8
S	2	2
Cu	1	1

Равенство атомов в левой и правой частях уравнения доказывает, что уравнение составлено правильно».

Последнее категорическое утверждение ложно: равенство количеств атомов в левой и правой частях уравнения не доказывает, что оно составлено правильно!

Это следует хотя бы из уравнений (1) и (2), в каждом из которых число атомов любого элемента в левой и правой частях равны, но уравнение (1) неверно, а (2) – верно!

Очевидно другое: Если число всех атомов хотя бы одного элемента в левой части уравнения не равно числу всех атомов того же элемента в правой части, то химическое уравнение составлено не правильно.

Прежде чем сформулировать критерий правильности расстановки стехиометрических коэффициентов, рассмотрим конкретный пример, соответствующий схеме



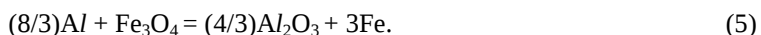
Итак, вычислим, сколько моль Al реагирует с одним моль Fe_3O_4 и сколько моль Al_2O_3 и Fe при этом образуется, т.е. считая коэффициент при Fe_3O_4 равным 1, будем находить остальные, обозначив их через x , y и z , из уравнения



Для этого на основе атомного баланса составим систему алгебраических уравнений

$$\begin{cases} x = 2y & (Al) \\ 3 = z & (Fe) \\ 4 = 3y & (O) \end{cases}$$

которая во множестве вещественных чисел имеет единственное решение: $x = 8/3$, $y = 4/3$, $z = 3$, а потому уравнение (4) примет вид:



Теперь очевидно, что справедлива основная теорема:

Если в уравнении химической реакции один (любой) из коэффициентов выбран равным 1 (или другому числу), а остальные при этом найдены **ОДНОЗНАЧНО** во множестве вещественных чисел только на основе атомного баланса, то рассматриваемое уравнение составлено правильно.

Конечно, в уравнении (5) можно все коэффициенты умножить на наименьшее общее кратное их знаменателей и записать его с целыми коэффициентами, которые являются взаимно простыми натуральными числами



Если же соответствующая система алгебраических уравнений, составленная только на основе атомного баланса, окажется неопределенной, т.е. будет иметь более одного решения, то для однозначного нахождения коэффициентов необходима дополнительная информация.

Так, если для схемы, соответствующей (1), сначала запишем уравнение в виде



и составим только на основе атомного баланса систему

$$\begin{cases} x = 2 \\ 3y = 1 + 2z \end{cases} \quad \begin{matrix} (Ag) \\ (O) \end{matrix}$$

то легко обнаружим, что она оказалась неопределенной.

Но, как указано выше, коэффициенты при O_3 и O_2 должны быть равны. Теперь дополнив уравнением $y = z$ выписанную выше систему и решив её, получим однозначный ответ: $x = 2$, $y = 1$, $z = 1$ и уравнение (7) примет вид:



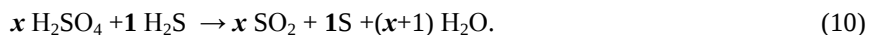
В итоге сформулируем критерий истинности химических уравнений, моделирующих реальные реакции, в виде:

*Если в химическом уравнении один (любой) из коэффициентов выбран равным 1 (или другому числу), а остальные при этом найдены (на основе закона сохранения массы при необходимости с учётом электронного баланса, механизма реакции или другой объективной информации) **ОДНОЗНАЧНО** во множестве вещественных чисел, то рассматриваемое уравнение составлено правильно.*

Составим ещё химическое уравнение, соответствующее схеме реакции



Фиксируем коэффициент, равный 1, перед H_2S . Если учесть соответствующее электронное уравнение или, что H_2S окисляется с образованием свободной серы S , то коэффициент перед S также будет равен 1. Далее арифметически затрудняемся найти другие коэффициенты, поэтому введём x , перед H_2SO_4 , тогда на основе баланса атомов H и S запишем схему (9) в виде



Уравнивая атомы кислорода в левой и правой частях (10), получим $4x = 2x + x + 1$, т.е. однозначный результат $x = 1$, а потому уравнение, соответствующее схеме (10), примет вид

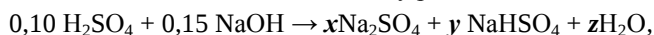


Коеффіцієнти для схеми (9) можна визначити арифметично, якщо взяти відповідне електронне рівняння або, що сульфат – іони відновлюються до SO_2 , т.е. коеффіцієнти при H_2SO_4 і SO_2 рівні. Тоді, вибрав коеффіцієнт 1 при H_2SO_4 , приходимо до висновку, що він буде дорівнювати 1 і при SO_2 . Далі на основі балансу атомів кисню знаходимо коеффіцієнт 2 при H_2O і інші однозначно і отримуємо рівняння (11).

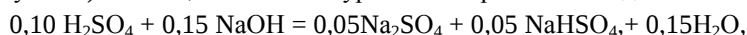
Тепер розглянемо задачу: Скільки грамів середньої солі утвориться при взаємодії 6 г гідроксиду натрію і 9,8 г серної кислоти, взятих в розчинах?

Рішення, яке веде до відповіді: 10,65 г, наведено в [5, С. 107-108].

Вона відповідає гіпотезі, що в результаті реакції утворюється тільки середня сіль, тоді як середня сіль не єдиний продукт, який може бути отриманий при взаємодії гідроксиду натрію і серної кислоти. В кінцевих продуктах може утворитися суміш середньої і кислотної солі і ця можливість повинна бути врахована в схемі реакції. Крім того, вихідні речовини можуть прореагувати повністю, а може бути одне з речовин в надлишку (маси реагентів за умов розглянутої задачі – це додаткова інформація, однозначно визначає коеффіцієнти відповідного хімічного рівняння). Подивимося, яка з цих двох можливостей має місце. Спочатку розглянемо можливість повного реагування. Кількість речовини серної кислоти в 9,8 г її буде: $n(\text{H}_2\text{SO}_4) = 9,8 \text{ г} / (98 \text{ г/моль}) = 0,10 \text{ моль}$. Аналогічно $n(\text{NaOH}) = 6/40 = 0,15 \text{ моль}$. Виходячи з них, запишемо схему реакції



в якій коеффіцієнти в лівій частині відомі, і, оскільки встановлюється можливість повного реагування, $x \geq 0$, $y \geq 0$ і $x+y > 0$, т.е. хоча б одне з цих невідомих додатне. В цих умовах коеффіцієнт при H_2O однозначно визначається за киснем гідроксильних груп щелочи NaOH , т.е. $z = 0,15$, після чого інші однозначно визначаються за балансом атомів: $x = 0,05$, $y = 0,05$ (кстати, якщо на основі балансу атомів Na і S скласти систему з невідомими x і y і розв'язати її, то отримаємо той же результат). Отже, хімічне рівняння приймає вигляд:



з якого випливає, що маса середньої солі, утвореної в результаті реакції, буде: $0,05 \cdot (23 \cdot 2 + 32 + 16 \cdot 4) = 7,1 \approx 7 \text{ (г)}$. Звернемо увагу на необхідність дотримуватися правил наближених обчислень: тут відповідь повинна бути записана з точністю до однієї значущої цифри, оскільки з такою точністю визначено одне з вихідних даних 6 г.

Ця відповідь відрізняється від авторської не тільки кількісно, але й якісно, так як в результаті реакції утворюється як середня, так і кисла сіль, т.е. їх суміш.

В §5 «Рішення задач на надлишок» [3, С. 32] при розв'язанні задачі 4 «В розчин, що містить їдкий натр масою 20 г, пропустили оксид сірки (IV) об'ємом 15 л (н.у.). Визначити масу утвореної в результаті реакції солі» підкреслено: «Визначити, що ця задача може бути на надлишок, вказується в умови даних для двох реагуючих один з одним речовин. Отже, необхідно встановити, яке з цих речовин дано з надлишком. Але в даному випадку, як це зробити, якщо ми не знаємо, яка сіль утворилася? Бо може утворитися або кисла, або середня сіль». Останнє твердження невірно, так як в результаті реакції може утворитися і суміш солей, як в розглянутій нами вище задачі.

В цій зв'язі розглянемо ще задачу:

Для нейтралізації серної кислоти масою 49 г був взят гідроксид натрію масою 20 г. Яка маса утвореної солі? [6, С. 78]. Рішення, яке веде до відповіді: Утворюється Na_2SO_4 масою 35,6 г, наведено на С. 78-79.

Враховуючи, що вихідні речовини можуть прореагувати повністю, а може бути одне з них в надлишку, встановимо, яка з цих двох можливостей має місце. Спочатку розглянемо можливість повного реагування. В цьому випадку

$$n(\text{H}_2\text{SO}_4) = 0,5 \text{ моль}, \quad n(\text{NaOH}) = 0,5 \text{ моль}.$$

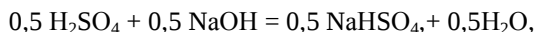
Оскільки заздалегідь невідомо, яка сіль або їх суміш утворюється після закінчення реакції, запишемо рівняння з невідомими коеффіцієнтами



де $x \geq 0$, $y \geq 0$ і $x+y > 0$, т.е. хоча б одне з цих невідомих додатне і на його основі складемо систему лінійних рівнянь

$$\begin{cases} 0,5 = x + y, \\ 0,5 = 2x + y, \end{cases} \quad \begin{matrix} (S) \\ (Na) \end{matrix}$$

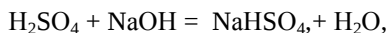
решая которую находим: $x = 0$, $y = 0,5$, после чего однозначно вычисляется $z = 0,5$. Значит, имеет место полное реагирование, и химическое уравнение принимает вид:



из которого следует, что масса кислой соли, образовавшейся в результате реакции, будет: $0,5 \cdot (23+1+32+16 \cdot 4) = 60$ (г).

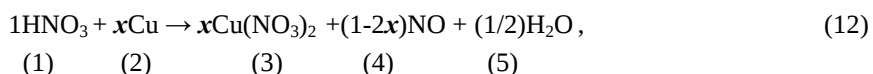
Этот ответ отличается от авторского не только количественно, но и качественно, так как в результате реакции образуется кислая, а не средняя соль, как в авторском решении.

Впрочем, здесь $n(\text{NaOH}) / n(\text{H}_2\text{SO}_4) = 1$, а потому имеет место очевидное уравнение



и в этом случае указание в условии задачи данных для двух реагирующих друг с другом веществ соответствует их полному реагированию.

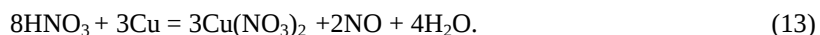
Теперь рассмотрим схему



На первом шаге перед формулой вещества HNO_3 поставим коэффициент, равный единице, в соответствии с которым будем на основе атомного баланса находить остальные, например, в последовательности, указанной в (12) цифрами в скобках под формулами веществ. Уже на втором шаге возникает затруднение в определении коэффициента при какой-либо другой формуле, поэтому на втором шаге введем коэффициент x , например перед Cu , тогда на третьем шаге коэффициент при $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ тоже будет равен x , на четвертом – при NO коэффициент запишется в виде $(1-2x)$ и на пятом он будет равен $1/2$. Теперь, на основе баланса атомов кислорода составим алгебраическое уравнение

$$3 = 6x + (1-2x) + 1/2,$$

решая которое находим $x = 3/8$, т.е. при выбранном коэффициенте 1 при HNO_3 на первом шаге коэффициенты определены однозначно только на основе атомного баланса. По основной теореме заключаем, что химическое уравнение составлено правильно. Подставляя значение $x = 3/8$ в схему (6) и умножая обе её части на 8, получим уравнение с целыми коэффициентами



В книге [4, С.54-55] приводится пример составления по заданной схеме реакции уже рассмотренного нами уравнения (13).

При этом автор подчеркивает, что такие реакции можно рассматривать как протекающие в две стадии, в схемах каждой из которых методом электронного баланса расставляются коэффициенты, а затем суммируются два химических уравнения, в обеих частях которых исчезают одинаковые «слагаемые» 3CuO .

Особо отметим, что приведенное нами выше решение адекватно как качественно, так и количественно химической реакции, соответствующей схеме (12), поскольку оно комплексно, системно отражает реакцию в целом. А вот декомпозиция, отвечающая схеме (12) естественной реакции, которую «можно рассматривать, как проходящую в две стадии», не достаточно аргументирована. В естественных условиях эта реакция не будет проходить в две стадии по велению или хотению того, кто решает задачу. А при системном подходе к задаче её не нужно искусственно делить на две подзадачи, а затем их решения увязывать между собой суммированием (?) двух химических уравнений.

В пособии для учителей [4, С. 55-57] отмечается: «Несколько десятков лет тому назад в методической литературе дискутировался так называемый алгебраический метод составления уравнений реакций. Наиболее подробно он был изложен в записках по методике химии проф. С.Г. Крапивина. Сам он к этому методу относился скептически... Оценивая алгебраический метод составления уравнения реакции проф. С.Г. Крапивин отмечает, что все дело сводится к подсчету и комбинированию количеств атомов различных элементов для составления системы уравнений. Химическая сторона вопроса здесь не затрагивается. Заключение С.Г. Крапивина вряд ли у кого-либо может вызвать сомнение. В последнее время сделана попытка воскресить этот метод.

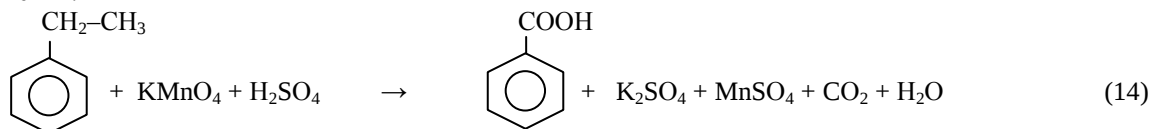
В журнале «Химия в школе» № 5 за 1968 г. появилась статья А.Ф. Хрусталева «О расстановке коэффициентов в химических уравнениях». В этой статье излагается алгебраический метод, мало чем отличающийся от метода, изложенного С.Г. Крапиным... Ни одно свойство веществ не затрагивается, ни одно теоретическое положение, трактующее о закономерной зависимости между величинами не используется. Чистая математика ... Для чего же нужны сложные и оторванные от химического содержания формальные выкладки?».

В этой связи отметим, что в упомянутой статье по существу сформулирован критерий правильности расстановки коэффициентов в химическом уравнении только на основе атомного баланса, благодаря введению перед формулой любого вещества коэффициента, равного единице, что отражено выше в формулировке критерия. Это главное отличие от метода, изложенного в записках по

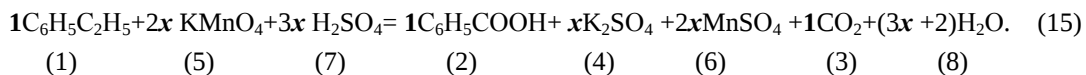
методике химии проф. С.Г. Крапивина. Но оно дает возможность сделать важный вывод о правильно составленном химическом уравнении с помощью соответствующей алгебраической системы, имеющей единственное решение.

Что касается заключения автора книги [4]: «ни одно теоретическое положение, трактующее о закономерной зависимости между величинами не используется», то оно ложно, так как система линейных уравнений, и притом довольно простая, составляется на основе закона сохранения массы веществ.

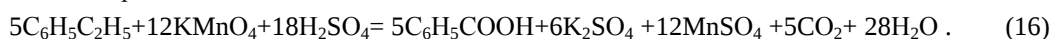
Приведём ещё пример расстановки коэффициентов в схеме, включающей органические соединения:



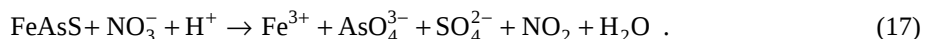
Из этой схемы видно, что в соответствующей ей реакции ароматическое ядро не разрушается. Значит, количество таких ядер в левой и правой частях уравнения должно быть одинаковым, т.е. коэффициенты при этилбензоле и бензойной кислоте равны. Итак, введём в уравнении (14) перед этилбензолом коэффициент 1, тогда коэффициент перед бензойной кислотой тоже будет равен 1. Теперь на основе баланса атомов С приходим к выводу, что коэффициент при CO_2 равен $7 - 6 = 1$. Поскольку на (4) шаге возникло затруднение, введём неизвестный коэффициент x перед K_2SO_4 и т.д. (Здесь, как и выше, последовательность расстановки коэффициентов в уравнении (15) указана цифрами в скобках под формулами веществ).



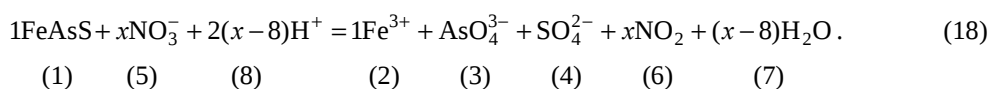
На восьмом шаге, коэффициент перед H_2O записан на основе баланса атомов Н. Чтобы найти x , составим линейное уравнение исходя из того, что количества атомов О слева и справа должны быть равны: $8x + 12x = 2 + 4x + 8x + 2 + 3x + 2$. Решив это уравнение, получим однозначный ответ: $x = 6/5$ (уравнение для нахождения x можно составить проще, если учесть, что атомы кислорода уже уравнены по S в формулах H_2SO_4 , K_2SO_4 и MnSO_4 , а потому $8x = 2 + 2 + 3x + 2$ и $x = 6/5$). Подставив в уравнение (15) $x = 6/5$ и умножив все его коэффициенты на 5, придём к уравнению с целыми коэффициентами, являющимися взаимно простыми числами:



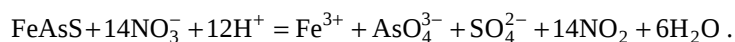
И, наконец, составим ионно-молекулярное уравнение, соответствующее схеме:



Считая коэффициент при FeAsS равным 1, будем расставлять остальные на основе атомного баланса в уравнении (18) в последовательности, указанной цифрами в скобках под формулами веществ, тогда на (5) шаге возникает затруднение, поэтому введём x перед NO_3^- и выразим через него другие коэффициенты:



На этом возможности атомного баланса исчерпаны. Теперь на основании закона сохранения заряда составим линейное уравнение $-x + 2(x-8) = 3 - 3 - 2$, имеющее единственное решение $x = 14$, подставив которое в (18) придём к ионно-молекулярному уравнению



Часто коэффициенты химических уравнений правильно находят с помощью подбора только благодаря тому, что в таких уравнениях при фиксированном коэффициенте, не обязательно равном 1, при формуле одного вещества, остальные, в силу самой схемы химической реакции, определяются однозначно только на основе атомного баланса. Но ведь заранее неизвестно, определены ли в указанных условиях коэффициенты однозначно или нет. Вот почему **ОДНОЗНАЧНОСТЬ**, о которой идет речь, должна быть обоснована!

Поскольку выдача результатов расчёта связана с моральной, материальной или уголовной ответственностью, то на всех этапах решения с целью предотвращения ошибок необходимо использовать все возможные методы контроля. Однозначность коэффициентов химического уравнения в описанных выше условиях является надёжным критерием истинности и коэффициентов, и химического уравнения.

Библиографический список

1. Кудрявцев А.А. Составление химических уравнений / А.А Кудрявцев. — М.: Высш. шк., 1968. — 120 с.
2. Попель П.П. Химия: учеб. для 9 кл. / П.П. Попель, Л.С. Крикля. — К.: ИЦ «Академия», 2007. — 90 с.
3. Буринская Н.Н. Химия, 10 кл. / Н.Н. Буринская, Л.П. Величко. — К.: ВТФ «Перун», 2005. — С. 16.
4. Абкин Г.Л. Методика решения задач по химии. Пособие для учителей / Г.Л. Абкин. — М.: Просвещение, 1971. — 55 с.
5. Веденяпин А.Я. Решение расчётных задач по химии. Метод. пособие для учителей / А.Я. Веденяпин. — М.: Просвещение, 1972. — С. 107.
6. Вивюрский В.Я. Учись приобретать и применять знания по химии / В.Я. Вивюрский. — М.: Просвещение, 1987. — 78 с.

Поступила в редакцию 12.03.2009 г.