

Elementární analýza

Elementární analýza - důkaz přítomnosti, resp. stanovení jednotlivých prvků. Předpokladem dalších postupů je mineralizace organického vzorku (oxidační nebo redukční rozklad). Následně se stanovují látky metodami anorganické analýzy.

Mineralizace organického vzorku se provádí:

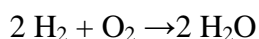
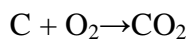
- spalováním při vysoké teplotě
- varem v minerálních kyselinách

Množství kyslíku se nestanovuje, ale dopočítává do 100 %. Protože spalováním vznikají sloučeniny s kyslíkem a není možné odlišit kyslík v původním nespáleném vzorku a kyslík, který pochází ze vzduchu.

Příklad:

Při kvantitativní analýze bylo spáleno 70 mg látky. Vzniklo 102,8 mg oxidu uhličitého a 41,6 mg vody.

Při spalování látky probíhají reakce:



Vypočítáme, z kolika mg uhlíku a vodíku vznikla zjištěná množství oxidu uhličitého a vody:



Pomocí relativních atomových hmotností $M(\text{C}) = 12,01 \text{ g/mol}$, $M(\text{CO}_2) = 44,01 \text{ g/mol}$
 $M(\text{H}) = 1,01 \text{ g/mol}$, $M(\text{H}_2\text{O}) = 18,02 \text{ g/mol}$ vypočítáme hmotnost jednotlivých prvků ve vzorku.

$$m(\text{C}) = 28 \ \text{mg} \quad m(\text{H}) = 4,66 \ \text{mg}$$

Dále určíme **elementární složení**. Spočítáme tedy hmotnostní procenta prvků ve vzorku ($m_{\text{prvku}}/m_{\text{vzorku}} \times 100$).

$$x = 40 \ \%$$

$$y = 6,66 \ \%$$

Zbytek do 100 % připadá na prvky nebo nečistoty, které nebyly stanovovány. V našem případě budeme uvažovat, že celý tento zbytek připadá kyslíku (tedy 53,34 %).

Výpočet stechiometrického a sumárního vzorce

Stechiometrický vzorec

- vyjadřuje základní složení sloučeniny
- udává, z kterých prvků se sloučenina skládá a v jakém poměru jsou atomy těchto prvků ve sloučenině zastoupeny

Sumární vzorec

- udává druh a počet atomů v molekule dané sloučeniny
- může být totožný se stechiometrickým vzorcem, nebo je jeho celistvým násobkem

Př. peroxid vodíku má stechiometrický vzorec HO a sumární vzorec H₂O₂

Atomový poměr prvků ve vzorku zjistíme, dělíme-li množství jednotlivých prvků v procentech jejich relativními atomovými hmotnostmi.

Stechiometrický vzorec získáme, pokud vydělíme poměr nejmenším z čísel.

Vzhledem k tomu, že ve sloučenině (v sumárním vzorci) jsou jednotlivé prvky v poměru celých čísel, snažíme se poměru celých čísel dosáhnout matematickými operacemi (násobení celým číslem).

K ověření „správnosti“ vypočteného vzorce lze využít: a) zpětný výpočet obsahu prvků; b) hodnotu DBE, která musí být celočíselná; c) NMR spektra.

a) Výpočet elementárního složení

Ze sumárního vzorce látky můžeme vypočítat elementární složení tak, že hmotnost jednotlivých prvků (počet molů daného prvku vynásobená molární hmotností) se vydělí celkovou hmotností molekuly (1 mol × molární hmotnost molekuly). Aby byl výsledek v %, je třeba ještě výsledek vynásobit 100.

Např. C₁₂H₁₁F₃N₂O₂

$$\%C = \frac{12 \cdot A_r(C) \cdot 100}{M_r(C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 52,93$$

$$\%F = \frac{3 \cdot A_r(F) \cdot 100}{M_r(C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 20,95$$

$$\%H = \frac{11 * A_r(H) * 100}{M_r(C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 4,07$$

$$\%N = \frac{2 * A_r(N) * 100}{M_r(C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 10,29$$

$$\%O = \frac{2 * A_r(O) * 100}{M_r(C_{12}H_{11}F_3N_2O_2)} = 11,76$$