

## 例谈中学化学中的近似计算方法

湖北省枣阳市第二中学 441200 杨文斌

近似计算包括数值的近似计算(如近似数的截取方法和近似数的运算法则等)、方法的近似处理(如对某一数值的取舍和对运算公式的修正等)。

### 一、中学阶段常见的近似计算

#### 1. 涉及元素的相对原子质量的相关计算

(1) 常用元素的相对原子质量的近似值参与计算

元素的相对原子质量是指该元素各种天然同位素原子(稳定)的相对原子质量与其在自然界所占的原子个数百分比(丰度)乘积的加和。即标在元素周期表中的相对原子质量。一般是非正整数,为了计算简便,通常取用的是其近似值,如高考试卷告知的数值。

(2) 用元素的近似相对原子质量代替元素的相对原子质量参与计算

元素的近似相对原子质量是按该元素的各种天然同位素原子的质量数与其在自然界所占的原子个数百分比乘积的加和。

用元素的近似相对原子质量代替元素的相对原子质量参与计算,一般误差不大,因为二者大小相差无几。

例 1 某元素一种同位素原子的质子数为  $m$ , 中子数为  $n$ , 则下列说法正确的是( )。

- A. 不能由此确定该元素的相对原子质量
- B. 这种元素的相对原子质量为  $(m+n)$
- C. 若碳原子质量为  $w$  g, 此原子的质量为  $(m+n)w$  g
- D. 核内中子的总质量小于质子的总质量

解析 元素的相对原子质量是各同位素原子相对原子质量的平均值,所以 A 正确、B 不正确。

▶ 还要据此分析化学计量数的正误。

综上所述,对于离子方程式的书写及正误判断题要全面细致地分析,切忌顾此失彼。尤其要注意以下几点:①复分解反应及氧化还原反应是否并存;②反应物中是否有氧化性或还原性不同的多种离子,它们的反应顺序如何;③反应物中是

由相对原子质量的概念及标准,若 C 项告知的碳原子就是碳-12 原子,设此元素的这种同位素原子的质量为  $x$ ,并且我们用该同位素原子的质量数代替其相对原子质量时,有:

$$\frac{x}{\frac{1}{12} \times w \text{ g}} = m + n \Rightarrow x = \frac{(m+n)w}{12} \text{ g}, \text{显然, C 不}$$

正确。一个中子的质量比一个质子的质量略大,但是这里  $m$  和  $n$  的相对大小未知(即核内质子数和中子数各是多少无法确定),故 D 不正确。

综上,选 A。

#### 2. 最简式法求有机物的分子式

最简式法求有机物的分子式的要点:求出分子中各元素原子的最简比即得最简式,再结合有机物的相对分子质量进一步确定分子式。

$$n(\text{C}) : n(\text{H}) : n(\text{O}) = a : b : c$$

最简式为  $\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c$ , 分子式可表示为  $(\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c)_n$ , 其中:  $n = \frac{\text{相对分子质量}}{\text{最简式的式量}}$

例 2 含碳质量分数分别为 83% 和 83.3% 的两种烃,其最简式分别是\_\_\_\_\_、\_\_\_\_\_。

解析 83% 的烃:

$$n(\text{C}) : n(\text{H}) = 83/12 : 17/1 = 6.9 : 17 \\ = 1 : 2.46 (\text{定} 1) = 2 : 4.92 \approx 2 : 5 (\text{化整})$$

即最简式为  $\text{C}_2\text{H}_5$ 。

同理可得另一烃的最简式为  $\text{C}_5\text{H}_{12}$ 。

原子个数比化为最简整数比的技巧及步骤:

定 1——用最小的数去除各数,使各数接近整数;

化整——选 2~9 中的某个数去乘各数,使各

否有隐含的特定条件下具有氧化性的离子(如  $\text{NO}_3^-$  在酸性条件下具有氧化性);④反应产物是否与物质的用量、浓度及状态有关;⑤反应产物是否与操作顺序有关;⑥反应产物是否与反应条件(如电解、点燃、高温等)有关。

(收稿日期:2015-01-15)

数接近整数,再一舍九入使各数化为整数,这里要求精确近似计算,不能四舍五入,否则得出错误结论。

3. 涉及弱酸(碱)电离的近似计算

一元弱酸 HA 的电离程度很小,计算时可将 HA 的平衡浓度看成是 HA 的起始浓度。

例 3  $c$  mol/L 一元弱酸 HA(电离平衡常数为  $K_a$ ) 溶液中  $c(\text{H}^+) = \underline{\hspace{2cm}}$ 。

解析 设  $c(\text{H}^+) = x$

	$\text{HA} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{A}^-$	
起始(mol/L)	$c$	$0 \quad 0$
平衡(mol/L)	$c - x \approx c$	$x \quad x$

$$K_a = \frac{x \times x}{c} \Rightarrow x = \sqrt{cK_a}$$

同理  $c$  mol/L 一元弱碱 BOH(电离平衡常数为  $K_b$ ) 溶液中  $c(\text{OH}^-) = \sqrt{cK_b}$ 。

4. 强酸溶液稀释时  $c(\text{H}^+)$  或 pH 的计算

强酸稀溶液稀释时,近似认为其体积具有加和性,即  $V_{\text{混}} = V_{\text{浓}} + V_{\text{水}}$ 。稀释至原来的  $n$  倍,  $V_{\text{混}} = nV_{\text{浓}}$ 。稀释后:

$$c(\text{H}^+)_{\text{溶}} = c(\text{H}^+)_{\text{酸}} + c(\text{H}^+)_{\text{水}}$$

当  $c(\text{H}^+)_{\text{酸}} \geq 10^{-6}$  mol/L 时

$$c(\text{H}^+)_{\text{溶}} \approx c(\text{H}^+)_{\text{酸}}$$

当  $c(\text{H}^+)_{\text{酸}} < 10^{-6}$  mol/L 时

$$c(\text{H}^+)_{\text{溶}} \approx c(\text{H}^+)_{\text{水}}$$

例 4 25℃ 时,把 pH = 4 的硫酸溶液稀释到原来的 100 倍、10000 倍,求其 pH。

解析 取 1 L 稀释 100 倍后:

$$c(\text{H}^+) = \frac{10^{-4} \text{ mol/L} \times 1 \text{ L}}{100 \times 1 \text{ L}} = 1 \times 10^{-6} \text{ mol/L}$$

$$\text{pH} = -\lg c(\text{H}^+) = -\lg 1 \times 10^{-6} = 6$$

取 1 L 稀释 10000 倍后:

错解一

$$c(\text{H}^+) = \frac{10^{-4} \text{ mol/L} \times 1 \text{ L}}{10000 \times 1 \text{ L}} = 1 \times 10^{-8} \text{ mol/L}$$

$$\text{pH} = -\lg c(\text{H}^+) = -\lg 1 \times 10^{-8} = 8$$

错因 忽略了  $c(\text{H}^+)_{\text{水}}$ 。

错解二

$$c(\text{H}^+)_{\text{酸}} = \frac{10^{-4} \text{ mol/L} \times 1 \text{ L}}{10000 \times 1 \text{ L}} = 1 \times 10^{-8} \text{ mol/L}$$

$$c(\text{H}^+)_{\text{溶}} = c(\text{H}^+)_{\text{酸}} + c(\text{H}^+)_{\text{水}}$$

$$= 1 \times 10^{-8} \text{ mol/L} + 1 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$$

$$= 1.1 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$$

错因 误认为  $c(\text{H}^+)_{\text{水}} = 10^{-7}$  mol/L,未考虑水的电离受抑制。

正解 设  $c(\text{H}^+)_{\text{水}}$  为  $x$ ,  $c(\text{H}^+)_{\text{溶}} = c(\text{H}^+)_{\text{酸}} + c(\text{H}^+)_{\text{水}} = 10^{-8} \text{ mol/L} + x$ 。

$$\text{由 } c(\text{H}^+)_{\text{溶}} \times c(\text{OH}^-)_{\text{溶}} = K_w \text{ 得}$$

$$(10^{-8} + x) \times x = 1 \times 10^{-14}$$

$$\text{解得 } x = 9.5 \times 10^{-8} \text{ mol/L}$$

$$\text{则 } c(\text{H}^+)_{\text{溶}} = c(\text{H}^+)_{\text{酸}} + c(\text{H}^+)_{\text{水}} = 10^{-8} \text{ mol/L} + 9.5 \times 10^{-8} \text{ mol/L} = 1.05 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$$

$$\text{pH} = -\lg c(\text{H}^+) = -\lg 1.05 \times 10^{-7} = 6.98$$

5. pH 相差 2 及以上的两种强酸溶液等体积混合后 pH 的计算

例 5 把 pH = 3 与 pH = 5 的两种盐酸等体积混合,求其 pH。

解析 pH = 3,  $c(\text{H}^+) = 10^{-3}$ ; pH = 5,  $c(\text{H}^+) = 10^{-5}$ 。 $c(\text{H}^+)$  前者是后者的 100 倍,近似处理:把后者视为水,即混合后相当于前者被稀释到原来的 2 倍。设各 1 L 混合:

$$c(\text{H}^+)_{\text{混}} = \frac{10^{-3} \text{ mol/L} \times 1 \text{ L}}{2 \times 1 \text{ L}} = 5 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$$

$$\text{pH}_{\text{混}} = -\lg c(\text{H}^+)_{\text{混}} = -\lg 5 \times 10^{-4} = 4 - \lg 5 \approx 4 - 0.7 = 3.3$$
。这就是公式  $\text{pH}_{\text{混}} = \text{pH}_{\text{小}} + 0.3$  的来历。

同理, pH 相差 2 及以上的两种强碱溶液等体积混合后,  $\text{pH}_{\text{混}} = \text{pH}_{\text{大}} - 0.3$ 。

二、化学计算中如何把握近似计算

1. 视题目要求确定是精确计算或是近似计算,若是近似计算,在计算过程中要尽量提高近似值的准确度。

2. 当两个静态数据相差无几时,计算时可以近似处理,如核素的相对原子质量与其质量数;元素的相对原子质量与其近似相对原子质量。

3. 涉及动态数据时,计算时要视其变化程度,若使计算结果与准确值相去甚远或使其性质发生质的变化时,要及时修正计算公式或计算方法。

如室温下,强碱溶液稀释后,若计算出  $\text{pH} < 7$ ,一定是错误的。肯定是没有考虑水的电离。稀释后:  $c(\text{OH}^-)_{\text{溶}} = c(\text{OH}^-)_{\text{碱}} + c(\text{OH}^-)_{\text{水}}$ ,当  $c(\text{OH}^-)_{\text{碱}} < 10^{-6}$  mol/L 时,要考虑  $c(\text{OH}^-)_{\text{水}}$ 。

(收稿日期: 2015-01-15)