

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНТЬЕ ПРИ ПЕРЕЧИСЛЕНИИ ИЗОМЕРНЫХ КЛАССОВ УГЛЕВОДОРОДОВ

Краснов В.Л. Email: Krasnov17114@scientifictext.ru

Краснов Владимир Львович – кандидат химических наук, доцент,
кафедра химической технологии,
Дзержинский политехнический институт (филиал)
Нижегородского государственного технического университета им. Р.Е. Алексева,
г. Дзержинск, Нижегородская область

Аннотация: выведена математическая формула для подсчета количества изомерных классов углеводородов. Классификация основана на общей химической формуле углеводородов, учитывающей коэффициент цикличности и ненасыщенности, который определяет количество изомерных классов углеводородов. При перечислении изомеров используется понятие антье – целой части действительного числа. Показано, что этот термин из теории вещественных чисел находит применение при решении задач органической химии. Полученные формулы дают обучающимся органической химии точный ответ на вопрос о многочисленности классов углеводородов.

Ключевые слова: классы органических веществ, молекулярная формула, коэффициент цикличности и ненасыщенности, изомерные классы углеводородов, антье.

THE USE OF ENTIER IN THE ENUMERATION OF THE ISOMERIC CLASSES OF HYDROCARBONS

Krasnov V.L.

Krasnov Vladimir Lvovich – Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor,
DEPARTMENT OF CHEMICAL TECHNOLOGY,
DZERZHINSKY POLYTECHNIC INSTITUTE (BRANCH)
NIZHNY NOVGOROD STATE TECHNICAL UNIVERSITY NAMED AFTER R.E. ALEKSEEV,
DZERZHINSK, NIZHNY NOVGOROD OBLAST

Abstract: derived a mathematical formula for counting the number of the isomeric classes of hydrocarbons. Classification based on General chemical formula of hydrocarbons, taking into account the coefficient of cyclicity and unsaturation, which determines the number of the isomeric classes of hydrocarbons. In the enumeration of isomers is used, the concept of entier – the integer part of a real number. It is shown that this term from the theory of real numbers finds application in solving problems of organic chemistry. The formulas give organic chemistry students an accurate answer to the question about the numerous classes of hydrocarbons.

Keywords: classes of organic substances, the molecular formula, the coefficient of cyclicity and unsaturation, isomeric classes of hydrocarbons, entier.

УДК 547

Развитие органической химии как самостоятельной науки, изучающей углеводороды и их производные, связывают обычно с многочисленностью органических соединений по сравнению с неорганическими. Однако при обучении органической химии часто обходят стороной вопрос точного перечисления различных классов углеводородов. На наш взгляд, классификация углеводородов обучающимися должна дать им четкий ответ на вопрос: «Сколько классов углеводородов существует?». Математической формулы, решающей эту простую задачу, до сих пор нет ни в одном учебнике органической химии. Вывод этой формулы мы предлагаем в данной работе.

Число атомов водорода m в формуле углеводорода C_nH_m всегда четное и зависит от показателя цикличности и ненасыщенности k для каждого класса углеводородов следующим образом: $m = 2(n - k + 1)$. Этот показатель является суммой числа имеющихся в молекуле циклов, двойных связей, а также удвоенного числа тройных связей [1, 2]. Число имеющихся в молекуле циклов (i) может принимать значения $0 \leq i \leq k$. Для ациклических углеводородов ($i=0$) коэффициент ненасыщенности k обозначает количество π -связей в структурной формуле углеводорода. Он может принимать значения $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ и т.д. Рассматривая ациклические углеводороды, легко убедиться, что увеличение на единицу четного коэффициента k не приводит к увеличению количества изомерных классов углеводородов, в то время как увеличение на единицу нечетного значения этого коэффициента приводит к увеличению на единицу количества изомерных классов углеводородов. Получаем ряд чисел $a = 1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5, \dots$ и т.д., подсчитывающий изомерные классы ациклических углеводородов при увеличении коэффициента ненасыщенности. Иллюстрацией получения данного ряда чисел может служить таблица 1, в которой

показано, как изменяется количество изомерных классов ациклических углеводородов (a) с увеличением количества π -связей в формуле углеводорода (k) от 0 до 9.

Таблица 1. Ациклические углеводороды

k	Формула	Ациклические углеводороды	a
0	C_nH_{2n+2}	Алканы.	1
1	C_nH_{2n}	Алкены.	1
2	C_nH_{2n-2}	Алкины. Алкадиены.	2
3	C_nH_{2n-4}	Алкенины. Алкатриены.	2
4	C_nH_{2n-6}	Алкадиины. Алкадиенины. Алкатетраены.	3
5	C_nH_{2n-8}	Алкапентаены. Алкатриенины. Алкенадиины.	3
6	C_nH_{2n-10}	Алкагексаены. Алкатетраенины. Алкадиенадиины. Алкатриины.	4
7	C_nH_{2n-12}	Алкагептаены. Алкапентаенины. Алкатриенадиины. Алкенаатриины.	4
8	C_nH_{2n-14}	Алкаоктаены. Алкатетраины. Алкадиенатриины. Алкагексаенины. Алкатетраенадиины.	5
9	C_nH_{2n-16}	Алканонаены. Алкагептаенины. Алкенаатетраины. Алкатриенаатриины. Алкапентаенадиины.	5

Для получения математической формулы выражающей зависимость количества изомерных классов ациклических углеводородов (a) от количества π -связей в формуле углеводорода (k) воспользуемся известным из теории вещественных чисел понятием антье (entier) – целой части действительного числа [3]. Антье числа x обозначается с помощью квадратных скобок: $[x]$ – это наибольшее целое число, не превосходящее число x . Следовательно, для $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, \dots$ антье половины этого коэффициента $[\frac{k}{2}] = 0, 0, 1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, \dots$ соответственно, что приводит к формуле (1), подсчитывающей количество (a) классов ациклических углеводородов $C_nH_{2(n-k+1)}$:

$$a = [\frac{k}{2}] + 1 \quad (1)$$

Для циклических углеводородов ($i \neq 0$) коэффициент k не может принимать значения меньше числа имеющихся в молекуле циклов (i). Поэтому для циклических углеводородов ($k-i$) = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, ... и, соответственно $[\frac{k-i}{2}] = 0, 0, 1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, \dots$, что приводит к аналогичному формуле (1) выражению (2) для количества классов циклических углеводородов (b_i), содержащих в своей структурной формуле один или несколько циклов ($i = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$):

$$b_i = [\frac{k-i}{2}] + 1 \quad (2)$$

Следует обратить внимание на систему подсчета количества циклов в полициклических ($i > 1$) и особенно в полиэдрических молекулах [4]. Циклы в структурных формулах подсчитываются по мере увеличения размера до тех пор, пока не будут учтены все связи между атомами углерода. При этом в полиэдрических молекулах число граней полиэдра на единицу больше числа циклов i . Примеры трех молекул этого типа приведены на рис. 1:

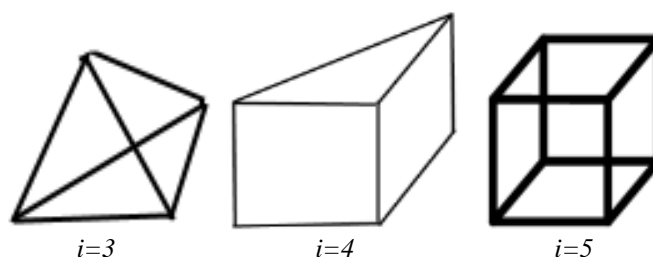


Рис. 1. Полиэдрические молекулы: тетраэдр C_4H_4 (трицикло [1,1,0,0^{2,4}] бутан), призма C_6H_6 (тетрацикло [2,2,0,0^{2,6},0^{3,5}] гексан, или бензол Ладенбурга), кубан C_8H_8 (пентацикло [4,2,0,0^{2,5},0^{3,8},0^{4,7}] октан)

Приведенные на рисунке молекулы построены из метиновых групп, поэтому имеют одинаковое соотношение углерода и водорода C_nH_n . Мы предлагаем называть молекулы, принадлежащие к различным классам органических веществ, но имеющие одинаковое относительное содержание элементов, органическими изократами [5, 6].

Объединяя формулы (1) и (2), получим формулу (3), подсчитывающую общее количество (c_k) изомерных классов углеводородов $C_nH_{2(n-k+1)}$ с определенным коэффициентом цикличности и ненасыщенности k :

$$c_k = a + \sum_{i=1}^{i=k} b_i = \sum_{i=0}^{i=k} ([\frac{k-i}{2}] + 1) \quad (3)$$

Результаты расчетов по формуле (3) для значений $0 \leq k \leq 9$ представлены в таблице (2):

Таблица 2. Количество классов (c_k) углеводородов (a -ациклические, b_1 -моноциклические, b_2 -бициклические, b_3 -трициклические и т.д.)

k	Формула	a	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5	b_6	b_7	b_8	b_9	c_k
0	C_nH_{2n+2}	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1
1	C_nH_{2n}	1	1	-	-	-	-	-	-	-	-	2
2	C_nH_{2n-2}	2	1	1	-	-	-	-	-	-	-	4
3	C_nH_{2n-4}	2	2	1	1	-	-	-	-	-	-	6
4	C_nH_{2n-6}	3	2	2	1	1	-	-	-	-	-	9
5	C_nH_{2n-8}	3	3	2	2	1	1	-	-	-	-	12
6	C_nH_{2n-10}	4	3	3	2	2	1	1	-	-	-	16
7	C_nH_{2n-12}	4	4	3	3	2	2	1	1	-	-	20
8	C_nH_{2n-14}	5	4	4	3	3	2	2	1	1	-	25
9	C_nH_{2n-16}	5	5	4	4	3	3	2	2	1	1	30

Легко убедиться, что значения количества изомерных классов углеводородов (c_k) подчиняются формуле (4):

$$c_k = \left(\left[\frac{k}{2}\right] + 1\right) \times \left(k - \left(\left[\frac{k}{2}\right] - 1\right)\right) \quad (4)$$

Таким образом, применение функции антье позволяет вывести формулу для подсчета количества изомерных классов углеводородов. Это первый опыт использования антье в органической химии может быть полезен при решении расчетных химических задач.

Формулу (4) можно упростить, если представить коэффициент k в виде ($k=2l$) для четных значений коэффициента цикличности и ненасыщенности ($k=0, 2, 4, 6, 8, \dots$) и выразить его в виде ($k=2l+1$) для нечетных значений коэффициента ($k=1, 3, 5, 7, 9, \dots$). Здесь $l=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$. Тогда для четных значений k , а именно для углеводородов, чью формулу можно записать как $C_nH_{2n+2-4l}$, антье $\left[\frac{k}{2}\right]=l$ и $(k - \left[\frac{k}{2}\right]) = l$, что позволяет привести формулу (4) к простому выражению (5):

$$c_k = (l + 1)^2 \quad (5)$$

Для нечетных значений коэффициента k , а именно для углеводородов, чью формулу можно записать как C_nH_{2n-4l} , так же, как и для четных значений k , антье $\left[\frac{k}{2}\right]=l$, но разность $(k - \left[\frac{k}{2}\right]) = l + 1$, что позволяет преобразовать формулу (4) к другому выражению (6):

$$c_k = (l + 1) \times (l + 2) \quad (6)$$

Данные таблицы (2) подтверждают, что формула (5) справедлива при $k=2l$, и формула (6) верна при значениях $k=2l+1$. Применение этих формул дает обучающимся органической химии ученикам и студентам точный ответ на вопрос о многочисленности классов углеводородов.

Список литературы / References

1. Миронов В.А., Янковский С.А. Спектроскопия в органической химии. Сборник задач: Учеб. пособие для вузов. М.:Химия, 1985. 232 с.
2. Краснов В.Л., Сахаров А.Н. Использование задачи подсчета структурных изомеров алканов при обучении студентов органической химии. Проблемы современной науки и образования, 2015. № 4 (34). С. 34-40.
3. Семенов И.Л. Антье и мантисса. Сборник задач с решениями. / Под ред. Е.В. Хорошиловой. М. ИПМ им М.В. Келдыша, 2015. 412 с.
4. Органическая химия. Задачи по общему курсу с решениями: учебное пособие: в 2 ч. / М.В. Ливанцов [и др.]; под ред. академика РАН Н.С. Зефирова. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. 714 с.
5. Краснов В.Л. Использование алгебраических формул для решения задачи установления химической формулы органического вещества. Проблемы современной науки и образования, 2017. № 12 (94). С. 15-21.
6. Краснов В.Л. Органические изократы. Альманах современной науки и образования. Изд-во ГРАМОТА, 2017. № 3 (117). С. 53-56.