

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ ФОРМУЛ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ УСТАНОВЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ ФОРМУЛЫ ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА

Краснов В.Л. Email: Krasnov1794@scientifictext.ru

*Краснов Владимир Львович – кандидат химических наук, доцент,
кафедра химической технологии,
Дзержинский политехнический институт (филиал)
Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексева,
г. Дзержинск, Нижегородская область*

Аннотация: показаны примеры решения школьных задач по органической химии, в которых требуется по данным элементного анализа установить структуру углеводорода или его производного. Для различных классов органических веществ выведены алгебраические формулы, обеспечивающие учащимся быстрое решение задачи. Вещества с одинаковым содержанием элементов и разной молекулярной массой названы изократами. Приводится общая формула углеводородов и кислородсодержащих и азотсодержащих производных, учитывающая коэффициент цикличности и ненасыщенности, на основании которой предлагаются алгебраические формулы определения углеродного и кислородного чисел органических молекул.

Ключевые слова: классы органических веществ, молекулярная формула, элементный анализ, алгебраическая формула, изократы.

THE USE OF ALGEBRAIC FORMULAS TO SOLVE THE PROBLEM OF ESTABLISHING CHEMICAL FORMULA OF ORGANIC MATTER Krasnov V.L.

*Krasnov Vladimir Lvovich - candidate of chemical Sciences, docent,
DEPARTMENT "CHEMICAL TECHNOLOGY",
DZERZHINSKY POLYTECHNIC INSTITUTE (BRANCH)
NIZHNY NOVGOROD STATE TECHNICAL UNIVERSITY NAMED AFTER R.E. ALEKSEEV,
DZERZHINSK, NIZHNY NOVGOROD OBLAST*

Abstract: shows examples of solving school tasks in organic chemistry, which is required according to elemental analysis to determine the structure of hydrocarbon or its derivative. For various classes of organic substances derived algebraic formulas, providing students with a quick solution. Substances with the same content of elements and different molecular weight called isocrate. Is the General formula of hydrocarbons and oxygen-containing and nitrogen-containing derivatives, taking into account the ratio of cyclical and unsaturation on the basis of which proposed algebraic formula to determine the carbon and oxygen numbers of organic molecules.

Keywords: classes of organic substances, the molecular formula, elemental analysis, algebraic formula, isocrate.

УДК 547

Задача установления молекулярной формулы углеводорода или его производного по данным элементного анализа является стандартным заданием, предлагаемым на уроках органической химии учащимся средних общеобразовательных школ и средних специальных учебных заведений. Подобные задания постоянно включаются в контрольно-измерительные материалы единого государственного экзамена по химии. Если в условии задачи содержится информация о молекулярной массе вещества, то решение обычно не вызывает затруднений даже при отсутствии предположений о классе органического соединения, формулу которого необходимо установить. Пусть это будут задачи первого типа. Ученикам, изучающим алгоритм решения таких задач, необходимо понять простые, но важные требования:

- 1) вести расчет на один моль вещества, если в задаче нет данных о массе вещества;
- 2) прежде всего, определять количество молей вещества, если в задаче есть данные о массе вещества.

При этом, естественно, ученик должен быть обучен не только правильному представлению о моле, как о количестве граммов вещества, численно равному относительной молекулярной массе, но и о смысле химической формулы молекулы, в которой нижний индекс у каждого элемента обозначает отношение количества молей атомов данного элемента к количеству молей вещества. Приведем решения двух задач первого типа, взятых из хорошо известного сборника задач по органической химии [1]. Обращаем внимание, что приводимый нами способ решения таких задач отличается от рекомендуемого автором задачника [1] и авторами учебника [2] традиционного подхода, использующего понятие о простейшей и истинной формулах, связанных определенным коэффициентом кратности.

Задача 1. Определить молекулярную формулу вещества, если известны массовые доли углерода-40,0%, водорода-6,67%, кислорода-53,33%. Относительная плотность паров этого вещества по диоксиду углерода (IV) равна 4,091.

Дано: $\omega(C) = 40,0\%$; $\omega(H) = 6,67\%$; $\omega(O) = 53,33\%$. $D(CO_2) = 4,091$. Найдти формулу вещества $C_n H_m O_x$: $n = ?$ $m = ?$ $x = ?$

Решение: 1) $\mu(C_n H_m O_x) = \mu(CO_2) \times D(CO_2) = 44 \text{ г/моль} \times 4,091 = 180 \text{ г/моль}$.

2) Расчет массы (m) элементов ведем на 1 моль вещества:

Количество вещества: $\nu(C_n H_m O_x) = 1 \text{ моль}$. $m(C_n H_m O_x) = \nu \times \mu = 180 \text{ г}$.

3) $m(C) = m(C_n H_m O_x) \times \omega(C)/100 = 180 \times 40,0/100 = 72 \text{ г}$.

4) $m(H) = m(C_n H_m O_x) \times \omega(H)/100 = 180 \times 6,67/100 = 12 \text{ г}$.

5) $m(O) = m(C_n H_m O_x) \times \omega(O)/100 = 180 \times 53,33/100 = 96 \text{ г}$.

6) $\nu(C) = m(C)/12 \text{ г/моль} = 72/12 = 6 \text{ моль}$.

7) $\nu(H) = m(H)/1 \text{ г/моль} = 12 \text{ моль}$.

8) $\nu(O) = m(O)/16 \text{ г/моль} = 96/16 = 6 \text{ моль}$.

9) $n = \nu(C) / \nu(C_n H_m O_x) = 6 \text{ моль} / 1 \text{ моль} = 6$.

10) $m = \nu(H) / \nu(C_n H_m O_x) = 12 \text{ моль} / 1 \text{ моль} = 12$.

11) $x = \nu(O) / \nu(C_n H_m O_x) = 6 \text{ моль} / 1 \text{ моль} = 6$.

Ответ: $C_6 H_{12} O_6$.

Задача 2. При сгорании 10,5 органического вещества получили 16,8 л (н.у.) диоксида углерода (IV) и 13,5 г воды. Плотность этого вещества при н.у. равна 1,8755 г/л. Определить молекулярную формулу вещества.

Дано: $m(\text{в-ва}) = 10,5 \text{ г}$; $\rho(\text{н.у.}) = 1,8755 \text{ г/л}$; $V(CO_2) = 16,8 \text{ л(н.у.)}$; $m(H_2O) = 13,5 \text{ г}$;

Найти формулу вещества $C_n H_m O_x$: $n = ?$ $m = ?$ $x = ?$

Решение: 1) $\mu(C_n H_m O_x) = \rho(\text{н.у., г/л}) \times 22,4 \text{ л/моль} = 1,8755 \times 22,4 = 42 \text{ г/моль}$.

2) $\nu(C_n H_m O_x) = m(C_n H_m O_x) / \mu(C_n H_m O_x) = 10,5 \text{ г} / 42 \text{ г/моль} = 0,25 \text{ моль}$.

3) $\nu(CO_2) = V(CO_2), \text{ л(н.у.)} / 22,4 \text{ л/моль} = 16,8 / 22,4 = 0,75 \text{ моль}$.

4) $\nu(C) = \nu(CO_2) = 0,75 \text{ моль}$.

5) $\nu(H_2O) = m(H_2O), \text{ г} / 18 \text{ г/моль} = 13,5 / 18 = 0,75 \text{ моль}$.

6) $\nu(H) = 2 \times \nu(H_2O) = 2 \times 0,75 = 1,5 \text{ моль}$.

7) $n = \nu(C) / \nu(C_n H_m O_x) = 0,75 \text{ моль} / 0,25 \text{ моль} = 3$.

8) $m = \nu(H) / \nu(C_n H_m O_x) = 1,5 \text{ моль} / 0,25 \text{ моль} = 6$.

9) $\mu(C_n H_m) = \mu(C_3 H_6) = 12 \times 3 + 6 = 42 \text{ г/моль}$.

10) $x = (\mu(C_n H_m O_x) - \mu(C_n H_m)) / 16 \text{ г/моль} = (42 - 42) / 16 = 0$.

Ответ: $C_3 H_6$.

Если в формулу соединения входят азот или галоген, то при сгорании вещества образуются соответственно молекулярный азот (N_2) или галогеноводород ($HHal$), и при расчетах используют следующие соотношения: $\nu(N) = 2 \times \nu(N_2)$; $\nu(H) = 2 \times \nu(H_2O) + \nu(HHal)$.

В последние годы в контрольно-измерительных материалах единого государственного экзамена по химии встречаются задачи установления молекулярной формулы органического вещества, в которых отсутствует информация о молекулярной массе вещества. Вместо этого явно или косвенно указывается принадлежность вещества к определенному классу органических соединений. Пусть это будут задачи второго типа. Разберем здесь оригинальный способ решения таких задач, основанный на использовании алгебраических формул, получаемых при анализе массовых соотношений элементов, определяемых общей формулой класса органического вещества. Поскольку все органические вещества представляют собой углеводороды или их производные, рассмотрим сначала углеводороды. Принадлежность вещества к углеводородам $C_n H_m$ может быть установлена по условию задачи, если данные элементного анализа указывают справедливость любого из двух следующих уравнений: $\omega(C) + \omega(H) = 100\%$; $m(C) + m(H) = m(C_n H_m)$;

Число атомов водорода m в формуле углеводорода $C_n H_m$ 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 [3]. Для алкенов и изомерных им циклоалканов $k=1$. Формула $C_n H_{2n}$ соответствует молярной массе $\mu(C_n H_{2n}) = 14n \text{ г/моль}$, что приводит к одинаковому элементному анализу всех представителей этих классов: $\omega(C) = 85,714\%$;

$\omega(H) = 14,286\%$, так как соотношение масс углерода и водорода в этих молекулах одинаково и равно $m(C):m(H) = 12n:2n = 6:1$. Для алканов показатель $k=0$. Формула алканов $C_n H_{2n+2}$ соответствует молярной массе $\mu(C_n H_{2n+2}) = (14n + 2) \text{ г/моль}$, при которой содержание углерода и водорода ($\omega(C) < 85,714\%$; $\omega(H) > 14,286\%$), зависит от углеродного числа n следующим образом: $\omega(C) = 600n / (7n+1)$; $\omega(H) = (100n+100) / (7n+1)$; Если заметить, что $(7\omega(H)-100) = 600/(7n+1)$, то эту зависимость легко преобразовать

в алгебраическую формулу (1), которая может быть использована при решении задач второго типа для установления брутто-формулы алкана:

$$n = \frac{\omega(C)}{7\omega(H)-100}; \quad (k=0) \quad (1)$$

Для углеводородов с показателем $k=2$ общей формулы C_nH_{2n-2} , которой соответствуют четыре изомерных класса (алкадиены, алкины, циклоалкены, бициклоалканы) молярная масса $\mu(C_nH_{2n-2})=(14n-2)$ г/моль. Для углеводородов с формулой C_nH_{2n-2} зависимость содержания углерода и водорода ($\omega(C) > 85,714\%; \omega(H) < 14,286\%$) от углеродного числа n показывают выражения: $\omega(C) = 600n / (7n-1)$; $\omega(H) = (100n-100) / (7n-1)$; $(100-7\omega(H)) = 600/(7n-1)$. Из этих выражений простым преобразованием получается приведенная ниже алгебраическая формула (2) для расчета углеродного числа n соединений C_nH_{2n-2} по данным элементного анализа.

$$n = \frac{\omega(C)}{100-7\omega(H)}; \quad (k=2) \quad (2)$$

Для всех углеводородов с общей формулой $C_nH_{2(n-k+1)}$ при $k \neq 1$ подобным образом выводится общая алгебраическая формула (3) расчета углеродного числа n углеводородов, которая может быть использована при решении задач второго типа, когда данные о молярной массе углеводорода отсутствуют.

$$n = \frac{(k-1)\omega(C)}{100-7\omega(H)}; \quad (k \neq 1) \quad (3)$$

Если вместо массовых долей в условии задачи приводятся данные о массах углеводорода и продуктов его сгорания, то вместо $\omega(C)$ и $\omega(H)$ в эту формулу (IV) подставляют массы (в граммах) $m(C_nH_m)$, $m(C)$, $m(H)$:

$$n = \frac{(k-1)m(C)}{m(C_nH_m)-7m(H)} = \frac{(k-1)m(C)}{m(C)-6m(H)}; \quad (k \neq 1) \quad (4)$$

Последняя формула может быть упрощена введением параметра x , равного отношению масс углерода и водорода. Для алканов C_nH_{2n+2} ($k=0$) этот параметр всегда меньше шести ($x = m(C)/m(H) = \omega(C)/\omega(H) < 6$), для алкенов и циклоалканов C_nH_{2n} ($k=1$) этот параметр равен шести ($x=6$), для всех углеводородов с общей формулой $C_nH_{2n-2(k-1)}$ при $k > 1$ этот параметр больше шести ($x > 6$), что показано в следующих формулах (5),(6),(7):

$$n = \frac{x}{6-x}; \quad (k=0) \quad (5)$$

$$n = \frac{x}{x-6}; \quad (k=2) \quad (6)$$

$$n = \frac{x(k-1)}{x-6}; \quad (k > 2) \quad (7)$$

Из приведенных формул следует, что в разных классах углеводородов $C_nH_{2(n-k+1)}$, характеризующихся показателем $k \geq 2$, имеются вещества с одинаковым содержанием углерода и водорода. Отношение углеродных чисел таких одинаковых по элементному анализу веществ равно отношению разностей $(k-1)$, которые легко определить по молекулярным формулам этих веществ. Эти соединения принадлежат к различным изоэологическим рядам, так как содержат различное количество атомов углерода. Они не являются изомерами, так как имеют различные брутто - формулы и молекулярные массы. Это не олигомеры или полимеры, так как их структурные фрагменты могут быть совершенно различными. Их формулы отличаются показателем цикличности и ненасыщенности k , однако их качественный и количественный элементный состав одинаков. Назовем такие вещества *изократы*. Наименьшее углеродное число соответствует изократу, имеющему формулу C_nH_{2n-2} , для которого $k=2$. Углеродные числа всех изократов этого вещества равны произведению $n \times (k-1)$, так как для него $k-1=1$. Так, например изократами ацетилен C_2H_2 являются аннулены $C_{2m}H_{2m}$ – моноциклические полиеновые углеводороды, содержащие в цикле m сопряженных двойных связей ($m = k-1$), в число которых входит бензол C_6H_6 ($k=4$). Изократами пропина C_3H_4 ($k=2$) являются циклогексадиен C_6H_8 ($k=3$) и ароматический углеводород мезитилен C_9H_{12} ($k=4$). Заметим, что молекулярные формулы изократов могут не быть кратны друг другу, имея тем не менее «наименьшего общего» изократа с формулой C_nH_{2n-2} .

Алканы не имеют изомеров, все алкены и циклоалканы имеют одинаковый элементный состав, который невозможен для углеводородов, у которых показатель цикличности и ненасыщенности $k \neq 1$. Отношение масс углерода и водорода (x) можно определить из данных в условии задачи масс углекислого газа и воды, полученных при сгорании органического соединения, если только это не галогенопроизводное. Действительно, это отношение можно представить следующим образом: $x = m(C)/m(H) = (m(CO_2) \times 12/44) / (m(H_2O) \times 2/18) = (27 m(CO_2)) / (11 m(H_2O))$.

Приведем решения предлагаемым нами способом с использованием алгебраических формул двух задач второго типа, касающихся установления формул углеводородов, взятых из учебника [2] и контрольно-измерительных материалов единого государственного экзамена по химии:

Задача 3. Определить молекулярную формулу углеводорода, массовая доля углерода в котором составляет 84,21%.

Дано: $\omega(C) = 84,21\%$;

Найти формулу углеводорода $C_n H_m$: $n = ? m = ?$

Решение: 1) $\omega(H) = 100 - \omega(C) = 15,79\%$

2) $\omega(H) > 14,286\%$, значит углеводород – алкан $C_n H_{2n+2}$.

3) $x = m(C)/m(H) = \omega(C)/\omega(H) = 84,21/15,79 = 5,333$

4) Формула, выведенная для алканов в данной статье:

$$n = \frac{x}{6-x} = \frac{5,333}{6-5,333} = \frac{5,333}{0,667} = 8$$

5) $m = 2n+2 = 2 \times 8 + 2 = 18$

Ответ: $C_8 H_{18}$

Задача 4. При сгорании 37,8 г нециклического органического соединения получили 123,2 г углекислого газа и 37,8 г воды. Известно, что в результате присоединения 1 моль брома к 1 моль этого вещества преимущественно образуется соединение, содержащее атомы брома, связанные с первичными атомами углерода. Произведите вычисления, необходимые для установления молекулярной формулы органического вещества, запишите молекулярную и структурную формулы вещества и уравнение реакции 1 моль этого вещества с 1 моль брома.

Дано: $m(\text{в-ва}) = 37,8 \text{ г}$; $m(CO_2) = 123,2 \text{ г}$; $m(H_2O) = 37,8 \text{ г}$; $v(\text{в-ва}): v(Br_2) = 1:1$

Найти формулу вещества $C_n H_m$: $n = ? m = ?$ Реакция с $Br_2 = ?$

Решение: 1) $v(CO_2) = m(CO_2)/\mu(CO_2) = 123,2 \text{ г}/44 \text{ г/моль} = 2,8 \text{ моль}$.

2) $v(C) = v(CO_2) = 2,8 \text{ моль}$.

3) $m(C) = 12 \times v(C) = 12 \times 2,8 = 33,6 \text{ г}$.

4) $v(H_2O) = m(H_2O)/\mu(H_2O) = 37,8 \text{ г}/18 = 2,1 \text{ моль}$.

5) $v(H) = 2 \times v(H_2O) = 2 \times 2,1 = 4,2 \text{ моль}$.

6) $m(H) = 1 \times v(H) = 1 \times 4,2 = 4,2 \text{ г}$

7) $m(C_n H_m) = m(C) + m(H) = 33,6 \text{ г} + 4,2 \text{ г} = 37,8 \text{ г} = m(\text{в-ва})$

8) Вещество – углеводород $C_n H_m$

$x = m(C)/m(H) = 33,6/4,2 = 8 > 6$. Значит $k \geq 2$. Пусть $k=2$. Тогда $m = 2n - 2$.

9) Формула, выведенная для углеводородов $C_n H_{2n-2}$ в данной статье:

$$n = \frac{x}{x-6} = \frac{8}{8-6} = 4$$

10) $m = 2n - 2 = 2 \times 4 - 2 = 6$ (изомеры с $k > 2$ не рассматриваются)

Ответ: $C_4 H_6$. Такую формулу имеют следующие изомерные нециклические соединения: бутин-1, бутин-2, бутadiен-1,2, бутadiен-1,3. Присоединение двух атомов брома к двум CH_2 -группам возможно только для бутadiена-1,3 в результате 1,4-присоединения 1 моль брома.

Ответ: $CH_2 = CH - CH = CH_2 + Br_2 = Br - CH_2 - CH = CH - CH_2 - Br$

Если при решении данной задачи не отказаться от рассмотрения изомеров, то можно найти и другие ответы. Действительно, пусть $k=3$, что соответствует, например, циклоалкадиенам или алкатриенам $C_n H_{2n-4}$. Тогда для искомого соединения углеродное число n удваивается:

$$n = \frac{2x}{x-6} = \frac{2 \times 8}{8-6} = 8$$

$$m = 2n - 4 = 2 \times 8 - 4 = 12$$

Среди структурных изомеров, соответствующих формуле $C_8 H_{12}$ легко найти углеводород, например, 1,2-диметиленциклогексан, способный вступать в реакцию 1,4-присоединения 1 моля брома с образованием двух групп $-CH_2-Br$. При $k=4$ получаем:

$$n = \frac{3x}{x-6} = \frac{3 \times 8}{8-6} = 12$$

$$m = 2n - 6 = 2 \times 12 - 6 = 18$$

Из алкатетраенов $C_{12}H_{18}$ условиям задачи удовлетворяет, например, 2,7-диметил-3,6-диметиленоктадиен-1,7, что видно из приведенных на рисунке 1 структурных формул выбранных изомеров бутадиена.

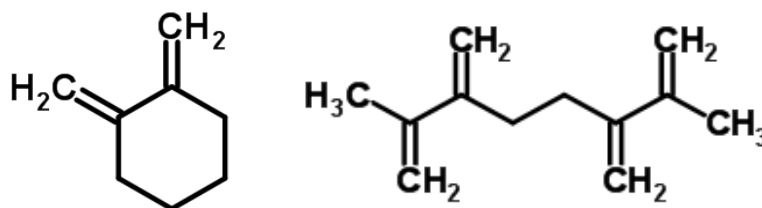


Рис. 1. Изокрыты бутадиена: 1,2-диметиленциклогексан и 2,7-диметил-3,6-диметиленоктадиен-1,7

Понятие об изокрытах не ограничивается разнообразными возможностями процесса олигомеризации и может учитываться при ознакомлении с такими разделами органической химии, как химия терпенов [4]. Многие терпены являются изокрытами изопрена C_5H_8 , гомолога бутадиена ($k=2$). Соответствующая этим соединениям обшая формула $C_{5(k-1)}H_{8(k-1)}$ в зависимости от значения показателя цикличности и ненасыщенности k приводит к монотерпенам $C_{10}H_{16}$ при $k=3$, сесквитерпенам $C_{15}H_{24}$ при $k=4$, дитерпенам $C_{20}H_{32}$ при $k=5$, тритерпенам $C_{30}H_{48}$ при $k=7$.

Рассмотрим теперь особенности решения задач на установление молекулярных формул при неизвестной молекулярной массе для производных углеводородов. Докажем сначала, что полученные для углеводородов алгебраические выражения зависимости массовых долей углерода и водорода от углеродного числа могут использоваться при поиске формул кислородсодержащих производных алканов $C_n H_{2n+2} O_m$ –одноатомных и многоатомных спиртов и простых эфиров ($k=0$). Формула $C_n H_{2n+2} O_m$ соответствует молярной массе $\mu=(14n+16m+2)$ г/моль, при которой содержание углерода и водорода выражается следующим образом: $\omega(C) = 600n / (7n+8m+1)$; $\omega(H) = (100n+100) / (7n+8m+1)$; Если использовать параметр x , равный отношению масс углерода и водорода, то для кислородсодержащих производных алканов $C_n H_{2n+2} O_m$ получаем уравнение: $x = m(C) / m(H) = \omega(C) / \omega(H) = \frac{6n}{n+1}$, которое равносильно формуле (V), выведенной для алканов ($x < 6$) в этой статье:

$$n = \frac{x}{6-x}; \quad (k=0) \quad (5)$$

Несмотря на то, что содержание кислорода $\omega(O)$ в веществе при элементном анализе чаще всего не определяется, оно может быть вычислено из тождества $\omega(C) + \omega(H) + \omega(O) = 100\%$. Учитывая, что содержание кислорода $\omega(O) = 800m / (7n+8m+1)$, можно для определения кислородного числа m использовать параметр $y = \omega(O) / \omega(H) = \frac{8m}{n+1}$:

$$m = 0,125 y (n+1) \quad (8)$$

Для формулы $C_n H_{2n+2} O_m$ справедливы также следующие соотношения:

$$n + 1 = \frac{6}{6-x}; \quad m = \frac{0,75y}{6-x}; \quad (9)$$

Перечисление структурных изомеров алканов и их производных осуществляется разбиением полученной молекулярной формулы на радикалы [5]. Если радикалы соединяются с карбонильной ($C=O$), карбоксильной ($COOH$) или сложноэфирной (COO) функциональными группами, то формула получающихся кислородсодержащих производных алканов – альдегидов, кетонов, монокарбоновых кислот и их сложных эфиров $C_n H_{2n} O_m$ может принимать различные значения кислородного числа m при замещении атомов водорода гидроксид- или алкоксигруппами также как и для изомерных им одноатомных и многоатомных циклоалканолов или алкенолов и их простых эфиров. Для всех этих соединений показатель цикличности и ненасыщенности $k=1$, что соответствует постоянному значению параметра x , равного отношению масс углерода и водорода, $x = m(C) / m(H) = \omega(C) / \omega(H) = 6$. Учитывая, что отношение содержания кислорода $\omega(O) = 800m / (7n+8m) = 100 - 7\omega(H)$ и водорода $\omega(H) = 100n / (7n+8m)$ для соединений $C_n H_{2n} O_m$ можно представить в виде уравнения $y = \omega(O) / \omega(H) = (100 - 7\omega(H)) / \omega(H) = \frac{8m}{n}$, получаем алгебраическую формулу (10) для определения отношения углеродного и кислородного чисел (n/m):

$$\frac{n}{m} = \frac{8\omega(H)}{100-7\omega(H)} = \frac{8m(H)}{m(C_nH_{2n}O_m)-7m(H)} = \frac{4\omega(C)}{3\omega(O)} \quad (k=1) \quad (10)$$

Для монокарбонильных соединений – альдегидов и кетонов $m=1$, для монокарбоновых кислот и их сложных эфиров $m=2$, для оксикислот и их эфиров $m=3$ и т.д. Для моносахаридов $m = n$, отношение $n/m = 1$. Это означает, что все моносахариды общей формулы $C_nH_{2n}O_n$ имеют один и тот же элементный анализ: $\omega(H)=100/15=6,67\%$. $\omega(C) = 6 \omega(H) = 40,0\%$; $\omega(O) = 100 - 7\omega(H) = 53,33\%$. Примером такого соединения является глюкоза, данные элементного анализа которой приведены в условии задачи 1. Полученная формула предсказывает также существование изократов, имеющих одинаковый элементный анализ, для соединений $C_nH_{2n}O_m$, отличающихся значениями кислородного числа m , каждому карбонильному соединению найдется изократная карбоновая кислота или сложный эфир, имеющие в два раза больше атомов углерода, оксикислота или ее эфир, содержащие в три раза больше атомов углерода и т.д. Например, в ацетоне C_3H_6O и капроновой кислоте $C_6H_{12}O_2$ значение отношения n/m одинаково ($n/m=3$), значит исходя из приведенной формулы: $\omega(H)=300/29=10,03\%$. $\omega(C) = 6 \omega(H) = 60,18\%$; $\omega(O) = 29,79\%$. Кислородсодержащим органическим соединениям с показателем цикличности и ненасыщенности $k=2$ соответствует формула $C_nH_{2n-2}O_m$. Это циклические и ненасыщенные альдегиды, кетоны и карбоновые кислоты, а также не содержащие циклов и кратных углерод-углеродных связей диальдегиды, дикетоны, дикарбоновые кислоты, оксокислоты, их гидроксиды или алкоксипроизводные, или гидроксипроизводные бициклоалканов, циклоалкенов, алкадиенов или алкинов и их эфиры. Формула $C_nH_{2n-2}O_m$ соответствует молярной массе $\mu=(14n+16m-2)$ г/моль, при которой содержание углерода и водорода выражается следующим образом: $\omega(C) = 600n / (7n+8m-1)$; $\omega(H) = (100n-100) / (7n+8m-1)$; Если использовать параметр x , равный отношению масс углерода и водорода, то также как и для углеводородов C_nH_{2n-2} получаем значение $x > 6$ которое соответствует уравнению $x = m(C) / m(H) = \omega(C) / \omega(H) = \frac{6n}{n-1}$, равносильному алгебраическим формулам (11):

$$n = \frac{x}{x-6}; \quad n-1 = \frac{6}{x-6}; \quad (k=2) \quad (11)$$

Учитывая, что содержание кислорода выражается следующим образом $\omega(O) = 800m / (7n+8m-1)$, можно для определения кислородного числа m в формуле $C_nH_{2n-2}O_m$ использовать параметр $y = \omega(O) / \omega(H) = \frac{8m}{n-1}$:

$$m = 0,125 y (n-1) \quad (k=2) \quad (12)$$

Для формулы $C_nH_{2n-2}O_m$ справедливо также следующее соотношение:

$$m = \frac{0,75y}{x-6} \quad (k=2) \quad (13)$$

Обобщая выведенные формулы для определения углеродного (n) и кислородного (m) чисел всех остальных многочисленных классов кислородсодержащих соединений с показателем цикличности и ненасыщенности $k \geq 2$, к которым относятся, например, фенолы и другие ароматические кислородсодержащие соединения, используем общую химическую формулу кислородсодержащих соединений $C_nH_{2(n-k+1)}O_m$.

Для параметров $x = \omega(C) / \omega(H)$ и $y = \omega(O) / \omega(H)$ получаем общие для всех кислородсодержащих соединений уравнения (14):

$$x = \frac{6n}{n-k+1}; \quad y = \frac{8m}{n-k+1} \quad (14)$$

Эти уравнения равносильны алгебраическим формулам (15), которые могут использоваться для решения задачи установления формулы кислородсодержащего органического соединения при $k \neq 1$:

$$n = \frac{x(k-1)}{x-6}; \quad (k \neq 1)$$

$$m = 0,125 y (n - k + 1) \quad (15)$$

$$m = \frac{0,75y}{x-6} (k-1) \quad (k \neq 1)$$

Аналогично решаются задачи нахождения формул азотсодержащих соединений, если известен класс вещества. Например, насыщенные амины ($k=0$) имеют формулу $C_n H_{2n+3} N$. Следовательно, молярная масса

$$\mu = (14n+17) \text{ г/моль}; \quad \omega(C) = 1200n / (14n+17); \quad \omega(H) = (200n+300) / (14n+17).$$

Тогда для аминов $C_n H_{2n+3} N$ получаем уравнение (16):

$$x = m(C) / m(H) = \omega(C) / \omega(H) = \frac{12n}{2n+3} \quad (16),$$

Это уравнение равносильно алгебраической формуле (17) для определения углеродного числа (n), применение которой приводит к решению данной задачи:

$$n = \frac{1,5x}{6-x}; \quad (k=0) \quad (17)$$

Подобным образом в общем виде решается задача нахождения формулы и для представителей других классов органических веществ. Например, брутто-формула нитроалканов и аминокислот $C_n H_{2n+1} NO_2$.

$$x = m(C) / m(H) = \omega(C) / \omega(H) = \frac{12n}{2n+1} \quad (18)$$

$$n = \frac{0,5x}{6-x}; \quad (k=1) \quad (19)$$

Для соединений, содержащих один атом азота $C_n H_{2(n-k+1,5)} NO_m$ получаем уравнения:

$$x = \frac{6n}{n-k+1,5}; \quad y = \frac{8m}{n-k+1,5} \quad (20)$$

Эти уравнения равносильны алгебраическим формулам (21):

$$n = \frac{x(k-1,5)}{x-6};$$

(21)

$$m = 0,125 y (n - k + 1,5)$$

Для соединений, содержащих два атома азота $C_n H_{2(n-k+2)} N_2 O_m$ получаем уравнения (22):

$$x = \frac{6n}{n-k+2}; \quad y = \frac{8m}{n-k+2} \quad (22)$$

Эти уравнения равносильны алгебраическим формулам (23):

$$n = \frac{x(k-2)}{x-6};$$

(23)

$$m = 0,125 y (n - k + 2)$$

Для соединений, содержащих r атомов азота $C_n H_{2(n-k+1+0,5r)} N_r O_m$ получаем уравнения (24):

$$n = \frac{x(k-1-0,5r)}{x-6};$$

(24)

$$m = 0,125 y (n - k + 1 + 0,5r)$$

Количество атомов азота в соединении оценивают по количеству образующегося при сгорании вещества молекулярного азота.

Список литературы / References

1. *Маршанова Г.Л.* Сборник задач по органической химии. 10 - 11 класс. М.: «Издат-школа», 2000. 80 с.
2. *Новошинский И.И., Новошинская Н.С.* Органическая химия. 11 класс. Учебник для общеобразовательных учреждений, профильный уровень. 2-е изд. М.: ООО «ГИД Русское слово-РС», 2008. 352 с.
3. *Мионов В.А., Янковский С.А.* Спектроскопия в органической химии. Сборник задач: Учеб. пособие для вузов. М.: Химия, 1985. 232 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., 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.