

确定有机物分子式的几种巧妙方法

安徽省灵璧县黄湾中学 234213 华雪莹

在学习有机化学的过程中,我们经常会遇到有机物分子式的确定问题。对于此类问题只要我们能够灵活地运用所学的知识,便可快速、准确、巧妙地确定。下面举例说明,希望同学们能够从中受到有益的启示。

一、直接求分子式

此法是根据相对分子质量,直接求出 1 个有机物分子中所含各原子个数以确定其分子式。

例 1 减弱“温室效应”的有效措施之一是大量的植树造林。绿色植物在叶绿素存在下的光合作用是完成二氧化碳循环的重要一环,已知叶绿素的相对分子质量小于 900,其分子中含 C 为 73.8% (质量分数,下同)、含 H 为 8.3%、含 O 为 8.9%,其余为 Mg。试确定叶绿素的分子式。

解析 镁元素的质量分数为 $1 - 73.8\% - 8.3\% - 8.9\% = 2.7\%$,因为镁的质量分数最小,但相对原子质量却最大,所以叶绿素分子中镁原子个数最少。因为 $900 \times 2.7\% = 24.3$,所以 1 个叶绿素分子中只有 1 个镁原子,即 $M_r(\text{叶绿素}) = \frac{24}{2.7\%} = 889$,所以 1 个叶绿素分子中所含碳原子个数为 $\frac{889 \times 73.8\%}{12} = 55$;同理求出 1 个叶绿素分子中所含 H、O、N 原子的个数依次为 74、5、4。故叶绿素的分子式为 $C_{55}H_{74}O_5N_4Mg$ 。

二、先求实验式再求分子式

此法是根据题给条件求出实验式,再结合相

对分子质量或有机物的结构特点,进而确定其分子式。

例 2 A 是一种含碳、氢、氧三种元素的有机化合物,已知 A 中碳的质量分数为 44.1%,氢的质量分数为 8.82%。A 只含一种官能团,且每个碳原子上最多只连一个官能团,与乙酸发生酯化反应,但不能在相邻碳原子上发生消去反应。请写出 A 的分子式。

解析 A 中氧元素的质量分数为 $1 - 44.1\% - 8.82\% = 47.08\%$, $N(C) : N(H) : N(O) = (44.1\% \div 12) : (8.82\% \div 1) : (47.08\% \div 16) = 5 : 12 : 4$,所以 A 的实验式为 $C_5H_{12}O_4$,因为实验式中 H 原子已达饱和,所以 A 的分子式为 $C_5H_{12}O_4$ 。

三、列方程组求分子式

此法是先设有机物的分子式为 $C_xH_yO_z$ 或 $C_xH_yO_z$,或根据题目分析出符合条件的物质的分子通式,再通过燃烧方程式或其它方程式列出关于 x, y, z 的方程组,进而求出分子式。

例 3 将含 C、H、O 的有机物 3.24 mg 装入元素分析装置,通入足量的 O_2 使它完全燃烧,将生成的气体依次通过盛氯化钙的管 A 和盛碱石灰的管 B,测得 A 管质量增加了 2.16 mg, B 管质量增加了 9.24 mg。已知该有机物的相对分子质量为 108,试确定该化合物的分子式。

解析 设该化合物的分子式为 $C_xH_yO_z$,根据

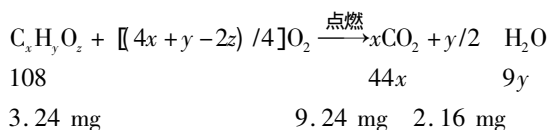
► 可求出通入 SO_2 时的浓度商 $Q = \frac{(py)^2}{(mx)^2 \cdot ny} = \frac{y}{x^2} \cdot \frac{p^2}{m^2 \cdot n} = \frac{y}{x^2} K$ (K 为平衡常数)。由于 $\frac{y}{x^2}$ 一定小于 1,所以 $Q < K$,则平衡一定正向移动,使 SO_3 的物质的量增大。

答案: A; A。

小结 通过对以上例题的分析可知,向恒温

恒压下的平衡体系中通入一种反应物,平衡不一定向正反应方向移动。通过对以上例题的分析可以看出,恒压时向平衡体系中通入一种反应物,平衡的移动方向取决于两个因素:一是何种物质的物质的量发生了改变,二是与方程式中反应物、生成物的化学计量数有关。

(收稿日期: 2013-09-13)



$$\text{则有} \begin{cases} \frac{108}{3.24} = \frac{44x}{9.24} = \frac{9y}{2.16} \\ 12x + y + 16z = 108 \end{cases}$$

解之得: $x = 7, y = 8, z = 1$, 所以该化合物的分子式为 C_7H_8O 。

四、利用除法运算求分子式

例 4 有两种烃其相对分子质量都是 128, 其中 A 易升华, 试确定 A、B 的分子式。

解析 因为 A、B 都为烃, 用 128 除以 14 (即“ CH_2 ”的式量) 商 9 余 2, 故其中一种烃的分子式为 C_9H_{20} ; 用 128 除以 12 商 10 余 8, 故另一种烃的分子式为 $C_{10}H_8$ 。又因为 A 容易升华为气体, 所以 A 的分子式为 $C_{10}H_8$, B 的分子式为 C_9H_{20} 。

五、利用假设法求分子式

此法是根据题意对所给有机物的分子式进行大胆假设, 再代入题目进行验证。

例 5 某一元羧酸 A, 含碳的质量分数为 50.0%, 氢气、溴、溴化氢都可以与 A 发生加成反应, 试确定 A 的分子式。

解析 因 A 是一元羧酸, 则 A 的结构中含 1 个 $-COOH$, A 能与氢气、溴、溴化氢发生加成反应, 故 A 分子中含有碳碳不饱和键。含碳碳不饱和键的最简单满足上述条件的化合物为丙烯酸和丙炔酸, 经验证只有丙烯酸中含碳质量分数为 50%, 所以 A 为丙烯酸, 分子式为 $C_3H_4O_2$ 。

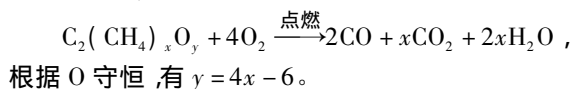
六、采用讨论的方法求分子式

例 6 有机物 A 是烃或烃的含氧衍生物, 其分子中碳原子数少于 5, 取 0.05 mol A 在 0.2 mol O_2 燃烧, 在 $101^\circ C$ 和 $1.01 \times 10^5 Pa$ 的条件下, 将生成的混合气体依次通过足量的无水 $CaCl_2$ 和足量的碱石灰吸收, 减少的气体体积比为 2:1, 剩余气体在标准状况下体积为 2.24 L, 试确定 A 可能的分子式。

解析 经分析可知剩余气体可能是 O_2 或 CO 。(1) 若剩余气体为 O_2 , 则有机物分子式中碳氢原子个数比一定是 1:4, 其组成符合 $(CH_4)_xO_y$, 通过计算验证 x 只能为 1, 只有 CH_4 符合要求。

(2) 若剩余气体为 CO , 则有机物的组成符合

$C_2(CH_4)_xO_y$ 其燃烧反应方程式为:



若 $x = 1, y = -2$, 无解; 若 $x = 2, y = 2$, 分子式为 $C_4H_8O_2$; 若 $x \geq 3$, 则碳原子数不少于 5, 不合题设条件。故 A 的分子式只可能为 CH_4 或 $C_4H_8O_2$ 。

七、利用原子守恒求分子式

例 7 吗啡和海洛因都是严查禁止的毒品, 吗啡分子中含 C 为 71.58%, 含 H 为 6.67%, 含 N 为 4.91%, 其余为 O。已知其相对分子质量不超过 300, 又知海洛因是吗啡的二乙酸酯, 试确定吗啡和海洛因的分子式。

解析 吗啡中氧元素的质量分数为 $1 - 71.58\% - 6.67\% - 4.91\% = 16.84\%$, 经对比可知吗啡中含氮原子个数最少。因为 $300 \times 4.91\% = 14.73$, 所以一个吗啡分子中只有一个氮原子。

$$Mr(\text{吗啡}) = \frac{14}{4.91\%} = 285, \text{利用直接法可求出吗啡的分子式为 } C_{17}H_{19}O_3N。$$

因为



根据原子守恒, 求出海洛因的分子式为 $C_{21}H_{23}O_5N$ 。

八、利用部分求整体

例 8 某片状有机含氮化合物, 在水中溶解度不大 (100 g 水中溶解不到 3 g), 但却溶于盐酸或氢氧化钠溶液。其相对分子质量在 120 ~ 150 之间。经元素分析, 它含氧质量分数为 43.5%。

试推测该有机物的分子式和相对分子质量。

解析 因为 $120 < Mr < 150$, 氧质量分数为 43.5%, 则一个有机物分子中含氧原子个数在 3.3 到 4.1 之间, 所以一个有机物分子中含四个氧原子。则 $Mr = \frac{16 \times 4}{43.53\%} = 147$ 。根据有机物的价键

原则可知, 其中氮原子个数为奇数。因为该有机物既溶于盐酸又溶于 $NaOH$ 溶液, 所以该有机物中既含 $-NH_2$, 又含 $-COOH$ 。又因为其在水中溶解度不大, 故该有机物中含极性基团较少, 所以含 N 原子个数为一个, 则残基的式量为 $147 - 16 \times 4 - 14 = 69$, 残基的组成为 C_5H_9 , 故其分子式为 $C_5N_1O_4N$ 。

(收稿日期: 2013-04-15)