

有机计算解题技法

山东省博兴县第一中学

(256500) 穆玉鹏

在高考中,有机化学计算是考查的重点,是教学大纲和高考考试说明的基本要求,是高中学生必须具备的能力之一.现把有机计算题型及解法总结如下,供广大读者参考.

一、确定有机物分子式

常用方法:最简式法、摩尔计算法、燃烧通式法、差量法、十字交叉法等.

例1 某有机物组成中含碳 54.5%, 含氢 9.1%, 其余为氧. 又知其蒸气在标况下的密度为 3.94 g/L, 试求其分子式.

解法1 最简式法

有机物分子中 C、H、O 原子个数比: $C:H:O = 54.5\% / 12 : 9.1\% / 1 : 36.4\% / 16 = 2:4:1$

最简式为 C_2H_4O , 设分子式为: $(C_2H_4O)_n$.

又因为其摩尔质量为: $22.4 \text{ L/mol} \times 3.94 \text{ g/L} = 88 \text{ g/mol}$

故其分子式为: $C_4H_8O_2$

解法2 摩尔计算法

因为该有机物的摩尔质量为:

$$3.94 \text{ g/L} \times 22.4 \text{ L/mol} = 88 \text{ g/mol}$$

所以 1 mol 该有机物中各元素原子的物质的量为:

$$n(C) = (1 \text{ mol} \times 88 \text{ g/mol} \times 54.5\%) / 12 \text{ g/mol} = 4 \text{ mol}$$

$$n(H) = (1 \text{ mol} \times 88 \text{ g/mol} \times 9.1\%) / 1 \text{ g/mol} = 8 \text{ mol}$$

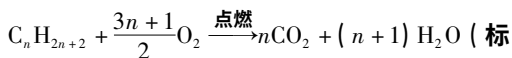
$$n(O) = (1 \text{ mol} \times 88 \text{ g/mol} \times 36.4\%) / 16 \text{ g/mol} = 2 \text{ mol}$$

所以该有机物的分子式为 $C_4H_8O_2$

评注 解法1, 根据有机物各元素的质量分数求出分子组成中各元素的原子个数之比(最简式), 然后结合该有机物的摩尔质量(或相对分子质量)求有机物的分子式. 解法2, 根据有机物的摩尔质量(分子量)和有机物中各元素的质量分数, 推算出 1 mol 有机物中各元素原子的物质的量, 从而确定分子中各原子个数, 最后确定有机物分子式.

例2 标准状况下 10 mL 某气态烷烃跟 80 mL 过量的氧气混合, 通入一个容积为 90 mL 的密闭容器中点火爆炸后, 恢复到原状态, 测得的压强为原来的 55.56%. 求烷烃的分子式?

解法1 燃烧通式法



况下水为液态)

$$1 \text{ mL} \quad \frac{3n+1}{2} \text{ mL} \quad n \text{ mL}$$

$$10 \text{ mL} \quad x \quad 10n \text{ mL}$$

$$\frac{1}{10} = \frac{\frac{3n+1}{2}}{x} \quad x = 5(3n+1) \text{ mL}$$

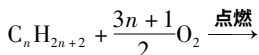
依据题意

$$\frac{80 - 5(3n+1) + 10n}{10 + 80} \times 100\% = 55.56\% \quad n = 5$$

∴ 烷烃的分子式为 C_5H_{12}

解法2 差量法

根据反应前后压强变化, 通过差量法解题求有机物分子式



$$1 \text{ mol}$$

$$10 \text{ mol}$$

$$nCO_2 + (n+1)H_2O \text{ (液态)} \quad \Delta n \text{ 减小}$$

$$1 + \frac{3n+1}{2} - n \text{ (mol)}$$

$$(10 + 80) \cdot (1 - 55.56\%) \text{ (mol)}$$

$$\frac{1}{10} = \frac{\frac{n+3}{2}}{40} \quad n = 5$$

∴ 烷烃分子式为 C_5H_{12}

评注 解法1, 根据有机物燃烧通式列入已知量, 根据比例式直接求出未知量. 解法2, 列举差量, 将“差量”看作化学方程式右端的一项, 将已知差量与化学方程式中的对应差量列成比例, 其他解题步骤与按化学方程式列比例解题完全一样.

例3 相同状况下 9 L 甲烷与 6 L 某烯烃混合, 所得混合气体的密度等于相同条件下氧气的密度, 计算该烯烃的分子式.

解法 十字交叉法

相同条件下 $\frac{\rho_{\text{混合气}}}{\rho_{O_2}} = \frac{\overline{M_{\text{混合气}}}}{M_{O_2}}$ (密度之比等于分子质量之比)

$$\overline{M_{\text{混合气}}} = M_{O_2} = 32 \text{ (依据题意)} \quad M_{\text{CH}_2} = 16$$

烯烃 $M_r = 14n$ (C_nH_{2n})

$$\begin{array}{ccc} 16 & & 14n - 32 \\ & \searrow & \nearrow \\ & 32 & \\ & \nearrow & \searrow \\ 14n & & 16 \end{array} \quad \frac{14n - 32}{16} = \frac{9}{6} \quad n = 4$$

烯烃的分子式为 C_4H_8

评注 十字交叉法是进行二组分混和物平均量与组分量计算的一种简便方法. 凡可按 $M_1n_1 + M_2n_2 = (n_1 + n_2)$ 计算的问题, 均可用十字交叉法进行计算, 式中, $(n_1 + n_2)$ 表示混和物的某平均量, M_1 、 M_2 则表示两组分对应的量. 如表示平均分子量, M_1 、 M_2 则表示两组分各自的分子量, n_1 、 n_2 表示两组分在混和物中所占的份额, $n_1:n_2$ 表示两组分物质的量之比.

二、有机物耗氧量的比较

1. 比较等物质的量有机物燃烧耗氧量大小

例 4 1 mol 下列有机物充分燃烧耗氧量最小的是().

A. C_3H_4 B. C_2H_5OH C. CH_3OH D. CH_3CH_3

解法 1 有机物燃烧的反应方程式 $C_xH_yO_z + (x + y/4 - z/2) O_2 \longrightarrow xCO_2 + y/2 H_2O$, $x + y/4 - z/2$ 的值分别为: A. 4 B. 3 C. 1.5 D. 3.5

解法 2 改写分子式

A. C_3H_4

B. $C_2H_5OH \longrightarrow C_2H_4 \cdot H_2O$

C. $CH_3OH \longrightarrow CH_2 \cdot H_2O$

D. C_2H_6

答案应为: C

评注 解法 1, 根据分子式 $C_xH_yO_z$ 计算 $x + y/4 - z/2$, 该值越大有机物的耗氧量越多. 解法 2, 改写分子式, 若是烃则 1 mol C 与 4 mol H 耗氧量相等; 若是烃的含氧衍生物, 则观察分子式, 看是否可把分子式中的 C、H、O 写成“ CO_2 ”或“ H_2O ”形式, 在比较剩余 C、H 的耗氧量即可.

2. 比较等质量烃燃烧耗氧量大小

例 5 质量相等的下列物质完全燃烧时耗氧量最大的是().

A. C_6H_6 B. C_2H_6 C. C_3H_8 D. C_7H_{12}

解析 12 g C 燃烧耗氧气 1 mol, 12 g H_2 燃烧耗氧气 3 mol; 即等质量的 C 和 H 燃烧耗氧: $H > C$. 把烃分子式改写为 CH_X 形式, CH_X 式中 X 值越大烃分子中 H 质量分数越大, 烃燃烧耗氧量越大.

A. $C_6H_6 \longrightarrow CH$

B. $C_2H_6 \longrightarrow CH_3$

C. $C_3H_8 \longrightarrow CH_{8/3}$

D. $C_7H_{12} \longrightarrow CH_{12/7}$

所以, 耗氧量最大是 C_2H_6 .

评注 等质量时, 12 g C 消耗 32 g O_2 , 4 g H 消耗 32 g O_2 , 因此, 烃中 H 的质量分数越高消耗 O_2 越

多. 现把分子式 C_xH_y 改写成 $CH_{y/x}$ 的形式, y/x 越大, 消耗 O_2 越多.

三、混和物组成成份的确定

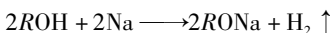
常用方法: 燃烧通式法、平均值法、差量法、讨论法和这些方法的综合运用.

例 6 有两种饱和一元醇组成的混合物 0.9172 g; 该混合物跟足量钠反应生成 22.4 mL 氢气(标准状况), 则两种醇的分子式分别为().

A. C_2H_5OH C_3H_7OH B. C_3H_7OH CH_3OH

C. CH_3OH C_2H_5OH D. C_3H_7OH C_4H_9OH

解法 中间值法



故混合醇的物质的量为:

$$\frac{0.0224 \text{ L}}{22.4 \text{ L/mol}} \times 2 = 0.02 \text{ mol}$$

$$\text{其平均分子量为: } \frac{0.9172}{0.02} = 45.86$$

说明混合物是由分子量大于 45.86 的醇和分子量小于 45.86 的醇所组成, 由此推断答案只能是 B、C.

评注 已知 a 、 b 、 c 存在 $a < c < b$ 的关系, c 是中间值, 只要根据方程式求得 c , 就可推断出 a 、 b 的取值范围.

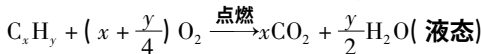
例 7 a mL A、B、C 三种气态烃的混合物跟足量氧气混合点燃后, 恢复到原常温常压状态, 气体体积共缩小了 $2a$ mL, 那么 A、B、C 三种烃可能是().

A. CH_4 、 C_2H_6 、 C_3H_8 B. C_2H_4 、 C_2H_2 、 CH_4

C. CH_4 、 C_2H_4 、 C_3H_4 D. C_2H_6 、 C_3H_6 、 C_4H_6

解法 差量法、平均值法 燃烧通式法

设混合气态烃平均分子组成 C_xH_y .



ΔV 减少

$$1 \text{ mL} \quad 1 + x + \frac{y}{4} - x(\text{ mL})$$

$$a \text{ mL} \quad 2a \text{ mL}$$

$$\frac{1}{a} = \frac{1 + \frac{y}{4}}{2a} \quad \therefore y = 4$$

满足 $n(\overline{H}) = 4 \text{ mol}$ 合理

A. $n(\overline{H}) > 4 \text{ mol}$ B. $n(\overline{H}) < 4 \text{ mol}$

C. $n(\overline{H}) = 4 \text{ mol}$ D. $n(\overline{H}) = 6 \text{ mol}$

$\therefore$ 选 C.

评注 根据有机物燃烧通式, 利用差量法求得平均值, 确定其取值范围, 即可选出正确选项.

例 8 常压 120°C 将 1 L CO 和某烯烃组成的混合气体与 11 L 过量的氧气混合, 经点燃充分反

有机物消耗无机试剂最大量问题例析

山东省滕州市第一中学西校 (277500) 柴 勇

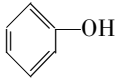
有机物与无机试剂反应,是高考命题中考查有机判断和计算的切入点,特别是有机物消耗无机试剂的最大量问题,更是历年高考命题的热点.解答此类问题要明确反应方式和用量关系,特别是各种官能团与无机试剂反应的比例关系.为了更好的应对这一问题,下面总结如下,希望对学生的备考有所帮助.

一、明确反应关系 储备必要知识

1. 与 H_2 反应的有: $C=C$ (碳碳双键)、 $C\equiv C$ (碳碳叁键)、 (苯环)、 $C=O$ (酮羰基)、 $H-C=O$ (醛基).

2. 与溴水反应的有:

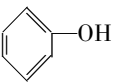
(1) 加成反应: $C=C$ (碳碳双键)、 $C\equiv C$ (碳碳叁键);

(2) 取代反应:  (苯酚: 取代苯环中

酚羟基邻位与对位上的氢原子).

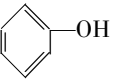
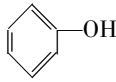
3. 与 Na 反应的官能团有: $-OH$ (羟基)、 $-COOH$ (羧基).

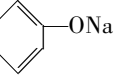
4. 与 $NaOH$ 反应的官能团有: $R-X$ (卤素原

子)、 (酚羟基)、 $-COOH$ (羧基)、

$RCOOR$ (酯基)、 $RCONHR$ (肽键)、 $RCOONa$ (羧酸钠): $CH_3COONa + NaOH \longrightarrow CH_4 \uparrow + Na_2CO_3$.

5. 与 Na_2CO_3 反应的官能团有: $-COOH$ (羧

基)、 (酚羟基:  + Na_2CO_3

$\longrightarrow$  + $NaHCO_3$).

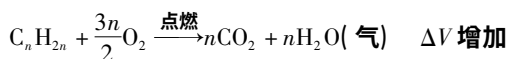
6. 与 $NaHCO_3$ 反应的官能团有: $-COOH$ (羧基).

► 应,再恢复到原状态时,测得气体的总体积为 12 L,试确定烯烃的分子式及其所占的体积百分含量?

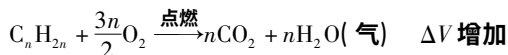
解法 讨论法

此题如按一般设未知数列方程法求解显然是不可取的解题方法(因为已知条件不充足),所以应对题目做认真剖析找到解题突破口.

依据题意,反应前气体总体积 $V_{前} = 1\text{ L} + 11\text{ L} = 12\text{ L}$,反应后气体总体积 $V_{后} = 12\text{ L}$,因此反应前后气体体积不变



利用差量法解题,设烯烃气体体积为 x



$$n + n - \frac{3n}{2} - 1(\text{ L}) = 0.5n - 1(\text{ L})$$

$$x \quad x(0.5n - 1)$$



$$1 - x \quad \frac{1-x}{2}$$

∴ 反应前后体积不变

∴ $\Delta V \text{ 减少} = \Delta V \text{ 增加}$

$$\therefore \frac{1-x}{2} = x(0.5n - 1) \quad x = \frac{1}{n-1}(\text{ L}) \quad (\text{有两个}$$

未知数无确定的解)

讨论: 烯烃为气态: $2 \leq n \leq 4$

∴ $n = 2 \quad x = 1$ (不合理, 烯烃气体体积为 1 L, CO 气体体积为 0, 此种情况不会形成反应前后体积不变)

$$\left. \begin{array}{l} n = 3 \quad x = \frac{1}{2} \text{ 烯烃 } C_3H_6 \\ n = 4 \quad x = \frac{1}{3} \text{ 烯烃 } C_4H_8 \end{array} \right\} \text{均合理}$$

∴ 若烯烃为 C_3H_6 时, 所占体积 50%

烯烃为 C_4H_8 时, 所占体积为 $\frac{1}{3} \times 100\% =$

33.33%

评注 某些有机计算题根据题设条件最终只能得到不定方程,必须利用化学原理找出解题范围加以讨论才可以得出合理的有限组解,使问题得到圆满解决.

总之,有机化学计算题主要考查学生思维的敏捷性,解题时主要靠平时积累的解题方法加上灵活运用来解题. (收稿日期: 2014-10-17)