第18卷 第2期 郑州工业大学学报 Vol.18 No.2.
1997年 6 月 Journal of Zhengzhou University of Technology Jun. 1997

有机化合物的分子式经验判别规则研究

高 岩 赵朝培
（新疆阿勒泰地区水利勘设计院） （河南省南乐县政府）

摘 要 本文根据价键理论导出了一个有机化合物的分子总通式。据此，不仅可以计算有机化合物中C、H数及不饱和度，还可确定有机化合物的具体分子式，结构式和名称。

关键词 价键理论 有机化合物 分子通式。
中图分类号：O621

到目前为止，人们所见到的有机化合物大约有上百类，近五百万种。对如此众多结构各异的有机化合物，其分子式能否用一个意义明确形式简单的通式来描述，则是化学家一直所关注和研究的课题。在现行的《有机化学》教科书中[1]，大都是按有机化合物的类型分别给一个分子通式。对于复杂的有机化合物（如生物碱、维生素、核酸等），则至今未见有一分子通式来描述。

针对上述情况，我们试图从价键理论出发，导出一个能适用于全部有机化合物的分子通式，以便于记忆和应用。

1 通式推导

烃是由C、H用共价键结合成的化合物；C永成四个价键，H永成一个价键。若C全部和H结合，则有如下通式：

$$C_nH_{4n} \quad n\text{是C数}=1、2、3\cdots\cdots\text{一切正整数}$$

实际上，除CH_4外，其它烃中总是相邻C结合成碳链，形成C—C，其余价键再和H结合形成C—H。每形成一个C—C用去两个C各一个价键，少结合2个H。

在链烷烃中，n个C形成n－1个C—C，少结合2（n－1）个H，其通式为：

$$C_nH_{4n-2(n-1+0)} \tag{1}$$

在环烷烃中，碳链首尾相接成环又形成一个C—C，n个C形成n－1＋1个C—C，少结合2（n－1＋1）个H，其通式为：

$$C_nH_{4n-2(n-1+1)} \tag{2}$$

在链单烯中，碳链中之C＝C增加一个C—C，n个C形成n－1＋1个C—C，少结合2（n－1＋1）个H，其通式为：

$$C_nH_{4n-2(n-1+1)} \tag{3}$$

在环单烯中，成环增加一个C—C，成烯增加一个C—C，n个C形成n－1＋2个C—C，少结合2（n－1＋2）个H，其通式为：

$$C_nH_{4n-2(n-1+2)} \tag{4}$$

在链单炔或链双烯中，一个C≡C或者两个C＝C都增加2个C—C，n个C形成n－1＋2个C—C，少结合2（n－1＋2）个H，其通式为：

收稿日期：1996－10－09

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

$$C_nH_{4n-2(n-1+2)} \quad (5)$$

在 中，成环增加一个C—C，环中增加三个C—C，n个C形成n－1＋4个C—C，少结合2（n－1＋4）个H，其通式为：

$$C_nH_{4n-2(n-1+4)} \quad (6)$$

若用m代表上述成环成烯成炔成苯增加的C—C（不饱和度），则上述通式可并为一式：

$$C_nH_{4n-2(n-1+m)}$$

约简，便得如下烃类总通式：

$$C_nH_{2n+2-2m} \qquad (m=0、1、2、3\cdots\cdots一切正整数) \quad (7)$$

全部有机化合物可视为烃及其衍生物，它们是由C、H和O、N、S、P、卤素等及微量金属元素组成的。若先把C、H以外的杂原子当C，代入$C_nH_{2n+2-2m}$中，再减去其不可能结合，加上其有可能结合的H数，便得如下“有机化合物的分子总通式”：

$$C_nH_{2(n+a+b+c+d+e+f)+2-2m-(3a+2b+1c)+(1e+2f)}+X_a+O_b+N_c+N_d^{-4}+P_e+S_f^{+6} \quad (8)$$

式中：

X_a—成一个共价键之杂原子及其数目

O_b—成二个共价键之杂原子及其数目

N_c—成三个共价键之杂原子及其数目

N_d^{-4}—成四个共价键之杂原子及其数目

P_e—成五个共价键之杂原子及其数目

S_f^{+6}—成六个共价键之杂原子及其数目

每类杂原子有非金属和金属，且有不同的价键数。式（8）看起来很复杂，但用起来简便。因多数化合物中含杂原子在三种以下。只要掌握好价键理论，牢记$C_nH_{2n+2-2m}$，遇到什么杂原子就取式中相关项将其代入，略去无关项，即可得到该类化合物的通式。如：

含卤素和一价金属原子化合物通式：

$$C_nH_{2(n+a)+2-2m-3a}+X_a$$

含O、S和二价金属原子化合物通式：

$$C_nH_{2(n+b)+2-2m-2b}+O_b$$

含N和三价金属原子化合物通式：

$$C_nH_{2(n+c)+2-2m-1c}+N_c$$

含O和卤素原子化合物通式：

$$C_nH_{2(n+b+a)+2-2m-2(2b+3a)}+O_b+X_a$$

含O和N（－ 中价键特殊，定其中N成三个价键并入N_c中）化合物通式：

$$C_nH_{2(n+b+c)+2-2m-(2b+1c)}+O_b+N_c$$

含O、N、P化合物（核酸）通式：

$$C_nH_{2(n+b+c+e)+2-2m-(2b+1c+1e)}+O_b+N_c+P_e$$

只含$-SO_3H$（如$ArSO_3H$）化合物通式：

$$C_nH_{2(n+b+f)+2-2m-2b+2f}+O_b+S_f^{+6}$$

2 通式功用

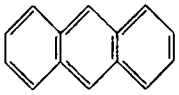
2.1 根据化合物名称或其构造式确定其分子式

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

2.1.1　三联苯：

三个 中 n＝6×3＝18，m＝4×3＝12，代入通式得：

$C_{18}H_{2\times18+2-2\times12}=C_{18}H_{14}$

2.1.2　蒽（  ）：

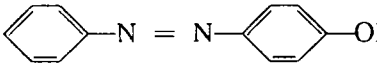
n＝14，m＝10，代入通式得：

$C_{14}H_{2\times14+2-2\times10}=C_{14}H_{10}$

2.1.3　二苯并 18－冠－6：

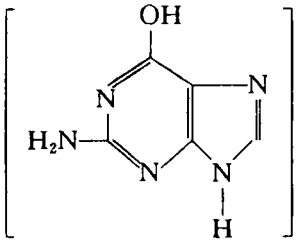
由名知意，两个 夹一个冠－6 环，两个 中有 12 个 C，不饱和度为 8；冠中有 8 个 C，6 个 O，不饱和度为 1。n＝12＋8＝20，m＝8＋1＝9，代入通式得：

$C_{20}H_{2(20+6)+2-2\times9-2\times6}+O_6=C_{20}H_{24}O_6$

2.1.4　对羟基偶氮苯（  ）：

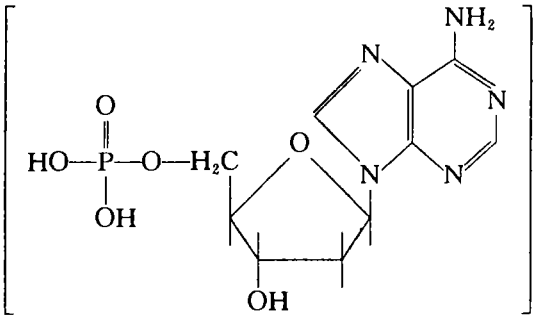
n＝6×2＝12，m＝4×2＋1＝9，代入通式得：

$C_{12}H_{2(12+2+1)+2(-2\times9-(1\times2+2\times1)}+N_2+O_1=C_{12}H_{10}N_2O$

2.1.5　鸟嘌呤 

n＝5，m＝6，代入通式得：

$C_5H_{2(5+5+1)+2-2\times6-(1\times5+2\times1)}+N_5+O_1=C_5H_5N_5O$

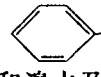
2.1.6　核酸 

n＝5＋5＝10，m＝6＋1＋1＝8，代入通式得

$C_{10}H_{2(10+6+5+1)+2-2\times8-(2\times6+1\times5)+1\times1}+O_6+N_5+P_1=C_{10}H_{14}O_6N_5P$

2.2　根据某类化合物中 H 数，杂原子数，确定其分子式，构造式和名称

2.2.1　某苯单炔中有 6 个 H，确定其分子式，构造式和名称。

中不饱和度为 4，单炔中不饱和度为 2，m＝4＋2＝6。故有：6＝2n＋2－2×6，解得 n＝8。其分子式为 C_8H_6，构造式为  —C ≡CH，是苯乙炔。

2.2.2　某烃中有 4 个 H，在常温下和溴水及酸化高锰酸钾溶液都起反应而退色，和银氨溶液反应生成灰白色沉淀，和 $3Br_2$ 完全加成。确定其分子式、构造式和名称。由化学性质知其是链炔，和

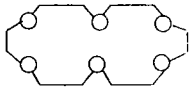
(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

$3Br_2$ 完全加成其 m＝3，故有：4＝2n＋2－2×3，解得 n＝4。其分子式为 C_4H_4，构造式为：

$CH_2=CHC\equiv CH$，是乙烯炔。

2.2.3 某环醚中有 24 个 H，6 个 O，确定其分子式、构造式和名称。

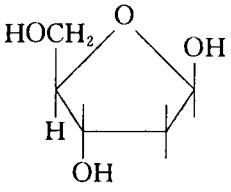
环醚中 m＝1，故有：24＝2（n＋6）＋2－2×1－2×6，解得 n＝12。其分子式为 $C_{12}H_{24}O_6$，构造式为：



，是18－冠－6 。

2.2.4 某核糖中有 10 个 H，4 个 O，确定其分子式、构造式和名称。

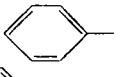
核糖中 m＝1，故有：10＝2（n＋4）＋2－2×1－2×4，解得 n＝5。其分子式为 $C_5H_{10}O_4$，构造式为：



是脱氧核糖。

2.3 根据分子式确定化合物的构造式和名称

2.3.1 某烃分子式为 C_8H_8，有芳香性，确定其构造式和名称。

由 8＝2×8＋2－2m，解得 m＝5，因其有芳香性，分子中有一个  — （n＝6，m＝4，H 数＝5），其余 2 个 C 和 3 个 H 必组成 $-CH=CH_2$。其构造式为 —CH ＝CH_2，是苯乙烯。

2.3.2 分子式为 C_7H_6O 的化合物易呈银镜反应，确定其构造式和名称。

由 6＝2（7＋1）＋2－2m－2×1，解得 m＝5。由化学性质知其是醛，含一个 －CHO，其余 6 个 C，5 个 H 必组成 — ，构造式为 —CHO ，是苯甲醛。

2.3.3 某化合物分子式为 C_4H_5N，为液体，沸点 77.5－79℃，用红外光谱法确定其构造式和名称。

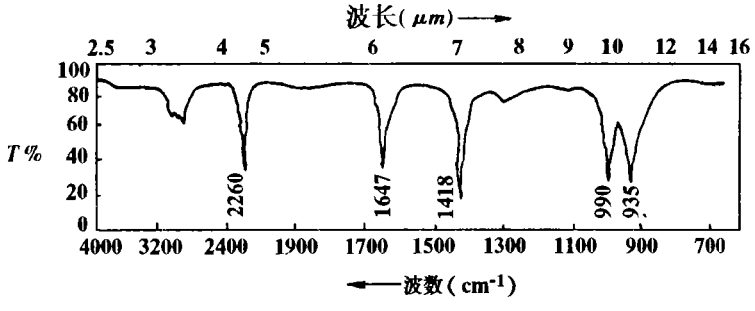


图 1 C_4H_5N 的红外光谱图

其红外谱图如下[2]：

由 5＝2（4＋1）＋2－2m－1×1，解得 m＝3。结合分子式知其很不饱和，又含一个 N，应注意双键、三键或 C≡N 出现，2260 处为－C≡N 吸收带，1647、990、935 处为 $-CH=CH_2$ 吸收带。其构造式为 $CH_2=CHCH_2CN$；查其物理性质知其是丙烯腈。

2.3.4 质谱测定某化合物分子式为 C_8H_8O，其沸点是 202℃，用红外光谱法确定其构造式和名称。其红外谱图如下[2]：

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

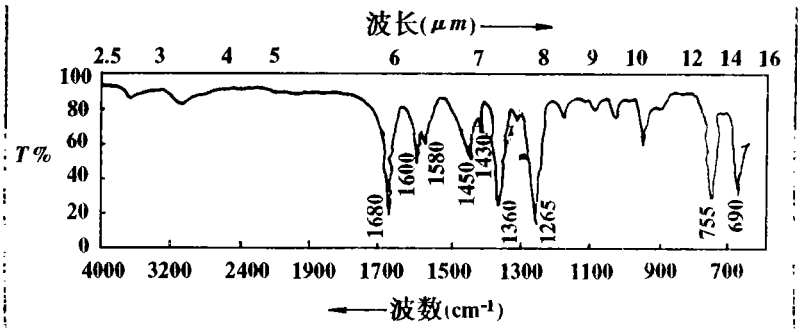
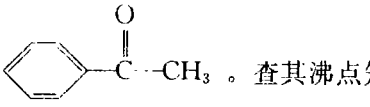


图 2　C_8H_8O 的红外光谱图

由 8＝2（8＋1）＋2－2m－2×1，解得 m＝5。结合分子式知其极不饱和，含一个 O，应注意 ，－OH、 C ＝O、－O－等出现。3200－3600 处无吸收带说明其不含－OH，1680 处有强吸收带说明其含有 C ＝O，1600、1580、755、690 处的吸收带说明其含有一个 （n＝6，m＝4，H 数＝5），1360 处的吸收带说明其含有－CH_3（由分子式和上述基因也知其余 1 个 C，3 个 H 必组成 －CH_3），其结构式为  。查其沸点知其是苯甲酮。

3　小结

本文根据价键理论导出的有机化合物的分子总通式，不仅能够解决现行有机化学教材中众多通式所能解决的全部问题，而且还可直接用来计算有机化合物中 C、H 数及不饱和度，并能确定有机化合物的具体分子式，结构式和名称。该式格式一致，道理清楚，便于记忆和应用，对有机化学教学内容的改革和有机化学分析将会起到一定的促进作用。

参　考　文　献

1　南京大学化学系有机化学教研室主编．有机化学．高教出版社．1984。
2　甘肃师范大学化学系“简明化学手册”编写组编．简明化学手册．甘肃人民出版社．1980。

General Molecular Formula for Organic Compounds

Gao　Yan
(Aletai District Institute of Irrigation Survey and Design, Xinjiang Autonomous Region)
Zhao　Chaopei
(Nanle County Government, Henan Province)

Abstract　Based on the valence bond theory, a general molecular formula for organic compounds is derived. According to this general formula, the number of C, H and unsaturated degree in organic compounds is not only calculated, but also the specific molecular formula, structural formulas and names for organic compounds is determined.

Keywords　Valence bond theory　Organic compounds　General molecular formula

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net