

المدخل إلى الكيمياء العضوية

Introduction pour la chimie organique

تمثل المركبات العضوية عامل إرباك للكثير من الطلبة وخصوصاً عندما يتعلق الأمر بمركبات ذات صيغ ضخمة. ولكن تصبح هذه الصيغ المعقدة مألوفاً لدى الطالب عند زيادة معارفه وتعلمه أسس الكيمياء العضوية، فأغلب المركبات العضوية لا تحتوي إلا عدداً قليلاً من العناصر المختلفة مثل الكربون والهيدروجين والأكسجين، ويندر أن يوجد في المركب العضوي أكثر من خمسة من هذه العناصر. يمكن أن نصادف بالإضافة إلى العناصر السابقة، في المركبات العضوية، بعض اللامعادن مثل الهالوجينات والكبريت والفوسفور والسيليسيوم، وكذلك بعض المعادن مثل الصوديوم والليثيوم والمغنيزيوم....الخ.

1-1- تعريف الكيمياء العضوية :

لقد تم عزل عدد من المركبات العضوية في بداية القرن التاسع عشر من العضوية الحية، ويعتبر السويدي بريزيليوس أول من أطلق عام 1807 اسم المركبات العضوية على المركبات المستخلصة من العالم المتعضي الحيواني أو النباتي، وقد ظن الكيميائيون في ذلك الوقت، بأن هذه المركبات خاصة بعالم الكائنات الحية، ولا يمكن الحصول عليها إلا من خلال هذه الكائنات، وقد عزي تشكلها إلى قوة خفية في ذلك الوقت دعيت بقوة الحياة (Force vitale) وأنه لا يمكن الحصول عليها مخبرياً. دعي العلم الذي يهتم بهذه المواد بالكيمياء العضوية.

لقد تزعمت نظرية قوة الحياة عام 1828 من خلال أعمال فوهرل (Wohler) الذي استطاع أن يحضر اليوريا مخبرياً، انطلاقاً من سيانات الأمونيوم:



وكان فوهرل نفسه عام 1824، قد حصل على حمض الحماض بمعالجة غاز السيانوجين مع الماء. لقد ظهر منذ اصطناع فوهرل الأول، عدة ملايين من المركبات العضوية الطبيعية أو المصنعة، وأدى ذلك إلى ظهور ما يسمى بالاصطناع العضوي، وفتحت أبواب الاصطناع على مصراعيها. لقد تمكن برتلو ابتداءً من عام 1853 بتحضير حمض النمل وبعض المركبات الغولية، ثم تتالت الاصطناعات، فكان اصطناع الببتيدات وبعض أشباه القلويدات (مثل الكوكائين والكينين) والمضادات الحيوية (مثل

البنسلين والكلورومايسين) وبعض الفيتامينات وكذلك الهرمونات (مثل الادرينالين والتيروكسين) وعدد كبير من المنتجات الطبيعية ذات الأصل النباتي أو الحيواني مثل الكافور والنيلة.

لقد تبين بالتحليل العنصري لهذه المركبات بأنها جميعاً محتوية على الكربون. تعرف **الكيمياء العضوية** في أيامنا هذه بأنها كيمياء الكربون أو كيمياء مركبات الكربون سواء أكان المركب من أصل طبيعي أو صناعي، لأن كل مركب عضوي يجب أن يحتوي بالضرورة على عنصر الكربون، والعكس غير صحيح في الحالة العامة، رغم أننا ندرس في الكيمياء اللاعضوية، عنصر الكربون ومركباته اللاعضوية مثل أحادي أكسيد الكربون وثنائي أكسيد الكربون و حمض الكربون

1-2- الخواص المميزة لعنصر الكربون:

لماذا يحتل عنصر الكربون هذه الأهمية في الكيمياء العضوية؟ للإجابة على هذا السؤال لا بد لنا أن نتعرف على خواص ذرة الكربون. يتوضع عنصر الكربون في وسط الدور الثاني من الجدول الدوري بين البور B والآزوت N كما هو ملاحظ في الشكل (1-1):

الفصيلة	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
الدور 1	1,008 1 H							4 2 He
الدور 2	6,94 3 Li	9,01 4 Be	10,81 5 B	12,01 6 C	14,01 7 N	16 8 O	19 9 F	20,18 10 Ne
الدور 3	22,99 11 Na	24,31 12 Mg	26,98 13 Al	28,09 14 Si	30,97 15 P	32,06 16 S	35,45 17 Cl	39,95 18 Ar

الشكل (1-1): جزء من الجدول الدوري بين موقع الكربون

ينتمي الكربون للفصيلة الرابعة وعدده الذري ($Z = 6$) أي أنه يملك ستة إلكترونات تدور هذه حول نواة تضم ستة بروتونات مشحونة بشحنة موجبة، وهذا ما يحقق استقرار هذه الذرة. إن التشكيل الإلكتروني لذرة الكربون هو $1s^2 2s^2 2p^2$ ، أي أن طبقاته السطحية تحتاج إلى 4 إلكترونات لاكتمالها. أما نظيره ^{13}C فهو نظير خامل يضم ستة إلكترونات وبتروناً واحداً، وهو من أكثر نظائر الكربون وفرة، وتصل نسبته حوالي 1 % من وفرة الكربون في الطبيعة. هناك نظير آخر للكربون وهو النظير ^{14}C وهو نظير مشع ونشط، ونسبته في الطبيعة ضعيفة جداً ويضم ستة إلكترونات ونيوترونين.

إن موقع الكربون المركزي مع عدد ذري ($Z = 6$) في الجدول الدوري، يتطلب إما فقدان أو اكتساب 4 إلكترونات من أجل الوصول إلى بنية الغاز الخامل الأكثر قرباً منه. ولكن هذا يتطلب طاقة

كبيرة وهو غير ممكن وفقاً لطبيعة التفاعلات الكيميائية. هناك حل آخر للوصول إلى الحالة المستقرة من خلال الاشتراك بالإلكترونات السطحية مع إلكترونات عناصر أخرى مثل الهيدروجين أو الآزوت، مشكلة بذلك أربع روابط، ويؤدي هذا الاشتراك إلى وصول كل ذرة إلى بنية الغاز النادر الأقرب.

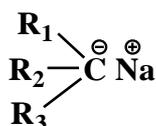
إن الخاصة الأساسية التي تميز الكربون عن بقية العناصر ما عدا السيليسيوم، هو مقدرته على الاشتراك بأزواج إلكترونية مع ذرات أخرى من الكربون مشكلاً روابط مشتركة كربون-كربون بسيطة أو مزدوجة أو ثلاثية. تمثل هذه الظاهرة أساس الكيمياء العضوية. تفسر الأشكال المختلفة التي يمكن أن يرتبط بها الكربون، أهمية هذا العنصر والدور الكبير الذي يلعبه في الكيمياء العضوية من خلال إمكانية تشكيله لعدد هائل من المركبات.

يخيل لنا بأن عنصر السيليسيوم Si، يمكن أن يقوم مقام الكربون ويشكل سلاسل مختلفة، باعتبار أنه يملك أربعة إلكترونات في طبقاته السطحية. في الواقع، لا يستطيع السيليسيوم فعل ذلك، لأن مركباته ليست ثابتة وتتأكسد بسهولة. فمثلاً يمكن أن يشكل السيليسيوم مركبات مع الكربون، إلا أن المركبات الناتجة من ارتباط Si-Si غير ثابتة وتتأكسد بسهولة لتعطي SiO₂. يعود سبب ذلك إلى ضعف قوة الرابطة Si-Si وهذا ما يلاحظ في عناصر الفصيلة الرابعة من الجدول الدوري حيث نلاحظ تناقص في قوة الرابطة M-M عند الانتقال من الكربون إلى القصدير.

الجدول (1-1) : طاقة الرابطة المتشكلة بين ذرات مختلفة

الرابطة	C-C	Si-Si	Ge-Ge	Sn-Sn
طاقة الرابطة (K Cal /mol)	83	42	40	37

أي ان طاقة الرابطة كربون-كربون أكبر بكثير من طاقة الرابطة سيليسيوم-سيليسيوم . يمكن لعناصر مختلفة مثل الآزوت والأكسجين أن تشترك بأكثر من إلكترون مع الكربون مشكلة بذلك روابط مزدوجة أو ثلاثية، وتتمتع كل رابطة بخواص مشتركة. كما يمكن للكربون أن يرتبط مع بعض المعادن القلوية مثل الصوديوم و الليثيوم و البوتاسيوم مشكلاً رابطة شاردية



1-3- الملامح العامة للمركبات العضوية :

تتميز المركبات العضوية كما وجدنا سابقاً، بوجود الكربون إضافة إلى الهيدروجين ويمكن أن يوجد الآزوت والأكسجين وعناصر أخرى مثل (الفسفور والهالوجينات) وبعض المعادن مثل (النحاس و المغنيزيوم و التوتياء و الليثيوم). توجد أغلب المركبات العضوية في الحالة السائلة أو الصلبة في درجات الحرارة العادية، وأن قسماً ضئيلاً منها يوجد في الحالة الغازية، تتمتع هذه المركبات بمجموعة من الخواص منها:

1- تتمتع بدرجات غليان منخفضة لا تتجاوز $^{\circ}\text{C}$ (300-400)، وهذا ما يسمح بتقطير أغلب المركبات العضوية السائلة، عند إجراء التقطير تحت ضغط منخفض، وهذا بعكس المركبات اللاعضوية التي تكون درجات غليانها مرتفعة جداً.

2- تتفكك أغلبها بالحرارة وهذا ما يعكس قلة ثباتها الحراري، فإذا سخنت المادة العضوية M بوجود الأكسجين، فإنها تحترق لتعطي الماء وغاز ثنائي أكسيد الكربون ونواتج أخرى. ويمكن أن يتشكل عند عدم وجود كمية كافية من الأكسجين أن يتشكل غاز CO.



وعندما تسخن المادة بغياب الأكسجين، يتشكل الكربون ونواتج أخرى، وهذا ما يسمى بالإتلاف الحراري pyrolyse.

3- لا تتحلل أغلب المركبات العضوية في المحلات ذات القطبية العالية مثل الماء، أو تكون ضعيفة الانحلال فيها، وتتناقص هذه الانحلالية بصورة عامة بزيادة طول السلسلة الكربونية المكونة للمركب، ما عدا بعض الاستثناءات ذات الفائدة الكبيرة من الناحية البيولوجية، كالسكر والغول وسواهما. ولكن تتحلل بشكل جيد في المحلات العضوية مثل (الهكسان والكلوروفورم وثنائي كلور الميثان ورابع كلور الكربون و الايتر...)، بعكس المركبات اللاعضوية التي تكون منحلة في المحلات القطبية. وبشكل عام تكون قطبية المركبات العضوية أقل من قطبية المركبات العضوية. ولذلك لا تنقل الأجسام السائلة منها، ولا المحاليل المائية للأجسام الصلبة التيار الكهربائي.

4- تتميز بانخفاض درجات انصهارها ونادراً ما تتجاوز الـ $^{\circ}\text{C}$ (300). وتتركب بلورات الأجسام الصلبة فيها من مجموعات جزيئية وليس من شوارد، وهي هشّة إذا ما قورنت ببلورات المركبات المعدنية (الشاردية).

1-4- مميزات التفاعلات العضوية:

بالرغم من أن قوانين الكيمياء العامة هي التي تحكم جميع التفاعلات الكيماوية على اختلاف أنواعها سواء أكانت تفاعلات لاعضوية أم عضوية، إلا أن هذه الأخيرة تتميز بأن الأثر أو الفعل الحراري لها ضعيف (ما عدا تفاعلات الاحتراق)، مثل تفاعل استرة الأغوال مثلاً أو حلمهة الاسترات، فهي تتحقق دون نشر أو امتصاص كمية كبيرة من الحرارة، لذلك تدعى هذه التفاعلات بالتفاعلات اللاحرارية. وكذلك فإن سرعة التفاعلات العضوية تكون بطيئة، بعكس العديد من التفاعلات اللاعضوية التي تتم آنياً، إذ تتطلب بعض التفاعلات العضوية بضعة أيام لتحقيقها، كما أن أغلبها عكوس ومتوازن، ونادراً ما تكون التفاعلات العضوية وحيدة الاتجاه، وهذا يعني أنه إلى جانب التفاعل الرئيس توجد تفاعلات ثانوية إما أن تتم آنياً أو تدريجياً، ويمكن عن طريق تغيير الشروط التجريبية أو استخدام الوسطاء تخفيض أهمية هذه التفاعلات الثانوية أو زيادتها.

1-5- مصادر المركبات العضوية :

تتنوع المصادر التي يمكن أن يتم إنتاج المركبات العضوية من خلالها نذكر منها:

- 1- باطن الأرض (البترو، الفحم الحجري...)
- 2- الحيوانات (الحرير، الصوف، اللحم، الزيوت الحيوانية...)
- 3- النباتات البرية والبحرية (خشب، قطن، سكر، ...)
- 4- الصناعة (البنزن، القطران، المنظفات، العطور الصناعية، المنسوجات...)

1-6- التطبيقات الصناعية للكيمياء العضوية :

لقد قادت الكيمياء بشكل عام والكيمياء العضوية بشكل خاص الحضارة الإنسانية إلى مستويات متقدمة، بفضل ما حققته من اصطوانات هامة، مثل اصطناع اللدائن والمطاط والمنسوجات الاصطناعية....، تمت الاستفادة منها في المجالات الصناعية المختلفة وكان لها الأثر الكبير في جميع مستويات الحياة. تم بموازاة ذلك، وبنتيجة الدراسات البنوية، تحديد بنية عدد كبير من المنتجات الطبيعية المستخلصة. مثل السيللوز والهيموغلوبين واليخضور والكاوتشوك، وبناء صيغ هذه المركبات.

لقد لعبت الكيمياء العضوية أيضاً دوراً مهماً في تطوير الصناعة الدوائية، وكذلك في علم الطب الشرعي والعلوم الزراعية الحديثة، وتلعب أيضاً دوراً مهماً في فهم بعض الأمراض والدواء المستخدم في علاجها. وفي غضون هذه التطورات المختلفة بدأت بعض المجالات الخاصة بالظهور نذكر منها:

أ – المنتجات الطبيعية Substances naturelles:

تعتبر المصادر الطبيعية مصدراً هاماً للمركبات العضوية ذات الأهمية البيولوجية، لقد توجهت الجهود ومنذ زمن طويل لدراسة صيغ النواتج الطبيعية وبنائها وطرق اصطناعها وذلك لأهميتها الكبيرة في مجال الصيدلة والطب. وقد ساعد على تطور هذه الدراسة فهم التفاعلات الكيماوية من جهة، وتقدم التقنيات المستخدمة في عزل المركبات وتنقيتها وتحليلها من جهة أخرى. ومن أكثر هذه المركبات أهمية نذكر: الستيروئيدات والهرمونات والفيتامينات وأشباه القلويات والمضادات الحيوية.

ب – المتماثرات " البوليميرات Polymères:

لهذه المركبات أهمية صناعية كبيرة جداً وتزداد أهميتها يوماً بعد يوم، وقد درست طرق تحضير هذه المركبات واصطناع موادها الأولية (أحاديات الحد Monomères) وشروط تماثرها، والوسطاء التي تستخدم في تحضيرها. تستخدم المتماثرات أو البوليميرات في الصناعة في مختلف المجالات، من البلاستيك إلى الدهانات فالمواد اللاصقة وفي صناعة المطاط والأنسجة.

ج – البروتينات :

بدأت الكيمياء العضوية منذ سنوات قليلة بدراسة اصطناع الببتيدات بغية الوصول إلى اصطناع البروتينات وذلك من خلال ربط السلاسل الببتيدية ببعضها (Ligation) للوصول إلى بنية البروتينات. تعد هذه المركبات حجر الأساس في بناء النسيج الحيوانية بشكل خاص، وقد تقدمت هذه الدراسة كثيراً بعد اكتشاف بنية الحموض الريبية النووية (DNA) ودورها في العالم الحي، ولا زالت الأبحاث مستمرة في هذا المجال لاصطناع هذه المركبات المهمة.

تمثيل الجزيئات العضوية – الصيغة الكيميائية

Réprésentation des molécules organiques -
La formule chimique

لقد ذكرنا سابقاً بأن أغلب المركبات العضوية لا تحتوي إلا عدداً صغيراً من العناصر المختلفة، مثل الكربون والهيدروجين والأكسجين، بالإضافة إلى بعض اللامعادن مثل الهالوجينات والكبريت والفوسفور والسيليسيوم، وبعض المعادن مثل الصوديوم والليثيوم والمغنيزيوم. لذلك يجب أن نعلم طريقة يمكن من خلالها التعبير بدقة عن العناصر الداخلة في تركيب المركب من خلال صيغة كيميائية تعبر عن طبيعة العناصر الداخلة في بنية المركب وعددها، ومن أجل ذلك لا بد من معرفة طبيعة هذه العناصر، وهذا يتطلب أن يكون المركب معزولاً بشكل نقي، لذلك فإن الخطوة الأولى في كتابة الصيغة هي تنقية المركب، ومن أجل ذلك سنتعرف فيما يلي على طرق عزل المركبات العضوية وكيفية تحليلها.

2-1- عزل المركبات العضوية وتحليلها:

يمكن أن تكون المركبات العضوية من مصادر طبيعية أو مصنعة، تعتبر الشحوم الحيوانية والزيوت والساكرات أو السيلولوز والبتروول..... مركبات ذات منشأ طبيعي، يمكن من خلال الصناعة تحضير عدد هائل من المواد العضوية بطرق الاصطناع المختلفة. ولكن من النادر الحصول على مركب عضوي نقي.

عندما يتم الحصول على مركب ما من تفاعل كيميائي أو بعد استخلاصه من منتج طبيعي بطرق التنقية المختلفة مثل الطرق الكروماتوغرافية Méthodes Chromatographiques، أو التقطير Distillation أو البلورة Cristallisation أو الاستخلاص Extraction، يسعى الكيميائيون لتحديد هويته ومعرفة تركيبه وبنية Identification. ومن أجل ذلك لا بد من التعرف على خواصه الفيزيائية Caractères physiques لتحديد بعض ثوابته الفيزيائية، لأن لكل مركب مجموعة من الثوابت الفيزيائية يتميز بها عن غيره، مثل (درجة الانصهار ودرجة الغليان وقرينة الانكسار....)، ومن مقارنة هذه الثوابت مع المراجع يمكن التعرف على المركب، هذا إذا كان المركب معروفاً سابقاً، أما إذا كان غير معروف، فيجب تحديد بنية هذا المركب المجهول. أعتمدت الطريقة التقليدية لمعرفة الصيغة الجزيئية لمركب ما، على تعيين وزنه الجزيئي من خلال تحليله عنصرياً وإجراء تفاعلات كيميائية للتعرف على الزمر الوظيفية الموجودة في بنيته من خلال الطرق القليلة التي كانت متوفرة حتى منتصف القرن الماضي. بقيت هذه الطرق تلعب دوراً مهماً في تحديد البنية الجزيئية العضوية، على الرغم من الثورة الكبيرة في هذا

المجال خلال السنوات القليلة الماضية، والتي اعتمدت على استخدام أجهزة دقيقة وطرق آلية للتحليل. لذلك يعتبر التحليل الكيفي والتحليل الكمي لعناصر مادة ما، الخطوة الأولى في عملية تحديد بنيتها والحصول على صيغتها المجملة.

2-2- الصيغة المجملة La formule brute:

تعتبر الصيغة المجملة عن عدد الذرات المختلفة التي تشكل الجزيء، يمكن كتابة الصيغة المجملة للمركب العضوي كما يلي: $C_xH_yN_zO_z$ حيث يمثل (x و y و z) أعداد الذرات التي تشير إليها، وهي أعداد صحيحة. فمثلاً تملك البولة الصيغة المجملة CH_4N_2O والبروبان C_3H_8 والاستون C_3H_6O . يتم تحديد العناصر الداخلة في بنية المركب من خلال التحليل العنصري أو من خلال تقنيات فيزيوكيميائية، تسمح بتحديد الكتلة الجزيئية.

2-2-1- التحليل العنصري L'analyse élémentaire :

يسمح التحليل العنصري بالتحديد الكمي للعناصر الداخلة في تركيب المركب، مثل الكربون والأكسجين والهيدروجين والكبريت والفسفور..... وذلك من خلال تفاعلات كيميائية خاصة لكل عنصر، يلي ذلك فصل بالطرق الكروماتوغرافية.

2-2-1-1- التحليل العنصري الكيفي L'analyse élémentaire qualitative:

تحدد هوية العناصر المكونة لجزيء عضوي بتحويلها إلى مركبات لاعضوية. يتحول الكربون والهيدروجين إلى CO_2 و H_2O ، أما العناصر الأخرى مثل الأزوت والهالوجينات والكبريت..... فتتحول بوجود الصوديوم إلى أملاح يسهل تمييزها من خلال تفاعلات كشف معروفة. أما الأكسجين فليس له طريقة بسيطة لتمييزه.

2-2-1-2- التحليل الوزني (الكمي) العنصري:

L'analyse pondérale ou quantitative

يقوم مبدأ التحليل الكمي على حرق عينة من المركب في جو من الأكسجين بوجود مؤكسد مناسب، بغية تحويله إلى مركب لا عضوي. يمكن من خلال التحليل الكمي العنصري معايرة كل عنصر (باستثناء الأكسجين) داخل في تركيب الجزيء.

تؤدي عملية حرق عينة معلومة الكتلة إلى أكسدة الكربون والهيدروجين الموجودين في العينة إلى CO_2 والماء على الترتيب. تساق الغازات الناتجة من خلال تجهيزات خاصة إلى مصيدة من الكلس الصودي أو من هيدروكسيد البوتاسيوم لامتصاص غاز ثاني أكسيد الكربون، وكذلك إلى مصيدة من كلور المغنيزيوم لامتصاص الماء.

يمكن تحديد كتلة غاز ثاني أكسيد الكربون m_{CO_2} من حساب الفرق بين كتلة الكلس الصودي قبل وبعد اصطياذ غاز CO_2 ، وكذلك يمكن تحديد كتلة الماء m_{H_2O} بنفس الأسلوب. ومن أجل فصل جزيئات ثاني أكسيد الكربون والماء من الغازات الأخرى المتشكلة عند وجود الآزوت (يعطي الآزوت في الشروط نفسها غاز N_2 يمكن حساب حجمه بعد امتصاص CO_2)، تستخدم تقنيات كروماتوغرافية حديثة للحصول بشكل مباشر على نسب هذه العناصر.

تحدد نسبة الأكسجين بالفرق بين 100 والنسب المئوية للعناصر الأخرى المكونة للعينة.

يمكن حساب كتلة الهيدروجين في العينة وفق العلاقة التالية :

$$m_H = \frac{2.016}{18.016} \times m_{H_2O}$$

يمثل الرقم 2.016 كتلة ذرتي الهيدروجين الموجودتان في الماء و 18.016 هي الكتلة المولية للماء.

تحسب النسبة المئوية للهيدروجين من العلاقة التالية :

$$m_H \% = \frac{m_H}{M} \times 100$$

تمثل M كتلة العينة الكلية. وبنفس الأسلوب يمكن حساب كتلة الكربون بالعلاقة التالية:

$$m_C = \frac{12.01}{44.01} \times m_{CO_2}$$

و تحسب النسبة المئوية للكربون من العلاقة التالية :

$$m_C \% = \frac{m_C}{M} \times 100$$

باعتبار 44.01 الكتلة المولية لثاني أكسيد الكربون. أما كتلة الآزوت، فإنها تحسب من العلاقة:

$$m_N = \frac{28 \times V_N}{22.4}$$

يمثل V_N حجم الآزوت المقاس في الشرطين النظاميين، ويعبر الرقم 28 عن الكتلة المولية لـ N_2 ، والرقم

22.4 عن حجمه في الشرطين النظاميين. تحسب النسبة المئوية للآزوت في العينة من العلاقة التالية:

$$m_N \% = \frac{m_N}{M} \times 100$$

يمكن من أجل عينة مكونة فقط من C و H و O أن نحدد نسبة الأكسجين من حساب الفرق:

$$100 - (H\% + C\% + N\%)$$

مثال :

أعطى مركب مكون من C و H و O كتلته 0.101 gr، عند حرقه 0.73 gr من الماء و gr

0.18 من غاز ثاني أكسيد الكربون. اكتب أبسط صيغة مجتملة للمركب السابق.

الحل:

تحسب كتلة الهيدروجين في العينة كما يلي :

$$m_H = \frac{2.016}{18.016} \times m_{H_2O}$$

$$m_H = \frac{2.016}{18.016} \times 0.73 = 0.00816 \text{ gr}$$

وتحسب النسبة المئوية للهيدروجين كما يلي:

$$m_H \% = \frac{m_H}{M} \times 100 = \frac{0.00816}{0.101} \times 100 = 8.08 \%$$

تحسب كتلة الكربون كما يلي:

$$m_C = \frac{12.01}{44.01} \times m_{CO_2} = \frac{12.01}{44.01} \times 0.18 = 0.0491 \text{ gr}$$

و كذلك فإن نسبته المئوية في العينة هي:

$$m_C \% = \frac{m_C}{M} \times 100 = \frac{0.0491}{0.101} \times 100 = 48.51 \%$$

أما النسبة المئوية للأوكسجين فتحسب كما يلي:

$$100 - (8.08 + 48.51) = 43.41 \%$$

تمثل عادة الصيغة المجملة لمركب يحوي C و H و O و N كما يلي: $C_x H_y N_z O_t$ حيث x, y, z, t تكافئ أعداداً صحيحة. يحسب عدد ذرات العنصر الموجود في الجزيء من قسمة الأعداد المحسوبة على الكتلة الذرية للعنصر الموافق. إن النسبة بين أعداد ذرات الكربون والهيدروجين والأوكسجين هي:

- من أجل الكربون:

$$48.51 / 12.01 = 4.03$$

- ومن أجل الهيدروجين:

$$8.08 / 1.008 = 8.01$$

- ومن أجل الأوكسجين:

$$43.41 / 16 = 2.71$$

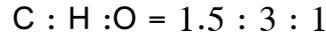
فإذا اعتبرنا وجود ذرة أكسجين واحدة، تصبح النسبة السابقة من أجل الكربون:

$$4.03 / 2.71 = 1.49$$

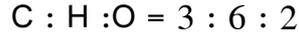
و تصبح من أجل الهيدروجين:

$$8.01 / 2.71 = 2.96$$

بأخذ أخطاء التجربة بعين الاعتبار، فإن النسبة بين أعداد ذرات الكربون والهيدروجين والأكسجين هي:



و بما أن عدد الذرات هو عدد صحيح دائماً، فإن النسبة تصبح:



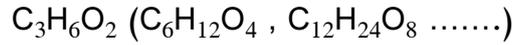
ومنه فإن الصيغة المجملة الموافقة هي $C_3H_6O_2$ ، وهي توافق الكتلة المولية:

$$M = 74.08 \text{ gr}$$

ولكن تبقى النسبة ذاتها بين أعداد ذرات الكربون والهيدروجين من أجل الصيغة $C_6H_{12}O_4$ وهي توافق الكتلة المولية:

$$M = 74.08 \times 2 = 148.16$$

وتبقى كذلك النسبة ذاتها من أجل مضاعفات الصيغة المجملة $C_3H_6O_2$:



لذلك فإن معرفة الصيغة المجملة الدقيقة للمركب تتطلب معرفة الكتلة المولية¹.

ولكن لا تعطي الصيغة المجملة وصفاً كافياً للمركب، إذ يمكن أن يكون لدينا أكثر من مركب بصيغة مجملة واحدة، من أجل التعبير الدقيق عن المركب، لا بد من كتابة الصيغ المفصلة. يتم تحديد

الصيغة المفصلة من خلال التقنيات الفيزيوكيميائية (انظر الفصل الثامن) التالية:

- مطيافية ما تحت الأحمر (IR) (Infrouge)، تسمح هذه المطيافية بتحديد الزمر الوظيفية في المركب، وتعطي أيضاً معلومات عن طبيعة المجموعات الكربونية.

- مطيافية الطنين النووي المغناطيسي (RMN) Résonance magnétique nucléaire: تسمح بالتعرف على البنية المفصلة للمركبات من خلال طيوف البروتون ¹H والكربون ¹³C.

- مطيافية الكتلة spectroscopie de Masse : تحدد الكتلة المولية الدقيقة للمركب.

¹ يوجد العديد من الطرق القديمة لتحديد الكتلة المولية، تعتمد على تغير في درجة غليان سائل أو درجة انصهار صلب عند إضافة كمية محددة m من مركب ما إليه. لقد أصبحت هذه الطرق قديمة وغير مستخدمة الآن، وقد تم استبدالها بمطيافية الكتلة Spectroscopie de Masse لتحديد الكتلة الجزيئية للمركب وصيغته الجزيئية. يسمح جهاز طيف الكتلة في أغلب الحالات في الحصول على الكتلة الجزيئية للعينة، وكذلك يزودنا بمعلومات مهمة عن بنية الجزيء.