

FENXIXIHUAXUE SHOUCE

# 分析化学手册

第九分册

## 质谱分析



化学工业出版社

CHEMICAL INDUSTRY PRESS

1740/10  
分析化学手册

(第二版)

第九分册

质谱分析

丛浦珠 苏克曼 主编



化学工业出版社

·北京·

(京)新登字 039 号

**图书在版编目 (CIP) 数据**

分析化学手册. 第九分册: 质谱分析 / 丛浦珠, 苏克曼主编. — 2 版. — 北京: 化学工业出版社, 2000  
ISBN 7-5025-2751-6

I. 分… I. ①丛… ②苏… III. ①分析化学-手册  
②分析(化学)-质谱法 IV. 065-62

中国版本图书馆CIP数据核字(2000)第11742号

---

**分析化学手册**

(第二版)

第九分册

质谱分析

丛浦珠 苏克曼 主编

责任编辑: 任惠敏

责任校对: 马燕珠

封面设计: 于兵

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里3号 邮政编码 100029)

<http://www.cip.com.cn>

\*

新华书店北京发行所经销

北京市燕山印刷厂印刷

三河市前程装订厂装订

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 69½ 字数 1658 千字

2000年5月第2版 2000年5月北京第1次印刷

印数: 1-3500

ISBN 7-5025-2751-6/TQ·1211

定 价: 134.00 元

**版权所有 违者必究**

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

## 《分析化学手册（第二版）》编辑委员会

主任：周同惠

副主任：汪尔康 陆婉珍

委员：

- 周同惠 中国科学院院士  
中国医学科学院药物研究所
- 汪尔康 中国科学院院士  
中国科学院长春应用化学研究所
- 陆婉珍 中国科学院院士  
中国石油化工总公司石油化工科学研究院
- 高 鸿 中国科学院院士  
西北大学
- 高小霞 中国科学院院士  
北京大学
- 梁晓天 中国科学院院士  
中国医学科学院药物研究所
- 卢佩章 中国科学院院士  
中国科学院大连化学物理研究所
- 陈耀祖 中国科学院院士  
浙江大学 兰州大学
- 王 夔 中国科学院院士  
北京医科大学
- 黄本立 中国科学院院士  
厦门大学
- 俞汝勤 中国科学院院士  
湖南大学
- 畠山立子(日) 日本国工业技术院物质工学工业技术研究所
- 孙亦樑 北京大学
- 慈云祥 北京大学
- 李浩春 中国科学院大连化学物理研究所
- 邓家祺 复旦大学
- 邓 勃 清华大学
- 王敬尊 北京微量化学所

程介克 武汉大学  
陈洪渊 南京大学  
于德泉 中国医学科学院药物研究所  
张玉奎 中国科学院大连化学物理研究所  
张孙玮 杭州大学  
刘振海 中国科学院长春应用化学研究所  
丛浦珠 中国医学科学院药物研究所  
彭图治 杭州大学  
杨峻山 中国医学科学院药用植物研究所  
柯以侃 北京化工大学  
王国顺 杭州大学  
任惠敏 化学工业出版社

## 第二版前言

分析化学是人们获得物质化学组成和结构信息的科学。由于多学科的交叉渗透,现代分析化学已发展成为一个庞大的学科体系,建立起了比较成熟的多种分析方法,包括色谱分析、电化学分析、光谱分析、波谱分析、质谱分析、化学分析、热分析、放射分析、生化分析等。它一方面在科学研究中起着至关重要的作用,极大地推动着其他学科的发展;另一方面还直接服务于国民经济和生产建设的需要。同时,当代科学技术和人类生产活动的飞速发展也向分析化学学科提出了严峻的挑战,并带来了前所未有的发展机会。

我国的分析化学学科在新中国建立以来,特别是改革开放以后,取得了长足的发展。到目前为止,在全国范围内已形成了一支以中国科学院和高等院校及各部委研究所为核心的分析化学科研队伍,和一个涉及生物、环境、材料、临床、医药、地质、冶金、石化、宇航、商检、法医、侦破和考古等领域的庞大分析检验队伍,共同构成了我国分析化学学科研究发展的源泉和推广应用的基地。在多年的发展过程中,无论是分析化学的基础理论,还是实际应用方面,都已形成了丰富的知识和经验的积累,需要进一步的总结和推广。

《分析化学手册》是一部比较全面的反映现代分析技术,供化学工作者使用的专业工具套书。手册第一版自1979年出版以来,在读者中形成了一定的影响,已成为许多分析化验室的必备图书。但由于受组稿时的历史条件所限,加上近20年来是世界和我国的科学技术,包括分析化学学科飞速发展的时期,原手册第一版在内容和编排上已不能全面反映当前我国分析化学的发展现状。因此,根据广大读者的要求,我们组织了这套《分析化学手册》的修订工作。

在第一版原有6个分册的基础上,这次经扩充和修订为以下10个分册:

第一分册 基础知识与安全知识

第二分册 化学分析

第三分册 光谱分析

第四分册 电分析化学

第五分册 气相色谱分析

第六分册 液相色谱分析

第七分册 核磁共振波谱分析

第八分册 热分析

第九分册 质谱分析

第十分册 化学计量学

其中第一分册为基础内容,收集了分析工作中常用的基础数据、分析实验室

的安全知识及分析数据的常规处理、计算机应用的基础知识。第十分册所涉及的化学计量学是近些年来发展非常迅速的化学学科的一个分支，与分析化学有着特殊密切的关系，它应用数学和统计学的方法，并引入计算机科学的发展成果，其研究对象几乎涉及分析化学的所有过程，对于设计或选择最优的分析方法，解析大量的化学分析数据以最大限度地获取化学信息等具有普遍的指导意义，因此修订时增加这一部分内容。其他各分册均是按分析方法及所采用的主要仪器类型来划分，大体包括两方面的内容：基础原理、基础数据部分和实际应用部分。

本次修订，在内容上我们着重收录了基础性的理论和发展较为成熟的方法及应用，注意推陈出新，更新有关数据，增补各自领域近些年的新发展新成果，特别是计算机应用、多种分析手段联用技术的发展，以及分析技术应用于生命科学等的内容。

在编排方式上，进一步突出了手册的可查性。各册均编排主题词索引，与目录相互补充。手册中所涉及的名词术语统一采用国家自然科学名词审定委员会发布的标准，计量单位参照国家标准《GB 3100~3102—93·量和单位》的有关规定贯彻执行。其他凡有国家标准的也一律采用相关最新标准。

第二版的重编修订工作得到了我国分析化学界的大力支持，包括11位中国科学院院士在内的近30位知名专家、学者应邀担任了手册修订的编委会成员，全套书的修订出版凝聚着他们大量的心血和期望，在此谨向他们，以及在编写过程中曾给予我们热情支持与帮助的有关院校、科研单位及厂矿企业的专家和同行们，致以衷心的感谢。同时我们也真诚地期待着广大读者的热情关注和批评指正。

《分析化学手册》编委会

1996年6月

## 本分册编写说明

本分册是《分析化学手册》第二版新增加的分册，和其他分册一样，本分册也是一个很重要的分册，因为质谱是近些年来发展很快，应用广泛，是强有力的分析技术。质谱不是光谱，是带电的物质粒子、即离子谱，按照带电粒子、即离子的质量  $m$  和所带电荷数  $z$  的比值、即质荷比 ( $m/z$ ) 所排列的谱，称为质谱 (mass spectrum)。和其他物理特性一样，质量也是一种物质特性，不同离子有不同的质量，测定离子的质量便可判断不同的离子。质谱可应用于许多学科领域，根据使用的学科领域不同，可把质谱分成有机质谱、无机质谱和同位素质谱三大类，有机质谱是质谱中的最大分支，不仅应用学科领域广泛、部门多，而且仪器数量很大，从事这项工作的人数也很多。可以这样说，一切与有机化学有关联的学科与部门，诸如生物化学、生命科学、化工、医药、试剂、生化临床、轻工、食品、商检、林业、农药、石油、地质、公安、法检、航天、国防，环境监测、致癌物质检测和兴奋剂检测等，都要装备现代最先进的有机质谱仪器。无机质谱和同位素质谱是质谱中的小分支，前者主要在矿产地质、冶金、半导体材料和原子能工业中应用，后者主要在与放射性同位素有关的部门应用。由于上述情况，本分册主要以质谱学基础和有机质谱为主，书中第一篇对质谱学基础知识、质谱仪器和方法进行了简要介绍，第二篇和第三篇分别主要刊载了 2100 个常见一般有机化合物和 900 个天然有机化合物的质谱图，对每个化合物的质谱进行了文字解释，以便读者能够深入了解有机质谱的基本原理和产生各种碎片离子 (bragment ion) 的裂解方式 (bragmentation pattern)。在书末附了化合物分子量及化合物中英方名称索引。

有机质谱学属有机化合物的定性方法之一，它能够测定有机化合物的分子量和分子式，揭示分子离子 (molecular ion) 和碎片离子、碎片离子和碎片离子之间的生缘关系，以及产生碎片离子的裂解方式与分子结构的关系的规律性，因而有机质谱学 (organic mass spectrometry) 是一门有机化合物分子结构推导和测定的科学。有机结构的质谱解析是有机质谱分析的高级阶段。要想把质谱使用好，就必须充分发挥有机质谱解析有机结构这项本领，把有机质谱用到绝妙处。

本分册第一篇由华东理工大学苏克曼教授主编，第二篇和第三篇由中国医学科学院药用植物研究所从浦珠研究员主编，全书由从浦珠研究员审阅和修改，梁晓天院士作最后审定，参加第一篇编写工作的还有杜海和俞仲华同志；参加第二篇与第三篇编写工作的还有邹忠梅博士、李立军和杨荣同志。由于质谱分册是第一次出版，错误之处必不可免，盼读者批评指正。

编者

1999 年 12 月



# 目 录

## 第一篇 质谱分析总论

<b>第一章 绪论</b> .....	1
第一节 质谱发展简史 .....	1
第二节 质谱分析法的内容 .....	2
一、同位素质谱分析 .....	2
二、无机质谱分析 .....	3
三、有机质谱分析 .....	3
第三节 质谱名词与术语 .....	4
一、质谱仪器与原理 .....	4
二、质谱图和质谱中的离子 .....	5
三、质谱分析方法与技术 .....	7
<b>第二章 质谱仪器</b> .....	9
第一节 质谱仪器的基本结构和分类 .....	9
第二节 离子源 .....	10
一、电子轰击型离子源 .....	10
二、离子轰击型离子源 .....	12
三、原子轰击型离子源 .....	14
四、放电型离子源 .....	16
五、表面电离源 .....	17
六、场致电离和场解吸电离源 .....	19
七、化学电离源 .....	22
八、电感耦合等离子体离子源 .....	24
九、其他类型的离子源 .....	25
第三节 质量分析器 .....	27
一、磁场偏转质量分析器 .....	27
二、飞行时间质量分析器 .....	34
三、四极滤质器 .....	36
四、傅里叶变换离子回旋共振质谱仪 .....	39
五、其他类型的质量分析器 .....	44
第四节 离子检测系统 .....	48
一、二次电子倍增器 .....	48
二、闪烁检测器和光电倍增管 .....	50
三、照相板 .....	51
四、其他类型的检测器 .....	52
第五节 进样系统 .....	52
一、直接进样系统 .....	52
二、间接进样系统 .....	53

三、参考样品进样系统 .....	54
四、组件式进样系统 .....	55
五、成分分离器和进样器的组合 .....	55
第六节 质谱仪器的真空系统 .....	71
一、质谱仪器的真空要求 .....	71
二、真空的获得 .....	73
三、真空的测量 .....	76
四、各种真空部件 .....	78
第七节 质谱仪器的基本指标 .....	80
一、质量范围 .....	80
二、分辨率 .....	81
三、灵敏度 .....	82
四、峰形 .....	83
五、精密度与准确度 .....	83
<b>第三章 计算机在质谱中的应用</b> .....	<b>85</b>
第一节 意义及发展 .....	85
第二节 计算机 .....	86
一、IBM 微机系统概述 .....	87
二、常见术语 .....	88
三、微机辅助 MS 系统实例 .....	88
第三节 仪器控制、数据采集及处理 .....	89
一、仪器控制 .....	89
二、质谱数据的采集和处理 .....	90
第四节 计算机辅助质谱解析 .....	93
一、理论方法 .....	94
二、模式识别方法 .....	95
三、谱图检索 .....	96
参考文献 .....	99
主要参考文献 .....	99

## 第二篇 一般有机化合物的质谱

<b>第四章 烃类和卤代烃类</b> .....	<b>101</b>
第一节 烃类 .....	101
一、正构脂肪烃类 .....	101
二、支链脂肪烃类 .....	108
三、环脂肪烃类 .....	112
四、直链烯烃类 .....	117
五、环烯烃类 .....	124
六、炔脂肪烃类 .....	132
七、芳香烃类 .....	134
第二节 卤代烃类 .....	157
一、卤代烷类 .....	157
二、卤代环烷类 .....	169
三、卤代烯类 .....	170

四、卤代炔类 .....	176
五、卤代苯类 .....	177
六、卤苯类 .....	188
七、卤代萘类 .....	190
<b>第五章 醇、酚和醚类 .....</b>	<b>191</b>
<b>第一节 醇类 .....</b>	<b>191</b>
一、伯醇类 .....	191
二、仲醇类 .....	197
三、叔醇类 .....	199
四、多元醇类 .....	199
五、烯醇类 .....	201
六、环醇类 .....	203
七、苄醇类 .....	209
<b>第二节 酚类 .....</b>	<b>212</b>
一、一元酚 .....	212
二、二元酚 .....	212
三、三元酚 .....	213
四、烷基酚 .....	214
五、甲氧基苯酚 .....	221
六、卤代酚类 .....	222
七、氨基酚类 .....	231
八、硝基酚类 .....	232
九、亚硝基酚类 .....	233
十、联苯酚类 .....	234
十一、萘酚类 .....	235
<b>第三节 醚类 .....</b>	<b>237</b>
一、直链脂肪醚类 .....	237
二、脂环烷基醚类 .....	241
三、苄基醚类 .....	242
四、二醚类 .....	242
五、过氧醚类 .....	242
六、芳香醚类 .....	243
<b>第六章 醛和酮 .....</b>	<b>248</b>
<b>第一节 醛类 .....</b>	<b>248</b>
一、脂肪醛类 .....	248
二、卤代脂肪醛类 .....	252
三、烯醛类 .....	252
四、二醛类 .....	254
五、三醛类 .....	254
六、芳香醛类 .....	255
七、缩醛类 .....	264
<b>第二节 酮类 .....</b>	<b>268</b>
一、直链脂肪酮类 .....	268
二、卤代脂肪酮类 .....	275

三、环丁酮类 .....	276
四、环戊酮类 .....	278
五、 $\alpha,\beta$ -环戊烯酮类 .....	280
六、环戊二酮类 .....	281
七、环戊三酮类 .....	282
八、环己酮类 .....	283
九、环己-2-烯酮类 .....	284
十、2,5-环己二烯酮类 .....	285
十一、环己二酮类 .....	286
十二、环己四酮类 .....	287
十三、芳香酮类 .....	287
<b>第七章 羧酸、酸酐、酰卤、酰胺和脂 .....</b>	<b>293</b>
<b>第一节 羧酸类 .....</b>	<b>293</b>
一、直链脂肪一元酸类 .....	293
二、直链脂肪二元酸类 .....	299
三、直链脂肪三元酸类 .....	302
四、卤代直链脂肪酸类 .....	303
五、芳香酸类 .....	304
六、卤代芳香酸类 .....	313
七、呋喃羧酸类 .....	317
八、其他羧酸类 .....	317
<b>第二节 酸酐类 .....</b>	<b>319</b>
一、脂肪酸酐类 .....	319
二、芳香酸酐类 .....	321
<b>第三节 酰卤类 .....</b>	<b>321</b>
一、脂肪酰卤类 .....	321
二、芳香酰卤类 .....	323
<b>第四节 酰胺类 .....</b>	<b>325</b>
一、脂肪酰胺类 .....	325
二、芳香酰胺类 .....	328
三、乙酰芳胺类 .....	332
四、内酰胺类 .....	335
五、硫代酰胺类 .....	339
六、碳酰胺类 .....	339
<b>第五节 酯类 .....</b>	<b>340</b>
一、脂肪酸酯类 .....	340
二、乙酸酯类 .....	355
三、丙酸酯类 .....	358
四、芳香酸酯类 .....	359
五、呋喃羧酸甲酯类 .....	367
六、氰酸烷基酯类 .....	367
七、硫氰酸酯类 .....	369
八、硫酸酯类 .....	371
九、亚硫酸酯类 .....	372

十、硫代羧酸酯类 .....	372
十一、硝酸酯类 .....	373
十二、亚硝酸酯类 .....	374
十三、碳酸酯类 .....	374
<b>第八章 胍和脲</b> .....	376
<b>第一节 胍类</b> .....	376
一、脂肪胍类 .....	376
二、芳香胍类 .....	378
三、酰胍类 .....	380
<b>第二节 脲类</b> .....	382
一、脂肪脲类 .....	382
二、脂肪异脲类 .....	387
三、芳香脲类 .....	388
四、芳香异脲类 .....	390
<b>第九章 内酯与氧杂环类</b> .....	392
<b>第一节 内酯类</b> .....	392
一、丁内酯类 .....	392
二、戊内酯类 .....	392
三、己内脂类 .....	397
<b>第二节 氧杂环类</b> .....	400
一、环氧乙烷类 .....	400
二、环氧丙烷类 .....	402
三、四氢呋喃类 .....	403
四、二氢呋喃类 .....	406
五、呋喃类 .....	408
六、四氢吡喃类 .....	411
七、二氢吡喃类 .....	412
八、二氧戊环类 .....	414
九、二氧己环类 .....	416
十、2,3-去氢-1,4-二氧己环类 .....	419
十一、三氧己环类 .....	419
十二、苯并呋喃类 .....	420
十三、吡喃酮类 .....	424
<b>第十章 硝基化合物、亚硝酸胺类和胺类</b> .....	427
<b>第一节 硝基化合物</b> .....	427
一、硝基烷类 .....	427
二、硝基苯类 .....	428
<b>第二节 亚硝酸胺类</b> .....	444
一、直链亚硝酸胺类 .....	444
二、环状亚硝酸胺类 .....	445
<b>第三节 胺类</b> .....	447
一、直链脂肪伯胺类 .....	447
二、支链脂肪伯胺类 .....	450
三、链状脂肪仲胺类 .....	452

四、链状脂肪叔胺类 .....	455
五、链状脂肪二胺类 .....	358
六、脂肪环胺类 .....	460
七、芳香胺类 .....	462
八、苯胺类 .....	481
九、芳二胺类 .....	482
十、其他 .....	486
<b>第十一章 氮杂环类 .....</b>	<b>488</b>
<b>第一节 氮杂环烷类 .....</b>	<b>488</b>
一、氮丙啶类 .....	488
二、氮杂环丁烷类 .....	488
三、吡咯烷类 .....	489
四、哌啶类 .....	491
<b>第二节 氮杂环烯和氮杂芳环类 .....</b>	<b>498</b>
一、吡咯类 .....	498
二、吡啶类 .....	503
三、吡嗪类 .....	524
四、吡啶啉类 .....	528
五、咪唑类 .....	534
六、咪唑啉类 .....	539
七、咪唑烷酮类 .....	540
八、三唑类 .....	542
九、四唑类 .....	547
十、噁唑类 .....	549
十一、异噁唑类 .....	551
十二、噁二唑类 .....	553
十三、哒嗪类 .....	553
十四、嘧啶类 .....	556
十五、吡嗪类 .....	568
十六、哌嗪类 .....	573
十七、三嗪类 .....	575
十八、四嗪类 .....	578
十九、嘌呤类 .....	580
<b>第十二章 吡啶、喹啉和异喹啉类 .....</b>	<b>586</b>
<b>第一节 吡啶类 .....</b>	<b>586</b>
一、简单吡啶类 .....	586
二、3-吡啶羧酸及其酯类 .....	593
三、其他取代吡啶类 .....	597
<b>第二节 喹啉类 .....</b>	<b>601</b>
一、简单取代喹啉类 .....	601
二、四氢喹啉类 .....	609
三、喹啉酮类 .....	610
四、其他喹啉类 .....	611
<b>第三节 异喹啉类 .....</b>	<b>611</b>

一、简单取代的异噻啉类 .....	611
二、氢化异噻啉类 .....	615
<b>第十三章 脲、胍和脒类 .....</b>	<b>616</b>
<b>第一节 脲和胍 .....</b>	<b>616</b>
一、脲类 .....	616
二、胍类 .....	617
<b>第二节 脒类 .....</b>	<b>618</b>
一、醛脒类 .....	618
二、酮脒类 .....	618
三、二脒类 .....	620
<b>第十四章 含硫化合物 .....</b>	<b>621</b>
<b>第一节 硫杂环烷类 .....</b>	<b>621</b>
一、硫杂环丙烷类 .....	621
二、硫杂环丁烷类 .....	622
三、四氢噻吩类 .....	623
四、四氢噻喃类 .....	624
五、二氢噻吩类 .....	625
六、二氢噻喃酮类 .....	626
七、噻喃酮类 .....	626
八、1,3-二硫杂环戊烷类 .....	627
九、二硫杂环己烷类 .....	627
十、三硫杂环戊烷类 .....	629
十一、三硫杂环己烷和多硫杂环烷类 .....	629
十二、1,3-氧硫杂环己烷类 .....	629
<b>第二节 硫醇类 .....</b>	<b>630</b>
一、直链脂肪硫醇类 .....	630
二、环脂肪硫醇类 .....	633
三、二硫醇类 .....	634
<b>第三节 硫醚类 .....</b>	<b>635</b>
一、脂肪硫醚类 .....	635
二、芳香硫醚类 .....	638
三、二硫醚类 .....	639
<b>第四节 硫酚类 .....</b>	<b>640</b>
一、苯硫酚类 .....	640
二、甲苯硫酚类 .....	640
三、氨基苯硫酚类 .....	641
<b>第五节 硫代化合物类 .....</b>	<b>641</b>
一、硫脲类 .....	641
二、硫代脂肪酸类 .....	643
三、硫代芳香化合物 .....	644
四、二甲亚砷类 .....	646
<b>第六节 噻吩类 .....</b>	<b>646</b>
一、噻吩 .....	646
二、甲基噻吩类 .....	647

三、乙基噻吩类 .....	649
四、丙基噻吩类 .....	649
五、异丙基噻吩类 .....	649
六、氨基噻吩类 .....	650
七、噻吩醛类 .....	650
八、乙酰基噻吩类 .....	650
九、噻吩羧酸类 .....	651
十、巯基噻吩类 .....	653
十一、卤代噻吩类 .....	653
十二、苯并噻吩类 .....	654
十三、甲基二氢噻吩酮类 .....	654
第七节 噻唑类 .....	655
一、噻唑 .....	655
二、甲基噻唑类 .....	655
三、乙基噻唑类 .....	657
四、氨基噻唑类 .....	657
五、甲氧基噻唑类 .....	657
六、二氢噻唑类 .....	658
七、噻唑烷类 .....	659
第八节 异噻唑类 .....	660
一、异噻唑 .....	660
二、甲基异噻唑类 .....	661
三、二甲基异噻唑类 .....	662
四、其他取代的异噻唑类 .....	663
第九节 多硫化物 .....	664
一、过硫化物 .....	664
二、三硫化物 .....	665
三、硫磺 .....	665
<b>第十五章 元素有机化合物</b> .....	667
第一节 含硼、铝的化合物 .....	667
一、含硼的化合物 .....	667
二、含铝的化合物 .....	668
第二节 含硅、锗、铅的化合物 .....	669
一、含硅的化合物 .....	669
二、含锗的化合物 .....	671
三、含铅的化合物 .....	671
第三节、含磷、砷、锑的化合物 .....	672
一、含磷的化合物 .....	672
二、含砷的化合物 .....	675
三、含锑的化合物 .....	676
主要参考文献 .....	677

### 第三篇 天然有机化合物的质谱

第十六章 生物碱类 .....	678
-----------------	-----



第一节 吲哚生物碱类 .....	678
第二节 二氢吲哚生物碱类 .....	679
一、白坚米定类 .....	679
二、白坚木茛宁类 .....	688
三、白坚木明类 .....	690
四、马钱子碱生物碱类 .....	692
五、C <sub>2</sub> 氧化吲哚生物碱类 .....	693
六、四氢吡咯吲哚类 .....	694
第三节 $\beta$ -咪啉生物碱与四氢- $\beta$ -咪啉生物碱类 .....	694
一、 $\beta$ -咪啉生物碱类 .....	694
二、四氢- $\beta$ -咪啉生物碱类 .....	695
第四节 四环、五环四氢- $\beta$ -咪啉生物碱 .....	696
一、四环四氢- $\beta$ -咪啉生物碱类 .....	696
二、五环四氢- $\beta$ -咪啉生物碱类 .....	699
三、其他五环四氢- $\beta$ -咪啉生物碱类 .....	701
第五节 四氢异喹啉生物碱类 .....	704
一、简单取代的四氢异喹啉生物碱类 .....	704
二、苄基四氢异喹啉生物碱类 .....	704
三、双苄基四氢异喹啉生物碱类 .....	705
四、螺苄基四氢异喹啉生物碱类 .....	706
五、四氢原小檗碱生物碱类 .....	708
六、阿朴啡生物碱类 .....	709
七、娃儿藤碱类 .....	710
第六节 其他生物碱类 .....	711
一、小檗碱生物碱类 .....	711
二、吗啡烷生物碱类 .....	712
三、三尖杉酯碱生物碱类 .....	716
四、吡啶酮生物碱类 .....	717
五、无叶豆碱生物碱类 .....	721
六、血根碱生物碱类 .....	721
七、嘌呤生物碱类 .....	722
八、甾族生物碱类 .....	723
<b>第十七章 黄酮、黄烷和查耳酮类 .....</b>	<b>726</b>
第一节 黄酮类 .....	726
第二节 黄烷酮类 .....	740
第三节 异黄酮、双黄酮类 .....	744
一、异黄酮类 .....	744
二、双黄酮类 .....	747
第四节 查耳酮、鱼藤酮类 .....	749
一、查耳酮类 .....	749
二、鱼藤酮类 .....	753
第五节 黄烷及黄酮甙类 .....	755
一、黄烷类 .....	755
二、黄酮甙类 .....	759

<b>第十八章 香豆精、吡酮、色烯和色酮类</b> .....	762
<b>第一节 香豆精类</b> .....	762
一、简单取代的香豆精类 .....	762
二、呋喃香豆精类 .....	765
三、异戊烯氧基香豆精类 .....	768
四、异戊烯基香豆精类 .....	770
五、双香豆精类 .....	773
<b>第二节 吡酮类</b> .....	774
一、吡酮和羟基吡酮类 .....	774
二、甲氧基吡酮类 .....	775
<b>第三节 色烷、色烯和色酮类</b> .....	778
一、色烷和色烯类 .....	778
二、二氢色酮类 .....	780
三、色酮类 .....	780
<b>第十九章 醌类</b> .....	784
<b>第一节 苯醌类</b> .....	784
一、对苯醌和甲基对苯醌类 .....	784
二、羟基对苯醌类 .....	786
三、异丙基对苯醌类 .....	787
四、羟甲基对苯醌类 .....	787
五、甲氧基对苯醌类 .....	788
六、其他苯醌类化合物 .....	788
<b>第二节 其他醌类</b> .....	790
一、萘醌类 .....	790
二、蒽醌类 .....	796
三、菲醌类 .....	803
四、丹参醌类 .....	803
<b>第二十章 甾族化合物</b> .....	804
<b>第一节 孕甾烷类</b> .....	804
一、 $C_{17}$ 为乙基和羟乙基的孕甾烷类 .....	804
二、 $C_6$ 有双键的孕甾烷类 .....	805
三、 $C_{17}$ 乙酰基取代物 .....	806
四、4-烯-3-酮孕甾烷类 .....	806
<b>第二节 雄甾烷类</b> .....	807
一、雄甾烷类 .....	807
二、雄甾烷-17-酮类 .....	808
三、 $C_6$ 羟基雄甾烷类 .....	811
四、 $C_{17}$ 羟基雄甾烷类 .....	812
五、4-烯-3-酮雄甾烷类 .....	814
六、 $\Delta^5$ -雄甾烯类 .....	815
<b>第三节 雌甾烷类</b> .....	815
一、 $C_{17}$ 羟基雌甾烷类 .....	815
二、4-烯-3-酮类 .....	816
三、雌甾-1,3,5-三烯类 .....	817

第四节 强心甙元类 .....	818
一、五元环内酯强心甙元类 .....	818
二、六元环内酯强心甙元类 .....	821
第五节 甾族皂甙元类 .....	825
一、 $C_{23}$ 无羟基取代的甾族皂甙元类 .....	825
二、 $C_{23}$ 羟基甾族皂甙元类 .....	829
第六节 甾醇类 .....	830
一、甾烷类 .....	830
二、 $\Delta^5$ -甾烯类 .....	832
三、 $\Delta^7$ -3-羟基甾醇类 .....	833
四、 $\Delta^{22}$ -甾烯类 .....	833
五、 $\Delta^{24(28)}$ -甾烯类 .....	836
六、 $\Delta^{5,7}$ -甾二烯类 .....	836
七、 $\Delta^4$ -3-酮类 .....	837
第七节 胆酸类 .....	837
<b>第二十一章 萜类化合物</b> .....	840
第一节 单萜类 .....	840
一、无环单萜类 .....	840
二、单环单萜类 .....	843
三、双环单萜类 .....	863
第二节 倍半萜类 .....	879
一、麝子油烷类 .....	879
二、没药烷类 .....	886
三、檀香烷类 .....	890
四、雅楮蓝烷类 .....	890
五、桉烷类 .....	891
六、土青木香烷类 .....	894
七、 $\beta$ -木兰烯和广藿香醇 .....	895
八、杜松烷类 .....	896
九、愈创木烷类 .....	900
十、香木兰烷类 .....	902
十一、广藿香烷类和石竹烷类 .....	904
十二、血菟烷类 .....	905
第三节 二萜类 .....	905
一、勒布烷类 .....	905
二、右松脂烷类 .....	911
三、考兰烷类 .....	914
四、松香烷类 .....	917
第四节 三萜类 .....	920
一、齐墩果烷类 .....	920
二、羽扇豆烷类 .....	926
三、甘遂烷类 .....	927
<b>第二十二章 其他天然有机化合物</b> .....	928
第一节 木脂素类 .....	928

一、双并- $\alpha$ -苯基四氢吡喃类 .....	928
二、4-苯基四氢萘并丁内酯类 .....	929
第二节 缩酚酸类 .....	929
一、苯甲酸酚酯类 .....	929
二、水杨酸或取代水杨酸酚酯类 .....	930
第三节 间苯三酚、核苷、糖类 .....	934
一、间苯三酚类 .....	934
二、腺苷类 .....	935
三、鸟苷类 .....	936
四、糖类 .....	936
第四节 抗菌素类 .....	938
一、蒽醌类抗菌素 .....	938
二、灰黄霉素类 .....	940
第五节 氨基酸及其酯类 .....	941
一、氨基酸类 .....	941
二、氨基酸酯类 .....	947
主要参考文献 .....	947
索引 .....	948
一、化合物分子量索引 .....	948
二、汉英化合物名称索引 .....	961
三、英汉化合物名称索引 .....	1026

# 第一篇 质谱分析总论

## 第一章 绪 论

### 第一节 质谱发展简史

质谱分析是先将物质离子化，按离子的质荷比分离，然后测量各种离子谱峰的强度而实现分析目的的一种分析方法。质量是物质的固有特征之一，不同的物质有不同的质量谱。质谱，利用这一性质，可以进行定性分析；谱峰强度也与它代表的化合物含量有关，利用这一点，可以进行定量分析。

早期的质谱研究工作是同元素的同位素测定紧密相关的。同位素 (Isotope) 这个词于 1910 年第一次使用。第一台质谱仪也是在这一年诞生的。实际上，早在 1886 年就有人提出了有关同位素的概念。用磁场偏转法分离带电粒子以测定其质量的研究工作也是在 1896 年取得了成果。这些研究为后来的质谱学工作提供了一定的基础。

1910 年，英国剑桥卡文迪许 (Cavendish) 实验室的汤姆逊 (Thomson) 研制了第一台现代意义上的质谱仪器。这是一台不能聚焦的抛物线质谱装置。汤姆逊用这台仪器首次发现了同位素的存在。他在分析氦元素时，发现了一个质荷比为 22 的峰。实验证明它既不是  $\text{CO}_2$  的双电荷离子，也不是放射性衰变产物，而是氦元素的一个同位素。这台质谱仪的诞生，标志着科学研究的一个新领域——质谱学的开创。

汤姆逊的第一台质谱仪，由于没有聚焦功能，分辨率较低。通过改进后，这台仪器能够将两个原子质量相差 10% 的离子分开，即分辨率为 10。1919 年，一台具有速度聚焦功能的质谱仪由汤姆逊的同事阿斯顿 (Aston) 研究成功。阿斯顿借鉴了光学理论，将电场和磁场安置成类似于两个光学透镜，使得离子在电场中受到的速度色散作用刚好被其在磁场中的速度色散作用所抵销，最后质量相同而初始速度不同的离子能聚焦在收集器同一处，从而大大提高了仪器的分辨率。由于这台仪器的卓越性能 (分辨率 130，准确度  $10^{-3}$  原子质量单位)，以致它第一次被人们称为质谱仪 (Mass Spectrograph)。阿斯顿在这台仪器上测得了大量元素的新的同位素峰以及定量数据，如他测得氦元素两种同位素 (20、22) 的丰度比为 10:1，这与氦元素的分子量 20.18 基本符合。

在此之前，美国芝加哥大学的丹普斯特 (Dempster) 于 1918 年研制成功了  $180^\circ$  扇形磁场方向聚焦型质谱计。他在这台仪器上独立地发现了几种元素的同位素，并测得许多元素的同位素丰度。这台仪器第一次使用了电测元件作为离子检测器，并通过改变电场或磁场强度的方法来测量不同质量的离子。这台仪器是第一台实际意义上的质谱计 (Mass Spectrometer)。它成了以后许多磁场型仪器的原始模型。

1934 年诞生的双聚焦质谱仪是质谱学发展的又一个里程碑。在此之前创立的离子光学理论为仪器的研制提供了理论依据。双聚焦仪器大大提高了仪器的分辨率，为精确原子量测定奠定了基础。

**1107986**

应该指出,随着几种双聚焦仪器的出现,质谱仪的分析器部分已达到了比较完善的境地,但当时的质谱学研究仍然限于少数几个实验室中。当然,它也取得了不少成果,如1933年有人用 $180^\circ$ 磁场型仪器进行 $3^1\text{H}+7^3\text{Li}\rightarrow 2^4\text{He}$ 的核反应实验。这是第一次用实验证明,爱因斯坦的质量-能量关系公式。

第二次世界大战期间,质谱进入了实际应用领域。首先是美国的原子弹制造计划,需要大量的 $^{235}\text{U}$ ,使质谱仪进入了军事科学领域。另外石油工业也将质谱用于定性、定量分析。1943年,第一台商品质谱仪出售给一家石油公司。质谱仪从此进入了工农业生产领域。如汽油分析、人造橡胶、石油精炼过程控制和真空检漏等工作都应用质谱仪器作为分析、检测工具,并证明为一种准确、快速的手段。

50年代是质谱技术飞速发展的一个时代。在质量分析器方面,高分辨双聚焦仪器性能进一步提高,并出现了四极滤质器(1953年)、脉冲飞行时间分析器(1955年)等。离子化手段也增加了。火花离子源和二次离子源也进入实际应用,后来还进行了串联质谱仪研制。特别值得一提的是,气相色谱与质谱联用成功,从而使得质谱在复杂有机混合物分析方面占有了独特的地位。

最近30年质谱学在各个方面都获得了极大的发展。新的离子化方法如场致电离(FI)、场解吸电离(FD)、化学电离(CI)、激光离子化、等离子体法(ICP)、快原子轰击法(FAB)和电喷雾电离(ESI)等不断出现。复杂的、高性能的商品仪器不断推出,如离子探针质谱仪、三级四极杆串联质谱仪、四极杆飞行时间串联质谱仪、磁场四极串联质谱仪、磁场飞行时间串联质谱仪、磁场型的串联质谱仪、离子回旋共振-傅里叶变换质谱仪等。液相色谱与质谱联用在近10年来有突破性进展,已进入实用阶段。另一方面,低价位、简易型仪器的推出,对扩大和普及质谱分析的应用起了很大的作用。

必须指出,电子计算机是现代质谱仪器不可缺少的一部分。它的主要功能是仪器状态的控制与实验数据处理。很难想象一台没有计算机数据处理系统的色谱-质谱联用仪如何能处理所获得的大量数据,更不必说计算机检索及人工智能谱图解析了。有些技术,如傅里叶变换质谱本身就是建立在快速计算机技术的基础之上的。

在仪器发展的同时,各种与质谱有关的理论研究广泛开展,大大丰富了质谱科学。

## 第二节 质谱分析法的内容

质谱分析法发展到今天,已在许多科学研究及生产领域中起着十分重要的作用。按研究对象来划分,质谱分析大致可分为以下几个分支。

### 一、同位素质谱分析

质谱分析是从同位素分析作为起点的。这方面的工作包括发现元素的新的同位素及测定同位素含量两个方面。早期的质谱分析工作集中于元素的天然同位素发现及丰度测定。这方面数据的积累为确立目前通用的以 $^{12}\text{C}$ 为基准的原子质量单位体系提供了基础。这是质谱对物理学和化学的一大贡献。目前这方面的分析、研究工作已基本结束,同位素分析集中到特定环境下的同位素含量测定上。

质谱既可分析元素的稳定同位素,也能分析某些放射性同位素;既可测定相对含量,也可测定绝对含量。被分析的样品可以是气体,也可以是液体或固体,还可以进行微区分析。质谱是同位素地质学研究的重要工具。通过测定地质样品(岩石、矿物、化石等)中某些同位

素的含量，可确定其形成年代，为地质学及考古工作提供可靠的信息。

同位素质谱分析在研究宇宙样品的成分及同位素构成的工作中起着十分重要的作用。

用有机质谱仪分析同位素标记化合物是研究有机反应历程以及生物体的新陈代谢机理，特别是人体内的代谢过程的有效方法。

## 二、无机质谱分析

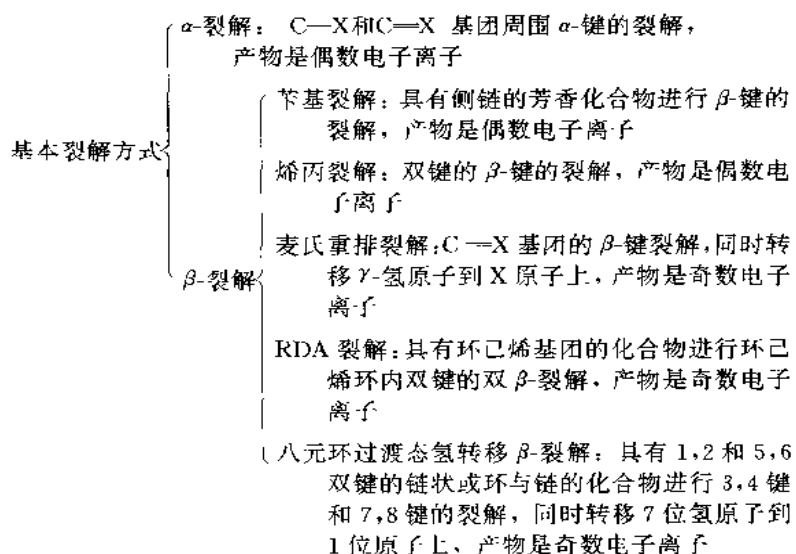
质谱在无机分析中的工作主要包括无机物的定性、定量及材料的表面分析等。用火花源质谱分析法，原则上可测定周期表上从氢到铀的全部元素，检测绝对灵敏度可达 ( $10^{-12} \sim 10^{-13}$ ) g，分析无机材料中的杂质，灵敏度达  $10^{-9}$  级。用质谱法检测某些性质相近的元素，如铈、铅、铋、钨等，得到的数据比其他方法更为可靠。另外，质谱与感应耦合等离子体法 (ICP) 的联用已获成功，使得元素的检测更加方便有效。

对固体样品进行“立体”分析 (包括微区分析、表面分析、纵深分析、逐层分析等) 是无机质谱分析的另一个重要领域。专门进行这种分析的设备也越来越完善。二次离子法 (SIMS) 为此提供了必要的手段。用火花探针法也进行了这方面的工作。

## 三、有机质谱分析

有机质谱学是一门有机化合物分子结构鉴定和测定的科学，有机质谱仪的各种技术无不围绕这项科学开展工作。本手册中的有机质谱图，除了供读者工作中查阅对照外，更主要的是为使读者从中掌握规律性的东西，从而达到读者自己根据图谱解析有机分子结构的目的。

学习和使用质谱最根本的是首先要掌握和遵从有机质谱的基本裂解方式。有机质谱的基本裂解方式粗分有两种，即  $\alpha$ -裂解和  $\beta$ -裂解，细分  $\beta$ -裂解又可分为 5 种，即苯基裂解、烯丙裂解、麦氏重排裂解、RDA 裂解和八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解，全部共 6 种。这 6 种基本裂解方式是世界有机质谱学家多年来对有机化合物在质谱分析中的各种裂解行为的概括性总结，因而具有普遍意义，在图谱解析中必须坚信和遵守<sup>[1]</sup>。



上述的 6 种基本裂解方式，其裂解强度大致如下：

苯基裂解 >  $\alpha$ -裂解 > 麦氏重排裂解、RDA 裂解和八元环过渡态氢转移  $\beta$ -裂解 > 烯丙裂解

这6种基本裂解方式除了烯丙裂解较弱外,其他均较强烈,因而又可把除烯丙裂解以外的其他5种裂解方式所具有的基本结构,称为“定向裂解基团”,这些定向裂解基团主宰着有机化合物分子在质谱中的定向裂解。除了定向裂解基团外,尚有所谓的“次级定向裂解基团”存在,例如,多分支结构、脂环结构、环的张力以及空间位阻(或立体障碍)等结构,加上较弱的烯丙结构也是5种。这5种基团在无定向裂解基团存在时,也能主宰有机分子在质谱中的裂解。这些基团引起的裂解较弱,所以不把它们看成是有机质谱的基本裂解方式。

在有机质谱中,除有基本裂解方式外,尚有各结构类型化合物的类型裂解方式,即相同结构类型的有机分子具有相同的类型裂解方式;不同结构类型的有机分子具有不同的类型裂解方式。各种类型裂解方式都是建立在基本裂解方式的基础之上的,人们不能脱离基本裂解方式来讨论或任意写出各种类型裂解方式。

有机质谱分析虽起步较晚,但发展十分迅速,它已成为当前质谱学研究中的主要分支,是有机化合物结构与成分分析的主要工具。它与核磁共振波谱、红外吸收光谱、紫外吸收光谱一起被称为有机结构分析的“四大谱”。而且它提供了有机化合物最直观的特征信息,即分子量及官能团碎片结构信息。在某些条件下,这些信息足以确定一个有机化合物的结构。在高分辨条件下,将质谱信号通过计算机运算,可以获知其元素组成。因此,质谱仪还具有元素分析的功能。质谱已被广泛应用于各种有机化合物的结构分析。

由于与分离型仪器(气相色谱仪、液相色谱仪)联用的成功,质谱已成为复杂混合物成分分析的最有效工具。这些混合物包括天然产物、食品、药物、代谢产物、污染物等等。它们的组分可多至数百个甚至上千个,含量也可千差万别。用别的方法分析这类样品所耗费的时间为人们难以承受,有时则根本不可能进行。而用色谱-质谱联用法则有可能在较短的时间内对这些组分进行定性分析。结合裂解方法,色-质联用还可分析高分子样品的成分。

石油族组分的定量分析是有机质谱分析的又一个重要方面。石油工业界用这方面的数据来评价石油及其产品的品质。

有机质谱法应用于生物化学、生物医学领域的研究工作已成为当前质谱学发展的热点。用质谱分析糖、核酸、多肽、蛋白质方面的许多成功的研究工作都标志着它作为一种生化分析方法将占据重要的地位。其他方面的进展包括大分子量生物样品的直接质谱分析及微量甚至痕量样品的质谱分析,后者在法庭科学中起着重要作用。用质谱进行临床医学研究也取得了成果。

### 第三节 质谱名词与术语

#### 一、质谱仪器与原理

**离子源**(ion source) 质谱仪器中使样品电离生成离子的部件。

**出现电位**(appearance potential) 由给定分子产生某一特定离子,并伴有中性碎片出现所需的能量。

**电离电位**(ionization potential) 给定分子电离产生特定离子所需的能量,是特殊情况下的出现电位。

**电离效率曲线**(ionization efficiency curve) 选定离子的离子流强度随提供的能量大小变化的曲线。



**质量分析器**(mass analyzer) 质谱仪器中使离子按其质荷比大小进行分离的部件。

**质谱基本方程**(equation for mass spectrometer) 研究磁偏转质谱仪器推导出的反映离子运动状态的基本方程:

$$m/Z = \frac{H^2 R^2}{2V} \quad (1-1)$$

式中  $m/Z$  离子质荷比;

$H$ —— 磁场强度;

$R$ —— 离子运动的曲率半径;

$V$ —— 加速电位。

(这虽然是一个适合于磁场偏转型质谱仪器的方程式,但因历史原因,通常称之为质谱方程或质谱基本方程。)

**质量色散**(mass scatter) 质量色散是描述质量分析器对不同离子分离效果的一个参数。由质量差  $\Delta M$  所引起的两个离子被分开的距离  $D$  被定义为质量色散。

**方向聚焦**(direction-focusing) 有一个小发散角的同一质荷比的离子束被会聚在一起称为方向聚焦。磁场具有方向聚焦的作用。

**能量聚焦**(energy-focusing) 将质量相同但能量(速度)不同的离子会聚到一起称为能量聚焦。

**单聚焦质谱仪**(single-focusing spectrometer) 质量分析器仅有磁场构成,只能起方向聚焦作用的质谱仪器。

**双聚焦**(double-focusing) 指既实现方向聚焦,又实现能量聚焦。

**离子检测器**(ion detector) 质谱仪器中检测离子丰度的部件。

**质量歧视效应**(mass discrimination effects) 质谱仪器中的一些部件,如离子检测器,对不同质量的离子产生不同响应的现象。

**分辨率**(resolution,  $R$ ) 在给定样品的条件下,仪器对相邻两个质谱峰的区别能力。相邻等高的两个峰,其峰谷不大于峰高的 10% 时,就定义为可以区分。分辨率  $R$  的表示法是峰谷为峰高的 10% 时,两峰质量的平均值与它们质量差的比值,即  $R = \frac{M}{\Delta M}$ , 式中  $M$  为两峰质量的平均值,  $\Delta M$  为两峰质量差。

**灵敏度**(sensitivity) 灵敏度是质谱仪器对样品量感测能力的评定指标,是指在规定条件下,对选定化合物产生的某一质谱峰,仪器对单位样品所产生的响应值。

**质量范围**(mass range) 质量范围是评定质谱仪器性能的参数之一。它描述仪器所能测量的最轻和最重离子之间的质量范围。

**单分子分解**(unimolecular decompositions) 质谱离子源中的样品蒸气压通常低到足以忽略分子与分子、分子与离子等发生碰撞反应的程度,所以质谱反应属于单分子分解反应。

**离子-分子反应**(ion-molecule reaction) 在化学电离等高压离子源中,已经电离了的分子(即离子)与尚未电离的分子有较多的碰撞机会,因此发生离子-分子反应。在反应中分子因和离子之间发生质子交换或电荷交换而被电离。

## 二、质谱图和质谱中的离子

**质谱图**(mass spectrum, ns) 以检测器检测到的离子信号强度为纵坐标,离子质荷比为横坐标所作的条状图(见图 1-1)。

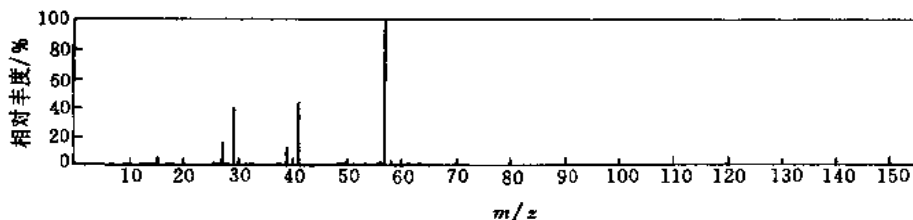


图 1-1 质谱图

**质荷比**(mass charge ratio,  $m/Z$ ) 离子质量(以相对原子量单位计)与它所带电荷(以电子电量为单位计)的比值,写作  $m/Z$  或  $m/e$ 。

**峰**(peaks) 质谱图中的离子信号通常称为离子峰或简称峰。

**离子丰度**(abundance of ions) 检测器检测到的离子信号强度。

**离子相对丰度**(relative abundance of ions) 以质谱图中指定质荷比范围内最强峰为 100%,其他离子峰对其归一化所得的强度。现在,标准质谱图均以离子相对丰度值为纵坐标。

**基峰**(base peak) 在质谱图中,指定质荷比范围内强度最大的离子峰称作基峰,其相对丰度为 100%。

**分子离子**(molecular ion,  $M^+$ ) 分子失去一个电子生成的离子。它既是一个正离子,又是一个游离基,用  $M^+$  表示。分子离子的质荷比等于分子量。

**准分子离子**(quasi-molecular ion) 指与分子存在简单关系的离子,通过它也可以确定分子量。例如分子得到或失去一个氢生成的  $[M+H]^+$  或  $[M-H]^+$  就是最常见的准分子离子。

**碎片离子**(fragment ions) 分子离子在离子源中经一级或多级裂解生成的产物离子。

**同位素离子**(isotopic ions) 由元素的重同位素构成的离子称为同位素离子。它们在质谱图中总是出现在相应的分子离子或碎片离子的右侧(即质荷比较大的一侧)。

**亚稳离子**(metastable ions) 亚稳离子是指那些在离开离子源之后,到达检测器之前这一区域中发生裂解反应的离子。它们一般呈现为很弱的宽峰,出现在非整数质量处。

**多电荷离子**(multiply-charged ions) 带有两个甚至两个以上电荷的离子。它们时常具有非整数质荷比,因而出现在质谱图的分数质量上。最常见的是双电荷离子。

**负离子**(negative ions) 带负电荷的离子,只在负离子质谱中才能被检测。

**本底**(back ground) 在与分析样品相同的条件下,不送入样品时所检测到的质谱信号。亦可称本底质谱。

**总离子流图**(total ions current, TIC) 在选定的质量范围内,所有离子强度的总和对时间或扫描次数所作的图(见图 1-2)。在色谱-质谱联用时, TIC 相当于色谱图。

**质量色谱图**(mass chromatograph, MC) 指定某一质量(或质荷比)的离子其强度对时间或扫描号所作的图(见图 1-2)。

**奇电子离子**(odd-electron ions, OE) 带有未成对电子的离子称为奇电子离子。它们是游离基正离子。通常用“·”表示游离基,用“ $\cdot^+$ ”表示游离基正离子,例  $CH_4^{\cdot+}$ 。

**偶电子离子**(even-electron ions, EE) 仅带有成对电子的离子称为偶电子离子。

**重排离子**(rearrangement ions) 由原子或基团重排或转位而生成的碎片离子。

**母离子**(parent ions) 在任一反应中发生裂解的离子。分子离子在裂解反应中总是母离子。

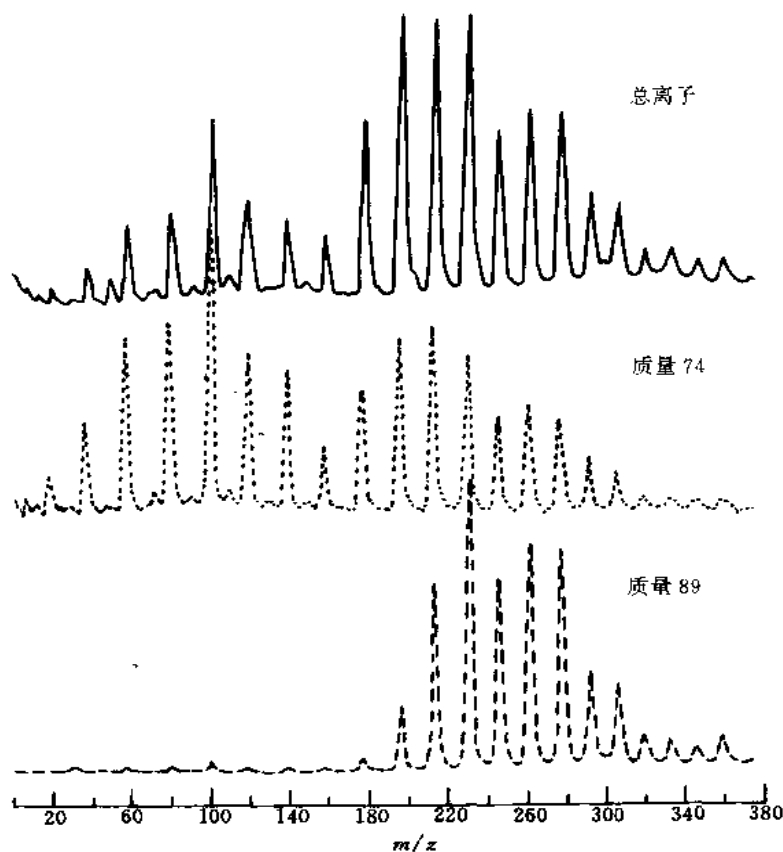


图 1-2 质谱总离子流图和质量色谱图

子离子(daughter ions) 在任一裂解反应中生成的离子。

### 三、质谱分析方法与技术

**精确质量测定(exact mass measurement)** 利用高分辨率的质谱仪器,精确测定离子的质量以确定离子元素(同位素)组成的方法。其原理如下:相对于标准的 $^{12}\text{C}$ 质量(12.00000000),其他每一个元素的同位素都不是整数质量,它们具有唯一的,特征的“质量亏损”,例如 $^{16}\text{O}$ 实际质量为15.99491475。离子的质量则包含了组成元素原子的总的“质量亏损”。所以,由离子的精确质量可以推算出该离子的元素和同位素组成。

**原子质量精确(exact determination of atomic mass)** 用质谱精确测量同位素的原子质量。是现行原子质量测定中的重要方法,可精确到小数点后6~8位。同位素精确的原子量值对原子物理原子核物理有重要意义。

**峰匹配法(peak matching)** 峰匹配法是一种广泛使用的获得离子精确质量的实验方法。它是利用精确测定加速电压比值来得到离子精确质量。根据质谱基本方程(式1-1),当 $H$ 、 $R$ 固定不变时,离子质量(质荷比)与加速电压成反比,即 $m_1v_1=m_2v_2$ 。如果 $m_1$ 为已知精确质量的参考峰,通过实验求得加速电压比 $v_1/v_2$ ,就能得到 $m_2$ 的精确质量值。

**气相色谱-质谱联用(gas chromatograph-mass spectrometer, GC-MS)** 指气相色谱仪和质谱仪的在线联用技术。可用于混合物的快速分离与定性。其中的色谱作为质谱的特殊进样器,

利用它对混合物的强有力的分离能力,使混合物分离成各个单一组分后按时间顺序依次进入质谱离子源,获得各组分的质谱图以便确定结构。

**液相色谱-质谱联用**(liquid chromatograph-mass spectrometer, LC-MS) 指高效液相色谱仪与质谱仪的在线联用。与 GC-MS 类似,液相色谱作为质谱的特殊进样器。与 GC-MS 的差别是 LC-MS 适合于热不稳定、难挥发和大分子类混合物的快速分离和鉴定。

**接口**(interface) 用于协调联用的两种仪器的输出和输入状态的硬件设备。例如,用于 GC-MS 的接口必须协调气相色谱和质谱工作气压相差 8 个数量级的矛盾,即除去色谱柱流出的大量载气,使其不至于破坏质谱离子源的高真空,同时又能将样品传送到质谱离子源中。

**质谱-质谱联用**(MS-MS) 指质谱仪与质谱仪的在线联用。其中,第一个质谱仪用于混合物分离,第二个质谱仪利用二次质谱鉴定各组分。因此,MS-MS 联用也称作“质量分离-质谱鉴定”技术。在 MS-MS 系统中,通常离子源和离子检测器都只有一个,而质量分析器有两个或两个以上。两个质量分析器之间配有碰撞室,用于产生二次质谱。

**软电离技术**(soft ionization) 化学电离、场致电离等低能量电离方式的总称。

**同位素稀释法**(isotope dilution technique) 利用质谱丰度测量来定量求得样品中某一同位素或某一元素的原子数目(或含量)的方法。该方法的基本原理为:把一个已知丰度和重量的同位素稀释剂加入样品中均匀混合,测定样品混合前后丰度变化。根据稀释剂的丰度和重量,可以求出样品中某个含量极低的元素重量或原子数目。

**火花源杂质分析**(analysis by spark source) 这是高纯材料中微量杂质测定的重要方法之一。利用对各元素普遍有效的,且灵敏度相近的火花源电离过程,实现多元素同时检测。选择适当的同位素峰作为待测元素的特征谱线,其强度代表该元素含量。直接利用特征谱线强度可得到半定量结果。定量分析时还应考虑质谱过程中的质量歧视效应,需使用相对灵敏度因子或相对灵敏度系数。

**相对灵敏度系数**(relative sensitivity coefficient) 质谱定量分析时,必须考虑待测物质电离几率、检测器响应等的差异,因此引入相对灵敏度系数的概念。设某标准样品中, $i$ 元素和 $s$ 元素的实际百分含量之比为 $(c_i/c_s)_{\text{真}}$ ,实验测得的比值为 $(c_i/c_s)_{\text{测}}$ ,则相对灵敏度系数为

$$S_{is} = \frac{(c_i/c_s)_{\text{测}}}{(c_i/c_s)_{\text{真}}} \quad (1-2)$$

**相对灵敏度因子**(relative sensitivity factor) 质谱定量分析时,如果只考虑电离几率差异,上述相对灵敏度系数 $S_{is}$ 就称作相对灵敏度因子。

**选择离子检测**(selected ion monitoring) 选择离子检测技术是混合物进行定量分析的一种常用方法。选择能够表征该成分的一个质谱峰进行检测,叫做单离子检测(SID),选择多个质谱峰进行检测,叫做多离子检测(MID)。这种方法的灵敏度高于常规方法,多用于痕量成分的测定。

## 第二章 质谱仪器

### 第一节 质谱仪器的基本结构和分类

一台质谱仪的分析系统一般由四个部分组成，如图 2-1 所示。进样系统按电离方式的需要，将样品无分馏地送入离子源的适当部位。离子源是用来使样品分子或原子电离生成离子的装置，除了使样品电离外，离子源还必须使生成的离子会聚成有一定能量和几何形状的离子束后引出。质量分析器是利用电磁场（包括磁场、磁场与电场组合、高频电场、高频脉冲电场等）的作用将来自离子源的离子束中不同质荷比的离子按空间位置、时间先后或运动轨道稳定与否等形式分离的装置。检测器是用来接收、检测和记录被分离后的离子信号的装置。样品由进样装置导入离子源，在离子源中被电离成正离子或负离子，离子按质荷比大小由质量分析器分离后，被检测系统接收并记录而获得质谱图。

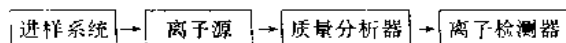


图 2-1 质谱仪分析系统的基本组成

一台完整的质谱仪器，除了分析系统之外还有电学系统和真空系统。电学系统为质谱仪器的每一个部件提供电源和控制电路。真空系统提供和维持质谱仪器正常工作所需要的高真空，通常在  $10^{-4} \sim 10^{-6}$  Pa。另外，现代质谱仪器均配有计算机数据处理系统，用以快速、高效地计算和处理从质谱仪器中获得的大量数据。随着计算机技术的飞速发展，计算机也愈来愈多地承担起仪器控制的任务，使质谱仪器的控制和操作的自动化程度大大提高。

质谱分析的应用很广，适用不同分析目的和要求的质谱仪器种类繁多。仪器的分类问题比较复杂，没有一个统一标准。从不同的出发点可以进行不同的分类

国际上曾经有质谱仪 (Mass Spectrograph) 和质谱计 (Mass Spectrometer) 之分。两者是根据检测器不同而划分的。质谱仪用照相法记录分析结果，质谱计则用电学方法检测离子。由于这两者工作原理相同，用途也相同，而且有的仪器同时采用两种检测方法，因此很难区分。随着电测技术的成熟，大部分仪器采用了电测法，并与电子计算机配套。所以 Mass Spectrograph 这个词用得越来越少了。我国质谱学工作者习惯上统称各种类型的质谱仪器为质谱仪，只是在特定场合才作区分。

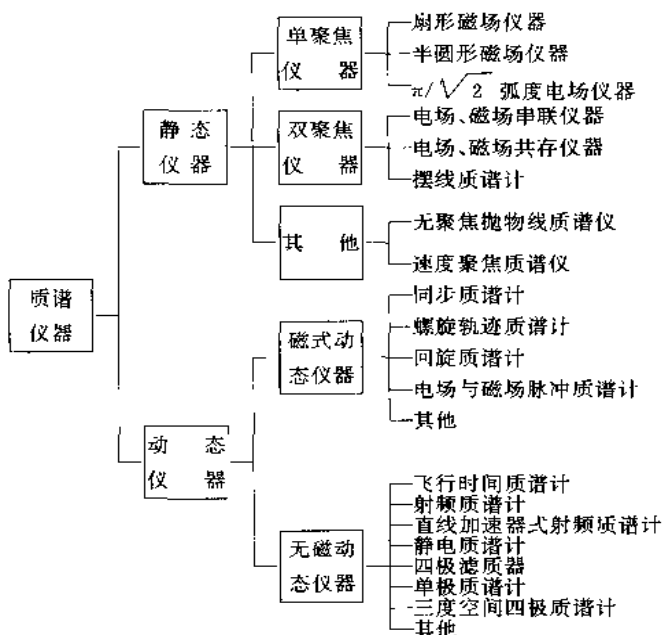
根据仪器的用途，可将质谱仪器分为有机质谱仪、无机质谱仪和同位素质谱仪三种。根据不同的分析对象，对仪器的某些部分作特殊的设计以满足各自的要求。如火花离子源主要用于无机物的分析；色-质联用仪一般认为是有机质谱仪；而同位素分析时，检测器用双接收器就比较方便。当然三者之间并无十分严格的区别。而且现代仪器的功能也越来越多样化，适合各种需要，使这种差别更不明显了。

另一种分类方法是根据仪器的质量分析器的类型区分。这种分类法将仪器分为静态仪器和动态仪器两大类。静态仪器的质量分析器采用稳定磁场，按空间位置把不同质荷比的离子分开。动态仪器则用变化的电磁场构成质量分析器，按时间或空间分离不同质荷比的离子。

在质谱仪器发展历史上，曾经有过很多种类的质谱仪。表 2-1 基本上总结了各种不同类型

的质谱仪。但现在由质谱仪器公司提供的商品质谱分析仪器只有双聚焦磁场型、四极滤质器型、傅里叶变换回旋共振型和飞行时间质谱型 4 种。它们各有优点和缺点。磁场型双聚焦质谱计能达到较高的分辨率，可以用来作离子的精密质量测定；四极滤质器的优势在于结构非常简单，具有小型、低价格的特征；傅里叶变换离子回旋共振质谱比扫描型质谱具有更高的灵敏度和分辨率，但价格昂贵；飞行时间质谱计的最大特点是检测离子的质量数没有上限，适用于大分子化合物的分析。了解各类仪器的特点，并根据应用目的进行选择是一项重要的原则。

表 2-1 质谱仪器的分类



## 第二节 离子源

离子源是质谱仪器最主要的组成部件之一，其作用是使被分析的物质电离成为离子，并将离子会聚成有一定能量和一定几何形状的离子束。由于被分析物质的多样性和分析要求的差异，物质电离的方法和原理也各不相同。在质谱分析中，常用的电离方法有电子轰击、离子轰击、原子轰击、真空放电、表面电离、场致电离、化学电离和光致电离等。各种电离方法是通过对应的各种离子源来实现的，不同离子源的工作原理、组成结构各不相同。作为质谱仪器的一个重要部分，离子源的性能直接影响质谱仪器的主要技术指标。因此，不论何种离子源都必须满足以下一些要求：① 产生的离子流稳定性高，强度能满足测量精度；② 离子束的能量和方向分散小；③ 记忆效应小；④ 质量歧视效应小；⑤ 工作压强范围宽；⑥ 样品和离子的利用率高。

### 一、电子轰击型离子源

利用具有一定能量的电子束使气态的样品分子或原子电离的离子源称为电子轰击离子源 (Electron Impact Ion Source, 简称 EI)。电子轰击离子源能电离气体、挥发性化合物和金属蒸气。因其结构简单、电离效率高、通用性强、性能稳定、操作方便，是质谱仪器中广泛采用

的电离源。尽管为了适应不同样品电离的需要，各种新型离子源不断产生，但电子轰击源仍不失为一个基本装置广泛配置在商品有机质谱、气体质谱和同位素质谱仪中。应该特别指出的是电子轰击源是最早用于有机质谱仪的一种离子源。电子轰击质谱能提供有机化合物最丰富的结构信息，有较好的重复性。通过对单分子裂解规律的研究，已总结了较完整的谱图解析方法，并积累了数万个化合物的标准谱图。因此，电子轰击离子源是有机化合物结构分析的常规工具。

电子轰击离子源一般由电离盒、灯丝（或称阴极）、栅极、电子收集极、狭缝、永久磁铁、电离盒加热器、热电偶以及一套离子光学系统（或称透镜系统，包括推斥极、引出极、聚焦极、Z向偏转极、引出极、聚焦极、Z向偏转极等）组成（见图2-2）。

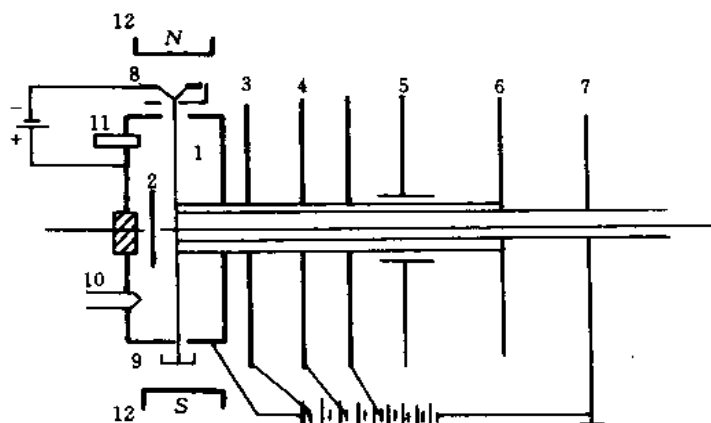


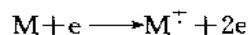
图2-2 电子轰击型离子源示意图

1—电离盒；2—推斥极；3—引出极；4—聚焦极；5—Z向偏转极；6—总离子流检测极；  
7—主狭缝；8—灯丝；9—电子收集极；10—电离盒加热器；11—热电偶；12—永久磁铁

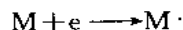
灯丝通常用钨丝或铯丝制成。在高真空条件下，当电流通过阴极时，灯丝温度高达2000°C左右，炽热的灯丝发射出电子。电子在电离电压（即加在电离盒和灯丝上的电压差）下加速，获得能量，并经栅极聚焦成束，经电子入射口进入电离盒。在电离盒中电子与气态的样品分子或原子相互作用，当电子能量高于样品的离子化电位时，样品分子或原子发生电离。永久磁铁产生的磁场使电子在电离盒内作螺旋运动，增加了电子与气态分子或原子之间作用的几率，从而提高电离效率。穿过电离盒的电子被电子收集极收集。离子在电离盒中一旦形成，就立即在推斥极和引出极作用下被拉出电离盒。聚焦极和Z向偏转极使离子聚焦成束。在检测正离子时，电离盒加数千伏的正高压，推斥极电位稍高于电离盒的电位；如检测负离子，则电离盒加负高压。狭缝通常接地。因此，电离盒和狭缝之间的电压差等于电离盒上所加电压，这一电压称为加速电压（Accelerating Voltage）。单电荷离子在电离盒和狭缝之间的加速电场中获得电势能，然后转化为动能，并以一定速度进入质量分析器。

根据被分析样品的性质，电离盒加热器加热并维持电离盒在适当的温度范围内。热电偶用于测温和控温。

在电子轰击源中，被测物质的分子（或原子）或是失去价电子生成正离子：



或是捕获电子生成负离子：



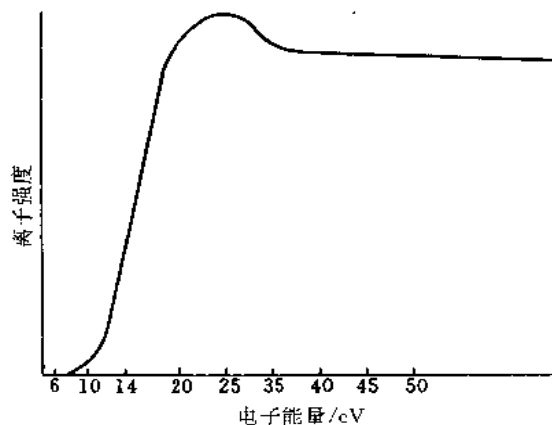


图 2-3 吡啶分子电离效率曲线

一般情况下,生成的正离子是负离子的 $10^4$ 倍。如果不特别指出,常规质谱只研究正离子。轰击电子的能量至少应等于被测物质的电离电位,才能使被测物质电离生成正离子。元素周期表中各元素的电离电位在(3~25)eV(电子伏特)之间,其中绝大部分低于15eV;氦(He)的电离电位最高,为24.6eV,有机化合物分子的电离电位一般在(7~15)eV。如果轰击电子能量正好等于被测物质的电离电位,必须使电子的所有能量全部转移给被测物质,方能使其电离。实际上能获得电子所有能量的分子或原子数量相当有限,此时电离效率很低,提高轰击电子的能量有利于增加电离效率。以所得到的离子强度对电子能量作图,可得电离效率曲线。图2-3是吡啶分子电离效率曲线,曲线的起点即为吡啶的电离电位。随电子能量升高,电离效率急剧上升,但当电子能量超过30eV之后,曲线渐趋水平。为了获得可重复的质谱图,轰击电子能量一般为70eV,但较高的电子能量可使分子离子上的剩余能量大于分子中某些键的键能,因而使分子离子发生裂解。为了控制碎片离子的数量,增加分子离子峰的强度,可使用较低的电离电压。一般仪器的电离电压在(5~100)V范围内可调。

电子轰击源的一个主要缺点是固、液态样品须汽化进入离子源,因此不适合于难挥发的样品和热稳定性差的样品。炉状离子源和克努曾室离子源是为了解决难挥发样品进样而对电子轰击源进行的改进。这两种源的基本结构与一般的电子轰击源相同,但样品是在电离室附近气化的。炉状源在电离室旁边或内部装一小型电炉,炉温可达 $1000^{\circ}\text{C}$ ,难挥发样品在高温下蒸发,并很快到达电离区电离(图2-4)。克努曾室离子源则是将样品置放在石墨或其他材料的坩埚中,用电阻丝或电子轰击等办法加热,使坩埚升温,最高可达 $2700^{\circ}\text{C}$ 。样品蒸发后,分子以克努曾扩散形式进入电离室。

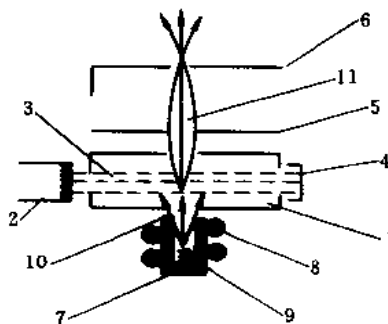


图 2-4 炉状离子源简图

1—电离室; 2—灯丝; 3—电子束;  
4—电子收集极; 5—引出极;  
6—主狭缝; 7—炉; 8—加热丝;  
9—样品; 10—样品蒸气; 11—离子束

## 二、离子轰击型离子源

### (一) 概述

具有一定能量的初级离子束轰击样品靶引起溅射,利用这种效应做成的质谱离子源统称离子轰击型离子源。离子轰击时得到的溅射产物一部分是离子,它们可以直接利用,经透镜系统、质量分析器获得表征靶表面成分的质谱。这种方法称作二次离子质谱 SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry)。溅射的另一部分产物是中性粒子,用适当的方式将这部分中性粒子电离,然后进行质量分析,同样能够得到样品靶表面的组成情况。这种方法叫做溅射中性粒子质谱 SNMS (Sputtered Neutrals Mass Spectrometry) 或二次中性粒子质谱 (Secondary Neutrals Mass Spectrometry),这是新近发展起来的一种表面分析技术。离子轰击



样品靶时还发生一些其他的物理过程，有的也可用于表面分析，但不属于质谱范围，所以不作介绍。

离子轰击型源在固体表面和薄层分析中极为有用。初级离子能够通过透镜系统会聚成细束，在样品靶上产生直径为微米级的束斑，通过束扫描能进行表面微区分析；利用束的剥蚀则可以做深度分布分析，深度分辨可达1~2个原子距离。离子轰击型源在有机化合物结构分析方面的应用最近也有较大发展。

## (二) 基本原理和仪器结构

### 1. 溅射过程及溅射电离的机理

一个几千电子伏能量的离子束（初级离子）和固体表面碰撞时，初级离子和固体晶格粒子相互作用导致的一些过程如图2-5所示。一部分初级离子被表面原子散射了，另一部分入射到固体中，经过一系列碰撞后，将能量传递给晶格。获得一定能量的晶格粒子反弹发生二级、三级碰撞，使其中一些从靶表面向真空发射，即溅射。溅射出来的晶格粒子大部分是中性的，只有一部分是二次离子——正离子或负离子。

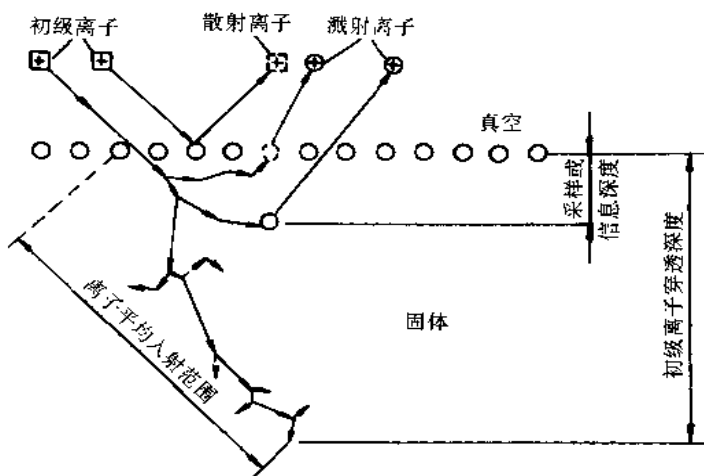


图 2-5 溅射电离过程解释

关于二次离子产生的机理，有许多学者进行了研究，C. A. Evans 的综述认为有两种过程导致二次离子产生。一种是“动力学”过程。连级碰撞的结果使电中性的晶格粒子发射到真空中，其中一部分处于亚稳激发态，它们在固体表面附近将价电子转移到固体导带顶端而电离。另一种是“化学”过程，认为在样品靶中存在化学反应物质，比如氧，由于氧的高电子亲和势减少了自由导带电子数目，这就降低了在固体中生成的二次离子的中和几率，允许它们以正离子发射。反应物质可能是固体中本来就存在的，也可以是以一定的方式加入体系的。在这两个过程中，“化学”过程起主导作用。

### 2. SIMS 源的结构

SIMS 源的基本结构如图2-6所示。一次离子源产生初级离子，初级离子经过一系列透镜、狭缝，加速聚焦成直径为几微米至几十微米的离子束，轰击在样品靶上。溅射出的二次离子经过另一组透镜加速、聚焦进入质量分析器。

二次离子质谱是应用广泛的表面分析技术之一，也是难挥发和热不稳定的生物有机分子结构分析的一种新技术。但是，由于二次离子溅射产率一方面受样品表面化学环境的影响（基体效应），一方面受被测样品种类的影响，定量分析很困难。下面叙述的二次中性粒子质

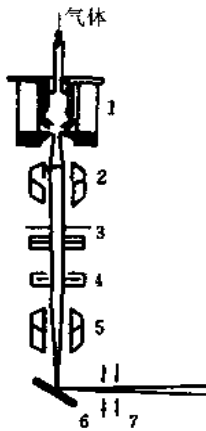


图 2-6 SIMS 离子源结构示意图  
 1—一次离子源；2—束控制板；  
 3—聚光镜；4—物镜；5—束偏转板；  
 6—样品靶；7—二次离子透镜

谱则可弥补这一不足。

### 3. SNMS 源的结构

SNMS 和 SIMS 的区别在于它是利用溅射产生的中性粒子进行分析的。由于质谱仪器只对离子有响应，因此在质量分析器前必须安装一个中性粒子电离装置，通常称为后电离装置。这是 SNMS 的关键部件。可以用电子碰撞、脉冲激光或气体放电等方式使中性粒子离解。

根据初级离子来源不同，SNMS 的离子源可以分成直接式和分立式两种。在直接式中，轰击样品靶的初级离子来自于后电离装置。如，西德 Leybold-Heraeus 公司生产的 SNMS 仪器 [见图 2-7 (a)] 使用一个惰性气体高频等离子体作后电离装置。在装置中除产生大量电子外，还有等量的  $Ar^+$  存在。当靶和等离子体之间加一定的电压，且靶的电压低于等离子体时， $Ar^+$  就能用作初级离子。如果外加一个产生初级离子的一次离子源，就是分立式，见图 2-7 (b)。在分立式离子源中，样品靶的电位高于等离子体。为了防止溅射产生的二次离子进入后电离装置干扰分析结果，在样品和后电离室之间常加电栅网。直接式的优点是能使用均匀的、高电流密度的一次离子流，适合于做高分辨深度分布分析。分立式可以独立地调节初级离子束的能量和束流，适合于作不均匀样品的微区分析。图中  $L_1$ 、 $L_2$  为两个（离子）透镜。

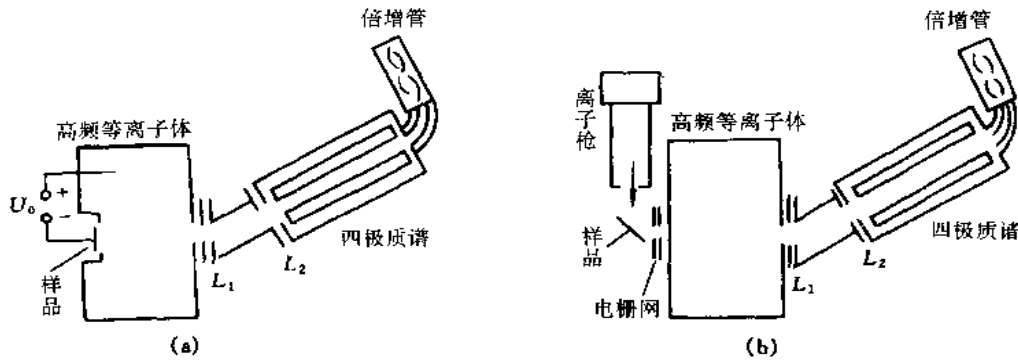


图 2-7 SNMS 谱仪示意图  
 (a) 直接式；(b) 分立式

与 SIMS 相比，SNMS 的优点是：① 由于溅射和电离过程分开，其信号强度不受基体效应影响；② 溅射产物中，中性粒子的量大大超过二次离子，因此 SNMS 有更高的灵敏度，加之各种元素几乎有相同的溅射产率，所以 SNMS 特别适合于定量分析。

### 三、原子轰击型离子源

与离子轰击型离子源相似，原子轰击型离子源也是利用溅射使样品电离的，所不同的是用于轰击的粒子是快速的中性原子，因此原子轰击型离子源一般称为快原子轰击源 FAB (Fast Atom Bombardment Source)。

快原子轰击源是 80 年代发展起来的一种新技术。由于电离在室温下进行和不要求样品气化，这种技术特别适合于分析高极性、大分子量、难挥发和热稳定性差的样品。与场解吸电

离(FD)相比,快原子轰击具有操作方便、灵敏度高、能在较长时间内获得稳定的离子流、便于进行高分辨测试等优点。因此得到迅速发展,成为生物化学研究领域中的一个重要工具。快原子轰击质谱不仅有强的分子离子或准分子离子峰,而且有更多的碎片离子;不仅能得到正离子谱,而且还可以得到灵敏度相当高的负离子质谱,在结构分析中能提供更丰富的信息。这一技术的不足之处主要是:①甘油或其他基质(matrix)在低于400的质量范围内产生许多干扰峰,使样品峰很难辨认;②对于非极性化合物,灵敏度明显下降;③易造成离子源污染。

图2-8是快原子轰击源的结构示意图。在放电源中,氩气被电离为 $Ar^+$ ,经过一个加速场, $Ar^+$ 具有5~10keV的能量,快速的 $Ar^+$ 进入一个充有(0.01~0.1)Pa氩气的碰撞室,与“静止”的Ar原子碰撞,发生电荷交换。即

$$Ar^+ (\text{快速}) + Ar (\text{“静止”}) \rightarrow Ar (\text{快速}) + Ar^+ (\text{“静止”})$$

生成的快速Ar原子保持了原来 $Ar^+$ 的方向和大部分能量,从碰撞室射出,轰击涂敷在铜靶(或银靶)上的样品,由样品中直接轰击出二次离子。二次离子经加速、聚焦后进入质量分析器。在射出碰撞室的快原子中还夹杂有 $Ar^+$ ,在碰撞室和靶之间设置的偏转极可以将 $Ar^+$ 偏转掉,仅使Ar原子轰击样品。氙气(Xe)、氦气(He)等其他惰性气体的原子也可用作轰击粒子。

如果固体样品直接涂在靶上,在快原子轰击到的小区域内,样品表面被破坏,使离子流不能维持较长时间。因此,通常先将样品溶于称为基质的低挥发性液体中,再涂到靶上。基质的流动性使样品不断补充到轰击区域。常用的基质有甘油、硫代甘油等。

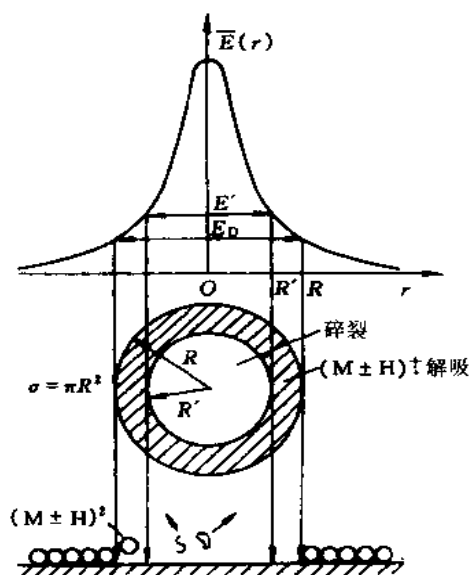


图2-9 激发区的平均能量E分布图

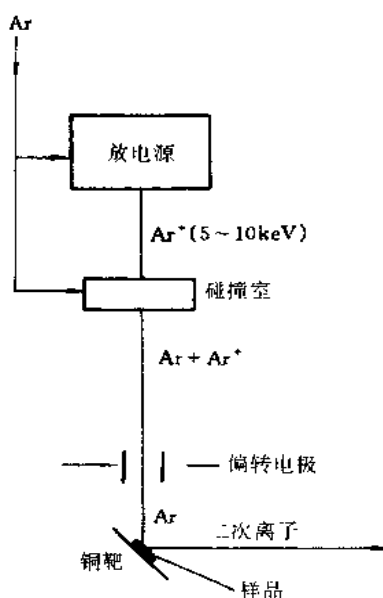


图2-8 快原子轰击源结构示意图

在快原子轰击电离的机理研究中,提出了“前体模型”(Precursor model)论点,其要点如下:

(1) 在初级粒子轰击之前,二次离子的前体就已经在靶的表面上存在了。

(2) 当初级粒子轰击样品靶时,二次离子很快获得动能并以极快的速度( $<10^{-12}s$ )发射。

(3) 根据电荷守恒的一般原理,二次离子的前体从靶表面分离时倾向于正、负电荷相等,即正、负离子以同等的几率发射。

(4) 如较大的能量传递给二次离子的前体,将导致其裂解。

当初级粒子轰击靶时,在靶上以轰击点为中心的一个小区域内产生一个激发区,初级粒子传递给激发区的能量分布可用图2-9定性描述,平均能量E是距离r的函数。在轰击点附近,传递的能量大,溅射产生碎片离子。在离轰击点稍远的地点(图中环状阴影部分),

溅射产物为分子离子。离轰击点更远的区域，由于  $E$  很小，不引起溅射。

前体模型能很好地解释实验结果，但总体来说，关于二次离子产生的机理研究远远不如快原子轰击技术在应用方面的发展那么迅速。

#### 四、放电型离子源

放电型离子源是利用两个电极之间的真空击穿来产生离子的。在真空条件下，改变两个

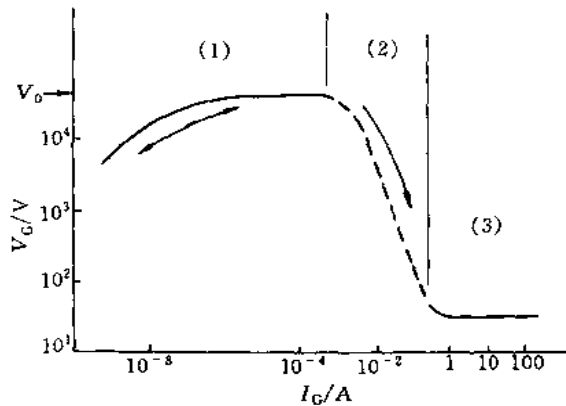


图 2-10 真空火花放电曲线

电极间的电压  $V_G$ ，会引起极间电流  $I_G$  的变化。两者之间的关系可以用图 2-10 中的  $V_G-I_G$  曲线来描述。当极间电压  $V_G$  增加到  $10^4$  伏左右时，两极间出现预击穿电流，其强度约为  $1\text{mA}$ ，这个阶段称为预击穿区域 (1)，在这个区域中过程是可逆的；当电压继续增加到某一点时，由于多种效应使荷电粒子增殖，产生“雪崩”，即火花击穿 (2)。这时  $V_G$  突然下降， $I_G$  急剧上升，这是一个不可逆过程；如果外部电路的阻抗较低，储备了足够的能量，便导致弧光放电区域 (3)，此时极间电压下降到接近蒸气的电离电位。利用火花击穿或弧光放电现象可以制成真空放电电源。

##### (一) 高频火花源

高频火花离子源 (High Frequency Spark Ion Source) 是广泛使用的一种真空放电型离子源。它利用两个电极间高压击穿产生离子。高频火花源应用范围广，能分析多种形态的导体、半导体和绝缘体材料。而且对所有的元素都有大致相同的电离效率，因此，特别适合于定量分析，是测定高纯材料中微量杂质的重要方法之一。高频火花源具有高的灵敏度，检测限可达  $3\text{ng/g}$ 。高频火花源的缺点是生成的离子能量分散大，约为  $10^3\text{eV}$ ，离子流的稳定性差。因此，质量分离必须采用双聚焦质量分析器，离子检测一般要用积分测量。

图 2-11 是高频火花源的结构示意图。被分析物质以适当的方式制成样品电极，和参比电极相距约  $0.1\text{mm}$  (属于窄间隙)。在电极间加高频 (兆赫) 高压 ( $10^4\text{V}$ )，发生火花击穿 (Spark Breakdown) 时，产生一定数量的正离子。其电离机理简述如下：当两电极间的平均电场强度达到  $10^5\text{V}\cdot\text{cm}^{-1}$  时，有一个小的预放电电流流过，这是由于阴极表面的晶须场致发射电子产生的。

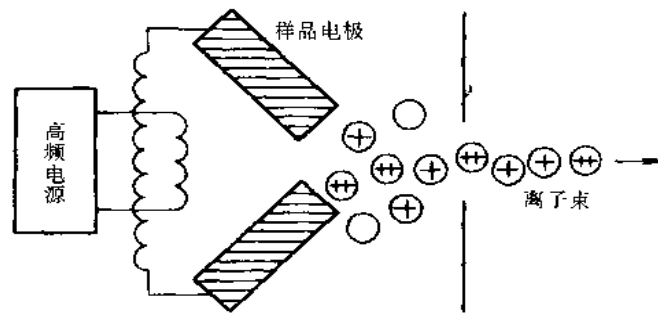


图 2-11 高频火花离子源的示意图

电子轰击在阳极上，使阳极加热蒸发，并使蒸气电离。产生的正离子轰击阴极发生溅射，溅射出的中性粒子，又被电子电离，生成的正离子引起更激烈的阴极溅射。如此循环，当电子和离子流达到一定强度时，电极间的电压骤然下降，发生火花击穿，这一

过程可用图 2-12 形象地表示。

使用高频火花源的一个关键是制作电极，对不同形态、不同导电性能的样品有不同的电极制作方法。如果样品是块状导体，可以直接裁制成约 1mm 直径，10mm 长的柱状（或条状）电极；如果是粉末样品，可以冲压成上述形状；液体样品要加充填物。对于非导体材料，则需要采用适当的方法，使电极有较好的导电性能：一种方法是在非导体样品粉末中掺入良导体材料，如石墨、金、银、铜粉，然后冲压成电极；另一种方法是在非导体表面敷镀导电层，或在样品下面衬导体基片。

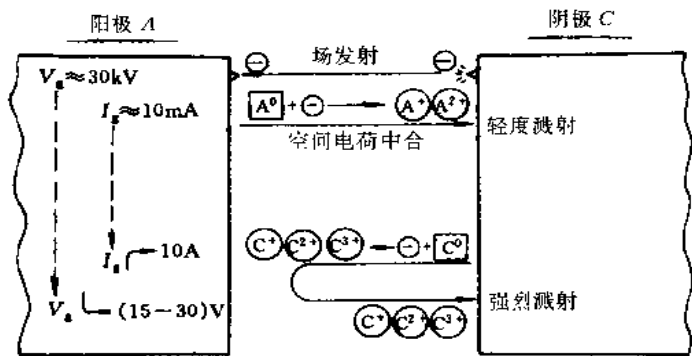


图 2-12 火花电离过程

## (二) 振动电弧源

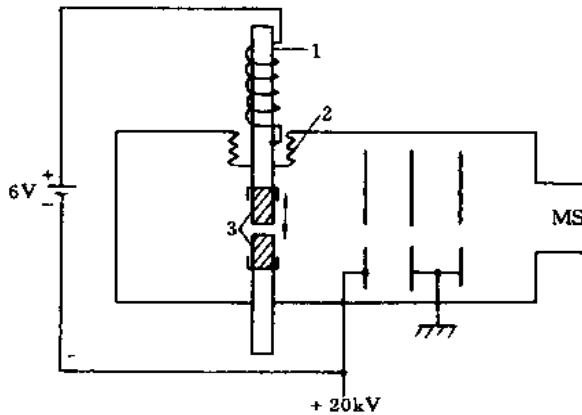


图 2-13 振动电弧源的示意图

1—铁芯；2—波纹管；3—样品

振动电弧离子源 (Vibrating Arc Ion Source) 是另一类型的真空放电源。图 2-13 是它的结构示意图。它有两个相距很近的棒状样品电极，在两电极上加 6V 的直流低压。用一个类似门铃的电路使其中一个电极振动，从而使两个电极忽而接触，忽而离开。当两个电极离开时，极间电压为 6V。当两电极接触时，极间电压降为 0，电流指数上升。振动电极向反方向移动，两电极的接触压力渐渐变为 0，接触电阻变得很大，引起接触区域的熔融，当电极分开时产生所谓的“液体桥” (Liquid Bridge)。液体桥断开时，产生电流约 15A，电压约 20V 的低压电弧，同时产生离子和光的发射。当电弧消失时，产生一突变的感应电压。电极每作一个周期振动，就重复一次上述过程。

电极每作一个周期振动，就重复一次上述过程。

振动电弧源所产生的离子能量分散比高频火花源小，但是振动电弧源要求电极有足够的导电性能和机械强度。因此，不适合于分析高电阻率的半导体、粉末和脆性材料。在一些商品仪器中，振动电弧源和高频火花源被组合成两用离子源。

## 五、表面电离源

如果将样品涂布在金属表面，当金属表面的温度足够高时，样品会发生蒸发电离。表面电离源 (Surface Emission Ion Source) 就是利用这一现象制成的。表面电离源广泛应用于同位素质谱，尤其适合于分析碱金属、碱土金属、稀土和铜系等低电离电位的元素。它有良好的选择性，能避免高电离电位的本底气体和杂质的干扰，得到比较“纯净”的质谱图；检测灵敏度较高，使用三带源（见后）可检测  $10^{-8}$ g 样品。表面电离只产生单电荷离子，离子初始能量发散很小，但离子流的稳定性差。由于不同元素的电离效率不同，表面电离源一般只用于

定性和半定量分析。

表面电离时，样品的蒸发和电离是同时发生的，在飞离金属表面的粒子中既有离子，又有中性粒子，电离效率由 Langmuir-Kingdon 公式描述

$$n_+/n_0 = g_+/g_0 e^{-(\varphi-\omega)/kT}$$

其中， $n_+$ 、 $n_0$  分别为单位时间内离开金属表面的正离子数目和中性粒子数目； $g_+$ 、 $g_0$  分别为离开金属表面的离子态粒子和原子态粒子的统计权重因子； $\varphi$  是被分析样品的电离电位，单位为 eV； $\omega$  是金属的表面功函数，单位为 eV； $k$  是波尔兹曼常数 ( $1.38 \times 10^{-23} \text{J} \cdot \text{K}^{-1}$ )； $T$  是热力学温度，单位为 K。

对负离子来说，公式为

$$n-/n_0 = g-/g_0 e^{EA-\omega/kT}$$

其中， $EA$  是被分析样品的电子亲和势。

由上面两式可得知影响表面电离的因素是金属材料的表面功函数  $\omega$ ，被分离物质的电离电位  $\varphi$  (对负离子来说是电子亲和势  $EA$ ) 和温度  $T$ 。电离效率 ( $n_+/n_0$  或  $n-/n_0$ ) 随金属的表面功函数增大而增高。因此，表面电离源一般选用铂、铯、钨、钽等高功函数的金属作为电离表面。表 2-2 列出一些金属的表面功函数和熔点。

表 2-2 一些金属元素的表面功函数和熔点

元 素	Ni	Pd	Pt	Rh	Ir	Ta	Re	W
功函数/eV	5.03	4.99	5.32	4.80	4.57	4.19	5.1	4.52
熔点/°C	1453	1553	1769	1985	2454	2996	3180	3410

$n_+/n_0$  随被分析物质的电离电位降低而增高。因此，这一方法适合于分析低电离电位的样品。 $n-/n_0$  随被分析物质的电子亲和势增大而提高。表 2-3 列出了部分元素的电离电位。电离效率还与电离表面的温度有关，根据 Langmuir-Kingdon 公式可以计算出各种元素在某一金属表面电离生成足以检测的离子流所需的温度，从而控制温度提高分析的选择性。

表 2-3 部分元素的电离电位

元 素	电离电位/eV	元 素	电离电位/eV	元 素	电离电位/eV	元 素	电离电位/eV
铝(Al)	5.97	铥(Ho)	6.02	铷(Rb)	4.17	钨(W)	7.94
钙(Ca)	6.11	铟(In)	5.79	钌(Ru)	7.37	铀(U)	6.08
镝(Dy)	≈6.8	锂(Li)	5.40	钐(Sm)	≈5.6	镱(Yb)	6.22
铈(Er)	6.10	镱(Lu)	5.43	钠(Na)	5.14	钇(Yt)	6.5
镱(Eu)	5.64	铈(Nd)	≈6.3	锶(Sr)	5.69	铪(Zr)	6.95
钆(Gd)	6.7	钾(K)	4.34	铽(Tb)	6.7		
镱(Ga)	5.97	铈(Pm)	5.55	铪(Tm)	6.18		
铪(Hf)	7.0	铈(Rh)	7.46	铪(Tl)	6.84		

图 2-14 是表面电离源的示意图。源中有用以蒸发电离的金属表面，通常称作“带”(A)。样品涂在带上，用电流加热带并控制其工作温度。与其他类型的离子源相同，表面电离源中也有一套透镜系统(B)，用于准直、聚焦和引出离子束。

带的形状、数目和布置有几种不同方式。结构最简单的是单带电离源(如图 2-14)。当带加热到适当的温度，涂布在带上的样品就蒸发电离。单带源适合于碱金属等低电离电位的元

素分析。对于电离电位较高的样品，为了得到足够高的电离效率，带应处在较高的工作温度。在达到合适的工作温度之前，离子流很弱，但样品却因大量蒸发而几乎丧失殆尽。为了解决这一问题，1953年 M. G. Inghram 和 W. A. Chupka 提出了多带结构，即在源中设置两种带，一种用于涂样，称样品带；一种用于电离，叫电离带。这两种带的温度可分别加以控制。一般来说，电离带处于足够高的温度，而样品带温度较低，只须维持蒸发产生足够的束流即可。这样既能节制蒸发，又能获得较高的电离效率。常见的多带源采用三带，三带的位置有不同的布置方式（见图 2-15）。

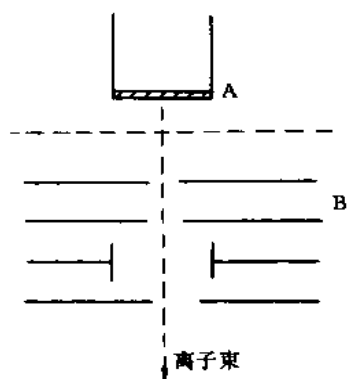


图 2-14 表面电离源的示意图

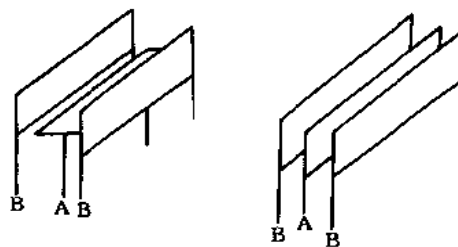


图 2-15 两种不同布置的三带源

A—电离带；B—样品带；

还有一种舟形的单带，是 F. A. White 于 1956 年首次使用的。铯或钨带折成舟形，内盛样品。由于舟内蒸发的样品在逸出带前会与炽热的金属表面进行多次碰撞，增加了生成离子的机会，因此，舟形单带的电离效率接近于三带源。

## 六、场致电离和场解吸电离源

如果将正高压加在金属细丝（或金属刀片、尖端）等场发射体（Emitter）上，形成  $10^7 \sim 10^8 \text{V} \cdot \text{cm}^{-1}$  的高场强。有机化合物的蒸气在高静电场的发射体附近，分子内库伦场的势能面发生变形，价电子以一定几率穿越有限厚度的势垒壁到达金属发射体，使分子电离。场致电离源（Field Ionization Ion Source 简称 FI）就是根据这一原理制成的。

场致电离提供给分子的能量大约为  $12 \sim 13 \text{eV}$ ，而有机化合物的电离电位约为  $10 \text{eV}$ ，因此没有过多的剩余能量使分子离子进一步裂解。这是一种温和的离子化方法，谱图以分子离子 ( $M^+$ ) 或准分子离子 ( $[M+H]^+$ ) 强、碎片离子少为特征。FI 主要用于测定有机化合物的分子量，对于那些在电子轰击条件下不生成或只生成很弱的分子离子峰的样品，FI 是一个极有用的补充。由于大部分场致电离质谱相当简单，这种方法也被用于混合物的分析。例如，测定同系物的分子量分布。

尽管场致电离的条件比较温和，但由于液、固态样品需要气化后才能进样，仍然不能解决难汽化和热不稳定化合物的分析问题。1969 年 H. D. Becky 提出的场解吸（Field Desorption，简称 FD）技术，改进了进样方式，将样品涂布在发射体上，直接送进离子源，当发射体上通过几毫安至几十毫安电流时，样品就被解吸出来，扩散到高场强的场发射体域中离子化。由于场解吸电离源首次成功地解决了难汽化和热不稳定化合物，如有机酸、糖类、肽、生物碱、抗菌素、有机金属化合物等分析问题，扩大了有机质谱的应用范围，因此得到普遍重视，大部分商品有机质谱仪配置了场致电离/场解吸电离源。但是，由于这两种技术操作复杂，需要

较高的实验技巧和一定的操作经验，使其推广使用受到较大的障碍。当其他一些适合于难气化和热不稳定化合物分析的技术，如快原子轰击、有机二次离子质谱等出现后，场电离源的重要性大大下降了。

场致电离和场解吸电离源的灵敏度较电子轰击源低1~2个数量级，离子流稳定性较差。

有机化合物的蒸气分子在高静电场的发射体附近发生离子化的过程是按量子力学的隧道

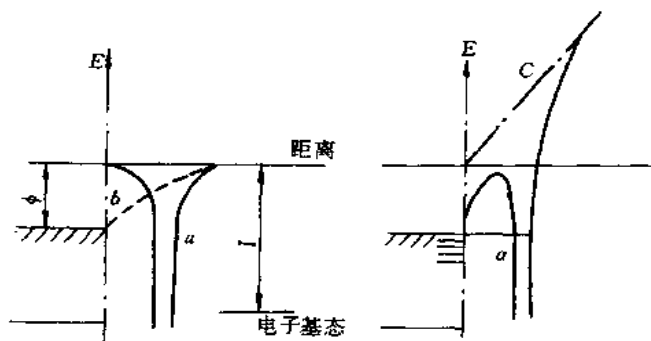


图 2-16 金属表面前方的原子或分子的势能图

效应进行的，图 2-16 中金属尖端的前方存在气态的原子和分子，左图表示了没有外电场存在的情况，曲线 *a* 表示原子或分子的价电子势能曲线，金属表面到横坐标的距离  $\phi$  为金属的功函，它表示从金属表面拉出电子所需的能量，也就是自由电子的势能，曲线 *b* 表示自由电子与金属中的空穴相互作用的空穴势能曲线。右图是正高压加在金属上的情况，曲线 *c* 是外电场的势能曲线，它是一个线性的电位梯度，可用  $eFx$  来表示（其中  $F$  为场强， $x$  为距离）。

它和左图中的 *a*、*b* 曲线叠加形成了右图中的 *a* 曲线，*a* 曲线在靠近金属这一侧有一势垒，存在于金属和原子或分子之间。在外电场存在下，原子或分子的价电子势能达到或高于金属的最高费米电位  $\mu$ ，此时不需要有达到势垒能量的电子就以一定的几率到达金属。一旦价电子到达金属，原子或分子就形成正离子而远离金属，这就发生了场离子化。使原子或分子发生电离的临界距离  $x_c = \frac{I - \phi}{F}$ （其中  $I$  为原子或分子的电离电位， $F$  为场强， $\phi$  为金属的功函）。理论计算此距离的典型值为 0.5nm，但实验表明离子化发生在 10nm 处。这意味着有一段死区域，增加场强就是为了缩小死区域。原子或分子的隧道概率  $D$ （或称势垒穿透概率）与  $I$ 、 $\phi$ 、 $F$  值相关，可以用公式近似表示  $D = E^{-(I - \phi)I + f(F \cdot D)}$ 。场强越大， $(I - \phi)$  越小，隧道效率越高。

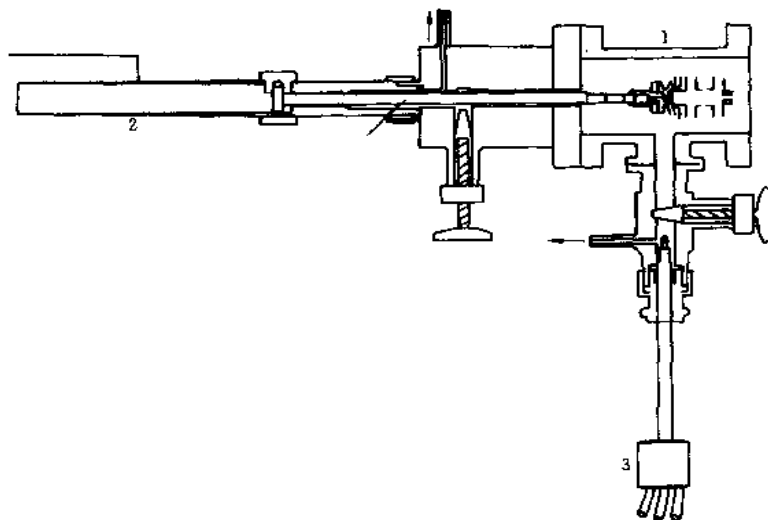


图 2-17 FI/FD 复合源

1—离子源；2—FI/FD 发射体推杆；3—直接进样杆



FI/FD 离子源的基本结构如图 2-17 所示。一个发射体推杆(其结构与直接进样杆相似)可将发射丝送入电离盒。发射丝的位置可以进行微调,使其对准狭缝,这时产生的大部分离子能通过狭缝,进入质量分析器,离子利用率较高。离子源配有高压供给系统,可在发射丝和狭缝之间加几千伏高压。在检测正离子时,发射丝作阳极(处于正电位),狭缝作阴极。当发射丝处于负电位时,则可检测负离子。使用 FI 时,样品可从间接进样、加热进样、气相色谱或直接进样系统导入,样品蒸气在发射丝附近电离;使用 FD 操作时,样品预先涂在发射丝上,然后由推杆送入电离盒。发射丝上可以通几毫安到几十毫安电流,用于加热,促使涂布在其表面的样品解吸。样品的涂布是一项极为细致的工作。目前常常采用微型注射器,将样品稀溶液的液滴挂在注射器针尖上,然后发射丝在液滴中往复运动,随着溶剂的挥发,样品粘在发射丝上。这一操作一般在显微镜下进行。

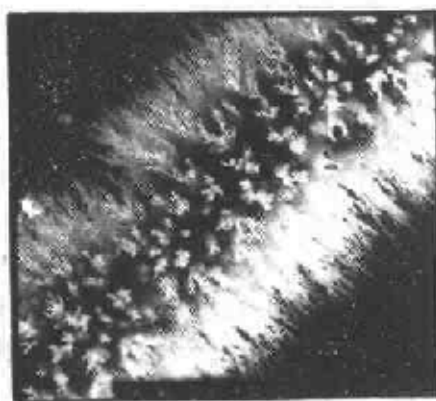


图 2-18 活化后的钨丝(放大 800 倍)

金属细丝、刀片、针尖等可用作场电离的发射体。目前大多采用经过活化处理的钨丝作发射体。所谓“活化”就是用某种方法在金属丝上生长微针。根据公式  $F_e = \frac{U_0}{Kr_0}$  (式中  $F_e$  为电场强度,  $U_0$  为电压,  $r_0$  为发射体尖端的半径), 提高电压和减少发射丝直径可以提高电场强度,但实际上单靠这两个措施来获得高场强是困难的。通过活化,在金属丝上生长微针(其尖端的半径约为  $1\mu\text{m}$ , 远小于金属丝的半径),把微针作为场发射体可大大提高场强。发射丝活化的另

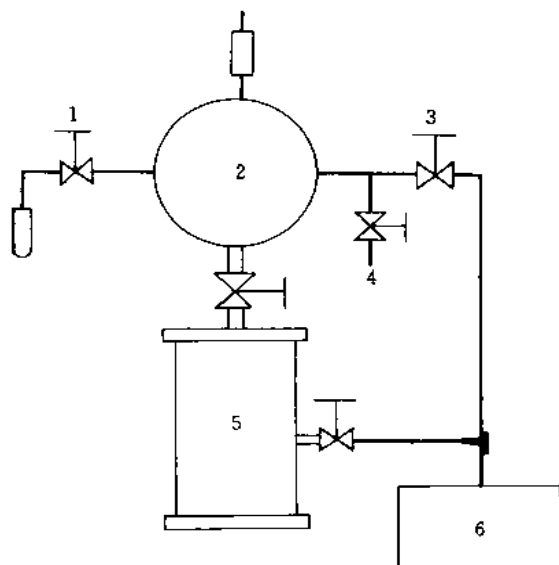


图 2-19 场发射丝的活化装置  
1—定量阀; 2—活化室; 3—旁抽阀;  
4—放空阀; 5—扩散泵; 6—机械泵

一些好处是可以采用直径稍大的发射丝,例如  $10\mu\text{m}$ , 以改善丝的机械强度,延长使用寿命;对于 FD 来说,微针的存在使样品比较容易附着在发射丝上,提高样品的负载量。图 2-18 是放大 800 倍的活化钨丝。关于场发射丝的活化方法有过许多报道,普遍使用的是苯甲腈高温活化。先将  $5\sim 10\mu\text{m}$  的钨丝焊在发射丝架上,放入活化装置中(见图 2-19),将活化室抽真空后,通入苯甲腈蒸气,在约  $1.33\text{Pa}$  ( $10^{-2}$ 托)的苯甲腈气氛中,在发射丝和地电极间加  $10\text{kV}$  高压,并在丝上通电流加热到  $1200^\circ\text{C}$  左右,经过  $6\sim 8\text{h}$  活化,钨丝上生长出长度为几至几十微米的碳微针。近年来我国质谱工作者研究成功了一种简便、快速活化的方法,可直接利用 FD 离子源作为活化装置,活

化一个场发射体只须十几分钟。

## 七、化学电离源

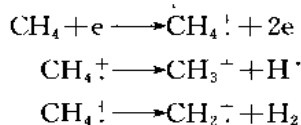
化学电离源 (Chemical Ionization Source) 是通过样品分子和反应气 (或反应试剂) 离子之间的分子-离子反应使样品分子电离。1966 年 M. S. Munson 和 F. H. Field 首次报道了以甲烷为反应气的有机化合物化学电离质谱。

在有机化合物结构测定中, 质谱法由于能提供分子量的信息而具有特殊的地位。但常规的电子轰击源通过电子直接传递给样品分子的能量较多, 带有过高剩余能量的分子离子易裂解生成大量碎片离子, 使得相当一部分化合物的分子离子峰强度过低, 无法辨认或分子离子峰根本不出现。这给分子量的确定和谱图解析带来困难。化学电离通过分子-离子反应传递的能量很少, 大部分化合物能得到一个强的与分子量有关的准分子离子峰, 碎片离子较少, 因而是电子轰击质谱的补充。化学电离源的工作气压比较高, 因此比电子轰击源更适合于和气相色谱或液相色谱联用, 色谱流动相可直接用作反应试剂。化学电离因能生成强的准分子离子峰, 在质谱/质谱联用时也极为有用。除了上述特点之外, 化学电离还有灵敏度高 (比电子轰击源高 1~2 个数量级)、可以通过改变反应气实现较高的选择性等优点。因此, 在有机质谱中, 化学电离源作为电子轰击源的重要辅助而发展很快。但是, 化学电离源和电子轰击源一样, 必须首先使样品汽化, 然后再电离, 所以不能解决热不稳定和难挥发化合物的分子量测定。

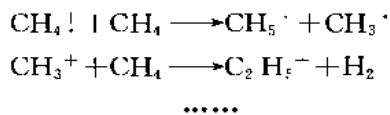
化学电离建立在分子-离子反应的基础上, 下面我们以甲烷 (CH<sub>4</sub>) 作反应气为例, 说明化学电离的基本原理和过程。

第一步, 反应气的电离和裂解。

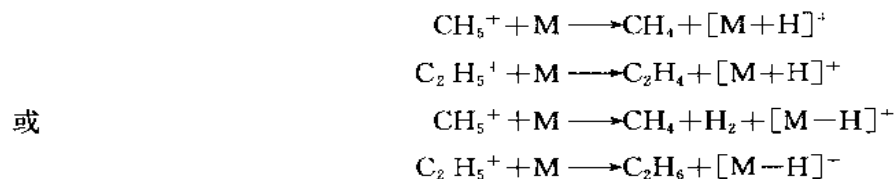
由于源中甲烷反应气的压力大约是样品蒸气压的 10<sup>3</sup> 倍, 可以认为灯丝发射的轰击电子只使反应气电离和裂解。



第二步, 甲烷电离生成的 CH<sub>4</sub><sup>+</sup> 等离子与未被电离的甲烷分子发生分子-离子反应, 生成反应离子。



最后, 反应离子与样品分子发生分子-离子反应, 通过质子交换使样品分子电离。



这些反应通常生成准分子离子, 如果样品分子的质子亲和势大于反应气的质子亲和势时, 样品作为一个质子接受体生成质子化的分子离子 [M+H]<sup>+</sup>; 如果样品的质子亲和势小于反应气的质子亲和势则生成 [M-H]<sup>+</sup>。还有其他类型的分子-离子反应。例如, 以 O<sub>2</sub>、N<sub>2</sub> 或惰性气体为反应气时发生的电荷交换反应。表 2-4 列出了一些常见的反应试剂。除此之外, 还可

以根据分析对象的特点和分析要求选择特殊的反应试剂和多元反应试剂。

表 2-4 常见的反应试剂

类 型	反应试剂	主要反应离子	质子亲和势/(kJ·mol <sup>-1</sup> ) 或电离能/eV
质子化反应试剂	氢	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	428 kJ·mol <sup>-1</sup>
	甲烷	CH <sub>5</sub> <sup>+</sup> 、C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	536、699
	水	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>	708
	丙烷	S-C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> <sup>+</sup>	749
	甲醇	CH <sub>3</sub> OH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	762
	丙酮	(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> COH <sup>+</sup>	790
	异丁烷	T-C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> <sup>+</sup>	813
	氨	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	846
	甲胺	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	884
	三甲胺	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> NH <sup>+</sup>	929
电荷交换试剂	氦	He <sup>+</sup>	24.6 eV
	氮	N <sub>2</sub> <sup>+</sup>	21.6
	氩	Ar <sup>+</sup>	15.8
	一氧化碳	CO <sup>+</sup>	14.0
	二氧化碳	CO <sub>2</sub> <sup>+</sup>	12.8
	二硫化碳	CS <sub>2</sub> <sup>+</sup>	~10.0
	苯	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> <sup>+</sup>	9.2

目前用于分析的化学电离源有中气压、低气压和大气压化学电离源三种。其中最常用的是中气压化学电离源。中气压源内反应气的压力为(13.3~133) Pa, 样品压力为0.01Pa, 源的结构与电子轰击源相似, 但为了维持源内的高压力, 电离盒的电子束入口和离子束出口狭缝做得较小, 密闭性好。由于化学电离源和电子轰击源的结构相似, 且两种方法得到的结构信息又互为补充, 现在商品有机质谱仪常将两个源组合成一个复合源, 通过改变狭缝大小或把一密闭的电离盒推入或拉出离子源实现两者的快速切换, 切换时间在(1~2) s内(见图2-20)。

回旋共振质谱仪的离子捕集源能通过延长离子在源中停留时间(几百毫秒, 在中气压源中离子停留时间约为0.1ms)来增加反应离子与样品分子碰撞的几率, 因此在低气压下就能实现化学电离。在低气压化学电离源内反应气压力约为 $1 \times 10^{-4}$  Pa, 样品压力为( $10^{-6}$ ~ $10^{-7}$ ) Pa, 可以使用难挥发的反应试剂, 并能在

较低的温度下测定难挥发的样品, 而且不会严重污染离子源。但是, 低气压化学电离源只能用于回旋共振仪, 目前尚不能推广使用。

大气压化学电离源是在大气压下进行分子-离子反应, 高的压力使反应离子和样品分子碰撞几率大大增加。因此, 检测灵敏度比一般化学电离高三个数量级, 检测限可达 $10^{-13}$ g, 但它

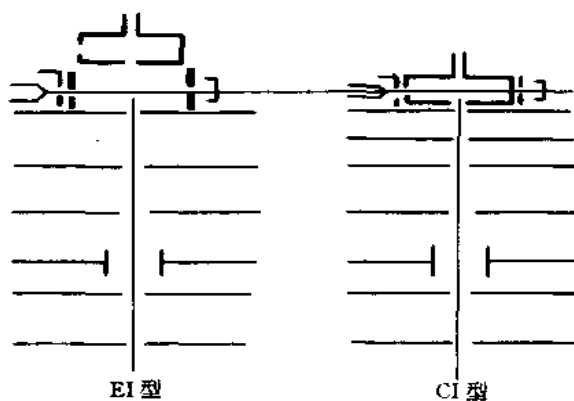


图 2-20 电子轰击/化学电离复合源

要求配用的质量分析器能忍受较高的工作气压，一般采用四极杆质谱仪（详见九、其他类型的离子源）。

## 八、电感耦合等离子体离子源

电感耦合等离子体（ICP）用作质谱离子源的研究是受电感耦合等离子体发射光谱（ICP-AES）快速发展的影响。ICP 用作发射源大大提高了原子发射光谱的检测灵敏度和抗干扰能力，也大大简化了试样准备和引入方法，提高了分析速度。因此，自 1964 年首次发表了有关研究报告之后，ICP-AES 的发展十分迅速，逐渐在多元溶液分析中获得统治地位。多元无机质谱分析虽然具有极高的检测灵敏度和较少的干扰因素，但因仪器昂贵，操作要求高以及分析速度慢等弱点，应用受到限制。如果将 ICP 用作质谱离子源，只要能将离子从等离子体中引出，并将它们送入质谱计，那么 ICP 带给原子发射光谱快速、方便进样和抗干扰能力等优点同样能带给质谱。这一设想现在已经成为现实。

等离子体是处于电离状态的气体。它是一种由自由电子、离子和中性原子或分子组成的，在总体上呈电中性的气体，其内部温度高达几千至一万度。电感耦合等离子体离子源就是利用等离子体中的高温，使进入该区域的样品蒸发电离。

用作离子源的 ICP 与用于原子发射光谱的 ICP 相似，它主要由高频发生器、等离子炬管组成，但等离子体炬管是水平放置的，以便离子引出到质量分析器中。ICP 炬管由三根严格同心的石英玻璃管制成。外管的前端有（2~3）匝与高频发生器相连的感应线圈，中间的石英管前端正好到感应线圈为止（见图 2-21 所示）。（10~15）L·min<sup>-1</sup> 的氩气从外管通入，通过外管和中间管的环形区域切向导入，形成高速气流，它既是维持 ICP 的工作气流，又将等离子体与管壁隔离，防止石英管烧融。中间的石英管通入辅助气，流量约为 1L·min<sup>-1</sup>。接通高频场，并用 Tesla 线圈点火（触发少量气体电离），产生的带电粒子在高频电场作用下使工作气体迅速大量电离，在炬管口形成等离子体焰炬。试样由载气携带从内管喷出，从等离子体焰炬中央穿过，形成一个较冷的中心通道。残留的等离子体焰炬形成一个约 10000°C 高温的热气环。此环构成一个单匝与感应线圈耦合，使等离子体得以维持，并加热中心通道至温度接近 8000°C。试样经过中心通道时被蒸发电离。常用的进样方法是利用气动雾化器产生气溶胶或用一小蠕动泵。

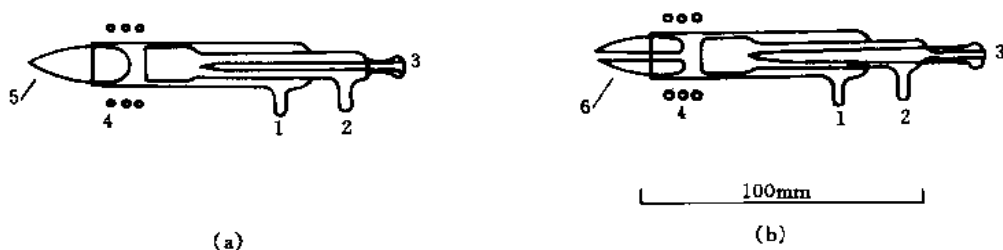


图 2-21 电感耦合等离子体炬管和炬焰

(a) 未被刺穿的等离子体焰焰；(b) 被载气流刺穿的 ICP 炬焰

1—工作气体入口；2—辅助气入口；3—载气和样品入口；4—感应线圈；

5—未被刺穿的火焰；6—已被刺穿的环状火焰

ICP 离子源是在常压下工作的，因此产生的离子必须通过一个离子引出接口与高真空的质量分析器相连。典型的离子引出接口见图 2-22 所示。等离子体的尾焰喷射在第一级的水冷挡板 1 上。挡板中央有一孔径为（0.5~1）mm 的采样孔 2。挡板后面装有分离锥 3，分离锥

上的小孔孔径为(0.5~1.5)mm,与挡板上的小孔及等离子体尾焰准直。分离锥之后安置离子引出电极4。在挡板和分离锥之间安装大抽速泵,形成第一级真空,气压可维持在 $(1\sim3)\times 10^2\text{Pa}$ ,分离锥之后为第二级真空,气压可降低到(0.1~0.01)Pa。

与适用于无机质谱的放电型离子源相比,电感耦合等离子体离子源有以下显著优点:

(1) 试样是在常压下引入的,使操作大大简化、方便;

(2) 等离子体温度很高,使样品能完全蒸发和解离,样品电离的百分比高,因此,几乎对所有元素均有高的检测灵敏度。

(3) 离子源处于低电位,且产生的离子能量分散小,可以采用四极滤质器作为质量分析器,使仪器总体结构简单,造价降低。

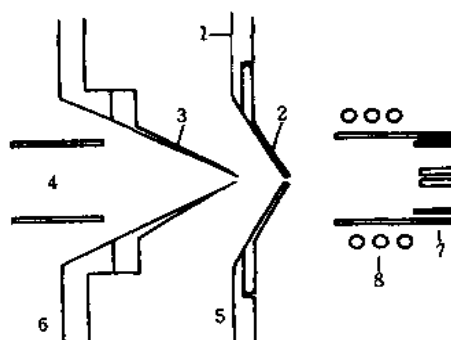


图 2-22 ICP 源的离子引出接口  
1 水冷挡板; 2—采样孔; 3—分离锥;  
4—离子引出电极; 5—第一级真空;  
6—第二级真空; 7—ICP 炬管;  
8—感应线圈

## 九、其他类型的离子源

### (一) 激光源 (Laser Source)

由脉冲激光得到的几乎平行的光束很容易被聚焦在一个非常小的区域上,产生高的辐射密度和超高的表面温度。例如,1J 的输入能量就能使直径为(20~100) $\mu\text{m}$ 、深度为1000 $\mu\text{m}$ 的微小区域中的金属、半导体甚至烧结绝缘体气化。在中性粒子汽化的同时还有热电子和热离子脉冲发射。激光离子源就是利用这些现象制成的。

图 2-23 是一个与双聚焦质谱仪配合的激光源示意图。激光束透过窗口射入离子源,经透镜聚焦在靶上。透镜和靶的位置可以独立地调节,以便获得最佳聚焦。靶的下面是一块毛玻璃制的基板,当靶移走时,通过落在基板上的光束对聚焦条件进行初调。靶还可以在一个小区域内移动,以便更换样品的不同测试点。屏蔽罩的作用是防止离子被抽走。

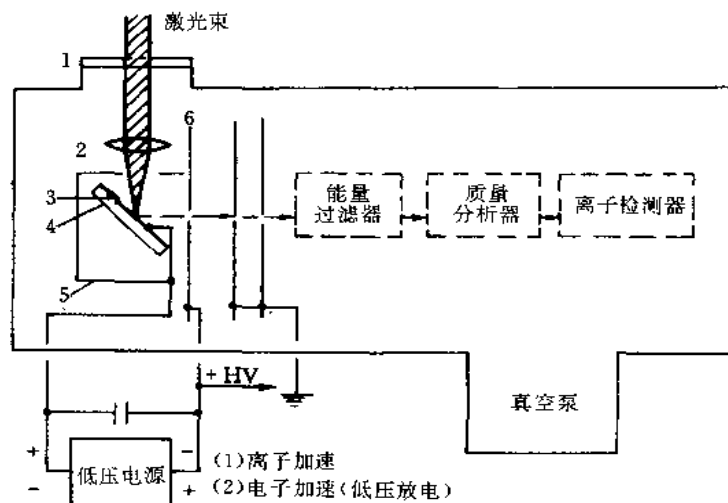


图 2-23 激光源的结构示意图

1—窗口; 2—透镜; 3—靶; 4—基板; 5—屏蔽罩; 6—狭缝

激光源能提供如下两种可检测的信息。

### 1. 热离子

当靶和狭缝上加正离子加速电压时，能检测激光照射时发射的单电荷热离子，离子相对强度取决于所研究的元素的表面功函和离子化电位。

### 2. 气化的中性粒子

当靶和狭缝上加电子加速电压时，离子源中产生低压弧光放电，电子轰击由激光加热表面而蒸发的中性粒子，产生大的离子流（最高可达  $10^{-5}A$ ），其中包括样品的单电荷离子、多电荷离子以及本底气体的离子。这些离子能量分散，要用双聚焦质谱仪进行分析，离子的检测一般用感光板，因为感光板适合于检测脉冲式的离子流。

由于激光束易聚集，所以激光源特别擅长于固体表面微区分析，通常被称为激光微探头 (Laser Microprobe)

## (二) 铯-252 等离子体解吸源

铯-252 等离子体解吸源 ( $^{252}Cf$ -Plasma Desorption Source) 是利用人造放射性同位素铯-252 ( $^{252}Cf$ ) 自发裂变产生 40 多对裂变产物，产生的碎片为高能重离子，如  $^{142}Ba^{+18}$  和  $^{106}Tc^{+21}$ 。当这些重离子穿透样品薄箔时，可以电离样品。R. D. MacFarlane 等对电离机理进行的研究，认为裂变产物即高能重离子穿透薄箔时，以极快的速度加热和电离样品。在重离子经过的样品箔微区里可形成  $10^4K$  的高温等离子体。由于过程极短 ( $10^{-13}s$ )、功率密度极高 ( $10^{13}W \cdot cm^{-2}$ ) 和能量来不及传递，这就避免了分子受激振动解离。因此， $^{252}Cf$  等离子体解吸源能用于难挥发、热不稳定的生物大分子的分子量和结构测定。文献已有报道用这种源分析氨基酸、肽、核苷酸等。

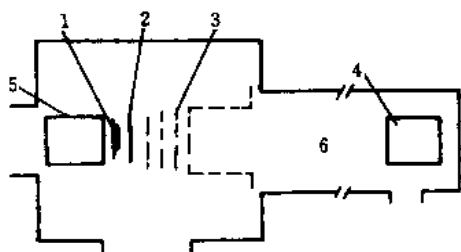


图 2-24  $^{252}Cf$  等离子体解吸离子源

1  $^{252}Cf$  放射源；2 样品箔；3 加速栅极；  
4、5 电子倍增器；6 飞行时间质量分析器

于难挥发、热不稳定的生物大分子的分子量和结构测定。文献已有报道用这种源分析氨基酸、肽、核苷酸等。

图 2-24 是一个  $^{252}Cf$  等离子体解吸源的结构示意图。放射源的强度为  $(10 \sim 100) \mu Ci$ 。样品溶解后，喷涂在厚度为  $1 \mu m$ ，面积约为  $1 cm^2$  的镍箔上，样品箔对准放射源。裂变产生的一对碎片沿直线向相反方向运动，其中一个穿过样品箔，加热和电离样品，生成的样品离子经加速后进入飞行时间质量分析器，经质量分析后为电子倍增器所检测。裂变的另一产物被放置在相反方向上的另一电子倍增器接收、检测。

器接收、检测。

## (三) 大气压电离源

大气压电离源 (Atmospheric Pressure Ion Source) 是利用一个处于大气压下的毫居里级的  $^{63}Ni$  放射源使气体电离产生初级离子，然后经过一系列的离子-分子反应使样品电离。与传统的离子源的最大差别在于大气压源是在大气压下工作的，因此在结构上它必须独立于处在高真空状态的质量分析器等质谱仪器的其他部分。从这个意义上说，它是一个“外部”源。在应用上，它适合于气相色谱、液相色谱与质谱联用技术。

图 2-25 给出了一个大气压源的基本结构。当色谱流出物进入离子源时， $^{63}Ni$  放射源使载气或载液电离，在源中生成的初级离子与未电离的分子发生一系列离子-分子反应，使样品电离。这与化学电离源中发生的过程相同。离子经过小孔进入质谱仪的透镜系统以及质量分析器。 $^{63}Ni$  放射源与质谱仪器高真空区域靠一个直径为  $25 \mu m$  的微孔连接，微孔可让离子通过，同

时既保证离子源的压强处于工作范围,又维持透镜区的真空要求。透镜系统配备大抽速的泵,维持  $(10^{-1} \sim 10^{-2})\text{Pa}$  的真空。质量分析器的真空大约为  $(10^{-4} \sim 10^{-5})\text{Pa}$ 。

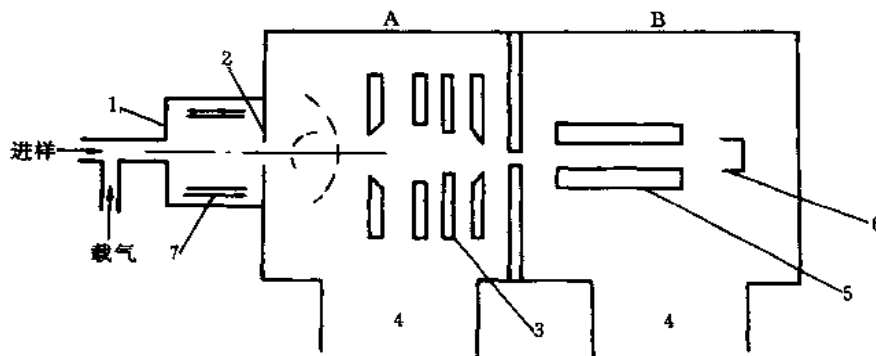


图 2-25 大气压电离源

- 1—离子源,常压,  $(200 \sim 400)^\circ\text{C}$ ; 2—微孔; 3—聚焦透镜; 4—高抽速真空泵;  
5—四极滤质器; 6—电子倍增器; 7— $^{60}\text{Ni}$  放射性箔  
A—离子/气体喷射分离区,  $0.1 \sim 0.01\text{Pa}$ ; B—质量分析区,  $10^{-1} \sim 10^{-5}\text{Pa}$

### 第三节 质量分析器

质量分析器是质谱仪的主体部分。一个理想的质量分析器应具备分辨率高、质量范围宽、分析速度快、灵敏度高及无质量歧视效应等特点。但是能满足上面所有要求的质量分析器是不存在的,不同类型的质量分析器具有各自的优缺点。这一节介绍几种常见的质量分析器,对于不常用的几种类型,在最后也作一简介。

#### 一、磁场偏转质量分析器

磁场偏转质量分析器为经典的质谱仪所采用。在 40 年代前,几乎所有质谱仪都是磁场偏转的。今天,这种质量分析器仍得到最广泛的应用。单聚焦磁场型仪器价格较低,而由磁场和静电场结合构成的双聚焦仪器具有分辨率高、质量范围较宽、质量歧视效应小等优点。

##### 1. 基本公式

图 2-26 是一个  $180^\circ$  的磁场质量分析器,其磁场强度为  $H$ , 离子运动轨道的半径为  $R_m$ 。当一个质量为  $m$ , 电量为  $ze$  的正离子在离子源与分析器之间的加速区被加速电压  $V$  的加速进入分析器时,受到磁场力的作用而发生偏转。被加速后的离子的运动速度  $v$  可由能量守恒定律求得,即

$$\frac{1}{2}mv^2 = zeV \quad (2-1)$$

离子在磁场中受到洛伦兹力作用,这个力既垂直于离子运动方向,又垂直于磁场强度  $H$ , 其值为  $Hzev$ 。在这个力的作用下,离子作圆周运动,其离心力为  $\frac{mv^2}{R_m}$ , 所以

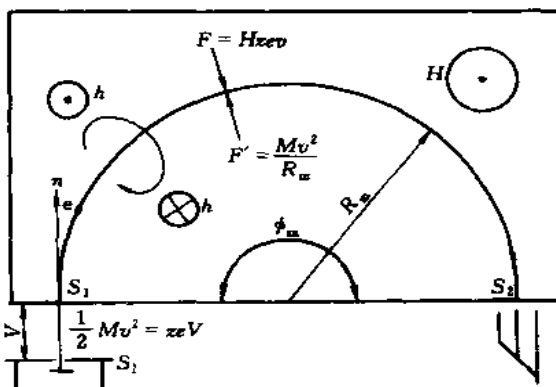


图 2-26  $180^\circ$  磁场质量分析器

$$\frac{mv^2}{R_m} = Hzev \quad (2-2)$$

由(2-1)式可得

$$v = \sqrt{\frac{2zeV}{m}} \quad (2-3)$$

将式(2-3)代入(2-2)式,并整理得

$$\frac{m}{z} = \frac{H^2 R_m^2 e}{2V} \quad (2-4)$$

式(2-4)是磁场型分析器的基本方程式。式中各参数均取静电制单位( $m$ 的单位是克, $e$ 的单位是绝对静电单位电量, $V$ 为绝对静电单位电压)。为方便计算,将各单位换算后得

$$\frac{m}{z} = \frac{10^{-12} H^2 R_m^2}{20740 V} \quad (2-5)$$

式中, $m$ 为离子的质量,取原子质量单位(u);磁场强度 $H$ 的单位是特斯拉(T);离子运动轨道半径 $R_m$ 的单位是厘米(cm),加速电位 $V$ 的单位是伏特(V); $z$ 为离子带电荷的个数,单位为1; $\frac{m}{z}$ 称离子的质荷比。

式(2-5)是计算时常采用的公式。将此式变形后可得

$$R_m = \frac{144 \times 10^6}{H} \sqrt{\frac{mV}{z}} \quad (2-6)$$

式(2-6)也是一个常用公式。

## 2. 磁场的方向聚焦功能

在前面的公式推导中,作了两条假设即①所有离子以与磁场垂直的角度射入磁场;②进入磁场的离子其动能均为 $zev$ 。实际情况是进入磁场的离子具有一定的角度分散,同时其能量也有一个分布。由于这两个原因,相同 $m/z$ 值的离子经过磁场后不能聚集在一起,因而使分辨率降低。为了获得高分辨率,必须使 $m/z$ 相同但具有角度与能量分散的离子经过分析器后聚集在收集器的同一点处,因此要求分析器具有方向聚焦及能量聚焦功能。这里先讨论磁场的方向聚焦功能。

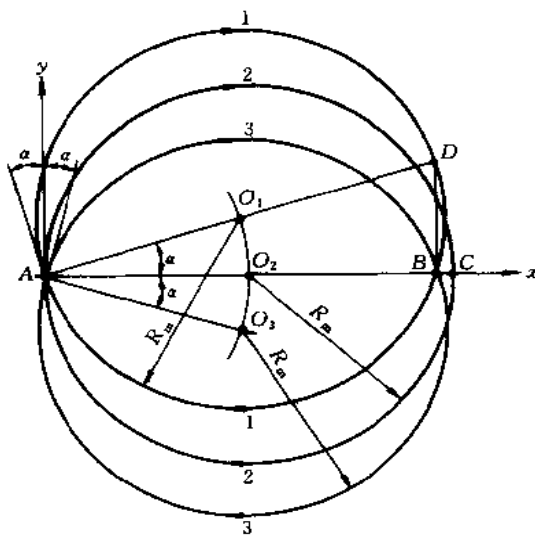


图 2-27 均匀磁场的方向聚焦作用

设想当 3 个  $m/z$  及速度相同的离子以不同角度进入一个均匀磁场(图 2-27),离子 2 与磁场垂直,离子 1、3 则分别与磁场成  $\pm\alpha$  角。在磁场中它们以不同的轨迹运动,当偏转  $180^\circ$  时,离子 1、3 聚在一点 B,离子 2 落在 C 点,当离子继续运动偏转到  $360^\circ$  时,它们一起回到原点 A。可见磁场对以  $\alpha$  角出射而发散的离子具有约束作用,这种作用就是方向聚焦本领。在图 2-27 所示的均匀磁场中,只有当离子偏转一周( $360^\circ$ )后,它们才完全聚在一起,在其他状态均存在不同程度的分散。

扇形磁场在方向聚焦上具有独特的优点,利用扇形磁场有可能获得理想的方向聚焦。下面通过与光学聚焦相类比的方法来讨论扇形磁场的聚焦功能。为此,先来看一下光学透镜的聚焦条件。

扇形磁场在方向聚焦上具有独特的优点,利用扇形磁场有可能获得理想的方向聚焦。下面通过与光学聚焦相类比的方法来讨论扇形磁场的聚焦功能。为此,先来看一下光学透镜的聚焦条件。



图 2-28 是一个光学厚透镜的成像原理。左边为物方，右边为像方。在  $A'B'$  处的物  $b'$  将在  $A''B''$  处形成一个像  $b''$ 。图中  $F'$  和  $H'$  称为物方焦点和主点， $F''$  和  $H''$  则称为像方焦点和主点。通过主点并垂直于光轴  $A'A''$  的平面称主平面。焦点至主平面的距离  $f'$ 、 $f''$  称为焦距（焦点至透镜面的距离  $g'$ 、 $g''$  称焦点距），物和像至透镜面的距离  $l'$ 、 $l''$  分别称为物距和像距。根据几何光学理论，有以下公式：

$$(l' - g')(l'' - g'') = f' f'' \quad (2-7)$$

如果透镜对称，则有： $g' = g'' = g$ ， $f' = f'' = f$ ，式 (2-7) 变为

$$(l' - g)(l'' - g) = f^2 \quad (2-8)$$

式 (2-7)、(2-8) 称为光学透镜的聚焦公式。

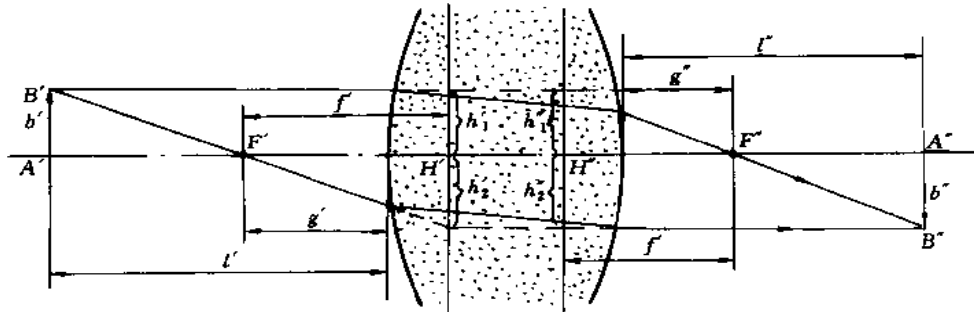


图 2-28 光学厚透镜的成像原理

图 2-29 是一个光学薄透镜与扇形磁场的类比。在 (a) 中，置于焦点  $F'$  处的一个点光源发出的散射光线经过透镜后变成平行光线出射。在 (b) 中由  $S$  发出的具有散角  $\alpha$  的离子经过扇形磁场后也以平行线出射。磁场离子光学的几个参数可通过图中的几何关系求得，即：

$$f'_m = \frac{R_m}{\sin \phi_m} \quad (2-9)$$

$$g'_m = R_m \operatorname{ctg} \phi_m \quad (2-10)$$

式中下标  $m$  代表磁场。

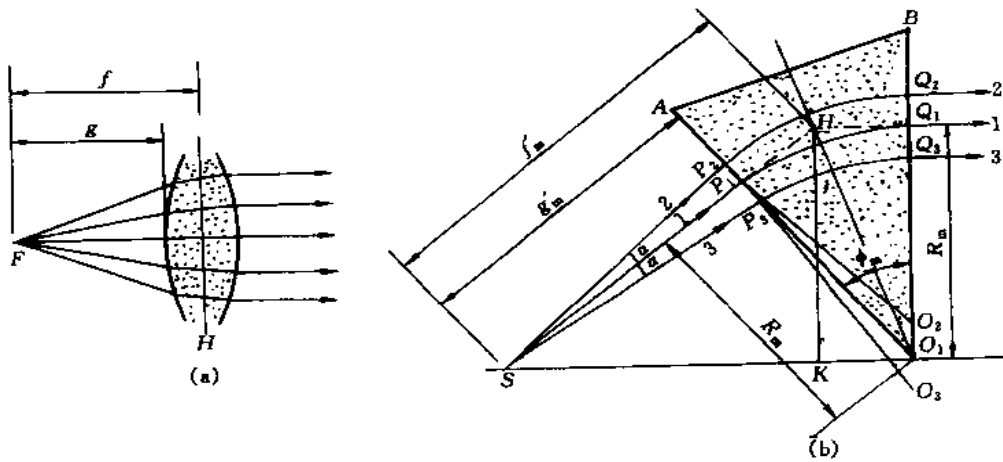


图 2-29 光学薄透镜与扇形磁场的类比

图 2-30 表示了两个薄透镜组合在一起的聚焦作用 (a) 及由一个厚透镜代替两个薄透镜的聚焦作用 (b)，以及它们所对应的磁场类比图 (c)、(d)。延用式 (2-9) 和 (2-10)，对 (c) 来说有

$$g_m' = R_m \operatorname{ctg} \phi_1 = l_m' \quad (2-11)$$

$$g_m'' = R_m \operatorname{ctg} \phi_2 = l_m'' \quad (2-12)$$

同样，在 (d) 中，可得

$$\phi_m = \phi_1 + \phi_2 \quad (2-13)$$

$$f_m = \frac{R_m}{\sin \phi_m} \quad (2-14)$$

$$g_m = R_m \operatorname{ctg} \phi_m \quad (2-15)$$

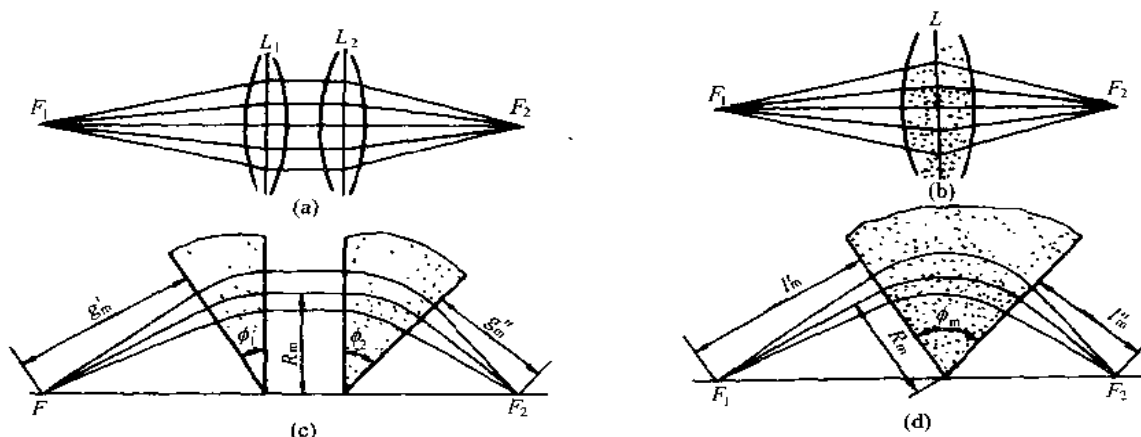


图 2-30 两个薄透镜组成的聚焦系统及一个厚透镜的聚焦系统及对应的扇形磁场聚焦系统

前面已介绍了光学厚透镜的聚焦公式，式 (2-7)，与此相同，图 (2-30) (d) 所示的扇形磁场具有以下聚焦公式：

$$(l_m' - g_m')(l_m'' - g_m'') = f_m' f_m'' \quad (2-16)$$

已经证明在扇形磁场中，物方焦距与像方焦距相等，即  $f_m' = f_m'' = f_m$ ，所以式 (2-16) 可写成：

$$(l_m' - g_m')(l_m'' - g_m'') = f_m^2 \quad (2-17)$$

式 (2-17) 就是扇形磁场的透镜公式，式中  $l_m'$ 、 $l_m''$  分别为物距和像距， $g_m'$ 、 $g_m''$  分别为物方和像方焦点距。 $f_m$  为焦距。凡符合公式 (2-17) 的磁场都具有离子的方向聚焦作用。所以这个公式又称为方向聚焦条件公式。

### 3. 磁场的色散作用

磁场除了方向聚焦作用外，另两个基本功能是质量色散和能量色散。为了介绍简单，直接将式 (2-6) 两边取对数后进行微分得：

$$\frac{\Delta R_m}{R_m} = \frac{1}{2} + \frac{\Delta M}{M} + \frac{1}{2} \frac{\Delta V}{V} - \frac{\Delta H}{H} \quad (2-18)$$

从式 (2-17) 知， $M$ 、 $V$ 、 $H$  中任何一个的变化都将引起离子运动轨道半径的改变。先假定  $V$  与  $H$  不变，则得：

$$\frac{\Delta R_m}{R_m} = \frac{1}{2} \frac{\Delta M}{M} \quad (2-19)$$

这就是磁场的质量色散公式。图 2-31 表示了一个  $180^\circ$  磁场的质量色散情况，通常将由质量差  $\Delta m$  所引起的几何距离  $D$  称为质量色散。从图中知  $D = 2\Delta R_m$ 。从式 (2-18) 得  $2\Delta R_m = R_m \frac{\Delta M}{M}$ 。因此得：

$$D = R_m \frac{\Delta M}{M} \quad (2-20)$$

扇形磁场同样也有质量色散公式，但其推导及结果十分复杂，此处不作介绍。

质量色散是磁场的基本功能。 $D$  值的大小标志一个磁场质量分离本领的强弱。

式 (2-18) 中，若  $m$  与  $H$  不变，则得：

$$\frac{\Delta R_m}{R_m} = \frac{1}{2} \frac{\Delta V}{V} \quad (2-21)$$

即加速电压的微小变化  $\Delta V$  将使离子的运动半径也产生一个变化  $\Delta R_m$ 。也就是说相同质荷比但不同能量的离子将在磁场中产生色散，即**能量色散**。由于加速电压  $V$  与速度  $v$  的固定关系 [式 (2-1)]，能量色散也叫**速度色散**。而且离子在加速前就存在的初始速度变量  $\Delta v$  也可通过上式转换成  $\Delta V$ 。

#### 4. 单聚焦质量分析器

一个扇形磁场可构成一个具有方向聚焦本领的质量分析器。半圆形磁场也能达到上述目的。这就是通常称的单聚焦分析器。但由于磁场的能量色散作用，质量相同而能量不同（由初始速度或加速电场变化所引起的）的离子通过分析器后将不能聚集在一起，从而降低了分辨本领。因此，由单聚焦分析器构成的质谱仪都是低分辨率的仪器，只能进行对分辨率要求不高的测试工作。

提高分辨率要解决的问题是能量色散，而这仅靠磁场分析器是无法解决的。将静电场和磁场配合，有可能对离子进行能量聚焦，从而大大提高仪器的分辨率。下面先讨论静电场的几种功能。

#### 5. 静电场的能量色散作用

图 2-32 所示是一个扇形柱面电场，其半径为  $R_c$ ，电场强度为  $E$ 。离子  $m/z$  经加速电压  $V$  加速后进入电场时受到电场力作用而作圆周运动，其离心力  $\frac{mV^2}{R_c}$  与电场力  $zeE$  平衡，即

$$\frac{mV^2}{R_c} = zeE \quad (2-22)$$

将式 (2-1) 代入上式，并整理得：

$$R_c = \frac{2V}{zE} \quad (2-23)$$

对上式两边取对数并微分得：

$$\frac{\Delta R_c}{R_c} = \frac{\Delta V}{V} - \frac{\Delta E}{E} \quad (2-24)$$

当  $E$  不变时：

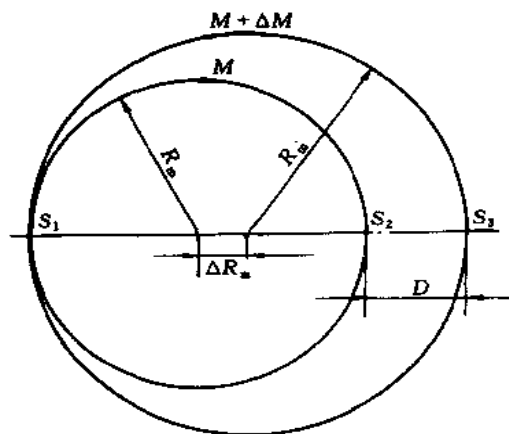


图 2-31 质量色散图

$$\frac{\Delta R_e}{R_e} = \frac{\Delta V}{V} \quad (2-25)$$

式(2-25)是静电场的能量色散公式,它表明能量变化 $\Delta V$ 将引起离子运动轨道半径的变化 $\Delta R_e$ 。这一点性质与磁场相同。

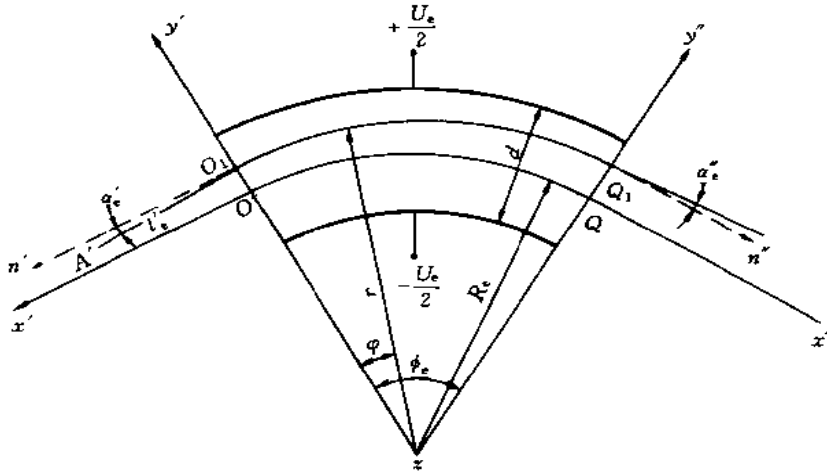


图 2-32 扇形柱面电场

### 6. 静电场的方向聚焦作用

与磁场一样,静电场也具有方向聚焦作用,而且研究证明,扇形柱面电场具有对称透镜的性质。它的透镜聚焦公式也可通过与光学透镜类比的方法获得。图 2-33 表示了一个光学薄透镜及一个与之类比的扇形柱面静电场以及它们各自的参数。

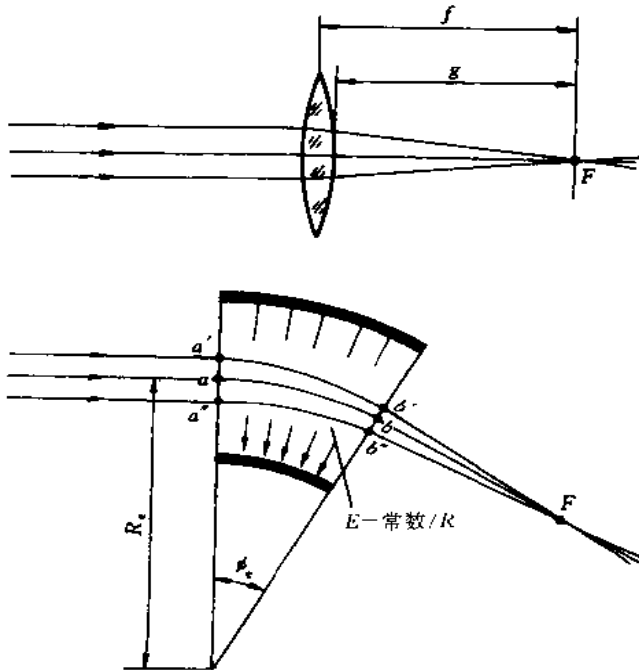


图 2-33 薄透镜与扇形柱面电场的类比

图 2-34 中的各参数其意义和磁场中各参数相同,下标 e 表示这些是静电场参数。通过类比方法,可得到静电场的透镜公式:

$$(l_e - g_e)(l_e'' - g_e) = f_e^2 \quad (2-26)$$

从上面的讨论知静电场具有方向聚焦及能量色散的作用。另外,静电场在质谱仪器中还起着能量过滤的作用。这指的是当离子的能量分散太大时,只要在静电场后面加一能量限制狭缝(在双聚焦质谱仪中叫 $\beta$ 缝),就能使那些分散太大的离子撞到狭缝上而被过滤掉。

### 7. 双聚焦的原理和条件

在讨论了磁场和静电场的一些性质之后,现在来讨论由静电场和磁场组

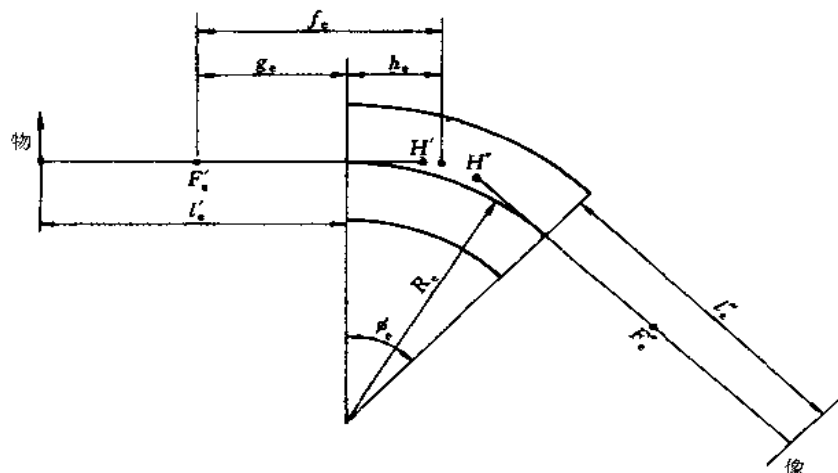


图 2-34 扇形柱面静电场的参数

合在一起时的作用，即方向、能量双聚焦作用。磁场具有方向聚焦、质量色散和能量色散的功能，而静电场具有方向聚焦、能量色散的功能。在一个由磁场和电场组成的分析器中，只要磁场和电场各自满足其自身的方向聚焦条件，分析器就只有方向聚焦的功能。能量聚焦的基本原理是：让静电场对离子的能量色散作用被磁场对离子的能量色散作用抵销，使质量相同而能量（即速度）有分散的离子在通过两个场后重新聚集在检测器的同一点。如图 2-35 中，一束离子进入静电场后，速度不同的离子发生了能量色散，速度慢的离子以较短的路径通过电场，而速度快的离子以较长的路径通过。在磁场中，由于磁场的能量色散作用又使速度慢的离子以较短的路径通过磁场，速度快的离子以较长路径通过。两个质量相同、能量不同的离子同时到达同一点。在磁场中由于质量色散作用，不同质荷比的离子得到了分离，到达不同点，从而得到质量分离。由此而总结出双聚焦的基本条件为：

① 电场和磁场应分别满足方向聚焦条件，即式 (2-8) 和 (2-26)。这样组成的离子光学系统具有方向聚焦作用。

② 静电场产生的能量色散刚好被磁场产生的能量色散所抵销，这样能获得能量聚焦，或

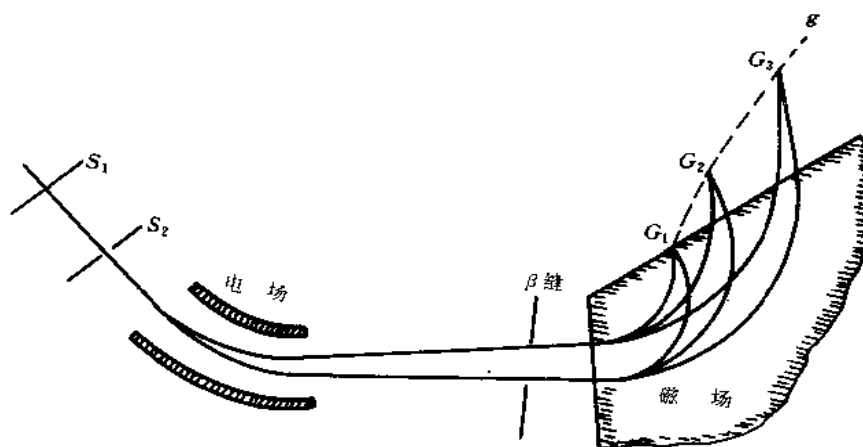


图 2-35 能量聚焦图

称为速度聚焦。

上面讨论的是最基本的双聚焦系统。双聚焦可分为一级双聚焦、多级双聚焦、单质量双聚焦及全质量双聚焦。

### 8. 扫描方式

从基本公式知,  $m/z$  与 3 个参数有关。对一台用照相板法作检测器的质谱仪, 磁场强度  $H$  与加速电压  $V$  保持不变, 不同  $m/z$  值的离子具有不同的轨迹半径  $R$ , 从而落在照相板不同的位置, 构成质谱图。目前大部分仪器采用扫描法, 以电子技术检测信号。这样离子的轨迹是固定的, 即  $R$  不变, 由基本公式知  $m/z$  值与  $H^2$  成正比, 与  $V$  成反比。通过改变  $H$  与  $V$  参数的任一个, 就能达到扫描目的。改变  $V$  值的方法称电扫描, 改变  $H$  值称磁扫描, 两者各有优缺点。有些仪器两种方法均可采用, 但永久磁铁型的质谱仪只能进行电扫描。电扫描的优点是扫描速度快, 容易校正质量标尺。这种方法的缺点是, 在不同电压值时, 仪器的灵敏度、分辨率不同。特别是  $m/z$  值较大时,  $\bar{V}$  值必然较小, 灵敏度下降很严重。因为加速电压  $\bar{V}$  值小时, 无法使离子具有足够的速度进入分析器, 并达到检测器, 因此传输率变差。所以这种扫描方法不为质量范围宽的大型仪器所采用。

磁扫描使仪器能保持灵敏度、分辨率不随  $m/z$  值而变。这种方法的一个缺点是扫描速度慢。新的电磁铁制造技术使这个问题得到某种程度的解决。测量技术的进步也使仪器校正变得比较方便。因此磁扫描法为大部分仪器所采用。磁扫描也可分为指数扫描与线性扫描两种形式。指数扫描根据磁场变化的物理现象而设计, 而线性扫描法从用户的方便出发, 比较直观。

## 二、飞行时间质量分析器

飞行时间分析器的质量分离原理极为简单, 分析器只是一个长度一定的无场空间, 离子经加速电压加速而进入分析器时, 由于不同质量的离子其飞行速度不同, 它们飞过一定距离所需时间也不同, 质量小的离子飞行速度快先到达检测器, 质量大的飞行速度慢后到, 因而可以获得质量分离。

早在 30 年代就有人用这一原理进行了实验, 40 年代已有这种仪器, 50 年代时发展了较完善的脉冲型飞行时间质谱仪。

### 1. 基本公式

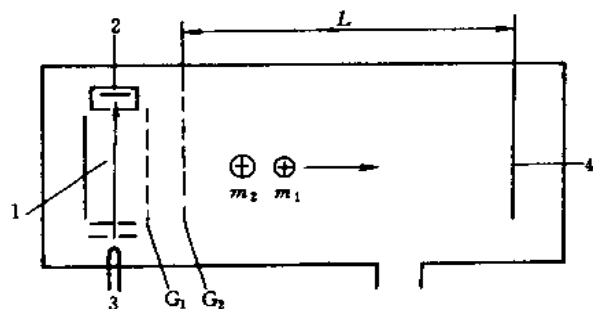


图 2-36 飞行时间质量分析器

1-电离室; 2-电子接收极; 3-阴极; 4-离子接收极

飞行时间质量分析器的基本结构如图 2-36 所示。样品受到阴极灯丝发出的电子轰击后变成离子, 栅极  $G_1$  上的负脉冲将离子引出离子室,  $G_1, G_2$  间的直流电压差  $\bar{V}$  使离子受到加速并进入长度为  $L$  的无场分析管道, 最终按  $m/z$  值不同先后到达离子接收极。

忽略离子的初始能量, 离子经  $\bar{V}$  加速后获得的动能为:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = eV \quad (2-27)$$

由此可得离子的飞行速度为:

$$v = \sqrt{\frac{2eV}{m}} \quad (2-28)$$

它是质量  $m$  的函数。离子飞越长度为  $L$  的分析管道所需时间为：

$$t = \frac{L}{v}$$

$$\therefore t = L \sqrt{\frac{m}{2eV}} \quad (2-29)$$

$$\text{或} \quad m/e = \frac{2\bar{V} t^2}{L^2} \quad (2-30)$$

将  $e$  换为  $z$  后，得飞行时间质量分析器的基本公式：

$$m/z = \frac{2V}{L^2} \cdot t^2 \quad (2-31)$$

从式 (2-31) 知， $m/z$  与时间  $t$  呈平方关系。

## 2. 分辨率

飞行时间质量分析器的分辨率与分析管道的长度及加速电压有关。从式 (2-31) 可得：

$$\Delta m = \frac{2\bar{V}}{L^2} (t_1^2 - t_2^2)$$

$$\text{因此} \quad \frac{m}{\Delta m} = \frac{t_1^2}{t_1^2 - t_2^2} \approx \frac{t}{2\Delta t} \quad (2-32)$$

由式 (2-29) 和 (2-32) 知，增加分析管道长度  $L$  将增加飞行时间  $t$ ，这有助于提高分辨率  $\frac{m}{\Delta m}$ 。又由式 (2-27) 及 (2-28) 知，提高加速电压  $V$  将提高飞行速度  $v$ ，从而缩短飞行时间，降低分辨率。

另外两个对分辨率至关重要的因素是离子初始态时的空间分布及能量分布。如果这两个分布太大，将严重影响仪器的分辨率。有几种工作方式可以降低这些因素的影响。一个方法叫“全脉冲模式”。这种模式的一个特点是所有的工作状态全部由脉冲控制，而当离子化脉冲结束后立即在离子源施加另一个电压脉冲，迫使那些速度较慢的离子追上速度快的离子，以降低其空间分布的宽度。当分析脉冲开始时，所有离子几乎能同时被分析。另一种方法是“连续离子化模式”，连续的含意仅指离子化的过程较长 [ (50~100)  $\mu\text{s}$  ]，这个模式能使离子源与栅极  $G_1$  之间形成一个“离子阱”。在离子化过程中产生的大部分离子在此处滞留，而那些初始速度太快的离子则被一个小的电压偏置吸引过去，从而降低离子的初始能量分布，有利于提高分辨率。这个模式的另

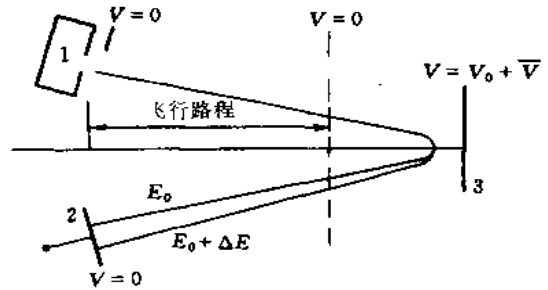


图 2-37 反射模式的飞行时间质量分析器

1 离子源；2—检测器；3—反射器

优点是，由于离子化过程较长，形成离子较多，提高了仪器的灵敏度。还有一种方法叫“反射模式”，其简单原理如图 2-37 所示。离子不是直线飞行，而是在中途被反射后再到达检测器。这种方法有两点好处：① 系统具有某种形式的“双聚焦”功能，相同质量不同能量的离子被反射后能同时到达检测器；② 离子的飞行路程增加一倍。两者均对提高仪器的分辨率

有益。

虽然采取了各种各样的方法进行弥补，飞行时间质量分析器还是不能在分辨率方面与双聚焦磁场型分析器或其他高分辨本领分析器相比，这限制了它的广泛应用。同时整套仪器的结构也显得复杂，因此这种质谱仪的商品化程度不高。

### 3. 其他特点

尽管飞行时间质量分析器在分辨率方面有欠缺，但它也有其自身独特的优点。这些优点使得它不可能被其他类型分析器取代。

首先是极快的分析速度。通过控制扫描频率，它能达到每秒 10 万次以上的扫描。即使扫描很宽的质量范围，也能达到每秒上万次的速度。这就使它能够监视化学反应的进行，研究动力学过程，检测并记录那些“转瞬即逝”的中间产物或最终产物。因此，它极适合于和激光解吸离子源、等离子体源相配合，进行特殊研究。

它的另一个优点是分析质量范围宽。从它的基本公式可知， $m/z$  值取决于时间，如果增加分析脉冲的时间，就有可能检测到  $m/z$  值很大的离子。从理论上说， $m/z$  是没有上限的（不像磁场型仪器那样，一旦  $R$ 、 $H$ 、 $\bar{V}$  值固定，可测定的最大质量范围就被限定了），只要在离子传输率方面加以提高，可获得很高的质量范围。目前用这种仪器分析  $m/z$  值超过 10000 的样品已常见报道。

## 三、四极滤质器

四极滤质型质谱仪自 50 年代问世以来，目前已成为最主要的商品仪器之一。从数量上讲，它已取代磁场型仪器而居第一，而且有继续增长的趋势。这种仪器的特点是体积小、结构简单、造价低廉，且性能也不错。特别是对一般用途而言，其价值、性能均具有优势。早期的四极质谱仪的最大限制是质量范围小，一般在几百以内。新一代的仪器质量范围已达 4000，甚至更高。通常达到 1000 是不困难的。

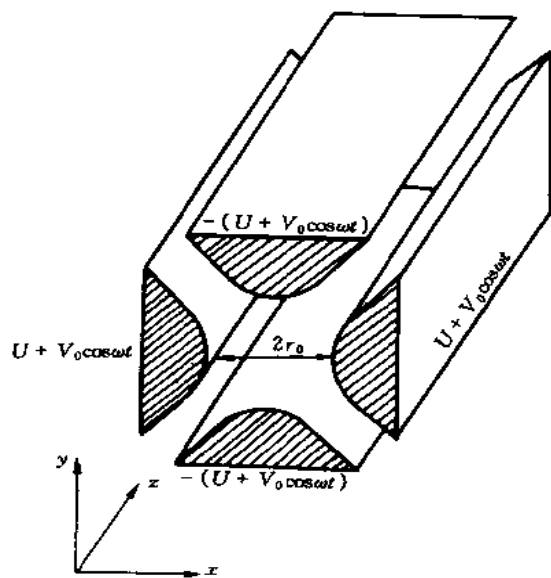


图 2-38 四极滤质器原理图

四极滤质型质谱仪自 50 年代问世以来，目前已成为最主要的商品仪器之一。从数量上讲，它已取代磁场型仪器而居第一，而且有继续增长的趋势。这种仪器的特点是体积小、结构简单、造价低廉，且性能也不错。特别是对一般用途而言，其价值、性能均具有优势。早期的四极质谱仪的最大限制是质量范围小，一般在几百以内。新一代的仪器质量范围已达 4000，甚至更高。通常达到 1000 是不困难的。

1. 基本原理

四极滤质分析器由四根相互平行并均匀安置的金属杆构成。金属杆的截面大都是双曲线，但也可简单地做成圆形或其他形状。图 2-38 是一种双曲截面四极滤质器的示意图。相对的两根极杆连在一起。在两组极杆上分别施加极性相反的电压。电压由直流分量和交流分量迭加而成。这样在电极间形成一个对称于  $z$  轴的电场分布。离子束进入电场后，在交变电场作用下产生了振荡，在一定的电场强度和频率下，只有某种质量的离子能通过电场到达检测器，其他离子则由于振幅增大而最后撞到极杆上。图 2-39 表示了这种状态。离子的运动可由一组微分方程来描述。在图 2-38 中， $x$  方向上施加的电压为  $U + \bar{V} \cos \omega t$ ， $y$  方向上施加的电压为  $-(U + \bar{V} \cos \omega t)$ 。因此在电极间任一位置  $(x, y, z)$  处的电位  $\Phi$  可用下式表示：



$$\Phi = \frac{(U + \bar{V} \cos \omega t)(x^2 - y^2)}{r_0^2} \quad (2-33)$$

式中  $U$  是电压的直流分量,  $\bar{V}$  是交流分量的幅值,  $\omega$  是圆频率,  $t$  是时间,  $r_0$  是电场中心至电极端点的距离。

当质荷比为  $m/e$  的离子从  $z$  方向进入电场时, 由于电场的作用, 其运动轨迹可用下述方程描述:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{2e}{r_0^2} (U + \bar{V} \cos \omega t) x = 0 \quad (2-34)$$

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} - \frac{2e}{r_0^2} (U + \bar{V} \cos \omega t) y = 0 \quad (2-35)$$

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = 0 \quad (2-36)$$

设

$$\omega t = 2T$$

$$\frac{8eU}{mr_0^2 \omega^2} = a$$

$$\frac{4e\bar{V}}{mr_0^2 \omega^2} = q$$

则式 (2-34)、(2-35) 分别变成了马绍方程 (Mathieus Equation)

$$\frac{d^2 x}{dT^2} + (a + 2q \cos 2T) x = 0 \quad (2-37)$$

$$\frac{d^2 y}{dT^2} - (a + 2q \cos 2T) y = 0 \quad (2-38)$$

式 (2-37)、(2-38) 是这个振荡体系的数学表达式, 方程的一般解可以自然指数形式表示:

$$x(T) = A e^{\mu T} \cdot \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n e^{inT} + B e^{-\mu T} \cdot \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n e^{inT} \quad (2-39)$$

式中  $A$ 、 $B$  为积分常数,  $C_n$ 、 $\mu$  是由  $a$  和  $q$  决定的常数。这种解可以分为不稳定和稳定解两类。若是稳定解,  $x(T)$  随  $T \rightarrow \infty$  而趋于零或取有限值, 表明离子在  $x$  方向作有界振荡后通过四极场。若是不稳定解,  $x(T)$  随  $T$  的增大而不断增大, 即振幅不断增加, 最终离子撞到  $x$  电极上。解的稳定与否取决于  $a$  和  $q$  的数值。图 2-40 (a) 的阴影部分所对应的  $a$ 、 $q$  值表示  $a$ 、 $q$  取这些值时,  $x(T)$  有稳定解。同理, 离子在  $y$  方向的运动也有类似的稳定解和不稳定解。图 2-40 (b) 表示离子  $y$  方向运动稳定解所对应的  $a$ 、 $q$  值。只有在  $x$ 、 $y$  方向上都有稳定解时, 离子才能通过四极场到达检测器。图 2-40 (c) 表示  $x$ 、 $y$  方向均有稳定解时所对应的  $a$ 、 $q$  取值范围。

## 2. 分辨率

与双聚焦磁场质谱仪比较, 四极质谱仪在分辨率方面欠缺较大。但精心设计的四极质谱仪也能达到较高 (大于 10000) 的分辨率。

极杆长度是分辨率的一个决定因素。极杆越长, 分辨率就越高, 但同时仪器的几何尺寸也增大。因此, 增加极杆长度的方法只在一定的场合才采用。

离子进入分析器时的状态对分辨率也有影响。在磁场型分析器部分已仔细地分析了离子进入分析器时的初始状态对分辨率的影响。虽然四极滤质器的数学表示式 (2-37)、(2-38) 不

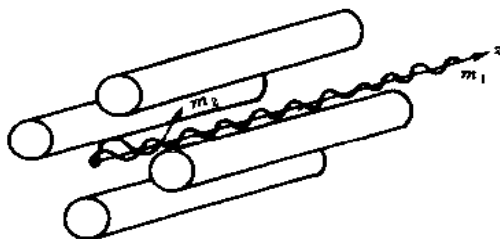


图 2-39 不同质荷比的离子在四极滤质器中的运动

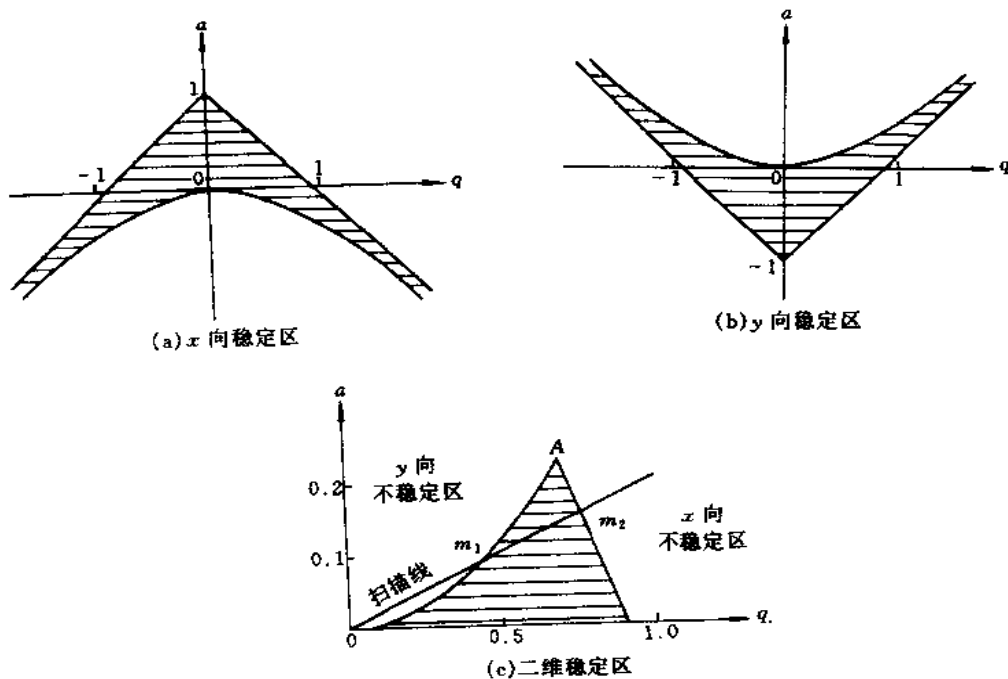


图 2-40 四极场的稳定图

涉及到离子的初始状态，实际上离子的初始速度与方向都对仪器的分辨率有影响。离子入口处与出口处的边缘场效应也是影响的因素之一。

从图 2-40 (c) 可知，当  $a/q$  值较小时，稳定区较宽，表示较宽质量范围的离子可稳定振荡通过分析器。当  $a/q$  值增大时，这个区域逐渐缩小，在顶点时只有一种质量的离子能通过。因此，提高  $a/q$  值可提高分辨率。 $a/q$  值的提高可通过调整  $U/V$  值获得。在四极场中，分辨率  $R$  与离子传输率  $T (=I/I_0)$  之间大致上保持反比例关系，即  $R \cdot T$  基本保持不变。在低分辨率区，传输率  $T$  几乎为 1，在高分辨区，传输率随分辨率的提高而快速下降（见图 2-41）。

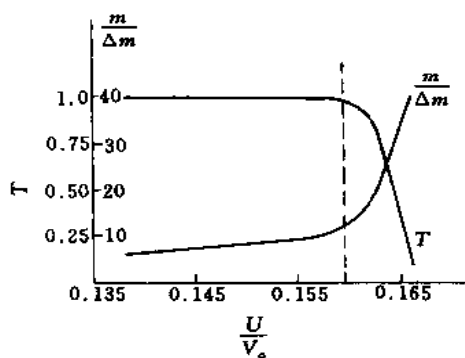


图 2-41 四极质谱计分辨率、传输率与  $U/V_0$  的关系

分辨率还可用一个实验公式表示：

$$\frac{m}{\Delta m} = \frac{f^2 L^2 m}{kzv} \tag{2-40}$$

式中， $f$  为交流频率， $L$  是极杆长度， $z$  是电荷数， $v$  在这里表示加速电压，以避免与交流分量的幅值混淆， $k$  为常数。从这个式子可知，分辨率与  $f^2$ 、 $L^2$  成正比。 $L$  与  $R$  的关系前面已经提到。提高  $f$  值也可增加分辨率，但这与提高质量范围有矛盾。

将上式变换得：

$$\Delta m = \frac{kzv}{f^2 L^2} \tag{2-41}$$

这个式子右边的几个参数一般保持不变，即不论在哪个质量值， $\Delta m$  是定值，这样式 (2-40) 可简单地写成：

$$\frac{m}{\Delta m} = K' m \quad (2-42)$$

可见  $\frac{m}{\Delta m}$  随  $m$  的增加而增加。目前不少商品的四极质谱仪的分辨率指标就是以式 (2-42) 的形式给出的。

### 3. 扫描方式

与磁场型仪器比较, 四极质谱仪的扫描速度更快。这是因为磁场分析器采用改变磁场强度的方法进行扫描, 这就无法避免磁滞效应。而四极分析器以电参数扫描, 能以很快的速度进行。

在四极分析器中质量  $m$  与其他参数之间的关系可简单地用下式表示:

$$m = K \frac{V}{f^2 r_0^2} \quad (2-43)$$

式中,  $V$  为交变电压分量的幅值,  $f$  为频率,  $r_0$  为四极场半径,  $K$  为常数。这个式子中只有  $V$  与  $f$  是可变的, 所以扫描既可通过改变  $V$  值, 也可通过改变  $f$  值完成。大多数情况下是通过改变  $V$  值 (同时改变  $U$  值而保持  $U/V$  值恒定) 进行扫描的。因为  $V$  与  $m$  成线性关系。另外从式 (2-41) 可知  $f$  改变时,  $\frac{m}{\Delta m}$  也将变化。

## 四、傅里叶变换离子回旋共振质谱仪

傅里叶变换质谱是近十几年中发展起来的新技术。它以检测各种离子的回旋频率的方法来获得质谱。从这一点讲, 它与其他的质谱仪有本质的区别。因为其他的质量分析器都是将各种不同质量的离子从空间位置上或时间上分开, 而这种方法应用快速傅里叶变换方法将离子的频率信号转换为质谱信号。傅里叶变换质谱具有不少优点, 主要表现在分辨率高, 而且灵敏度随着分辨率的提高而提高。还有, 在不增加任何设备的情况下, 它就具有多级串联质谱的功能。所以它在近年来发展极快。几种商品仪器达到了较成熟的程度, 如美国 Nicolet 的 FTMS-2000 及瑞士 Spectrospin 的 CMS-47。

傅里叶变换质谱 (FTMS) 是在离子回旋共振质谱 (ICRMS) 技术基础上发展起来的。所以又可称为傅里叶变换离子回旋共振质谱 (FTICRMS)。早在 30 年代就产生了离子回旋共振的概念。后来制造出了小型商品回旋质谱计 (Omegatron) 及离子回旋共振质谱仪。

### 1. 离子回旋共振质谱的概念

图 2-42 是一个小型回旋质谱计的示意图。它集离子源、分析器和检测器于一室, 在室中央样品受电子轰击而变成离子, 在离子初速度  $v$  及磁场  $H$  的作用下, 离子作垂直于磁场的圆周运动, 其频率为  $f$ 。离子所受的磁场力与离心力平衡, 即:

$$\frac{m \cdot v^2}{r} = eHv \quad (2-44)$$

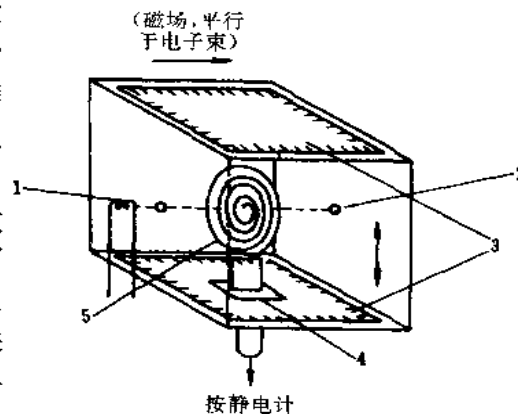


图 2-42 小型回旋质谱计简图

- 1—热丝电子发射器; 2—电子束; 3—射频极板;  
4—离子收集器; 5—共振离子途径

或 
$$\frac{V}{r} = \frac{eH}{m} = \omega \quad (2-45)$$

因为  $\frac{v}{r}$  就是角频率  $\omega$ ，它与  $f$  的关系为：

$$f = 2\pi\omega \quad (2-46)$$

因此 
$$f = \frac{2\pi eH}{m} = K \frac{eH}{m} \quad (2-47)$$

式中， $f$  为离子回旋频率， $H$  为磁场强度， $K$  为常数。从这个式子可看出，当  $H$  固定时，频率  $f$  与离子质量  $m$  成反比，上式也可写成（用  $z$  代替  $e$ ）：

$$m/z = K \frac{H}{f} \quad (2-48)$$

为了在检测器上收集到质谱信号，在射频极板上施加一个射频电场，当这一射频电场的频率与回旋离子的频率相等时，就发生共振，离子从射频场吸收能量，其回旋半径增加，最后撞到检测器上。对射频电场的频率进行扫描，就可在检测器上收集到各个  $m/z$  值的离子，经放大处理后，就变成一张质谱图。质谱的质量范围由频率  $f$  的范围决定。当磁场强度已知时，很容易计算出  $m/z$  与  $f$  之间的对应值。例如当  $H = 1.5\text{T}$  (15000Gs) 时，对应于  $m/z 1 \sim 500\text{u}$  的  $f$  范围是 25MHz ~ 50KHz。

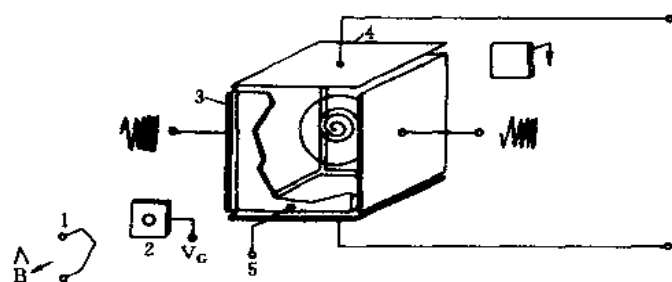


图 2-43 傅里叶变换质谱

1-灯丝；2-栅极；3-传输板；4-接收板；5-V<sub>c</sub>

## 2. 傅里叶变换质谱的基本概念

图 2-43 是一个单室傅里叶变换质谱分析室的示意图。它与传统的离子回旋共振分析室结构大致相同，区别在于它没有离子收集器，而代之以两块接收板 (Receiver Plate)。离子在室中央形成后就以其自然频率  $f$  作回旋运动，其值由式 (2-47) 决定。但即使是相同  $m/z$  值的离子其运动也是混乱的，因而无法测定信号。

为了使离子的运动具有规律性，可以和经典的离子回旋共振法一样，对离子施加一个射频电场扫描，其频率范围对应于所要检测的离子的自然频率值。当扫描电压频率与离子回旋频率相等时，离子吸收能量，跃迁到较大的轨道，最后所有吸收了能量的离子在相近轨道上作规律性回旋运动。图中的传输板 (Transmitter Plate) 作用就是发出射频信号。

分析室的上下两极板称为接收板。实际上接收板不与回旋离子接触，而是通过正负带电粒子相吸的原理获得由回旋离子在极板上感应出来的电信号。

图 2-44 更清楚地显示了感应电信号产生的原理。离子在两块金属接收板之间作回旋运动。

当同一质量的正离子接近上极板时，由于其带正电，就吸引接收板上的电子。同样当这些离子运动到接近下极板时，就吸引这块板上的电子。随着离子的运动，接收板上的电子也作规律性运动。当将上、下两板联接成电路时，电子的运动就变成了一个电信号。我们

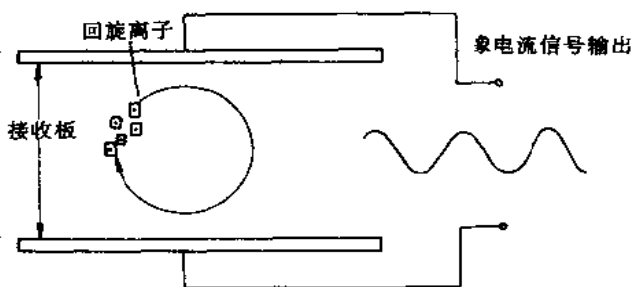


图 2-44 像电流产生原理

把这个信号称作像电流 (Image Current)，它是一个衰减的余弦波形，可写作  $Ae^{-\beta t} \cos(2\pi f_0 t)$ 。实际上在同一时刻不同质荷比的离子分别产生与其相应的像电流。因此，在电路输出端得到的是一个各种频率的正弦波迭加而成的时域信号，各分量的强度对应于离子的数量。

如果能将这个时域信号中的每个正弦波分量的频率和幅值都加以鉴定，就能获得各离子所对应的  $f$  值及强度。傅里叶变换法正好具备这种本领。

傅里叶变换是一种时域函数转换为频域函数的数学方法，可简单地以式 (2-49) 表示：

$$Ae^{-\beta t} \cos(2\pi f_0 t) \rightarrow \frac{A[\beta - j2\pi\Delta f]}{[2\pi(\Delta f)^2 + \beta^2]} \quad (2-49)$$

式中， $\Delta f = f - f_0$ ,  $j = \sqrt{-1}$

现代计算机技术已能进行快速傅里叶变换 (FFT) 运算，所以输出的像电流经放大、滤波及模/数转换后直接输入计算机，由计算机作快速傅里叶变换运算后输出频率信号，每个频率信号对应一个  $m/z$  值。 $f$  与  $m/z$  的关系可通过式 (2-48) 确定。在实际操作时，用标准样品作标定以避免由系统不稳定或其他原因引起的误差。这些工作都在计算机控制下完成。

### 3. 实际工作方式及仪器

傅里叶变换质谱的工作在脉冲控制下进行。整个分析过程可分为分析室的清洁 (Quench)、离子形成 (Ion Formation)、离子激发 (Ion Excitation)、离子检测 (Ion Detection)、计算等几步。图 2-45 基本解释了工作全过程。

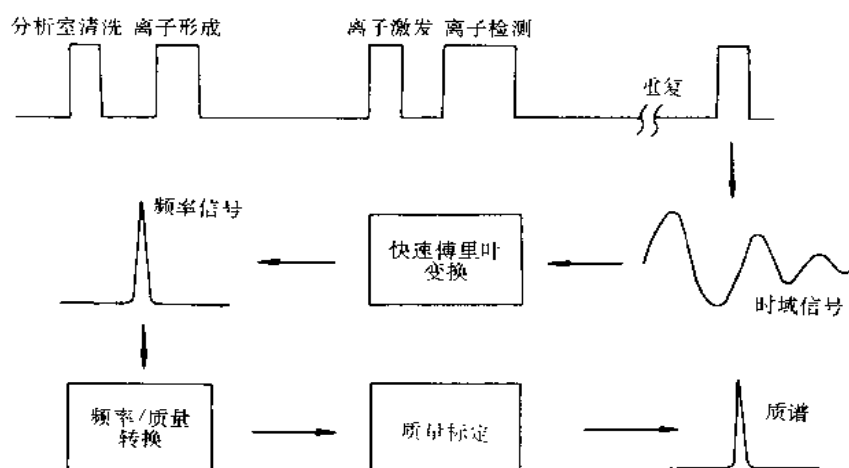


图 2-45 FTMS 的工作流程

开始工作时，先将分析室中残存的离子清除掉。这通过在分析室的阱集板 (Trapping Plate) 上施加一个脉冲电压而达到。在脉冲电压作用下，所有残存离子全部撞到阱集板上。离子化脉冲控制样品的离子化时间，离子化的方法仍然是电子轰击。在离子形成至离子激发之间有一个可变延时，这为样品的化学电离或离子-分子反应提供了方便。在实际中这个延时在几毫秒至几秒之间。化学离子化的程度可通过调节反应气压力及时间来控制，对于没有反应气而仅在样品间反应的现象，叫做自身化学离子化 (Self-CI)。

接下去的离子激发、检测及傅里叶变换等步骤，在叙述基本原理一段中已作了介绍，这里不再重复。在实际测量时，常多次重复傅里叶变换之前的过程，并将每次检测所获信号迭加以获得足够的信噪比 ( $S/N$ )。

上面介绍的仪器属于单室 (Single Cell) 质谱仪。它集离子化和分析检测于一室，使主机

结构简单。但单室的仪器有几个不足之处，主要是它要求室内的真空度极高 ( $10^{-9}$ Torr 数量级<sup>①</sup>)。这是因为被检测的离子在室内高速旋转，真空度不够高时，它们与气体分子碰撞而碎裂的几率增加，这将严重影响灵敏度和分辨率。因此，单室仪器不适合那些样品气压或背景气压较高的场合。一种典型情况就是色质联用 (GC-MS)。所以单室仪器的使用局限较大。

解决上述问题的一个办法是用双室 (Dual Cell) 替代单室。图 2-46 是双室的示意图。一个长方形的室在中间被一块导板一分为二。导板的一边处于较低真空状态 ( $10^{-3} \sim 10^{-7}$ Pa)，叫源区 (Source Region)；另一边处于高真空状态 ( $10^{-7}$ Pa)，叫分析区 (Analyzer Region)。导板的中央有一小孔，供输送离子之用。样品在源区被离子化后，在热扩散及磁力线作用下，向分析区迁移。离子的运动可通过调节导板上的电位控制，同时这块导板也作为阱集板起作用。这一设计使仪器的分析室保持要求的高真空，又能进行真空度要求较低的离子化。这样，FTMS 能够与 GC 结合起来。而且很多其他的离子化方法也能应用到 FTMS 上，如激光解吸，二次离子法等。就现代的质谱仪而言，这些离子化方法是必需的。

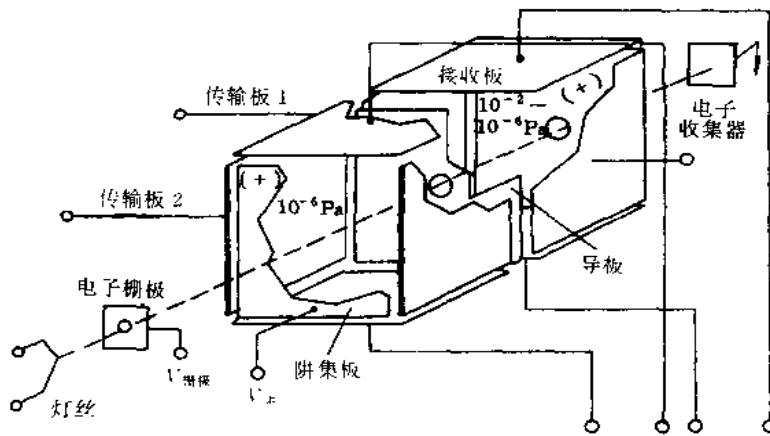


图 2-46 双室 FTMS 示意图

还有的设计采用传统的方法，将离子源与分析区分开，样品在离子源电离后，再用电学方法输送到分析区。图 2-47 是这种方法的一个示意图。

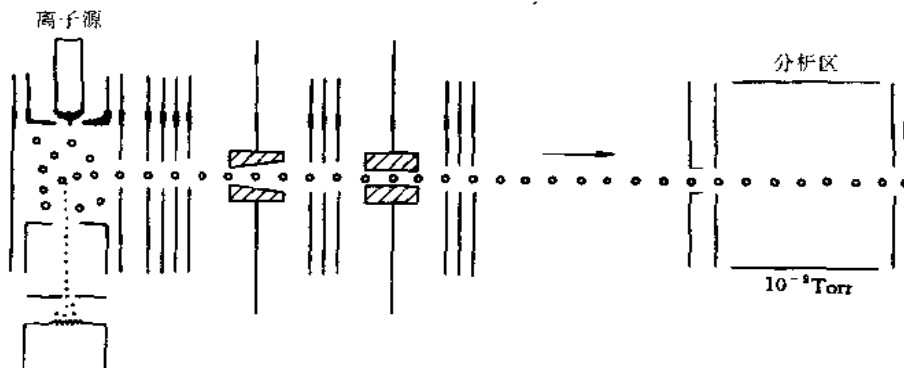


图 2-47 离子源与分析区分离

1Torr = 133.322Pa

① 1Torr = 133.322Pa。

目前的商品仪器都考虑到了真空问题，所以采用了上面介绍的技术以使新离子化方法与 FTMS 结合起来。

#### 4. FTMS 的特点与前景

FTMS 能达到其他仪器所达不到的分辨率，这一点是这种仪器的最主要优点。图 2-48 是全氟三丁胺的碎片  $C_3F_3^+$  的质谱峰，根据半峰高处峰宽定义，其分辨率达到  $1.1 \times 10^7$ 。

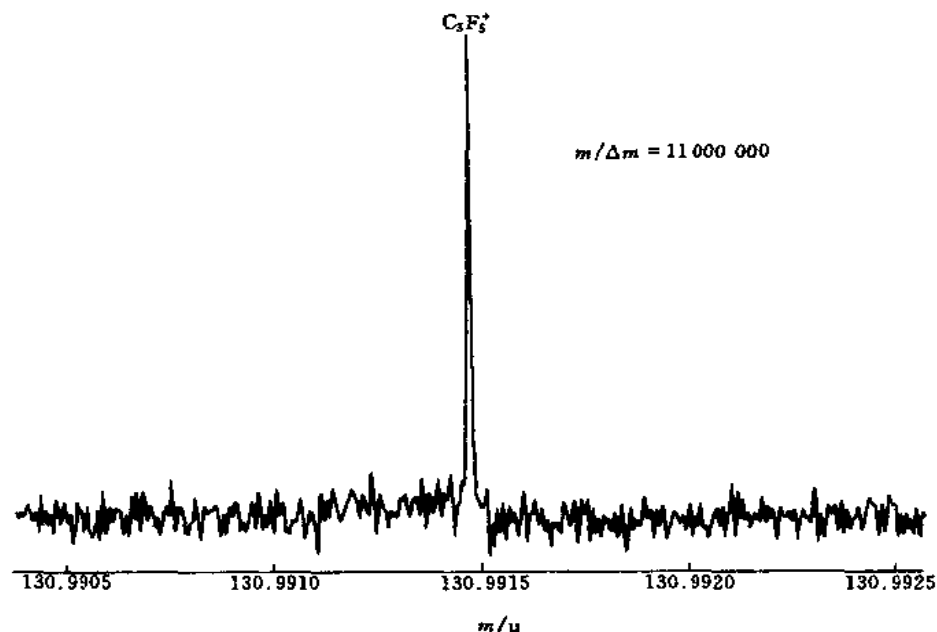


图 2-48 FTMS 的分辨本领

$H = 4.7T$

分辨本领取决于仪器的真空度及磁场强度与稳定性。分辨率的降低主要是由于离子与中性分子碰撞后产生衰变引起的，所以可用一个衰变常数  $\tau$  来表示分辨率，即

$$R = \frac{1}{2} \omega \tau = \pi f_0 \tau \quad (2-50)$$

式中的  $\tau$  与式 (2-49) 中的  $\beta$  关系为  $\beta = \frac{1}{\tau}$ 。

式 (2-50) 在应用时较困难。另一个常用的表示分辨率的式子为：

$$R = \frac{M}{\Delta M} = \frac{\omega}{\Delta \omega} \quad (2-51)$$

将式 (2-47) 代入得：

$$R = \frac{eH}{M \Delta \omega} \quad (2-52)$$

从式 (2-52) 知，分辨率与磁场强度  $H$  成正比，而与质量  $m$  成反比。所以当给出分辨率指标时，必须指出其相应的  $m/z$  值。

FTMS 均使用超导技术，这对分辨率是十分重要的。因为超导磁场既有较高的场强又十分稳定。

灵敏度不高是 FTMS 的一个主要缺陷，这主要是因为 FTMS 检测的是离子的回旋频率，所获得的像电流只能用电子线路放大，而不能像其他仪器那样采用电子倍增器来获得高增益。

但 FTMS 的一个优点是其灵敏度随分辨率的提高而增加。在磁场型仪器中,为了提高分辨率就必须将各狭缝调小,因此降低了传输率。四极质谱也有同样的问题,分辨越高,灵敏度越低,这是一对矛盾。在 FTMS 中,分辨率的提高必须增加数据采集时间,而这同时也增加了灵敏度。

FTMS 的另一个突出优点是在不增加任何仪器硬件的条件下能进行串联质谱测定。而且可达到多级串联,只要离子能保持足够的强度。已有获得五级串联质谱测定数据的报道。串联质谱对于分析未知物的结构特别有意义。而用磁场型仪器获得串联质谱功能势必大大增加仪器的复杂程度和成本。

从仪器的构造来看,FTMS 不存在一整套离子光学聚焦系统,也不需要高电压,仪器扫描速度极快,仪器的状态控制可由计算机完成,正负状态切换十分方便,这些都是其优点。但有几个方面对仪器有极高的要求。首先是要有快速、大容量的计算机,其次是高稳定性、高强度的磁场,超导技术的应用增加了仪器的日常维持成本。另外对真空技术的要求也很高。这几点加在一起使得仪器的复杂程度及成本大为提高。

FTMS 技术是建立在计算机技术与超导技术基础之上的。它是质谱技术的一个新领域。有人认为,在核磁共振和红外光谱学方面,傅里叶变换技术已占主导地位,在不久的将来,这种技术也将主宰质谱领域。从目前的情况看,FTMS 仍无法与磁质谱相提并论,这不仅仅是因为其价格昂贵,从技术上讲也还不完全成熟,有些优点还只是理论上的推导。灵敏度低的问题仍是一个大缺陷。已有几家公司推出了一些新型号的商品仪器,从性能上讲还不如磁质谱稳定。当然 FTMS 作为一种新的质谱技术,将会占据越来越重要的位置。

## 五、其他类型的质量分析器

除了前面所述的几种质量分析器外,还有许多其他类型的分析器。表 2-1 列出的各种分析器所构成的质谱仪,其中一部分仪器已成为历史旧物。这里仅介绍几种相对来说较为常见的仪器。

### 1. 摆线型聚焦质谱仪 (Cycloidal Focusing Mass Spectrometer)

这种仪器的分析器由一个匀强磁场迭加一个与之垂直的匀强电场构成。离子源出来的离子射入分析器后,同时受磁场和电场的作用而作摆线运动。分析器的特点是能将离子源射出的具有相同  $m/z$  值而能量与出射角有分散的离子最后聚焦到收集狭缝处。图 2-49 (a) 表示了离子的轨迹,(b) 是一种仪器的简图。质量扫描可通过改变电场或磁场强度而达到。式 (2-53) 是这种分析器的基本方程:

$$m/z = \frac{KH^2}{2\pi E} \quad (2-53)$$

式中,  $H$  为磁场强度,  $E$  为电场强度,  $K$  为常数。

这种仪器能达到较好的分辨率和较高的质量范围。

### 2. 射频质谱计 (Radio-Frequency Mass Spectrometer)

有几种质谱分析器应用了射频电压,如四极滤质器等,但有一种质谱计被专门称为射频质谱计。它的分析器原理如图 2-50 所示。

分析器由一些电位不同的栅极组成。栅极 1、3、5、7 处于地电位,2、4、6 上则施加射频电压  $U = U_0 \sin(\omega t + \theta)$ ,离子在经过一组栅极(1→2)时,在射频电压作用下,获得能量而加速。能量的增加值与射频电压的相角  $\theta$  有关,与射频电压同相的离子所获得的速度增量为:

$$\Delta v = s f \quad (2-54)$$



式中,  $s$  为栅极间距,  $f$  为射频频率。

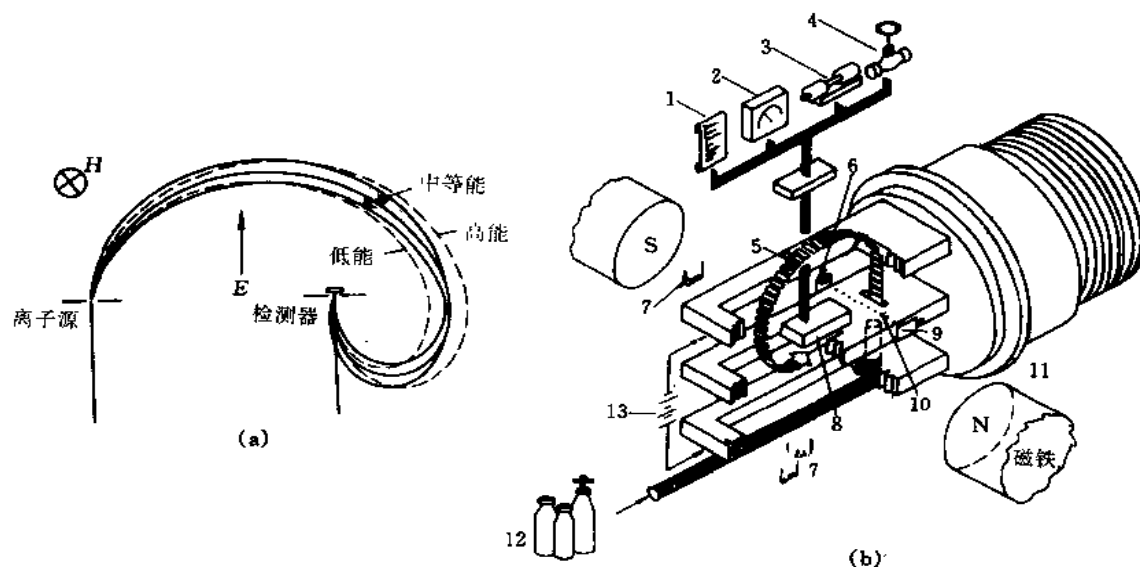


图 2-49 摆线聚焦质谱仪

(a) 离子轨迹; (b) 仪器

- 1—记录器; 2—指示表; 3—伺服机构; 4—阀; 5—待记录离子的途径; 6—热丝; 7—极板加热器;  
8—收集极; 9—阳极; 10—电子束; 11—摆线管; 12—试样; 13—护环的静电场电压

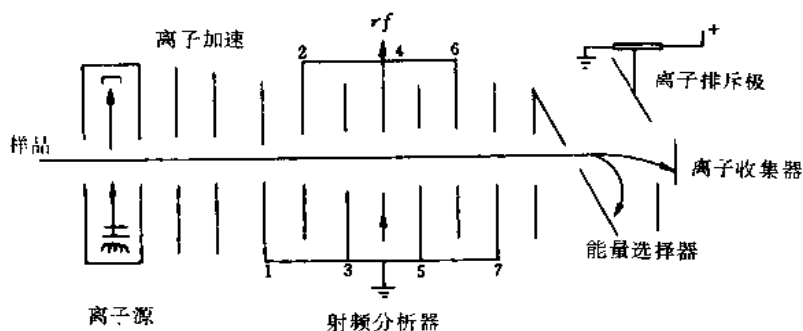


图 2-50 射频质谱计示意图

$rf$ —交变的射频

离子经过每一组栅极都有同样的过程。离子通过所有栅极后速度的差异变大。在检测器前施加一个抑制电压以排斥那些能量小于某一阈值的离子, 使得只有能量最大的离子才到达检测器被检测。根据式 (2-1) 和 (2-54) 可得射频分析器的基本公式:

$$m/z = \frac{0.266\bar{V}}{s^2 f^2} \quad (2-55)$$

式中,  $\bar{V}$  是加速电压, 单位为 V;  $f$  是射频频率, 单位为 MHz;  $s$  为栅极间距, 单位为 cm, 常数 0.266 是单位换算的结果。

通过改变射频频率即可进行扫描。

### 3. 同步质谱计

同步质谱计的原理与离子回旋共振质谱计相同, 它们都让离子在均匀磁场中作  $360^\circ$  回

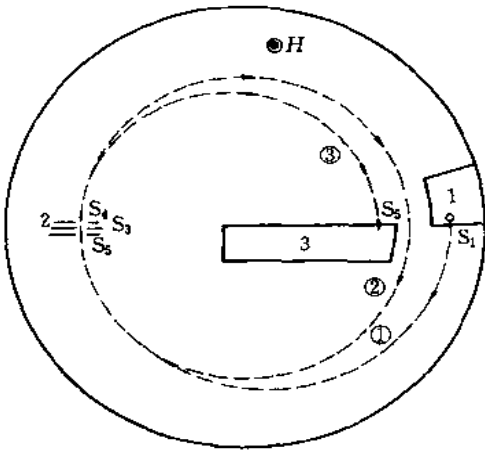


图 2-51 同步质谱计原理图  
1—离子源；2—离子束调变器；  
3—检测器（电子倍增管）

转。不同之处在于，离子回旋共振质谱对离子施加射频电压，让其吸收能量而增加运动半径，而同步质谱计则采用脉冲电压使离子减速而缩小运动半径，仪器的检测器置于半径小的地方。图 2-51 是这种质谱计的原理图。

离子进入磁场后进行圆周运动，当偏转 180° 到达由 S<sub>2</sub>、S<sub>3</sub> 和 S<sub>4</sub> 等狭缝电极组成的离子束调变器时，受到施加在 S<sub>3</sub> 上的正脉冲电压作用而减速，因而以较小的轨道半径继续作圆周运动。此后，每经过 S<sub>3</sub> 一次，就受到同步正脉冲的减速，最终撞到检测器上。离子的回旋频率仍可用式 (2-47) 表示，即  $f = \frac{2\pi e H}{m}$ 。到达检测器离子的  $m/z$  值由脉冲减速电压控制。通过改变脉冲电压频率能进行  $m/z$  扫描。

4. 单极质谱计 (Monopole)

单极质谱计的原理与四极滤质器一样。它利用双曲线电场的一部分，用一根双曲线形电极和一个直角电极组成质量过滤器 (图 2-52)。其数学表达式也和四极滤质器相同。

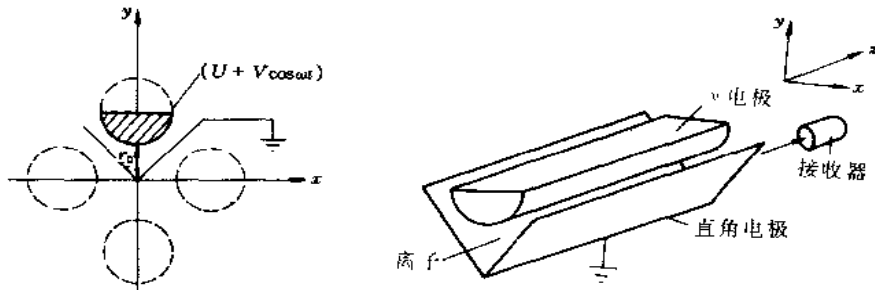


图 2-52 单极质谱计原理图

5. 离子阱质谱仪 (Ion Trap Detector)

离子阱近几年开始作为一种简易质谱计而崭露头角，而它的发明却是 30 年前的事。目前一般将它与毛细管气相色谱仪联用，作为色谱的检测器。它的离子源与质量分析器同处一室。由色谱仪流出的组分直接送入兼作离子源和分析器的“阱”内。阱由一对终端帽和一对环形电极构成。图 2-53 是阱的一个剖面图。离子阱的质量分离原理类似于四极滤质器，在终端帽与环形电极间加一电压  $U + V \cos \omega t$ ， $U$  为直流分量， $V$  为射频分量的幅值， $\omega$  为角频率。由这个电压在阱内产生一个电场。场内任一处 ( $z$ 、 $r$ ) 的电位为

$$\Phi = (U + \bar{V} \cos \omega t) \frac{r^2 - 2z^2}{2r_0^2} \quad (2-56)$$

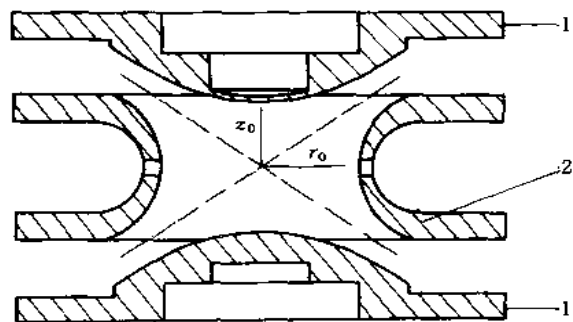


图 2-53 离子阱检测器的一种电极结构  
1—终端帽；2—环形电极

离子在场内的运动方程为

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} - \frac{2e(U - V \cos \omega t)}{r_0^2} \cdot z = 0 \quad (2-57)$$

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} + \frac{2e(U - V \cos \omega t)}{r_0^2} \cdot r = 0 \quad (2-58)$$

$$\begin{aligned} \text{令} \quad & a = -4eU/mz_0^2\omega^2 \\ & q = -2e\bar{V}/mz_0^2\omega^2 \\ & T = \omega t/2 \end{aligned}$$

$$\text{则} \quad \frac{d^2 z}{dT^2} + (a + 2q \cos 2T)z = 0 \quad (2-59)$$

$$\frac{d^2 r}{dT^2} - (a + 2q \cos 2T)r = 0 \quad (2-60)$$

式(2-59)、(2-60)即为马绍方程。只有当 $a$ 和 $q$ 取一定范围的值时,方程才有稳定解。其形式如式(2-39)。离子在场内的稳定区如图2-54所示。所有落在稳定区内的离子就一直被约束在阱内。

与四极滤质器不同的是,离子阱收集检测的是稳定区以外的离子。当改变 $a$ 、 $q$ 值时,不同质量的离子依次被解除约束,穿过终端帽上的孔进入电子倍增器,经放大处理后,输出质谱信号。

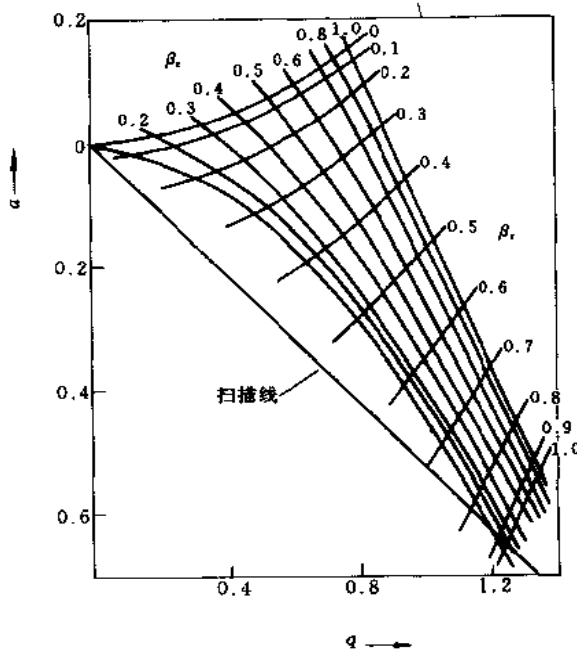


图 2-54 离子在离子阱内的稳定区图

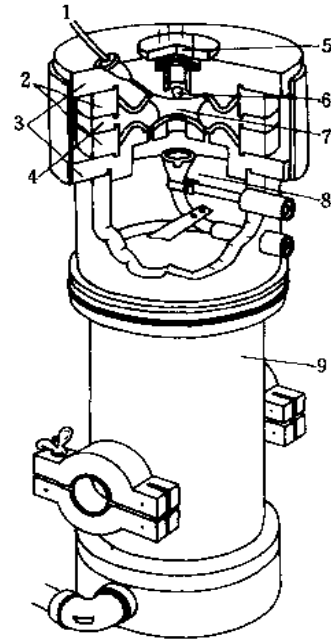


图 2-55 一种商品离子阱质谱仪的基本结构

- 1—GC 进样口; 2—陶瓷绝缘块; 3—终端帽;  
4—环形电极; 5—双灯丝装置; 6—电子束入口;  
7—离子阱集区; 8—电子倍增器; 9—分子泵

在实际工作时,将终端帽接地,在环形电极上加射频电压,这样直流分量 $U=0$ , $a$ 也等于零,离子的稳定区仅由 $q$ 值决定。扫描可通过改变 $q$ 值(频率)达到。

离子阱质谱具有结构简单,灵敏度高的特点。由于灵敏度高,检测气相色谱组分时,容



图 2-56 电离与扫描的脉冲控制

易产生饱和而引起失真。解决的一种方法是加一种自动增益控制 (AGC) 功能, 让计算机判断信号强度, 并自动调节增益, 避免产生饱和。

图 2-55 是一种商品仪器的基本结构。在终端帽外部有一电子枪, 它发射电子的时间受脉冲电压控制。每一次电离后进行一次质量扫描, 获得一张质谱图。

这个过程可在极短的时间内完成。图 2-56 是脉冲过程。

#### 第四节 离子检测系统

在质谱仪器中, 离子源内生成的离子经过质量分析器的分离后, 由离子检测系统按离子质荷比大小接收和检测。作为质谱仪器的检测器, 一般要求其具有稳定性好 (包括对时间的稳定性和对工作环境的稳定性), 响应速度快, 增益高, 检测的离子流范围宽, 在检测的质量范围内无质量歧视效应等特点。但不同类型、不同用途的质谱仪器对检测器性能的要求不尽相同, 因此应该根据具体要求选择适当的检测器。

根据工作原理的差别, 离子接收、检测的方法分为如下几种:

(1) 直接电测法 离子流直接为金属电极所接收, 并用电学方法记录离子流。例如, 用法拉第筒或平板电极作为离子接收器。

(2) 二次效应电测法 利用离子引起的两次效应, 产生二次电子或光子, 然后用相应的倍增器或电学方法记录离子流。二次电子倍增器以及闪烁检测器就属这一类。

(3) 光学方法 利用离子能使感光板感光的性质, 由黑度确定离子流的强弱。

(4) 其他方法 例如在电磁法制备同位素时, 使离子束沉积在收集器上。

下面介绍几种在现代质谱仪器上常用的检测器。

##### 一、二次电子倍增器

一定能量的离子轰击固体表面时, 会产生二次电子发射, 使二次电子进行多级或连续增殖, 就可以构成放大倍数很高的电子倍增器。电子倍增器的种类很多, 下面介绍几种典型、常用的类型。

##### 1. 静电聚焦式电子倍增器

这是质谱仪器中应用最广的离子检测器。其工作原理见图 2-57。一定能量的正离子打击

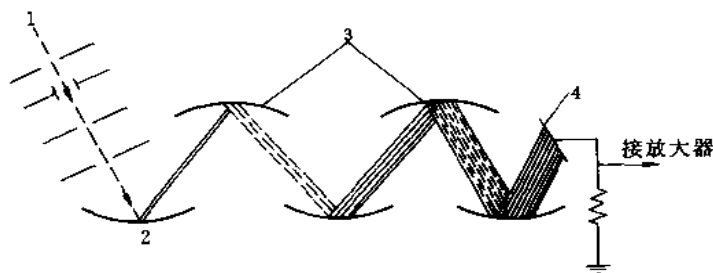


图 2-57 静电聚焦式电子倍增器

1 离子束; 2 阴极; 3—打拿板 (二次极); 4—阳极

阴极的表面，产生若干二次电子，然后用多级瓦片状的二次电极（或称打拿极）使二次电子不断倍增，最后为阳极所检测。

设入射的正离子流强度为  $I_0$ ，阴极发射的二次电子流强度为  $I$ ，则阴极效率  $\gamma = I / I_0$ 。对于每一个打拿极来说，设入射电子流强度为  $i_1$ ，发射的二次电子流强度为  $i_2$ ，则二次发射系数  $\sigma = i_2 / i_1$ 。相同材料的打拿极的二次发射系数是相等的。由此可以得知，到达阳极的电子流强度  $I_A = I_0 \gamma \sigma^n$  ( $n$  是打拿极的个数)，并能计算出倍增器的增益（放大倍数） $G = I_A / I_0 = \gamma \sigma^n$ 。大多数倍增器有 10~20 个打拿极，通过一个电阻分压器相连接，总体电压一般在 3000V 左右，可以获得  $10^5 \sim 10^8$  的增益。

制作阴极和打拿极的材料二次发射系数  $\sigma$  必须大于 1，铜-铍（含铍 2% 左右）、银-镁（含镁 2%~4%）、铝-镁（含镁 4%~5%）等合金或某些半导体材料都可采用。铜-铍合金由于具有下述优点，是最常使用的：

- ① 二次发射系数  $\sigma$  再现性好；
- ② 对空气较稳定；
- ③ 在较大负载情况下，仍有较高的稳定性；
- ④ 稳定工作的温度范围宽（ $\leq 400^\circ\text{C}$ ）；
- ⑤ 激活过程简单。

电子倍增器长期使用，特别是在暴露大气后，由于打拿极表面污染而导致增益下降，必要时应进行清洁和重新激活。通常清洁的方法是在高真空中加热或将倍增器浸入丙酮中进行超声波处理。铜-铍打拿极的激活方法一般是在氧气氛中加热到一定温度。

## 2. 百叶窗式电子倍增器

百叶窗式电子倍增器是另一种静电式电子倍增器。它的工作原理以及极板材料与静电聚焦式电子倍增器相同，但结构比较简单、紧凑。其性能上的特点是可以检测截面较大的离子束，输出电流大，可达毫安级；电子在倍增器中飞行时间比较一致；可以检测低能离子。图 2-58 是一个百叶窗式倍增器的结构示意图。

## 3. 磁式电子倍增器

二次电子在正交均匀的电场和磁场中以摆线轨迹运动，撞击在平板电极上逐级倍增，最后为阳极所接收，这就是磁式电子倍增器的工作原理（见图 2-59）。

磁式电子倍增器比静电式电子倍增器的响应快，时间常数仅  $10^{-10} \sim 10^{-11}\text{s}$ ，因此更适合于快速测量。

## 4. 磁式连续电子倍增器

上面介绍的都是级联式电子倍增器，它们的增益大小与所用的二次电极级数有关。下面介绍连续式倍增器。

磁式连续电子倍增器（如图 2-60 所示）的工作原理与上面

介绍的磁式电子倍增器相同，但结构有所不同。它的二次电极不是一片片独立的平板，而是由相互平行的电场板和倍增板组成。两个极板均由玻璃基体制成，基体上覆盖一层具有一定二次发射系数的高阻抗材料。每个极板两端施加 1000V 以上的高压，两极板之间亦有几百伏的压差，极板置于一个与电场正交的、 $10^{-2}\text{T}$  的磁场中。当离子轰击阴极产生的二次电子进入

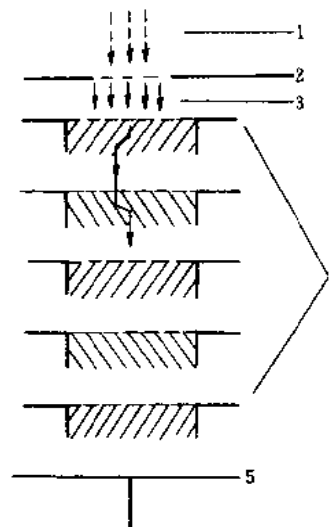


图 2-58 百叶窗式电子倍增器

1—离子；2—阴极；3—电子；  
4—二次极；5—阳极

正交的电场和磁场，便按摆线轨迹向电场较高的方向运动，撞击在倍增板上产生新的二次电子而连续倍增，最后为阳极所接收。

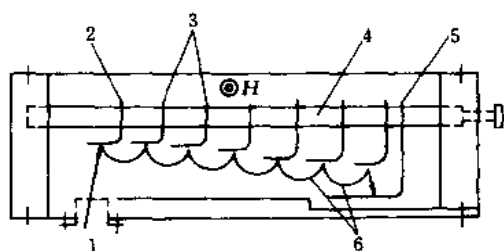


图 2-59 磁式电子倍增器

1—离子束；2—阴极；3—二次极；  
4—绝缘架；5—阳极；6—二次电子轨迹

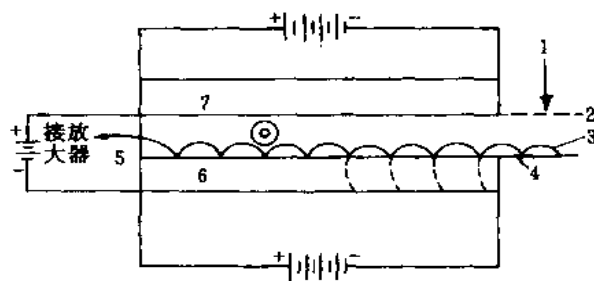


图 2-60 磁式连续电子倍增器

1—离子；2—栅极；3—电子轨迹；4—阴极；  
5—阳极；6—倍增板；7—电场板

### 5. 静电连续电子倍增器

这类电子倍增器与磁式连续电子倍增器的区别在于不需要外加磁场。它的电子倍增电极可以是两块平行的极板，也可以是一根细长的管子。电极的内表面涂敷了具有一定二次发射系数的材料，两端施加几千伏的高压。离子打击阴极产生的二次电子在平板或管道中间来回撞击而倍增。

二次电子倍增器是质谱仪器中广泛采用的一种离子检测器，它具有响应快 [ $10^{-9} \sim 10^{-11}$  s]、增益高 ( $10^6 \sim 10^8$ ) 的优点，适合于高灵敏度和快速测定。但是，由于阴极效率与轰击离子的质量、能量和类型有关，使二次电子倍增器有较大的质量歧视效应；倍增电极的二次发射系数受倍增器的“历史”状况影响<sup>①</sup>，因此二次电子倍增器的测量精度较差，在进行定量测定时，必须进行校正。

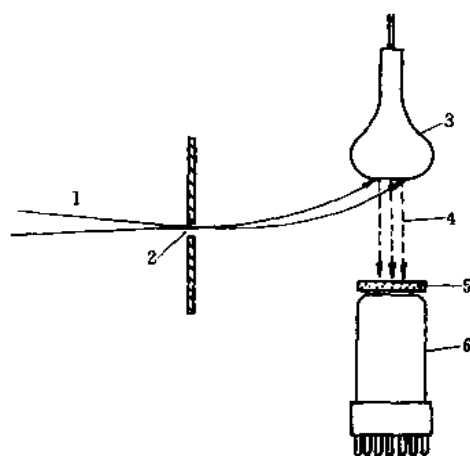


图 2-61 离子-电子闪烁检测器

1—离子束；2—接收器入口缝；  
3—离子-电子转换极；4—电子；  
5—闪烁体；6—光电管

## 二、闪烁检测器和光电倍增管

闪烁检测器和二次电子倍增器一样，是利用离子产生二次效应来检测的。其差别是二次电子倍增器是离子打击阴极产生二次电子，而闪烁检测器则是离子打击闪烁体产生光子，然后用光电倍增器检测电流。用离子束直接打击闪烁体的方法容易损伤闪烁体，并且有显著的质量歧视效应。所以，闪烁检测器的一种较好的设计是增加一个金属电极。通过接收狭缝的离子束先经加速，能量从几千伏提高到几十千伏，然后打击金属电极产生二次电子，再使二次电子打击闪烁体产生光子，最后用光电倍增器检测。图 2-61 就是这样一个离子-电子闪烁检测器的工作原理图。

① 所谓“历史”状况，是指倍增器的制作和使用情况，即使是同一批制作的产品，其性能仍会有差别；即使两个倍增器的初始性能相同，但因使用时间的长短及使用采用的增益大小不同，甚至由于被检测离子的质量和类型等等的差异，其二次发射系数的变化也不相同。

常用的闪烁体是用特殊杂质激活的碱金属卤化物，例如铯激活的碘化钠 [NaI (TI)]。ZnS (Ag) 有时也用作闪烁体。

光电倍增管的基本结构为阴极区（包括光窗、光阴极、光电子聚焦系统）、倍增系统、收集极和外壳四个部分。光窗材料有钠钙玻璃、硼硅玻璃等，要求所选用的材料对闪烁体发射的光不吸收。光窗的设置方式有两种——端面窗和侧面窗，视光阴极的性质而定(图 2-62)。光阴极的作用是将光子转化成电子，常用的有铯铷阴极、多碱阴极（除含有铯、铷之外，还含钾、钠）。光阴极的面积大于倍增系统的第一打拿极的面积，另一方面打拿极吸收光电子的效率对整个光电倍增管的增益影响颇大，所以在阴极区内有一个电子聚焦系统，使光阴极发射的绝大部分光电子聚焦在第一打拿极上。光电倍增管的倍增系统的结构、原理与电子倍增器基本相同。收集极一般是细栅网，紧靠着最后一个打拿极。光电倍增管的管壳是玻璃壳，一头用玻璃封死，另一头封接着带有全部引出线的多脚芯柱。

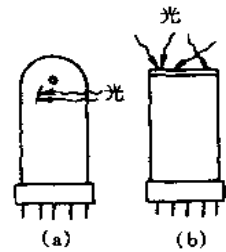


图 2-62 光电倍增管  
(a) 侧面窗，不透明光阴极；  
(b) 端面窗，半透明光阴极

由于通过离子-电子、电子-光子两次转换，信号已有所放大，这就降低了对光电倍增器放大倍数的要求，使倍增器处于较低的工作电压，提高了信噪比。因此，离子-电子-闪烁检测器具有极高的灵敏度，其检测限为  $10^{-21}\text{A}$ 。这种检测器的另外一些优点是：其放大系数比电子倍增器稳定；可以设置在真空系统之外，便于拆装。它的主要缺点是结构比较复杂。

### 三、照相板

一定能量的离子能使照相板感光，感光后所得的谱线黑度和面积表征离子束强度。将照相板放在质量分析器的聚焦面上就能实现离子检测。半圆形磁场和马-赫型质量分析器(图 2-63)的聚焦点落在同一直线上，适合于用照相板检测。

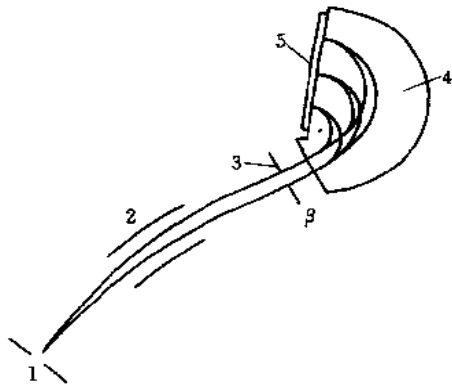


图 2-63 马-赫型仪器上的照相板检测

1-离子源；2-静电场；3- $\beta$ 狭缝；

4-磁场；5 照相感板

用于质谱检测的照相板通常由均匀涂布溴化银感光材料的玻璃板制成（也有时使用  $\text{SC}_5$ 、 $\text{SC}_7$  等感光材料）。要求感光层薄、颗粒细、涂布均匀。每一块照相板可记录 (20~30) 个独立的谱图。测量时，对各种不同强度的离子流可以通过改变和控制曝光量提高检测的相对灵敏度，并获得黑度相近的谱线，便于黑度测量和计算。曝光量改变的幅度一般按 10:3:1 的比例递减。

用照相板检测可以同时检测几十个离子的质荷比和强度。由于测量是积分性质的，不仅提高了检测灵敏度，而且离子流的起伏以及其他随时间变化的不稳定因素在测量过程中可以抵销。

照相板检测的缺点是：

- ① 定量测定的精度较低 ( $\pm 5\% \sim \pm 10\%$ )。这主要是由于照相板制作的重复性差，本身灵敏度分布不均匀以及背景影响大的缘故。
- ② 质量歧视效应大。照相板在离子束作用下感光效率随离子质量增大而减小，黑度与质量数的 (0.4~0.8) 次方成反比。
- ③ 谱图处理比较复杂。首先，被离子感光后的照相板必须经过仔细地显影。其次，必须

用专用的投影放大装置来研究谱图, 所得的信息不像电测法能直接与计算机联机。另外, 谱线黑度和离子流强度常常不成线性关系, 在定量分析时要作黑度-离子束强度曲线。

照相板常用于精确的质量测定和火花源杂质分析, 一般不用于同位素分析和有机质谱分析。

#### 四、其他类型的检测器

还有一些用于质谱仪器的离子检测器。例如半导体检测器。它是利用电子撞击反偏压工作状态的 p-n 结半导体时, 引起半导体内部一定深度范围内的电子-空穴对移动而产生电流来检测。工作时离子首先要转换成电子。

有一些检测器是在前面介绍的几种检测器的基础上部分加以改进, 以改善检测器的性能, 如采用新的感光材料或无乳胶型薄膜感光层的照相干板, 在静电倍增器中采用网状聚焦电极等。

不同类型的离子检测器性能和用途各异, 表 2-5 将常见的检测器作一简单的比较。

表 2-5 各种离子检测器的比较

检测器类型	检测限/A	响应时间/s	测量精度/%	质量歧视效应	适用范围
法拉第筒	$10^{-15}$ (直流放大) $10^{-16} \sim 10^{-17}$ (交流放大)	0.1	$\pm 1$	无	精密定量测定(如同位素测定)
二次电子倍增器	$10^{-18} \sim 10^{-19}$	$10^{-10} \sim 10^{-11}$ (磁式) $5 \times 10^{-9}$ (静电式)	$\pm 5$	有	高灵敏度和快速测定(如 GC-MS)
闪烁检测器	$10^{-21}$			较小	高灵敏度测定
照相板			$\pm 5 \sim 10$	较大	火花源质谱仪和质量精测

### 第五节 进样系统

通常的质谱仪器都是在高真空条件下工作的, 而被分析的样品则处于常压环境下。将样品无分馏、快速、安全和方便地送入质谱仪器的离子源是进样系统的主要任务。商品仪器中配备的进样系统有直接进样系统、间接进样系统和参考样品进样系统。随着色谱与质谱联用技术的发展, 气相色谱和高效液相色谱这些以成分分离见长的分析仪器, 在联用技术中可以看作是质谱仪器的一种特殊进样系统, 它们先将混合物样品作了预分离后, 再将它们导入质谱仪。当然, 从另一角度看, 质谱仪也可看作是色谱仪器的具有结构分析能力的特殊检测器。

#### 一、直接进样系统

直接进样系统是利用一个推杆(或称探头, Probe)将样品送到离子源的电离盒样品口, 然后使样品气化的进样系统, 主要用于固体与高沸点液体样品进样。由于样品在电离盒旁边气化, 大部分样品蒸气能进入电离盒, 因此样品利用率高于其他几种进样系统。同时, 由于气化位置与电离区域很近, 样品一旦汽化, 很快被电离, 能比较有效地防止样品热分解。

直接进样系统主要由推杆、样品管(也称作样品坩埚)、闸阀、预抽室等部分组成(见图 2-64)。

样品管一般是石英或黄金制成的毛细管, 样品放入后, 将样品管置于推杆顶端, 利用推杆送进离子源。样品管与电离盒样品口之间的相对位置影响样品利用率。图 2-65 列出了三种情况, (a)、(b) 样品利用率很高, 如果推杆头或样品管与进样口密封得好, 样品利用率可达



100%。(c) 的样品利用率则低得多。由于离子源处于高真空状态,当推杆推入或拉出离子源时,为了不破坏源的真空,必须在离子源和直接进样系统之间安装一个高真空闸阀。闸阀关闭时,真空系统对预抽室抽真空,待真空达到一定要求时,闸阀打开,推杆便可推入,将样品送入离子源;测试完后,将推杆拉至预抽室,关闭闸阀,然后将预抽室放空,再拔出推杆,更换样品管。

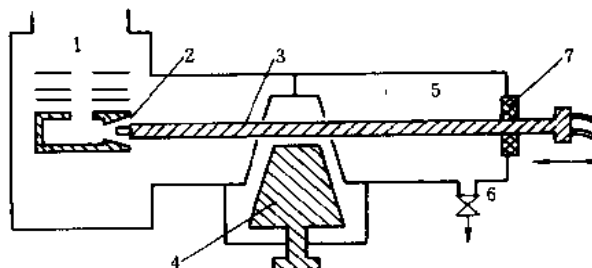


图 2-64 直接进样装置

- 1 离子源; 2—样品管; 3 样品推杆; 4—闸阀  
5—预抽室; 6—接真空泵; 7 真空密封

样品的加热气化有两种方式——间接加热和直接加热,所谓间接加热就是利用电离盒本身的温度(一般在  $150^{\circ}\text{C}\sim 250^{\circ}\text{C}$  之间),通过辐射或传导加热样品使其气化,调节探头的位置能控制样品蒸发速度。这种方法因受电离盒温度的限制,所能达到的温度较低。直接加热是在推杆顶端安装加热器,或在电离盒旁边样品管所能达到的位置处安装加热器,通常还配备有程序升温装置。当样品管进入离子源后,再启动加热器使样品挥发。

有些仪器的直接进样推杆还可以通冷水或液氮冷却,以防止样品在预抽真空时挥发掉。这种推杆也能适合于沸点较低的液态样品进样。

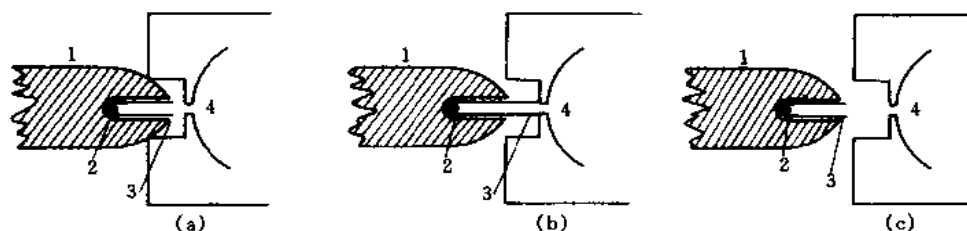


图 2-65 推杆头与电离盒的相对位置

- 1—推杆头; 2 样品; 3—样品管; 4 电离盒入口

如果将样品管的形状稍加改进,使其顶端正好达到轰击电子束经过的区域。样品直接粘在样品管顶端,这样电子能直接轰击被测样品。这种进样方式称为“在束”技术(In Beam),它适合于难挥发和热稳定性差的样品分析。

## 二、间接进样系统

间接进样系统也叫做贮气罐进样系统。它是先将气态样品或液、固态样品的蒸气贮存在贮气罐中,然后通过加热的导管送入电离盒的一种进样系统。间接进样系统对气、液、固态样品的分析均适用。由于贮气罐的体积较大,允许样品在较长时间内以稳定的流量进入质谱离子源,所以这种进样系统特别适合于半定量和定量分析。但是,间接进样系统不适用于热稳定性差的样品,因为液、固态样品从气化到进入电离盒需要较长时间,热稳定性差的样品可能在进入电离盒前就部分或全部热解了。贮气罐中的样品蒸气只有少量进入电离盒,所以间接进样系统的样品利用率很低,约为  $1\%\sim 2\%$ 。少于  $100\mu\text{g}$  的微量样品一般不能得到足够的离子流强度。它的灵敏度比直接进样系统低(2~3)个数量级。

间接进样系统的结构如图 2-66 所示。贮气罐(1)的体积一般为几百毫升到几升,放置在一个可以调节温度的恒温箱中。抽气阀(8)和泵(9)用于贮气罐和一些管道的抽空。管道

(2) 连接贮气罐和电离盒，它的外面缠有电热丝和保温层。管道中间装有孔径为  $(5\sim 10)\ \mu\text{m}$  的分子漏孔 (3)，用来限制进入离子源的样品量和维持离子源的真空状态。单位时间内流入电离盒的样品量不仅与贮气罐中的压强、温度有关，而且与分子漏孔的传导有关：

$$n = \frac{PC}{RT} \quad (2-61)$$

式中  $P$ ——贮气罐内压强，Pa；

$n$ ——单位时间内流入电离盒的样品量， $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$ ；

$C$ ——分子漏孔的传导， $\text{L} \cdot \text{s}^{-1}$ ；

$R$ ——气体常数 [ $8306\text{L} \cdot \text{Pa} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ]；

$T$ ——热力学温度，K。

仪器说明书上给出的分子漏孔的传导范围一般是指  $25^\circ\text{C}$  下，对氮气分子的传导。因为分子流速与分子量的平方根成反比，可以从对氮分子的传导计算出任何一种分子的传导。

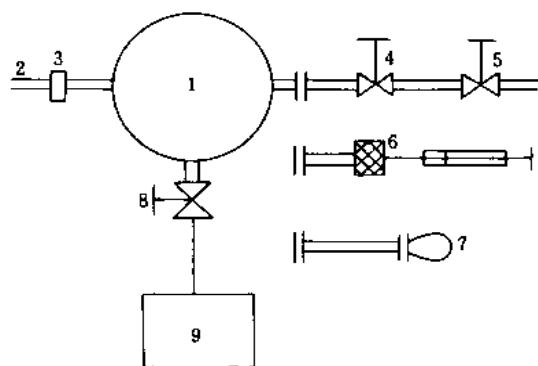


图 2-66 间接进样系统

- 1—贮气罐；2—通电离盒的管道；3—分子漏孔；  
4, 5—气体进样阀；6—硅橡胶垫圈；7—样品管；  
8—抽气阀；9—真空泵

气、液、固态样品以不同的装置导入贮气罐。气体样品通过一个双阀路送入贮气罐。进样前先关闭阀 (5)，打开阀 (4) 和抽气阀 (8)，将系统抽到  $1\text{Pa}$  或更高的真空；然后关阀 (4) 和抽气阀 (8)，打开阀 (5)，气体样品进入阀 (4)、(5) 之间的管路，其压力与样品罐压力相同。这可以使限量的样品进入贮气罐，实现样品的计量；关阀 (5)，打开阀 (4)，气体样品便扩散到贮气罐中。液态样品可用微量注射器从硅橡胶垫进样口 (6) 直接注入。进样前，系统必须先抽真空，由于整个系统处于真空状态和一定的工作温度，液态样品很快气化，进入贮气罐。固态样品则是利用一个活动的样品管 (7)。进样前，先将系统放空，取下样品管 (7)，将被测物放入其内，然后把样品管放回原

处，打开抽气阀 (8) 抽真空，由于系统内外的压力差，样品管牢牢连接在系统上。当真空达到要求后，加热样品管，使样品气化后进入贮气罐。样品管与系统的连接，可以用硅橡胶垫圈密封，但使用温度超过  $300^\circ\text{C}$  时，硅橡胶会软化变形。一个带有光学玻璃制法兰的样品管适合于高温操作，因为法兰表面光洁度很高，有良好的密封性。固体样品也可以用推杆送入气化室，气化后进入贮气罐。

为了避免高温下金属对样品的热解催化作用，制作间接进样系统的材料一般是玻璃或内衬珐琅的金属。整个体系保持温度的均匀和恒定。保证混合样品充分馏进入电离盒是间接进样系统进行定量或半定量分析的关键。贮气罐、管道和样品导入部分都有独立的加热和温控体系。

### 三、参考样品进样系统

参考样品是指质量定标所用的标样。最常用的标样是全氟煤油 (简称 PFK)，因为它能在质量范围  $(50\sim 1200)$  之内给出一系列间隔  $12$  或  $19\text{u}$  的特征峰。PFK 可以通过直接进样或间接进样系统导入离子源，但因为 PFK 有较强的记忆效应，易造成污染，所以质谱仪常常装备

有专门的参考样品进样系统。

参考样品进样系统的种类很多。西德 Varian MAT 公司采用的装置如图 2-67 所示。标样放在样品孔内，然后由推杆送到加热的气化室内气化，气相标样分子经过一个节流阀进入离子源。另一种参考样品进样系统更为简单，只需用微量注射器将液态 PFK 从硅橡胶垫注入加热管道，气化后的 PFK 通过分子漏孔限流进入离子源。

#### 四、组件式进样系统

为了便于更换样品或变换电离方式，有一些商品仪器将离子源分成两部分设计。一部分对各种离子化方式是通用的，不变的，如狭缝、离子透镜等。另一部分按不同的离子化方式和进样要求的特点分别设计，并制成组合件。通过一个类似于直接进样系统的推杆、闸阀和预抽室，可以将组合件整个送入离子源或从离子源中取出，而不破坏源的真空。这样就能很方便地从一种离子化方式变换到另一种或是更换样品。

图 2-68 是一个组件式进样装置的示意图。当闸阀（4）关闭时，可以打开密封门（7）更换样品或整个组件。

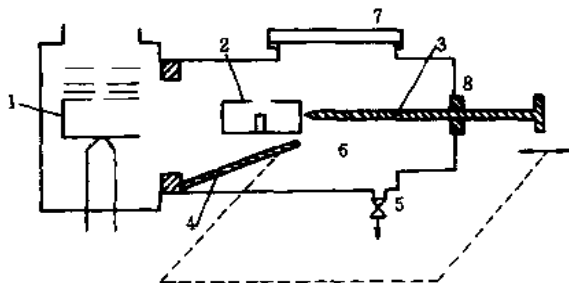


图 2-68 组件式进样系统

1—离子源；2—进样组件；3—传送杆；4—闸阀门；  
5—接真空泵；6—预抽空间；7—密封门；8—真空密封

现在，几乎所有的商品有机质谱仪器上均备有 GC-MS。为了解决低蒸气压、强极性和大分子量的混合物分析，液相色谱和质谱联用（LC-MS）一直是质谱学家和仪器制造商们关注 and 致力研究的一个课题。近十几年来，LC-MS 的接口也有突破性的进展。用于同样目的的另一联用技术是质谱/质谱联用（MS-MS），这是 80 年代出现的新技术。现在，LC-MS、MS-MS 均已有的商品仪器出售。

这些联用技术实际上都是使用一个成分分离器作为进样器，即 GC、LC 和 MS-MS 联用时，GC、LC 和第一个 MS 用作进样器。混合物进样后，先经过成分分离器，不同组分被分开，然后逐个进入质谱仪定性。这种方法快速、方便、可靠，是复杂混合物分析的最有效方法。

##### （一）气相色谱仪用作进样器（GC-MS）

气相色谱是一种公认的快速、高效的分离技术。在定性分析方面，由于它只是利用保留时间作为鉴定手段而受到很大限制。质谱则是一种高效的定性分析技术。将气相色谱和质谱结合起来可以集两者之长，大大扩展应用的范围，其优点是显而易见的。

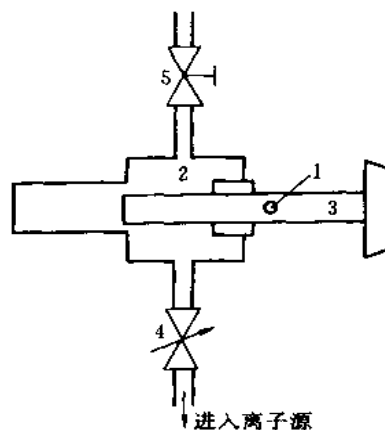


图 2-67 参考样品进样系统  
1—样品孔；2—气化室；3—推杆；  
4—节流阀；5—真空阀

#### 五、成分分离器和进样器的组合

质谱仪器是一种高灵敏度、高效的定性分析工具，它与许多用于定性分析的仪器一样，对混合物的分析常常无能为力。1957 年 J. C. Holmes 和 F. A. Morrell 首次试图把一个快速、高效的成分分离仪器——气相色谱仪和质谱仪结合起来。在解决了若干技术关键之后，气相色谱和质谱联用技术（GC-MS）已经相当成熟，成功地解决了许多复杂混合物的分离和鉴定。

GC 和 MS 除了工作气压之外, 具有很好的适应性(见表 2-6)。它们均采用连续流动分析方法, 都具有毫微克级的灵敏度, 在分析速度方面也能匹配, 但是 GC 柱出口气压为  $1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$  (1atm), 而 MS 至少应在低于  $10^{-4} \text{ Pa}$  的高真空下工作。因此 GC-MS 联用的关键问题是需要有一个连接器, 它可将 GC 载气的气压降低 8 个数量级, 并把样品送到 MS 的离子源。

表 2-6 气相色谱仪与其他仪器的适应性

操作参数	气相色谱	质谱	红 外	核磁共振	紫 外
气 相	是	是	不希望	否	否
毫微克级灵敏度	是	是	否	否	取决于样品
扫描时间匹配	-	是	是 <sup>①</sup>	是 <sup>②</sup>	否
连续流动	是	是	否	否	否
温度匹配	-	是	否	否	否
环境气压	是	否	是	是	是

① 傅里叶变换红外。

② 傅里叶变换核磁共振。

### 1. 气相色谱-质谱连接器

(1) 不用分子分离器的连接器 把气相色谱柱的流出物引入质谱仪的最简单方法是在柱出口将载气分成两股, 一股用细调定量针阀控制, 使流量限制在质谱仪所能承受的范围内, 另一股分流掉。针阀就用作连接器。这种方法结构简单使用方便, 在 GC-MS 发展初期得到应用。这种连接器没有分馏作用, 样品利用率取决于分流比, 即流入质谱仪电离盒的量和色谱柱流出物总量之比。这两个量又分别由质谱仪的真空系统的通导和色谱柱的类型所决定。表 2-7 列出了不同真空系统和不同色谱柱条件下, 这种连接器的效率。

表 2-7 不同条件下, 针阀连接器的样品利用率

真空系统类型	能接受的最大流量/ ( $\text{cm}^3 \cdot \text{atm} \cdot \text{min}^{-1}$ )	气相色谱柱的内径/cm			
		0.025	0.05	0.075	0.32(填充柱)
单级泵抽空	0.1~0.3	(10~30)%	(2~6)%	(1~3)%	<1%
差动抽空	1~2	约 100%	(20~40)%	(10~20)%	(5~10)%

现代色质联用仪器在离子源部分使用一个通导在  $500 \text{ L} \cdot \text{s}^{-1}$  以上的高速真空泵, 允许色谱柱流出物以  $(0.6 \sim 0.8) \text{ cm}^3 \cdot \text{MPa} \cdot \text{min}^{-1}$  ( $6 \sim 8 \text{ cm}^3 \cdot \text{atm} \cdot \text{min}^{-1}$ ) 的流速进入电离盒, 因此, 可以直接与毛细管柱连接, 样品利用率为 100%。

(2) 使用分子分离器的连接器 当被分析的样品具有很宽动态范围时, 上述简单的连接器不能满足要求, 必须采用分馏技术富集样品, 也就是使进入质谱仪的气流中样品量与载气量之比增加。样品富集装置称为分子分离器。分子分离器的性能评价常常采用分离系数 ( $N$ ) 和收率 ( $y$ ) 两个参数。分离系数, 也称浓缩系数, 定义为进入质谱仪的载气中样品浓度与色谱柱出口的载气中样品浓度之比, 即:

$$N = \frac{c_{\text{MS}}}{c_{\text{GC}}} = \frac{(p_s/p_{\text{He}})_{\text{MS}}}{(p_s/p_{\text{He}})_{\text{GC}}} \quad (2-62)$$

式中,  $c$  为浓度,  $p$  为气体分压; 下标 MS 表示进入质谱仪, GC 表示色谱柱出口,  $s$  表示样品, He 表示载气 (氦气)。

由于分离系数不能说明进入质谱仪的样品量, 为了全面评价分离器的性能, 引入“收率”这一参数。所谓收率就是指进入质谱仪的样品量占全部样品的百分数, 即

$$y = \frac{Q_{\text{MS}}}{Q_{\text{GC}}} \times 100\% \quad (2-63)$$

式中,  $Q$  为样品量, 下标含义同上。

按富集样品的原理, 分子分离器可分为三类: 隙透分离器; 喷射分离器; 半透膜分离器。实际使用时可以单独或双级混合使用。

① 隙透分离器 隙透分离器是利用细孔或狭缝渗透 GC 载气而使样品组分浓缩的分子分离器。根据分离器所用材料及结构的不同, 隙透分离器又可分为以下几种。

a. 多孔玻璃分离器 这是最早被广泛使用的一种分离器, 其结构如图 2-69 所示, 一根烧结的微孔玻璃管, 装在一个抽真空的套管内, 进出口各有一段玻璃毛细管限制气流。气相色谱的流出物经过进口毛细管限制, 使微孔玻璃管内气压下降到 100Pa 左右。然后, 气流分成二股, 一股从微孔渗透到抽空套管被旋转泵抽走, 另一股流经出口毛细管进入质谱仪。经过多孔玻璃层的任一组分的量  $Q$  与该组分的分压  $p$  成正比, 而与其分子量  $M$  的平方根成反比,  $Q = Kp\sqrt{1/M}$ 。载气的分压高, 分子量小, 容易渗透; 样品组分分压低, 分子量大, 不易渗透, 大部分进入质谱仪。因此, 气相色谱流出物流经多孔玻璃分离器后, 样品组分被浓缩了。

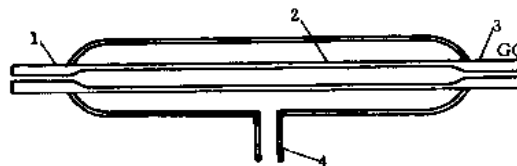


图 2-69 多孔玻璃分离器

- 1—出口限制器 (通到质谱计);
- 2—烧结玻璃管 (超细多孔结构);
- 3—入口限制器 (来自色谱仪);
- 4—接到旋转机械泵的抽气口

多孔玻璃分离器的分离系数  $N$  和收率  $y$  可以用公式 (2-64) 和 (2-65) 计算:

$$N = \frac{V_{GC}}{V_{MS} + V_{\text{多孔层}} \sqrt{M_{He}/M_s}} \quad (2-64)$$

$$y = \frac{1}{1 + V_{\text{多孔层}}/V_{MS} \sqrt{M_{He}/M_s}} \times 100\% \quad (2-65)$$

式中  $V_{\text{多孔层}}$ ——指透过多孔层的部分的流速;

$M_{He}$ ——载气 (He) 的分子量;

$M_s$ ——样品的分子量;

$V_{MS}$ ——进入质谱仪的流速;

$V_{GS}$ ——色谱柱出口的流速。

从上述两式可以看出这类连接器的性能与载气流速和载气与被分析物的分子量有关。流出物的流速愈大、流入质谱仪的流量愈小, 分离系数越高; 但收率随流出物流速的减小和流入质谱仪量的加大而变大。

b. 微孔金属和陶瓷分离器 它们的工作原理与多孔玻璃分离器相同, 但微孔部分是用银、不锈钢或陶瓷做成的, 一般结构比较紧凑、结实、耐用, 易于安装和更换。图 2-70 是一个多孔银薄膜微型分离器。

c. 可变通导分离器 上述两种分离器都是固定型的富集装置, 一旦制成后, 其多孔烧结体和进出口限流毛细管的尺寸不能再改变了。因此, 只在某一特定流速条件下, 才能达到最佳分离性能。为了使分子分离器能适应各种载气流速, C. Brunnee 等人设计了可变通导的隙透分离器, 其结构如图 2-71 所示。一个平面盖板和两个直径约 2cm 的环型刀口组成了小狭缝, 渗透就是通过这个狭缝发生的。盖板上装有千分尺轴心, 可以根据色谱柱载气流速大小, 从 0 到大约  $5 \times 10^{-3}$ cm 范围内调节盖板的开启程度, 变动狭缝大小, 使分离器保持最佳工作水

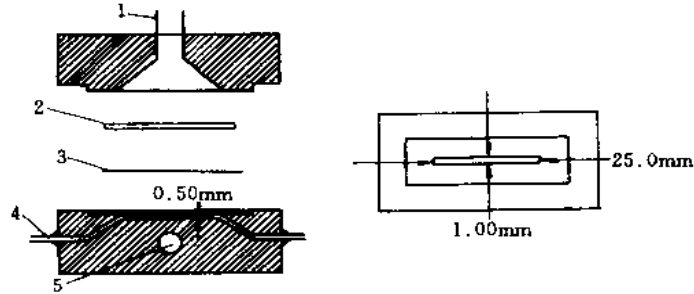


图 2-70 多孔银薄膜型分离器

1 外径 640mm 的管子；2 金丝垫圈；3 多孔银薄膜；4—外径 1.60mm 的管子；5—加热器插入孔

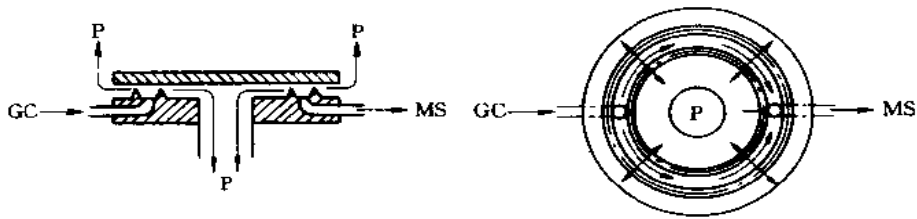
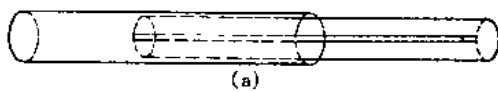
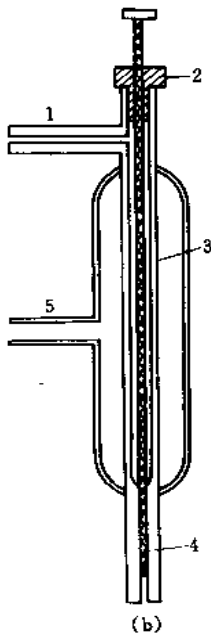


图 2-71 可变通导分离器



(a)



(b)

图 2-72 可变粘滞流出口限制器

(a) 沿管子可滑动的有槽棒；  
 (b) 具有可调不锈钢棒的出口限制器  
 1—入口限制器；2 聚四氟乙烯压盖；  
 3—烧结玻璃；4—可变出口限制器；  
 5 抽气口

平。另一种可变通导的隙透分离器是采用调节分离器出口流量的方法。图 2-72 给出一个示意图。一根可以沿着出口毛细管滑动的有槽的聚四氟乙烯棒用来调节出口流量。

② 喷射分离器 在膨胀的超声速喷射气流中，不同气体以不同的速率扩散，喷射分离器就是利用这一原理实现样品组分和载气的分馏。

图 2-73 是喷射分离器的结构和工作原理图。从气相色谱柱流出的气体，通过限制孔  $d_1$ ，在  $d_1$  和  $d_2$  之间的抽空区域里迅速膨胀，形成一个压力梯度。在这个区域每一组分的扩散速度是其分子量的函数，而且正比于扩散系数。较重的组分，扩散系数小，处于喷射中心，大部分进入接收孔  $d_2$  被富集，载气分子量小，扩散系数大，处于气流外围大部分被抽走。

喷射分离器仅在  $10\text{cm}^3 \cdot \text{atm} \cdot \text{min}^{-1}$  ( $0.1\text{MP}$ ) 以上的高流速时才能有效地工作。当气体流量小于  $(3\sim 4)\text{cm}^3 \cdot \text{atm} \cdot \text{min}^{-1}$  时，由于不能保持超声速流动条件，没有分馏作用。喷射分离器的性能与喷口的位置和尺寸有关，一个推荐尺寸是  $d_1 = 10^{-2}\text{cm}^2$ ， $d_2 = 2.5 \times 10^{-2}\text{cm}^2$ ， $d_1$ 、 $d_2$  间隔  $L = 1.5 \times 10^{-2}\text{cm}$ 。

喷射分离器一般由玻璃或不锈钢制成。玻璃表面的惰性不易造成样品的热解，因此，全玻璃喷射分离器应用很广。

③ 半透膜分离器 这类分离器利用样品组分和载气通过半透膜的速度不同实现分馏，不同材料的半透膜工作原理不同。

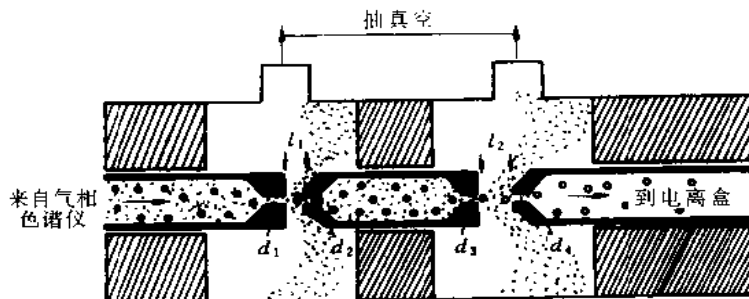


图 2-73 喷射分子分离器

a. 硅橡胶膜分离器 利用硅橡胶膜的特殊性质，即有机物能溶于其中，而无机载气则不溶的性质达到组分和载气分馏的目的。图 2-74 是双级硅橡胶膜分离器的剖面图。其结构相当简单，有一小室，一硅橡胶薄膜将其分成两部分。薄膜厚度约  $10^{-3}\text{cm}$ ，面积几个平方厘米，为金属网或烧结玻璃所支持。当色谱柱流出物进入分离器的小室后，有机组分溶解于硅橡胶薄膜，并通过扩散穿过薄膜进入质谱仪。载气由于难溶于薄膜而从出口流走。气体通过薄膜的传导速率是气体比容度 ( $S$ )、扩散常数 ( $D$ )、薄膜厚度 ( $l$ ) 和面积 ( $A$ ) 的函数，可用公式 (2-66) 表示：

$$-\frac{dp}{dt} = \frac{A}{V_c} \cdot \frac{p}{l} (SD) \quad (2-66)$$

式中  $p$ ——组分分压；

$V_c$ ——分离器小室体积。

硅橡胶分离器结构简单、制造方便，能得到高的分离系数和收率，有比较广泛的应用。它的主要缺点是严重的温度效应。当温度高时，有机物在薄膜中的溶解度降低，影响收率；当温度较低时，溶解度增大，但扩散系数减小，造成色谱峰拖尾，严重影响色谱分离度。

M. A. Graysen 和 C. J. Wolf 认为分离器的温度一般应保持低于有机物沸点 ( $50\sim 70$ ) $^{\circ}\text{C}$ 。因此，J. E. Hawes 等人建议将分离器放在气相色谱柱箱内，与色谱柱同步升温，这种办法取得较好的效果。薄膜分离器的另外一些缺点是使用温度比较低（一般低于  $230^{\circ}\text{C}$ ）、薄膜易发生破裂，影响使用寿命。

b.  $\text{H}_2/\text{Pd-Ag}$  分离器 利用 Pd-Ag 合金对  $\text{H}_2$  有高度的穿透性，而其他有机或无机气体及蒸汽则不能透过的性质，做成的半透膜分离器。这种分离器结构简单，一根长几十厘米，内径零点几毫米的 Pd-Ag 合金管，盘成螺旋形，装在玻璃套管内，玻璃套管留有冲洗气体出入口。来自色谱的气体流过 Pd-Ag 管时， $\text{H}_2$  载气穿过管壁进入玻璃套管内，被冲洗气体带走，需要分析的组分则流过合金管进入质谱仪。由于除了  $\text{H}_2$  之外的其他气体和蒸气均不能透过 Pd-Ag 管，所以  $\text{H}_2/\text{Pd-Ag}$  分离器的收率可达 100%。其缺点是 Pd-Ag 合金的催化活性在高温下可能使未知样品中某些组分还原，因此，除非一些特殊用途，如宇宙方面，被分析物浓度很低要求高的收率，一般避免使用  $\text{H}_2/\text{Pd-Ag}$  分离器。

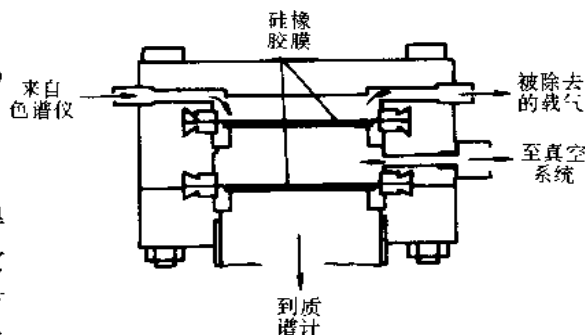


图 2-74 硅橡胶膜分离器

c. 聚四氟乙烯分离器 当温度高于 250°C 时,大量氦气能透过聚四氟乙烯薄膜而使样品浓缩,但温度低于 200°C 时,氦气几乎完全不能透过。这种分离器的确切机理还不清楚。聚四氟乙烯分离器的结构与 H<sub>2</sub>/Pd-Ag 分离器相似,只是渗透管的材料不同。当使用温度高于 350°C 时,聚四氟乙烯管易破裂。这种分离器虽然结构简单,便于制造,但未得到广泛应用。

④ 各种分子分离器的比较 分离系数 ( $N$ ) 和收率 ( $y$ ) 可以用来评价分离器性能,但是这两个指标不仅与分离器本身的结构、尺寸有关,而且受气相色谱流速、质谱真空系统效率、被测样品分子量大小等条件的影响极大,以至于必须在指定的条件下测试和比较所得的数据才有实际意义,所以可以引用的数据很少。表 2-8 列出了气相色谱流出物流速为 50cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup>, 流入质谱仪的流速为 0.1cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup> 时,各种分离器的收率和分离系数。

表 2-8 并不能说明某一分离器的优劣,只是在这一特定条件下的适用性比较。表 2-9 对不同的操作条件下,各种分离器的适用性作一简略的小结。

表 2-8 各种分离器的收率与分离系数<sup>①</sup>

分离器	收率/%	浓缩系数	分离器	收率/%	浓缩系数
不用分离器,分流比 500/1	0.2	1	单级 H <sub>2</sub> /Pd	100	高 <sup>④</sup>
单级隙透型	2 <sup>②</sup>	10	双级隙透型	6	30
单级喷射型	6~12 <sup>③</sup>	30~60	双级喷射型	≈40 <sup>⑤</sup>	48 <sup>⑥</sup>
单级硅橡胶膜	12	60	双级硅橡胶膜	30~50 <sup>⑦</sup>	300~500 <sup>⑦</sup>

① 测试条件为总流出物流速为 50cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup>, 流入质谱仪流速为 0.1cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup>;

② 分子量 400;

③ 估计值,无实测数据;

④ 决定于分离器的尺寸及操作形式,可能超过 1000;

⑤ 流入质谱仪的流速为 0.25cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup>;

⑥ 无确切数据;

⑦ 流入质谱仪的流速约为 0.05cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup>。

表 2-9 各种分离器的适应性比较

操作条件 <sup>①</sup>	隙透式	喷射式	硅橡胶膜	H <sub>2</sub> /Pd-Ag	双级	不用分离器
高 V <sub>GC</sub> 高 V <sub>MS</sub>	不适合	适合	适合	避免	不必要	不适合
高 V <sub>GC</sub> 低 V <sub>MS</sub>	不适合	不适合	不适合	适合	适合	不适合
低 V <sub>GC</sub> 高 V <sub>MS</sub>	适合	不适合	不适合	避免	不必要	适合
低 V <sub>GC</sub> 低 V <sub>MS</sub>	适合	不适合	适合 <sup>②</sup>	避免		适合

① 操作条件中, V<sub>GC</sub>——GC 流出物流速; V<sub>MS</sub>——流入 MS 的流速; 高 V<sub>GC</sub>——高于 15cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup>; 低 V<sub>GC</sub>——(1~15) cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup>; 高 V<sub>MS</sub>——(0.7~8.0) cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup>; 低 V<sub>MS</sub>——(0.07~0.7) cm<sup>3</sup> · atm · min<sup>-1</sup>。

② 应减少有效薄膜面积。

## 2. 色质联用对气相色谱和质谱的特殊要求。

(1) 对气相色谱的特殊要求 用于 GC-MS 的气相色谱仪没有特殊的要求。一般的商品仪器,填充柱、毛细管柱两种柱型都能用于 GC-MS,但在操作条件上必须注意两个问题,一是固定相的选择,一是载气的选择。

选择固定相除了与气相色谱相同的要求之外,要着重考虑高温时固定液的流失问题。流失的固定液大部分随样品组分进入质谱仪,污染离子源,造成高的质谱本底,干扰质谱图的解释。当柱子流失量超过低含量的样品组分水平时,该组分的色谱峰就检测不出来。因此,应尽可能在同类型固定相中选择温度限度高的,或采用键合型固定相。柱子在使用前应高于预定操作温度下老化,将柱流失减少到质谱可以接受的水平。还有一种解决办法是在柱后加一个流失吸附柱。

用于 GC-MS 的载气选择有四条标准,即:化学惰性;不干扰质谱图;具有能使载气中样



品富集的某些性质和不干扰总离子流检测。气相色谱中常用的载气是  $H_2$ 、 $N_2$ 、 $He$ 。 $He$  全部符合上述条件，是最常用的； $H_2$  满足前三个条件，有时也使用； $N_2$  除了化学惰性之外，完全不符合条件，一般不使用。在化学电离时，载气可兼作化学反应气，因此，在某些特殊情况下，也有以甲烷、乙烷、异丁烷等为气相色谱载气的。

## (2) 对质谱的特殊要求

① 离子源 并非所有的离子化方式都适合于 GC-MS，只有用于气相分子电离的离子化方式，如电子轰击 (EI)、化学电离 (CI) 和场致电离才适合于 GC-MS。那些为了适应热不稳定和难挥发样品分析的场解吸电离 (FD)、快原子轰击 (FAB)、离子轰击 (SIMS) 等电离方式，由于液、固态样品涂在发射丝或靶上，送入电离盒，然后几乎不经汽化直接电离，不可能也没有必要用于 GC-MS。

在 GC-MS 分析中，通常利用总离子流来检测色谱过程。由于载气  $He$  电离产生大量的  $He^+$  离子流，使检测发生困难。避免  $He^+$  干扰的办法是降低电子轰击的能量。 $He$  的电离电位是  $24eV$ ，绝大部分有机化合物的电离电位低于  $20eV$ ，所以 GC-MS 常常采用  $20eV$  的电子能量。但是，这种方法得到的谱图与标准谱图 (轰击电子的能量为  $70eV$ ) 不完全相同，给谱图解析带来一定困难。一种解决的方法是利用  $20eV$  的轰击电子检测色谱峰，在质谱扫描的几秒钟内转换到  $70eV$  的电子能量。

应用于 GC-MS 的离子源需要考虑的另一个问题是样品在离子源中的清除速率。清除速率低会造成色谱峰拖尾，影响分离度，含量高的组分尤其如此。因此，要求离子源的真空系统有较大的抽速。表 2-10 给出了几种离子源的结构、通导和清除速率。因为样品，特别是极性样品在电离盒内表面吸附，使实际的清除速率低于表 2-10 提供的数据。

表 2-10 几种离子源的通导性能比较

	源通导 / ( $L \cdot s^{-1}$ )	等量样品的 相对电离效率	源体积 / L	半清除时间 / s	达到 0.1% 的时间 / s
裸源	50	1	5	0.07	0.7
普通源	0.4	120	$7.5 \times 10^{-1}$	0.013	0.13
封闭源	0.1	480	$7.5 \times 10^{-2}$	0.05	0.5
高度密封的化学电离源	0.003	(不适用)	$7.5 \times 10^{-3}$	0.17	1.7

② 质量分析器 用于 GC-MS 的质量分析器 一般有飞行时间、单聚焦、双聚焦磁式或四极滤质器，现在绝大部分商品仪器采用后两种。

GC-MS 要求质量分析器的扫描速度较快，特别是在使用高效毛细管柱时，色谱峰很窄 ( $2s$ )。磁式质量分析器由于磁滞效应，扫描速度较慢，一般在秒 / (10 倍程) 级，四级滤质器则可达较高的扫描速度 [ $10^{-1}$  秒 / (10 倍程)]，所以，四极质谱仪更适合于 GC-MS。

GC-MS 对于质量分析器的分辨率没有特殊要求，选择分辨率完全取决于分析目的的要求，并受所用仪器的限制。但应该注意的是，为了达到高分辨率，狭缝必须变窄，这使仪器灵敏度下降，在通常的高分辨测试中，可以用降低扫描速度作部分补偿，而在 GC-MS 联用时扫描速度受色谱峰宽的限制，不能过低。

## (二) 液相色谱仪作进样器 (LC-MS)

作为一种分离技术，液相色谱比气相色谱具有更广泛的适应性。它特别适合于处理难挥发和热不稳定的化合物，在生命科学研究中有极为重要的作用，因此液相色谱和质谱联用 (LC-MS) 具有相当大的吸引力。但是 LC-MS 联用要比 GC-MS 联用困难得多，这是由 LC 的

两个工作特性所决定的。首先,液相色谱流动相的量比质谱所能忍受的量大多得多。液相色谱的流动相是液体,典型流量是  $1\text{ml} \cdot \text{min}^{-1}$ ,气化后相当于气体流速 ( $150 \sim 1200$ )  $\text{ml} \cdot \text{min}^{-1}$  (因不同化合物而异)。而现代质谱仪器所能忍受的气体流量只有 ( $1 \sim 20$ )  $\text{ml} \cdot \text{min}^{-1}$ ; 第二,液相色谱的研究对象是难挥发和热不稳定化合物,这些化合物用常规离子化方法是很难电离的。因此,关于 LC-MS 的研究主要致力于解决上述两个问题。最近十几年里已有多种 LC-MS 接口和适合于 LC-MS 的新的离子化方法产生,其中一些已商品化,表 2-11 作了一个简单的归纳。仅选几个比较成功的方法作较详细的介绍。

表 2-11 各种类型的 LC-MS 接口

接口类型		工作原理	适用的离子化方法	主要特点
传 送	移动丝	LC 流出物滴在不锈钢丝(带)或聚酰亚胺丝(带)上,由加热器和真空泵除去溶剂,样品经瞬间气化进入离子源或直接由带送入离子源	EI, CI	LC 条件可独立控制,但样品利用率仅 1%,不挥发物不能分析
	移动带		EI, CI, FAB	LC 条件可独立控制,样品利用率高于移动丝,可达 (30~40)%
喷 射 式	单级喷嘴	与 GC-MS 的喷射分子分离器相似, LC 流出物经加热气化后通过接口	CI	只能接受低流量 ( $\mu\text{l} \cdot \text{min}^{-1}$ 级) 低挥发性样品不适用
	真空雾化	He 气流使 LC 流出物雾化,加热器和真空泵抽除溶剂	CI	样品利用率高,可以分析极性和大分子样品
	激光喷射式	用 $\text{CO}_2$ 激光束汽化 LC 流出物,真空泵抽除溶剂	EI, CI	效率高,但仪器复杂,变化因素多
	热喷雾	含电解质的 LC 流出物经过气化室形成高速运动的带电雾滴,在真空中溶剂汽化,溶质电离	TSP(热喷雾)	适合于反相 LC-MS 联用,极性大、难挥发样品有高的灵敏度
	电喷雾	在高电场中 LC 流出物雾化其中的样品分子同时发生电离;雾滴进一步蒸发后,脱除溶剂,样品离子导入质量分析器	ESI	能生成多电荷离子,特别适合大分子量的蛋白质、多肽、多糖的分析
	粒子束	使 LC 流出物形成气溶胶,溶剂脱除后,样品以小颗粒状态经动量分离器富集进入质谱离子源	EI, CI	样品应有一定挥发性 能获得与常规 EI 相似的质谱图,便于结构测定
薄膜式	硅橡胶薄膜分离器	LC 流出物经瞬间气化后,样品透过薄膜进入离子源,溶剂被膜分离并由泵抽走	EI	结构简单、廉价,可接受大的流量,但使用温度小于 $250^\circ\text{C}$ , 不适合于极性样品
直 接 导 入	大气压源	LC 流出物加热气化,在大气压下用 $^{63}\text{Ni}$ 放射源或电晕放电电源电离	API(大气压源)	灵敏度高,可接受较大流量,但不适合极性和不挥发样品
	简单直接导入	如果流量为 $\mu\text{l} \cdot \text{min}^{-1}$ 级,用毛细管直接与 MS 相连;如果流量是 $\text{ml} \cdot \text{min}^{-1}$ 级则需分流	CI	适合于微型 LC; 常规 LC 因分流效率太低
	连续流动 FAB	通过一根装在 FAB 探头内的毛细管 LC 流出物被直接引到处于离子源中的 FAB 靶上	FAB	可接受 ( $5 \sim 10$ ) $\mu\text{l} \cdot \text{min}^{-1}$ 流速; 适合分析热不稳定和难挥发样品

### 1. 传动带式接口 (Moving Belt LC-MS Interface)

传动带式 LC-MS 接口是早期一种较为成功的 LC-MS 接口,其结构如图 2-75 所示。整个装置处于质谱仪离子源高真空和液相色谱柱尾端的大气压之间,靠两个机械泵降低气压。传动带由约  $0.3\text{cm}$  宽、 $0.05\text{mm}$  厚的不锈钢带或聚酰亚胺带制成,在驱动轮的带动下,以 ( $2 \sim 4$ )  $\text{cm} \cdot \text{min}^{-1}$  的速度移动。液相色谱流出物滴在带上,先经过一个红外灯加热,使载液气化,然后顺序经过两个真空室,将气化后的载液抽走,在第一个真空室气压下降至 ( $600 \sim 6000$ ) Pa, 经过第二个真空室后气压下降到 ( $10 \sim 60$ ) Pa。载液蒸发后,样品组分沉积在带上,随带继续移到电离盒入口,在加热器作用下闪烁蒸发,样品蒸气进入电离盒。由于闪烁蒸发在瞬间进行,一般样品来不及分解或不至于完全分解。经过电离盒入口后传动带继续移动,经过一个清洁加热器,并再次通过两个真空室,清除残留在带上的剩余样品。

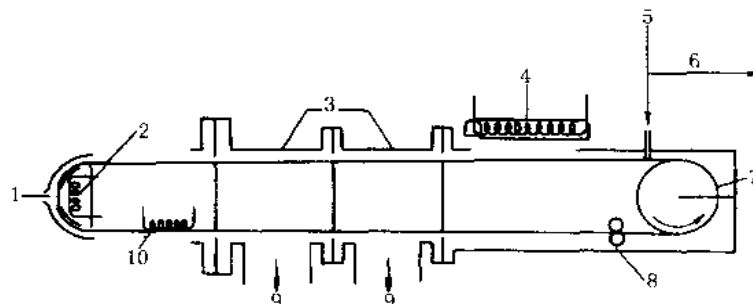


图 2-75 传动带式 LC-MS 接口

- 1—离子源；2—闪蒸器；3—真空锁；4—红外加热器；5—LC 流出物；6—分流；  
7—弹簧固定皮带轮；8—驱动轮；9—泵；10—清洗加热器

传动带接口可以接受的流量为  $1\text{ml} \cdot \text{min}^{-1}$ ，它能除去全部载液，并将样品组分依次送入离子源，用闪烁蒸发的方法汽化样品能得到样品的电子轰击质谱或化学电离质谱，收率与闪烁蒸发效率有关，一般可达 (25~40)%。一种经过改进的传动带式接口还可以使用快原子轰击或离子轰击的电离方法。它的特点是传动带一直通到离子源中 (见图 2-76)。快速的氦气原子或其他惰性气体原子能直接打在带的顶端。如果使用甘油等基质物 (matrix)，可以获得组分的准分子离子峰。使用基质物的方法可在 LC 的载液中加入少量甘油，待载液蒸发掉后，甘油留在带上。当带通过离子化区域后，有一清扫装置将残留的甘油除去。

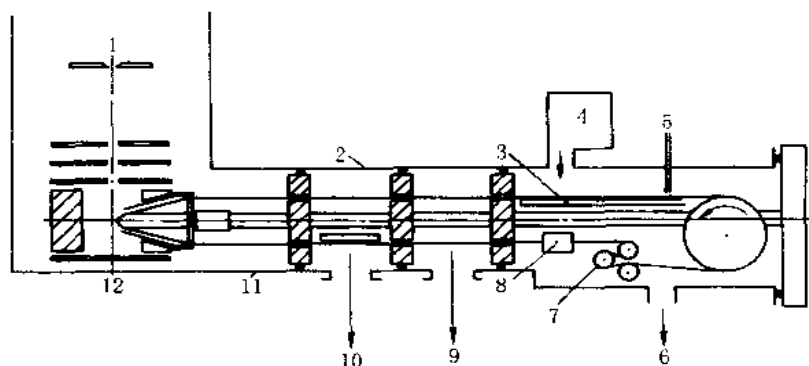


图 2-76 可用于快原子轰击电离的传动带接口

- 1—质谱仪；2—带；3—溶剂气化；4—风扇；5—来自 LC；6—排气管；7—驱动轮；8—清洗器；  
9—去泵 ( $12\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ )；10—去泵 ( $4\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ )；11—清洗加热器；12—样品加热器

传动带接口的优点是可以任意选择离子化方式，而不受液相色谱操作条件的限制。但结构复杂、需要带驱动机构、附加的真空系统、加热部件等是其主要缺点。另一缺点是难挥发样品的本底清除比较困难。

## 2. 热喷雾接口 (Thermospray Interface)

热喷雾是 80 年代提出的一种新的软电离方法。由于能够直接接受  $(1\sim 2)\text{ml} \cdot \text{min}^{-1}$  的极性溶剂，热喷雾电离特别适合于用作反相液相色谱与质谱联用的接口。

热喷雾接口的结构如图 2-77 所示。一根一端焊有铜块的不锈钢毛细管 (内径为  $0.15\text{mm}$ ，外径为  $1.5\text{mm}$ ) 构成一个蒸发器，铜块外包有电加热器，并有热电偶和温度控制装置，可以精确地控制蒸发器的工作温度。来自液相色谱的载液和样品组分沿不锈钢毛细管进入蒸发器的加热区域。小心地控制蒸发器的温度，使载液正好在毛细管的最后 (2~3) cm 处开始汽化，

然后以细小的液滴——即雾状形式从蒸汽喷嘴高速喷出，通过一个厚壁铜管进入离子源。离子源直接连接一个大抽速的机械泵。当雾滴离开喷嘴高速进入离子源的低压空间时，载液迅速蒸发。由于液相色谱的载液中含有缓冲溶液，所以液滴上或带正电荷或带有负电荷。如果液滴中含有被测样品的分子，当载液蒸发完后，电荷留在样品分子上使其变成离子。排斥极和离子透镜将生成的离子引出离子源，送入质量分析器。汽化的载液被机械泵抽走。

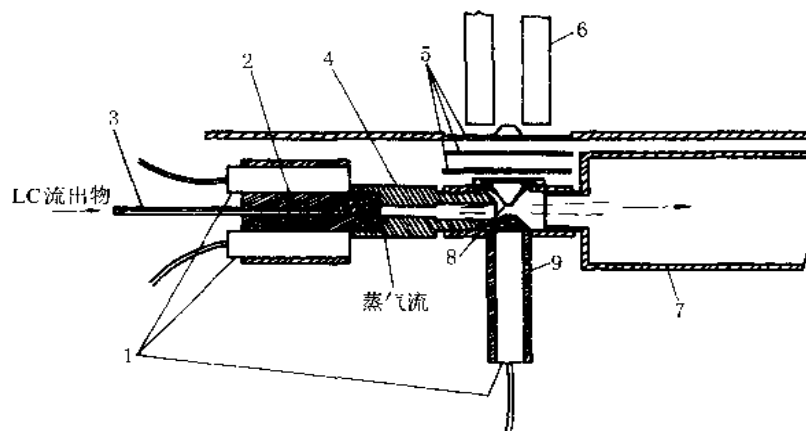


图 2-77 热喷雾接口

1—100W 盒式加热器；2—焊在不锈钢毛细管上的铜块；3—1.5mm 外径，0.15mm 内径的不锈钢毛细管；  
4—厚壁铜管；5—离子透镜；6—四级滤质器；7—机械泵抽空；8—离子出口；9—离子源加热器

从蒸发器的喷嘴中喷出的雾滴中通常含有缓冲液的离子，这些离子能与载液分子生成各种加和离子，它们构成了质谱的本底谱。在水-甲醇-乙酸铵体系中生成以下基本离子：

离子	m/z	离子	m/z
$\text{NH}_4^+$	18	$\text{CH}_3\text{OH} \cdot \text{H}_2\text{O} \cdot \text{NH}_4^+$	68
$\text{NH}_3 \cdot \text{NH}_4^+$	35	$\text{CH}_3\text{COONH}_4 \cdot \text{H}^+$	78
$\text{H}_2\text{O} \cdot \text{NH}_4^+$	36	$(\text{CH}_3\text{OH})_2 \cdot \text{NH}_4^+$	82
$\text{CH}_3\text{OH} \cdot \text{NH}_4^+$	50		

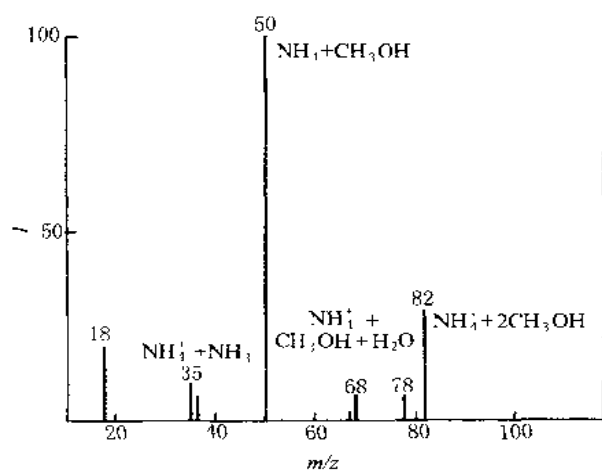


图 2-78 水-甲醇-乙酸铵体系热喷雾电离的本底质谱

其质谱见图 2-78。

当有样品存在时，同样会形成样品分子的加和离子，常见的有  $\text{M} \cdot \text{H}^+$ 、 $\text{M} \cdot \text{NH}_4^+$ ，有时也有  $\text{M} \cdot \text{Na}^+$  存在。 $\text{Na}^+$  可能来自于玻璃容器或一些无法控制的条件。在热喷雾质谱中，碎片离子是很少见的，一般为多羟基化合物失水生成的碎片离子。

热喷雾电离有两个必要条件。一是溶剂中必须含有电解质，如乙酸铵；二是载液必须有一定的极性。水-甲醇体系可以用到 100% 的甲醇，但随着甲醇浓度增加，灵敏度下降。水-乙腈体系只能用到 75% 的乙腈溶液，乙腈浓度再高，乙酸铵将使乙腈分层。

关于热喷雾电离的机理研究已有一些报道。人们注意到一些实验事实，例如：

① 热喷雾电离产生的离子几乎与溶液中存在的离子相同。如乙酸铵溶液中产生  $\text{NH}_4^+$ 、 $\text{CH}_3\text{COO}^-$  以及这些离子与水生成的簇离子。

② 热喷雾电离产生的正负离子强度大致相等。

③ 产生的离子流强弱与溶液中离子浓度有关，在较高的离子浓度条件下，离子流强度与离子浓度平方根成正比。

④ 离子流强度依赖于液体流速和汽化温度。在这些实验事实的基础上，提出了如下机理：

- 一定流速的载液进入蒸发器产生超音速蒸汽流，蒸汽流中携带超热雾滴；
  - 因为溶剂中含有电解质，电中性的液体中实际由分离的正、负电荷存在，所以雾滴按统计规律带正电荷或负电荷；
  - 雾滴中的电荷造成高的局部电场，有助于生成溶剂化的分子离子（簇离子）；
  - 簇离子很快与离子源中溶剂蒸气平衡，因此溶剂化程度与离子源温度及气化过程有关。
- 以上机理可以用示意图（图 2-79）形象地说明。

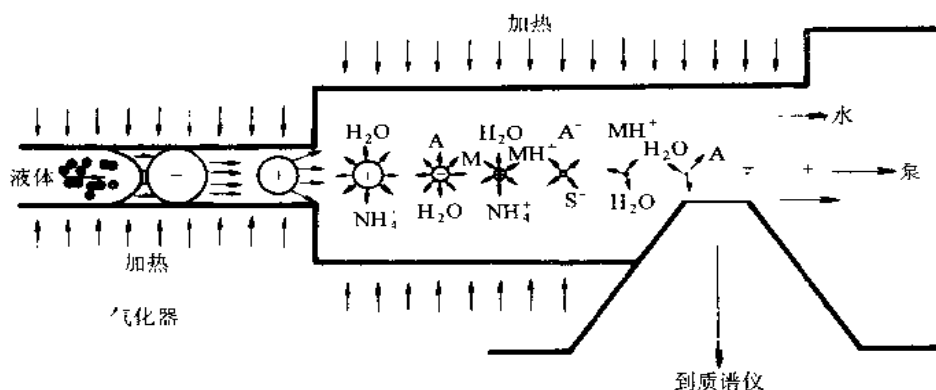


图 2-79 热喷雾电离过程示意图

### 3. 电喷雾和离子喷雾 (Electrospray and Ionspray)

与热喷雾不同，电喷雾是利用高静电场使毛细管中流出物雾化和离子化。早在 1917 年，J. Zeleny 就发现当高电压加在毛细管溶剂出口处，会使溶剂流裂分为许多丝状细流，进而形成直径约  $1\mu\text{m}$  的细滴。自 1968 年之后，M. Dole 和其他一些质谱工作者研究了电喷雾作为软电离技术的可能性，并取得了有益的进展。其中，由 C. M. Whitehouse 等人设计的电喷雾离子源后来发展成为 LC-MS 接口。

图 2-80 是一个电喷雾接口的示意图。不锈钢毛细管 (1) 与圆筒形电极 (2) 之间加几千伏的电位差，构成静电雾化室。当 LC 流出物从毛细管流出时，在强电场作用下雾化，雾滴带所加电场相同的电荷。大气流的热氮气 (3) 从反方向通入，使雾滴进一步分散，并使其中的溶剂迅速蒸发。溶质离子在玻璃毛细管 (4) 附近生成后，以超音速穿过玻璃毛细管 (4) 进入第一真空室 (5)，大抽速的泵能使气压下降到  $0.05\text{Pa}$ ，离子再经过分离器 (6) 进入四极滤质器。在这一装置中没有通常的离子源。电喷雾过程除去了 LC 流动相，既是一个 LC-MS 的接口，又同时能使样品电离，是一种软电离技术。

电喷雾接口一般允许 LC 的流速为  $10\mu\text{m} \cdot \text{min}^{-1}$ 。离子喷雾接口是在电喷雾接口的基础上稍作改进，增加了气动喷雾装置，使更大的 LC 流量能被接纳，已有报道离子喷雾接口可适用于  $200\mu\text{l} \cdot \text{min}^{-1}$  的 LC 流出物。图 2-81 是一个离子喷雾接口的示意图。

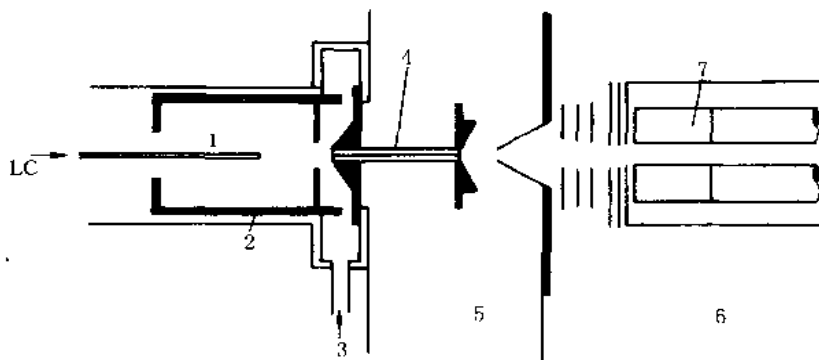


图 2-80 电喷雾接口示意图

1—不锈钢毛细管；2—圆筒电极；3—氮气；4—玻璃毛细管；  
5—第一真空室；6—分离器；7—四极滤质器

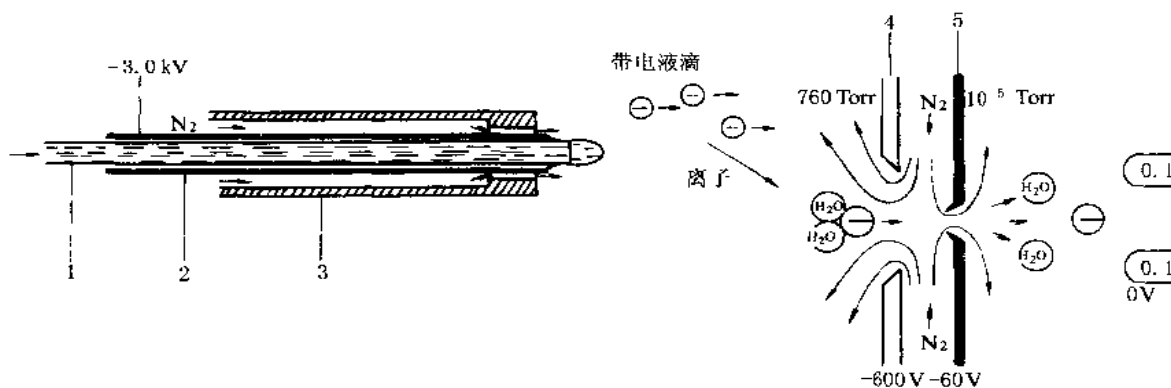


图 2-81 离子喷雾接口示意图①

(1 Torr = 133.322 Pa)

1—50 μm 内径的熔融硅毛细管；2—200 μm 内径的不锈钢毛细管；  
3—0.8 mm 内径的 PTFE 管（管前端收缩）；4—离子聚焦透镜和中心电极；  
5—带有 100 μm 内径锥形进样孔的平板

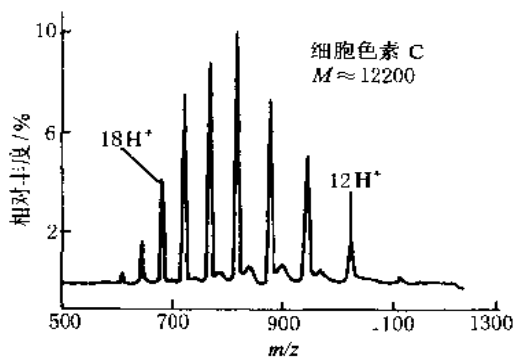


图 2-82 细胞色素的电喷雾质谱图

电喷雾接口的一个最主要优点是它能形成多电荷离子。一个分子量为 20000 的化合物，其单电荷离子用一般的质谱仪器无法测定，但如果生成带 20 个电荷的多电荷离子，其质荷比仅为 1000，四级质谱计就可以对它进行分析，这就使得大分子量的化合物的质谱分析成为可能。J. B. Fenn 和他的合作者在 1988 年用肽溶液做电喷雾时，首次发现在溶液中的肽分子的所有氨基均能质子化。如赖氨酸、精氨酸侧链上的氨基以及肽链端基上的氨基都能质子化，这使得大分子量的肽、蛋白质等可能形成多电荷离子。

① 此图引自：Niessen W M A, Van der Greef J. Liquid Chromatography-Mass Spectrometry. New York; Marcel Dekker, 1992 240。

图 2-82 就是个例子。根据峰的位置和相邻峰之间的间隔可以计算出分子的精确质量。因此，电喷雾在生命物质的结构分析中特别有意义。另外电喷雾在小分子分析中常能生成单电荷准分子离子，在用质谱-质谱分析混合物时，各组分的准分子离子经过碰撞（CID）进入第二质谱，所给信息对结构鉴定也具有重要意义。

#### 4. 粒子束接口（Particle-Beam Interface, PB）

粒子束接口是又一种喷雾式 LC-MS 接口。以雾化方式除去溶剂显然优于传送带等其他方式，因为雾滴的总挥发面积非常之大，可以实现快速、高效除去溶剂的目的，也就是说可以接纳来自 LC 的较大的流量。

粒子束接口由三个主要部分组成：气溶胶发生器、脱溶剂室和动量分离器（见图 2-83）。

LC 流出物在气溶胶发生器中雾化（形成气溶胶雾滴），然后在加热的脱溶剂室中，溶剂挥发成蒸气，较难挥发的样品形成小颗粒，经喷嘴进入动量分离器。动量分离器与质谱离子源相连，并有泵抽真空。在轴向压力梯度下，样品粒子束通过分离器进入离子源，溶剂蒸气被泵抽走。这一过程与 GC-MS 接口——喷射式分子分离器的工作过程相似。在粒子束接口中，一般采用两级动量分离器（见图 2-84），压力可从脱溶剂室的 25kPa 下降到动量分离器的 30Pa，到质谱离子源时压力下降到  $2 \times 10^{-3}$  Pa。样品转移率为（5~20）%，因溶剂不同而异。样品粒子进入离子源后，撞击在加热的离子源壁上，快速气化或撞碎成分子，然后用 EI 或 CI 电离。

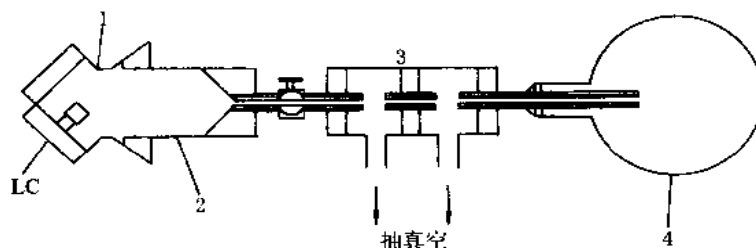


图 2-83 粒子束接口的示意图

1—气溶胶发生器；2—脱溶剂室；3—动量分离器；4—质谱离子源

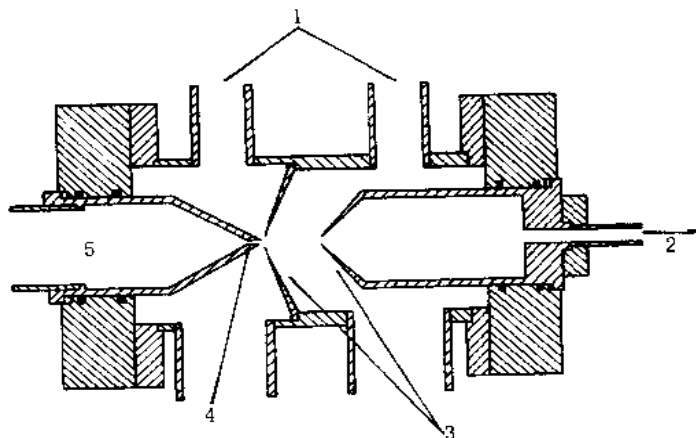


图 2-84 动量分离器

1—泵口；2—去离子源；3—分离器；4—喷嘴；5—气化室

根据气溶胶发生和脱溶剂方法的不同，商品仪器中又把这类接口分为粒子束（PB）、热束

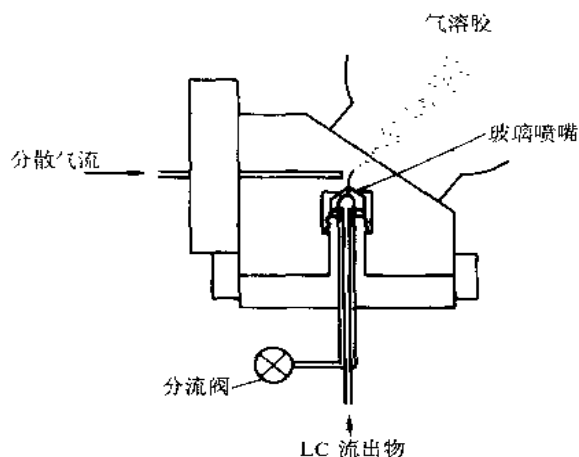


图 2-85 气动雾化器

离子。由于 FAB 的上述特点，质谱学家特别注意它在 LC-MS 联用中的作用。早期 LC-MS 传送带接口曾与 FAB 联用，但因灵敏度的限制和传送带接口本身的局限，一直没有突破性的进展。

1986 年 R. M. Caprioli 等提出连续流动快原子轰击接口。一根开口毛细管柱直接装在 FAB 探头中，LC 流出物可通过毛细管直接流到置于质谱离子源中的 FAB 靶上。为了满足 FAB 电离的需要，LC 流动相中一般应含 (10~20)% 的甘油。当流动相携带样品流到 FAB 靶上时，易挥发的溶剂快速气化，被离子源的真空泵抽走，其中难挥发的甘油作为基质和样品一起在靶上形成薄而稳定的液膜，在 Xe 快原子的轰击下产生溅射电离（见图 2-86）。多余的甘油等难挥发物质从靶上流下来，被靶下方的滤垫吸收，该滤垫需定期更换。控制操作条件的最佳化，用 CF-FAB 接口的 LC-MS 联用分析在灵敏度、基线稳定性、峰高重复性和易于操作等方面都达到比较满意的程度。研究认为在 CF-FAB 操作中，最重要的问题是在靶上形成一层薄的、稳定的液膜，因为这是 FAB 电离的必要条件。有许多因素影响液膜的状态，如流动相的组成、流速；靶的材料、形状、位置及化学处理；毛细管出口与靶的相对位置；离子源的温度和泵的抽速等等。

CF-FAB 接口实际上是一种直接导入式的 LC-MS 接口，它可以接纳来自 LC 的 (5~10)  $\mu\text{l} \cdot \text{min}^{-1}$  的流速。因此，与普通的 HPLC 联用时，需有一个分流装置并采用较高的分流比，把 LC 原来  $\text{ml} \cdot \text{min}^{-1}$  级的流速分流为 (5~10)  $\mu\text{l} \cdot \text{min}^{-1}$  的流速。

### (三) 质谱-质谱联用技术 (MS-MS)

质谱-质谱联用是近期发展起来的一种直接分析复杂混合物的新技术，它比色谱-质谱技术适应分析更为广泛的样品，且样品可以不经任何预处理而直接分析。

#### 1. MS-MS 联用技术用于混合物分析的原理

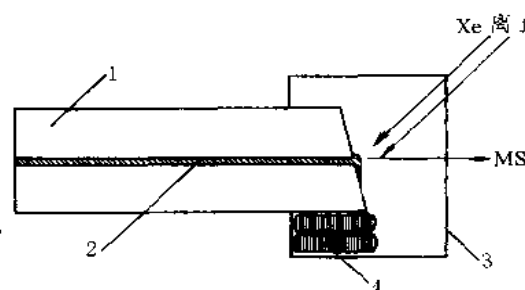
MS-MS 联用仪器现在已有许多种配置方法，但一般都含有两个质量分析器。第一个质量分析器的作用与色谱-质谱联用中的色谱仪所起的作用相似，是将欲测组分与其他组分分离。根据样品的特点，选择合适的离子化方式。通常采用软电离方式，使混合物中的各个组分生

(Thermobeam) 和 万能接口 (Universal Interface)。通常的粒子束接口采用气动雾化器（见图 2-85），即用一股垂直气流撞击 LC 流出物，使之雾化。热束接口是利用热喷雾方式产生气溶胶，由于雾化时提供了大量热能，脱溶剂和雾化过程没有明显的界限。

粒子束接口的优点是，对于大部分化合物来说，可以获得与 EI 相似的质谱图，这样就能利用质谱标准谱库进行检索，便于定性分析。

#### 5. 连续流动快原子轰击接口 (Continuous Flow FAB, CF-FAB)

快原子轰击是 80 年代发展起来的一种软电离技术，适合于热不稳定和难气化样品的电

图 2-86 连续流动快原子轰击接口示意图  
1—FAB 靶；2—毛细管；3—离子室；4—滤垫



成分子离子峰或准分子离子峰。第一个质量分析器 (MS-I) 设定在某一状态下, 使欲测组分的分子离子或准分子离子能够通过而其他离子不能通过。第二个质量分析器 (MS-II) 像正常的质谱仪那样扫描, 便可以获得通过 MS-I 的组分的质谱图。这样得到的质谱图实际上是在 MS-I 和 MS-II 之间的无场区的亚稳离子谱, 离子信号很弱。所以完善的 MS-MS 联用采纳了碰撞诱导活化技术 (CID), 即在 MS-I 和 MS-II 之间的无场区设置碰撞室, 引入中性气体, 如 He、N<sub>2</sub>、空气等。当气压在 (10<sup>-4</sup>~10<sup>-2</sup>) Pa 时, 碰撞使离子的部分动能转化为内能, 从而增加了裂解的几率。碰撞诱导裂解比亚稳裂解具有高的灵敏度, 所得谱图的重现性也较好, 因此可以用作定性分析的依据。近年来, MS-MS 联用在天然产物分析方面的应用已有许多报道。

下面用图 2-87 简要说明 MS-MS 分析的一般程序。

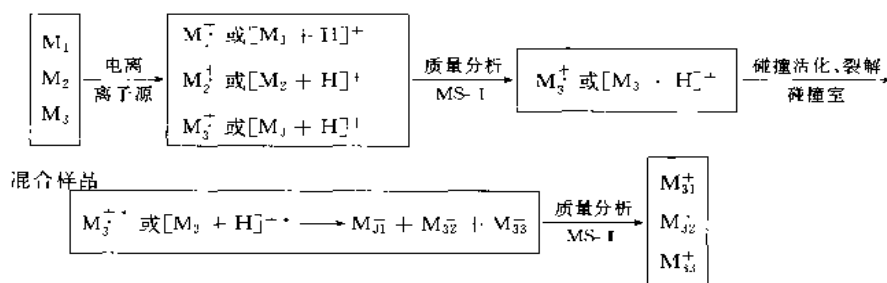


图 2-87 MS-MS 分析的一般程序

## 2. MS-MS 联用仪器的类型

MS-MS 联用仪器的雏型是倒置型的磁偏转质谱仪 (图 2-88 (a))。在这种仪器中磁场用于选择特定的母离子, 电场作动能分析, 检测其亚稳离子谱。这种技术起初称作质量分析离子动能谱 (MIKES), 实际上就是一种最简单的 MS-MS 联用技术。现在的 MS-MS 仪器按其结构可分成三大类。

(1) 磁质谱仪器 这类仪器是一个或两个磁场 (B) 和电场 (E) 以不同排列方式配置而成的。在各个无场区都有碰撞室。由一个 B 和一个 E 组成的 MS-MS 仪器就是上述倒置型磁质谱仪 (BE 型); 两个 B 和一个 E 构成的 MS-MS 仪器是 BEB 型; 一个 B 和两个 E 可构成 EBE 型; 更为复杂的有 EBEB 型 (见图 2-88 (b) - (d))。磁质谱仪的优点, 高分辨率 and 大的质量范围在这类仪器中得到体现。但是多个磁场和电场的组合使仪器体积庞大, 价格昂贵。

(2) 四极质谱仪 Finnigan MAT 公司生产的三级四极质谱计 (QQQ) 是单纯四极杆式 MS-MS 仪器 (见图 2-88 (e))。其中, 第一个四极杆 (Q<sub>1</sub>) 用作母离子的质量分析器; 第二个四极杆 (Q<sub>2</sub>) 只加射频电场, 是用作碰撞室, 而无质量分离作用; 第三个四极杆 (Q<sub>3</sub>) 用作子离子的质量分析器。与磁质谱仪相比, 这类 MS-MS 仪器结构简单、紧凑, 价格较低, 但是分辨低、质量范围小。

(3) 混合型仪器 混合型仪器是将双聚焦磁性质谱和四极质谱、离子阱 (Trap) 或飞行时间质谱 (TOF) 结合起来的形式。例如 BEQQ [见图 2-88 (f)], EBQQ, EBTrap, EBTOF 和 QQTof。其中 BE 或 EB (即双聚焦磁质谱) 用于选择母离子, 第一个四极杆 (Q<sub>1</sub>) 用作碰撞室, 而第二个四极杆 (Q<sub>2</sub>) 作为质量分析器。混合型仪器集上述两类仪器之长, BE 或 EB 对母离子的分离选择能达到高分辨, 并有大的质量范围, 而 Q<sub>2</sub>、Trap 和 TOF 则能实现快速质谱扫描。

目前商品化的 MS-MS 仪器基本上都是对已有型号质谱仪加以改造而得的。例如, 英国

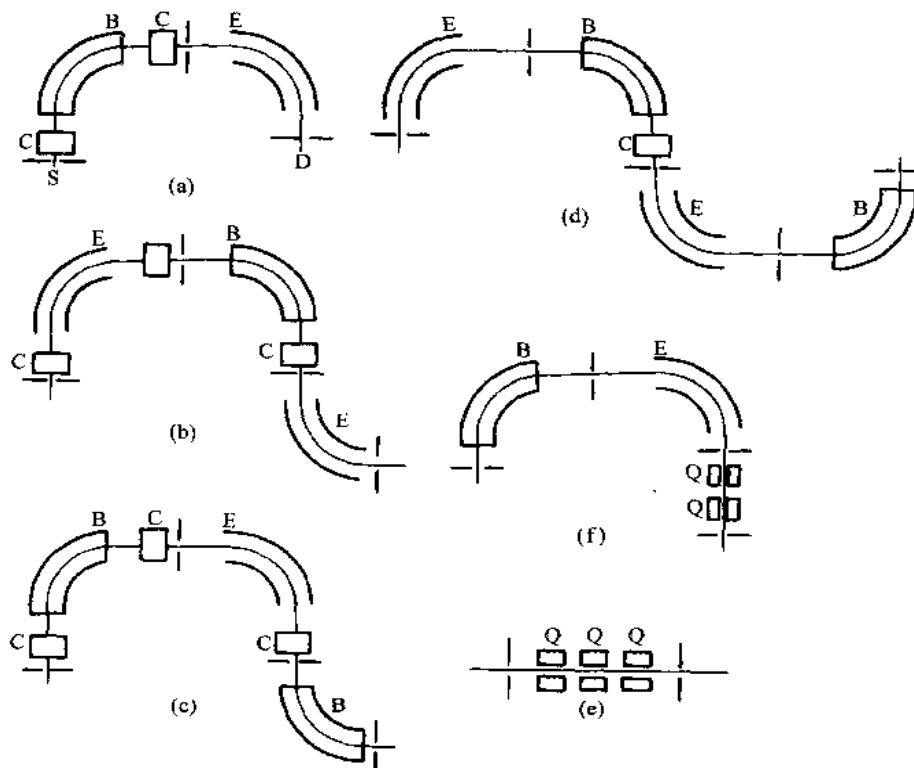


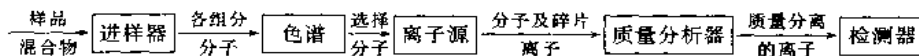
图 2-88 各种构型的 MS-MS 仪器

VG 公司生产的 BEB 型 MS-MS 仪器 ZAB3F, 就是在 ZAB2F 后面加一个磁场。Finnigan MAT 公司生产的两种型号的 BEQQ 仪器——8200QQ 和 8500QQ 就是在 8200 和 8500 高分辨 BE 仪器后加两个四极杆。此外新近开发的仪器还有 Finnigan 的 MAT-95ST, 日本电子的 JMS-700T 以及 Micramass 的 Autospec-TOF 等, 都设计为第一质谱为高分辨质谱。

### 3. 质谱-质谱与色谱-质谱联用技术的比较

质谱-质谱和色谱-质谱联用均以分析复杂混合物为目的, 就其分析过程来说也有许多相似之处, 图 2-89 列出了两者的分析过程。由图可以看出 MS-MS 中的 MS-I 相当于色谱-质谱中的色谱仪(或色谱柱), 而碰撞室相当于色谱-质谱中的离子源。所不同的是色谱对组分分子进行分离(选择), 而 MS-I 对离子, 通常是组分的分子离子进行选择; 色谱是按化合物的物理化学性质进行分离, 而质谱是按化合物的质量进行分离。

#### 色谱-质谱



#### 质谱-质谱

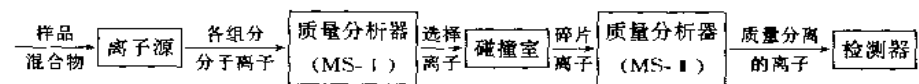


图 2-89 质谱-质谱和色谱-质谱分析过程比较

与色谱-质谱联用相比, MS-MS 联用具有一些独特的优点, 首先, 整个分析都在质谱仪中进行, 不需要接口, 因此也就不存在由于接口而造成的样品收率等问题。第二, MS-MS 联用是靠质量分析器选择离子实现复杂混合物的分离, 因此完全没有色谱联用分析过程中由于色谱柱流失造成的高本底或载气、载液的干扰。第三, 被测样品不需要作复杂的前处理。例如, 古柯叶和茎中古柯碱的测定, 只要从古柯叶子上取  $1\text{mm}^2$  的一小块直接送入离子源即可。而常规的办法先要将相当量的叶子压榨, 用适当的溶剂浸取, 再用萃取、精馏等化学物理方法处理后, 才能用色谱联用分析。可见 MS-MS 大大简化了研究工作的步骤, 提高了工作效率。另外, 色谱分离条件的选择是色谱联用分析的关键和难点, 相比之下用质量分析器来选择离子要简单得多; 色谱分析法有死时间, 分析周期长; 而质谱分离时间仅为毫秒级, 所以分析速度更快。

除了仪器昂贵之外, 目前 MS-MS 联用技术在应用过程中遇到的一个困难是缺少标准谱图。因为用 MS-MS 仪器测得的是碰撞诱导活化的谱图, 与常规的质谱图不尽相同。因此, 在定性分析中还要辅之以标样。

## 第六节 质谱仪器的真空系统

### 一、质谱仪器的真空要求

质谱仪器必须在良好的真空条件下才能正常操作, 一般要求质量分析器的真空优于  $10^{-4}$  Pa。

质谱仪器要求高真空的理由是:

- 离子的平均自由程必须大于离子源到收集器的飞行路程。
- 氧气分压过高影响电子轰击离子源中灯丝的寿命。
- 离子源内高的气压可能引起高达数千伏的加速电压放电。
- 高的气压产生的高本底会干扰质谱图及分析结果。
- 电离盒内的高气压导致离子-分子反应, 改变质谱图样。
- 电离盒内的高气压会干扰轰击电子束的正常调节。

以上诸因素中, 第四、五两项与气体种类有关, 而其余各项则取决于气体总压。为了保证质谱仪器正常而有效工作, 其中任何一项不满足都将使整个系统失败。

#### 1. 对离子平均自由程的要求

对离子平均自由程的要求是质谱仪器对气压限制的最重要因素。所谓“离子平均自由程”是指离子在与别的质点(原子或分子)互相作用之前所飞越的平均距离。“互相作用”不仅是指质点之间的相撞, 而且包括两个质点接近到它们能发生作用的距离时所产生的偏转。

质点的平均自由程依赖于碰撞直径和质点浓度。按分子动力学理论, 中性纯气体分子的自由程由下式给出:

$$L = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma^2} \quad (2-67)$$

式中,  $n$  为每立方厘米中的分子数目, 与气体压强有关;  $\sigma$  为碰撞直径。由于多数气体的碰撞直径相差不大, 可以用近似的经验公式进行计算:

$$L = \frac{4 \times 10^{-5}}{p} \text{cm} \quad (2-68)$$

式中,  $p$  为压强, 以 Pa 为单位。

但是, 对于质谱仪器中的离子来说, 与中性质点至少有三个区别。第一, 在中性分子系统中, 平均自由程通常由粘度、小角散射或扩散来进行测量的, 这种测量能很好地估计出分子间的距离和它们之间的强相互作用, 但对微小的偏转则不敏感。而正是这种微小的偏转使离子束在质谱仪器, 尤其是在磁式质谱仪器中偏离轨道, 使仪器的分辨率和灵敏度显著降低; 第二, 由于离子-分子反应, 碰撞直径大大增加, 使离子平均自由程变小; 第三, 离子在进入质量分析器之前经过加速场, 其速度比热速度约大两个数量级。由于离子与中性分子碰撞几率与它在飞行路程中所用的时间成正比, 因此, 高速离子有大得多的平均自由程。但是由于缺少准确的参数, 无法实际计算离子的平均自由程, 一般只采用经验法。考虑到离子碰撞直径的增加和加速后离子高的运动速度对其平均自由程的影响可以抵销, 常常用经验公式 (2-62) 对质谱仪器中的离子平均程作初步估算。假设离子从离子源出口狭缝到收集器的飞行路程为 100cm, 则可以计算出允许的气压应低于  $6 \times 10^{-3}$  Pa, 加上估计误差, 认为在气压  $3 \times 10^{-3}$  Pa 以下能安全工作。对于四极杆质谱仪, 飞行路程短得多, 因此在较高的气压下就能正常工作。

## 2. 氧对灯丝寿命的影响

离子源中残留过多的氧气, 对处于高温工作状态下的灯丝极为有害。在正常质谱操作条件下, 灯丝寿命至少为 (5~10) 个月, 此时氧的分压为  $(1 \sim 3) \times 10^{-6}$  Pa, 并不构成对灯丝的大的危害, 影响灯丝寿命的因素主要是操作方法和被分析的化合物类型。当氧的分压达到  $10^{-4}$  Pa 时, 明显影响灯丝寿命, 但是高压的氮、氩以及惰性气体对灯丝没有危害。

## 3. 高压放电的危险

大部分质谱仪器需要高的加速电压, 离子源对地电压通常为数千伏。当离子源中气压大于 10Pa 时, 由于气体传导, 容易引起高压放电, 造成电离盒或高压供电系统的损坏。

对于四极滤质器等适合于分离低能离子的仪器来说, 高压放电的危险小得多。

## 4. 本底质谱的干扰

本底的主要来源是记忆效应(即先前样品的残余)、高真空中残留气体和真空系统的漏气、扩散泵油(或汞)的蒸气、色质联用时的柱流失以及离子源各部分表面污染物加热时汽化, 因此高速真空系统维持离子源中尽可能低的气压是减少本底质谱干扰的有效措施。当然, 必要时仍需辅之以清洗离子源和烘烤整个系统等措施。

## 5. 离子源内高压引起的离子-分子反应

当离子源内气压接近 10Pa 时, 会发生离子-分子反应, 造成样品质谱图样的显著变化, 即使在离子源中气压较低时, 由于样品蒸发过快等原因, 局部区域的、暂时的高气压也会产生上述效应。但是, 除色质联用外一般情况下离子源内不会达到 10Pa 的高气压。化学电离则是有意利用离子-分子反应。

## 6. 对电子束调节的干扰

在质谱定量分析中, 需要控制电子束强度以获得定量分析的精密度。当电离电流(即电子束强度)调节到最佳值后, 从电子收集极上测得的电流波动用作反馈信号来调节灯丝电压。当电离盒内气压超过 1Pa 时, 开始阻碍电子束的通过, 若气压高达 10Pa, 电子束基本截止。此时, 调整回路使灯丝电压不断提高, 直到烧断灯丝为止。

化学电离时, 电离盒内必须维持 10Pa 或更高的气压, 一般不使用灯丝电流调节器, 以避免上述危险。

从上述讨论可以看到,不同类型的质谱仪器对真空的要求不同,既与仪器的类型有关,又与仪器的大小有关;质谱仪器的不同部分对真空的极限要求也不同,质量分析器是所有部分中对真空要求最高的,离子源对氧的分压要求比较苛刻,但对总压的要求则比质量分析器低几个数量级。所以真空系统的配置要视实际情况而定。

## 二、真空的获得

### (一) 低真空泵

必须使用高真空泵才能达到和维持质谱仪器正常工作所需要的  $10^{-4}$ Pa 以上的真空水平,但低真空泵也是真空系统中必不可少的一部分。

质谱仪器中的低真空泵有两个用途。一是作为高真空泵——扩散泵或分子泵的前级泵,提供高真空泵正常工作所需要的前级真空;二是预抽真空,为直接进样系统、间接进样系统以及离子源或整个仪器暴露大气后预抽真空,色质联用时也用于分子分离器抽低真空。

由于机械泵的运用范围是从大气压开始,所以适合于作质谱仪器的低真空泵。有各种各样的机械泵可供选择,只要抽速和极限真空符合要求即可。一般要求抽速在  $(120\sim360)$  L·min<sup>-1</sup>, 极限真空 0.1Pa。最常用的机械泵是旋转式油封泵。

旋转式机械泵是利用工作室容积周期性增大或减少的原理来抽气的。泵内有一个圆柱形空腔,空腔带有进气口和排气阀。空腔里偏心安装一个带旋片的圆柱形转子,旋片中间装有弹簧,使转子旋转时旋片顶端始终紧贴着空腔内壁,把空腔内的空间分成两部分,一部分连着排气阀,另一部分与进气口相通。图 2-90 是旋转泵工作过程中旋片的典型位置,(a)正在吸气,同时把上一周期吸入的气体压缩;(b)吸气结束,将要压缩;(c)正在压缩,同时又进行一次新的吸气;(d)排气。上述过程周而复始,不断把被抽容器中的气体排除。由于机械加工水平的限制,运动部件的配合不可能完全密封,气体总会从高压端泄漏到低压端,因此常用蒸汽压低、有一定粘度的油来密封,以达到较高的极限真空。

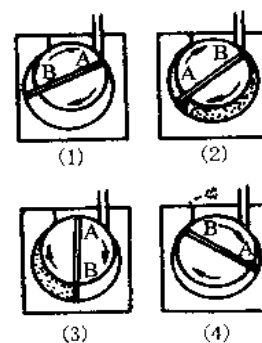


图 2-90 旋转泵工作过程中旋片的典型位置

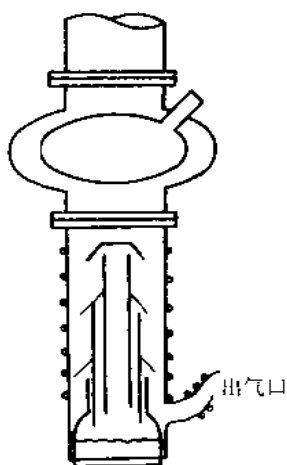


图 2-91 扩散泵结构示意图

### (二) 高真空泵

#### 1. 扩散泵

许多质谱仪器的高真空系统使用扩散泵——油扩散泵或汞扩散泵。扩散泵的结构如图 2-91 所示,其工作原理如下:泵的底部为蒸发器,泵液由加热电炉加热而蒸发。泵液蒸气(分压约 10Pa)沿烟囱状泵芯上升,并从伞形喷口以高速粘性蒸气流向下喷射。由于喷嘴外气压较低  $[1\sim0.1)$  Pa],油蒸气可形成一个向出气口方向运动的射流,气体分子一旦落入射流范围,便获得与射流方向相同的动量,迅速向下飞去,在泵下部出气口被前级泵带走。射流在碰到泵壁时,泵液蒸气为水冷壁冷却,冷凝下来流回蒸发器中连续循环使用。

扩散泵在密闭系统中可以达到  $10^{-5}$ Pa 的真空。如果在泵上方设液氮冷阱,降低泵液的蒸气压,则在密闭系统中真空可达  $(10^{-6}\sim10^{-7})$  Pa。由于在室温下泵的蒸气压大于 0.1Pa,会反向扩散到质谱仪器的离

子源和质量分析器管道中去,因此汞扩散泵必须配置液氮冷阱。油扩散泵所使用的是高沸点的聚苯醚,室温下蒸气压低于  $10^{-5}$  Pa,可以不配置冷阱。

扩散泵的抽速可以从每秒几升到  $1500\text{L}\cdot\text{s}^{-1}$ ,主要取决于泵的尺寸大小。质谱仪器中一

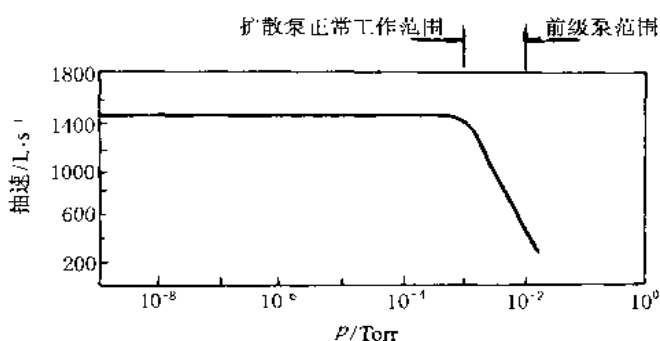


图 2-92 高速油扩散泵的工作特性  
( $1\text{Torr}=133.322\text{Pa}$ )

般使用抽速范围在  $(150\sim 500)\text{L}\cdot\text{s}^{-1}$  的扩散泵。在系统气压小于  $0.1\text{Pa}$  时,泵的抽速是很稳定的,但当系统气压大于  $0.1\text{Pa}$  时,抽速急剧下降,图 2-92 表示抽速为  $1500\text{L}\cdot\text{s}^{-1}$  的扩散泵的工作特性。因此,前级泵是扩散泵正常工作的必要条件。在扩散泵开始工作之前,前级泵应将整个系统的气压降到  $0.1\text{Pa}$  以下。

扩散泵无旋转部件,因此无磨损,使用寿命长。使用一段时间后,如极限

真空下降,只需更换泵液。扩散泵用作质谱仪器真空抽机的最大缺点是泵液蒸汽造成较高本底以及仪器突然暴露大气时,泵液可能倒流到质谱主机内造成严重污染和危害。

## 2. 涡轮分子泵

如前所述,扩散泵是依靠高速喷射的蒸汽流给气体分子定向的动量来完成抽气作用,而涡轮分子泵则是利用高速旋转的涡轮叶片不断对被抽气体施以定向的动量和压缩作用,将气体排走的。

图 2-93 给出了涡轮分子泵的基本结构。它有四个基本部分,即:(1)带进气口法兰的泵壳;(2)装有  $(15\sim 20)$  对动轮叶和静轮叶的涡轮排;(3)中频电动机和润滑油循环系统构成的驱动装置;(4)用于安装涡轮排和电动机的底座。

动轮叶[亦称转子,见图 2-94(a)]类似于风扇中的叶片,在轮叶上开有许多均匀的径向斜槽。它们在中频电动机的带动下,以每分几万转的高速旋转,将定向速度传给空气分子。静轮叶(亦称定子,见图 2-94(b))的大小、几何形状与动轮叶相同,但叶面角与动轮叶相反。它们在泵工作时是静止不动的。在涡轮排上,第一个是动轮叶,然后动轮叶和静轮叶相间排列,相互间的最小间隙仅  $2\text{mm}$  左右。每一对动、静轮叶构成一级。动轮叶旋转时给气体以切向速率,使定轮叶两侧有了定向运动的气流。就气体分子与轮叶槽之间的相对运动而言,静止的气流和高速旋转的轮叶之间的关系与运动气流和静轮叶之间的关系是相当的,因此静轮叶同样有抽气效果。

涡轮分子泵所能达到的极限真空主要与涡轮排上动、静轮叶的个数有关,一般  $(15\sim 20)$  级的泵可达到  $(10^{-5}\sim 10^{-6})\text{Pa}$ 。其抽速主要与动轮叶的转速有关,可以从  $160\text{L}\cdot\text{s}^{-1}$  到  $1600\text{L}\cdot\text{s}^{-1}$ 。

涡轮分子泵对质谱仪器来说有许多优点:它除有大的抽速和可以达到高的极限真空外;还因没有泵液而无本底污染;对所有气体有近似的抽速;偶而暴露大气不会受损伤等。其主要

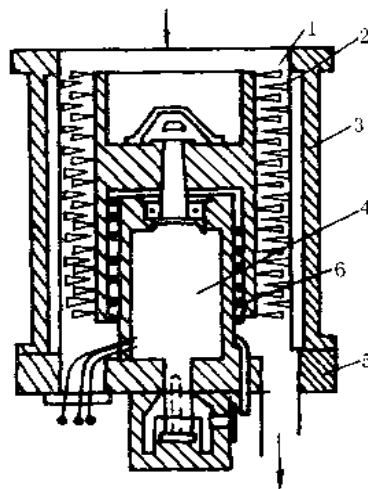


图 2-93 主式涡轮分子泵结构图  
1-动轮叶; 2-静轮叶; 3-泵壳;  
4-中频电动机; 5-底座;  
6-电机冷却水管

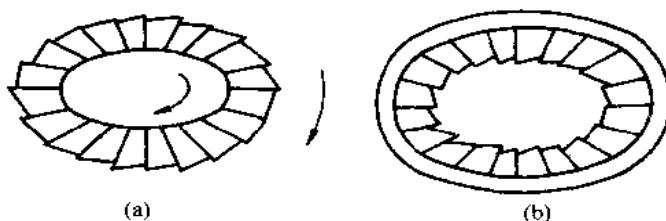


图 2-94 涡轮分子泵的动轮叶 (a) 和静轮叶 (b)

缺点是价格太贵，它的价格约是相同抽速的油扩散泵的 (3~4) 倍。另外，高分辨仪器因防震要求高而不能使用。

### 3. 溅射离子泵

另一种高真空泵——溅射离子泵也可用于质谱仪器。溅射离子泵是基于固体表面对中性气体的化学吸附作用和阴极表面的电清除作用来除掉被抽气体的真空泵。固体表面有吸附气体分子的能力，但是被吸附的分子使固体表面活性中心减少，直到不再有吸附能力。只有不断更新固体表面，使吸附作用持续下去，吸附现象才具有作为真空泵的实际意义。溅射离子

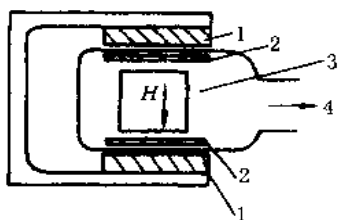


图 2-95 单室溅射离子泵的基本结构

- 1—磁铁；2—钛阴极；  
3—阳极筒；4—被抽容器

泵利用离子撞击钛阴极时产生的溅射现象，不断在阳极表面形成新鲜的活性钛膜。所谓“电清除作用”是指气体分子电离生成的离子以一定能量打在阴极表面时，其中一部分离子可在阴极上停留很长时间（粘附现象），以致能有效地抽除气体分子。粘附的逆过程是脱附，在一定条件下，粘附与脱附将达到平衡，使不能继续清除气体。在溅射离子泵中，钛阴极的溅射不仅在阳极上不断形成新的活性膜，而且在钛阴极遭受离子轰击较少的区域沉积下来，掩埋那里粘附的离子。

溅射离子泵的基本结构如图 2-95 所示。在不锈钢外壳中，有一个直径约 20mm 的圆筒状阳极，一般由不锈钢制成。阳极筒两头有钛板制成的阴极，两极之间加 (3~7) kV 直流高压，整个电极系统置于 (0.1~0.2) T [(1~2) kGs] 的固定磁场中，磁场强度的方向与阳极筒轴向一致。直流高压引起电子发射，磁场使电子作螺旋线运动，增加气体电离的几率，生成的离子在电场加速下轰击钛阴极，引起强烈溅射。溅射出的活性钛或是沉积在筒状阳极内表面形成新的吸附膜，同时掩埋了先前吸附的气体分子，或是沉积在阴极其他部位，掩埋粘附在那儿的离子。这样一个单室的泵抽速只有 (1~3) L·s<sup>-1</sup>，实际使用的泵是由许多筒状的阳极并联起来，组成一个蜂窝状的阳极，阴极则是由大块的钛板组成（见图 2-96）。

溅射离子泵作为质谱仪器的抽气泵的优点是不使用泵液或润滑、密封油，因此本底很低，使用比较安全，偶尔暴露大气不会损坏。但是，溅射离子泵是靠化学吸附作用工作的，由于惰性气体不易被吸附，对于惰性气体泵的抽速明显下降。另外，这种泵的寿命反比于抽气量，因此通常不适合于色谱-质谱联用。

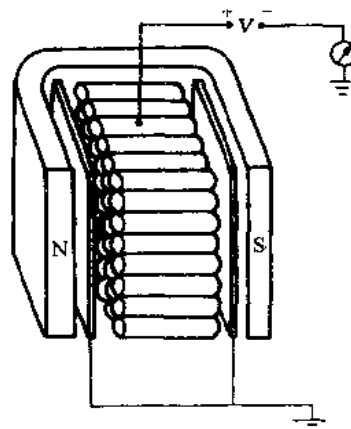


图 2-96 许多单室泵并联

### 三、真空的测量

#### (一) 高真空的测量

质谱仪器中通常使用电离式真空计测量压强为 ( $10^{-1} \sim 10^{-6}$ ) Pa 的高真空。电离式真空计的基本原理是利用一定的方式使残留在被测系统中的气体分子电离, 然后检测电离产生的正离子强度。在一定的气体压强范围内, 正离子流强度正比于气体压强。根据气体分子电离方式的不同, 电离式真空计可分成三种: 热阴极电离真空计、冷阴极电离真空计和放射能电离真空计。前两种是质谱仪器中经常使用的, 下面分别进行介绍。

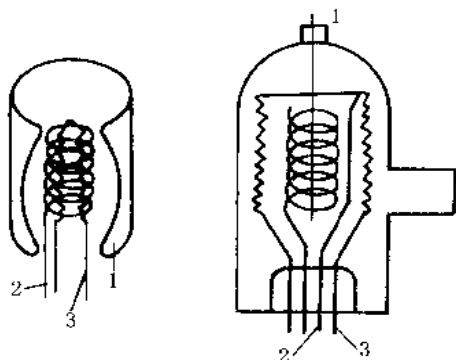


图 2-97 热电离真空规  
1—阴极; 2—栅极; 3 灯丝

1. 热电离真空计 热电离真空计, 简称“热规”, 它使气体分子电离的方法从本质上说与质谱电子轰击源所采用的方法相同, 即利用加热阴极 (即灯丝) 时发射的电子使气体电离。图 2-97 是两种不同电极配置的热阴极电离规管。它们的结构很简单, 三个电极封在一个圆筒形的外壳中, 其中一个电极是用于发射热电子的阴极; 另一个是栅极, 栅极上加正电位, 以加速阴极发射的电子; 第三个电极是离子收集极, 用于接收气体电离生成的正离子。

热电离真空计除上述规管外, 还有一套测量仪器, 包括规管的工作电源、发射电流稳定装置、离子流检测放大器和规管自动保护装置等。

热规具有测量范围宽 ( $10^{-1} \sim 5 \times 10^{-8}$  Pa)、稳定性好、精度较高 [ $\pm (10 \sim 20)\%$ ]、响应快、不受机械震动和外界环境影响等优点。它的主要缺点是阴极易受过量空气及泵油蒸气等污染物的损害, 特别是被测真空系统压强高于 0.1 Pa 时, 处于工作状态的阴极会烧断。

#### 2. 冷阴极电离真空计

冷阴极电离真空计简称“冷规”, 它是利用低压气体在强电场和强磁场下的冷阴极放电作用使气体分子电离的原理。图 2-98 表示一个冷阴极电离规的结构。在两块平板状的电极间设置一个筒状 (或环状) 的阳极, 两极间加 (2~4) kV 直流高压, 引起电子发射。规管的整个电极系统置于一个强度为零点几特斯拉的磁场中, 磁场垂直于电极平面。由于冷阴极发射产生的电子数目较少, 电离效率低, 磁场的作用是使电子作螺旋线运动以增加与气体分子作用的几率, 提高灵敏度。冷阴极电离真空计也有一套测量仪器, 包括阳极高压直流稳压电源和离子流测量仪器。

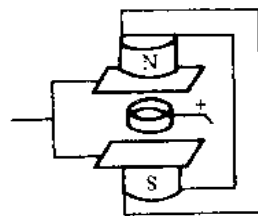


图 2-98 冷阴极  
真空规

冷规的一个突出优点是坚固耐用, 一方面是冷规不存在热阴极, 真空系统因意外事故暴露于高压不致损伤规管, 一些气体对阴极的污染和损害也较少。另一方面规管和测量仪表结构均较简单。商品冷规规管是全金属的, 操作或拆洗、安装时几乎无损坏的危险。其缺点是放电稳定性差。使用一段时间后电极被污染, 造成溅射, 引起短路或测量不准, 但清洗后可以复原。另外, 使用长久而“衰老”的规管在低气压下 (小于  $10^{-4}$  Pa) 常常由于不放电而失效, 造成操作者的错误判断。

#### (二) 低真空的测量

用于测量 ( $10^4 \sim 10^{-1}$ ) Pa 低真空的仪表相当多, 质谱仪器中常用的是热导式真空计。



热导式真空计利用低压下气体分子的热传导与压有关这一原理。如图 2-99 所示,封装在玻璃圆管的低压空间中一根金属丝,通适当电流使其加热,如果不存在对流,则达到平衡

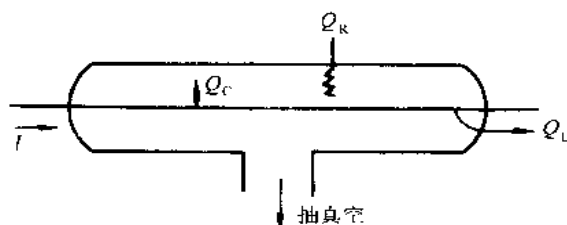


图 2-99 热导式真空计工作原理

之时,热丝产生的总热量  $Q$  应等于热丝热辐射  $Q_R$ 、热丝引线的热传导  $Q_L$  和气体分子热传导  $Q_C$  三者之和,即  $Q=Q_R+Q_L+Q_C$ 。 $Q_R$ 、 $Q_L$  只与金属丝的加热温度和环境温度有关,而与圆管中的气压  $p$  无关。在高压强下,气体热传导  $Q_C$  也与压强无关,在很低的压强下,因气体传导的热量相当小  $Q_C \ll Q_R+Q_L$ ,可以不加考虑。但是在中等压强 [约  $(10^4 \sim 10^{-1})$  Pa] 时,

$Q_C$  与  $p$  成正比。在这一压强范围内,在一定的加热条件下,可以根据气体分子通过热传导对热丝的冷却能力作为压强的指示。气体压强愈高,热丝温度愈低。如果用热电偶直接测量热丝的温度变化,就是热偶真空计;如果通过测量热丝电阻变化来确定温度变化,则称电阻真空计。在质谱仪中这两种真空计均有使用。下面介绍它们的结构和特点。

(1) 热偶真空计 分热偶式规管和测量仪器两部分。热偶式规管由加热丝和用来测量加热丝温度的热电偶组成。测量仪器包括规管热丝稳流电源和热偶电势测量仪表。

(2) 电阻式真空计 由电阻式规管和测量仪器两部分组成。规管结构相当简单,金属或玻璃规管壳内封有一根金属电阻丝(常用钨、铂、镍等材料制成),电阻丝两端用导线引出管壳。用惠斯顿电桥测量电阻变化,具体测量有三种方法:① 定压式 维持丝的加热电压不变,测量流过热丝的电流;② 定流式 维持丝的加热电流不变,测量丝两端的电压;③ 定温式 维持丝的温度不变,测量输入功率的变化。

这两种真空计结构简单,价格低廉,性能比较稳定,真空系统突然漏气不致于损坏。尽管环境温度和气体种类对测量结果有一定影响,但是在质谱仪器中作为前级真空测量完全能够满足要求。

### (三) 真空系统的检漏法

真空容器中的极限压强与容器的漏气量以及抽气机的有效抽速有关。当质谱仪器达不到正常工作所需要的真空时,首先判断是否由于漏气造成的。漏气的判断方法是先将系统抽空到一定压强,然后关闭阀,将系统和泵隔断,测量压强的变化。图 2-100 是孤立系统压强随时间变化的情况。

图 2-100 中,曲线 1 是压强保持不变,系统不漏气。此时如果达不到预定真空是由于抽气机工作不正常造成的。曲线 2,是压强随时间直线上升,说明系统漏气。曲线 3 和曲线 4 是系统内部有放气现象时的情况,在阀刚关闭后一段时间内,放气现象使压强增加,以后放气达到饱和。曲线 2 与 1 情况相同,不存在漏气;曲线 3 与 4 情况相似,压强随时间增加,体系漏气。

只有在确定了系统漏气后,检查漏孔位置才有意义。检漏的一般原理是利用漏孔两端的压力差引起的气体流动产生的种种效应。造成漏孔两端压力差的方法有两种,一种是容器内压强高于外压强,即所谓压力检漏;另一种是内压强低于外压强,即真空检漏。由

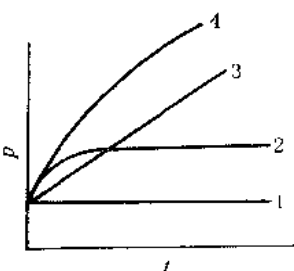


图 2-100 孤立系统的压强变化

于仅仅依靠空气的压强差产生的效应灵敏度很低,无法检查出微小漏孔。因此,现代真空检漏方法是使用示漏气体和相应的探测器。示漏气体和探测器分别处于器壁两边,当遇到漏孔时,示漏气体便从漏孔泄出,使探测器发生响应。这类检漏法包括卤素检漏法、氨检漏法、真空计检漏法和质谱仪检漏法,但选用时必须考虑示漏气体对仪器的腐蚀作用、可能残留在体系中产生高的本底以及简便易行等因素。实际上,对于质谱仪器,最常采用的检漏方法是真空计检漏法。

真空计检漏法是基于一些真空计,如热导真空计和电离真空计,它们的读数与气体种类有关,选用适当的示漏气体,这些真空计就能用作很好的探测器。由于真空系统中总是安装有真空计,用这种方法检漏不需要另外的探测器,所以既方便又便宜。这种检漏方法使用的范围就是真空计的测量范围。热导式真空计只适合于 $(0.1\sim 10)$  Pa的真空范围,示漏气体可用氢、二氧化碳、丁烷、丙酮、乙醚、乙醇等,它能检出的最小漏孔为 $(1.3\times 10^{-3})\text{Pa}\cdot\text{L}\cdot\text{s}^{-1}$ ;电离真空计使用的压强范围小于 $0.1\text{Pa}$ ,其最小可检漏孔约为 $(1.3\times 10^{-4}\sim 1.3\times 10^{-3})\text{Pa}\cdot\text{L}\cdot\text{s}^{-1}$ ,示漏气体常用氢、氨、氩、二氧化碳以及丁烷、乙醚等有机物。

一种实际有效,简便易行的检漏操作是用注射针向怀疑漏气的地方注射乙醇或丙酮,如果确实有漏,汽化的乙醇、丙酮分子会从漏孔进入真空系统,并到达真空计,使真空计的指示向压强大的方向摆动。

#### 四、各种真空部件

除了真空泵、真空计外,真空系统还有一些其他部件,其中主要是真空阀和真空连结。

真空阀门是用于改变气流方向或气体流量大小的零件,是真空系统中必不可少的一部分。真空泵等各种真空部件必须连接成一个整体,真空连接的好坏,直接影响真空系统的性能。

##### (一) 真空阀门

##### 1. 高导阀门

在质谱仪器维修的时候,常常需要用阀门把它和抽气系统隔断,这种安装在抽气管道关键部位的阀门必须是高导阀门,否则将会降低泵效。普遍采用的高导阀门有活塞阀、蝶阀、球阀和闸阀。

活塞阀(盘阀),见图 2-101 (a)。这种阀是靠一个带弹性体垫圈的盖盘紧压在阀座上来实现系统隔断的。用波纹管将阀杆密封,避免操纵时大气漏入真空系统。这种阀工作可靠,不需要维护,但阀的流通过程较长,为减小流阻常常需要选用大阀门。

蝶阀:见图 2-101 (b)。蝶阀的结构简单、体积小、开关方便,装在相同直径的真空管道中,总通导不变。阀的密封作用是由一个

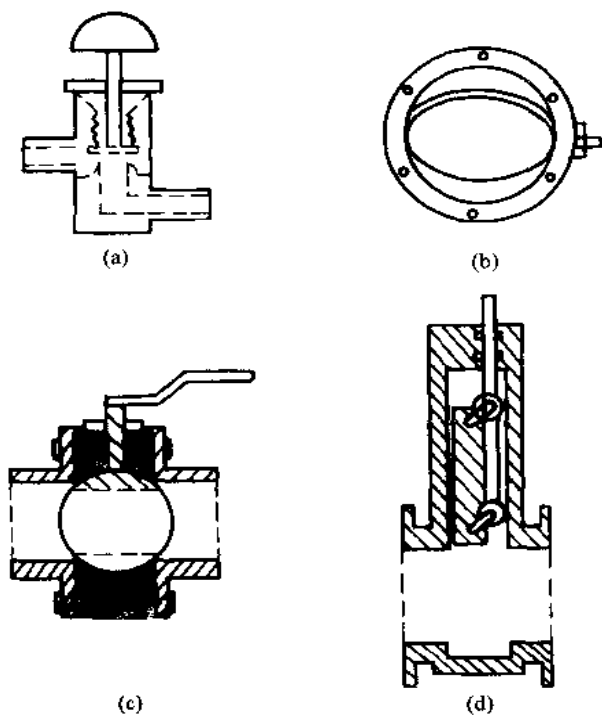


图 2-101 各种高导阀门

(a) 活塞阀; (b) 蝶阀; (c) 球阀; (d) 闸阀

带 O 型密封圈的圆板和阀体紧密接触得到的，圆板上有阀杆，当阀杆转动 90° 时，阀由关变为开。其缺点是阀杆常常是一个漏气源。

球阀，见图 2-101 (c)。球阀中有一个金属球，球上有一个大穿孔，阀杆转动金属球，使穿孔方向改变，以开启或切断气路。金属球与阀杆、阀体的密封均依赖于弹性密封圈。

闸阀（门阀），见图 2-101 (d)。一个盖盘与一滑杆相联，当滑杆压到底时，盖盘将门盖住，可将气路切断。在盖板上开有环形槽，槽内嵌入 O 型密封圈以保证密封。滑杆与阀体也用 O 型圈密封。

### 2. 流量控制和定量阀

在气体分析、色谱-质谱联用分析中常需要控制气体流量，针阀是广泛应用的流量控制及定量阀。常见的阀头式样如图 2-102 所示，利用锥形阀头与阀座之间的距离来调节通导能力。多数定量阀上还有类似千分尺的微动装置。各种针阀必须小心操作，过分旋紧极易损坏阀座。

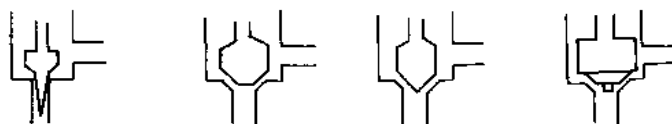


图 2-102 针阀的阀头式样

### 3. 电磁阀和气动阀

真空阀的操作可以用手动方式，也可采用电磁力或气动控制方式。

图 2-103 (a) 是一种电磁阀，它的密封部分与盘阀相同，平时由弹簧压紧盖住，需要开启时，在电磁线圈中通电，铁芯带着盖盘一起被吸上去。电磁阀便于进行联动控制。例如安装在机械泵和扩散泵之间的电磁阀，电磁线圈和泵的马达可共用一个电源，机械泵通电启动时，阀就打开；切断电源，泵停止抽气时，阀便自动关闭。有一些质谱仪器的分析对象是高沸点活性物质，金属材料在高温下的催化作用可能使样品发生变化，这时常常采用全玻璃电磁阀 [图 2-103 (b)]，它的铁芯封装在玻璃里。

气动阀是依靠压缩空气来开关阀门的。有一种气动阀其密封结构与闸阀相同，但它有一个气缸，气缸两端各有一根压缩空气导管，阀杆与气缸内的活塞相连。当压缩空气从气缸顶部的导管进入气缸时，活塞带着阀杆向下移动，直到盖盘完全与阀座密封切断气路。需要开启时，压缩空气从另一导管进入气缸，将活塞向上推。气动阀由于不用电作为动力源，常常用作突然停电等意外事故发生时的保护阀。压缩空气来自于空气压缩机的储气室或压缩空气钢瓶。

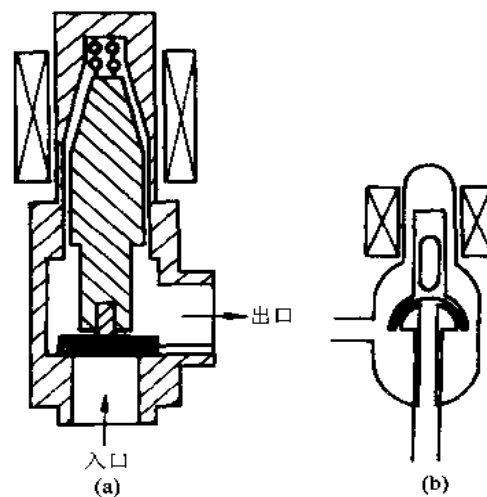


图 2-103 电磁阀  
(a) 普通电磁阀；(b) 全玻璃电磁阀

### (二) 真空连接

对于真空系统的组装来说，最重要的要求是连接处密封不漏气，同时要有足够的机械强度。

永久性真空连接方法是金属部件之间的焊接，玻璃间的烧结，玻璃与金属部件之间封接。

在处理涉及玻璃部件连接时，要特别注意被连接两部分的膨胀系数应相当接近，否则在温度变化较大时玻璃部分会炸裂。

可拆卸真空连接最方便的方法是依赖弹性体（如O型圈）以保证密封，但弹性体不能耐高温，使用的温度范围一般低于200°C。高温条件下，总是使用钢、铝、金、银等塑性较好的金属作为密封材料。

### 1. 用弹性体垫圈的可卸连接

常用的是凸缘连接（亦称法兰连接）。被连接的两个部件中，一个有一环状凸缘，而另一个有一对应的环状凹槽，槽中放置一个环状弹性体垫圈（O型圈），四周有螺栓，调节螺栓压力，使弹性体压缩填满凹槽，以达到密封的目的。凹槽可以有各种不同的形状，如圆弧形、V型、方型等（如图2-104）。密封性能主要取决于与弹性体接触面的光洁度。

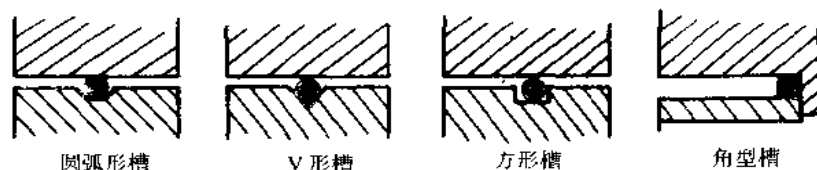


图 2-104 法兰连接的各种形式

### 2. 用金属垫圈的可拆卸连接

一种是类似于O型圈的丝密封圈，一根金属丝夹在两个平面法兰盘之间，加压后变形起到密封作用。

另一种是剪切一个矩形截面的金属垫圈，图2-105给出几种密封方式，其中(a)、(b)是阶形密封，(c)、(d)是刀缘密封。

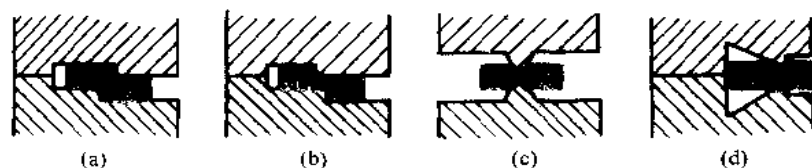


图 2-105 矩形截面金属垫圈密封

金属垫圈比弹性体垫圈使用温度高、放气少、渗透率低，但是需要夹紧的压力大，重复使用的次数少。

## 第七节 质谱仪器的基本指标

一般用几个基本指标来衡量一台仪器的性能。质谱仪的三个最重要的指标是：质量范围、分辨本领和灵敏度。有的指标，如扫描速度等，对某些应用具有特殊的意义。仪器的性能还应该从仪器所具有的功能多少来衡量。如质谱仪的进样方法、电离方式、质量分析器的功能，计算机功能等都是衡量仪器性能的指标。

### 一、质量范围

质量范围 (Mass Range) 就是一台质谱仪能够测量的离子质量下限 (Lower Limit) 与上限 (Upper Limit) 之间的一个范围。离子质量的单位即原子质量单位 (Atomic Mass Unit, 简称 amu)。实际上质量范围的下限却从0开始，所以一台仪器的质量范围就是这台仪器所能测量的最大的  $m/z$  值。这是一个非常重要的参数，因为它决定了可测量的样品的分子量。特别

是在质谱应用进入到生物大分子分析的时代,质量范围已成为质谱学工作者最感兴趣的焦点。在大部分商品仪器的质量上限不超过 4000 的情况下,人们已将目标设在几万以上,而且取得了不少突破。

从理论上讲,许多质量分析器都能测量  $m/z$  值为无穷大的离子。例如,就磁场型质量分析器而言,根据式 (2-3),  $m/z$  与加速电压  $\bar{V}$  成反比,当  $\bar{V} \rightarrow 0$  时,  $m/z \rightarrow \infty$ 。又如,对 FTMS 来说,当频率  $f \rightarrow 0$  时,  $m/z \rightarrow \infty$  [见式 (2-48)]。但实践中这些都是不可能的。在磁场型仪器中,  $V$  必须维持一个较大的值,以使仪器能获得所要求的灵敏度及分辨率。因此,每台仪器都存在一个质量上限,这个上限对于磁性仪器来说通常是指在最高加速电压下的最高质量数。随着仪器制造技术的进步,上限在不断地突破。磁场型分析器通过增加磁铁的几何尺寸 ( $R_m$ ) 及提高场强等方法,质量范围已大大提高。已有质量范围超过 20000 的报道。飞行时间质谱仪和傅里叶变换质谱仪都已证明能达到较高的质量上限 (大于 10000)。而四极滤质器则无法与上面几种仪器相比,虽然经过技术更新它的质量上限只达数千。

其他旨在提高质量上限的分析器仍在研究之中,如一种叫 Wien Mass Filter 的仪器能获得  $m/z$  值为 30000 的离子信号。还有获得  $m/z$  值为 70000 的离子信号的报道。

质量范围的提高在很大程度上还要归功于新的电离方法的出现。只有像快原子轰击、铍二次离子法、激光解吸、等离子体电离及电喷雾等手段才能使人分子有效地离子化。

目前在高质量区测量的一个困难是质量误差较大。一般  $m/z$  值在 10000 以上时,误差可达几个  $u$ 。 $m/z$  值越大,误差就越明显。这一方面与仪器及计算机技术有关,缺乏标准样品而无法准确地校正标尺也是一个原因。

## 二、分辨率

分辨率 (Resolution) 是仪器对不同质量离子分离和对相同质量离子聚焦两种能力的综合表征。

如果有两个离子峰其质量数分别为  $m_1$  和  $m_2$ ,两峰的质量数之差为  $\Delta m = m_2 - m_1$ ,当仪器把这两个峰刚好分开时,就定义为仪器的分辨率:

$$R = \frac{m_1 \text{ (或 } m_2)}{\Delta m} \quad (2-69)$$

所谓“刚好分开”,是指前一峰的峰尾和后一个峰的起点相连,且连结点刚好落在基线上,或者说两峰的中心距  $\Delta x$  等于两峰的平均宽度  $W = \frac{W_1 + W_2}{2}$  (见图 2-106)。

例如,设两峰的质量数分别为 100 和 101,当两峰刚好分开时仪器的分辨率  $R = \frac{100}{101-100} = 100$ ;如果刚好被分开的两峰质量数分别为 100.0 和 100.1,则此时仪器的分辨率为 1000。如果要质量数分别为 1000 和 1001 的两峰分开,仪器的分辨率也应达到 1000。由此可见,分辨率的物理意义是仪器在质量数  $m$  附近能够分辨的最小相对质量差。分辨率 100 表示在质量数 100 附近,仪器能分辨的质量差  $\Delta m$  为  $1u$ ;分辨率 1000 表示在质量数 100 附近,仪器能分辨  $0.1u$ ,而在质量数 1000 附近则只能分辨  $1u$  的质量差。同样是分辨  $1u$  的质量差,离子质量

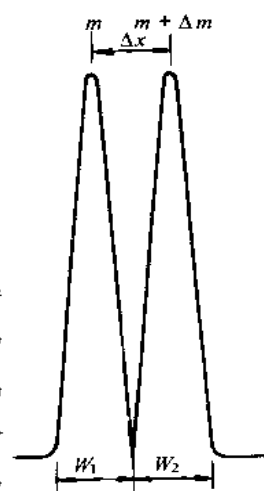


图 2-106 “刚好分开”的峰

( $m$ ) 越大, 要求的分辨率越高; 在相同离子质量数上, 分辨率越高, 能够分辨的质量差越小, 测定的质量精度越高。这说明质量测定精度既和分辨率有关, 又与被测离子的质量有关。在相同的分辨率下, 测量高质量离子的质量精度低, 而测量低质量离子的质量精度高。换言之, 在相同的质量精度要求下, 测定较高质量离子, 要求较高的分辨率。

在实际测量仪器分辨率时, 往往很难找到两个刚好分开的离子峰, 因此, 可以任意选择两个分开的离子峰, 或选择有部分重叠的离子峰, 然后将公式 (2-69) 改写为

$$R = \frac{m}{\Delta m} \cdot \frac{a}{b} \quad (2-70)$$

式中,  $a$  为两个峰的中心距,  $b$  为平均峰宽 (当两峰相隔不很远时, 近似为其中任一峰的峰宽)。

由于峰宽测量方法不统一, 对同一质谱, 可能得到不同分辨率结果。现在国际上规定使用 10% 峰谷作为测定分辨率的标准。所谓 10% 峰谷是指相邻的两个等高峰间的峰谷高度为峰高的 10% (见图 2-107), 即两峰各以 5% 峰高重叠。此时, 峰宽  $b$  的测量点确定为 5% 峰高处。有一些质谱仪器生产厂商以 50% 峰高来测量分辨率, 此时峰宽的测量点在 50% 峰高处, 测得的峰宽值显然比 5% 峰高处的测量值小, 用公式 (2-70) 计算得到的  $R$  显然大于 10% 峰谷方法。因此在考察厂商提供的仪器分辨率指标时, 应注意其测量方法。

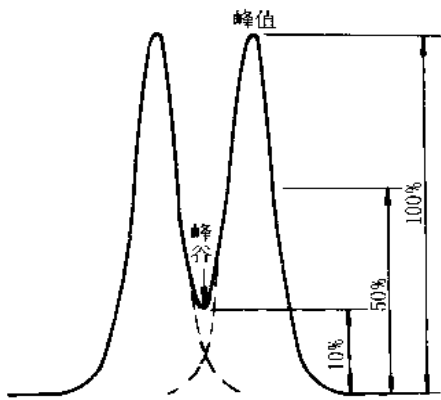


图 2-107 分辨率的测定标准

高的分辨率不仅可以保证高质量数离子以整数质量分开, 而且当测量的离子精度足够高时, 例如达到 (0.0001 ~ 0.00001) amu, 可以借助计算机进行精密质量计算, 获得离子的元素组成, 为解析质谱数据提供极为有用的信息。

分辨率是衡量仪器性能的一个极其重要的指标。高的分辨率不仅可以保证高质量数离子以整数质量分开, 而且当测量的离子精度足够高时, 例如达到 (0.0001 ~ 0.00001) amu, 可以借助计算机进行精密质量计算, 获得离子的元素组成, 为解析质谱数据提供极为有用的信息。

在分辨率方面, 傅里叶变换质谱具有很大优势。如本章第三节中所指出, 它的典型数据达 11000000 (FWHM 定义)。磁场型质谱计也能达到很高的分辨率, 这是双聚焦离子光学理论研究的成果。飞行时间质谱仪和四极滤质器均无法达到较高的分辨率。

### 三、灵敏度

灵敏度 (Sensitivity) 参数标志了仪器对样品在量的方面的检测能力。它是一台仪器的电离效率、离子传输率及检测器效率的综合反应。根据不同的测试条件, 灵敏度可用不同的方法来描述。但总的来说, 各种方法分属于绝对灵敏度和相对灵敏度两个概念。前者指分析样品时在记录器上得到可检测的质谱信号所需要的样品量 (克); 后者指可探测到的微量杂质的最小相对浓度。

有机质谱常用某种标准样品的最小检测量来衡量灵敏度参数。如用硬脂酸甲酯作标样, 检测其分子离子峰信号, 同时给出信噪比值。当测试条件相同时, 所用的样品量越小, 表明仪器的灵敏度越高, 这种方法就是绝对灵敏度法。

在文献中也有用物质的量 (mol) 浓度来描述灵敏度参数的, 这主要是为了叙述方便。当样品是经过化学反应或酶反应后的产物时, 用物质的量浓度 (简称为“浓度”) 更为常见。如果知道样品的分子量, 则以浓度为单位的灵敏度可折算为以克为单位的灵敏度。

不少仪器采用相对灵敏度法。相对灵敏度可衡量仪器检测含于其他物质中的极微量样品的能力。若相对灵敏度为通常用  $\mu\text{g} \cdot \text{mL}^{-1}$  或  $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$  表示 (1ppm)，相对灵敏度与进样量有关，增加进样量能增加样品的绝对量，使仪器较容易检测出样品的信号。但无限制地增加进样量会使样品信号被无用的本底或噪声所淹没。

检测气体样品时，常用质谱测得的离子流强度 (A) 与离子源内气压 (Pa) 之比值来衡量仪器的灵敏度，其单位为  $\text{A} \cdot \text{Pa}^{-1}$ 。在一定的气压下，得到的离子流强度越大，表明仪器的灵敏度越高。

其他还有几种表示灵敏度的方法，由于不经常使用，这里不一一介绍。

一般来说，仪器的灵敏度与分辨本领是一对矛盾，磁场型仪器提高分辨率的最有效办法是调小离子源及接收器狭缝，这将使一大部分离子无法到达接收器，从而降低了灵敏度。四极滤质器两者之间也有反比例关系。傅里叶变换质谱仪是一个例外，它的灵敏度不会随分辨率提高而降低。这一方面是因为仪器不存在狭缝、透镜等，另一方面分辨率的提高必须增加检测时间，这也有助于灵敏度的提高。

灵敏度参数还与许多其他条件有关，如离子化手段、检测器类型等。不同的样品也产生不同的灵敏度。因此，在讨论灵敏度时，必须先弄清楚具体的测试条件，否则将无法准确反映仪器的真实性能。

#### 四、峰形

质谱峰的峰形，反映了一台仪器的状态，包括透镜电位是否正常，各狭缝位置是否匹配及其他因素。

峰形可从两个角度进行考察，第一是对称性，显然不对称的峰形是不正常的。峰形对称与否一般通过观察就可知道。第二是峰顶与峰底的宽度差是否很大。太大的宽度差也表示峰形处于不正常状态。这一点可通过计算峰形系数的方法来表征。如图 2-108 所示，量取峰高 90%、50%、10% 三处的峰宽值  $W_1$ 、 $W_2$ 、 $W_3$ ，然后用下式计算峰形系数：

$$\text{峰形系数} = \frac{W_3 - W_1}{W_2} \quad (2-71)$$

当峰形系数小时，表明峰比较陡。

在具有狭缝的磁场型质谱仪器中，峰形与狭缝宽度有关，过小的狭缝宽度或狭缝位置不对都将影响峰形。图 2-109 显示了离子束像宽  $a$  与接收狭缝宽  $S_2$  之间三种不同关系时的峰形。当一束矩形离子通过宽度  $S_2$  大于像宽  $a$  的狭缝时，将获得一个梯形峰 (I)；当  $S_2 = a$  时，所获得的峰是三角形 (II)；当  $S_2 < a$  时，将获得一个强度降低了的梯形峰 (III)。当离子束本身是梯形时，所得结果如图 2-109 的右半部分所示。

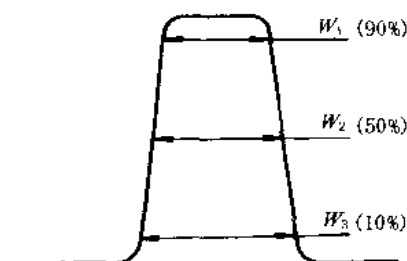


图 2-108 峰形系数的计算

#### 五、精密度与准确度

精密度和准确度是衡量仪器测量所得数据可靠程度的两个参数。精密度指的是重复测量时所得各值之间的接近程度，反映了测量过程的重复性；准确度指的是测量值与真值的逼近程度，反映了测量的准确性。表征测量值接近真值程度的准确度包括系统误差和精密度两个概念。

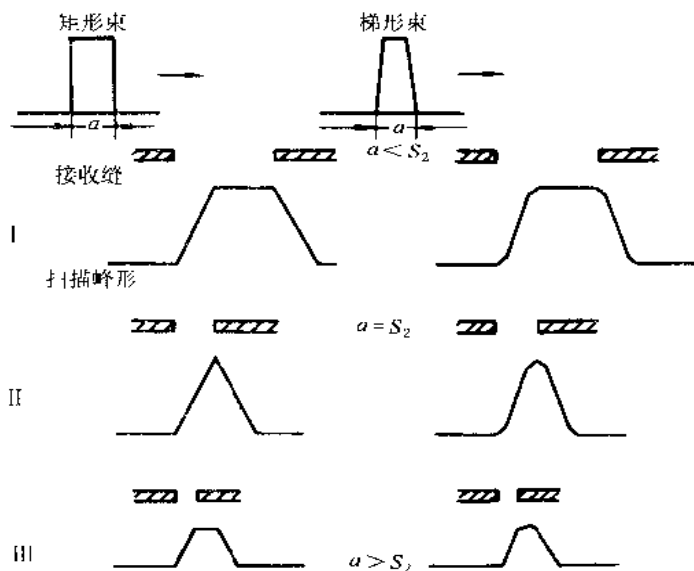


图 2-109 束宽、接收狭缝宽与峰形的关系

精密度值是由测量过程中产生的偶然误差（随机误差）决定的。这种误差主要是由仪器本身的不稳定性和操作者操作过程中的偶然性引入的。计算精密度有好几种方法。一种能较客观地评价此值的方法是标准偏差法，也称均方根偏差法，其计算公式如下：

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \quad (2-72)$$

式中， $x_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) 是各次测量值， $\bar{x}$  为各次测量值的平均值， $n$  为测量次数。根据统计规律，测量次数越多 ( $n$  越大)，精密度越好 ( $S$  值越小)。其他比较简单的计算方法还有极差法、平均偏差法等。但均不如标准偏差法客观。

精密度是准确度的必要条件。精密度差就不可能获得好的准确度。但好的精密度并不能保证好的准确度。

质谱仪安装时都对环境提出要求，如室温、振动、电源稳定度等。这能避免或降低某些偶然误差。同时由于自动化程度的提高，人为操作误差变少，因此，大多数仪器能保证较好的精密度。

准确度值由测量过程中存在的系统误差决定。这种误差主要是由仪器的内在因素引起的。准确度的计算方法是直接将测量值与真值相减。在质谱仪中用原子质量单位表示。准确度不但要求重复性好，而且要求测量值与真值接近。因此，准确度参数中已包含了对精密度的要求。一般商品仪器均给出准确度值。这个参数与前面介绍过的参数一起较全面地反映一台仪器的性能。

提高准确度的途径是限制系统误差，这必须从系统本身加以考虑。例如，四极滤质器从本质上讲就无法达到磁场型双聚焦分析器所能达到的准确度。另外，若仪器的质量标尺存在较大误差，必定会影响到准确度。用外标准所能获得的准确度差，只能进行低分辨质谱测定。要获得高分辨数据并进行元素组成计算时，必须用内标法。



### 第三章 计算机在质谱中的应用

#### 第一节 意义及发展

在仪器分析中质谱法有着广泛的应用。由于质谱仪的数据输出速度很快且数据量大，这使得质谱工作者的负担加重。用计算机采集和处理质谱数据可节省时间、提高工作效率。如果计算机控制了质谱实验室中全部的操作，则将使有高度专业修养的人员解放出来，促使质谱学家们开展更富有创造性的工作。但是计算机将不会完全取代人类专家，而只是帮助人们进入更智能化的活动中。

早在 60 年代末和 70 年代初，人们便开始意识到由大量分析方法产生的实验数据有必要用计算机来处理。在质谱学中迫切需要应用计算机的原因有两个：① 获取完整的高分辨质谱数据以测定化合物的分子式和离子式；② 在 GC-MS 联用技术中使用了重复扫描技术。最早的解决办法是离线处理。当时用的一种方法是用磁带记录下由电子倍增器输出的扫描模拟信号，然后将这些数据经数字化后存至另一磁带上，数字化后的数据由计算机进行顺序处理。这种离线的处理方法很费时间，另外，由于数据记录装置的引入，如磁带等，常将种种技术限制强加给系统。因此，后来人们采用在线方法，将质谱仪直接同计算机连接，使得处理结果更为可靠、迅速。这种在线方法的成功同计算机制造商不断努力，开发通用的、价格合理的硬件是分不开的。大规模集成电路的出现，使得如今人们已普遍将计算机作为质谱仪的一个组成部分。

图 3-1 表示一种在线质谱仪。它是由中央小型计算机分别控制两个微处理器，它们各有自己的专门任务。图右边的微处理器用来采集和处理质谱数据，如噪音的识别及排除，多重检测和标识等。所有这些过程都是在扫描一离子峰和将其输出到存贮器（通常是一硬磁盘），之间完成的，存贮的数据用于中央小型计算机的进一步处理。图左边的微处理器则用于控制质谱仪的各电子或机械功能，如进样、离子源、分析器及检测器等的控制。也许最为明显的控制方法是将现有的质谱仪操作全盘自动化。

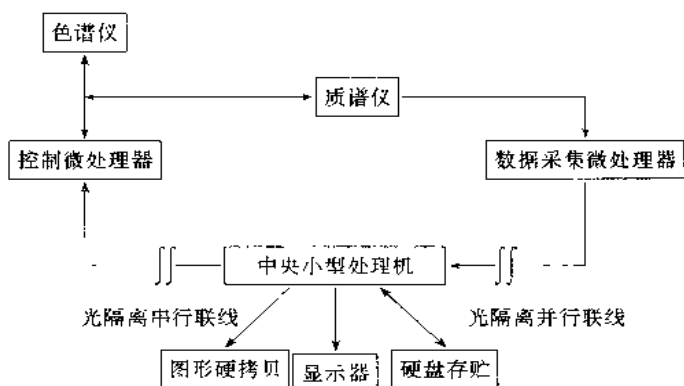


图 3-1 典型的在线质谱仪

在质谱仪中，计算机除了用于采集和处理数据，仪器控制外，还有一最必不可少的，也是计

计算机在质谱学领域中发展最快的一个领域——数据分析。数据分析从早先的本底扣除、峰质量数和峰强计算发展到如今用各种数学手段处理质谱数据,如用模式识别法分类化合物的各种特征、因子分析法求混合物成分、回归技术分析定量数据、人工智能法解析化合物的结构等。

回顾分析化学的发展历程,大致可将其划分为如下几个不同的阶段:

① 经典分析化学 S—A

② 仪器分析 S—I—A

③ 自动分析 S—I—C—A

④ 带有机器人的自动分析

其中, S—进样(样品), I—分析仪器, C—计算机, A—分析化学家, R—机器人。

质谱学的发展也不例外,带有机器人的全盘自动化质谱仪是人们目前及将来努力的目标。在现阶段有两大发展趋势值得注意:一是用数据工作站的方式处理数据,它的典型形式如图3-2。在数据工作站形式下,质谱仪器远离工作站,仪器控制和数据采集则分别由安装在质谱仪内的微处理器来完成。此时,质谱仪仅是网络中的一个结点,在网络上的每一台终端都可由用户来操作使用。二是专家系统。专家系统是处理现实世界中需要专家作出解释的复杂问题以及使用专家推理的计算机模型解决这些问题。评价一个专家系统一般要考虑以下几个问题:

- 知识表达方式是否合适,是否需要进一步扩充和修改?
- 系统能否给出正确的答案并伴以正确的理由?
- 系统中包括的知识是否与专家一致?
- 系统与用户交互是否方便?
- 用户需要哪些便利和功能?

开发一个专家系统是一个长期的反馈过程,新技术的不断发展使任何一个专家系统都处在变化之中。

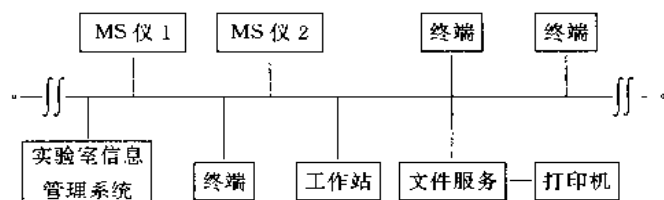


图 3-2 数据工作站网络系统

本章的目的不是为了详细地给出用在质谱仪中计算机的硬件、软件和数学处理方法,而是着重介绍基本概念,描绘出计算机辅助质谱系统领域的大致轮廓。

## 第二节 计 算 机

计算机在质谱仪中的主要作用是完成数据采集、数据处理和仪器控制三大任务。目前大多数质谱仪所用的计算机都是 IBM 微型计算机及兼容机,如 Finnigan 公司的 ITD 800GC 离子阱质谱,配置的是广泛使用的 IBM/XT/AT 微型个人计算机;VG MASS-LAB 公司的 VG SX 和 SXP 系列四极质谱仪及数据系统……SPECTRLAB PC 用的也是 IBM/XT/AT 或兼容机。

## 一、IBM 微机系统概述

IBM PC 最小的硬件配置只需要三部分，即键盘、显示器和一个系统板（板上有 CPU 和存贮器）及一块选件板的主机箱。这种最小配置仅能使用系统内部固化的程序，一般适合于教学或开展简单的数据处理或控制方面的应用。为了扩大 IBM PC 的应用范围，它的存贮容量、输入输出功能，以及运算处理能力都需作进一步的扩充，例如：

(1) 内存贮器容量 系统板上可以插上内存扩充板以扩充其内存容量。添加存贮器选件板后，还可以进一步扩充。如果把系统中只读存贮器（ROM）的容量也计算在内，则最大内存容量可有很大提高。如 IBM PC/XT/AT 的最大内存容量可达 1MB（1 兆字节）。

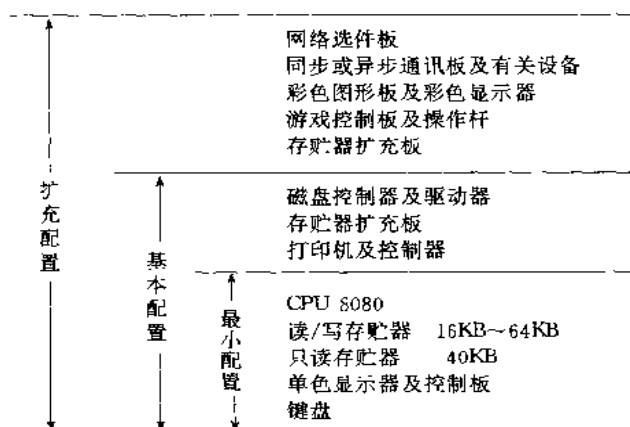
(2) 外存容量 系统可用录音机作为外存贮器，但更常用的是在主机箱内安装 5in 的软盘驱动器，每台驱动器的存贮容量为 360kB（千字节）。PC/XT 还可安装一台温彻斯特硬盘机（它的容量在 10MB 以上）和一台软盘机，如果需要的话，还可购买扩充主机箱增加两台软盘机。

(3) 运算处理能力 系统板上可增加一个大规模集成电路芯片——协处理 8087，从而使运算处理速度提高几十倍。

(4) 输入输出设备 系统还可以连接一台打印机作为硬拷贝输出设备，通常用的打印机是点阵式打印机或激光打印机。为了具有图形功能（彩色的），可在机箱内增加一块彩色图形选件板和一台彩色显示器。为了具备数据通讯能力，可增加同步或异步通讯控制板。这样，既能实现 PC 同其他计算机的通讯，还可利用一个或几个标准的串行接口连接其他种类的外部设备，如绘图仪，图形数字化仪、汉字终端等。如需要使用操纵杆或位控制器进行人机交互式图形显示等，则可配置相应的控制器选件板。

总之 IBM PC 的硬件配件比较灵活，可以适用于许多应用领域的不同要求。表 3-1 显示，系统硬件配置的一个简单概括。

表 3-1 IBM PC 的硬件配置



除了 IBM PC 机本身丰富的硬件配置外，它还有丰富的软件供用户使用，最常见的有：

MACRO 语言	DBASE 语言
FORTRAN 语言	WORDSTAR 软件
BASIC 语言	MS-DOS 操作系统

FORTH 语言	C 语言
PASCAL 语言	LOTUS 1—2—3 软件
PROLOG 语言	WORDPERFECT 软件
LISP 语言	UNIX 操作系统
COBOL 语言	MS WINDOWS 软件

在中文 DOS 的支持下, 也可运行上述软件的中文版。

## 二、常见术语

**模拟信号** 模拟信号指的是随时间连续变化的信号, 这些信号在研究的一连续时间内其幅值取连续值。

**数字信号** 指的是在有限的离散瞬时上取值的信号。

**量化** 量化就是采用有限长的一组数码(如二进制码)去逼近离散的模拟信号的幅度值。

**量化单位**  $q = FSR/2^n$ , 这里  $FSR$  是满量程电压值, 单位为 V (伏特),  $n$  为转换器的位数。

**量化误差  $\epsilon$**  指的是由量化引起的误差。显然,  $|\epsilon| \leq q$

**采样定理** 设连续变化的信号  $x(t)$  的频谱为  $x(f)$ , 以采样周期  $\Delta$  采得的离散信号为  $x(n\Delta)$  ( $n=1, 2, 3, \dots$ ), 如果频谱  $x(f)$  和采样周期满足条件: ①  $x(f)$  有截止频率  $f_c$ , 即当  $f \geq f_c$  时,  $x(f) = 0$ ; ②  $\Delta \leq \frac{1}{2f_c}$  或  $f_c \leq \frac{1}{2\Delta}$ , 则可由离散信号  $x(n\Delta)$  完全确定频谱  $x(f)$ 。

**采样** 即按一定时间间隔  $\Delta$  对模拟信号进行取值。

**采样周期** 采样的时间间隔  $\Delta$  也称为采样周期。

**A/D 转换器** 实现将模拟信号(电压值)转换成计算机可处理的数字信号。

**D/A 转换器** 将计算机的数字信号转换成模拟信号以实现计算机对仪器的控制。

另外, A/D、D/A 转换器的特性参数一般有:

① 分辨率

$$r = \frac{\text{量化单位}}{FSR} = \frac{1}{2^n}$$

② **转换时间** 对 A/D 转换器指的是在确定的精度内获得数字信号输出所需的时间; 对 D/A 转换器, 则是指获得模拟信号输出所需的时间。

③ **精度** 对 A/D 转换器指的是输入模拟信号的实际电压值同被转换成数字信号的理论电压值之间的差值; 对 D/A 转换器, 则指输入数字信号的理论电压值同被转换成模拟信号的实际电压值之间的差值。

④ **输出电压的幅度  $U_{\max}$**  当 D/A 转换器上的所有位的状态都为“1”时所对应的输出电压值。

## 三、微机辅助 MS 系统实例

VG MASSLAB 公司的 VG SX 和 SXP 系列四极质谱仪及数据系统——SPECTRLAB PC 的主要特性如下:

- (1) 接口 槽卡插板加上 PC 接口单元。
- (2) 兼容性 SX 200, SX 300 及 SXP 系列质谱仪。

- (3) 数字控制线 发射电流, 电子倍增器电压, 抽气及数据系统的所有开/关控制。
- (4) D/A输出到质谱仪 标准单元, 电子倍增器电压, 质量程序, 放大器零点; 只对 SXP 系列四极质谱仪作为附加选购件的单元; 离子能量, 聚焦电压, 发射电流, 电子能量, 分辨, 四极场轴电压。
- (5) A/D输入 离子流, 用户 1, 用户 2。
- (6) 选购件 阀门控制, 多道控制, 能量分析器 (只对 SXP 系列质谱仪而言), 脉冲计数。
- (7) 软件 C 语言+8086 自动编码器; 介质: 5¼in 360kB 软盘; 容量: 程序 96kB; 数据 52kB; 包括 32kB 的用户数据缓冲区; 存储要求 256kB 的 RAM; 操作系统 PC/MS DOS 或 CP/M。
- (8) 计算机 IBM PC/XT/AT 或兼容机。

### 第三节 仪器控制、数据采集及处理

仪器控制与数据采集涉及两个基本的电路: 数-模 (D/A) 转换电路和模-数 (A/D) 转换电路。近年来一些半导体厂商大量推出具有 12 位或更高分辨的完整的控制与采集子系统, 又称控制与采集模块, 这类模块一般具有如下特点:

- ① 容 A/D、D/A 功能于一身, 允许许多模拟信号输出及许多数字信号输入, 其输入通道一般为 12, 输出通道一般为 1;
- ② 可用程序和随机方式选择通道;
- ③ 模块内部均包括完整的数-模, 模-数转换电路
- ④ 模-数和数-模转换电路的分辨率一般均为 12 位, 也有高达 16 位的;
- ⑤ 转换速度有的可高达 50kHz 以上;
- ⑥ 模块内部包含定时控制逻辑;
- ⑦ 使用方便。

这一类产品的出现大大地方便了数据采集和仪器控制系统的构成。

#### 一、仪器控制

随着微型计算机和电子技术的迅速发展, 微机技术已被运用于各种分析仪器中。在计算机程序的控制下, 通过数-模转换器 (D/A) 产生的模拟信号, 再加上相应的电子技术及其他的机械功能便可实现对仪器的自动控制。目前质谱仪的计算机控制主要是磁场、电场的扫描, 离子源参数的设定等, 今后将朝着机器人技术方面发展。微机控制线路的流程如图 3-3 所示。

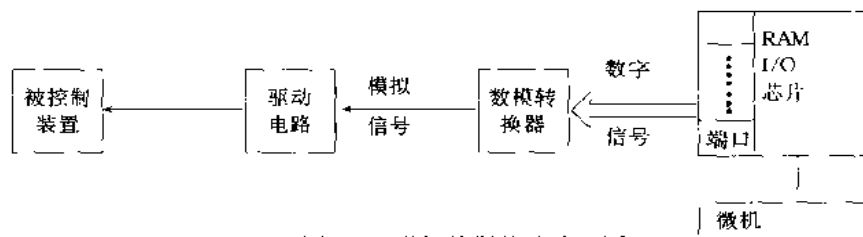


图 3-3 微机控制线路流程图

在仪器控制技术中, 接口间的联接分为并行、串行两种方式。并行联接主要用于高速通讯的情况。同并行相反, 串行用的是一根线或两根线来实现各系统之间的信号传递。串、并行通讯的示意图分别如图 3-4 和图 3-5。

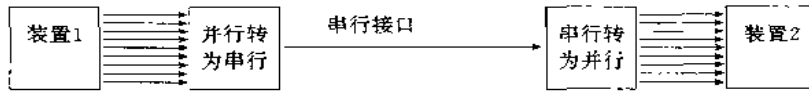


图 3-4 串行传送数据

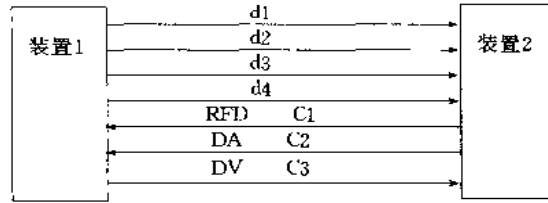


图 3-5 并行数据接口的一个简单例子

RFD—数据准备；DA—数据请求；DV—数据有效；d1~d4—数据或其他信息

由于用于仪器控制方面的电子技术较为成熟，故用户可根据不同的要求，通过类似搭积木的方式，选用各种标准线路元件，构造用于各自目的的仪器控制电路。

## 二、质谱数据的采集和处理

用于质谱仪数据采集的必备硬件单元如图 3-6 所示。

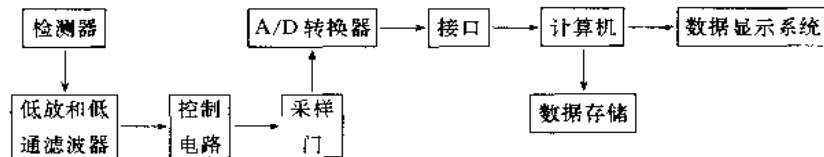


图 3-6 数据采集的必备硬件单元

通常 A/D 转换器在计算机内，它远离质谱仪，故经过放大-滤波的信号要经过一段传递过程输向计算机。采用屏蔽电缆可增加信号的抗干扰能力。但远距离模拟信号的传输总是会带来传输方面的干扰。解决这一问题的常用方法是将 A/D 转换器装在质谱仪一边，将数字化后的信号送往计算机，数字信号具有高的抗干扰能力。

用于收集数据的计算机类型取决于它在数据收集及后续过程中充当的是什么角色。计算机通常有三种类型：大型机、小型机和微机。作为选择标准，有三点值得注意：①大型机通常不用于直接的数据采集；②小型机常用于既需大量数据又涉及多台装置的同时控制的情形；③微型机常用于需不中断处理的场合。

### 1. 数据转换

在计算机控制下，A/D 转换器执行在精确时间间隔内将输入的模拟信号转换成数字信号（如图 3-7）。计算机收到的信号是由数字值组成的。

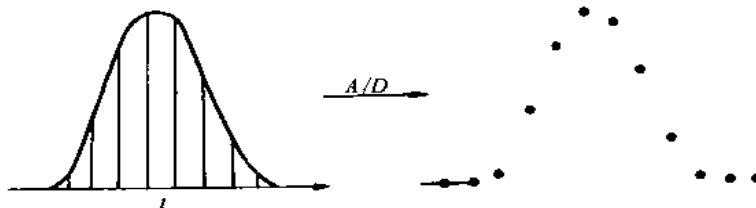


图 3-7 模拟信号到数字信号的转换

由于 A/D 转换有一定的转换时间  $\Delta t$ ，因此，所得数字值有一定的不确定性，即它是在  $t_0$

$t_0 + \Delta t$  时间间隔内的值，而不是在  $t_0$  时刻的值。这里的  $t_0$  是开始转换的时间，也是指定给数字值的时间（见图 3-8）。在理想情况下，在转换时间内，模拟信号的变化应小于 A/D 转换器的转换精度。

为了保证来自输入信号的信息没有丢失，应用采样定理做判据。最小的采样速率应能使所有未知的信号都被采集进来。

还需要提及一些计算问题。在质谱信号收集时，可能获得大量的数据，因此用各种硬件或软件技术压缩数据以节省存贮空间是有必要的。在大多数情况下，检测器的输出会产生一定的基线信号，这些基线数据没有必要存储。同样，样点数常取决于被记录信号的形状，一个尖峰需的采样点比一个缓慢变化的宽峰要大得多。

当设计一个数据采样系统时，需考虑：

- ① 实验或监测时间的长短；
- ② 采样速度；
- ③ 所涉及仪器的类型；
- ④ 采样方式；
- ⑤ 处理所采集数据的方式；
- ⑥ 系统的可靠性、适用性；
- ⑦ 所设定的观察模式；
- ⑧ 系统是否用于控制目的；
- ⑨ 经济方面是否符合要求。

## 2. 接口逻辑和控制功能

在采集数据期间计算机的功能是很重要的部分，

这些功能包括数据通道的启动，信号采集，以正确的时间序列传递数据，记下在一次扫描过程中所采的样点数及在采样结束时做上相应的标识，监视和控制质谱仪的扫描，记下隐含的条件等。

控制时间的时钟用的是石英振荡器，它是很准的频率发生器，A/D 转换器的采样率可由手控也可由软件控制。一般每一次时钟脉冲便使计数器加 1，当计算值达到预定的采样时间间隔后，计数器清零，采样器动作一次，而记录采样数的计数器则加 1。

计算机读数据则是通过中断方式进行的。通过中断方式，在 CPU 中运行的程序被中断，各存储器的内容被推入堆栈，CPU 转向执行读数据程序，读完数据后，计算机回到原来执行的程序上。中断信号可以是来自离子流，时钟计数器，A/D 转换器及来自质谱仪的扫描状态信号，每种中断方式都有各自的优先权。

## 3. 数字阈值和峰识别

很多数据采集系统，特别是在高分辨质谱仪中，都设有一比较器，该比较器将 A/D 转换器采集的数字值同一设定的值相比较，当信号值大于此设定值时，信号被送往计算机。比较器的主要功能是防止基线信号的传递以减少计算机处理的信号量。这一功能在高分辨质谱状态下特别重要，如当质谱仪的分辨率为 10000 时，有效数字（峰点数）可能仅占扫描时间的 1%。通常阈值取 1。

峰识别的主要功能是排除噪音峰和单离子峰。区别离子峰同尖噪音峰之间的差异一般要求规定构成一个峰的数字样点总数。如果一个峰是离子峰，则：① 在峰的开始处往后，存在一连续的超过某一阈值的采样点数；② 低于一设定值的连续采样点超过一最小值时表示峰

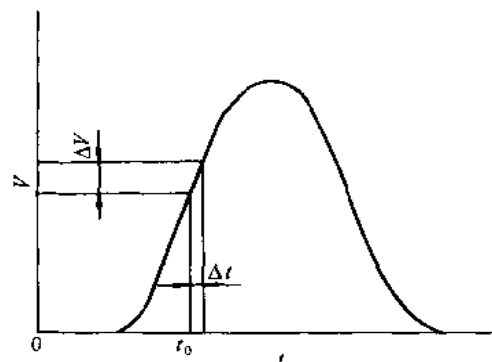


图 3-8 转换时间造成的  
数字值的不确定性

结束。

用上述的峰识别方法可能会引起一些小离子峰被不正确地排除,如图 3-9 所示,如果要求连续样点数大于 4 的话,图中的峰将被删除。

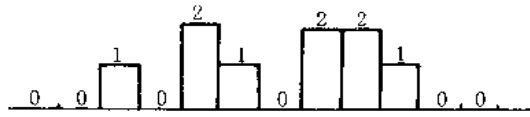


图 3-9 A/D 转换器采集的一些数字样点  
(0 表示低于阈值的样点)

也许改进这一情形的最好办法是在数字阈值之前采用平滑技术。平滑技术主要用来减少那些比离子峰尖锐但不如离子峰强的噪音峰,以改善信噪比  $S/N$ 。这种方法比较费时,但很适合于实验数据的处理。用平滑技术可在一定的范围内除去那些由于统计涨落引起的噪音峰,且可用阈值方法鉴别一些峰。Hiter 和 Biemann 用的平滑方法是:

一旦采到 5 个样点,使用式 3-1 来处理。

$$Y_i^* = \frac{1}{16} \sum_{j=2}^{i+2} C_j Y_{i+j}, [C_{+2}=1, C_{+1}=4, C_0=6] \quad (3-1)$$

式中,  $Y_j$  和  $Y_j^*$  分别为原始样点和平滑处理后的样点值。

这种方法用一个样点左右邻近的两个样点值来平滑。最常用的平滑范围不得超过半峰宽,以便尽可能保持原来的数据结构。

#### 4. 峰位置和峰强的计算

在峰识别的基础上便可进行峰位置和峰强的计算。最常用的两种方法是峰质心法和最大峰强法。

峰质心法如图 3-10 所示,一般是用一个峰的一系列样点值去计算精确的峰位置或精确的时间。对于一个光滑的、对称的峰,最大峰强方法恰好同峰质心法一致。

最大峰强方法的缺点是:① 在弱信号的情况下,由于离子数的统计涨落引起峰形偏离规则状态时(如图 3-11 所示),最大峰强方法比峰质心法所得的结果精度来得差;② 即使在离子数统计涨落是正常的情况下,而且最大峰强方法是测定峰位置的一种最好方法时,有限的采样率意味着最大采样点的时间可能不好是在实际的最大峰处,而可能是在最大采样点同另一邻近点之间的某一时间处。用峰质心法可减少由于有限采样率所引起的这一误差。

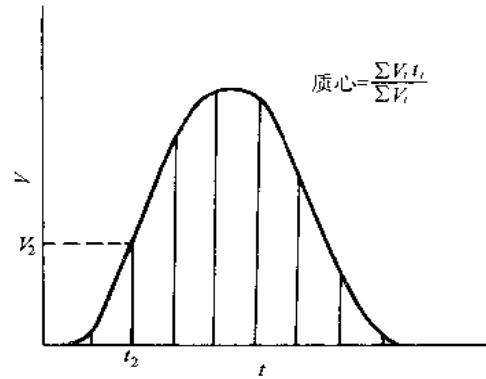


图 3-10 用峰质心法计算峰位置

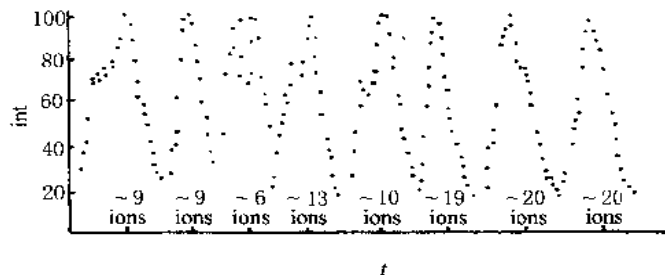


图 3-11 以数学形式输出的典型的低峰峰形

最大峰强方法在计算上远比峰质心法简单,因此是最常用的方法,特别是在 GC-MS 联用仪上。质心法通常比最大峰强法精确,在许多有特殊要求的情形中它能提供可靠的质量数,如



确定高质量处弱峰的峰位置等。

峰强度一般以峰的面积或峰的最大峰高来表示。峰的面积和峰的高度都是直观测量。当峰在时间上的峰宽相同时，用峰面积表示峰强和用峰高度表示峰强所得的结果大致相同。将两种计算峰强的方法作一比较，则通常用峰面积表示峰强误差较小，但是计算比较复杂。

#### 5. 数据转换

数据转换主要指建立一个校正方法，将峰位置（时间、电压等）转换成相应所表征的质量数。通常这一校正方法是由已知的全氟煤油或其他一些校正化合物的标准数据来建立的。计算机根据已知的标准数据建立校正曲线。

通常，计算机是通过识别一些重要的标准谱峰来构造质量-时间（电压等）校正曲线的。从这些标准谱峰拟合成分曲线，并外推或内插至全质量范围，最终构成所需的校正曲线。由于扫描的方式不同，所以相应的扫描函数也不同。

对于三种类型的质谱仪（四极滤质器，飞行时间质谱仪和扇形磁场质谱仪），除少数特殊的应用外，一般选择“自然”扫描函数，它们分别为

四极滤质器：线性扫描

$$m = m_0 + k_1 t \quad (3-2)$$

飞行时间质谱仪：双曲线扫描

$$m = m_0 + k_2 t^2 \quad (3-3)$$

扇形磁场质谱仪：指数扫描

$$\text{从高到低质量} \quad m = m_0 e^{-k_3 t} \quad (3-4)$$

$$\text{从低到高质量} \quad m = m_0 e^{k_4 t} \quad (3-5)$$

当使用全氟煤油标准谱时，计算机首先识别  $m/z$  28 ( $N_2^+$ )、32 ( $O_2^+$ ) 和 69 ( $CF_3^+$ ) 峰，然后识别其他峰，如  $m/z$  81 ( $C_2F_3^+$ )、100 ( $C_2F_5^+$ )、119 ( $C_2F_7^+$ ) 等。当超过某一数目的连续标准谱峰没被正确地预测出，则校正过程结束。人们一般选择最好的几个扫描函数形式（即可以校正到最多的峰质量而出现的预测错误最少）。校正的上限随仪器的不同而不同，而且当仪器受污染时它也会下降。

进行样品谱的采集时，用同样的扫描参数是十分重要的。校正曲线通常保留几小时或几天，这同仪器的性能有关，一般是一天检查 1~2 次校正曲线。在有些现代质谱仪中，通过计算机控制的联动扫描，可以得到非常可靠的校正曲线。

#### 6. 输出形式

经过处理后的质谱数据，可以如下几种常见的形式从计算机输出：

- ① 画出总离子流色谱图（在 GC-MS 联用时，最常使用）；
- ② 打印或显示归一化的棒状质谱图；
- ③ 打印或显示部分或完整的数字形式的质谱数据；
- ④ 在示波器上显示归一化质谱；
- ⑤ 画出质量色谱图（常用于 GC-MS 联用）；
- ⑥ 扣除任一次扫描后的差减谱输出；
- ⑦ 将谱数据以峰质量及相应峰强的关系储存在磁带上；
- ⑧ 用所选倍数因子把所需的部分谱图放大。

### 第四节 计算机辅助质谱解析

GC-MS 联用仪的出现要求加快处理谱图的速度。要做到这一点，计算机是必不可少的。在

过去的 20 年里,各种谱图解释、检索方法纷纷出现,一般可将它们划分为以下三种主要方法:

- ① 理论方法 根据断裂规则预测化合物结构。
- ② 统计方法 即模式识别方法,通过统计分析确定未知物的定性特征。
- ③ 比较方法 即检索方法,它将一未知谱同由已知谱图构成的数据库相互作用以寻找最好的匹配结果。

本节将重点介绍检索方法,因为它是目前最成熟、最常用的方法。同时简要介绍其他两种方法。

### 一、理论方法

理论方法的大多数程序是针对低分辨质谱的,它已应用到饱和碳氢化合物、饱和脂肪醚、饱和脂肪胺、芳香族化合物、酮、醛、烯烃、醇、环烷、烷基苯、烷基吡啶、链状饱和脂肪酸酯等化合物质谱数据的解释上。

在这一方法中,顺序选择下列各类化合物的谱特征:分子离子、主要碎片离子及中性丢失。但由于杂质的存在,或化合物的性质,有时会使得分子离子的确定成为不可能。

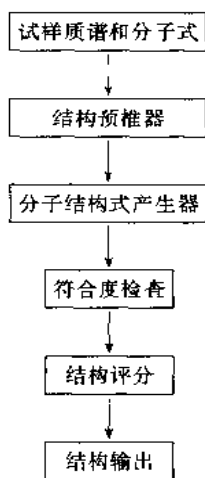


图 3-12 DENDRAL 程序的基本逻辑

大多数理论方法需要分子式方面的信息。如启发程序 DENDRAL 可以算出所有匹配谱的异构体。“启发式”指的是一些规则,用它们可指导搜索以获得唯一正确的解。

DENDRAL 程序包含结构预推器,结构产生,质谱预测,符合度检查和评分功能 5 个子程序(图 3-12)。结构预推程序依据质谱理论来确定未知化合物的化学结构类型,结构式产生器依据输入分子式产生该类化合物的全部分子结构式,质谱预测器对每一产生的结构提供一预测质谱,把分析试样的实验质谱同各预测质谱比较,并计算相似度以评价各化合物结构的符合度,最后依次输出一组最优结构供分析者选择录用。DENDRAL 程序要求计算机有很大的容量,远大于目前微机的容量。DENDRAL 程序除了用质谱方面的启发规则外,还应用其他启发规则,如 IR, <sup>1</sup>H-NMR 或其他物化数据,以改善解析效率。

Mclafferty 等人提出一个基于检查的理论方法——STIRS,它从表 3-2 的各谱特征中算出各种匹配指数。程序对每一匹配因子按 MF 值的大小顺序输出 10 个最好匹配化合物的名称、WLN (Wiswesser 线性编码)、顺序号、分子量、分子式和质谱的最低质量(用以指示标准谱图数据的完整性)。STIRS 认为未知化合物可能是所有这些输出化合物之一或未知物具有这些化合物中多数化合物所具有的那些结构特征。图 3-12 为 DENDRAL 程序的基本逻辑。

表 3-2 STIRS 所用的 9 类谱图数据和 11 项匹配因子

谱图数据类别	说 明	匹配因子
1. 离子系列	$m/z$ 15, 27, 29, 30, 31 和 33~99 离子用来计算 14-离子系列质谱	MF1
2. 低质量特征离子	$\leq m/z$ 39 的最强偶质量和奇质量离子各 3 个	MF2
3. 中质量特征离子	$m/z$ 90~149 ( $M < 150$ 时到 $M-1$ ) 范围的 5 个最强峰	MF3
4. 高质量特征离子	$m/z$ 150~( $M-1$ ) 范围的 5 个最强峰	MF4

续表

谱图数据类别	说明	匹配因子
5. 小质量一次中性丢失	6 个小质量中性丢失对应于失去 O (即 M <sup>+</sup> ) 1, 2, 15~64 和 80 生成的最丰富离子	MF5
6. 大质量一次中性丢失	从 M-65 起, 每 15 个 u 取一个最强峰对应的中性丢失。质量下限是 (M-64~90) 或 m <sup>+</sup> /z <sup>+</sup> (视谁先到而定)	
7. 最丰富的奇质量丢失生成离子的二次中性丢失	选择 (M-odd <sup>+</sup> ) 离子的 6 个最丰富二次丢失。方法同 5	MF7
8. 最丰富的偶质量丢失生成离子的二次中性丢失	选择 (M-even <sup>+</sup> ) 离子的 4 个最丰富二次中性丢失	MF8
	未知谱图的第 8 类数据与参考谱图的第 5 类数据比较	MF9
9. 指纹离子	m/z90~M 范围内每 14 个质量单位区间内取 1 个最强的奇质量离子和 1 个最强的偶质量离子	MF10
总匹配因子	(MF1 + MF2 + 2MF3 + 2MF4 + 4MF5 + 2MF6) / 12	MF11

① odd—奇电子离子。

② even—偶电子离子。

理论方法存在着同化学家自身一样的限制, 因为从低分辨质谱是不能够确定一个化合物的结构的, 除非一些特殊情况。

## 二、模式识别方法

在质谱中模式识别方法主要依据如下概念: 将一张质谱图认作是在  $p$  维空间的一个点, 可用一矢量来表示, 即  $x$ 。如, 有一化合物的集合, 它们的谱图都是用三个主要碎片离子来表征, 这样人们便可在三维空间中用一个点来表征一个化合物。由于离子强度的差别, 即使不同化合物有相同的碎片离子, 也可在三维空间将它们分开。

模式识别方法是一种基于统计分析的方法, 它可使人们研究数据的分类。在质谱中常见的模式识别方法如下:

(1) KNN 方法 ( $k$  个最近邻居) 在 KNN 中, 化合物的质谱可用一个  $n$  维空间矢量来表示,  $i_n$  是质谱中  $m/z=n$  的离子强度,  $F$  是每一个化合物的质谱可被表示为  $n$  维空间的一个点:

$$F_n = (i_1, i_2, \dots, i_n)$$

$n$  维空间各点之间的距离一般用 Euclidean 距离或绝对距离来表示。Euclidean 距离表示为

$$D_E = \left[ \sum_{k=1}^n (i_{uk} - i_{lk})^2 \right]^{1/2} \quad (3-6)$$

绝对距离表示为

$$D_A = \sum_{k=1}^n |i_{uk} - i_{lk}| \quad (3-7)$$

式中,  $i_{uk}$  和  $i_{lk}$  分别表未知和标准谱中  $m/z=k$  的离子强度。KNN 方法允许人们根据数据集中最近邻的  $k$  个谱的类别来区别一未知谱。

(2) 平均谱法 从未知谱同一平均谱的最小距离进行分类, 还可将多维空间图的分布情况设法绘制在两维平面上以便直观处理。每一类化合物被表征成一个样本点  $P$ , 使该类化合物都分布在其周围, 未知谱和样本点  $P$  之间的欧几里德距离 (Euclidean 距离) 可用不同方法得

到。这一方法的主要缺点是，在多研究体系中，数据很难分类。

(3) 学习机方法 一张谱图可表征为一个矢量  $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ ,  $x_i$  ( $i=1, \dots, d$ ) 值是适当处理过的峰强度值，外加一矢量元，它的值是 1。这样便可建立一决策面，通过决策面可将不同类的化合物分开。决策面是一超平面，它的法矢量  $w = (w_1, w_2, \dots, w_{d-1})$  是同决策面垂直的，这一矢量称之为加权矢量。区别函数  $g(x) = w \cdot x$  是两矢量的点积，它使人们可用决策面来区别任一  $d$  维空间的模式点，它的表示如下：

$$\begin{aligned} g(x) &= w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d + w_{d-1} \\ &= |w| \cdot |x| \cos \theta \end{aligned} \quad (3-8)$$

这里  $\theta$  指的是两矢量的夹角。

对那些  $\theta \leq 90^\circ$  的模矢量， $g(x) > 0$ ，反之  $g(x) < 0$ 。这里训练学习指的是通过一已知矢量集(训练集)去寻找其决策面的过程。下面几个因素会影响学习机的成功：

- 数据的特征；
- 被分辨项的选择；
- 训练集的选择。

学习机方法的缺点是，要用大量具有代表性的训练集，要有足够的特征以便对一化合物进行合理的表示，另外它还很费时。当数据为不可分时，学习机方法不如 KNN 方法所得的结果好。

### 三、谱图检索

试图用计算机技术鉴别低分辨质谱的尝试最早是由 Abrahams 和 Stenhagen 提出的。1960 年以后，人们开始大量地研究这一问题。考虑到理论方法遇到的困难和统计方法的缺点，许多研究者认识到将未知谱同已知谱进行比较似乎是最为成功的鉴别化合物的方法。显然，这一方法有两个优点：它仅用低分辨质谱去鉴别一个完全未知的化合物；以及它是一简单的方法，不需要质谱方面的理论知识。但比较方法也有一些缺点，例如需要一个大的数据库。而理论方法则需要有一个好的质谱断裂知识规则集。

当数据库中不存在某一化合物时，只能靠建造一更大型的数据库的方法利用类似性来解决：

相似化合物  $\longleftrightarrow$  相似谱图

根据类似的谱图来测定未知结构的某些属性是可能的。如同其他方法一样，此时不能完全解决鉴别问题。

#### 1. 质谱数据库的构造

当人们希望构造一个数据库时，必须解决以下问题：

- ① 数据的获取和质量评价；
- ② 数据库的规模；
- ③ 检索算法。

一个好的数据库应当有：充裕而正确的数据；适用各种应用的变换方式；有随时修正补充的能力。

数据库的质量和数量直接影响检索结果，也间接影响智能解释程序的结果。目前美国 NBS 的质谱数据库有 42, 231 张质谱图，美国 Cornell 大学的 PBM 程序大约应用 80000 张标准质谱图。

Mclafferty 等人发展了一个评价质谱数据质量的计算机程序,他们提出的 7 个质量因子分别为: ①  $QF_1$ - 质谱的来源; ②  $QF_2$ - 电离条件; ③  $QF_3$ - 高于分子量的杂质; ④  $QF_4$ - 不合理的中性丢失; ⑤  $QF_5$ - 同位素丰度的精度; ⑥  $QF_6$ - 峰的数目; ⑦  $QF_7$ - 最低的  $m/z$  值。谱图数据的质量为这 7 个质量因子的连乘积:

$$Q = \prod_{n=1}^7 QF_n \quad (3-9)$$

若  $Q < 0.5$  就认为谱图的质量有问题, 不适合作参考谱图。较低的  $QF_n$  部分, 表明此部分数据需要修改, 若无法修改, 则需重测谱图。

Domokos 等研究表明, 许多质谱数据库存着严重的质量问题, 上述的计算机程序不能真正解决“标准数据”的质量问题 (见表 3-3~表 3-6)。

表 3-3 在分子峰及其同位素峰之上仍有强度超过 1%、5%和 30%的质谱图数目

数据库	总谱图数	质谱图数		
		1%	5%	30%
SISCOM	约 6000	232 (4%)	33 (0.6%)	1 (0%)
EPA/NIH	38800	6272 (16%)	1636 (4%)	339 (0.9%)
CORNELL	约 41400	6886 (17%)	1673 (4%)	272 (0.6%)

表 3-4 基峰之后无同位素峰的谱图数目

数据库	SISCOM	EPA/NIH	CORNELL
谱图数	8 (0.1%)	4095 (10.6%)	3868 (9.3%)

表 3-5 离子强度数据不真实的谱图数目

数据库	SISCOM	EPA/NIH	CORNELL
谱图数	0 (0%)	1473 (3.9%)	1481 (3.6%)

表 3-7 列出英国质谱数据中心 (MSDC) 数据集中 1~3750 号质谱的质量分布。

表 3-6 质谱的最低  $m/z$  值分布

数据库	最低 $m/z$ 值大于以下各值的谱图百分数/%		
	29	40	50
SISCOM	1	0.2	0
EPA/NIH	53	33	13
CORNELL	54	31	13

表 3-7 MSDC 数据集的质量分布

谱图质量	张数	所占比例/%
正确	3510	93.6
数据不完整	162	4.3
错误	78	2.1

## 2. 谱图压缩

为了减轻计算机存储容量的压力以及加快谱图检索速度, 质谱数据库中一般不贮存化合物的全谱 (即一张谱的所有峰), 所以必须进行谱图压缩。常见的压缩谱图方法有二元编码法。在  $m$  个质量数区域内选  $n$  个最强峰, 在全谱范围内选  $N$  个最强峰、STIRS 法、PBM 法等<sup>[1~8]</sup>。

在实际应用中应区别谱图的来源:

(1) 实验测得的谱图 在一定质量范围内的所有峰都被记录下来, 在  $m/z$  28 及 32 处的峰常常忽略 (避免空气引起的干扰)。

(2) 文献中的谱图 大多数情况下, 这种谱图只包括作者归属过的离子碎片, 通常是按峰强从大到小排列。

(3) 计算机中存贮的格式化谱图 它是依据某一压缩谱图的方法将谱图存入计算机的, 这种压缩谱图的方法会造成或多或少的谱学信息丢失。

(4) 用于未知物定性的某一部分格式化谱图 它只同所需定性的未知物有关。

## 3. 谱图检索的各种算法

谱图检索方法是目前有机质谱解释中最广泛采用的一种计算机方法。现代的商品化质谱仪都随机带有质谱检索系统。在质谱检索中最为重要的是选择在检索过程中的检索策略和决策判据。

检索策略分为正检索和逆检索两种。正检索以未知谱图为基点与参考谱比较,该方法回答的问题是“该未知谱图表示哪个化合物?”。对于正检索系统,未知谱必须与参考谱以同样的方法进行压缩,然后才能与参考谱图比较。在逆检索系统中,无需对未知谱进行压缩,比较是以参考谱为基点进行的,它试图回答的问题是“未知谱是否包括化合物K?”,比较过程是从未知谱中找出和参考谱相匹配的那部分谱图数据,然后再进行详细的比较计算。因而,该方法只承认未知谱中和参考谱相匹配峰的正确性,在很大程度上排除了杂质峰的干扰,对于混合谱也可给出正确的鉴定结果。由于未知谱图无需压缩,使得逆检索系统的比较算法较为灵活、多变,必要时可用不同压缩方法组建同一数据库,从而改善系统的性能。正检索系统承认未知谱中所有峰的正确性,并在此基础上对未知谱进行压缩处理。因而,正检索系统得出的结果,容易受到杂质峰的干扰,不能用于混合物谱图的鉴定,在压缩谱图前必须扣除本底。此外,由于必须压缩未知谱,正检索系统在组建和比较算法上都受到一定的限制,不如逆检索系统灵活。逆检索是由 F. P. Abramson 在 1975 年最先提出的。在他以前的检索系统所采用的都是正检索。在组建检索系统时,两种检索策略的选择,要受到系统所采用的压缩方法的限制。如果采用人工选取特征峰方法组建谱图库的系统,只能采用逆检索;如果采用离子系列方法对谱图进行压缩则只能选用正检索方法。

决策判据决定了未知谱同标准谱之间的比较方式,同时也就决定了系统对参考谱图提供的信息的利用程度。通常一张质谱图数据等价于  $N$  对数据的集合(峰、峰强),如果用峰强为 0 表示该峰不存在,则不同化合物的谱图在数据库表示上都是相同的。而且由于用同一单位表示峰强,因此决策判据可简化为各峰强间的简单比较。如果  $S_1$  为一未知谱的峰强集合,  $S_2$  是一参考谱的峰强集合,则可将比较数据表示为函数  $F(S_1, S_2)$

$$\text{如 } S_1 = S_2, \text{ 则 } F(S_1, S_2) = 0$$

实际上,函数  $F$  总是大于 0,  $F$  值越接近于 0, 两谱也就越相似,通常是定义一阈值  $F_c$ 。

如  $F \leq F_c$ , 则两化合物为相似化合物;

如  $F > F_c$ , 则两化合物为不相同化合物。

根据函数  $F$  的形式和性质(对称性、连续性),函数  $F$  可用于分类检索方法。一般情况下,如果  $F$  的形式比较复杂,则可更有效地利用参考谱图提供的信息,提高系统的选择性、可靠性;反之简单的  $F$  形式可以大大提高检索速度,但往往造成系统的结果的低可靠性。人们或者用经验或者用理论(如概率论等)来决定函数  $F$ 。

我们这里介绍几种主要的算法:

(1) 基于峰强的二进制表示的算法 在某一峰位置上是否有峰存在取决于阈值  $I_c$ ,

如  $I \geq I_c$ , 则  $I = 1$  (有峰存在)

如  $I < I_c$ , 则  $I = 0$  (无峰存在)

Grotch 用下列函数作为判据函数

$$F = \mu N + \sum_{i=1}^M [(XOR)_i - \mu (AND)_i] \quad (3-10)$$

式中,  $\mu$  是逻辑与 (AND) 的加权因子 (Grotch 发现  $\mu = 2$  时效果最佳),  $N$  是未知谱中峰的数目,  $M$  是相比较的峰个数, (XOR)、(AND) 分别为逻辑或、逻辑与操作。

峰强二进制表示法易受峰强变化或化合物含有杂质的影响。

(2) 基于峰强排列的方法 Knock 等提出用参考谱中  $N$  个最强峰同未知谱中  $N$  个最强峰进行比较, 由下式算出匹配因子

$$F = \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^A (N - |i - j|_k) \quad (3-11)$$

这里  $A$  是不考虑顺序时两谱  $N$  个最强峰中, 质量数相同的峰个数,  $i$  和  $j$  是同一质量峰在两谱  $N$  个最强峰序列中的各自的顺序数。

(3) 基于峰强数据的方法 大多数峰强数据的算法是用绝对峰强差作为一匹配判据, 但具体使用的计算函数 ( $F$ ) 不尽相同<sup>[9~12]</sup>。例如,  $F = \sum_{n=1}^N |I_r - I_u|_n$ ,  $F = \sum_{n=1}^N |I_r^{1/2} - I_u^{1/2}|_n$ ,  $F = \sum_{n=1}^N (I_r - I_u)_n^2$  ( $\sum_{n=1}^N I_u^2 = 1$ ) 等等。式中  $I_u$  和  $I_r$  分别表示未知谱和已知谱中的峰强。

(4) PBM 方法 在 McLafferty 等人提出的基于概率匹配的 PBM 方法中, 所用的决策判据是,

$$F = 1/2^K \quad (3-12)$$

当  $K > K_{max}$  时,  $F \rightarrow 0$ , 这里  $K = \sum K_i$ 。一个峰  $i$  的  $K_i$  值被解释为: 随时从谱图库中选取出, 它们的谱数据可用于解释  $i$  存在的平均化合物数是  $2^{K_i}$ 。

从随机选出的  $2^{K_i}$  个化合物得到解释峰  $i$  的可能性是  $1/2^{K_i}$ , 对于整个谱图则是  $1/2^K$ 。其中每个  $K_i$  值都是四项因子组成的, 这四项因子可从参考谱库中用统计和经验的方法算出。

$$K_i = (U_i - A_i + W_i - D) \quad (3-13)$$

这里,  $U_i$  是峰  $i$  的唯一性因子;  $A_i$  是根据峰强对  $U_i$  的修正因子;  $D$  是稀释因子;  $W_i$  是偏差限度因子。  $W_i$  和  $D$  同  $I_u/I_r$  ( $I_u$ ——未知峰峰强度;  $I_r$ ——已知峰峰强度) 的比值有关; 如果  $I_u/I_r$  落在偏差限度以外, 则  $K_i = 0$ 。

PBM 的基本出发点是假设一张谱中的各峰是相互独立的, 某一特征峰在谱库中出现的频率越低, 相应峰的特征意义就越强。

## 参 考 文 献

- 1 Grotch, S.L. Anal Chem, 1970; 42: 1214
- 2 Hertz H.S. et al. Anal Chem. 1971; 43: 681
- 3 Kain-Sze Kwok et al. J Amer Chem Soc, 1973; 95: 4185
- 4 Sweeley C.C. et al. J Chromatog, 1974; 99: 507
- 5 Abramson Fred P. Anal Chem, 1975; 47: 45
- 6 Geoff Dromey R. Anal Chem, 1976; 48: 1464
- 7 Damen H. et al. Anal Chem Acta, 1978; 103: 289
- 8 Rasmussen G.T. et al. J Chem Inf Comput Sci, 1979; 19: 98
- 9 Geoff Dromey R. Anal Chem, 1979; 51: 229
- 10 Crawford L.R. et al. Anal Chem, 1968; 40: 1464
- 11 Crawford L.R. et al. Anal Chem, 1968; 40: 1469
- 12 Grotch S.L. Anal Chem, 1973; 45: 2

## 主要参考文献

- 1 季欧, 质谱分析法, 上册. 北京: 原子能出版社, 1978
- 2 季欧, 李玉桂, 质谱分析法, 下册. 北京: 原子能出版社, 1988

- 3 刘炳璋. 质谱学方法与同位素分析. 北京: 科学出版社, 1983
- 4 周华编著. 质谱学及其在无机分析中的应用. 北京: 科学出版社, 1986
- 5 丛浦珠编著. 质谱学在天然有机化学中的应用. 北京: 科学出版社, 1987
- 6 McFadden W H 著. 周自衡等译. 气相色谱-质谱联用技术. 北京: 科学出版社, 1983
- 7 Adams F, Gijbels R, Grieken R V 主编. 祝大昌译. 无机质谱法. 上海: 复旦大学出版社, 1993
- 8 Beynon J H. Mass Spectrometry and Its Applications to Organic Chemistry. Amsterdam: Elsevier Publishing Co. . 1960
- 9 Biemann K. Mass Spectrometry: Organic Chemistry Applications. New York: McGraw-Hill, 1962
- 10 Mitchell V B. Fourier Transform Mass Spectrometry. Washington, DC: ACS Symposium, 1987
- 11 White F A, Wood G M. Mass Spectrometry Application in Science and Engineering. New York: John Wiley & Sons, 1986
- 12 Niessen W M A, Greef J V d. Liquid Chromatography-Mass Spectrometry. New York: Marcel Dekker, Inc. . 1992
- 13 王欲知编著. 真空技术. 成都: 四川人民出版社, 1980
- 14 亚开耳著. 清华大学无线电系译. 真空的获得和测量. 北京: 国防工业出版社, 1958
- 15 Chapman J R. Computer in Mass Spectrometry. London: Academic Press, 1978
- 16 Stephen R H. Computer-Supported Spectroscopic Database. New York: Ellis Horwood Ltd. , 1986
- 17 张如洲. 微型计算机数据采集与处理. 北京: 北京工业学院出版社, 1987
- 18 张福炎. 微型计算机 IBM-PC 的原理与应用. 南京: 南京大学出版社, 1984
- 19 Busch K L. Techniques and Applications of Tandem Mass Spectrometry. New York: VCH Publishers, 1988



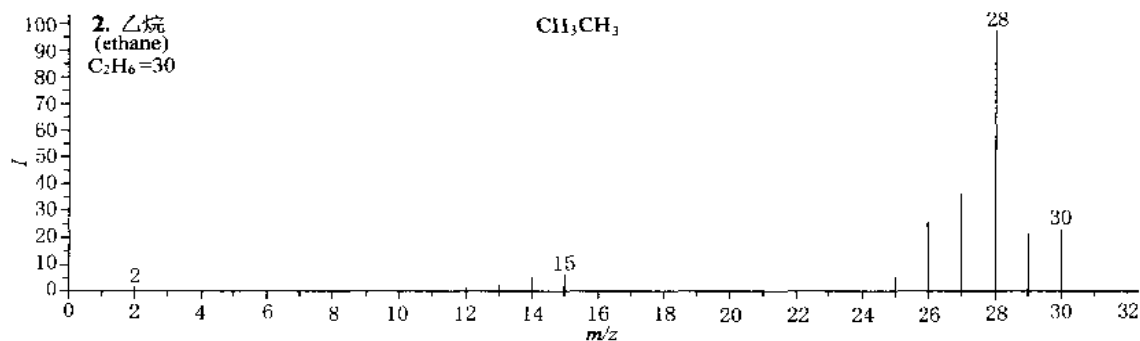
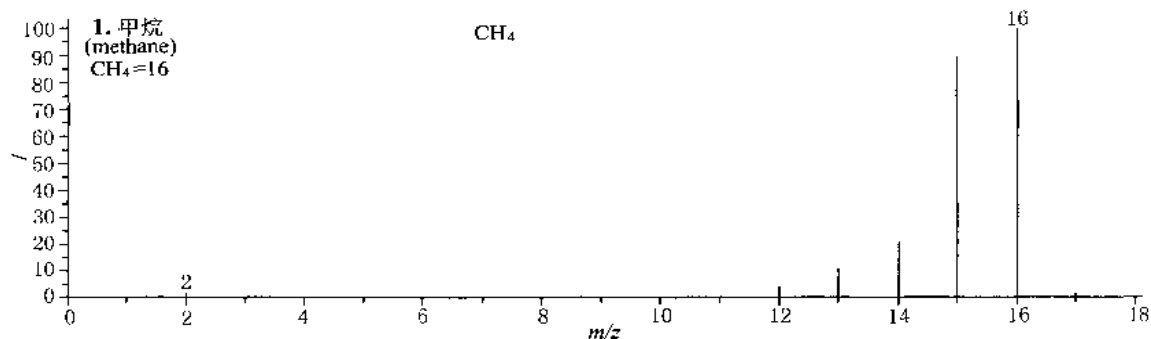
## 第二篇 一般有机化合物的质谱

### 第四章 烃类和卤代烃类

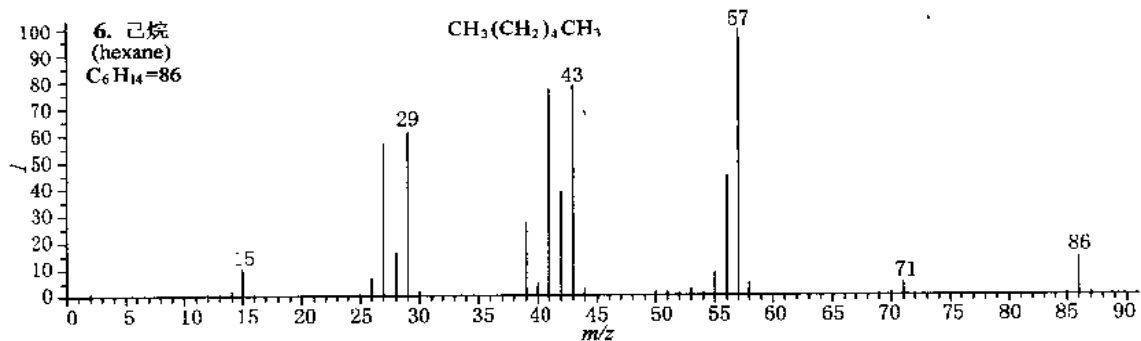
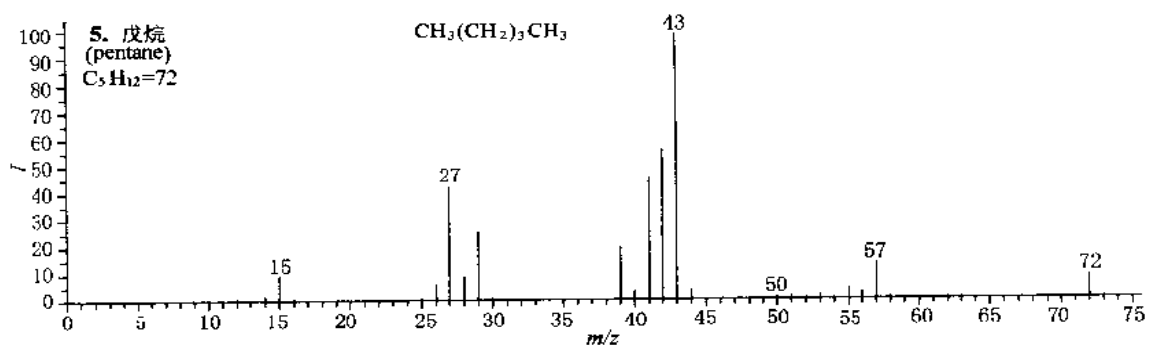
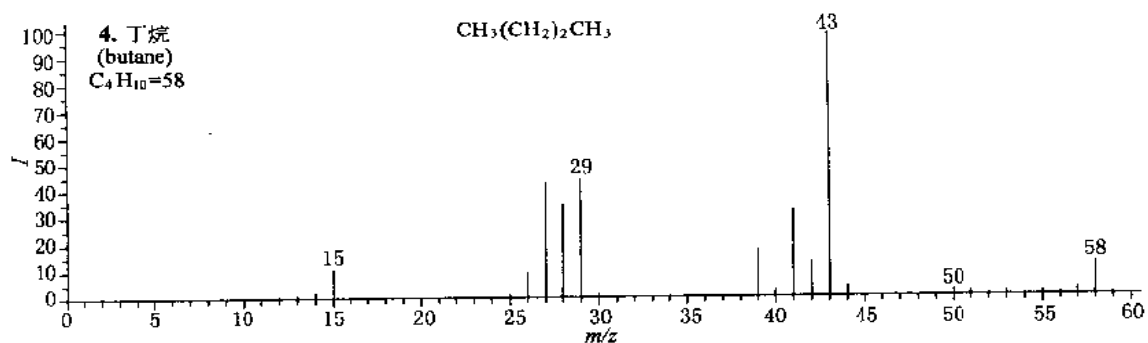
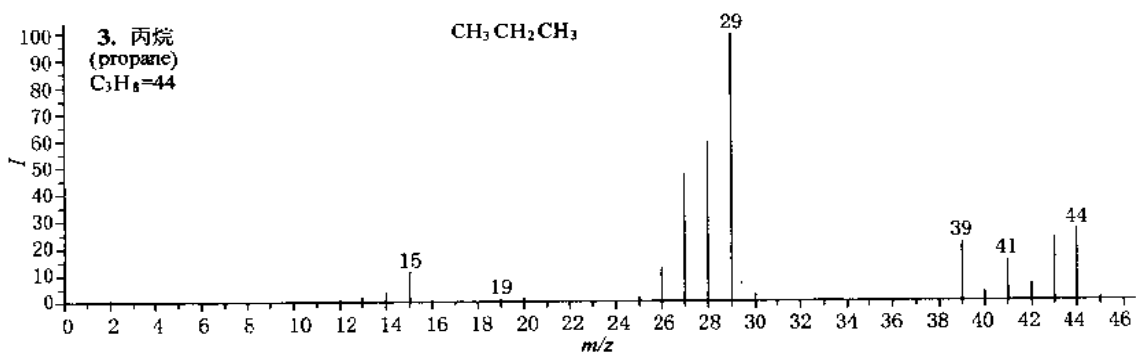
#### 第一节 烃 类

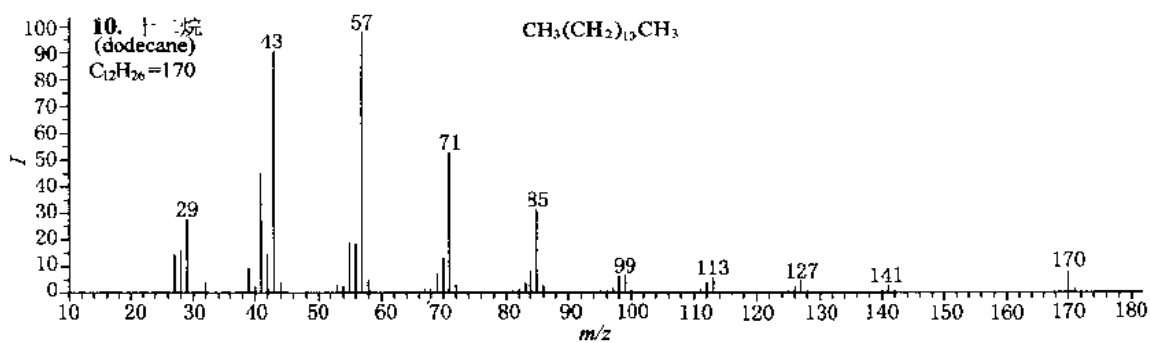
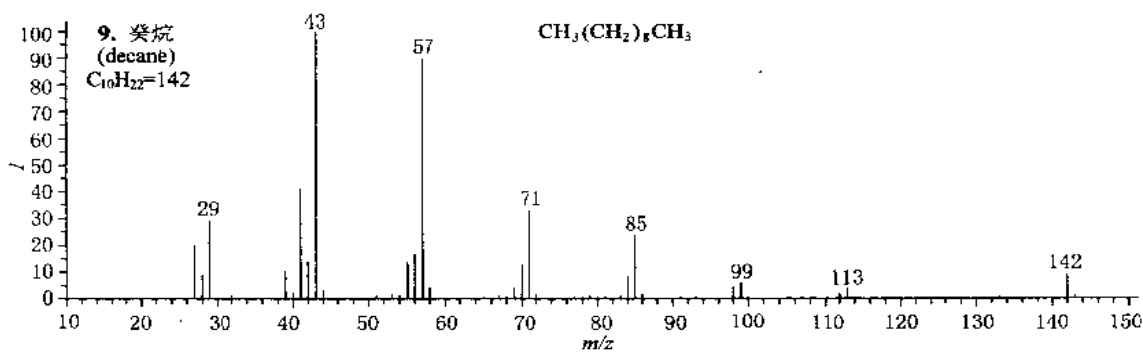
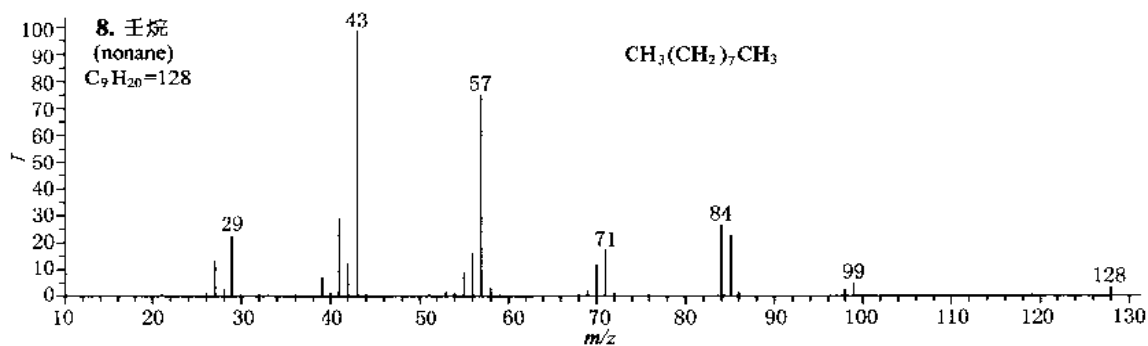
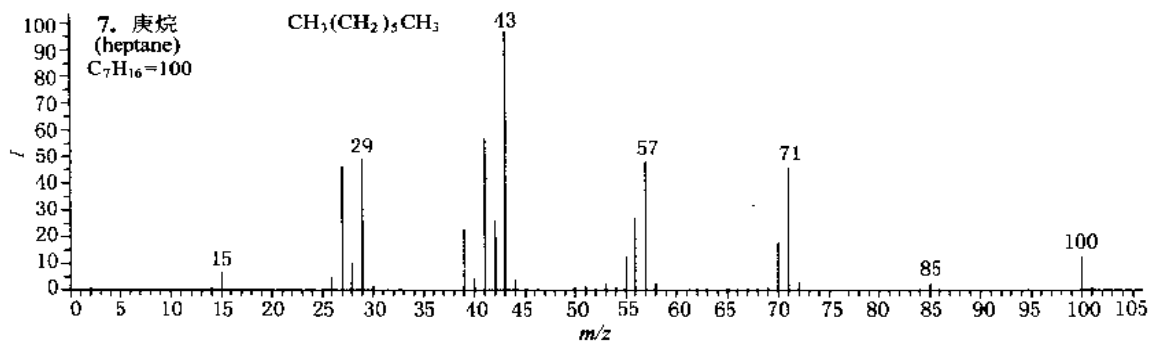
##### 一、正构脂肪烃类

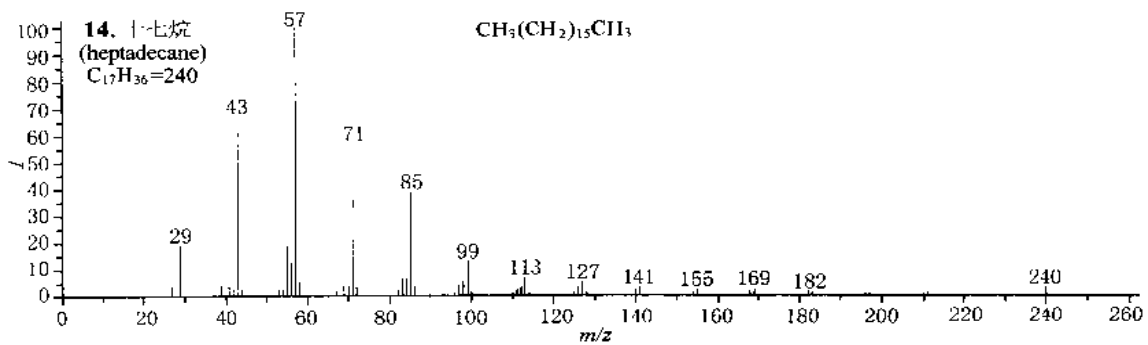
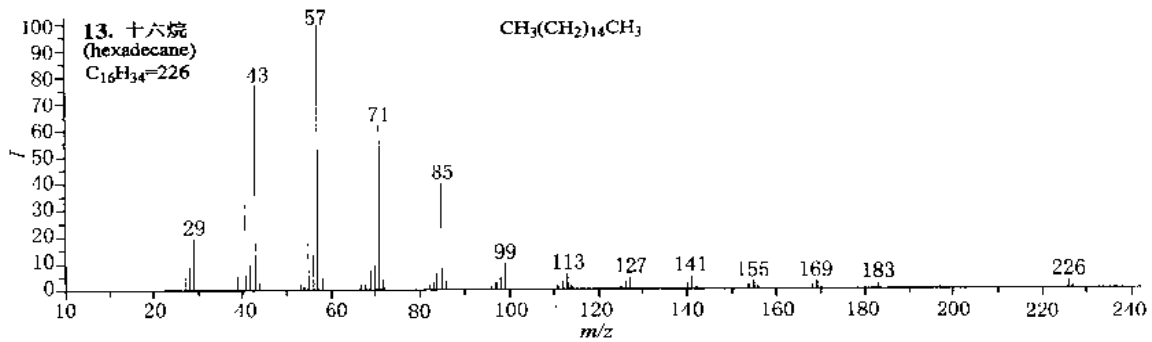
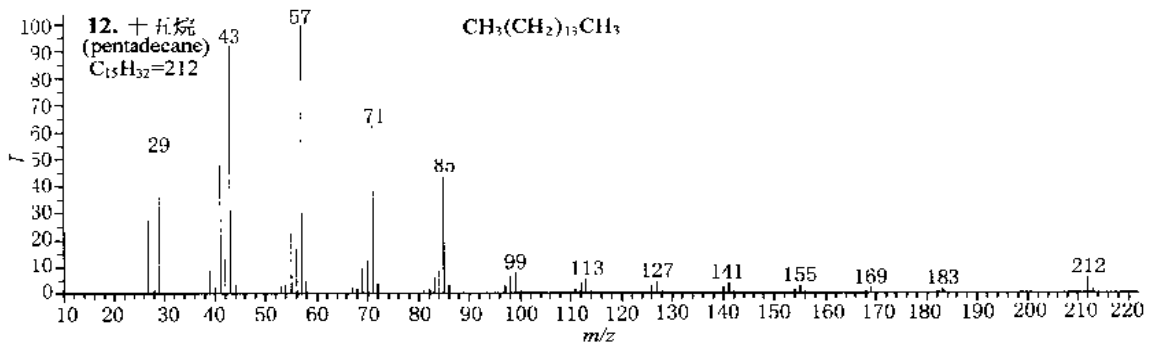
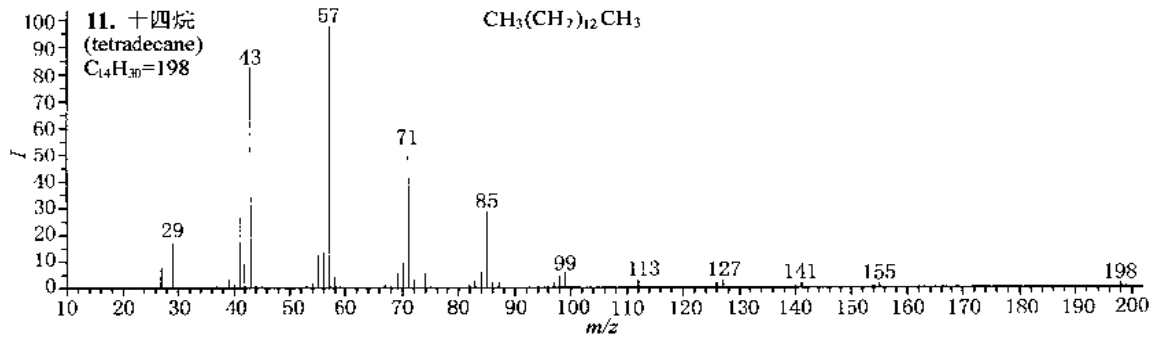
甲烷(1)<sup>①</sup>的分子离子  $m/z$  16 是基峰, 主要裂解是失去氢原子生成甲基离子  $m/z$  15。乙烷(2)的裂解也是失去氢, 但生成的乙烯离子  $m/z$  28 是基峰。丙烷(3)的基峰是乙基离子  $m/z$  29, 为  $M-CH_3$  的产物。丁烷(4)的基峰  $m/z$  43 也是  $M-CH_3$  的产物。戊烷(5)的基峰也是  $m/z$  43 ( $M-C_2H_5$ ), 而已烷(6)的基峰是  $m/z$  57 ( $M-C_2H_5$ )。离子  $m/z$  43 和 57 变强, 说明含 3 或 4 个碳原子的离子最为稳定, 这在更大的正构烷烃中、例如自癸烷(9)开始、以上的烷烃中最为明显。正构烷烃的另一质谱特征是每相差 14 个原子质量单位(简作 u, 下同)有一个较强峰, 而整体地貌<sup>②</sup>具有正态曲线形的离子分布, 分子量越大越明显。

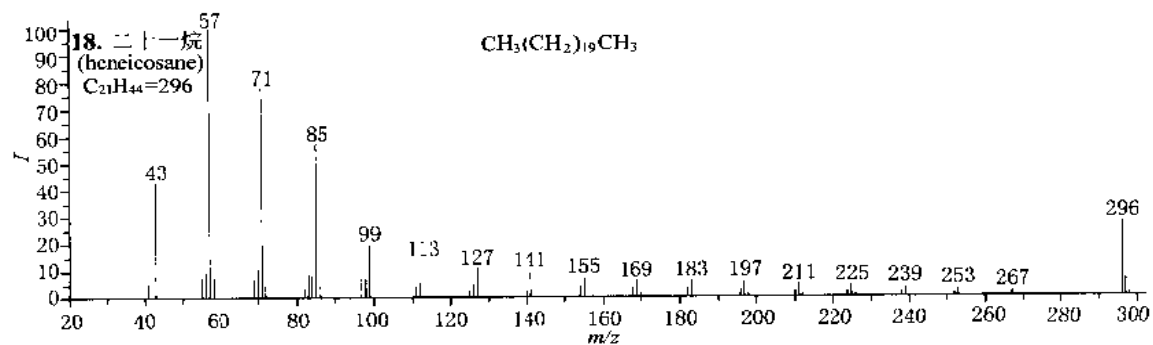
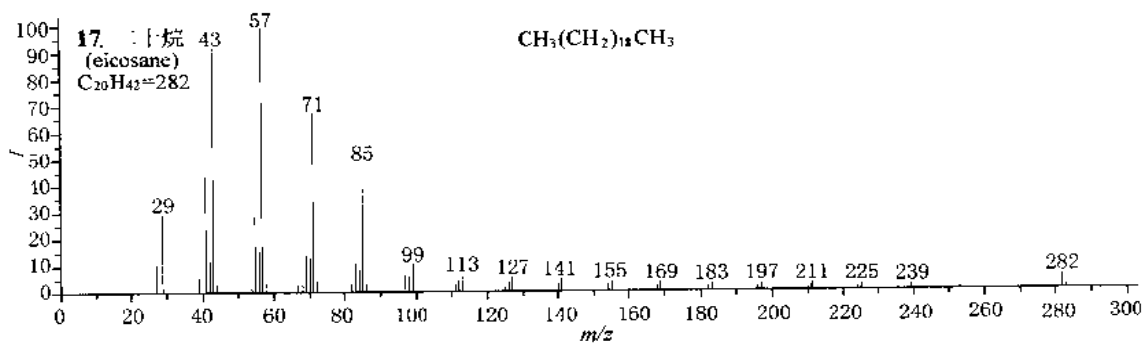
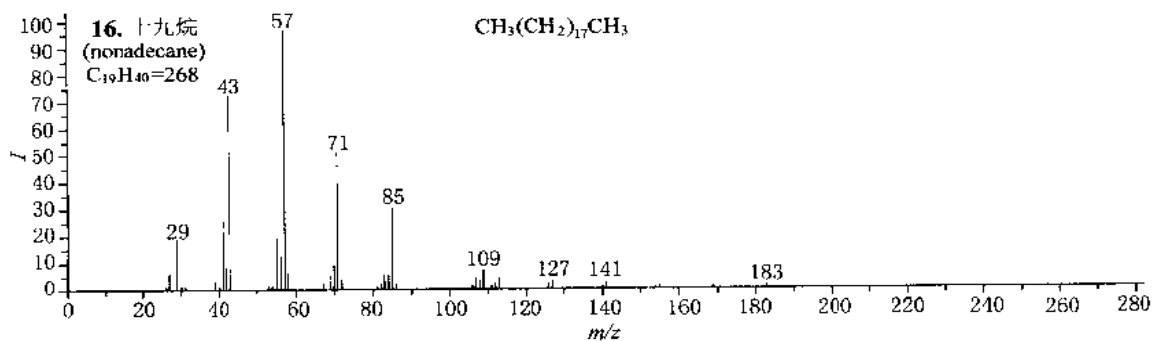
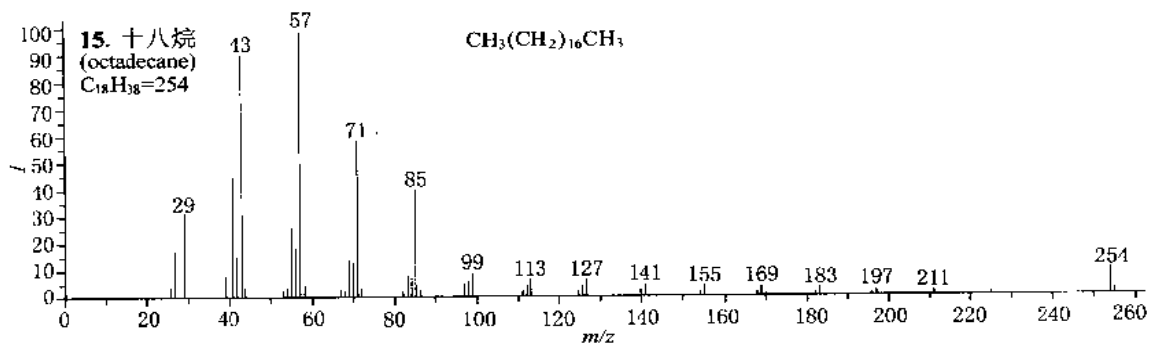


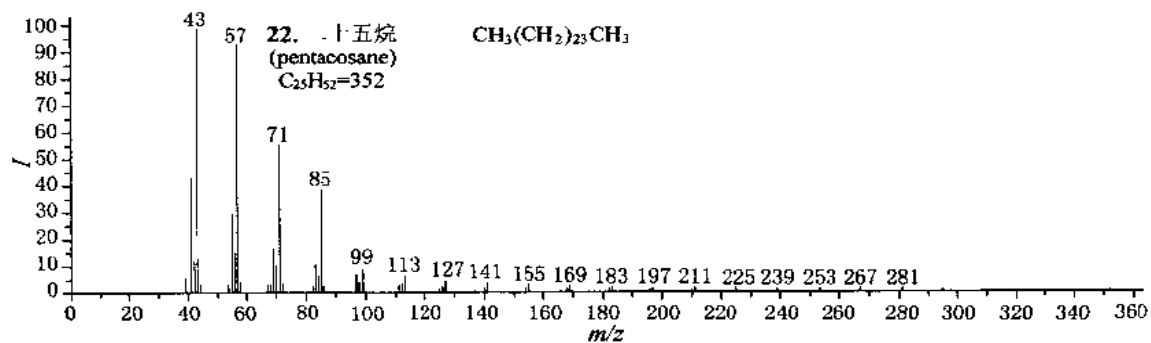
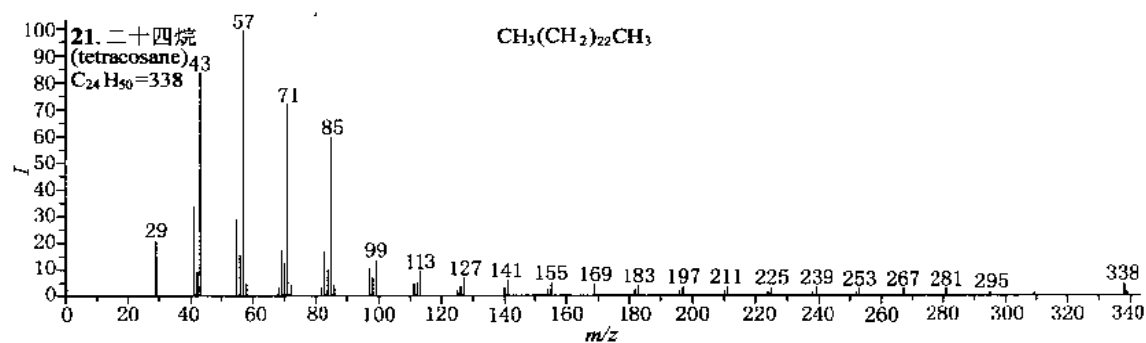
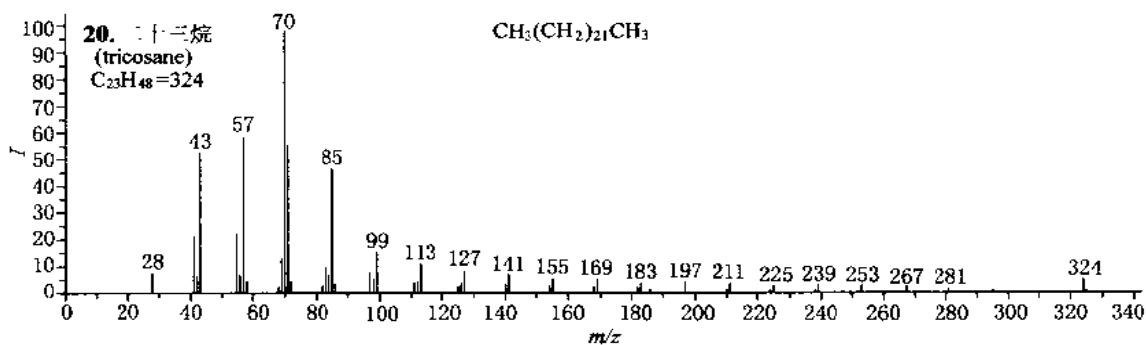
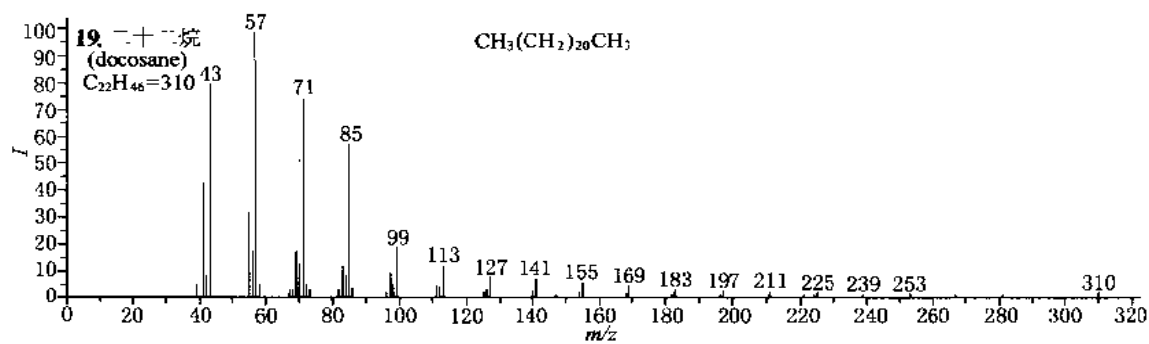
- ① 括号内的数值是谱图部分化合物的编号。  
② 所谓“地貌”是指大致的质谱图形。

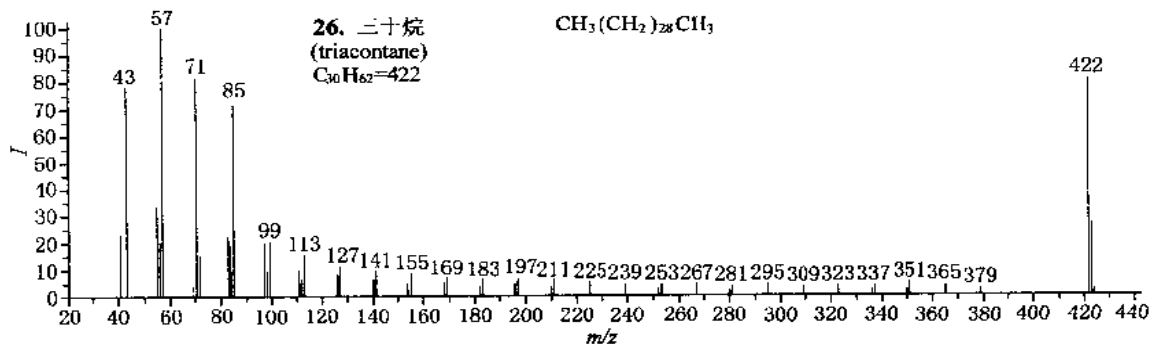
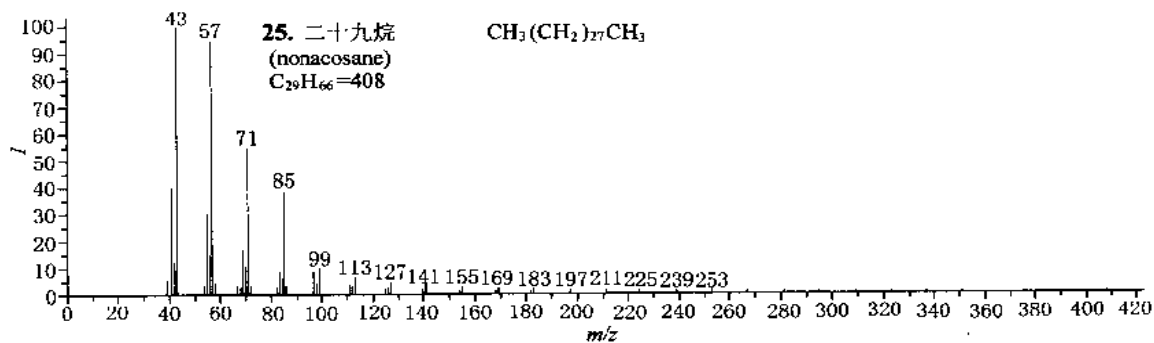
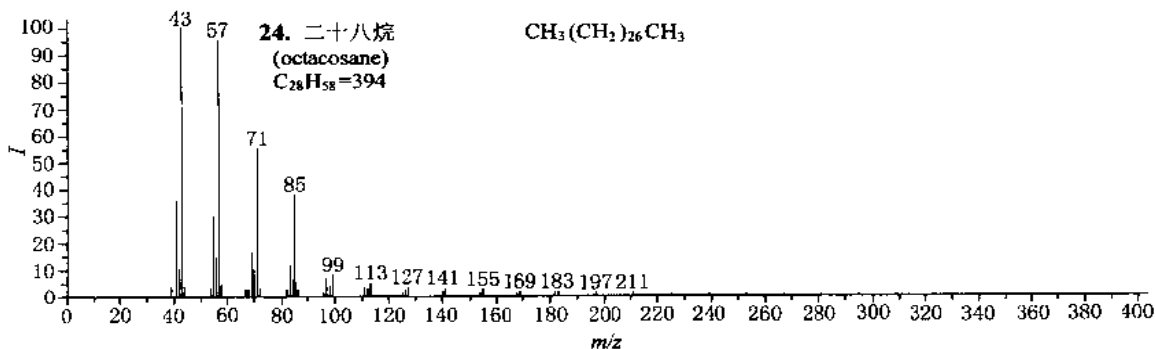
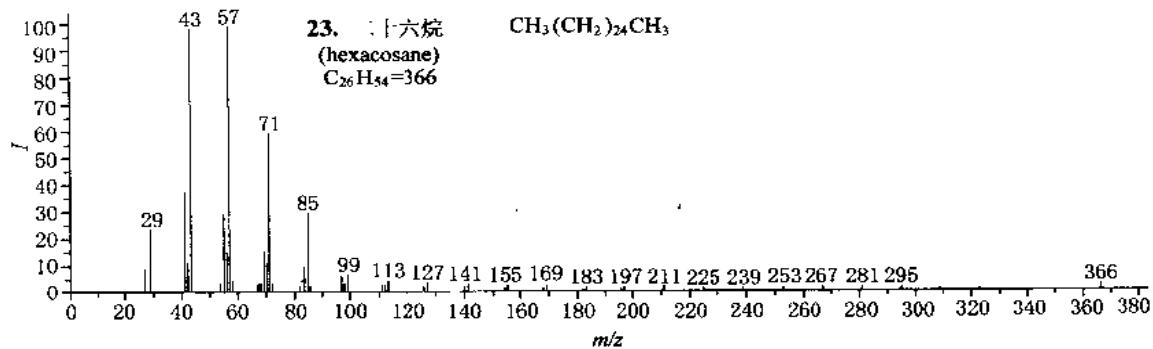


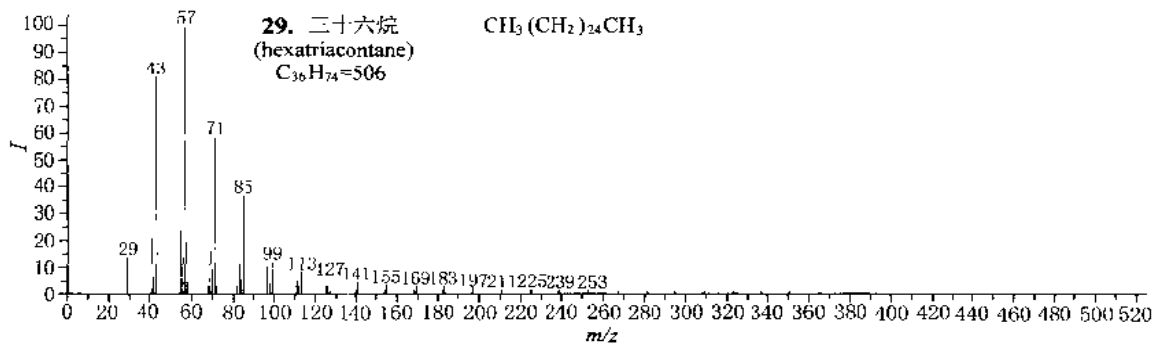
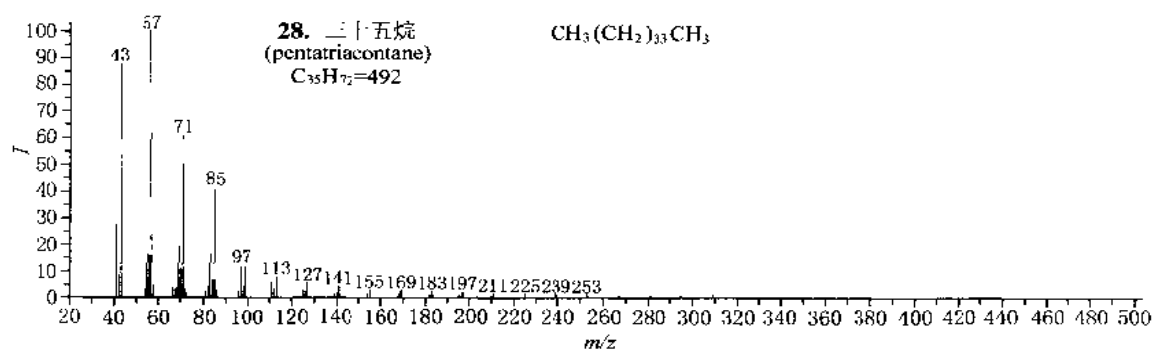
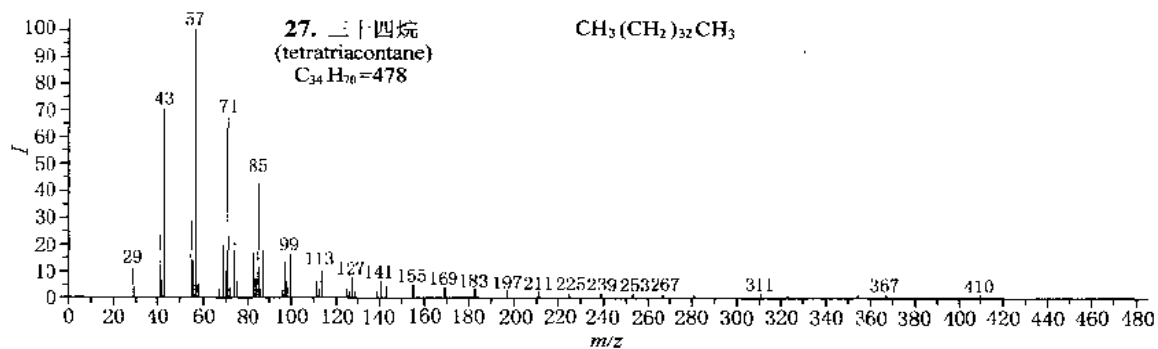








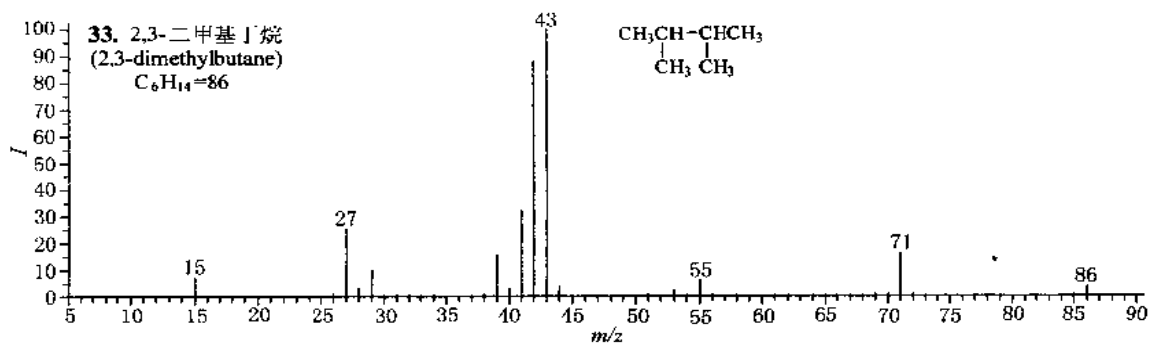
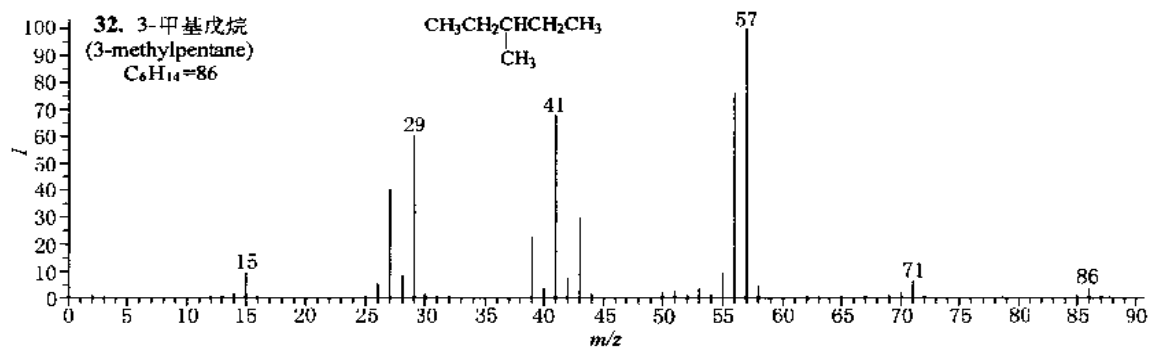
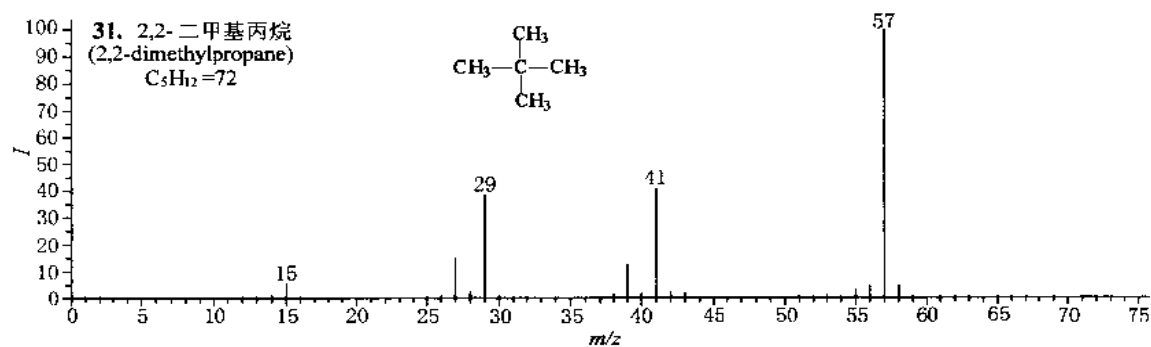
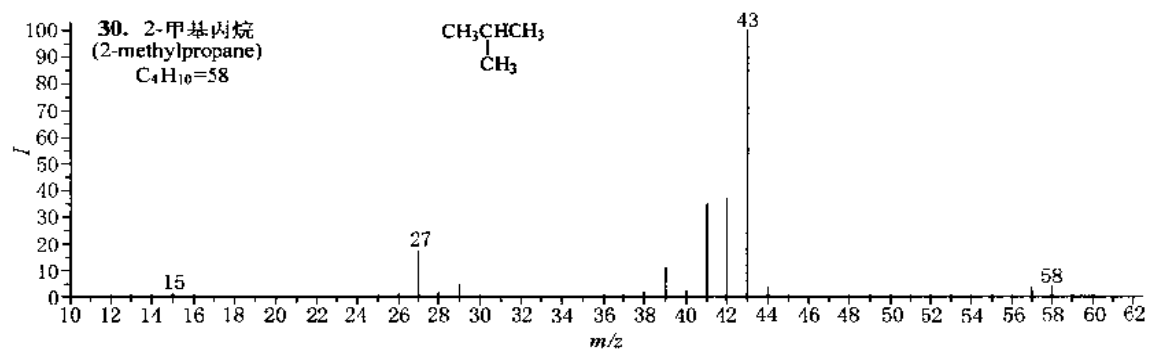


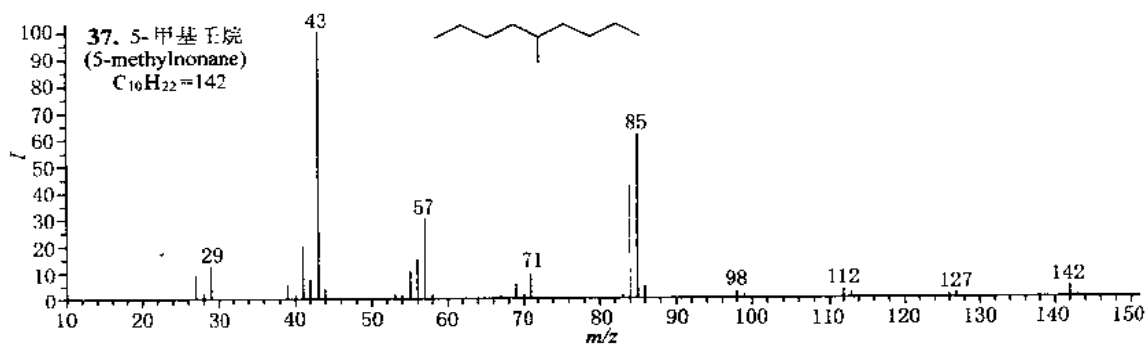
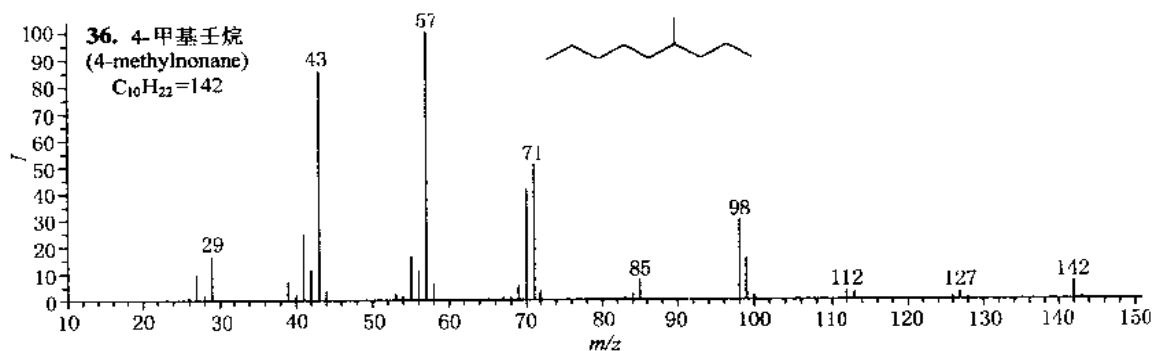
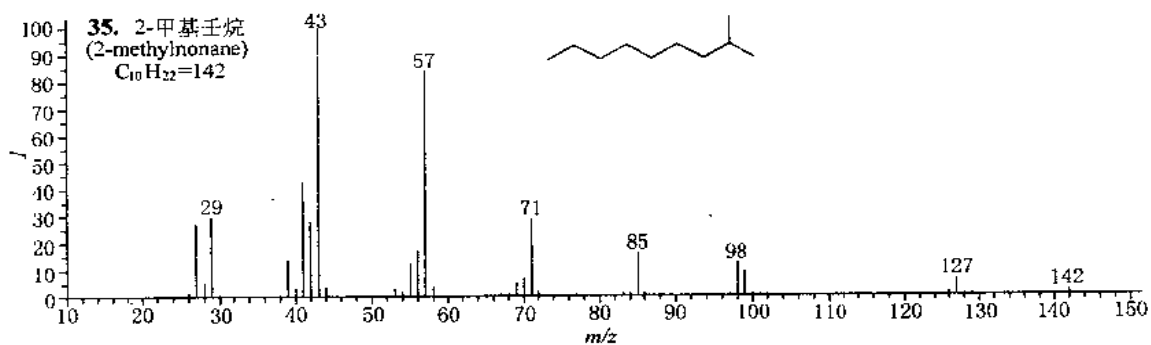
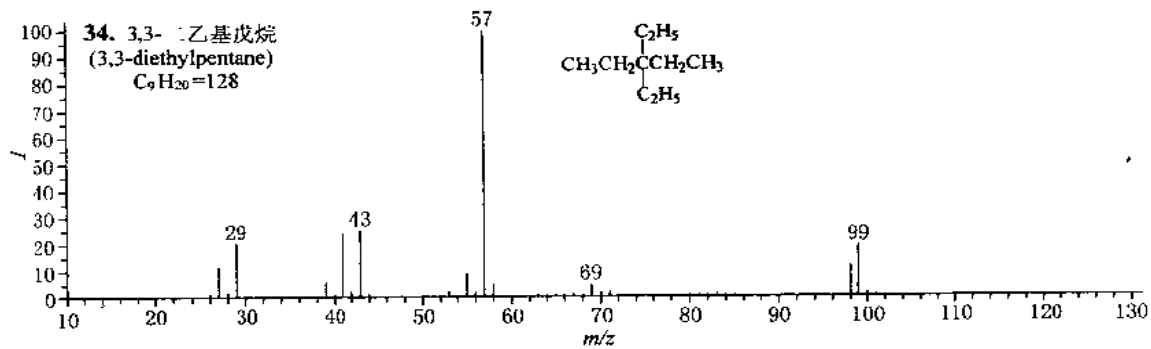


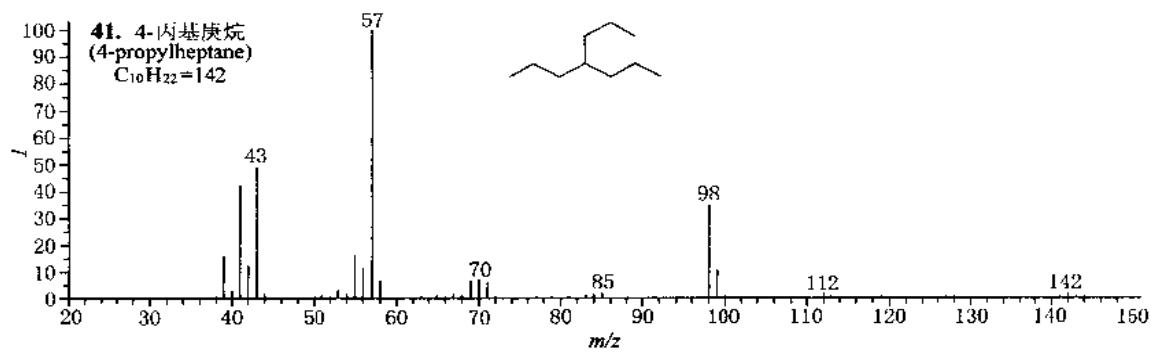
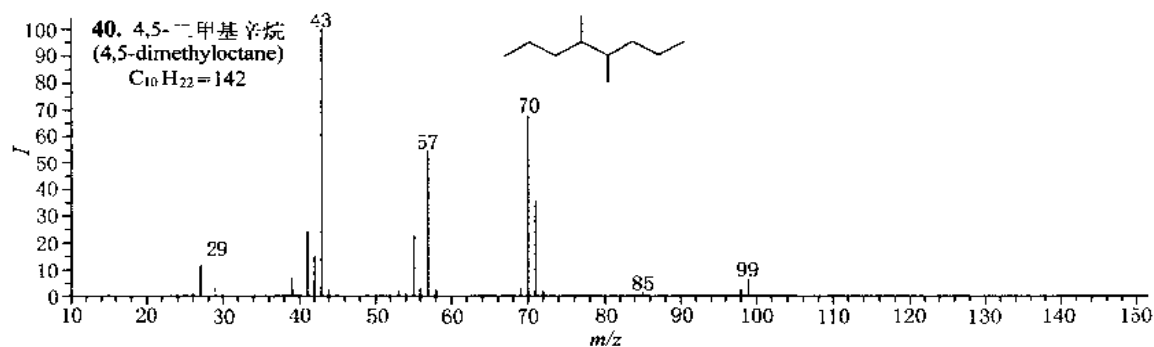
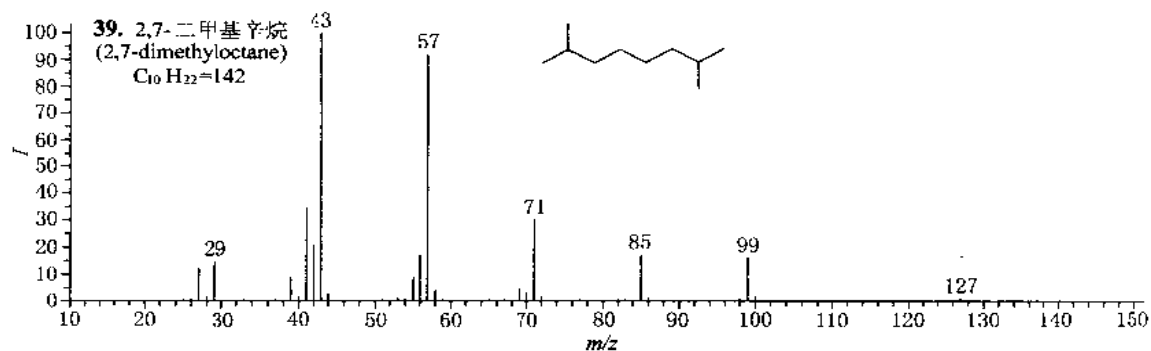
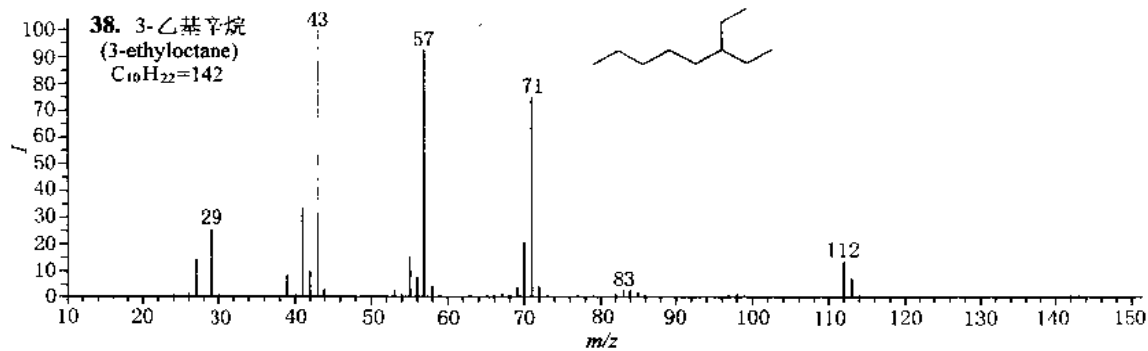
## 二、支链脂肪烃类

支链脂肪烃的质谱特征是分支处的碳-碳键容易裂解，并能继续失去氢原子。例如 2-甲基丙烷 (30) 和 2,2-二甲基丙烷 (31) 都很易失去甲基，3-甲基戊烷 (32) 很易失去乙基，并再失去 1 个氢原子生成离子  $m/z$  56。带有支链的长链烷烃类，同样如此裂解，支链处的碳-碳键裂解，使正态曲线产生突起。



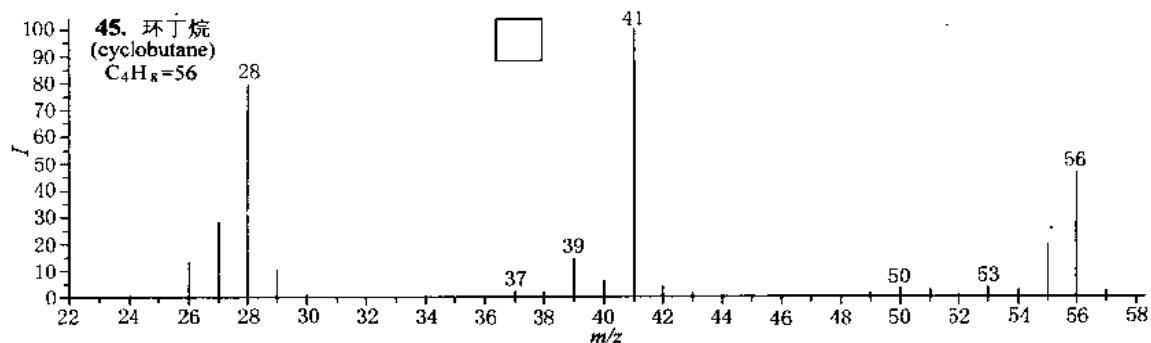
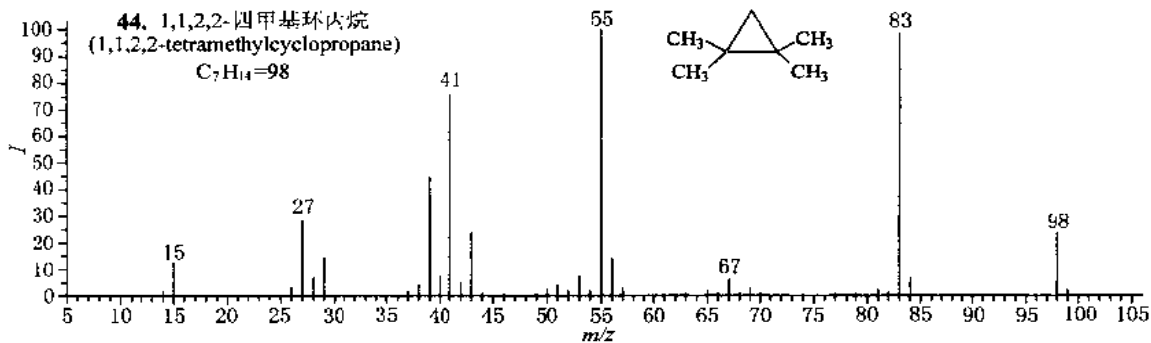
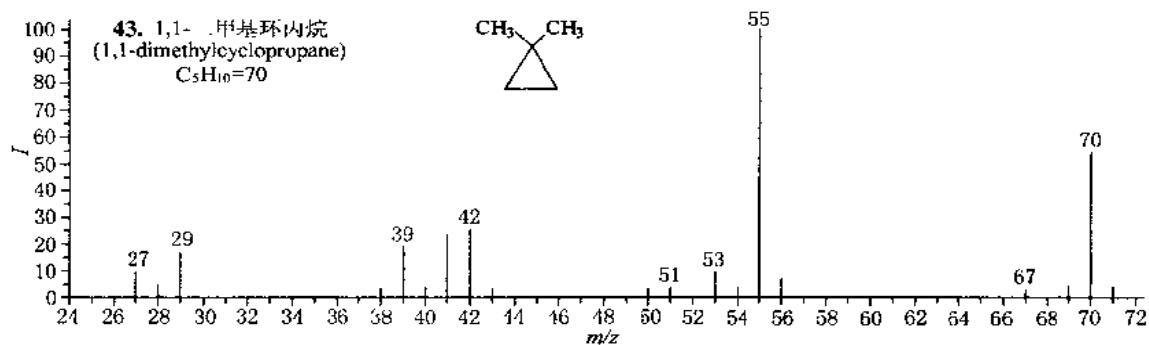
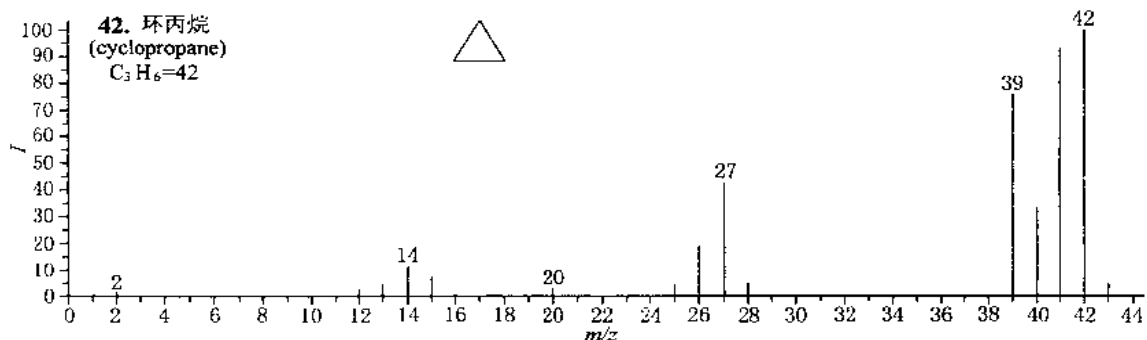


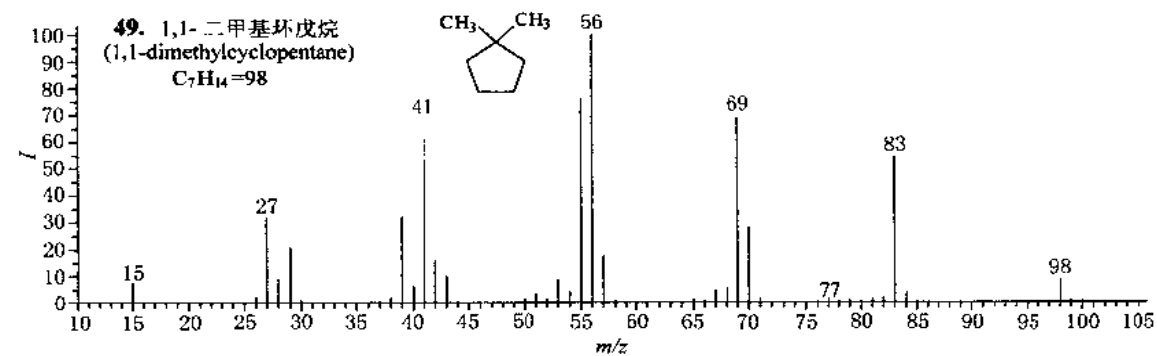
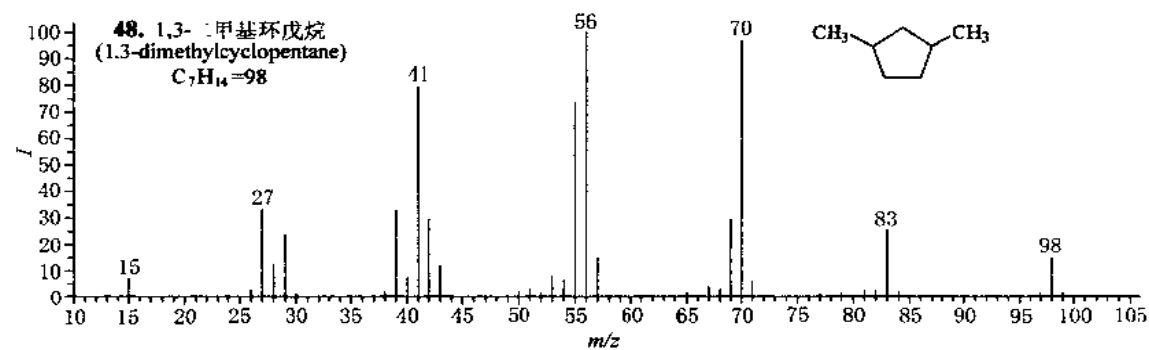
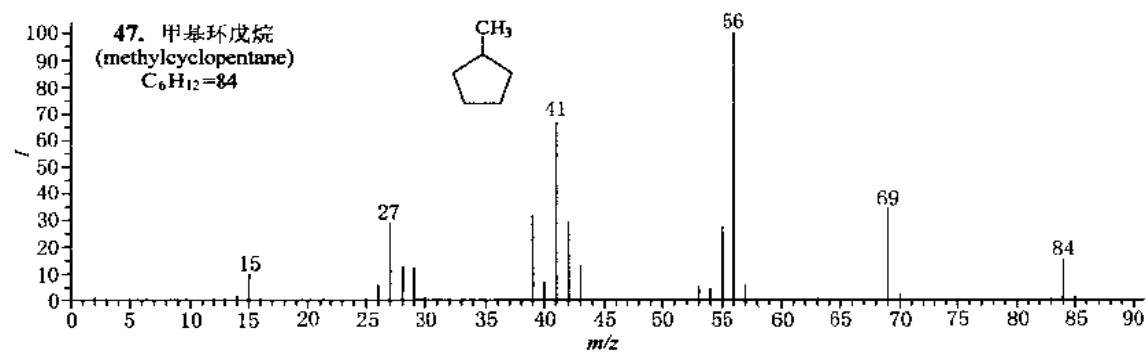
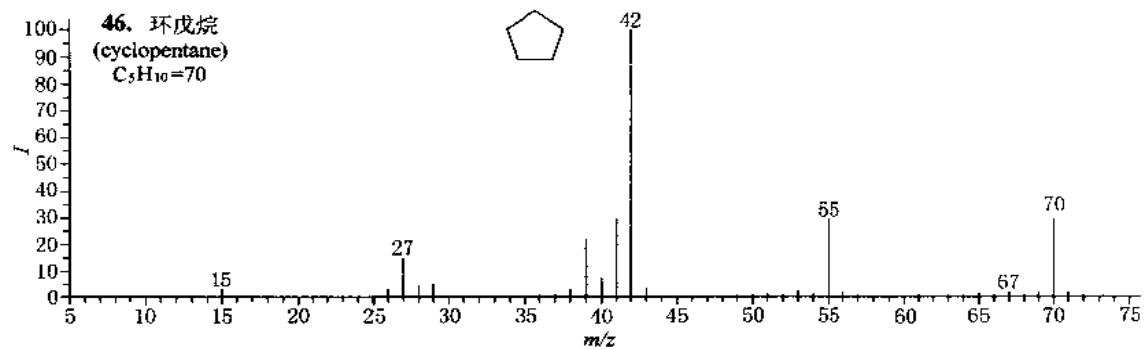


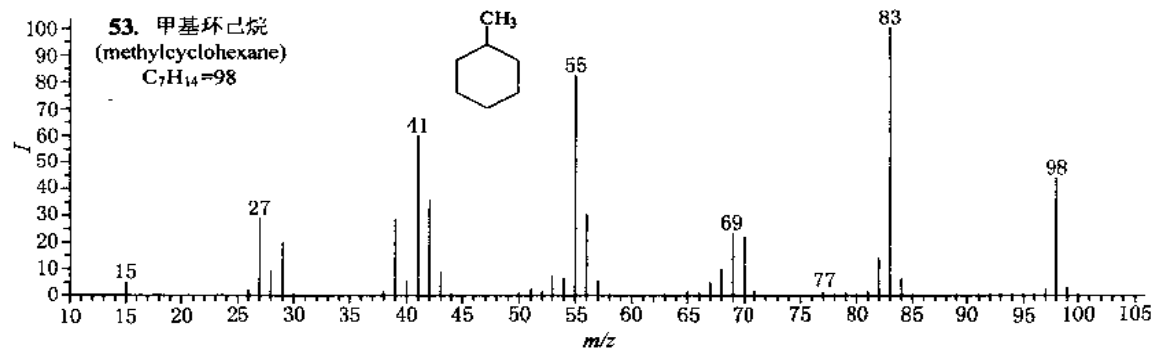
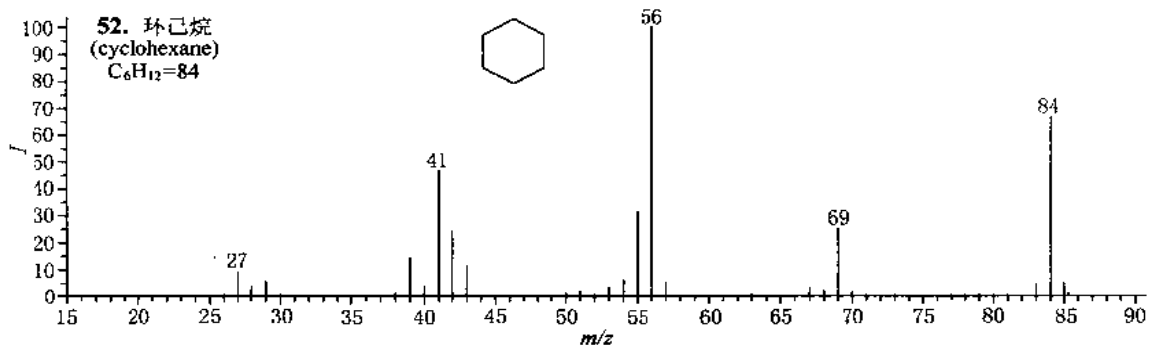
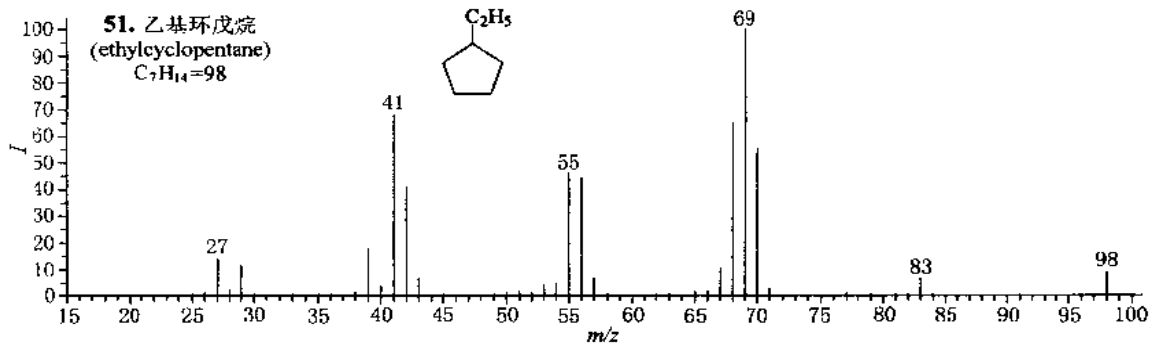
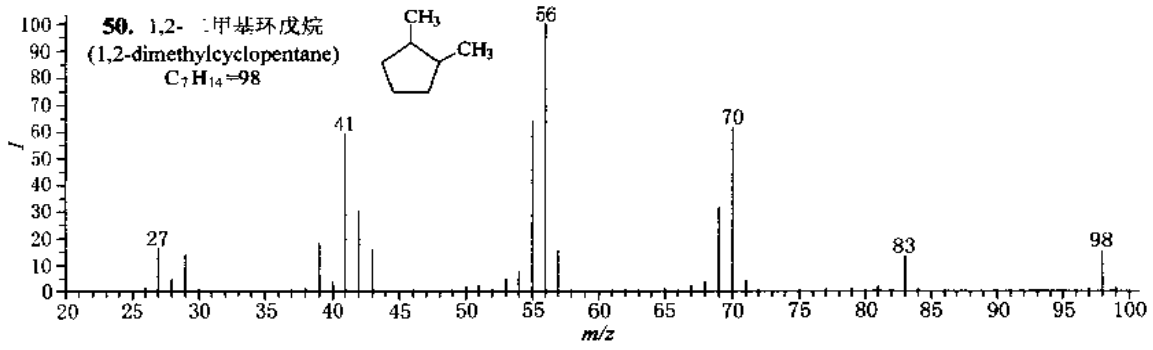


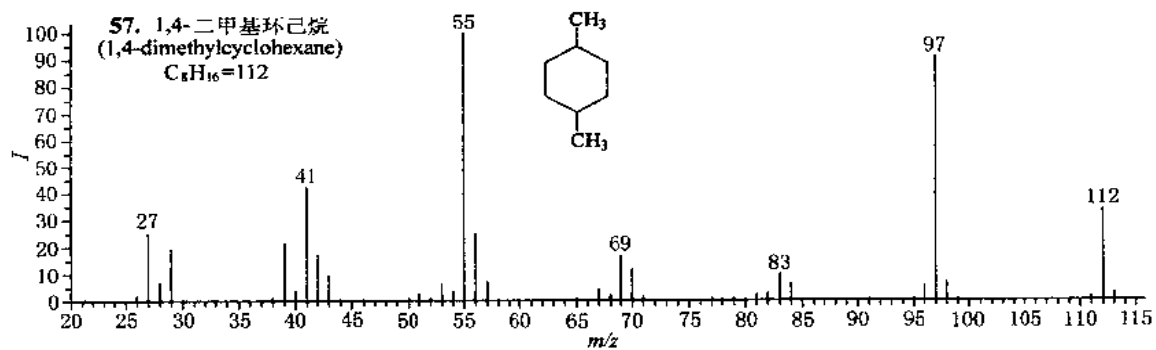
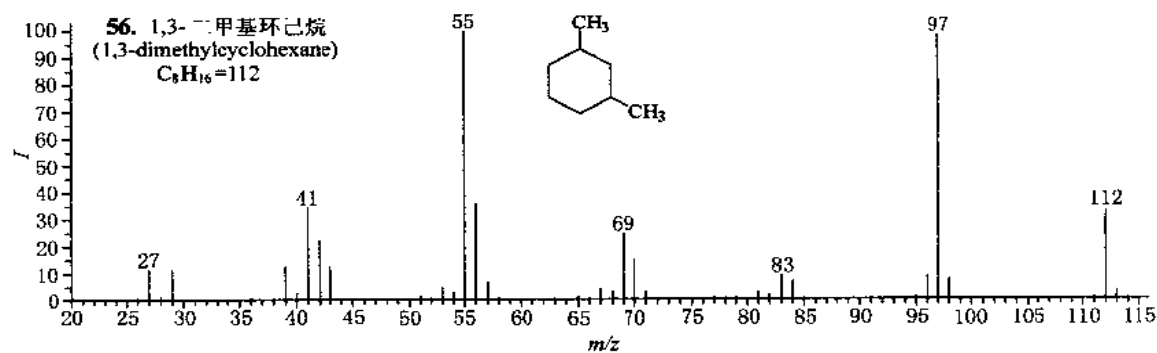
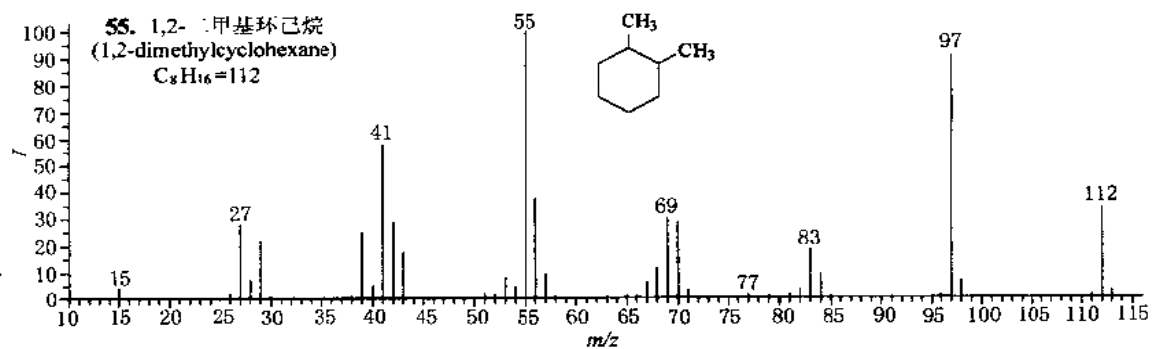
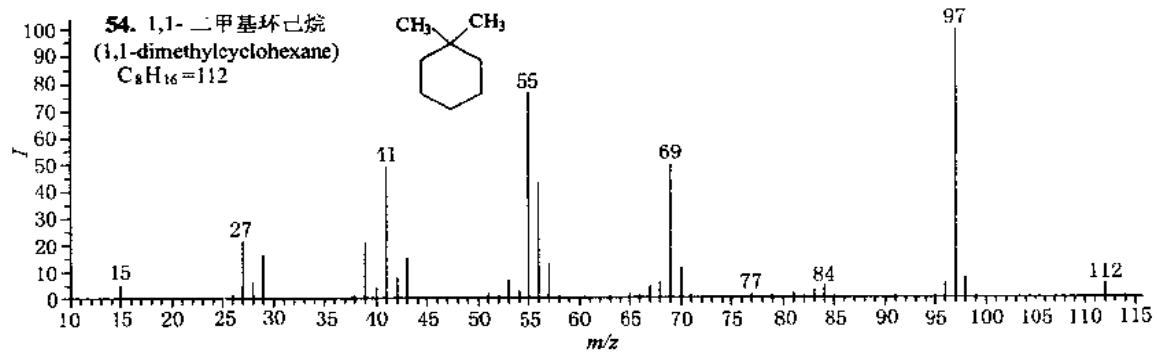
## 三、环脂肪烃类

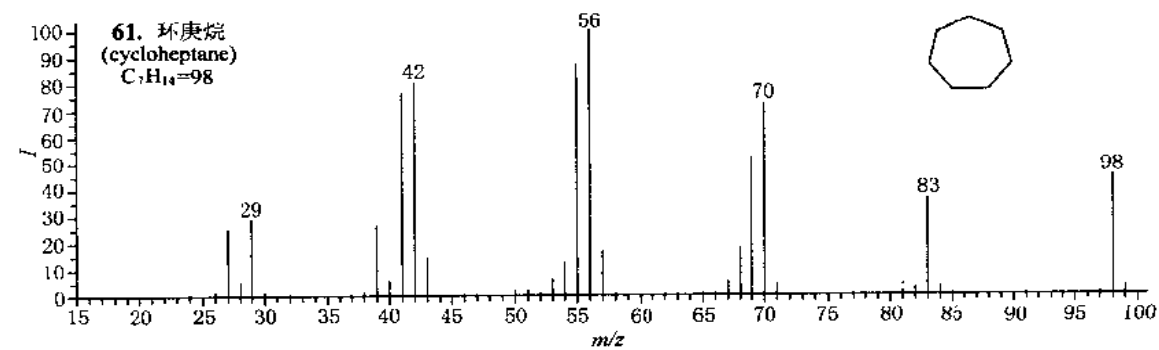
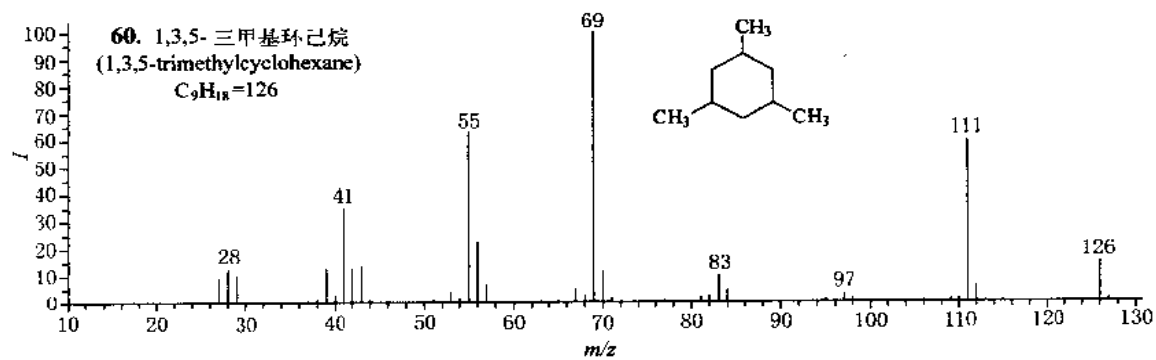
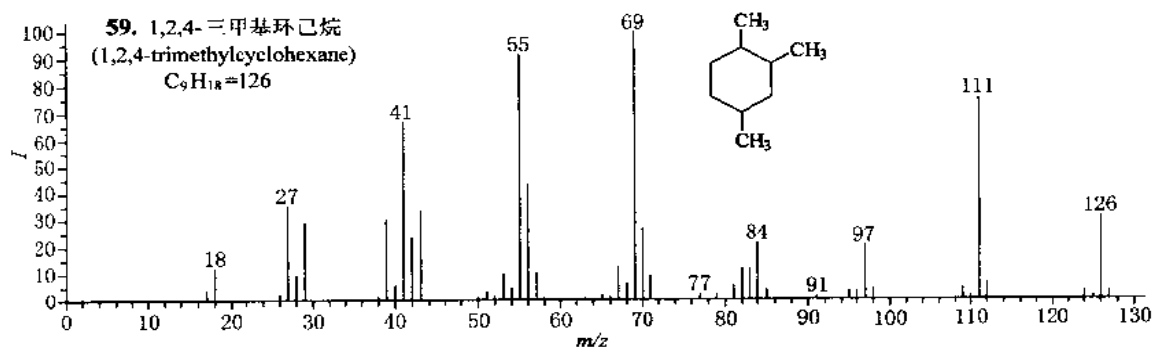
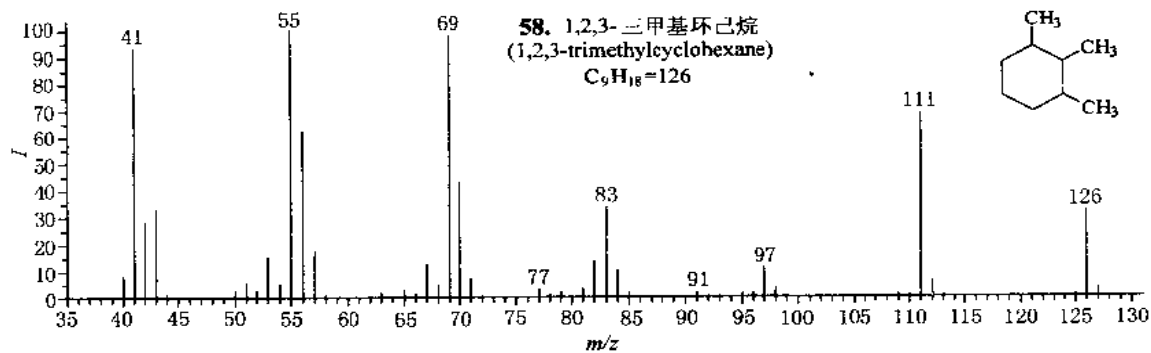
不论有无环外取代的环脂肪烃类，主要裂解都是重排失去甲基和乙烯，环己烷（52）以上的大环化合物还能由分子离子或  $M-CH_3$  离子重排失去丙烯。



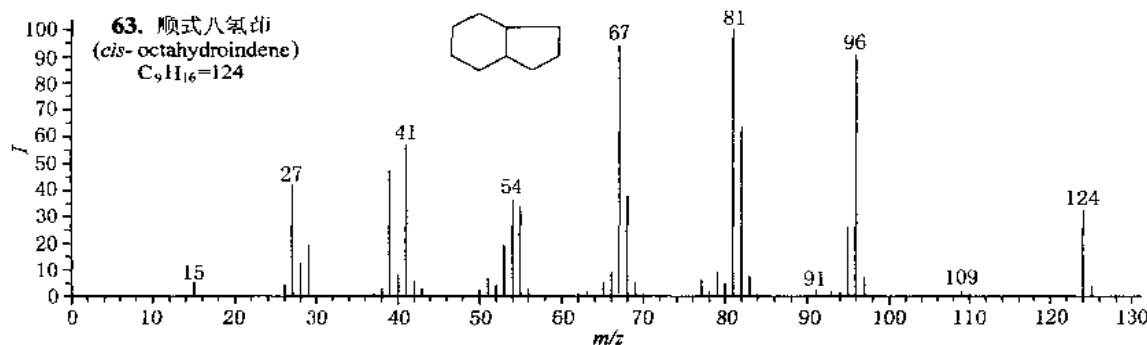
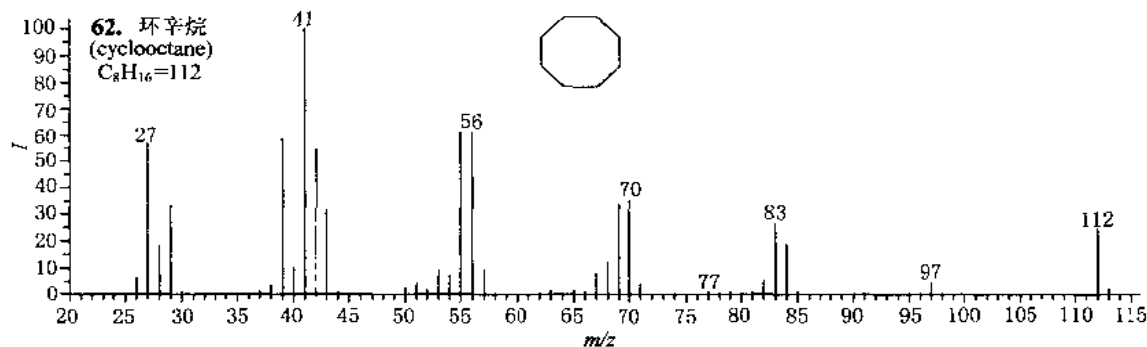










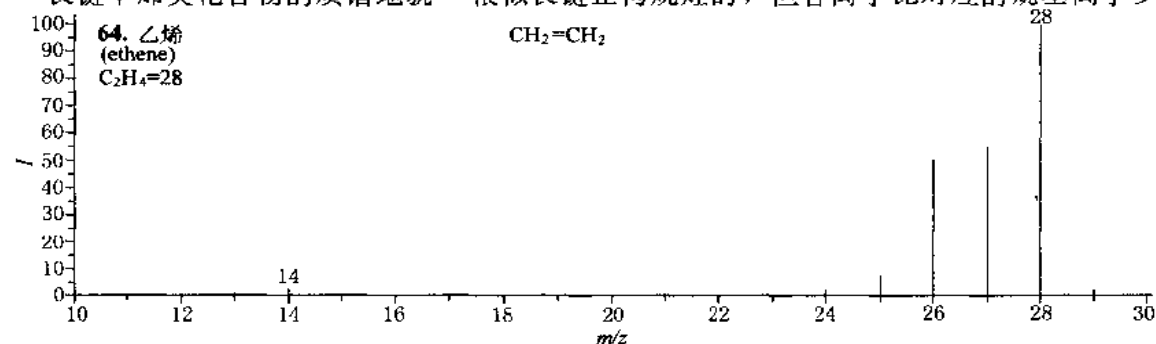


#### 四、直链烯烃类

小分子的单烯主要裂解是由分子离子失去氢原子和失去甲基, 1-丁烯 (66) 因烯丙裂解很容易失去甲基, 所以离子  $m/z$  41 ( $M-CH_3$ ) 是基峰。自 1-戊烯 (67) 开始, 能因麦氏重排裂解发生, 而失去乙烯、丙烯和丁烯等, 产物是强峰离子  $m/z$  42。1-庚烯 (74) 的主要裂解也是麦氏重排裂解, 但得到的是一对互补离子  $m/z$  42 和 56。2-庚烯 (75) 的离子  $m/z$  56 是离子  $m/z$  42 的同系离子, 而 4-甲基-1-己烯 (76) 的离子  $m/z$  56 与 1-庚烯 (74) 的离子  $m/z$  56 一样, 都是来自分子离子的相同部分, 即非双键的一侧。2-辛烯 (77) 的基峰离子  $m/z$  55 仍然是烯丙裂解产物, 它比 3-辛烯的同一离子强得多, 因而二者能够相互区别。

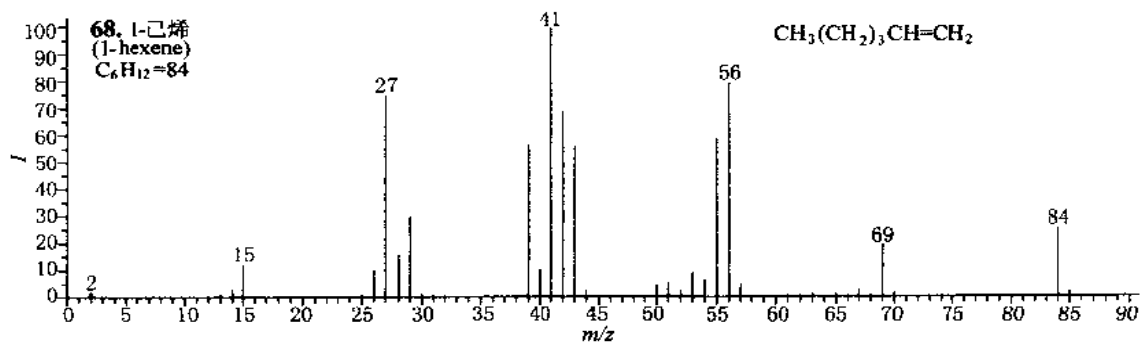
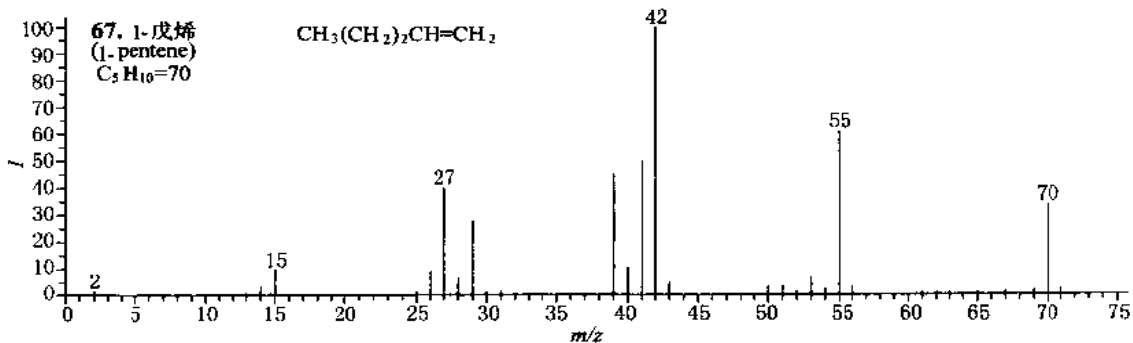
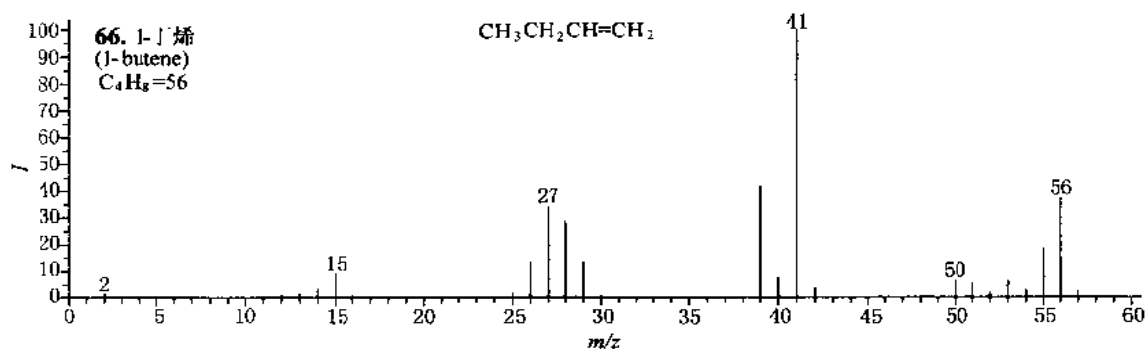
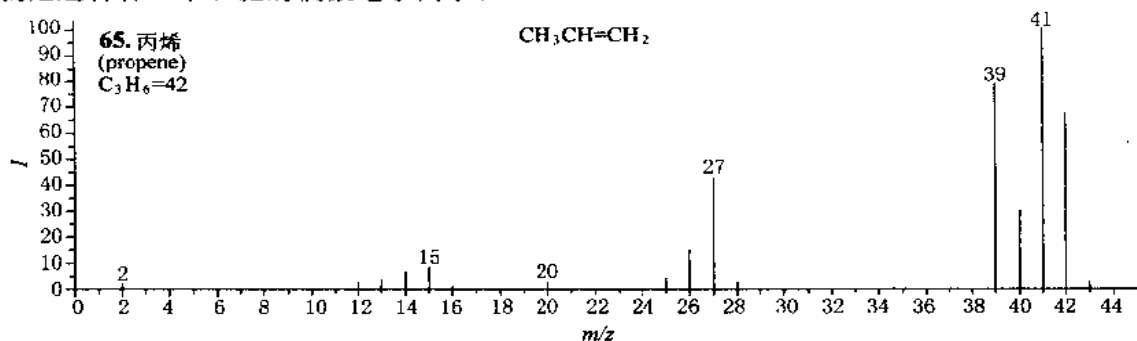
二烯或三烯类主要裂解是失氢和失甲基、或重排失甲基, 乙烯基离子  $m/z$  27 也常出现。2-甲基-1,4-戊二烯 (84) 的离子  $m/z$  54 很强, 这是重排失去乙烯的产物。

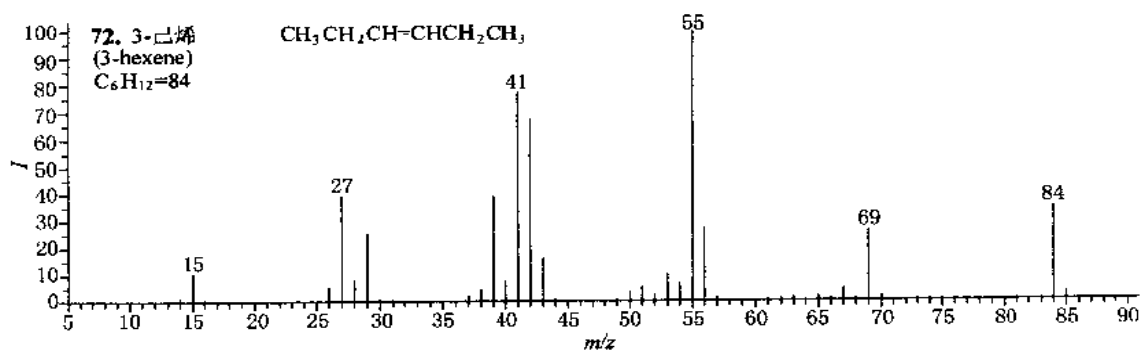
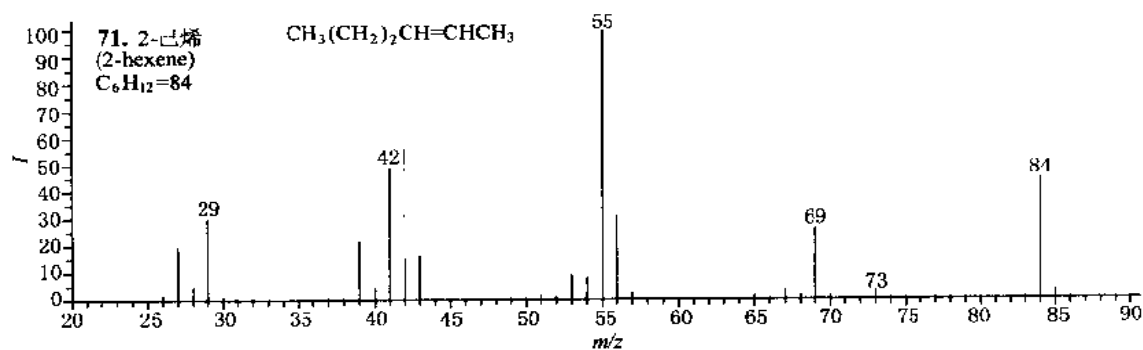
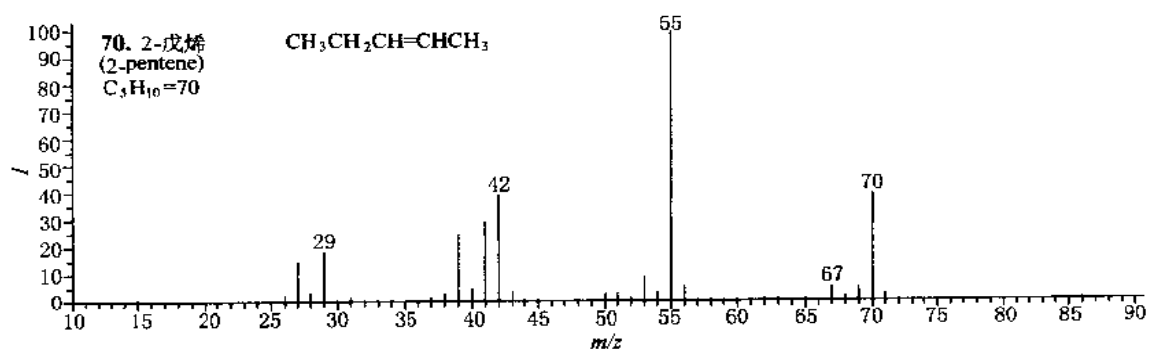
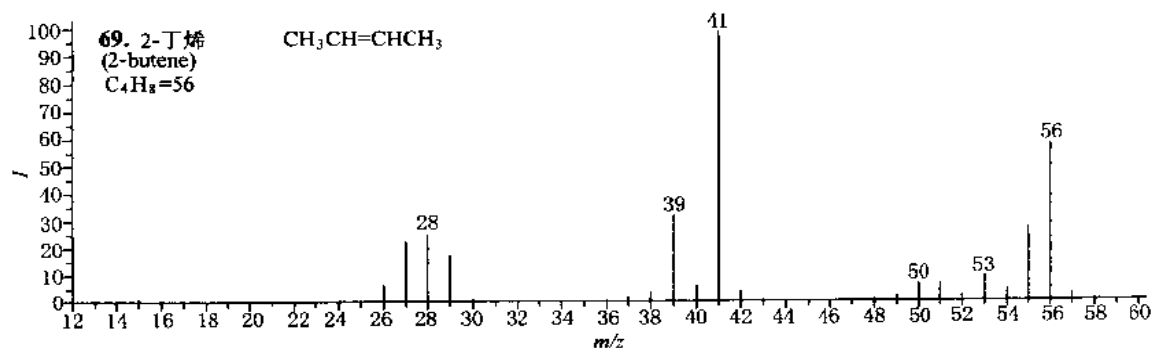
长链单烯类化合物的质谱地貌<sup>①</sup> 很似长链正构烷烃的, 但各离子比对应的烷基离子少 2

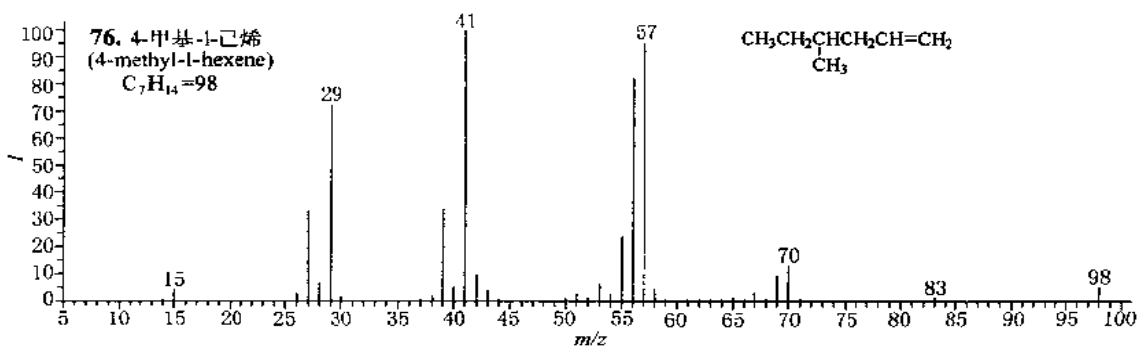
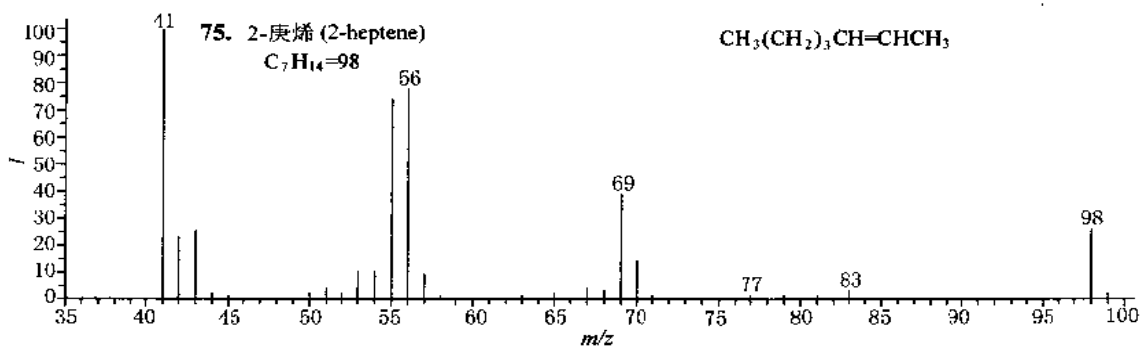
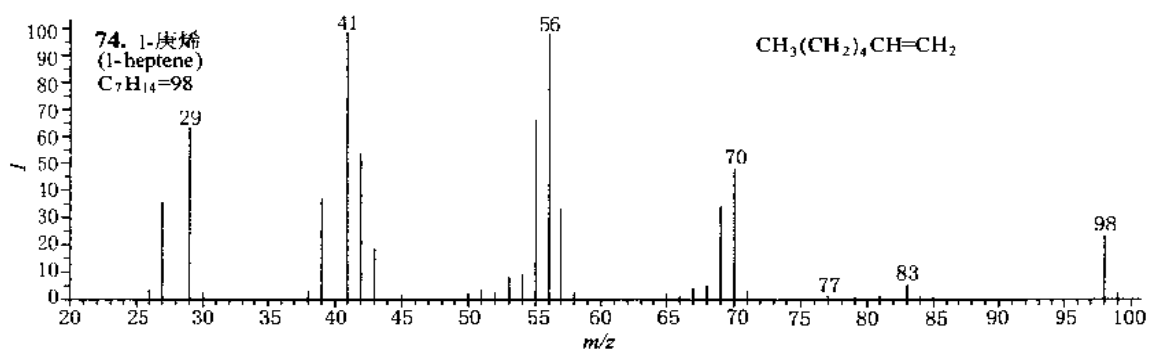
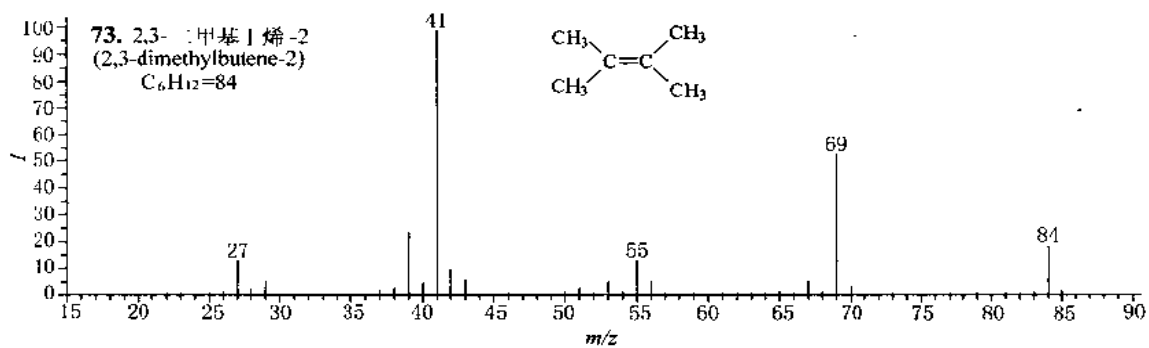


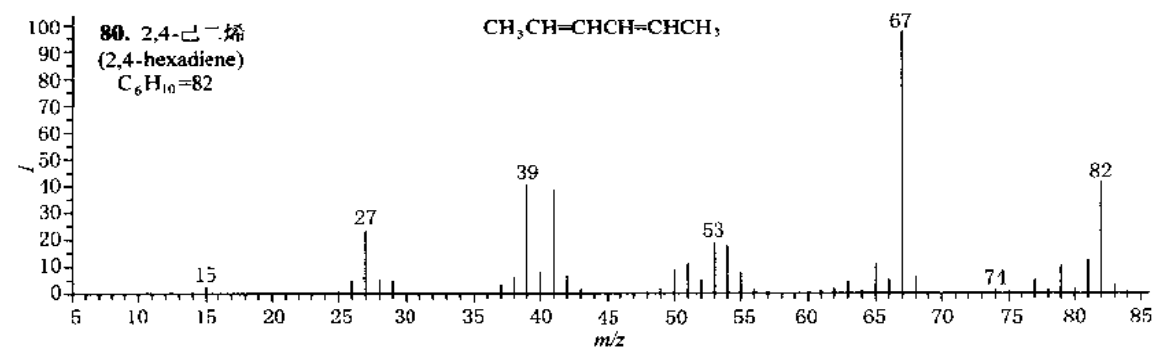
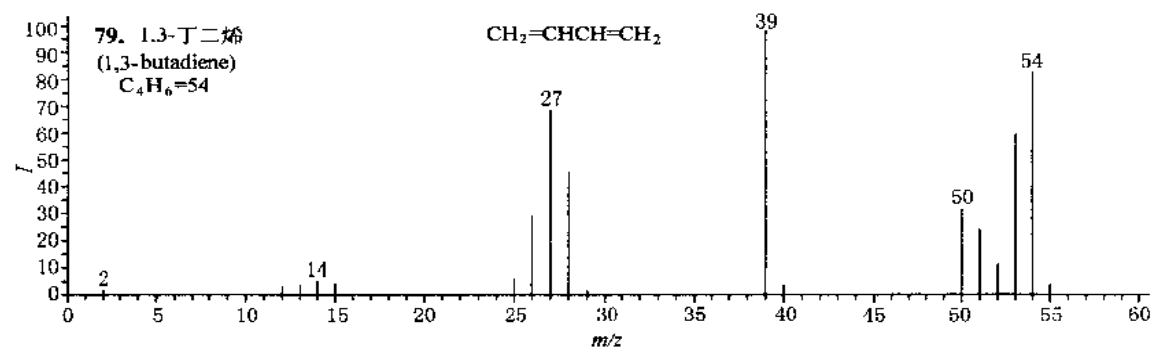
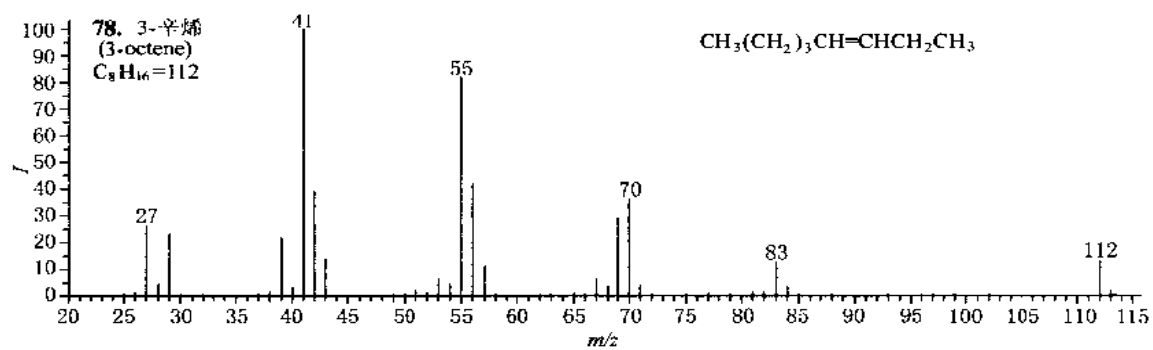
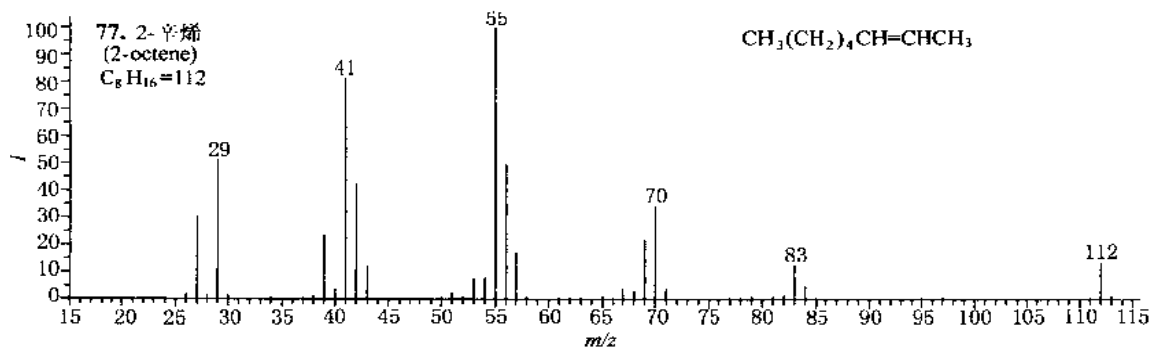
① 所谓地貌是指大致的质谱图形。

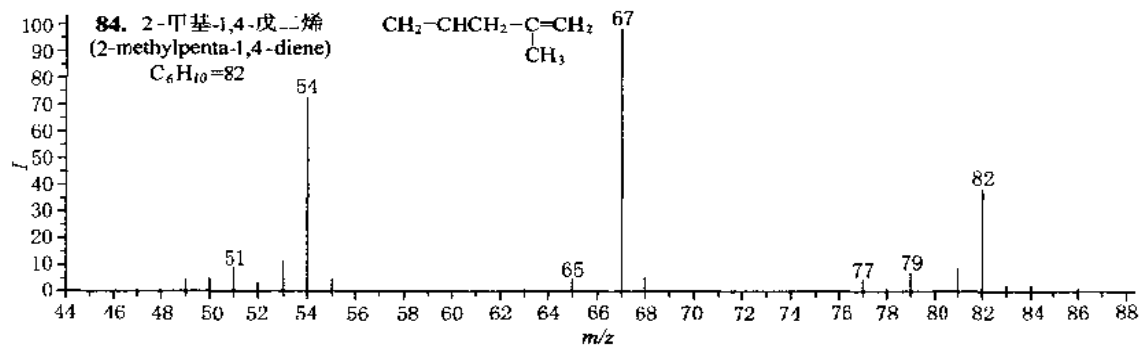
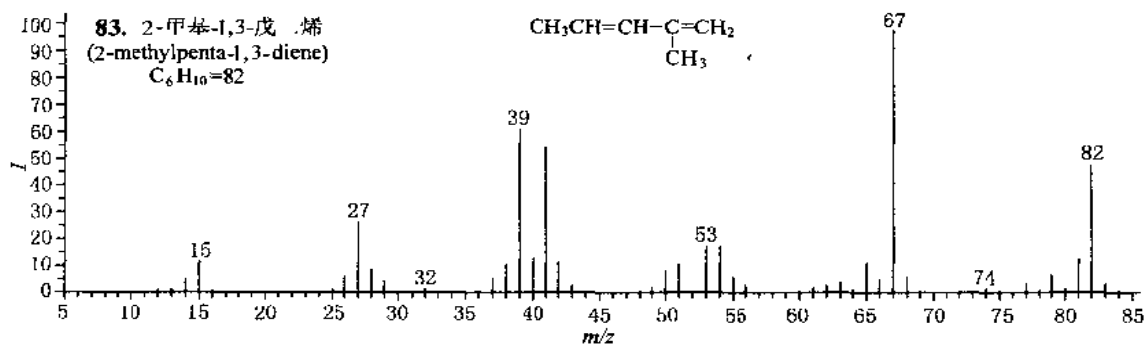
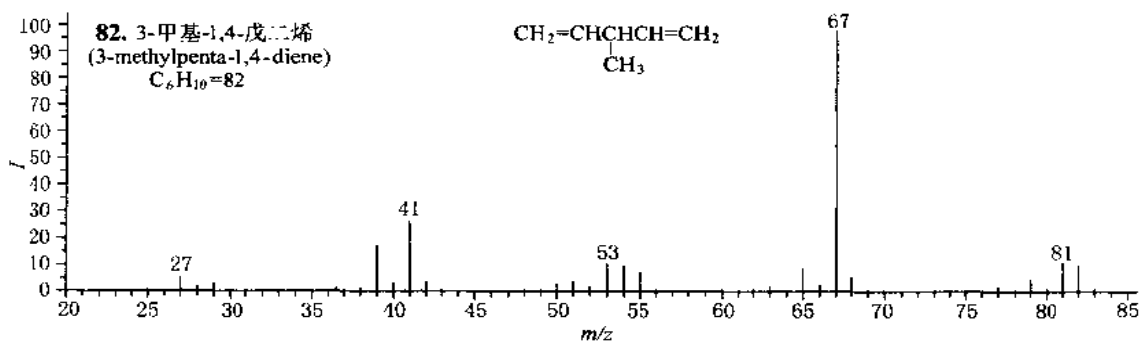
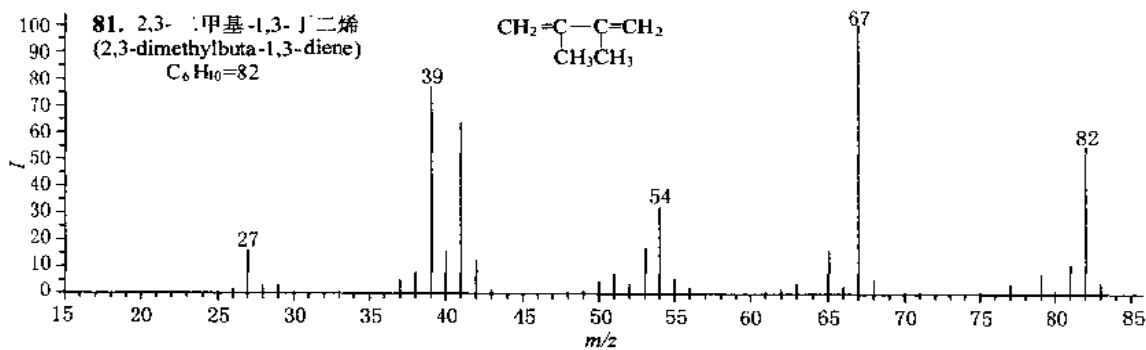
个质量数。这说明这些离子都有双键，例如离子  $m/z$ : 41, 55, 69, 83, 97, 111, 125 和 139 等就是这种含一个双键的偶数电子离子。

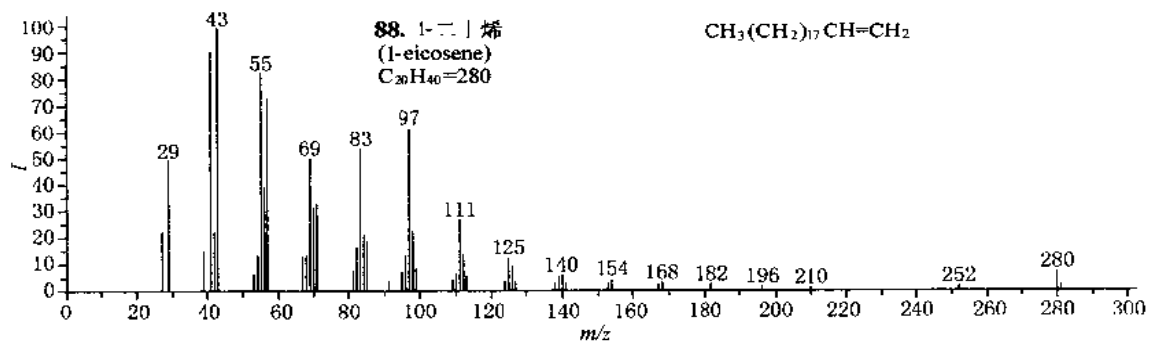
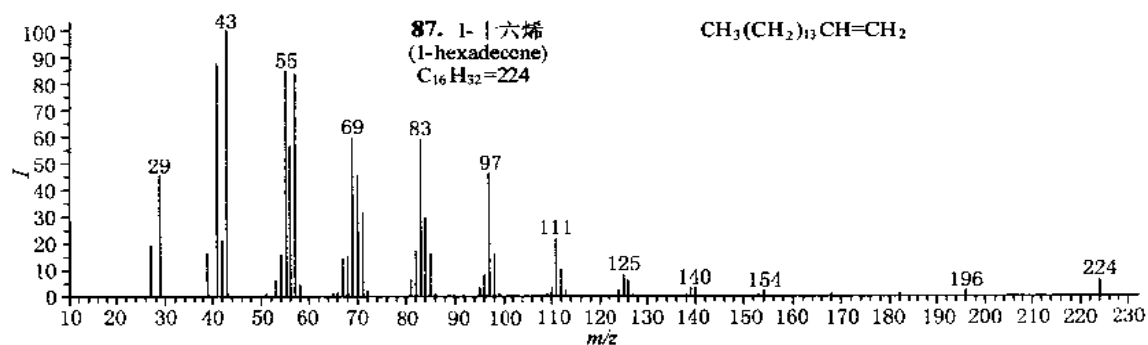
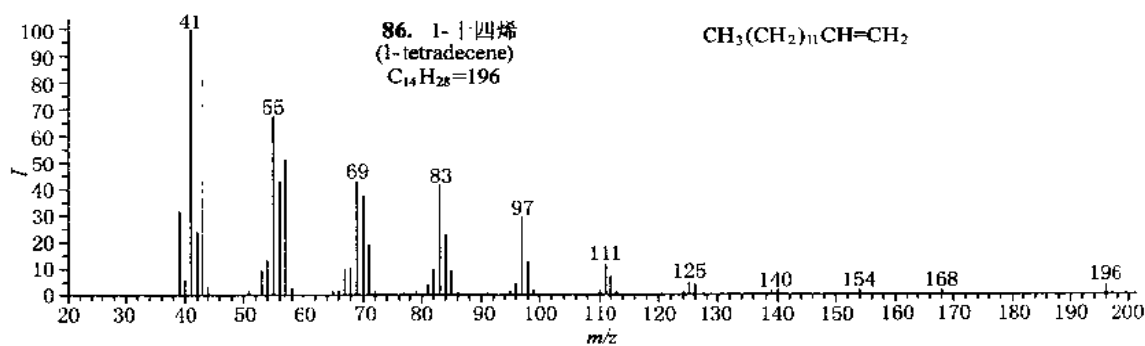
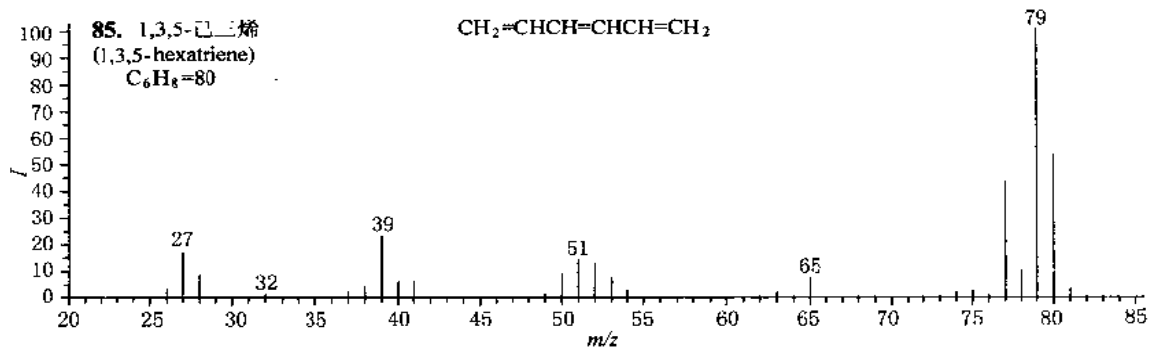


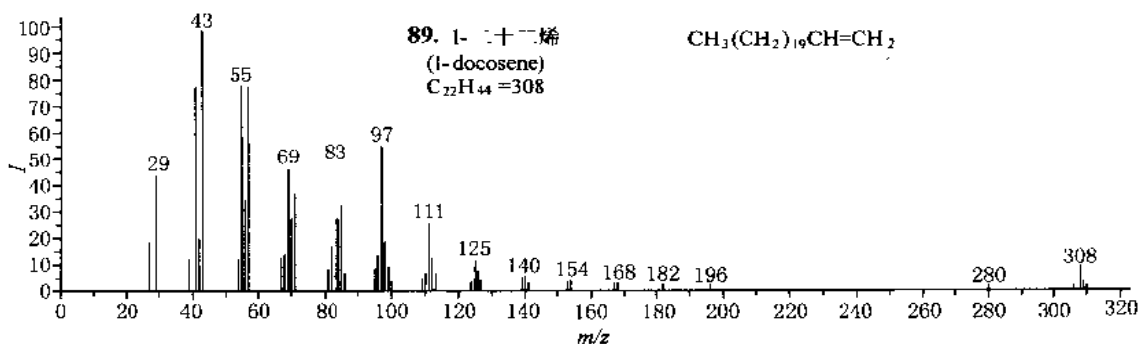












## 五、环烯炔类

1,2-二亚甲基环丁烷 (90) 的主要裂解是失氢和失去乙烯, 而亚甲基环戊烷 (91) 的主要裂解是重排失去甲基。甲基或二甲基取代的环戊烯类都主要是失去甲基, 取代基的位置用质谱不能区别。乙基取代物主要是失去乙基, 用质谱同样不易辨认取代位置。

环戊二烯类的主要裂解是失氢和失乙炔。甲基环戊二烯类也主要是失去氢原子, 失甲基较难。二甲基环戊二烯类才较易失去甲基, 但离子内部要发生氢重排, 以便形成稳定的烯丙结构。

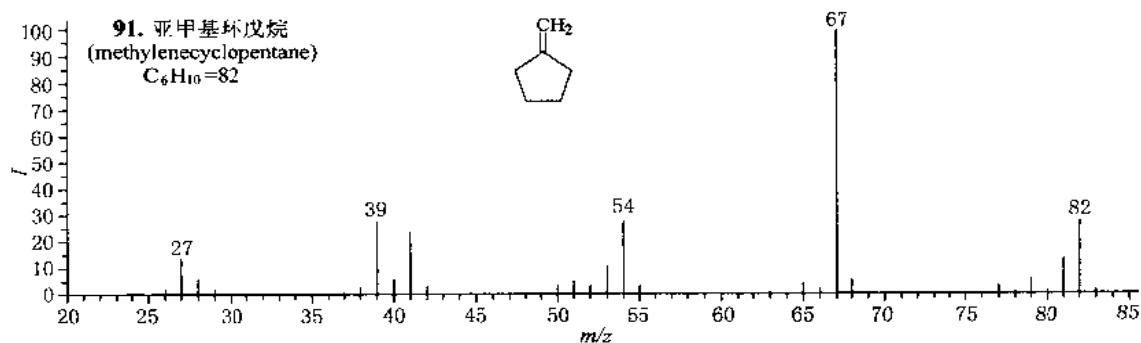
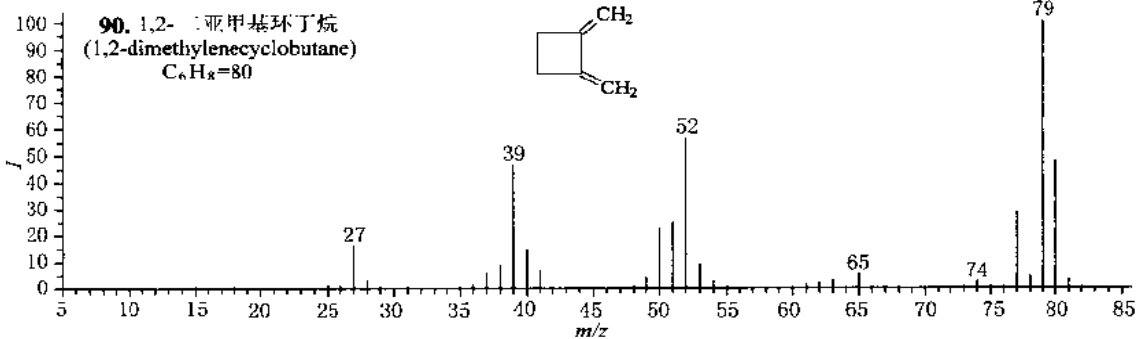
环己单烯类不论有无取代均易失去甲基或重排失去甲基, 次要的裂解是进行 RDA 裂解, 生成具有丁二烯结构的离子  $m/z$  54 或其同系离子  $m/z$  68。

环己二烯类主要是失氢, 甲基环己二烯主要是失甲基, 异构体亦不易用质谱区别。

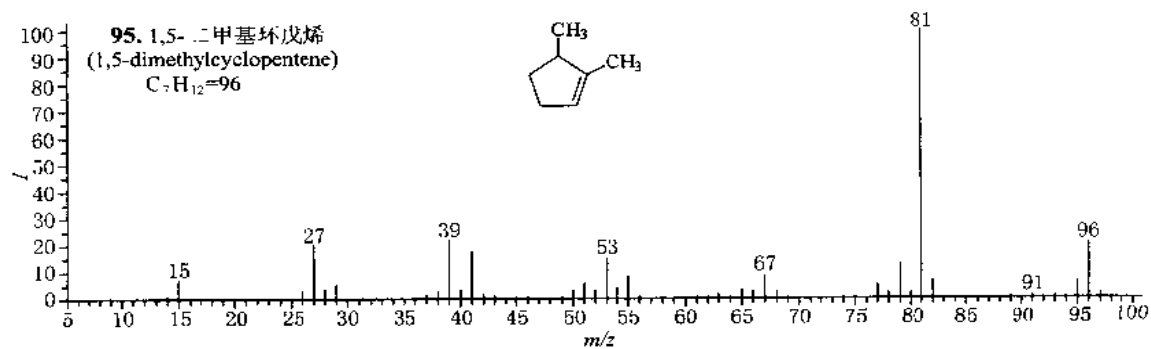
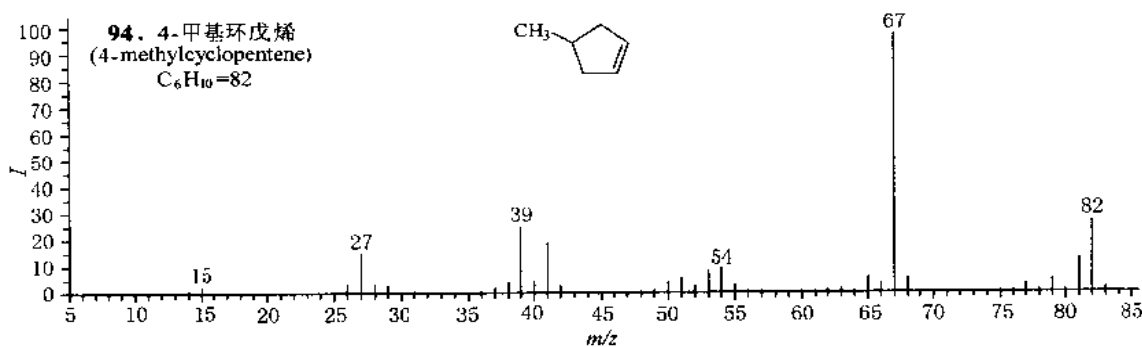
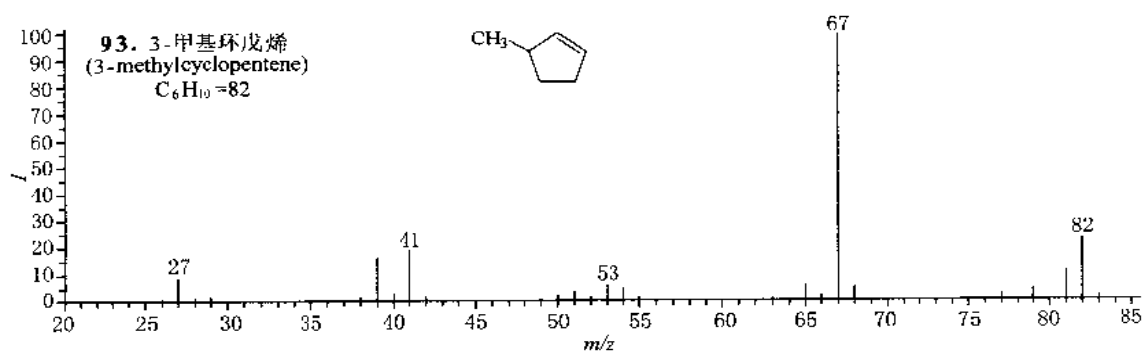
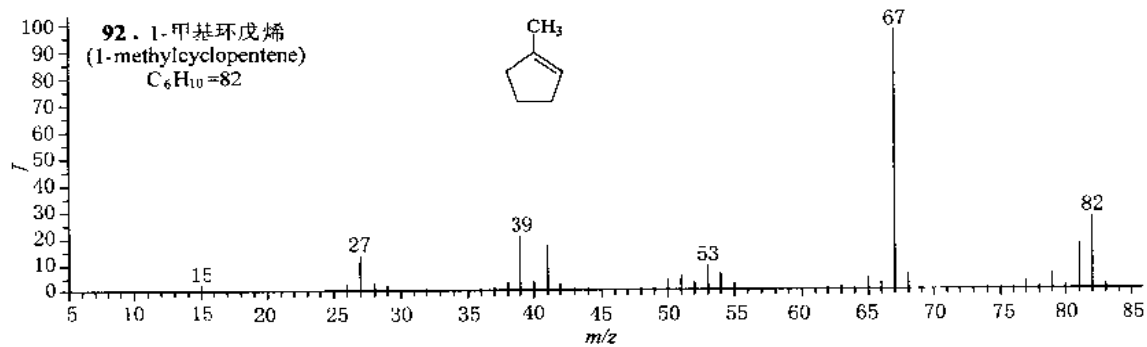
环庚单烯既能失甲基, 也能失去乙烯、乙基、丙烯基和丙烯, 裂解的任意性较大。环庚二烯类则只能失去甲基, 环庚三烯则主要是失氢, 生成稳定的莨菪离子 (tropylium ion)。

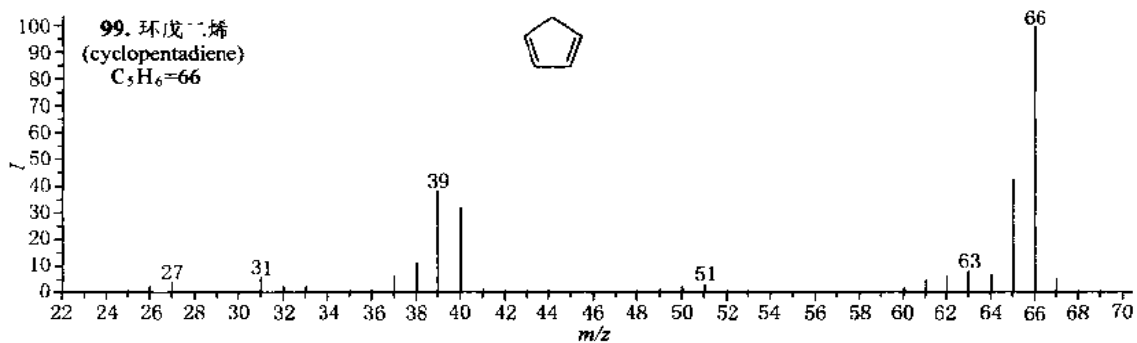
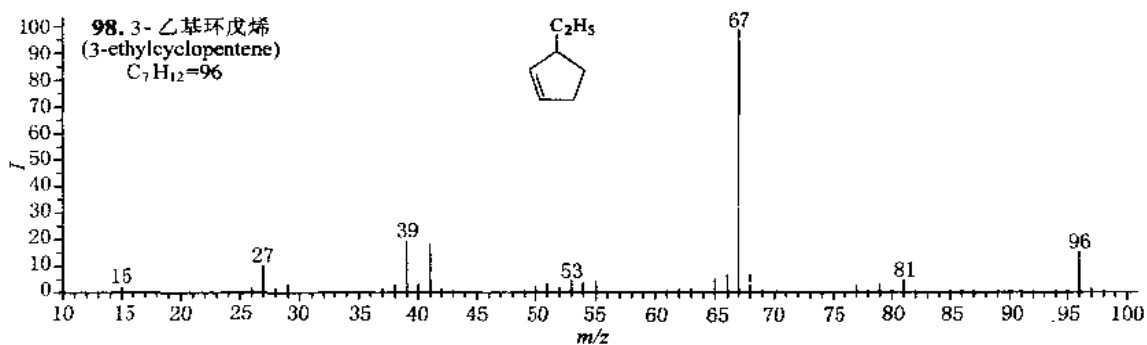
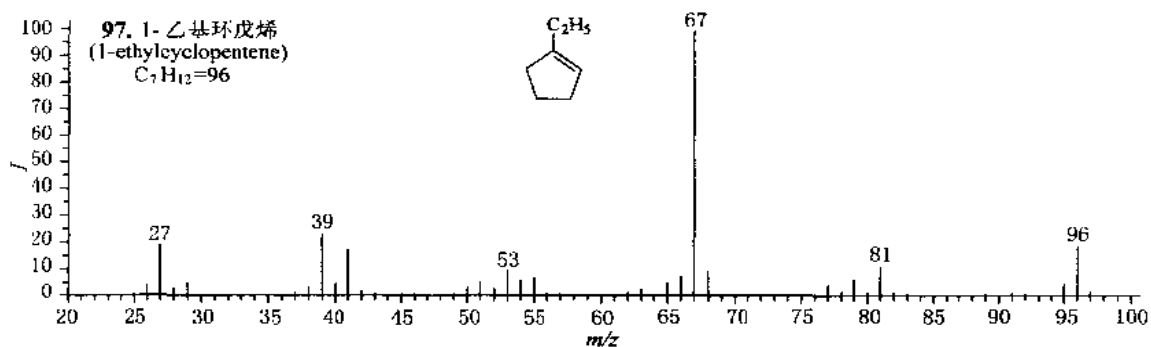
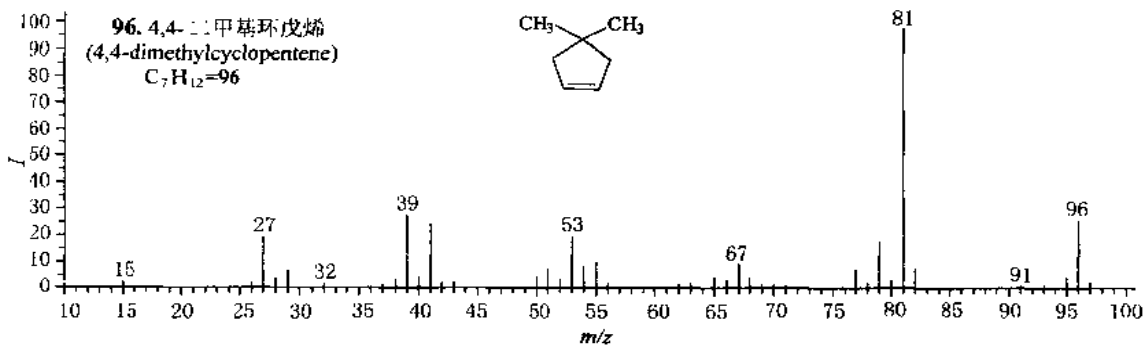
环-1,5-辛二烯 (116) 的主要裂解是两个双键的双  $\beta$ -裂解, 得主要离子  $m/z$  54。

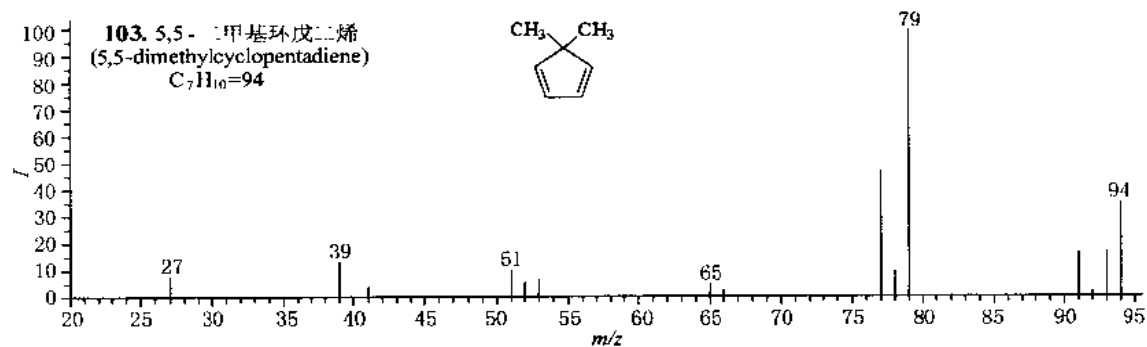
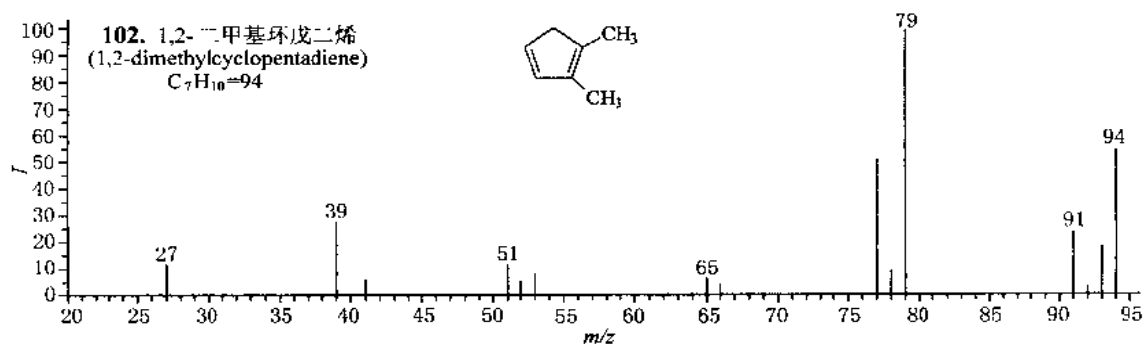
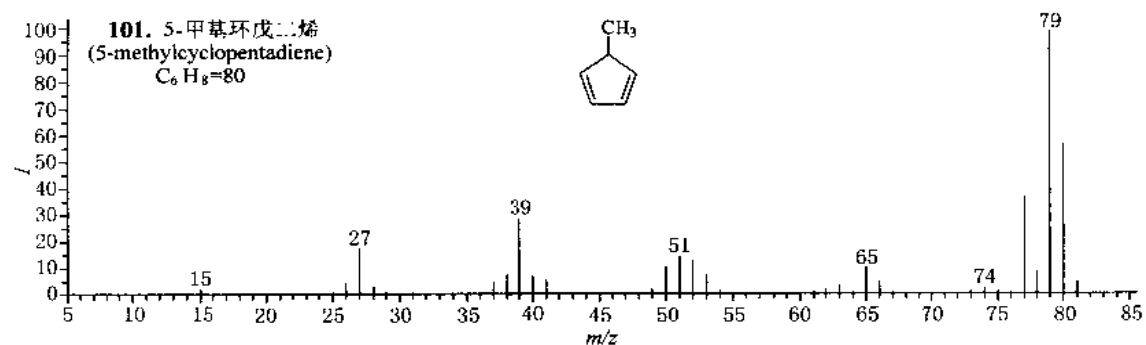
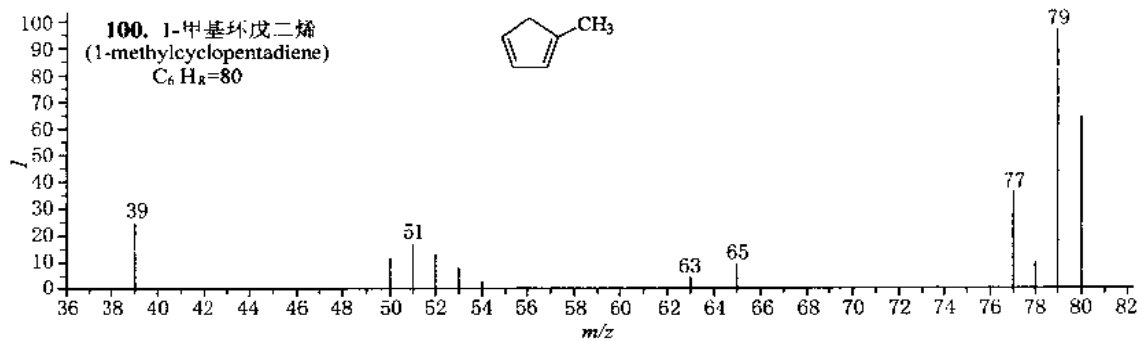
茛本身的主要裂解是失氢, 甲基取代的茛类则能失去甲基, 其他裂解均很弱。

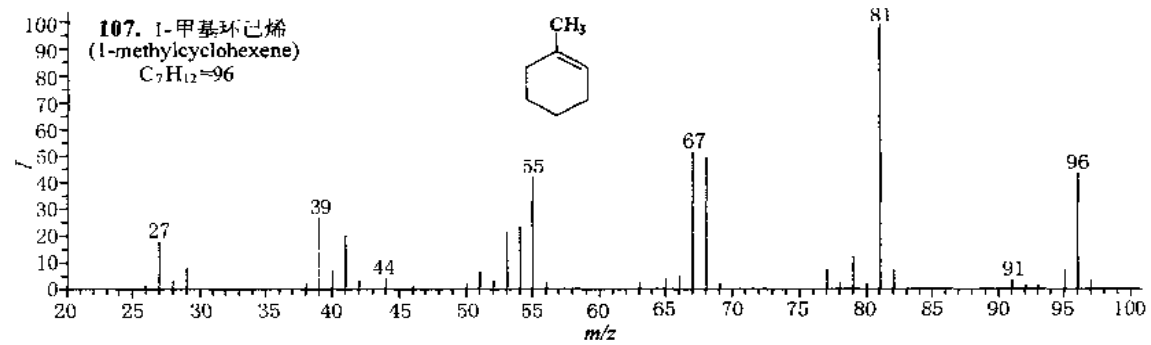
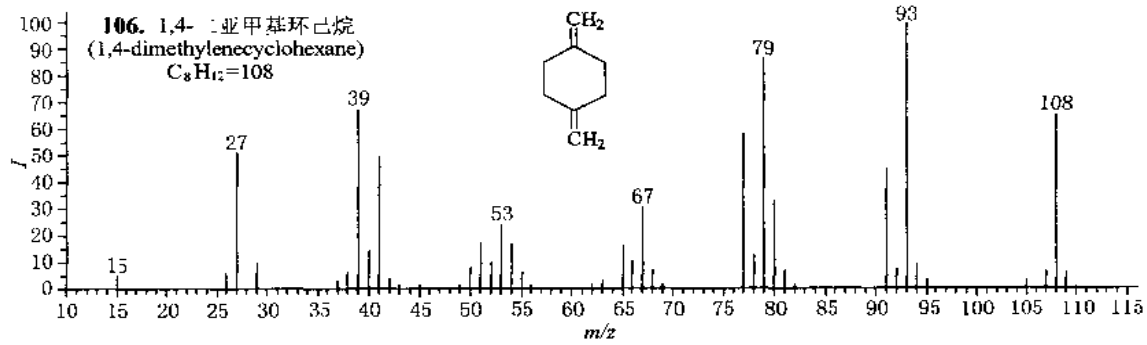
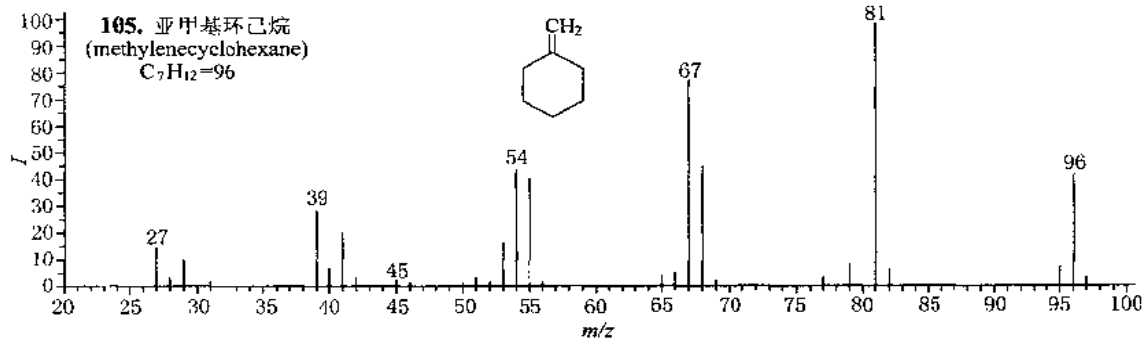
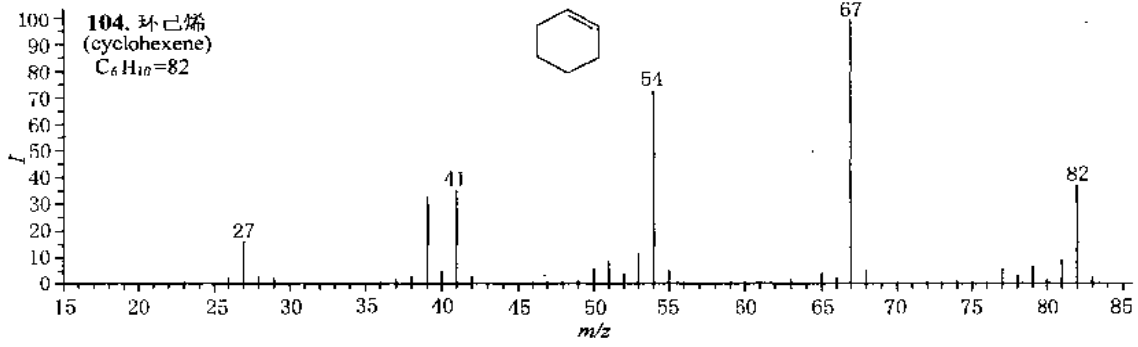


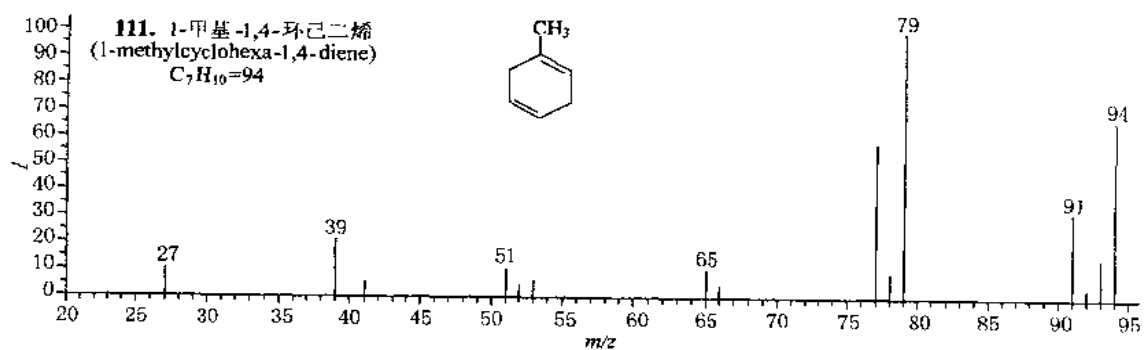
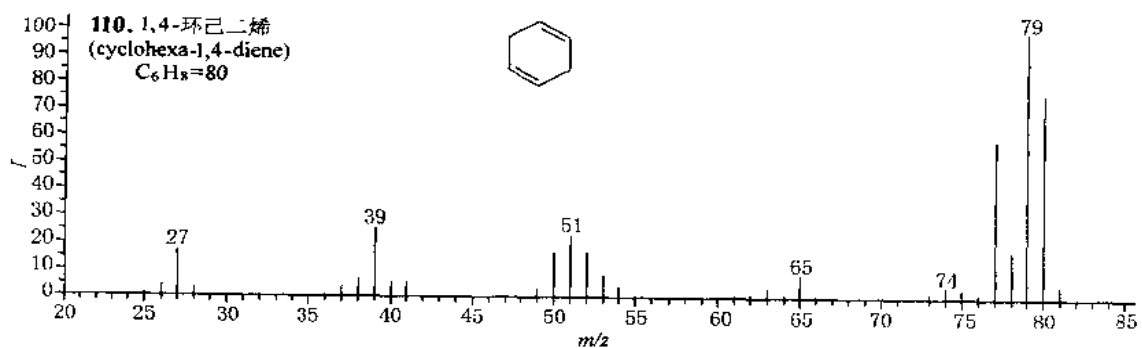
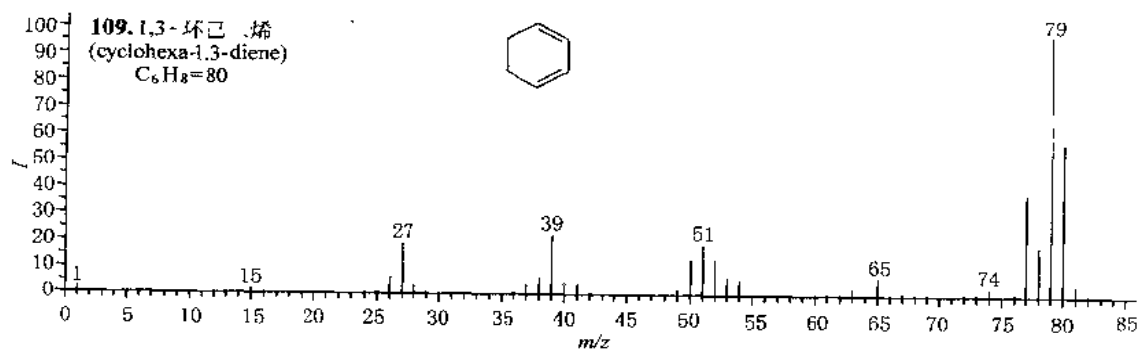
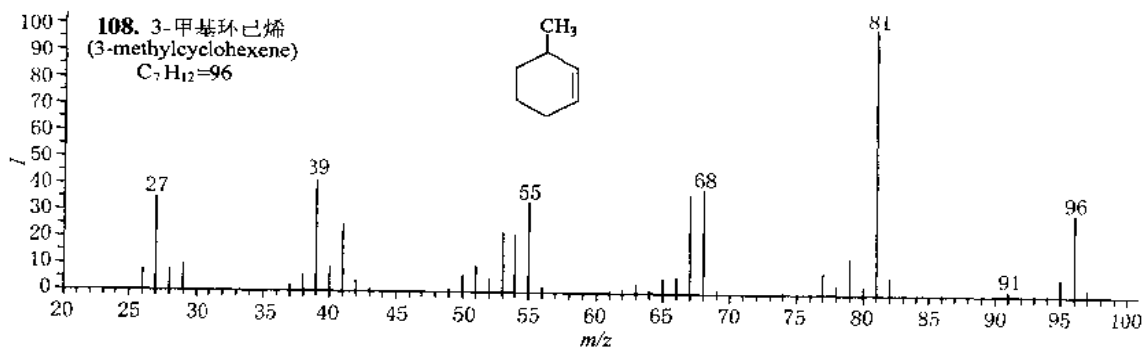


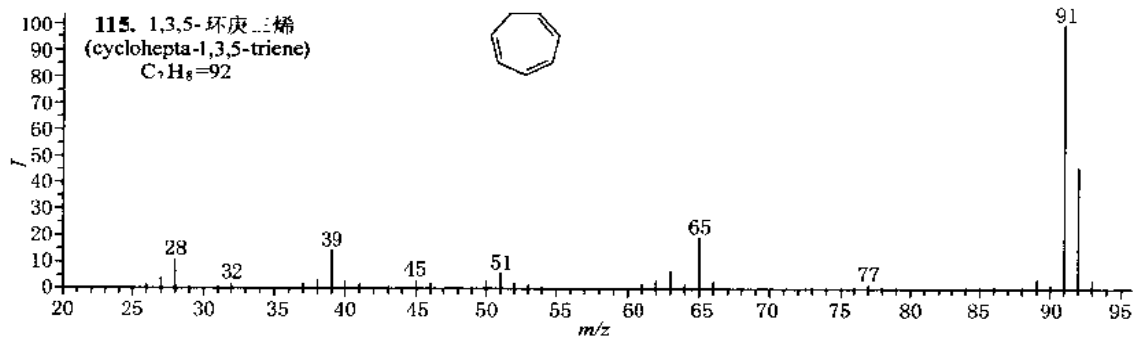
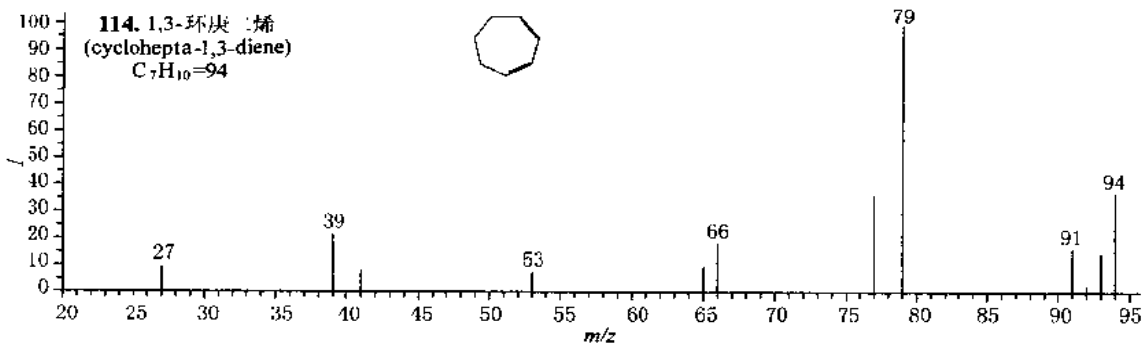
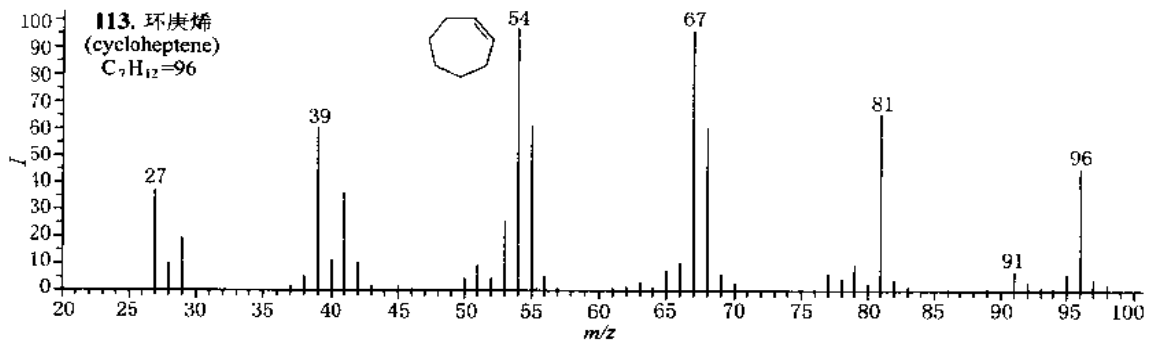
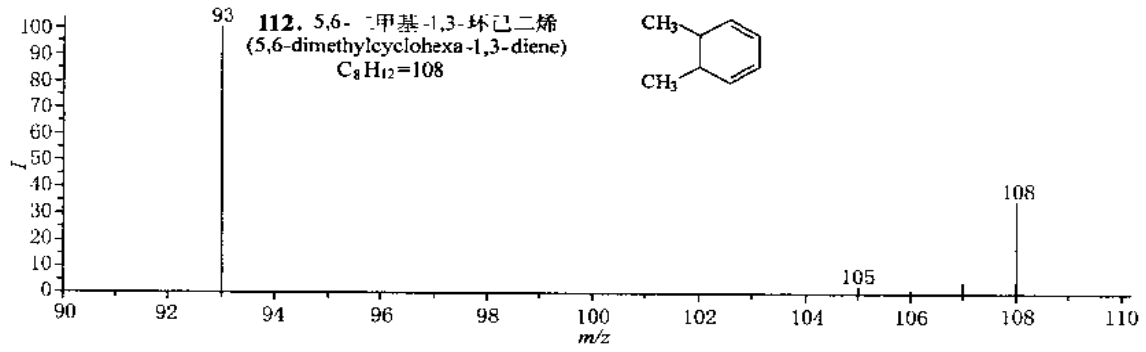


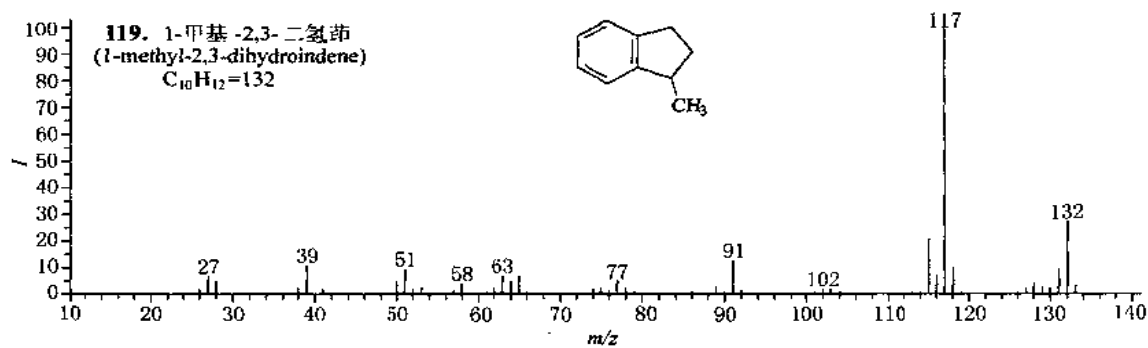
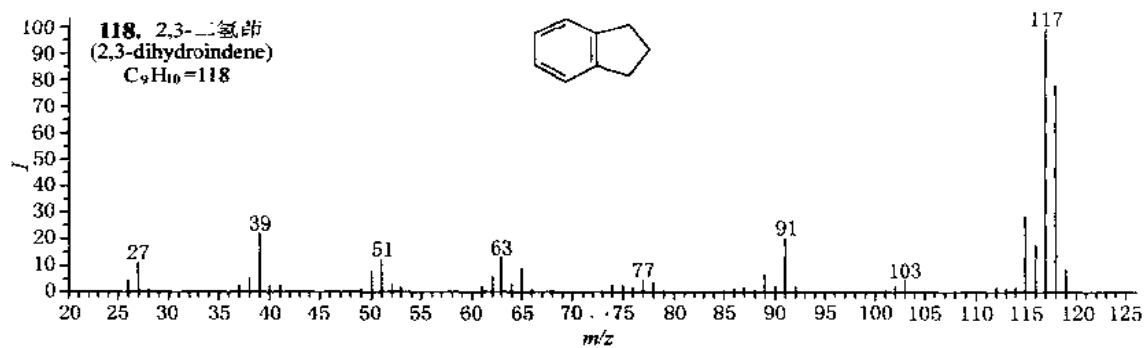
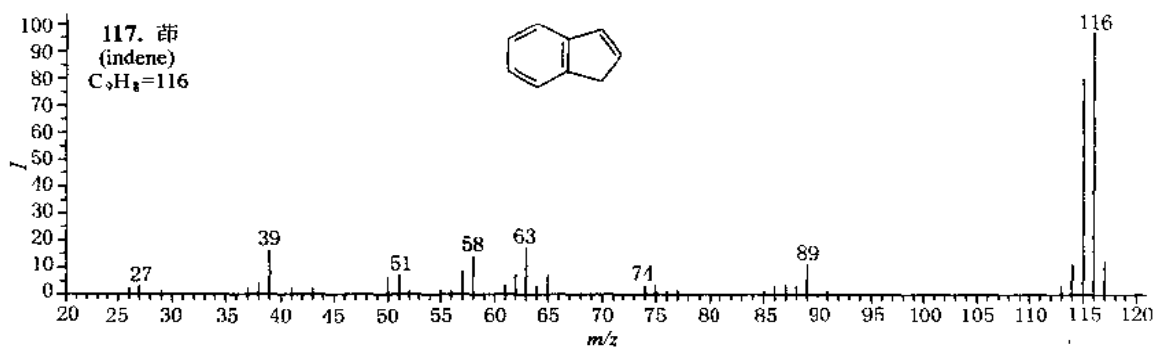
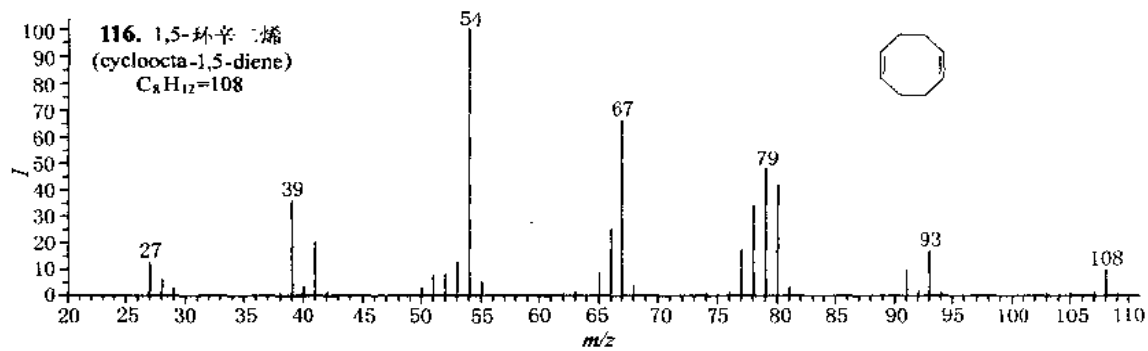


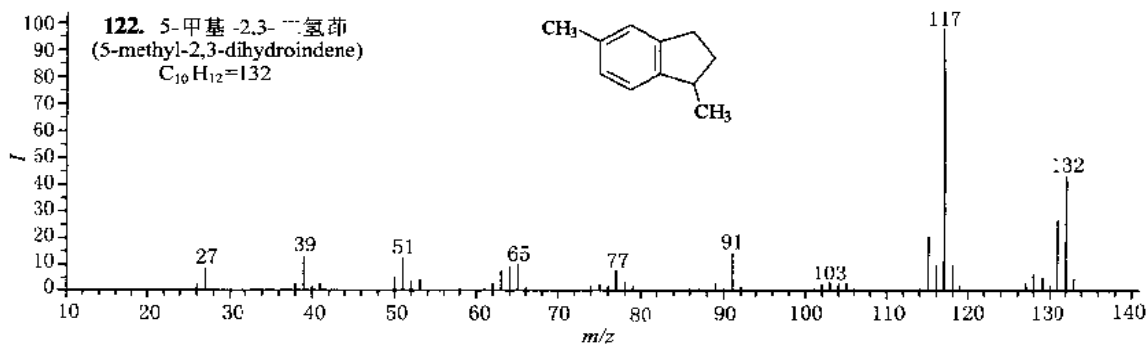
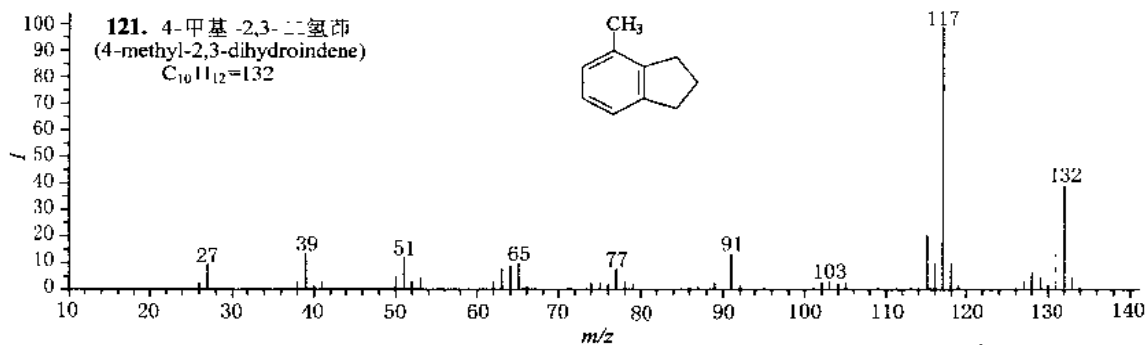
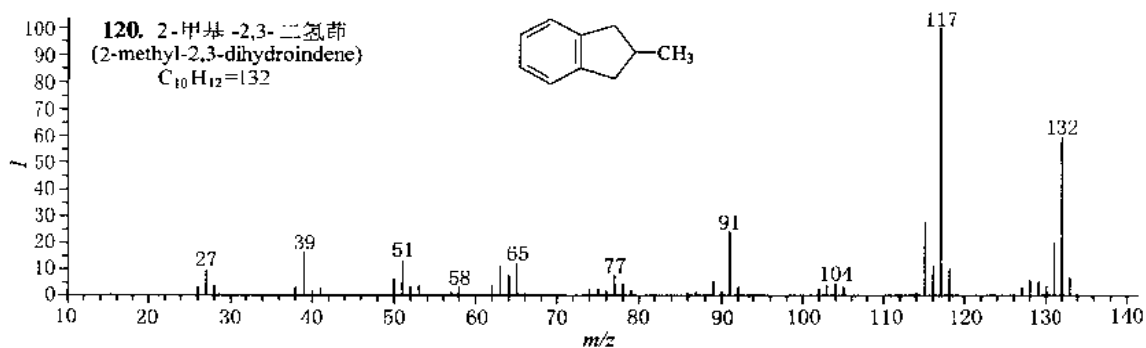






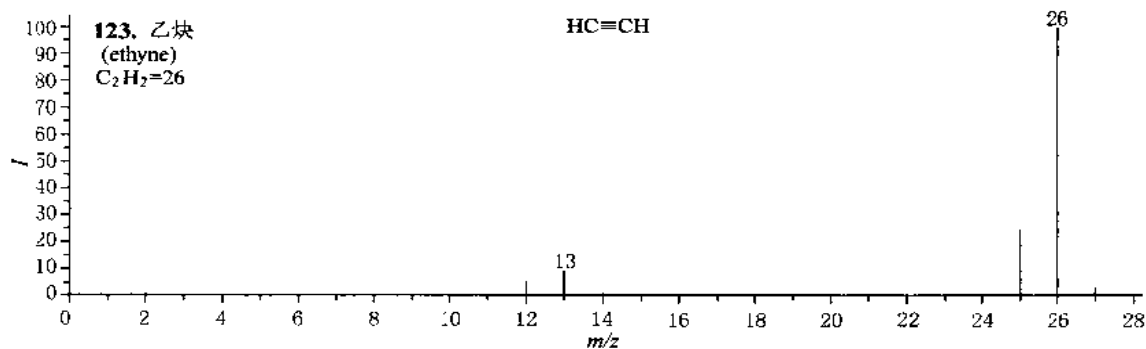




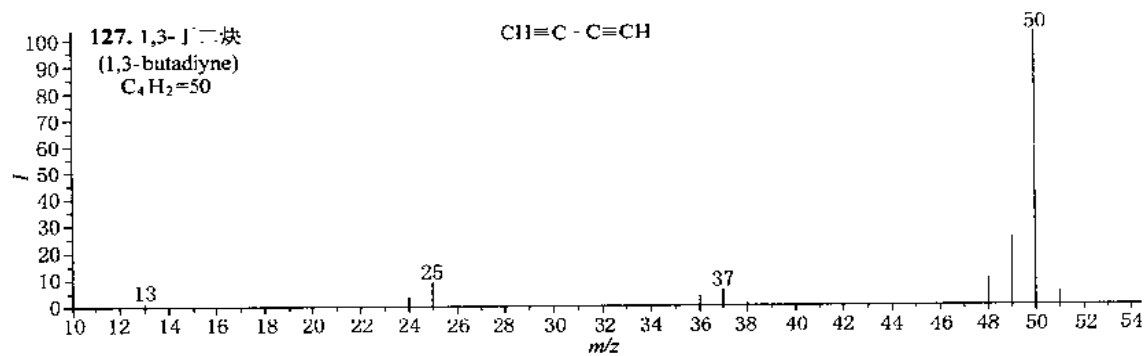
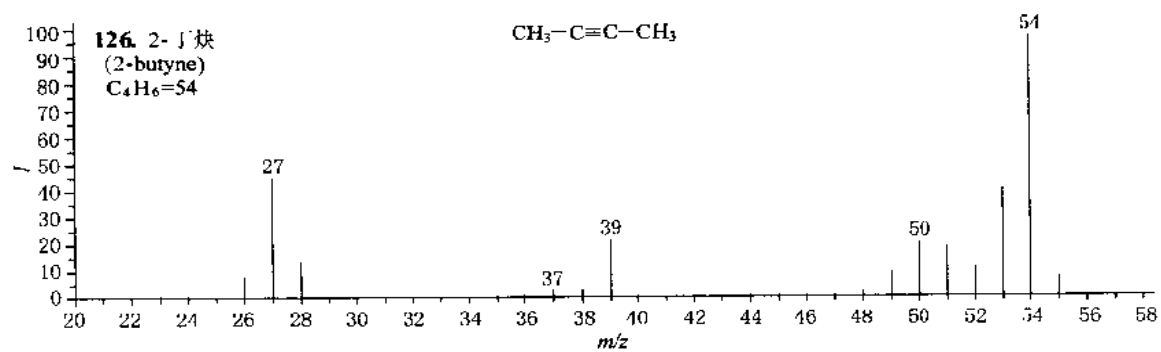
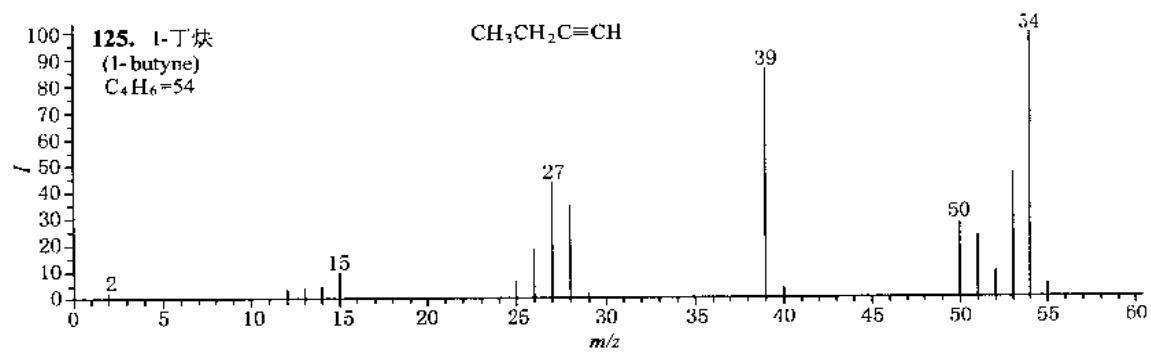
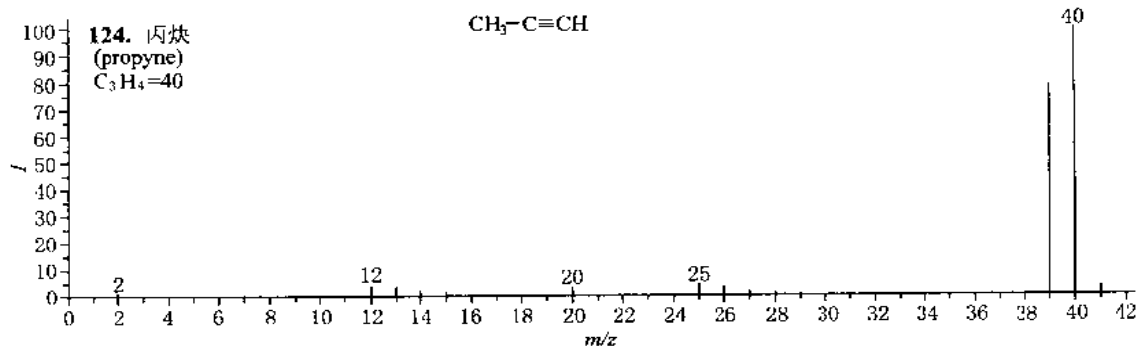


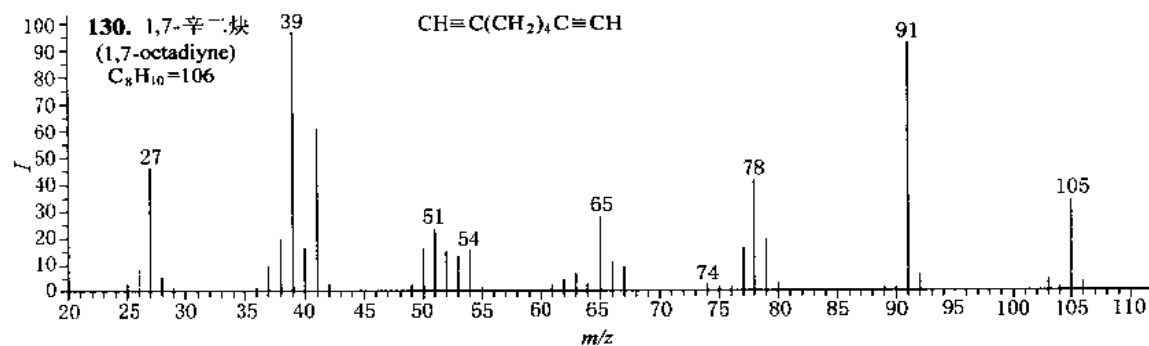
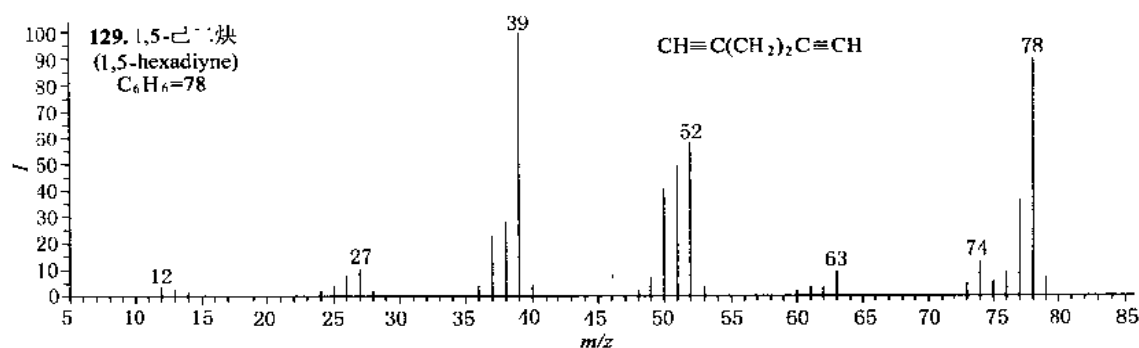
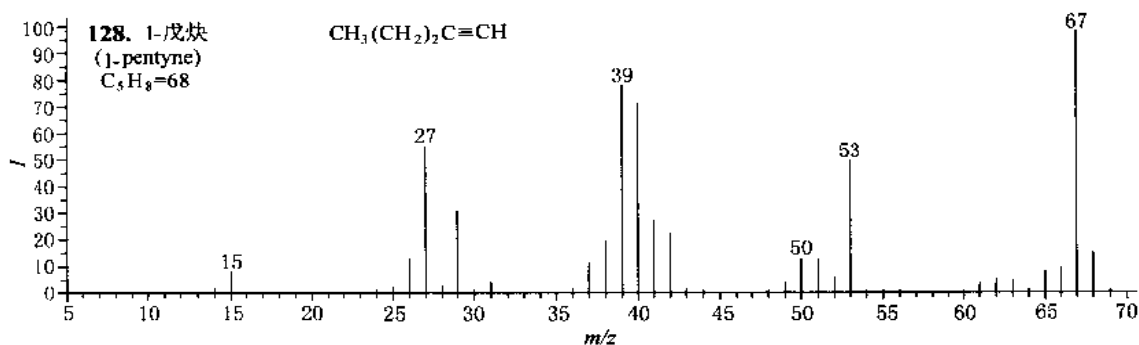
## 六、炔脂肪烃类

乙炔 (123) 的主要裂解是失氢, 丙炔 (124) 以上的化合物能炔丙裂解失氢、甲基或乙基等, 戊炔 (128) 以上的化合物可以进行麦氏重排裂解产生离子  $m/z$  40。









## 七、芳香烃类

### 1. 苯和烷基苯类

苯 (131) 本身的分子离子  $m/z$  78 是基峰, 其不强的裂解是失去氢和乙炔, 分别得离子  $m/z$  77 和 52。甲苯 (132) 的裂解类似于苯的, 也是失氢和乙炔。各种多甲基取代苯类的分子离子有中等强度, 主要裂解都是失氢和失甲基, 失氢和失甲基后可能重排氢原子形成葸烯离子。乙基苯 (142) 和 3 个甲基乙基苯位置异构体 (143~145) 的主要裂解是苯基裂解失去乙基上的甲基, 得基峰  $M-15$  离子。3 个二乙基苯异构体 (146~148) 的主要裂解是失去甲基和乙基, 失去乙基的离子在邻位异构体中最强, 间位异构体

居中，对位异构体最弱，这可能与空间障碍有关，因而可用质谱区别之。3个二乙基苯（149~150）和六乙基苯（151）的主要裂解也是失去甲基和乙基，还有些其他裂解。位置异构不易用质谱区别。一般来说，甲基苯类的分子离子比乙基苯类的强得多，前者有50%的相对丰度，后者有20%的相对丰度。丙基苯（152）的主要裂解是失去乙基，而各种异丙基取代苯类（153~155）仍然是失去甲基，分子离子的相对丰度仍是20%上下。正丁基苯（156）和异丁基苯（157）的主要裂解是失去丙基或异丙基，但又增加了麦氏重排裂解，两种裂解分别得离子  $m/z$  91 和 92。三正丁基苯（158）的主要裂解是麦氏重排裂解，得基峰  $m/z$  204。叔丁基苯（159）则仍然是失去甲基，另能重排失去丙基，但不能进行麦氏重排裂解。正戊基苯（160）和正己基苯（161）的裂解类似于正丁基苯的，苄基裂解得基峰  $m/z$  91，麦氏重排裂解得离子  $m/z$  92，后者有所增强。

乙烯基苯（162）的主要裂解是失氢和重排失去乙炔，也可以失去乙烯基。二乙烯基苯（163）也是失氢，但能重排失去甲基。乙炔基苯（164）则是失去乙炔，得炔苯离子  $m/z$  76 的中强峰。

## 2. 萘及甲基萘类

萘（165）的分子离子  $m/z$  128 是基峰，基本上没有甚么裂解。一甲基萘类（166, 167）的分子离子仍是基峰，但有强烈的  $M-1$  裂解，并再失去乙炔。多甲基取代萘类（168~172）主要是失去甲基，然后重排成苯并萘离子。

## 3. 多氢萘和甲基多氢萘类

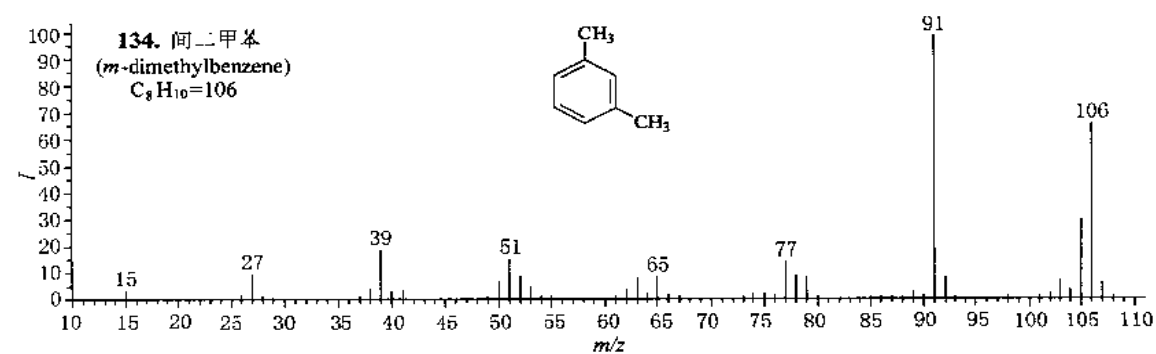
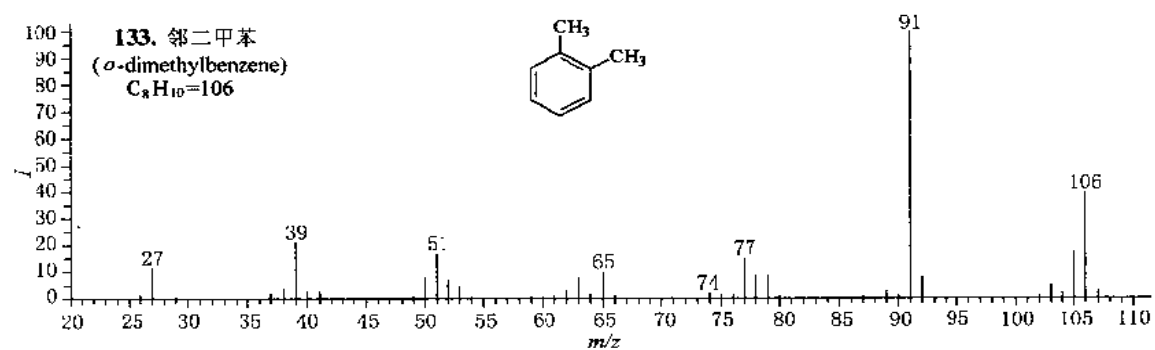
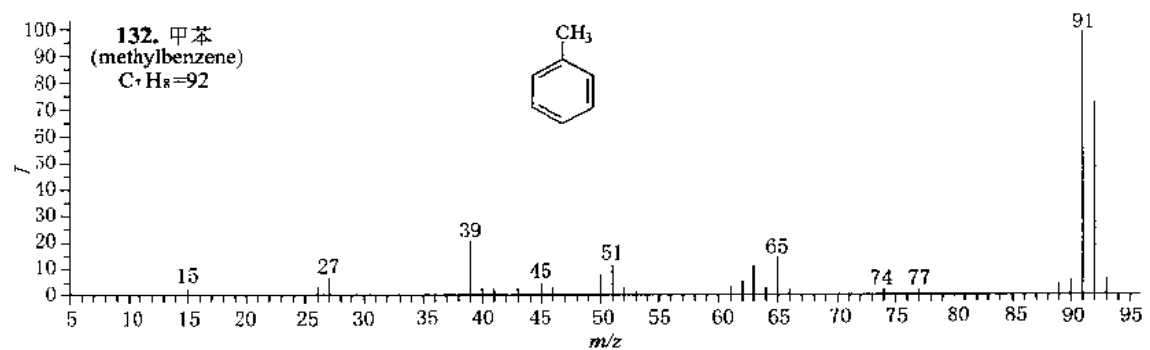
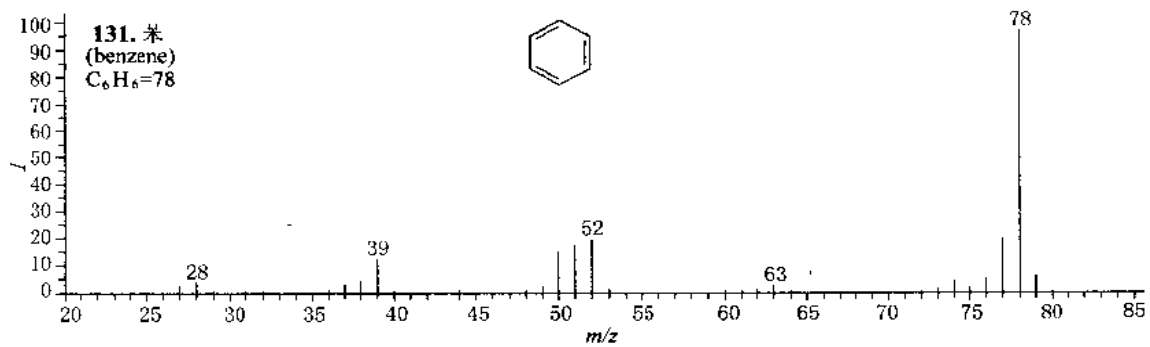
1,2-二氢萘（173）的主要裂解是失氢和重排失甲基，1,2,3,4-四氢萘（174）的主要裂解是能进行环己烯环的 RDA 裂解失去乙烯得  $M-28$  离子  $m/z$  104，重排失去丙烯基得到离子  $m/z$  91 的裂解也能进行，但不很强烈。两个十氢萘异构体（175, 176）的裂解很相似，主要是重排失去乙基、丙烯、丙基、丁烯、丁基、戊烯及戊基等，裂解的任意性很大，这是由于它们缺乏定向裂解中心和次级定向裂解中心之故。甲基取代的 1,2-二氢萘类（177~179）主要是失去甲基，并能内部重排再失一氢得稳定的萘分子离子  $m/z$  128。单甲基和二甲基取代的 1,2,3,4-四氢萘类（180~184）因甲基取代位置不同主要裂解也不同。例如 2-甲基和 2,3 二甲基取代者的主要裂解是环己烯环的 RDA 裂解失去丙烯和丁烯得基峰  $m/z$  104；6-甲基取代者主要是失去甲基，RDA 裂解降为其次；1,5-和 1,4-二甲基取代者 RDA 裂解更弱，主要裂解是苄基裂解失去甲基。

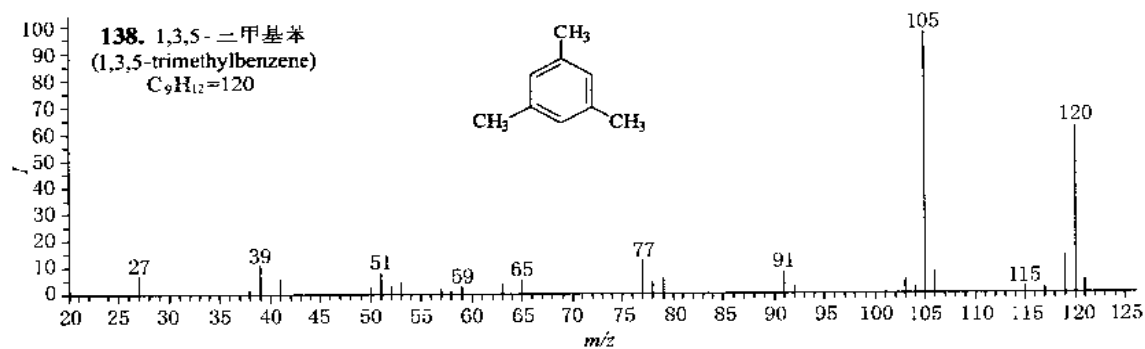
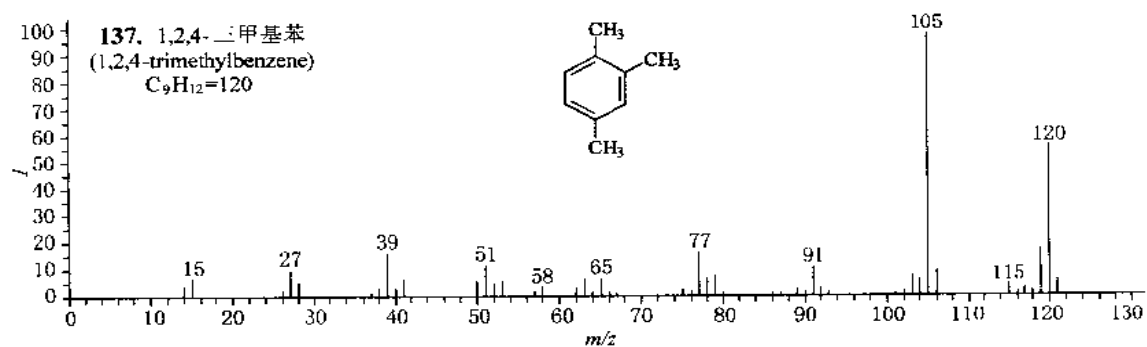
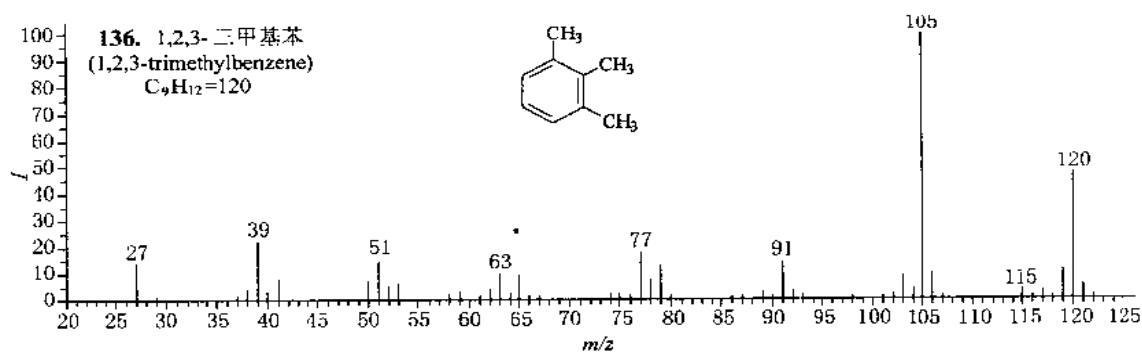
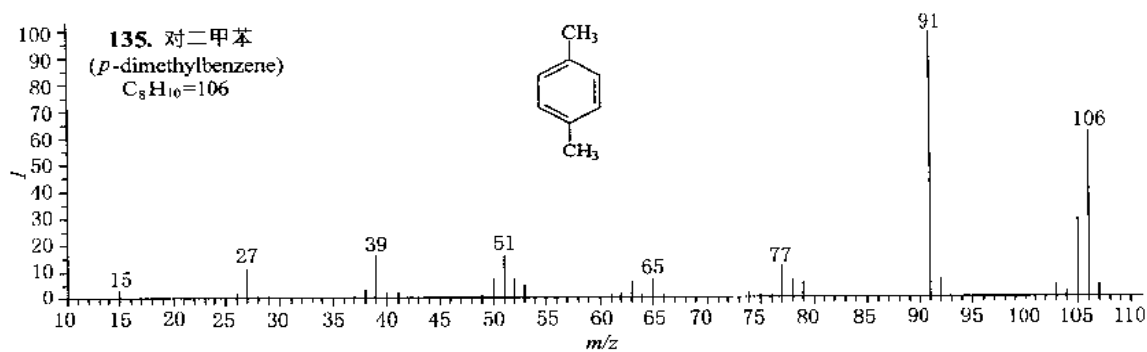
## 4. 联苯类

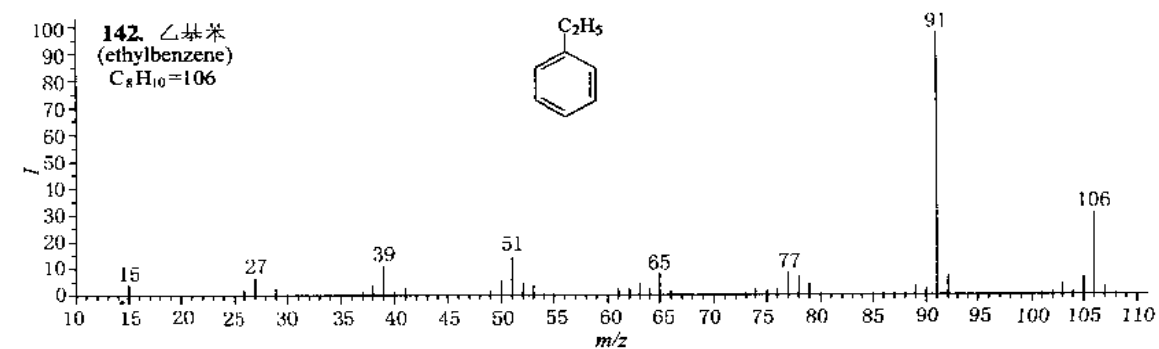
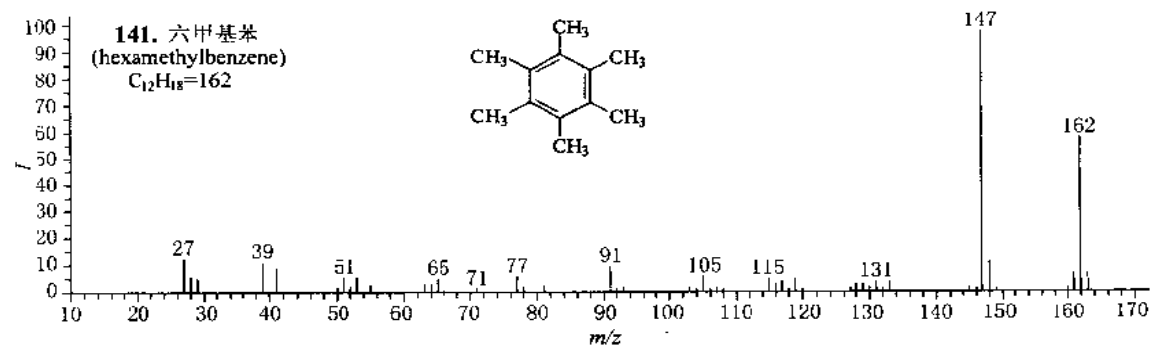
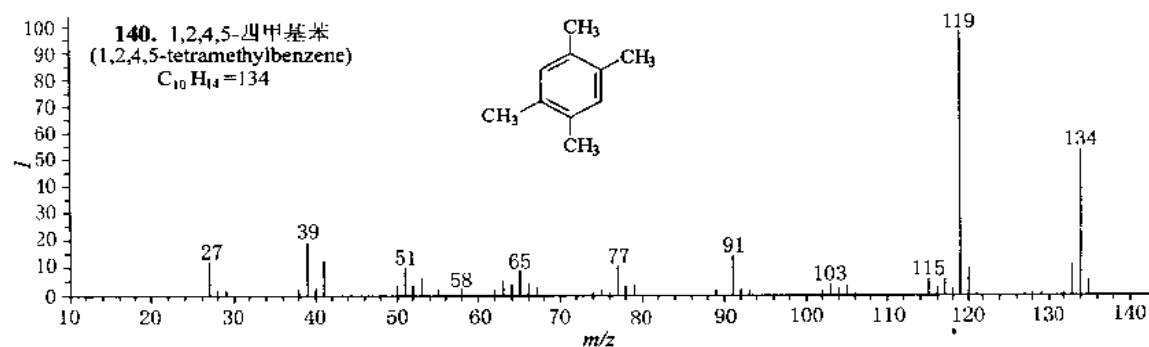
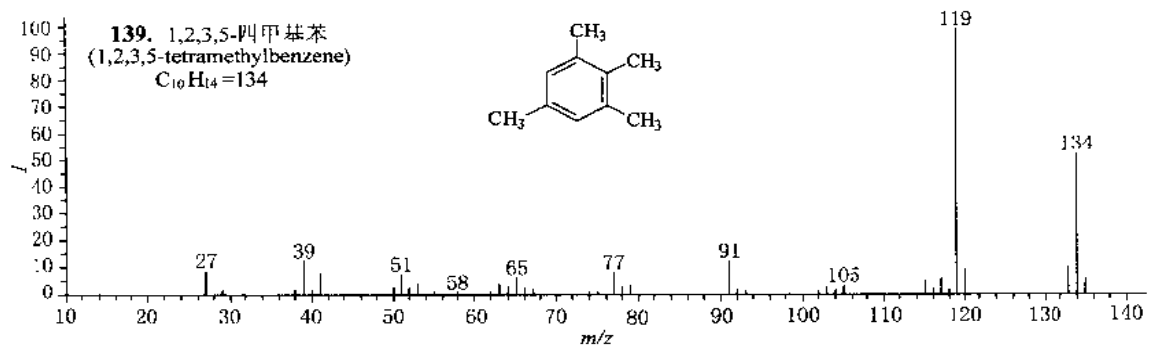
二联苯（185）的分子离子是基峰，较弱的裂解是失去乙炔和四元环的裂解生成炔苯离子，分别得离子  $m/z$  126 和 76。联苯（186）的裂解是生成苯基离子  $m/z$  77，再失氢也得炔苯离子  $m/z$  76。3个甲基取代的联苯异构体（187~189）的主要裂解是失氢和失甲基，彼此不易用质谱区别。二苯甲烷（190）也是失氢，失甲基必须经过重排。1,2-二苯乙烷（191）进行双苄基裂解得基峰  $m/z$  91，1,2-二苯乙烯（192）则不能进行这样的裂解。3个三联苯异构体（193~195）的分子离子都是基峰，裂解较难，芴（196）亦如此。四苯甲烷（197）能连续失去两个苯基生成基峰  $m/z$  243 和芴的分子离子  $m/z$  166，再失一氢得次强离子  $m/z$  165。

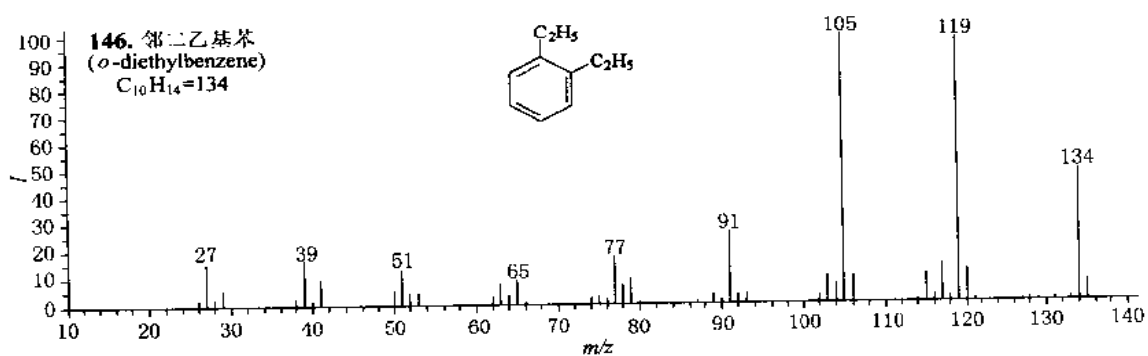
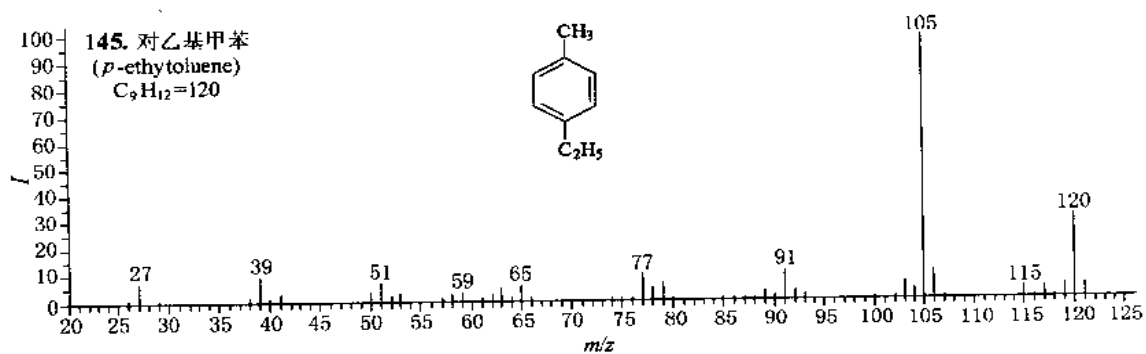
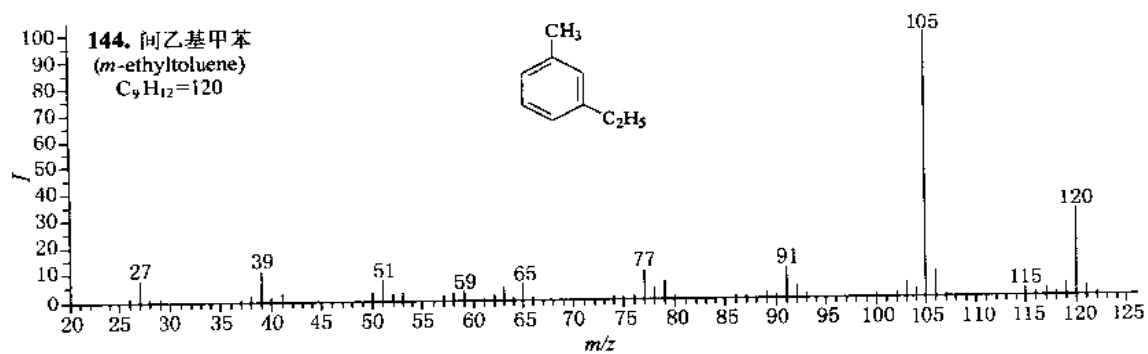
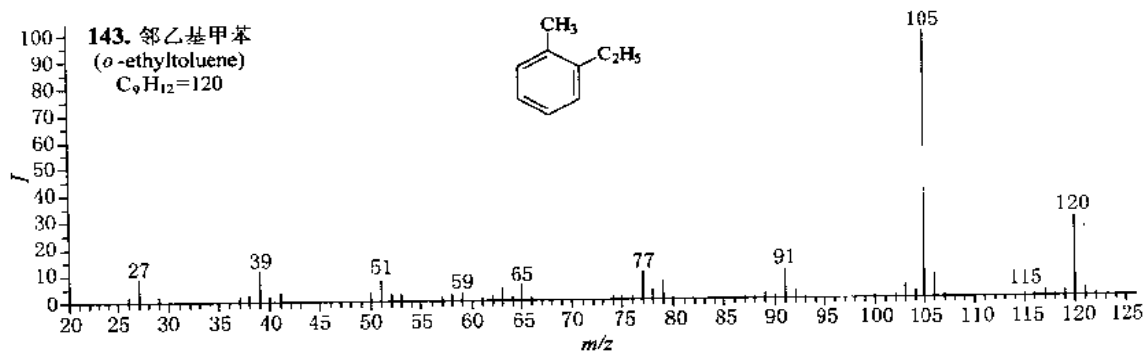
## 5. 稠环类

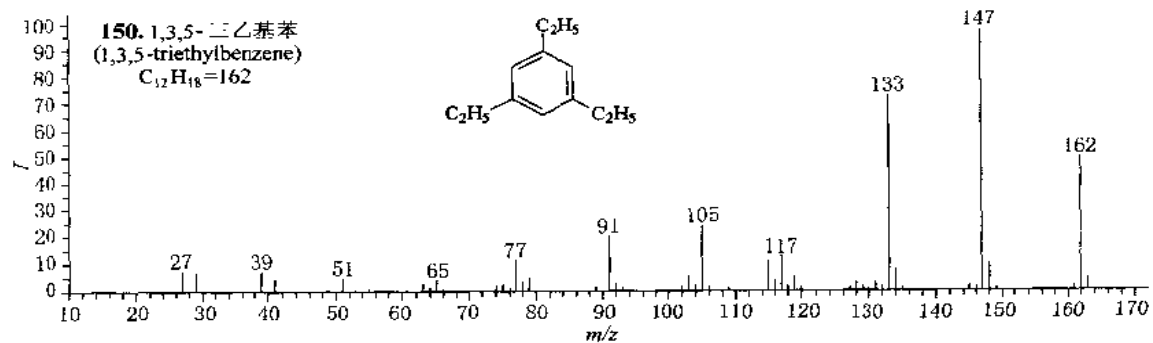
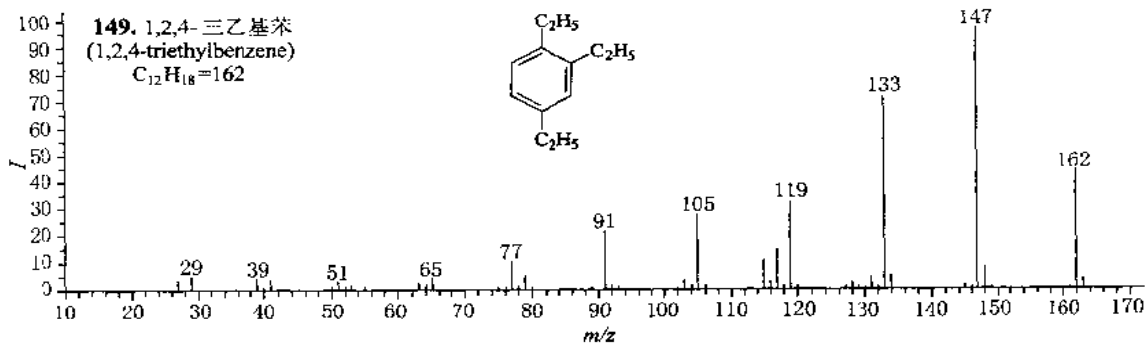
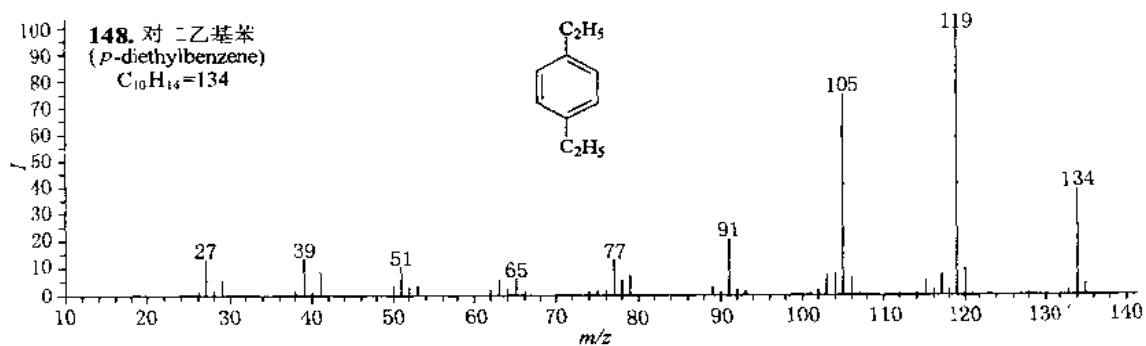
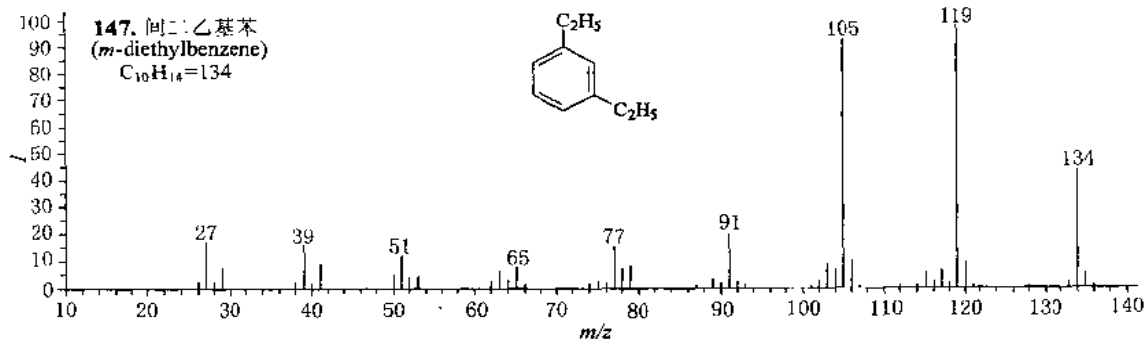
稠环芳香烃类的分子离子都是基峰，裂解很少，失去乙炔和乙烯的裂解很弱，都出现双电荷分子离子，且较强。



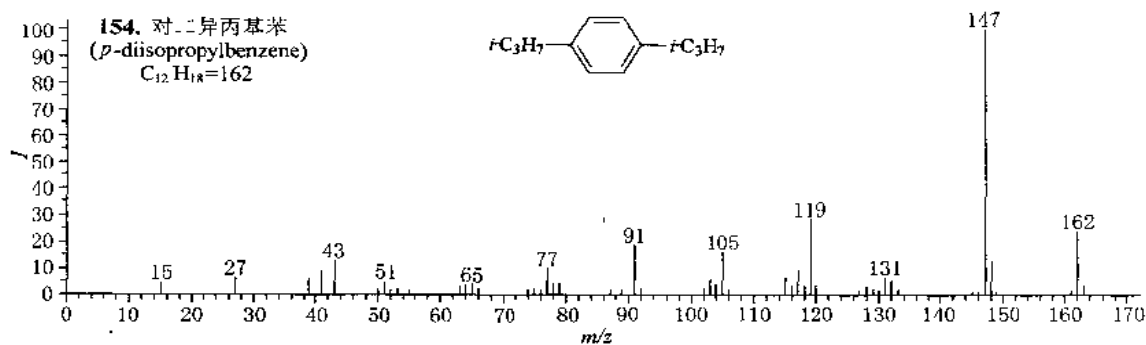
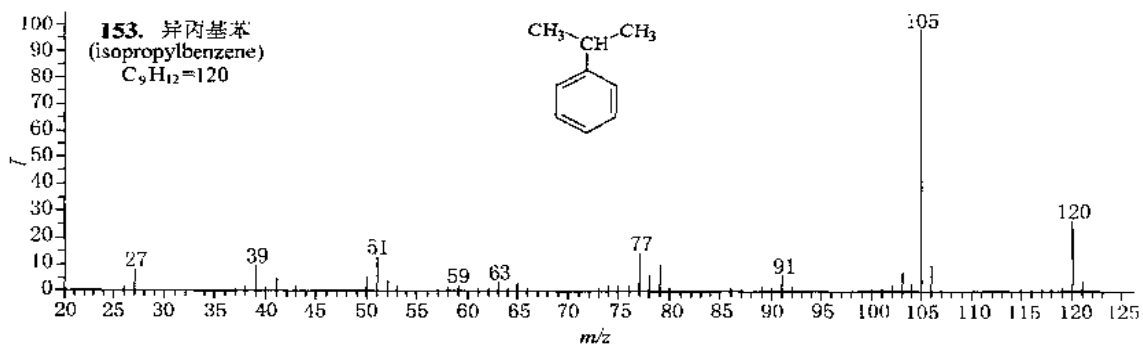
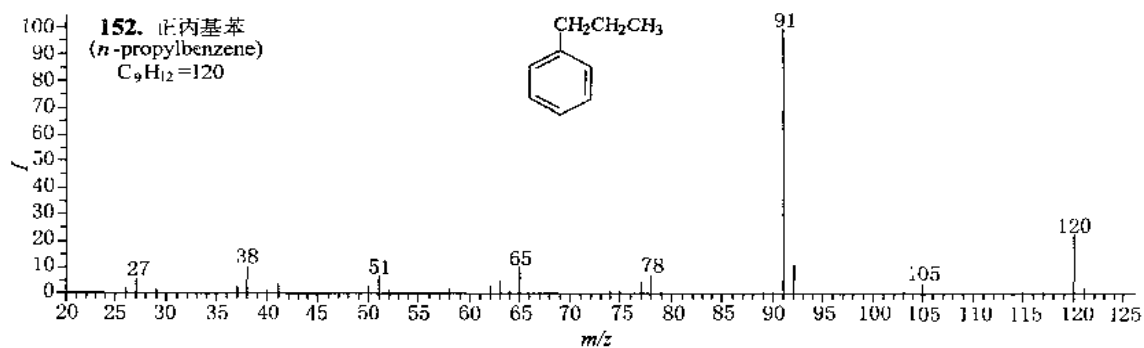
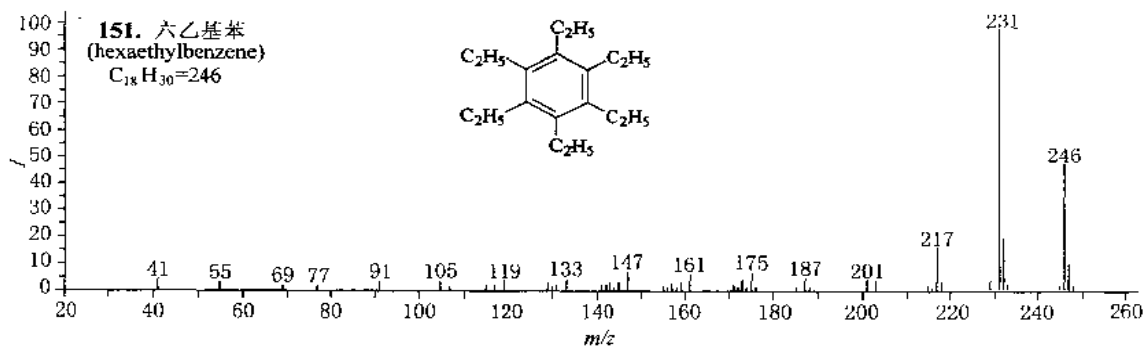


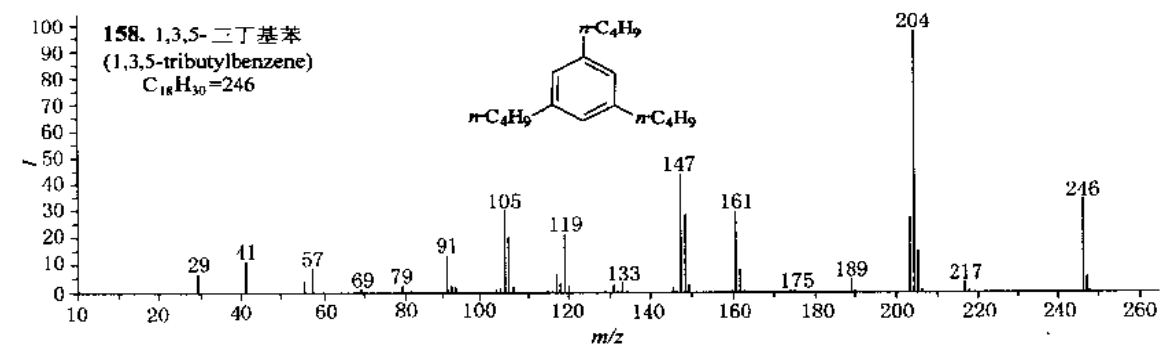
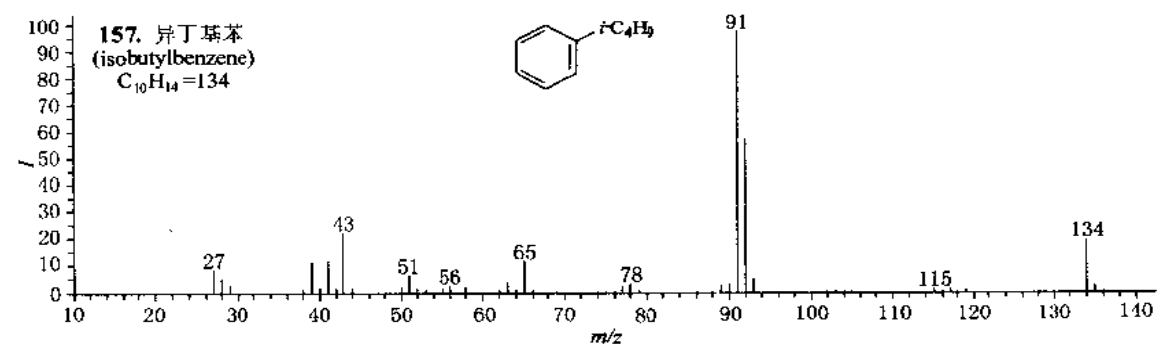
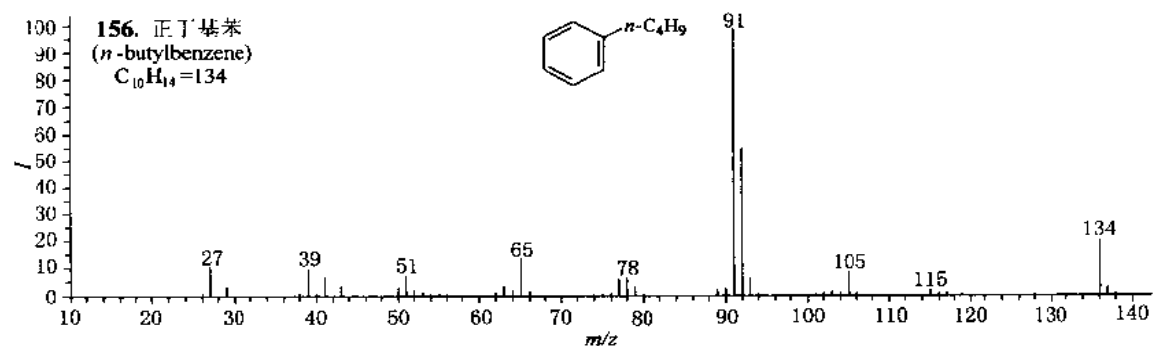
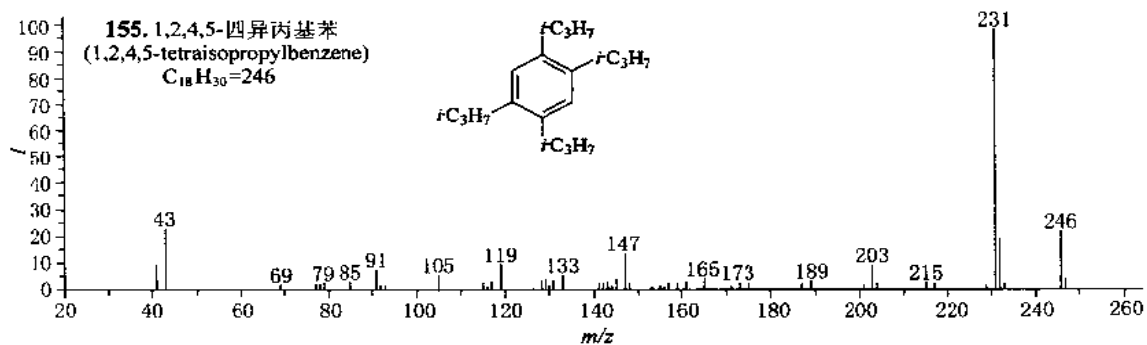


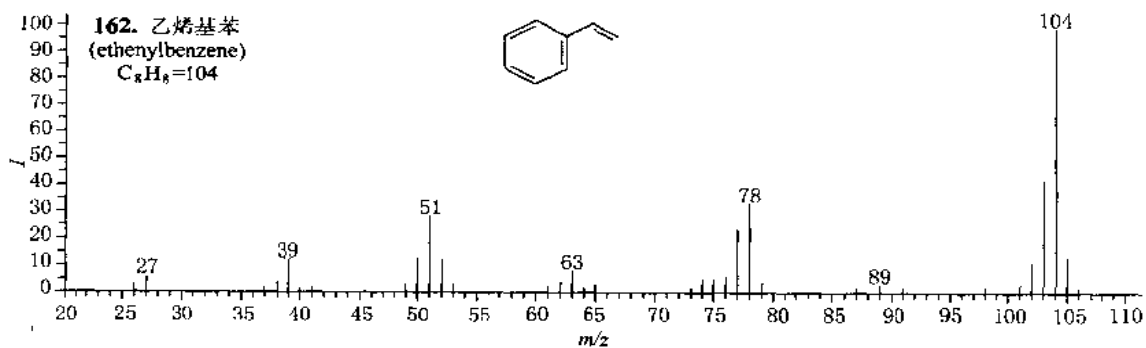
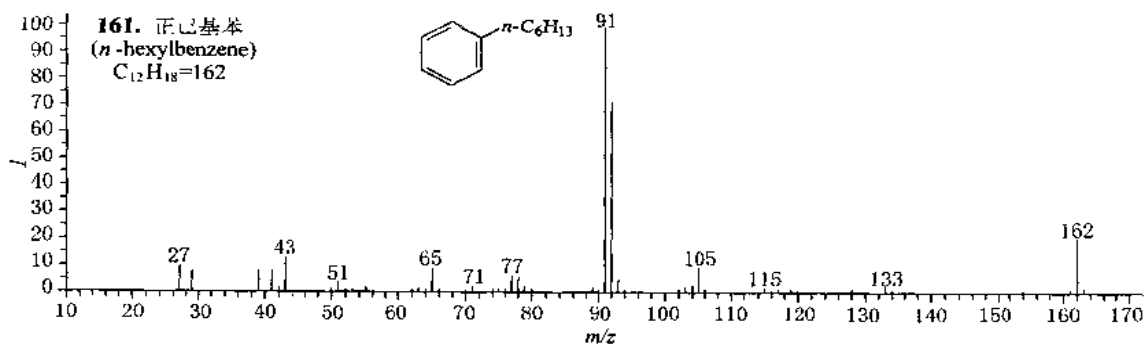
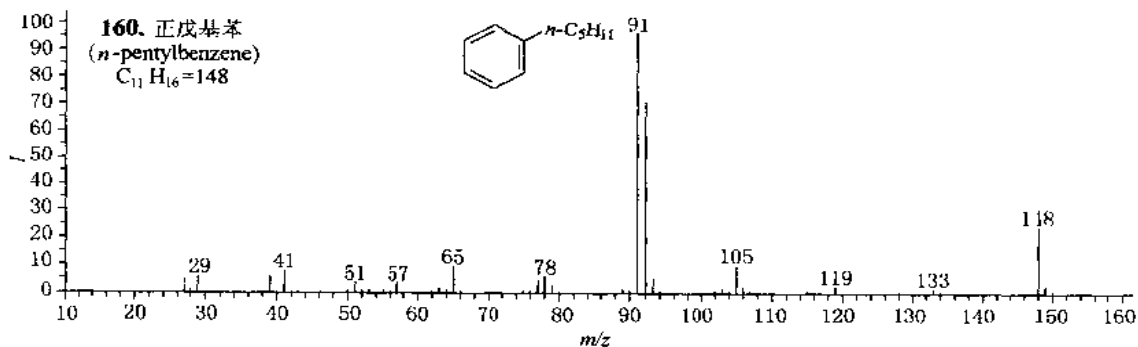
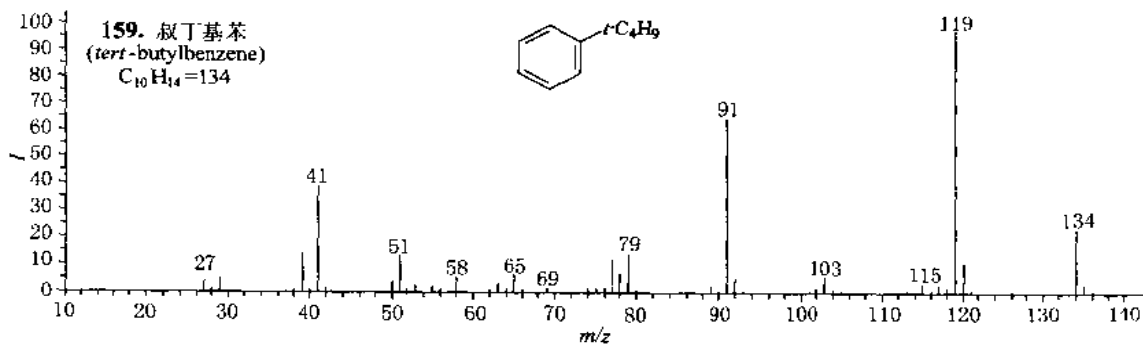


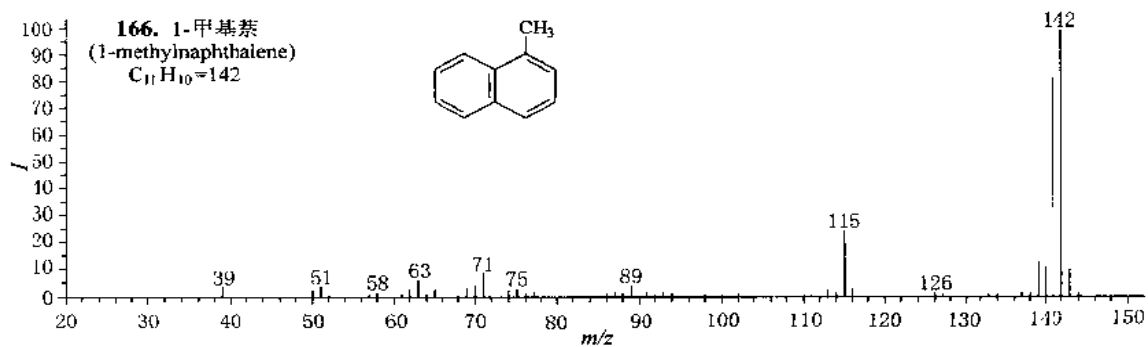
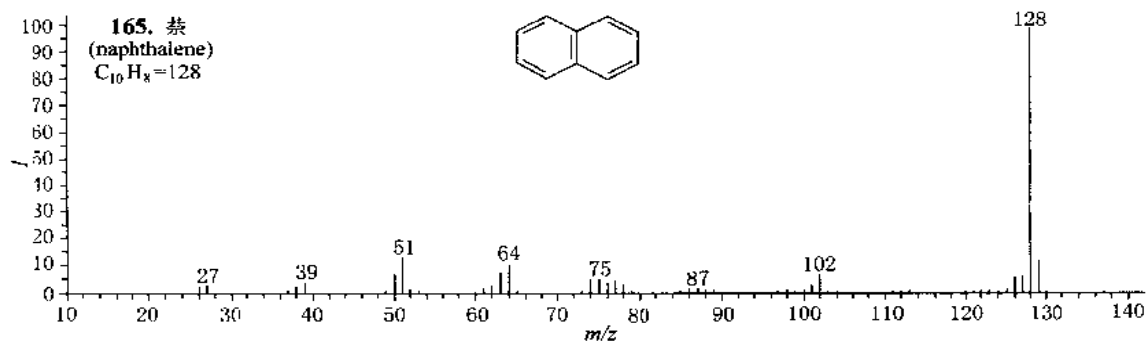
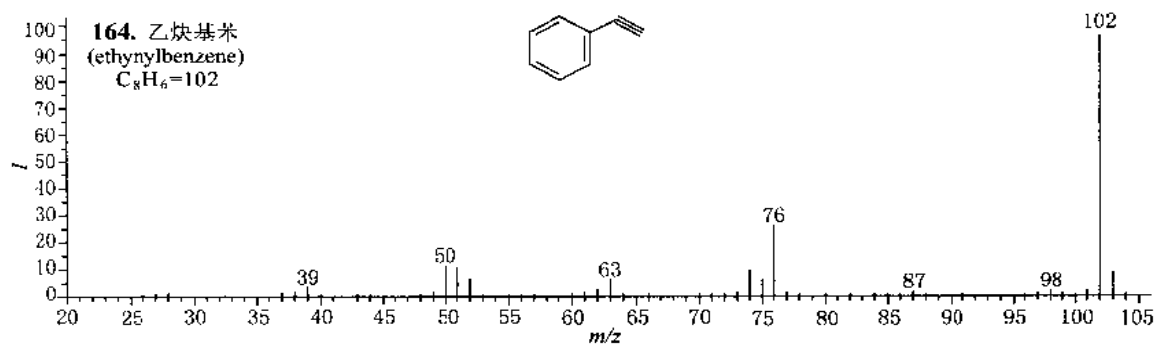
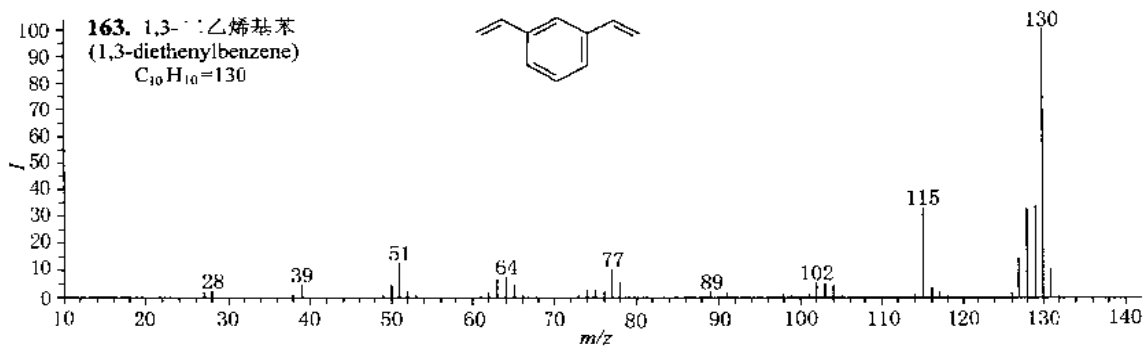


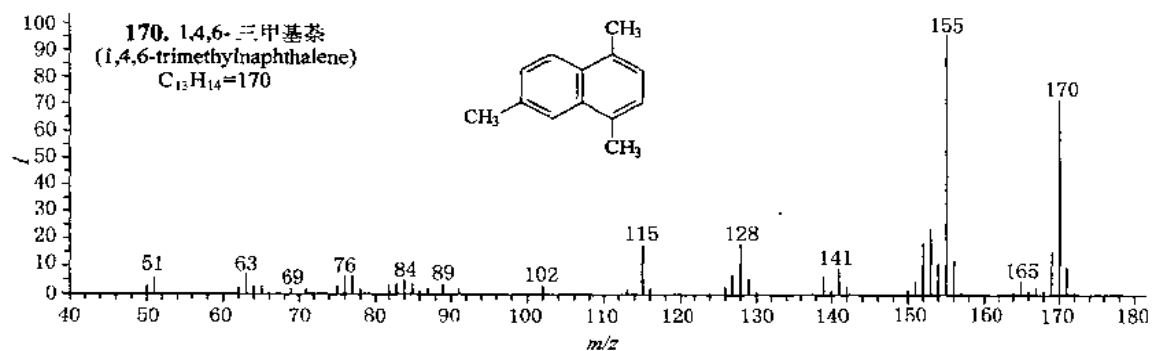
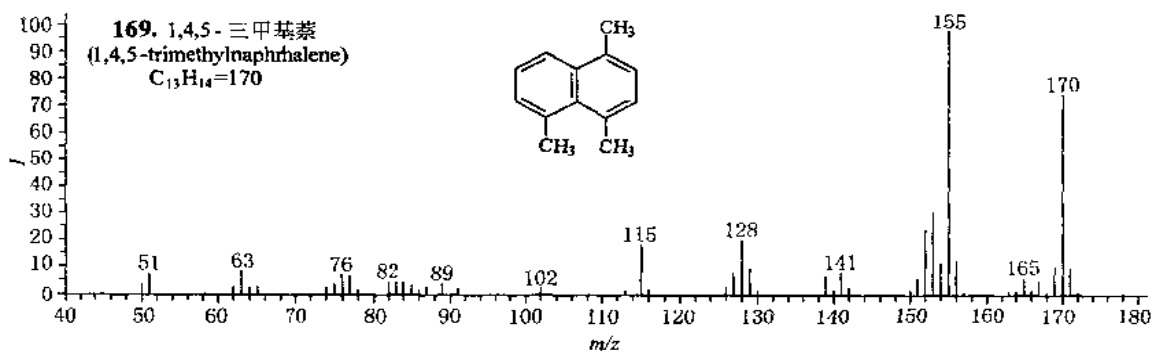
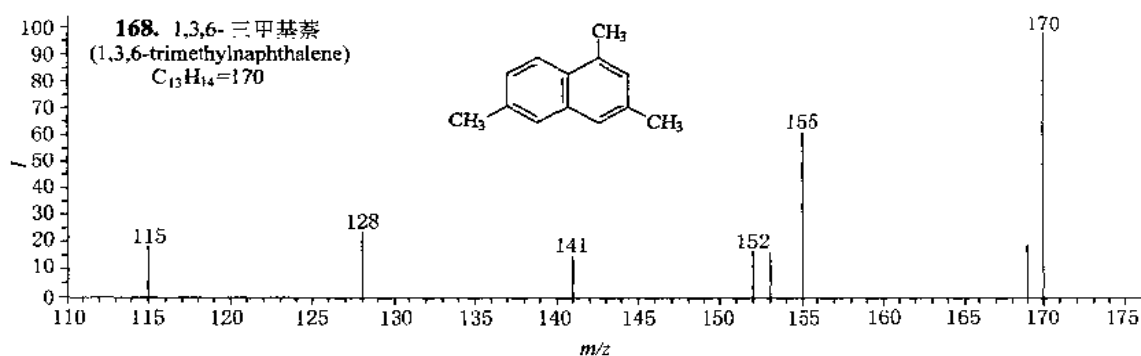
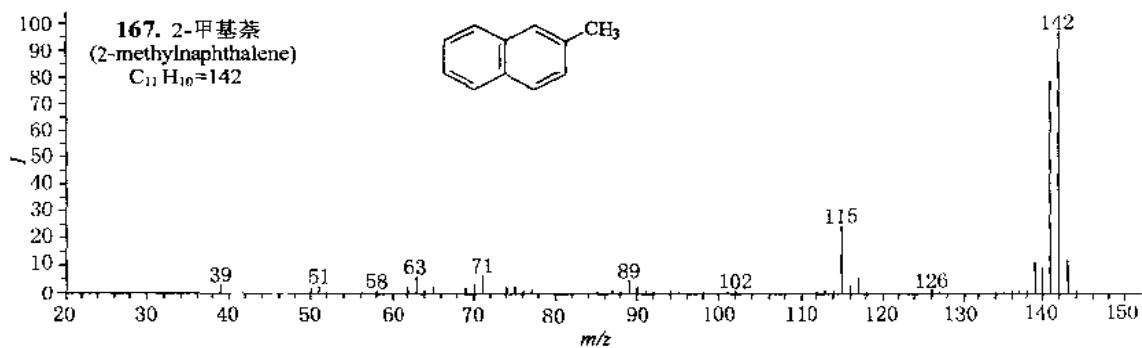


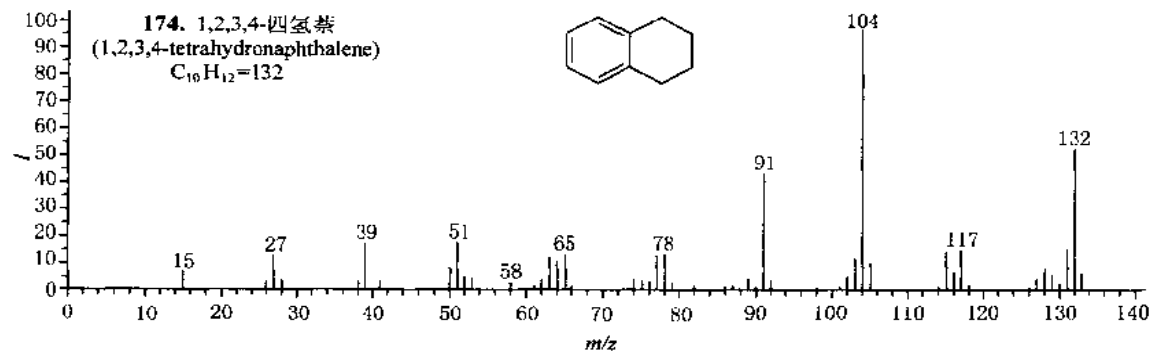
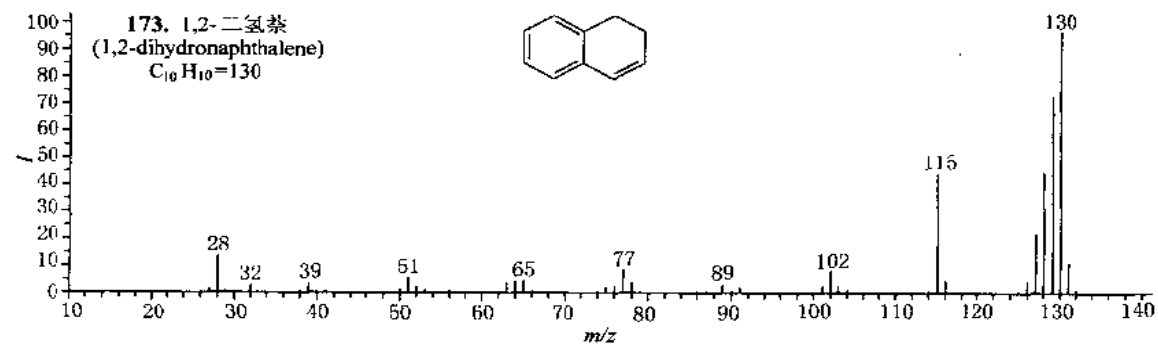
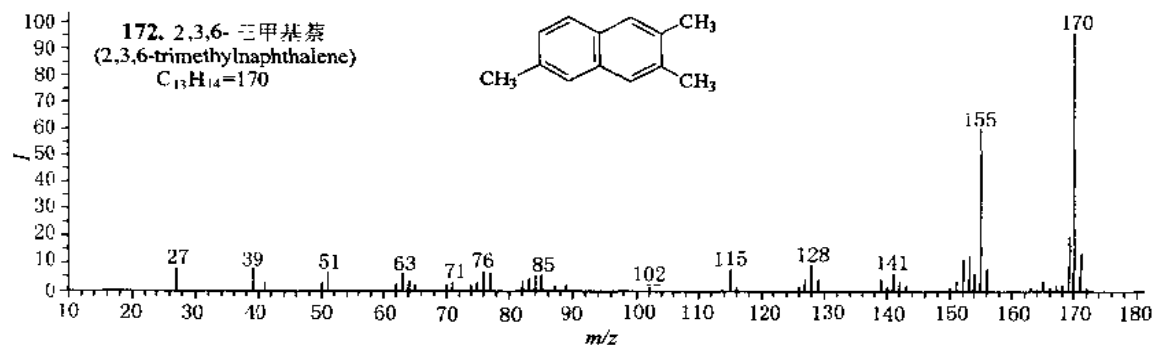
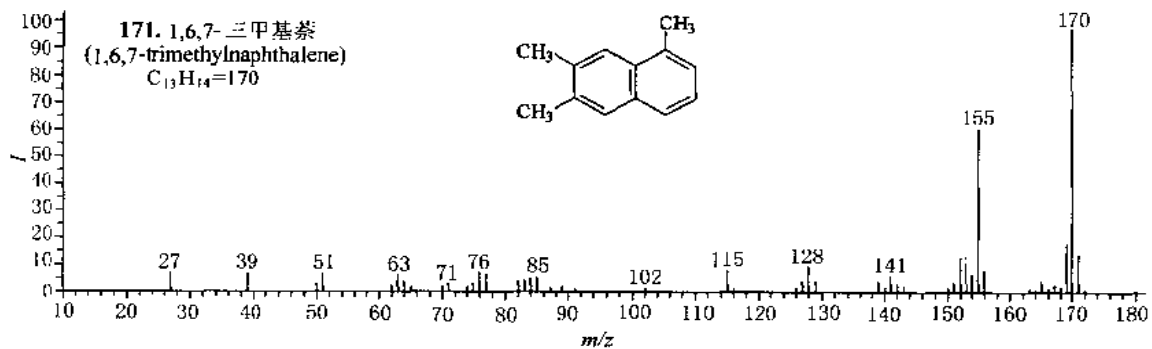


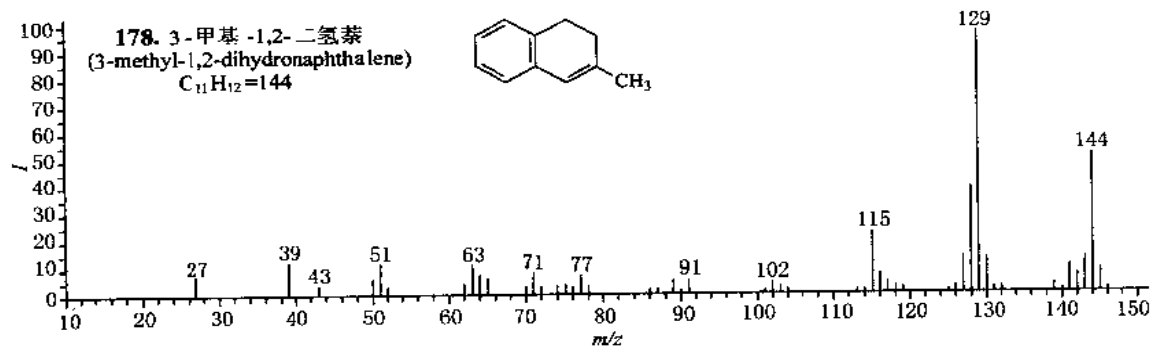
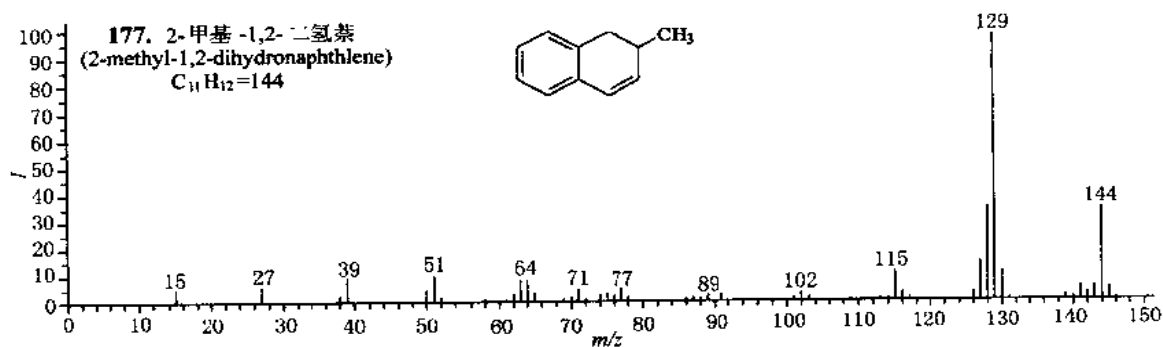
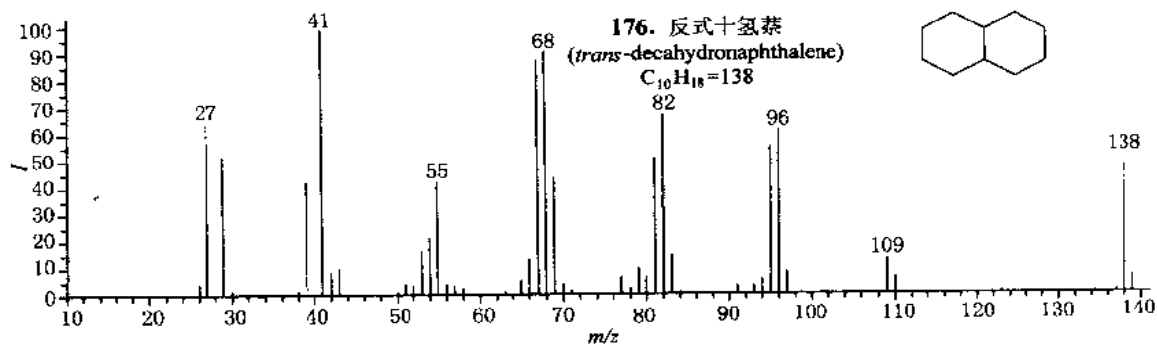
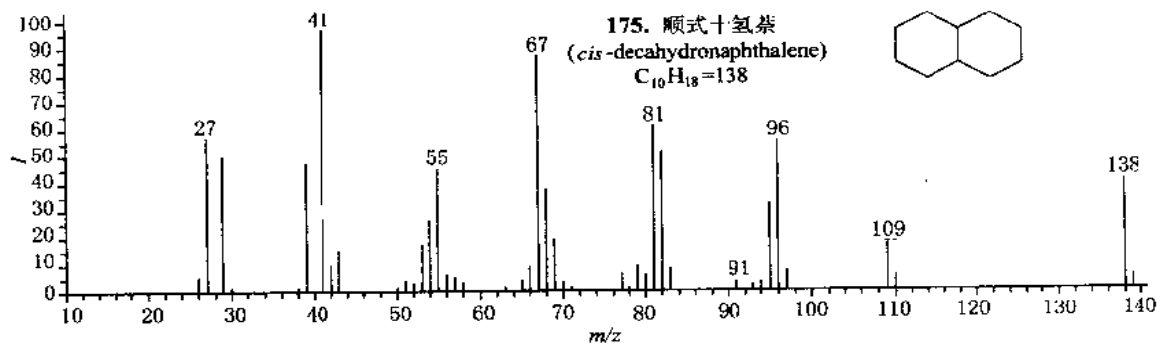


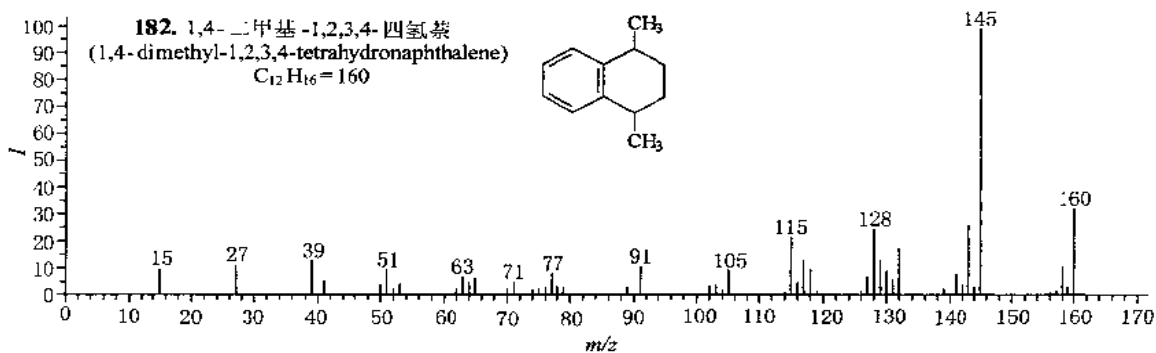
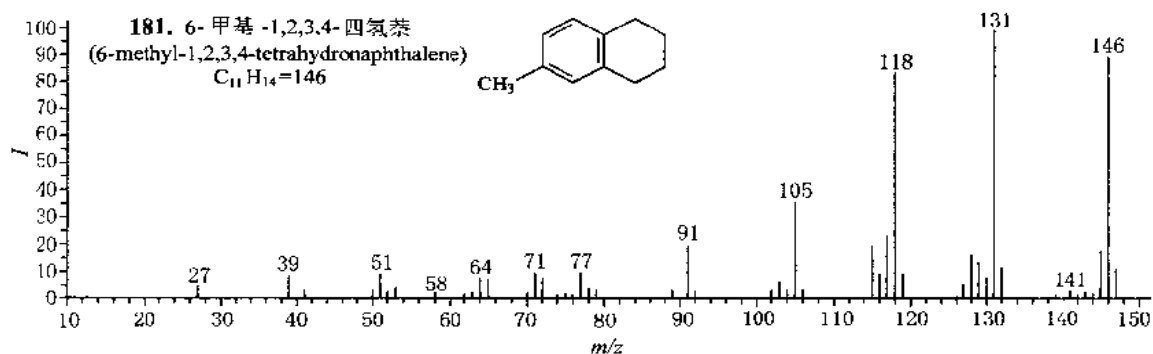
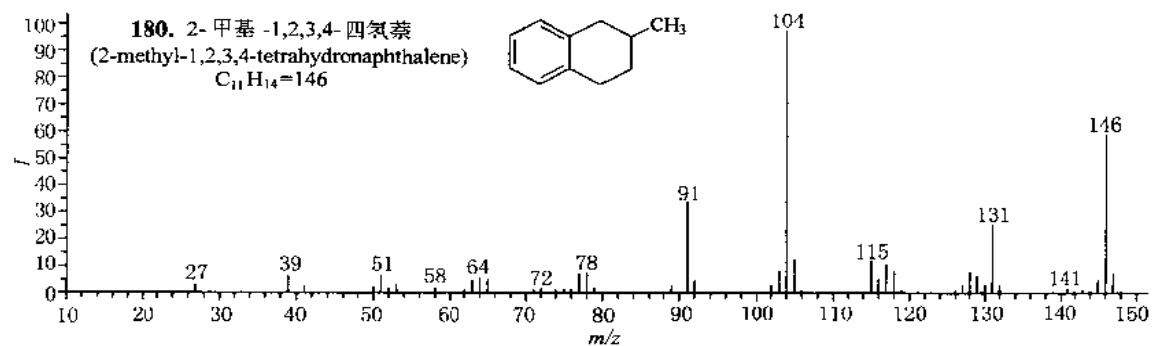
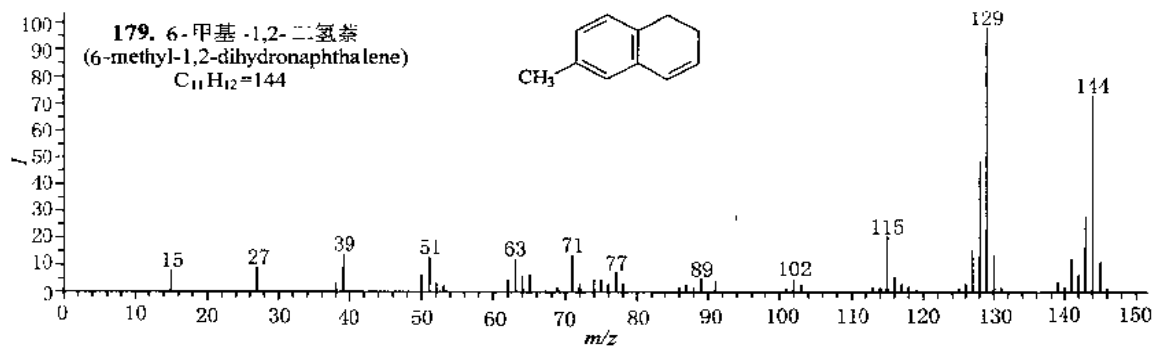




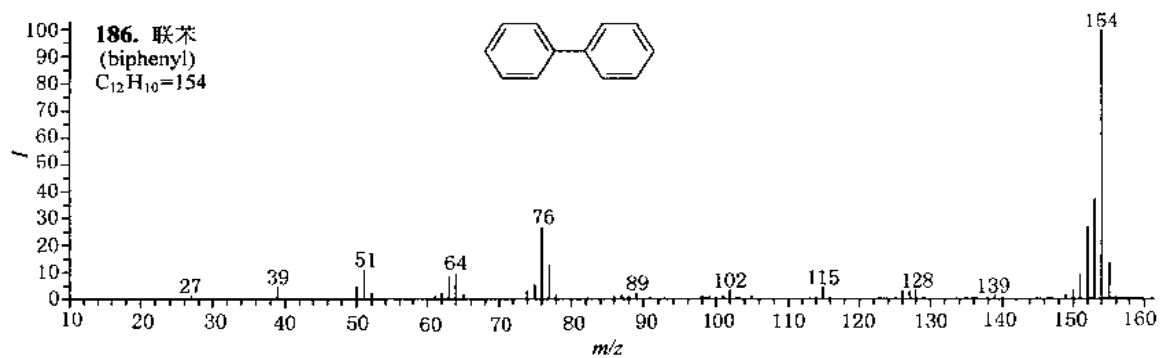
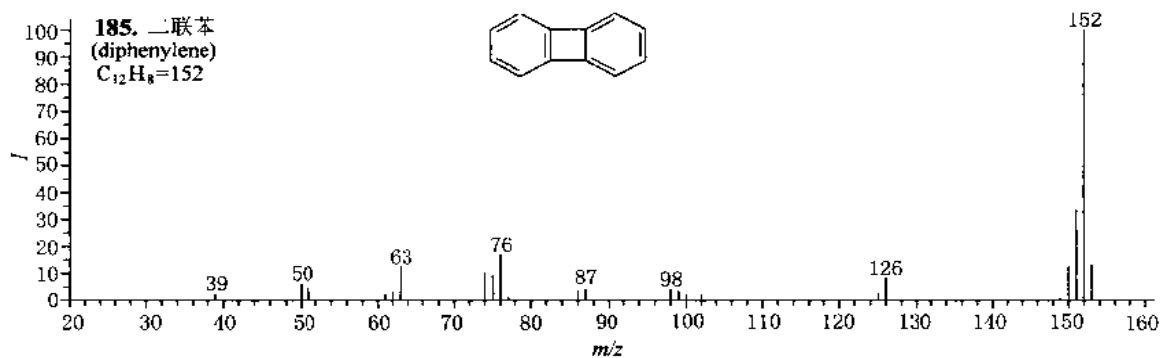
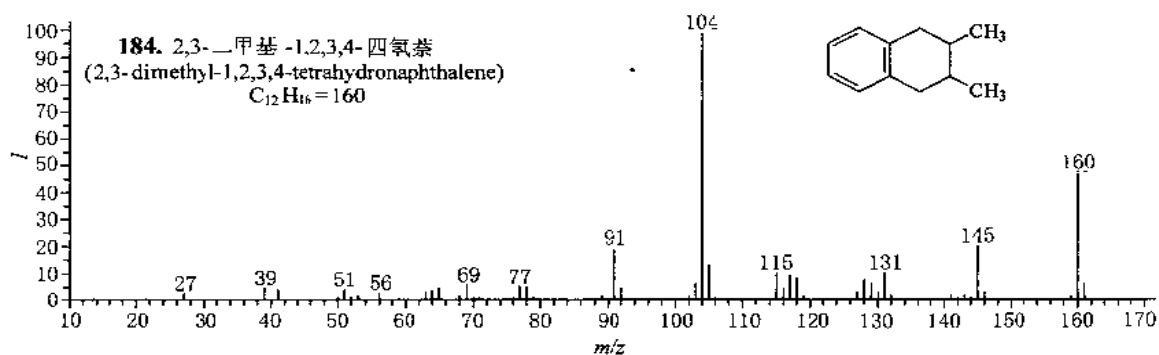
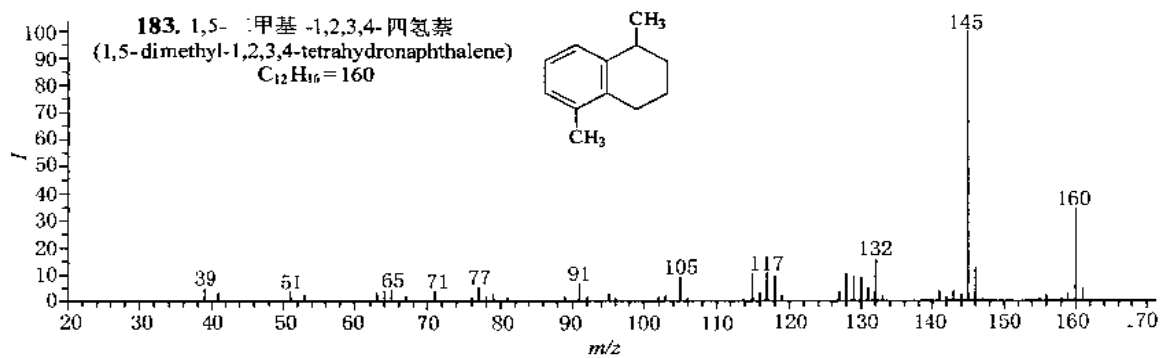


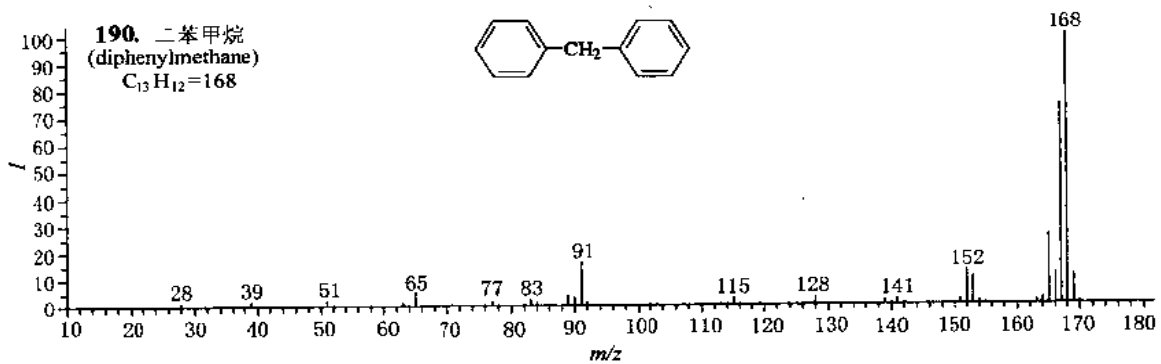
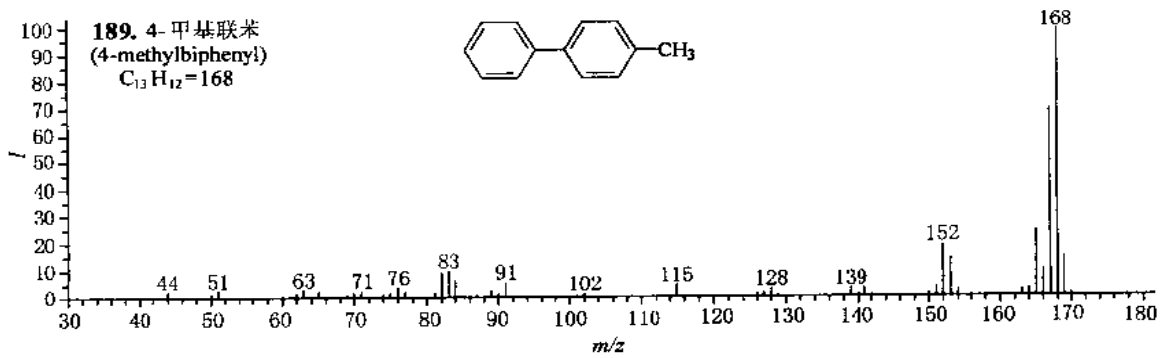
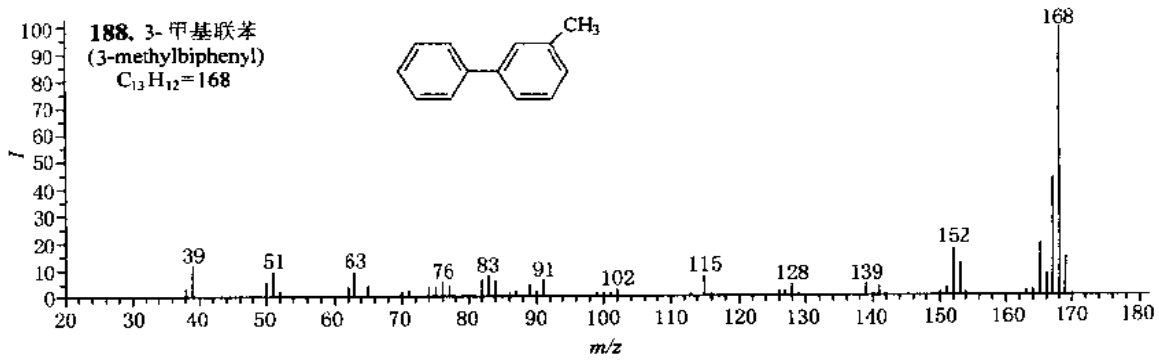
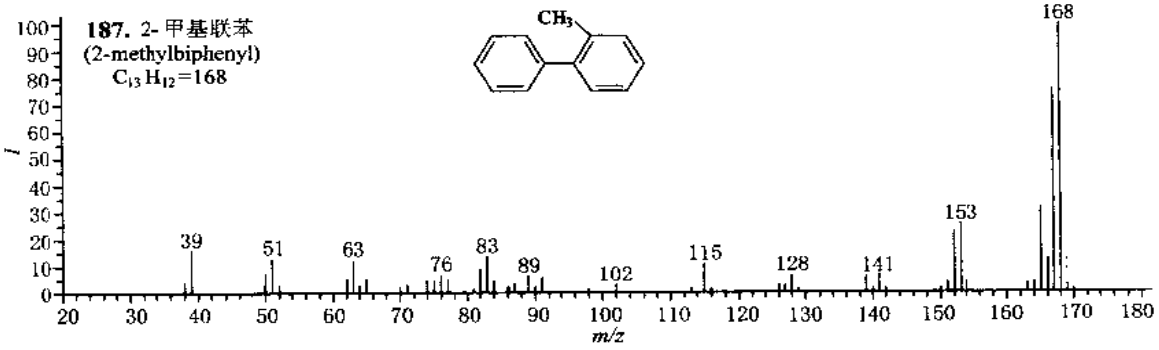


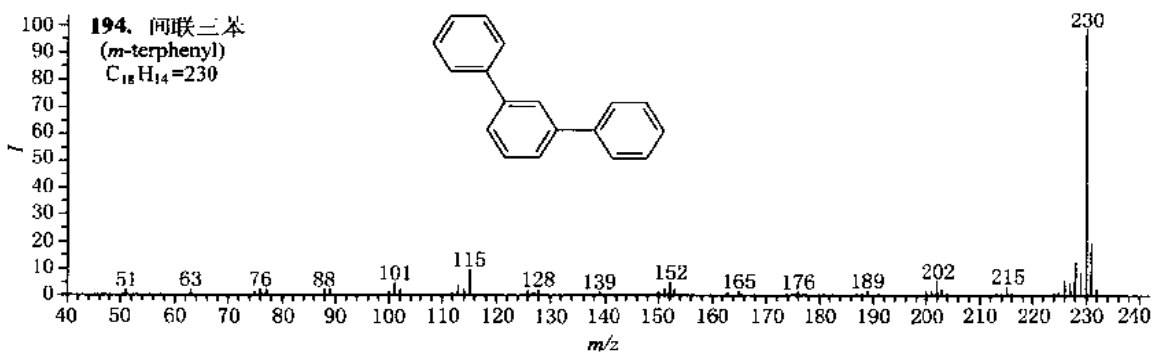
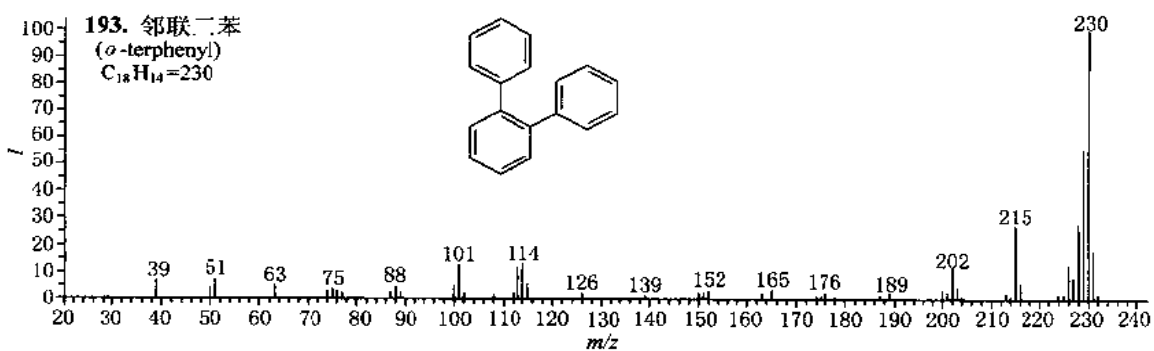
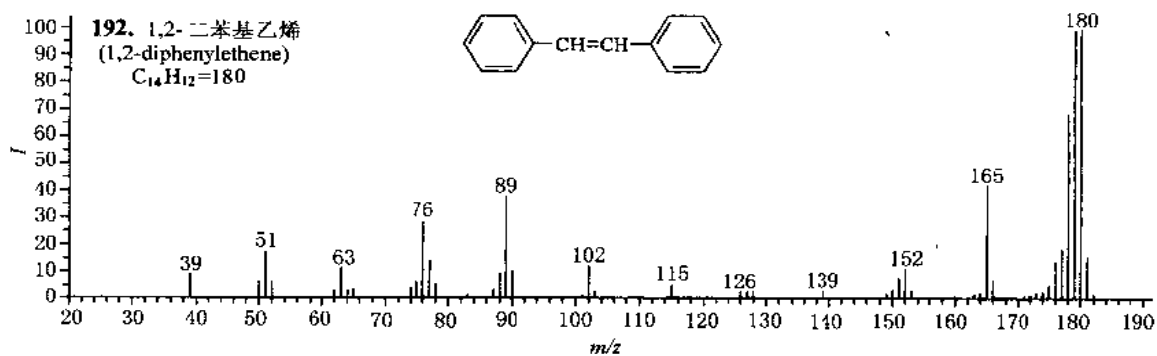
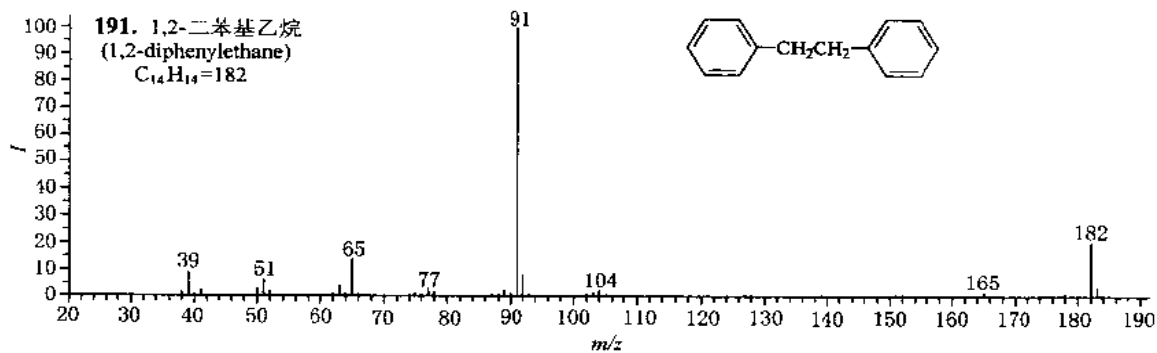


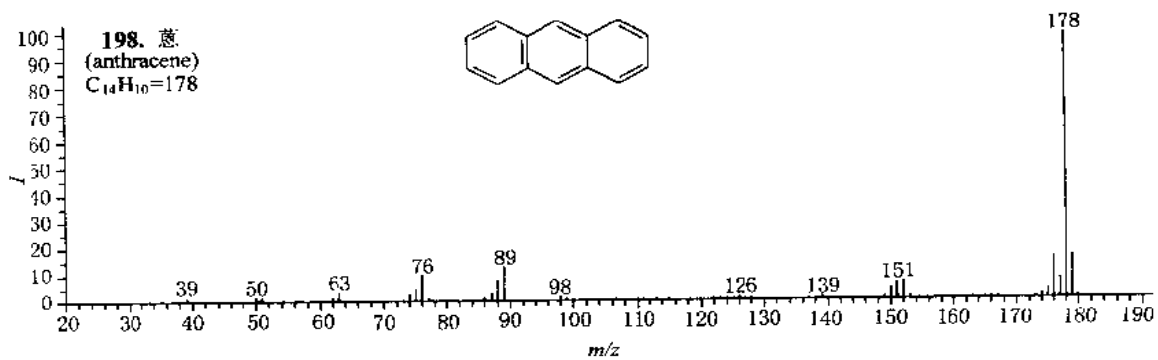
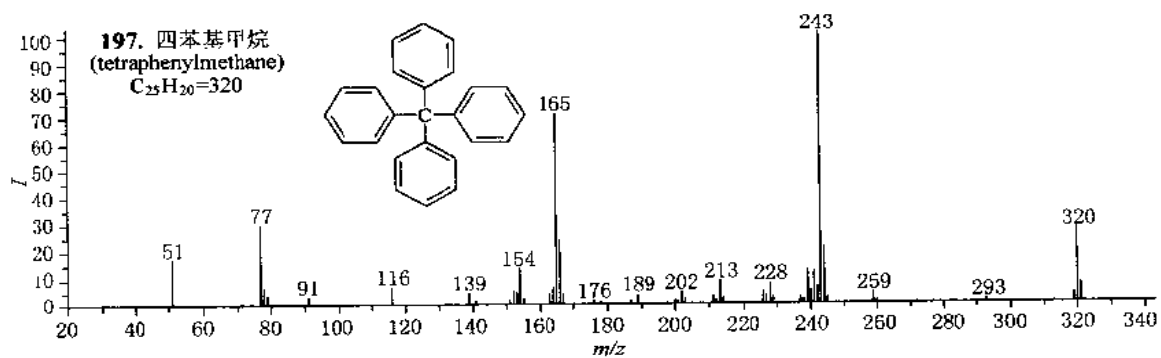
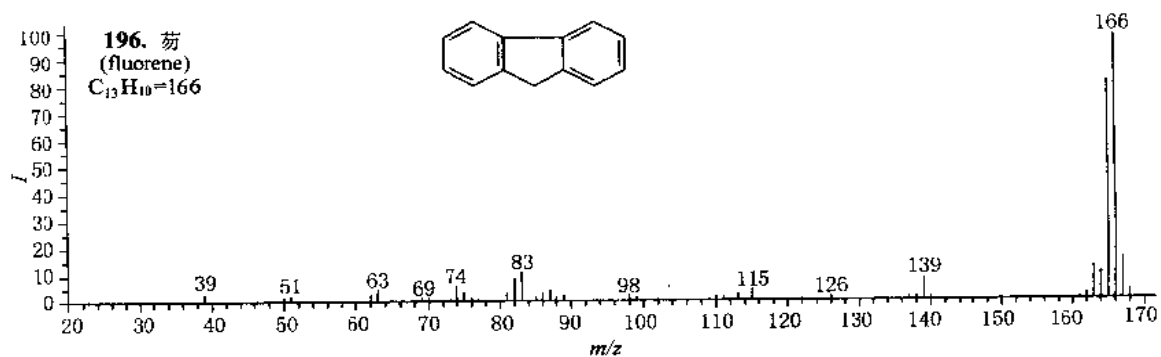
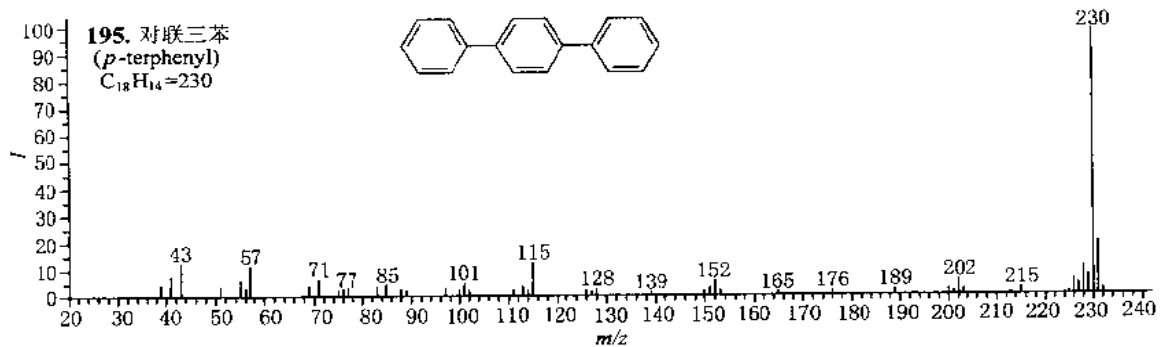


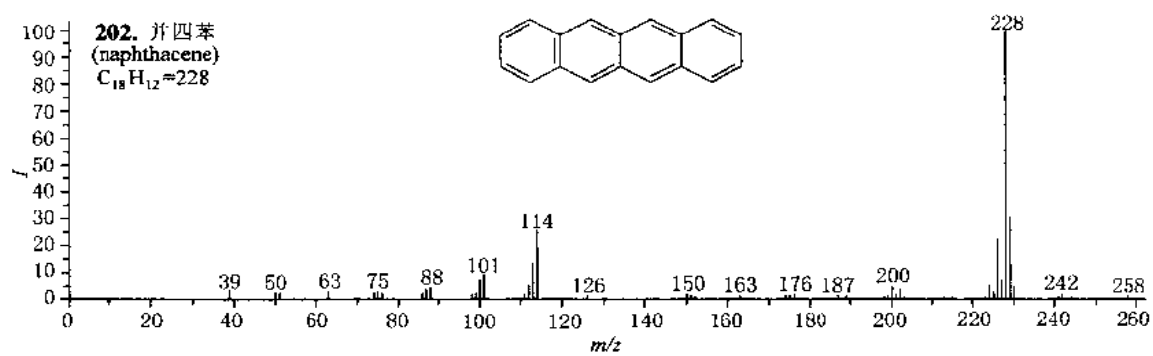
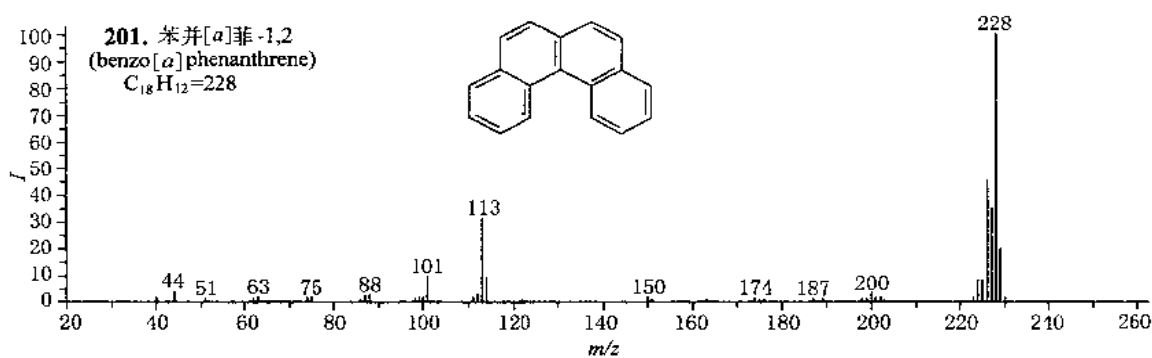
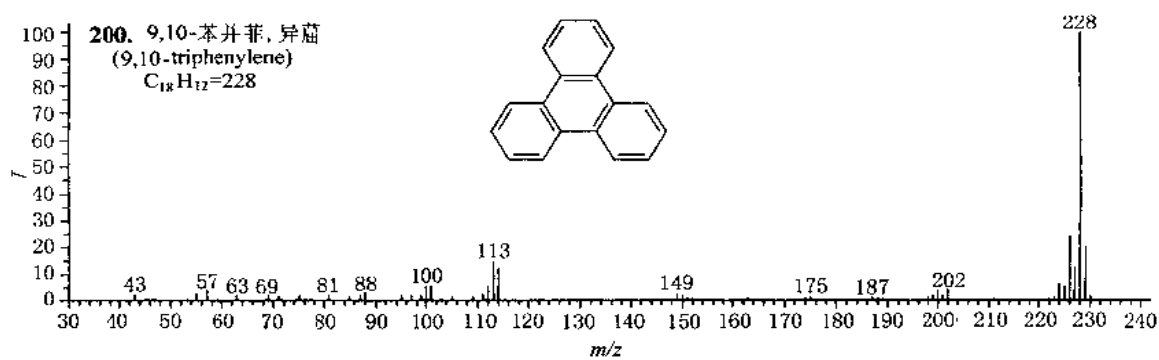
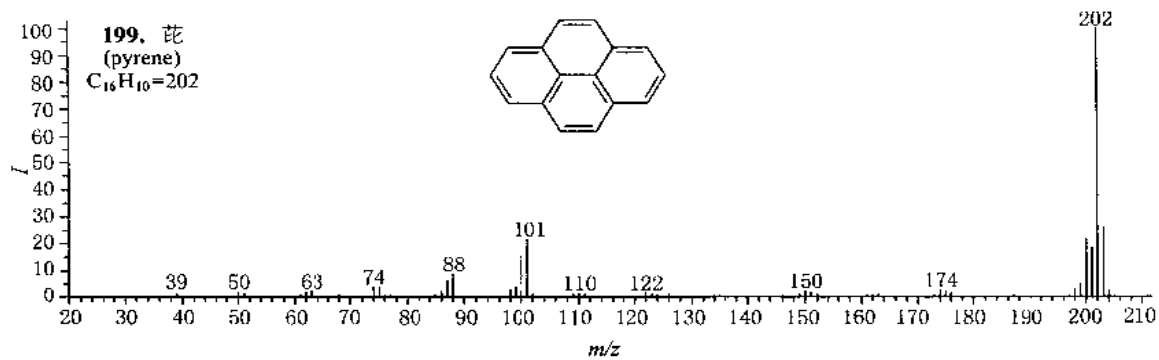


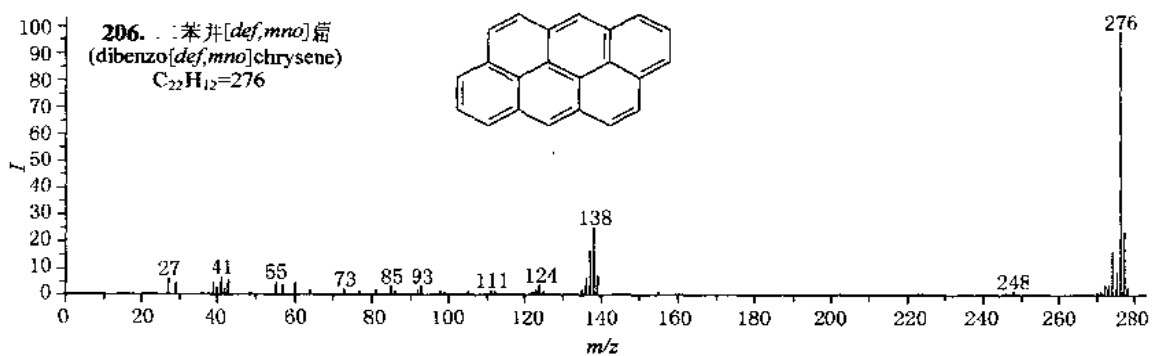
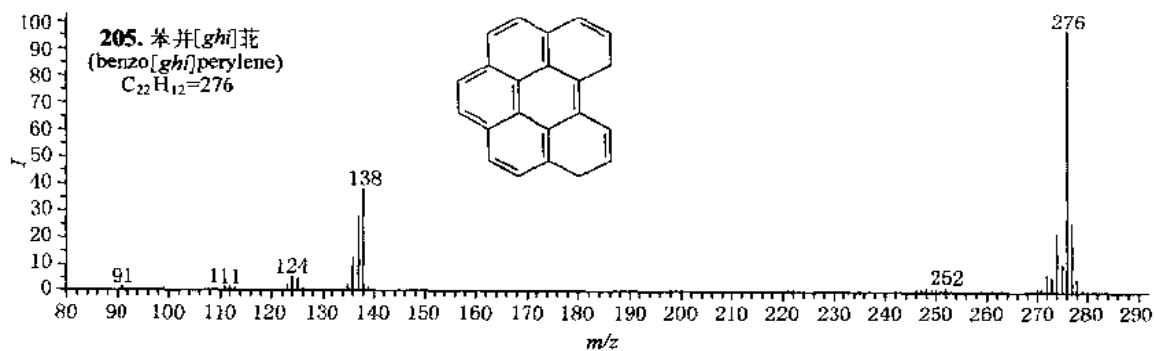
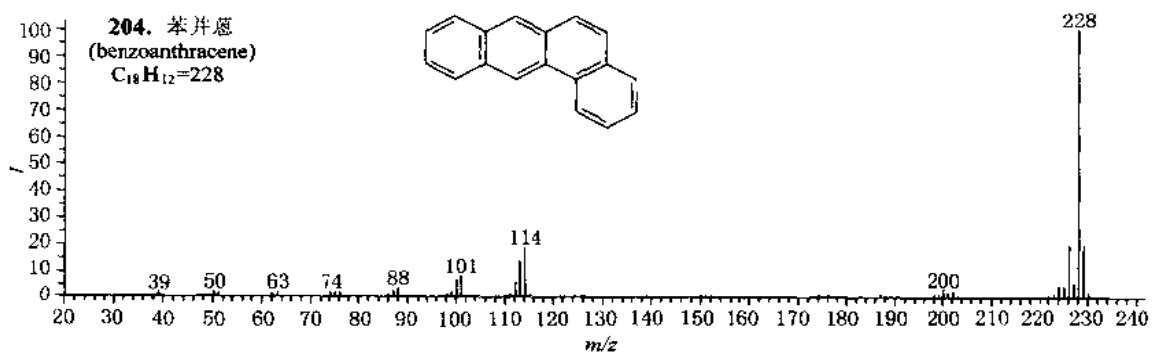
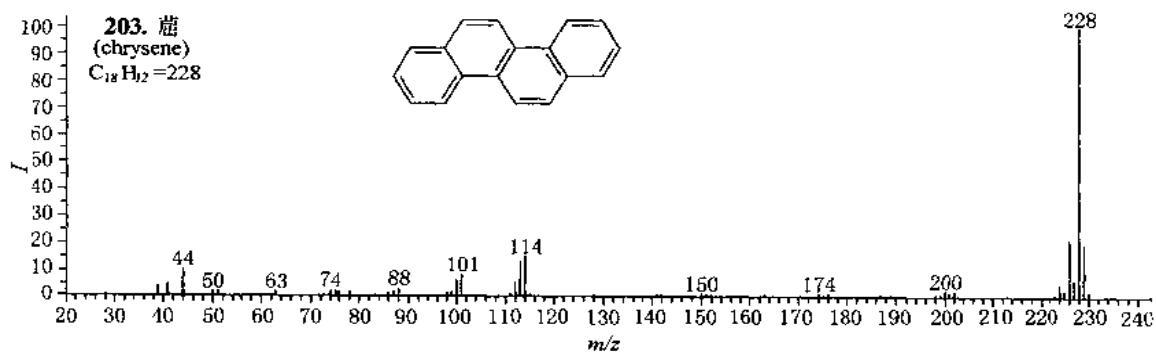


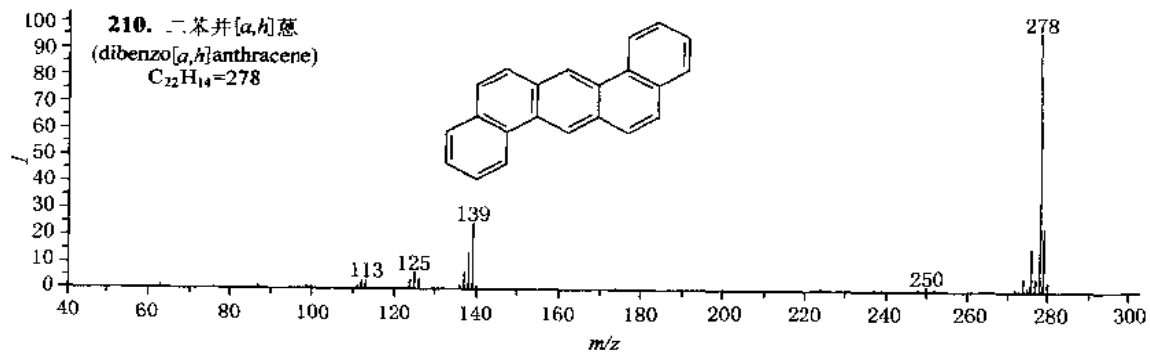
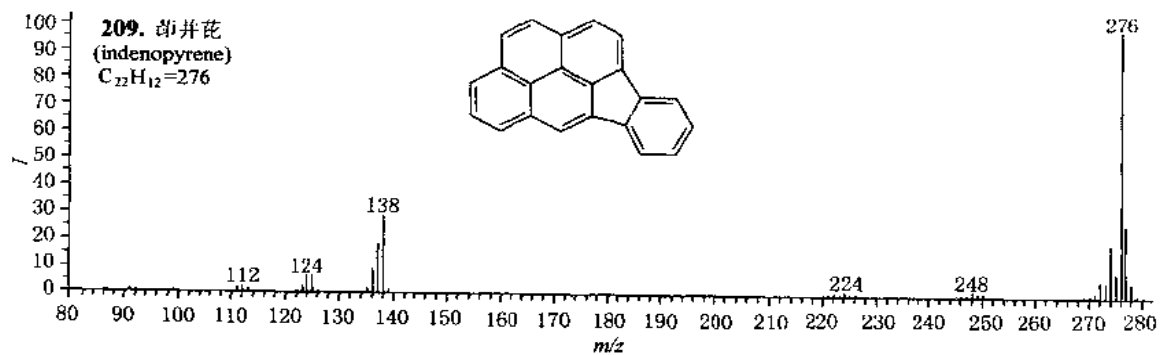
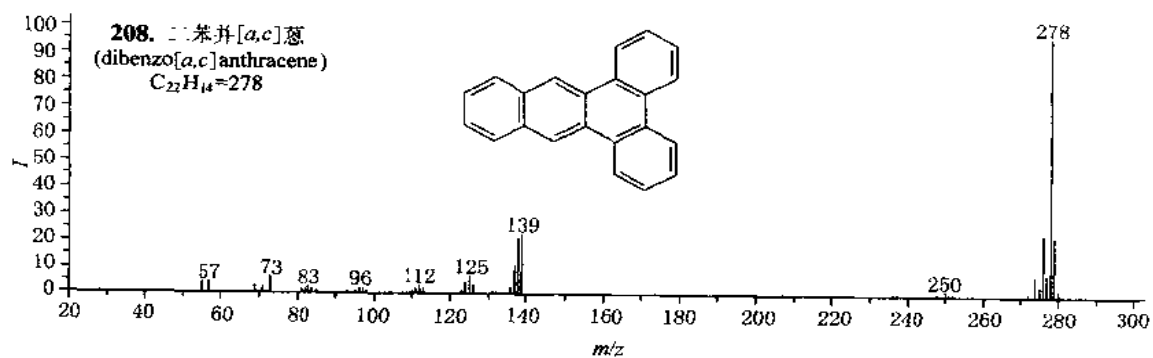
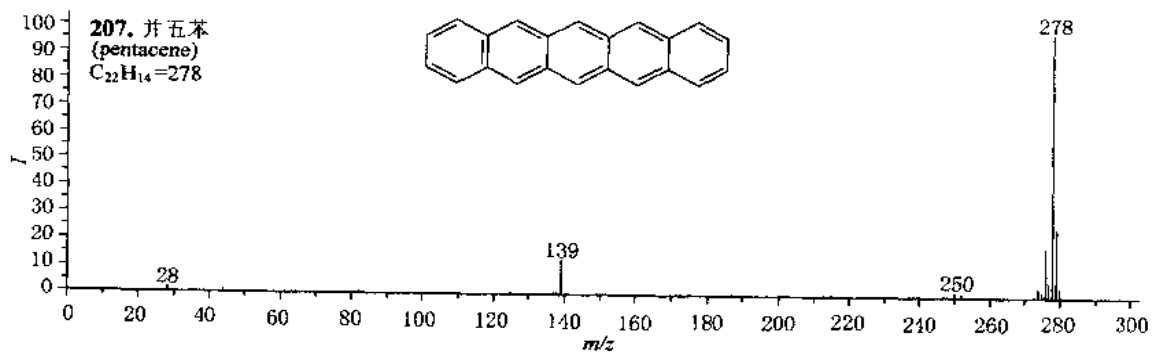


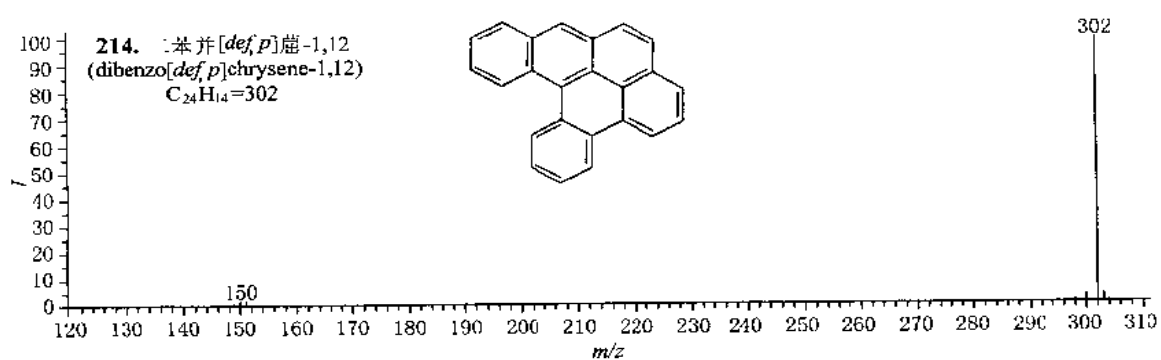
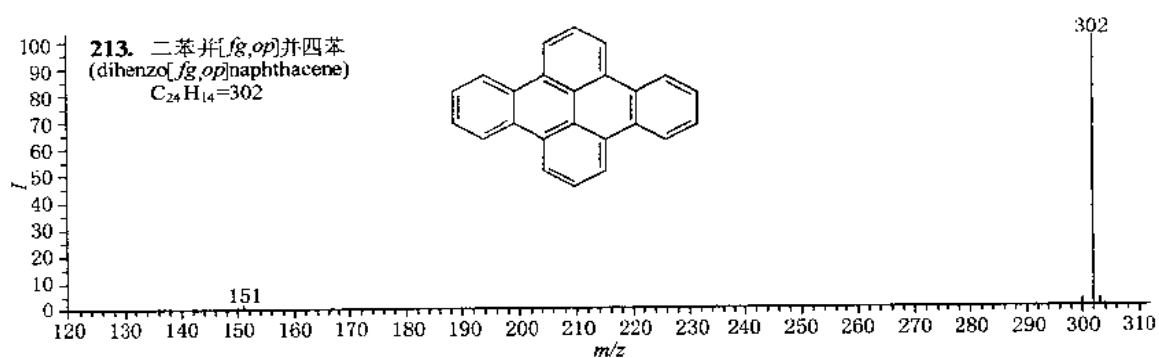
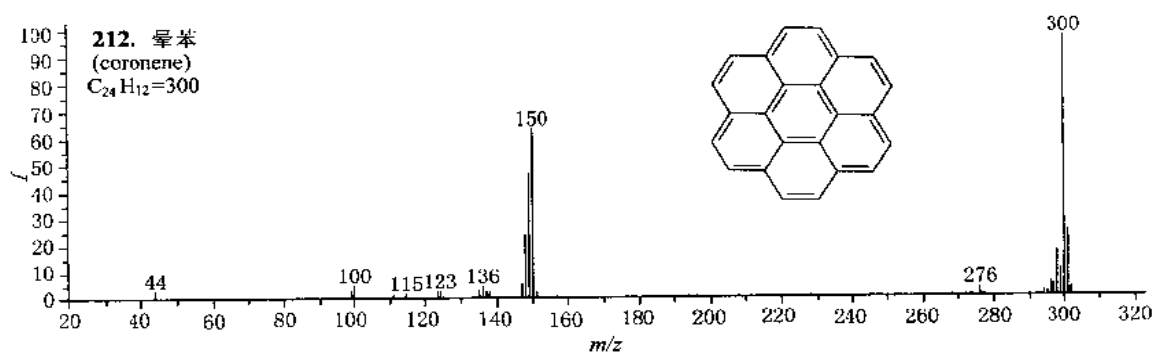
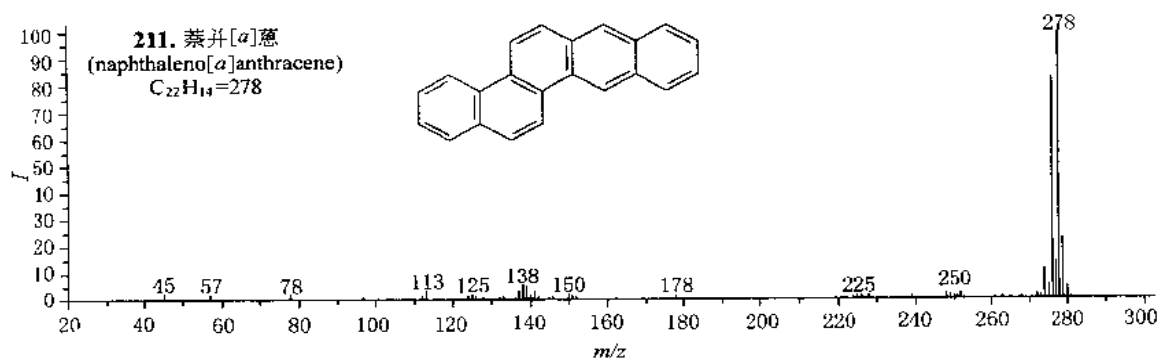














## 第二节 卤代烃类

### 一、卤代烷类

#### 1. 一卤甲烷类：

一卤甲烷的分子离子都是基峰，一氯甲烷（216）和一溴甲烷（217）尚有按天然重同位素比的强  $M+2$  离子。一氟甲烷（215）的  $M-1$  离子很强。4 个一卤甲烷（215~218）都出现甲基离子和较弱的卤素离子。

#### 2. 二卤甲烷类：

4 个二卤甲烷（219~222）的分子离子都很强，主要裂解是失去一个卤原子。一氟一氯甲烷（223）和一氟一溴甲烷（224）的主要裂解是失去氟原子或失去氯、原子。

#### 3. 三卤甲烷类：

4 个三卤甲烷（225~228）的主要裂解是连续失去 2 个卤原子，三氟甲烷（225）的  $M-1$  离子很强，四者的分子离子很弱或不出现。

#### 4. 一卤乙烷类：

4 个一卤乙烷（229~232）的主要裂解是  $M-CH_3$  和失去卤原子。

#### 5. 1,1-二卤乙烷类：

1,1-二卤乙烷类化合物（233~235）的主要裂解是失甲基和失卤原子。

#### 6. 1,2-二卤乙烷类

1,2-二卤乙烷类化合物（236~238）的主要裂解是连续失去卤原子，碳-碳键的裂解很弱。

#### 7. 1,1,1-三卤乙烷类

1,1,1-三卤乙烷类化合物（239, 240）的主要裂解是失甲基、失卤原子和失卤化氢，分子离子极弱或不出现。

#### 8. 三卤乙烷类

三卤乙烷类化合物（241~243）的主要裂解是  $M-CH_2X$ 、 $M-X$  和  $M-HX$ 。

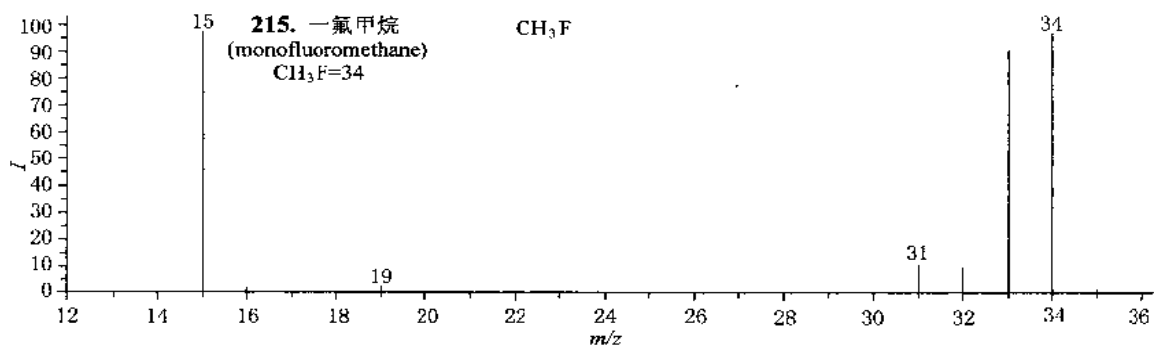
#### 9. 四卤乙烷类

四卤乙烷类化合物（244, 245）的主要裂解是  $M-X$ 、 $M-2X$ 、 $M-3X-H$  和  $M-CHX_2$ 。

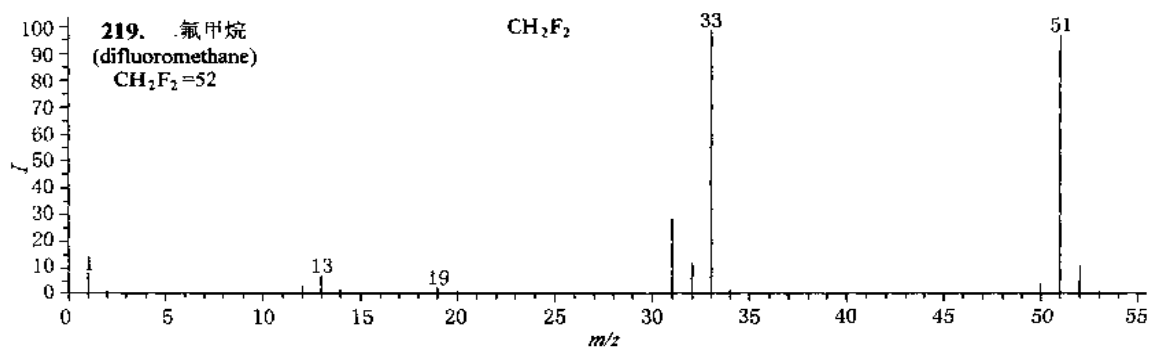
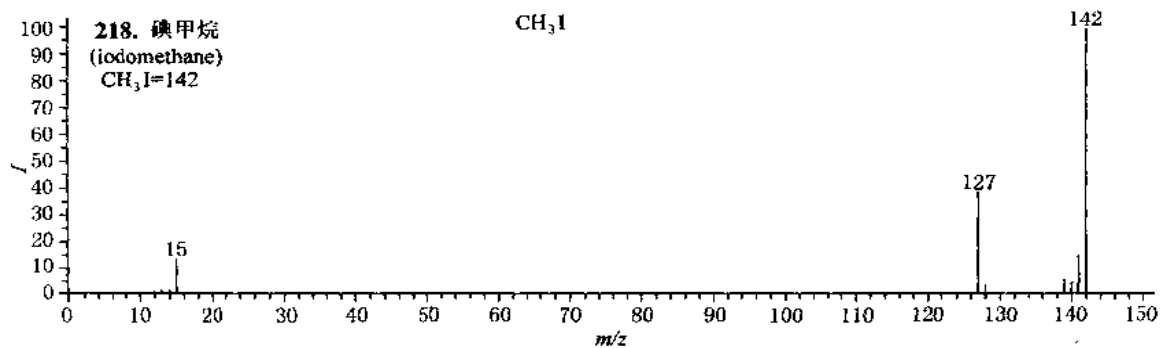
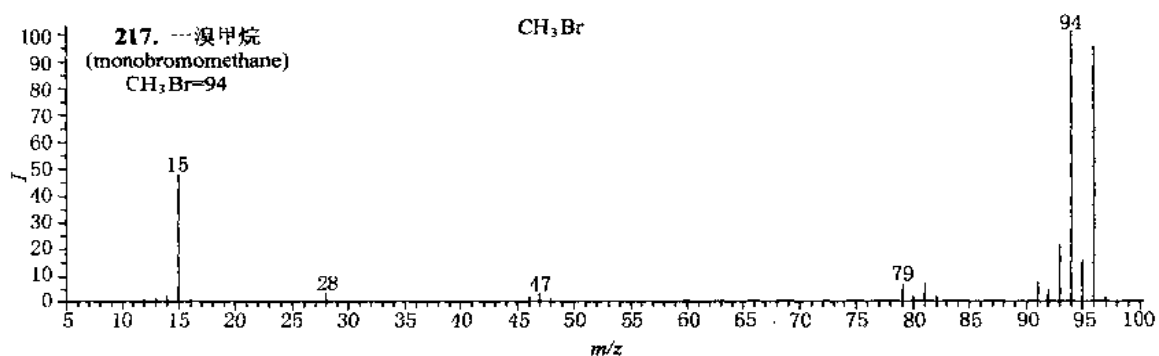
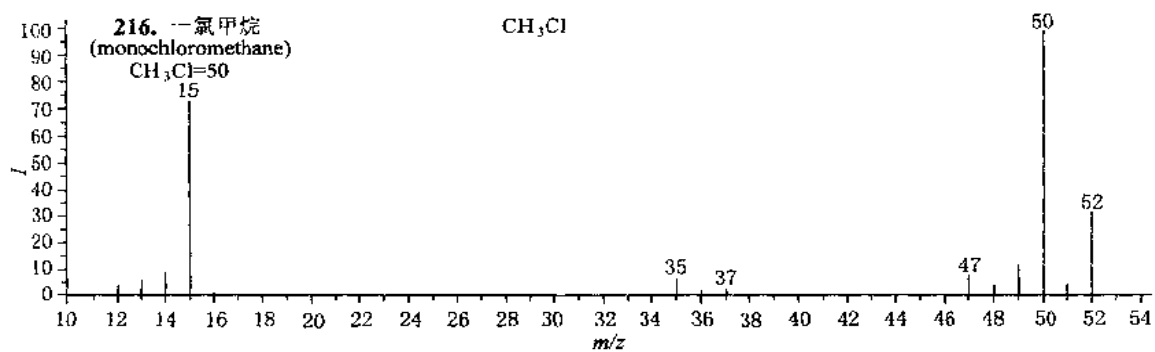
#### 10. 六卤乙烷类

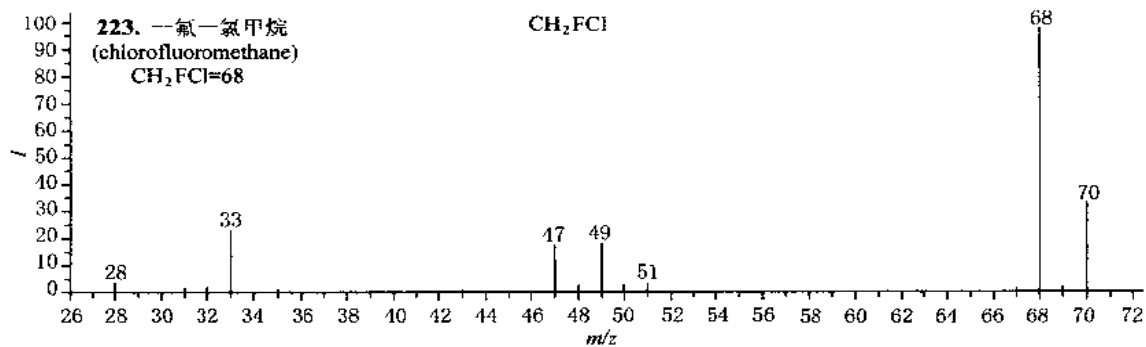
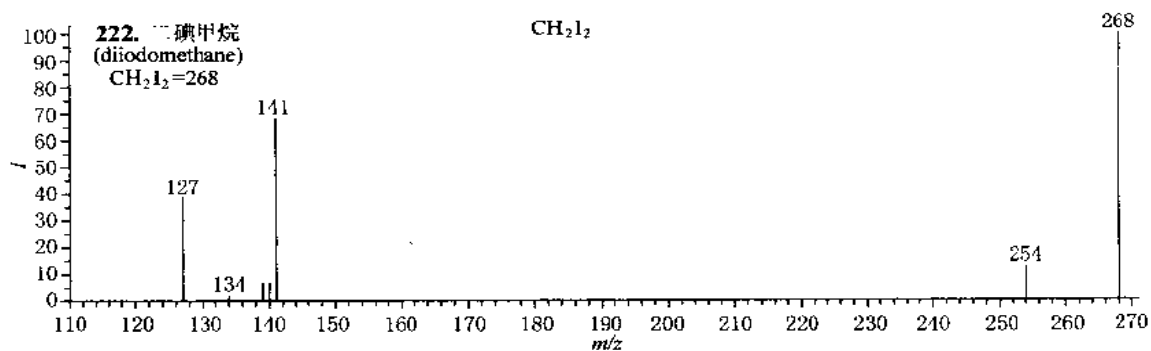
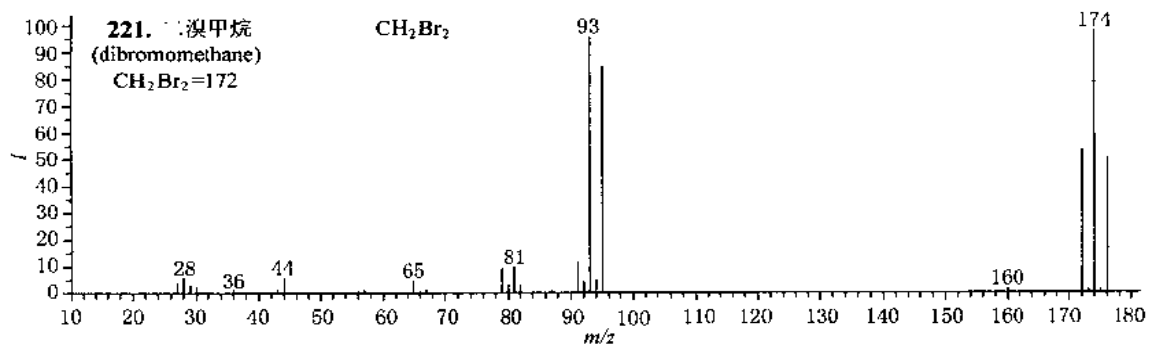
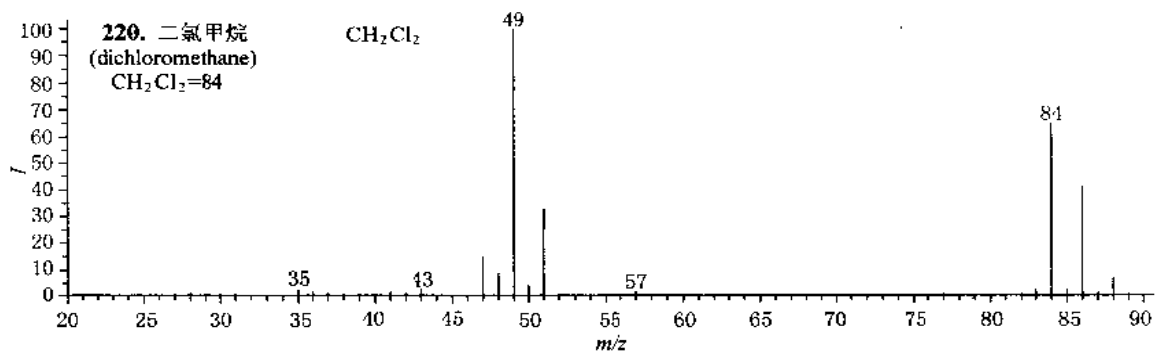
六卤乙烷类化合物（246, 247）的分子离子极弱或不出现，主要裂解是连续失去 5 个卤原子和裂解生成  $CX_3$ 、 $CX_2$  和  $CX$  离子。

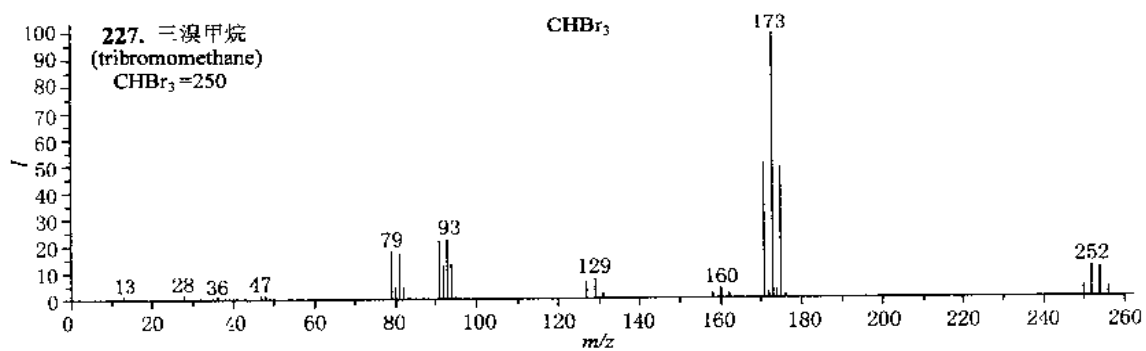
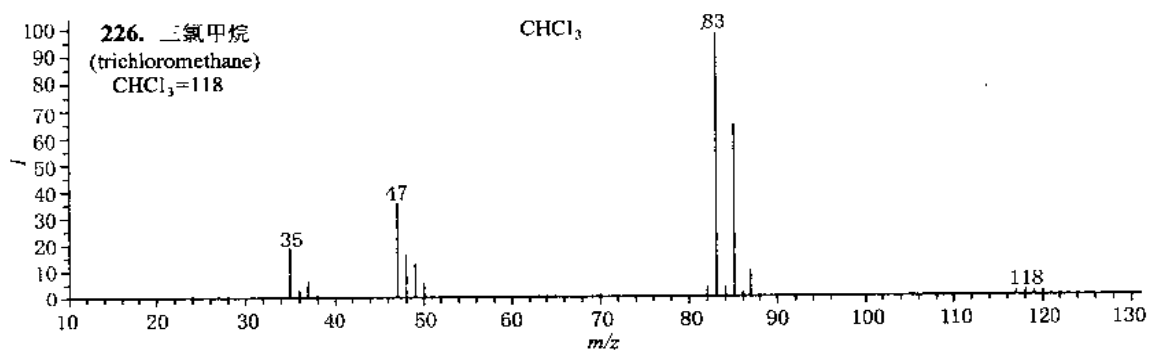
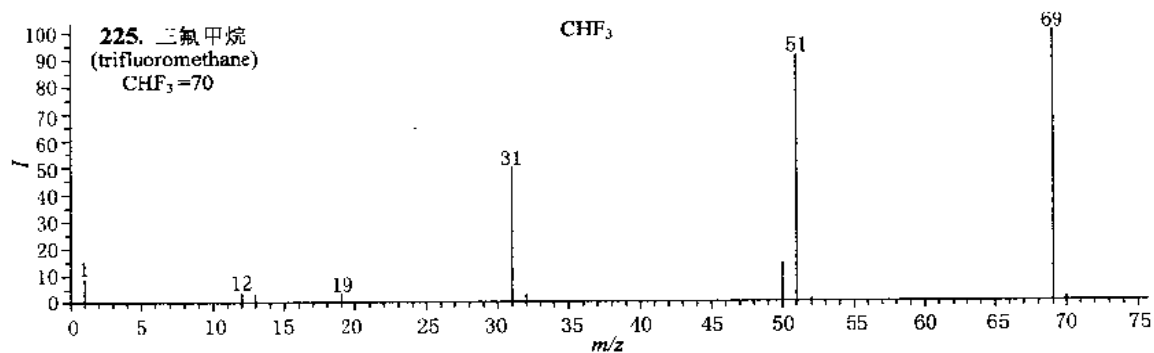
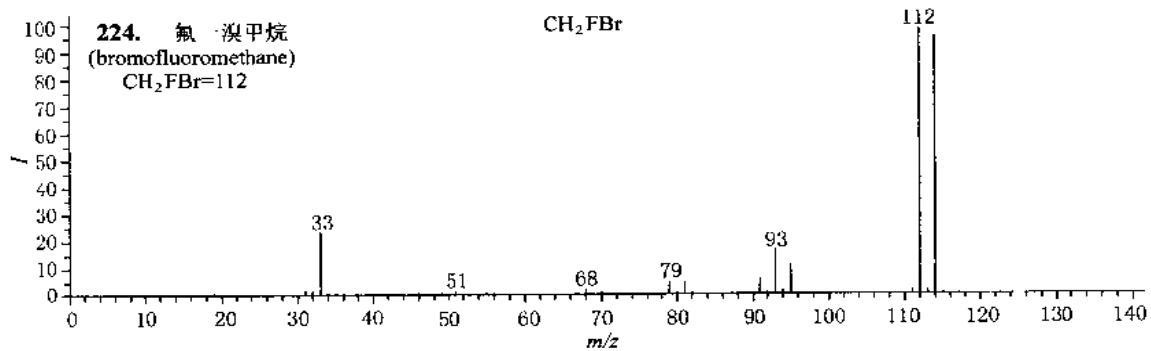
#### 11. 卤代丙烷、丁烷和戊烷类

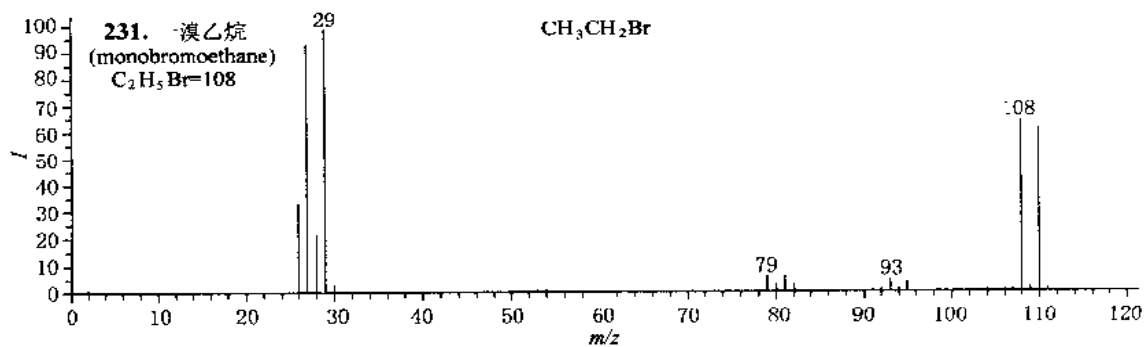
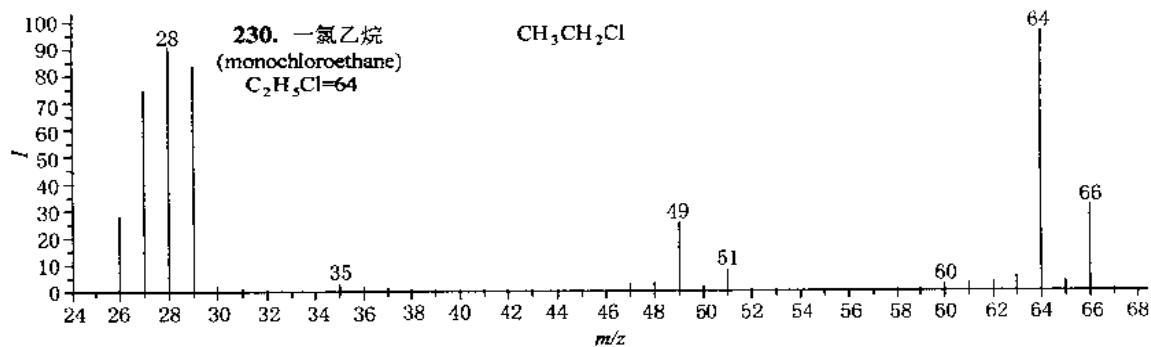
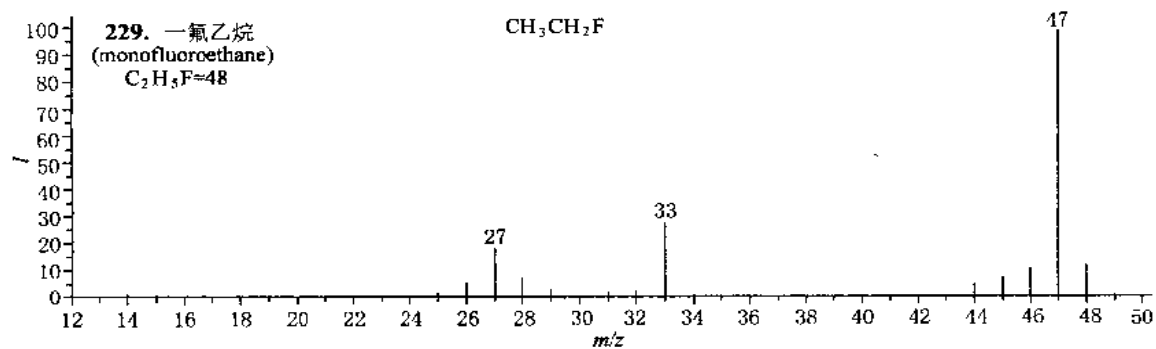
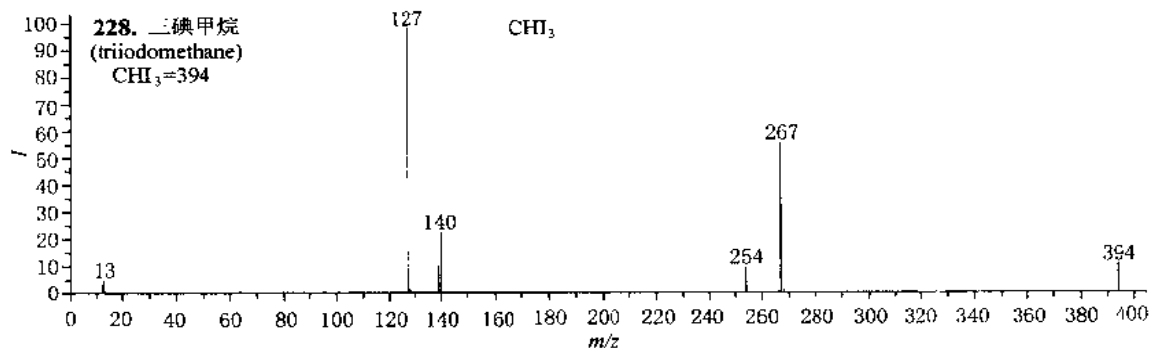


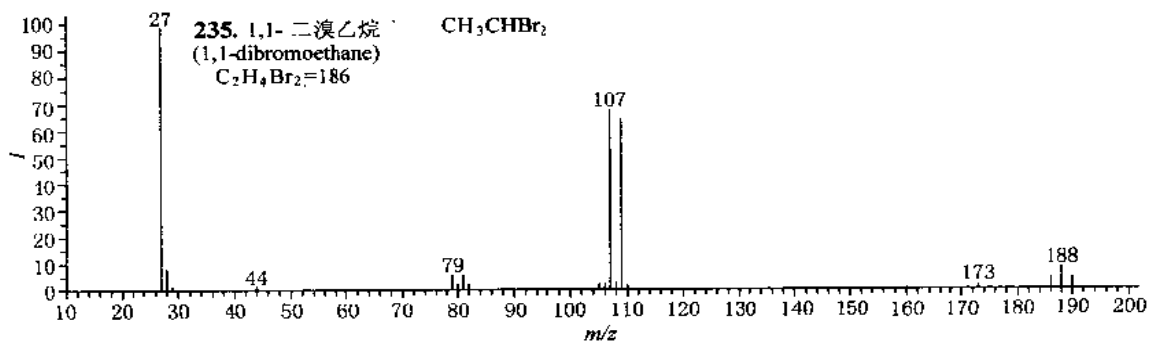
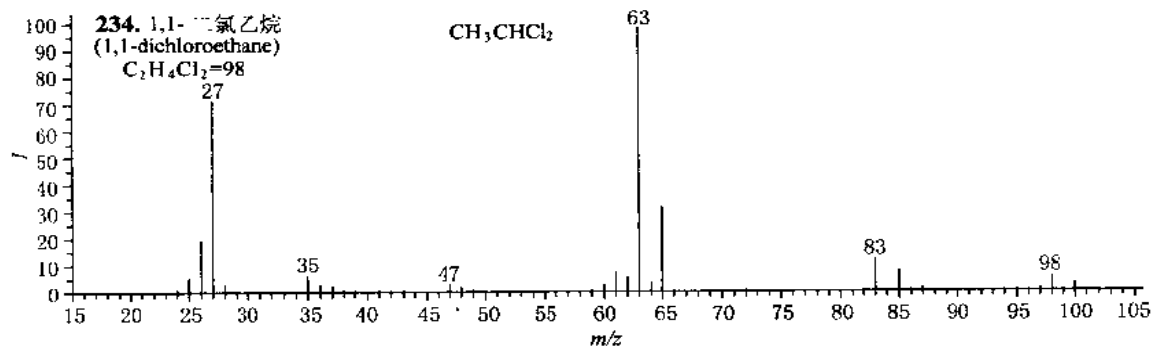
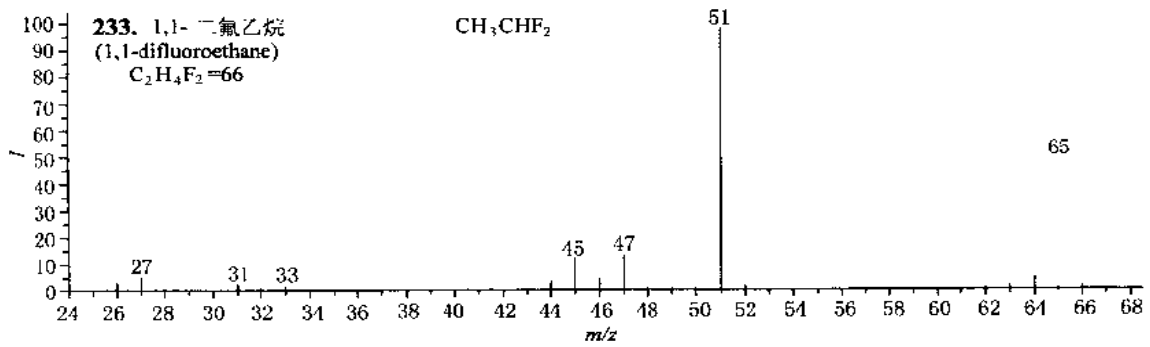
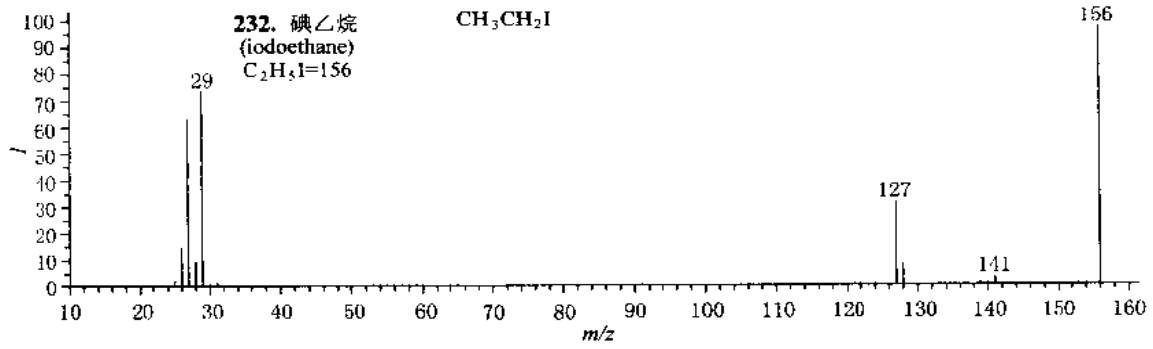
一氟叔丁烷 (248) 是失去甲基, 1,5-二氯戊烷 (249) 是连续失去氯化氢, 溴代和碘代烷类 (250~262) 都是失去溴和碘原子。

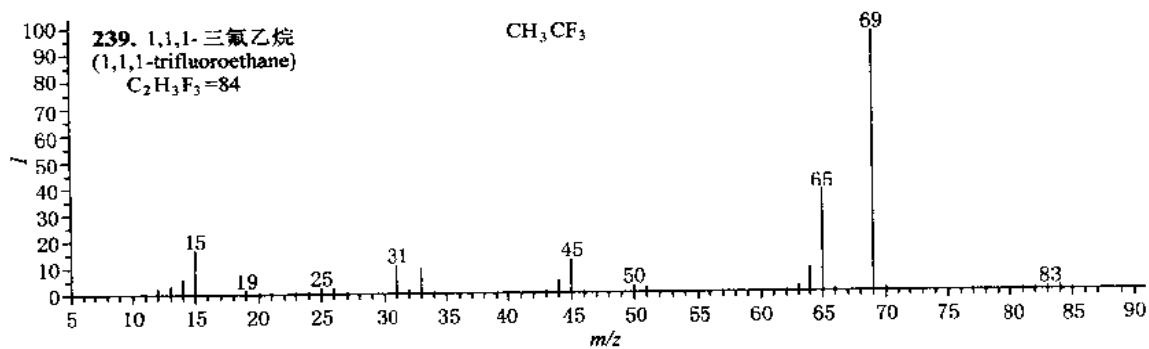
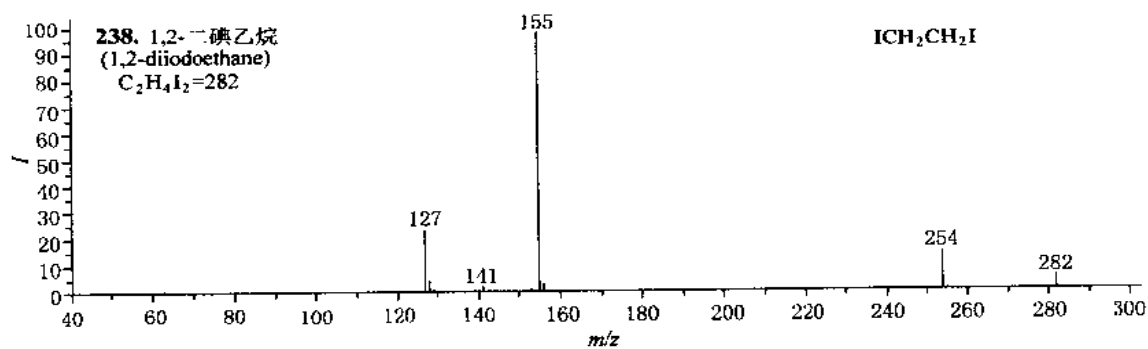
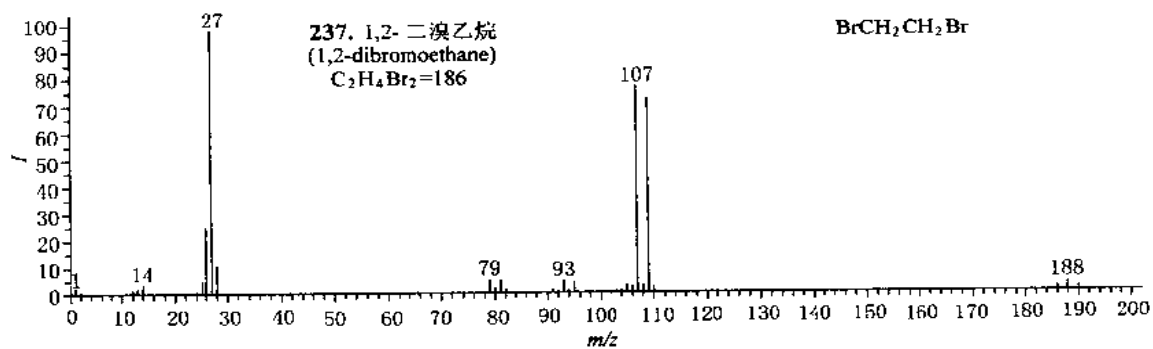
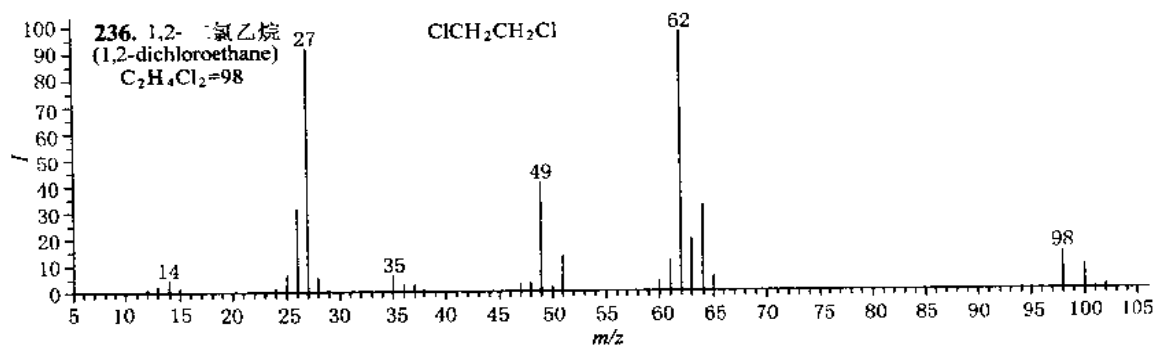


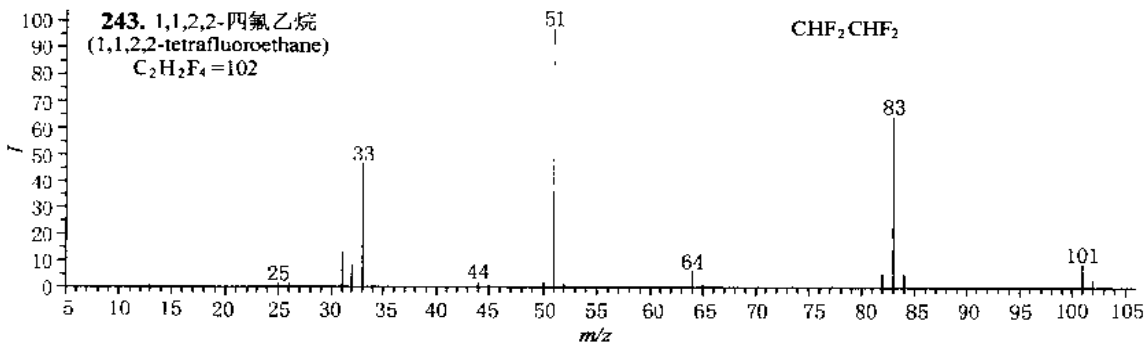
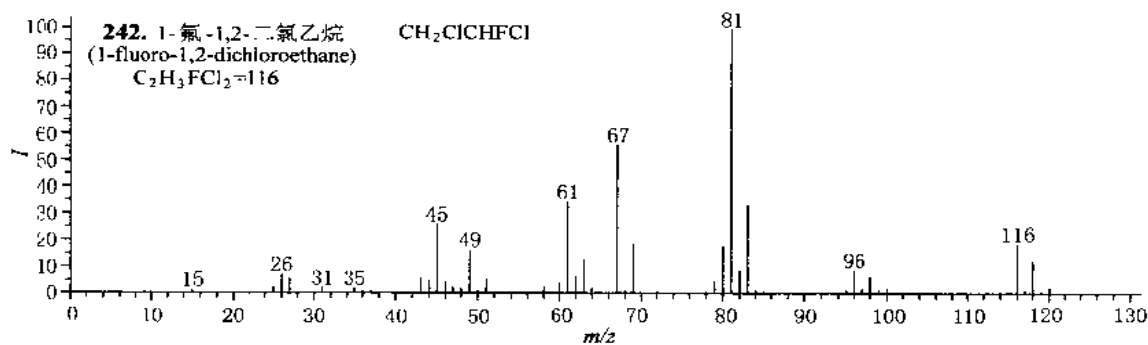
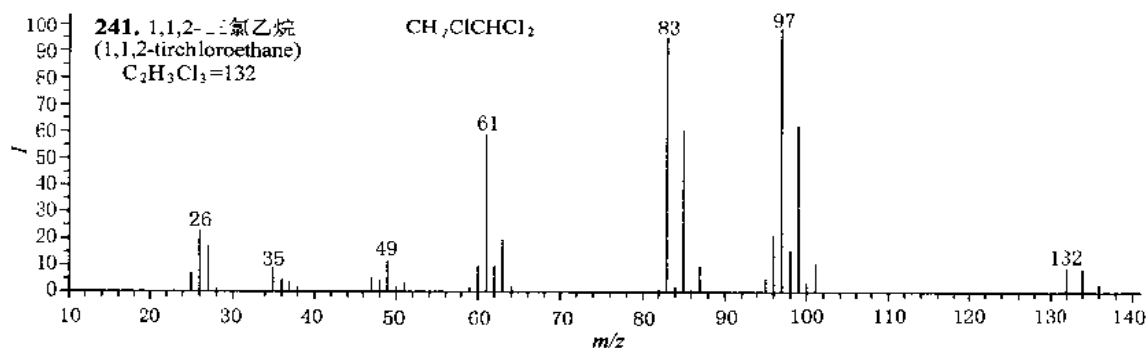
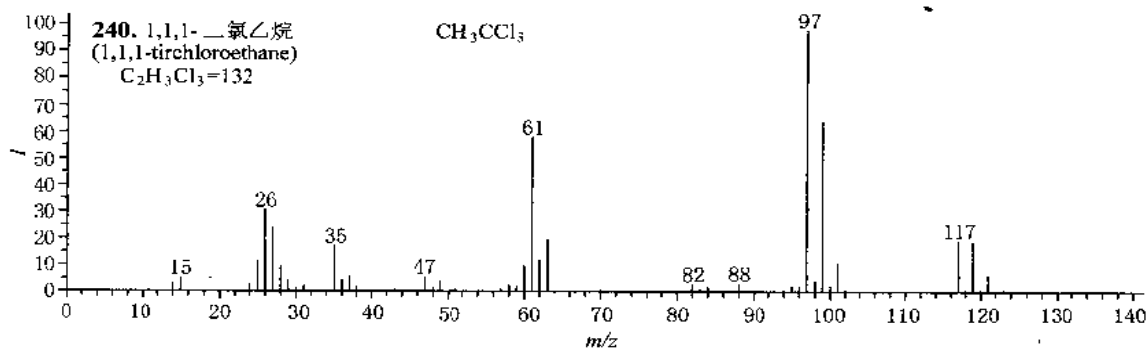




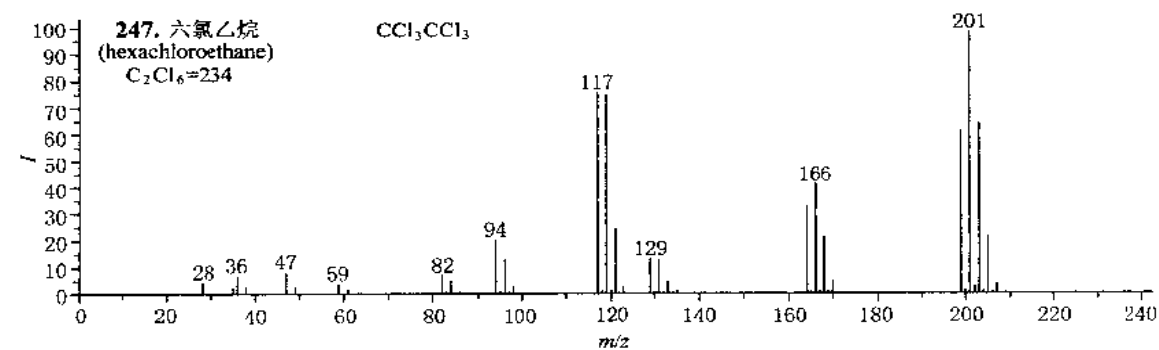
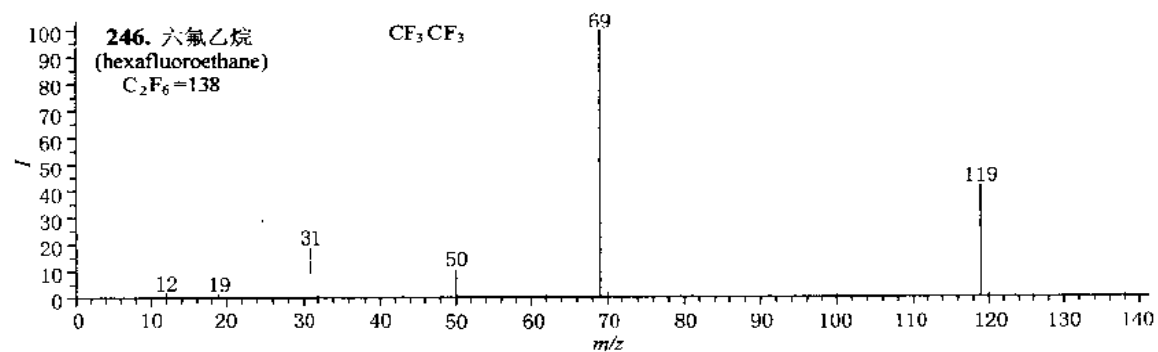
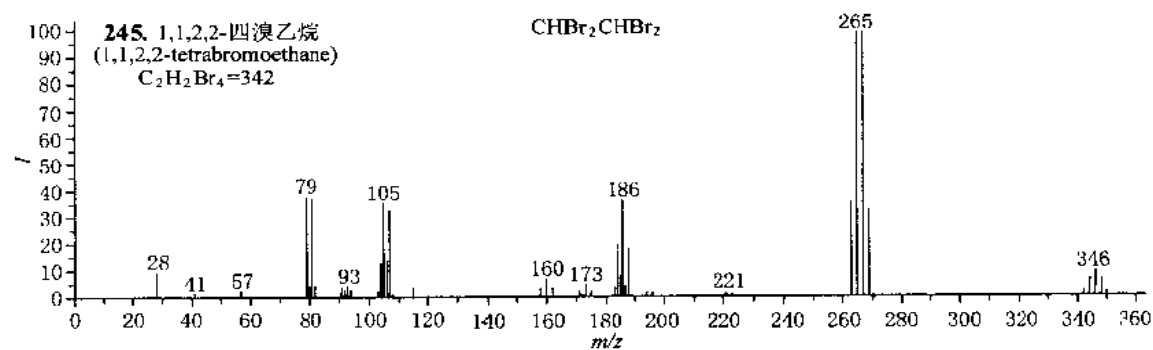
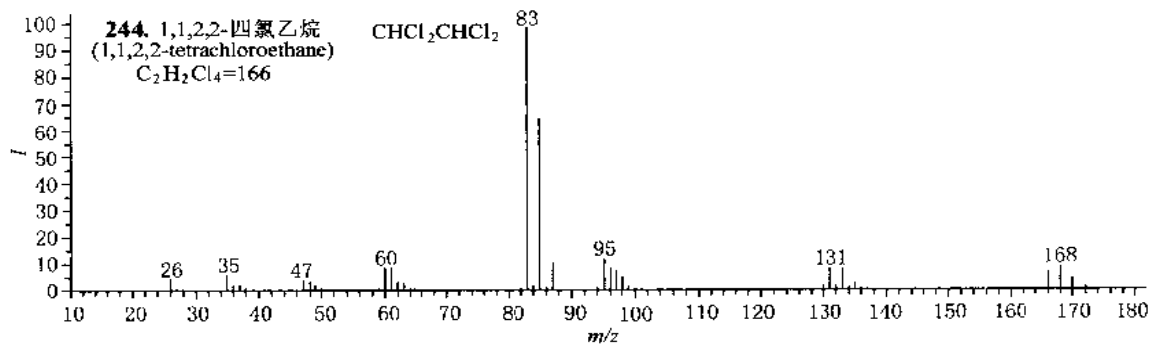


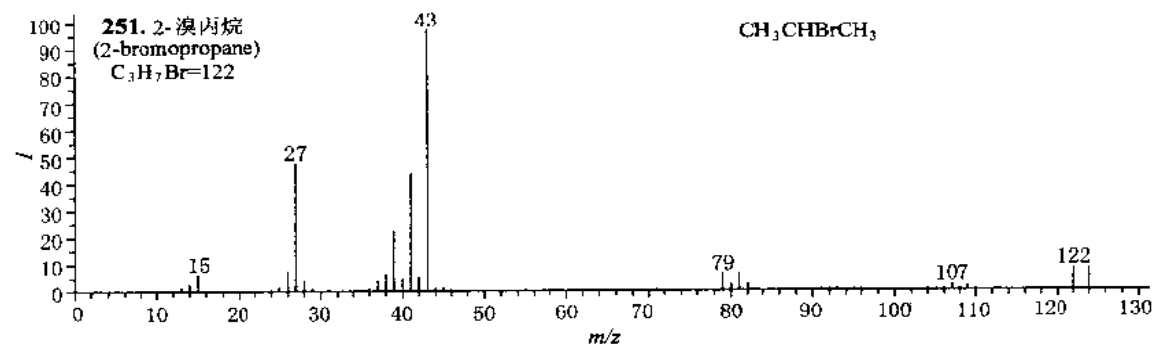
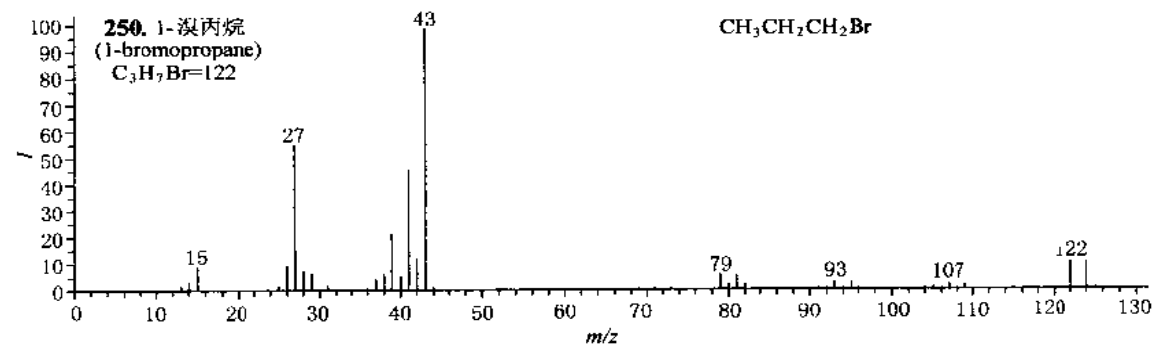
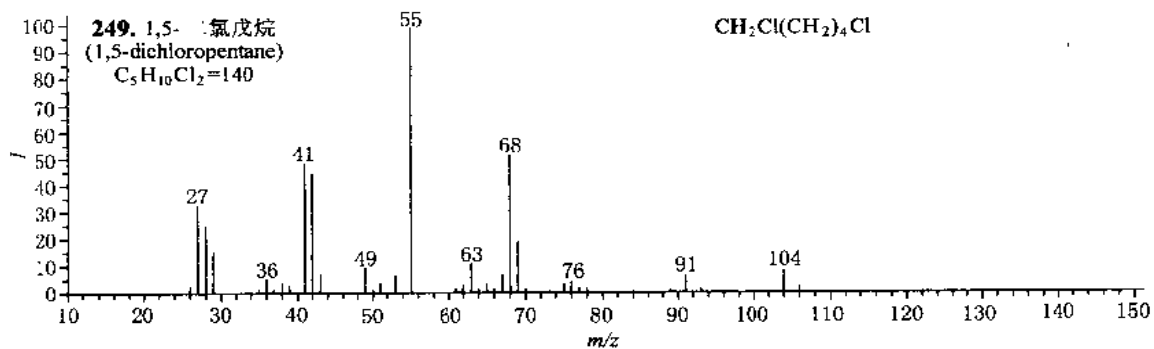
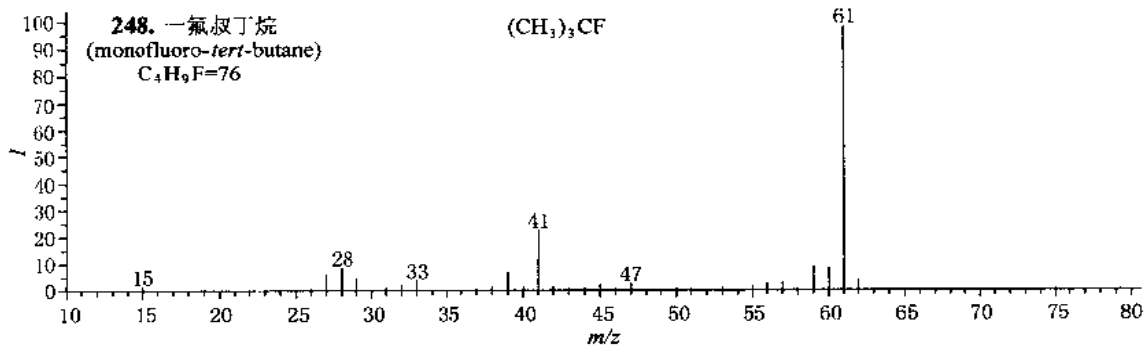


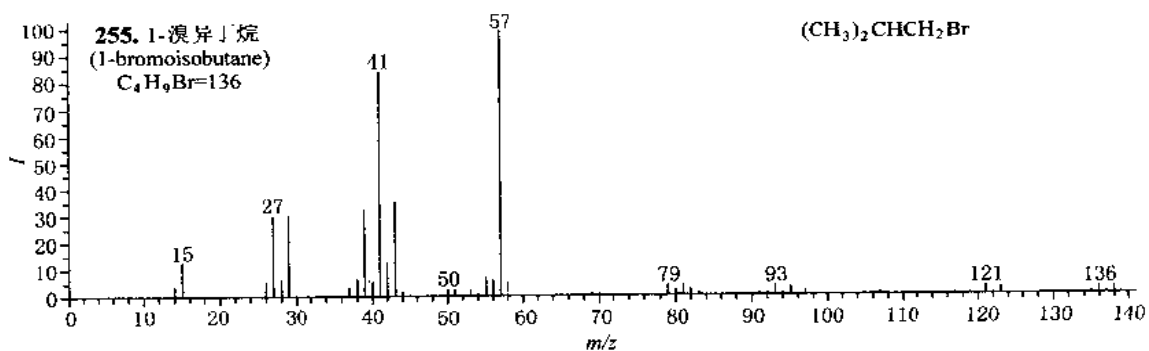
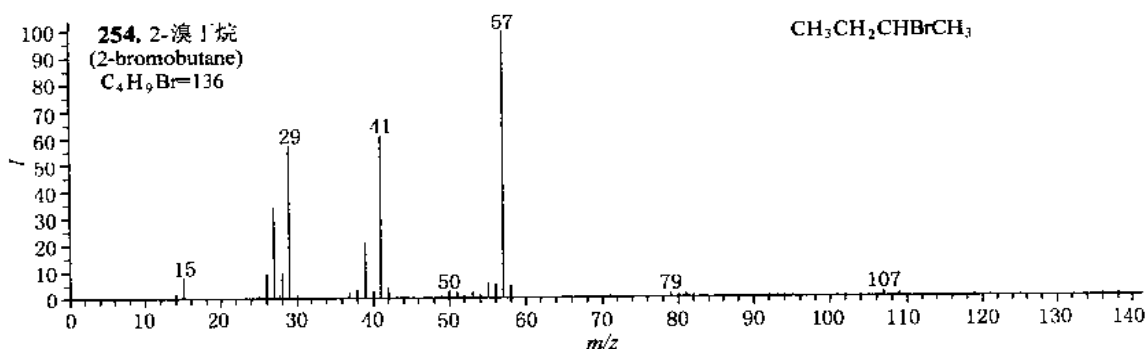
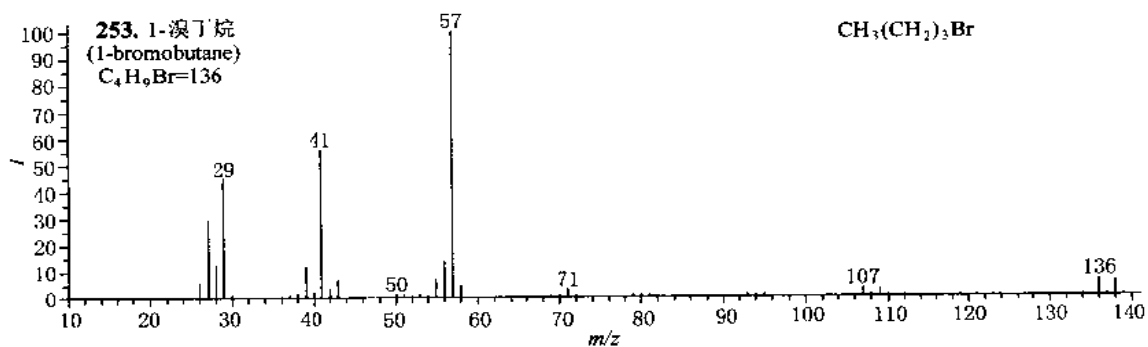
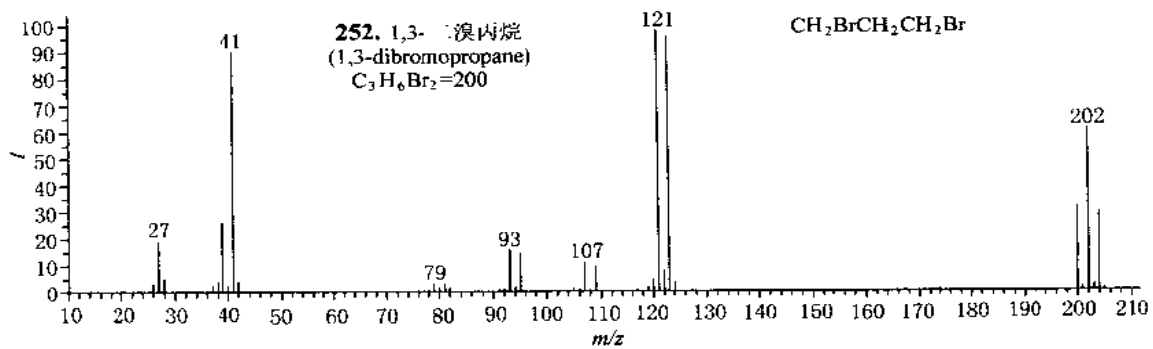


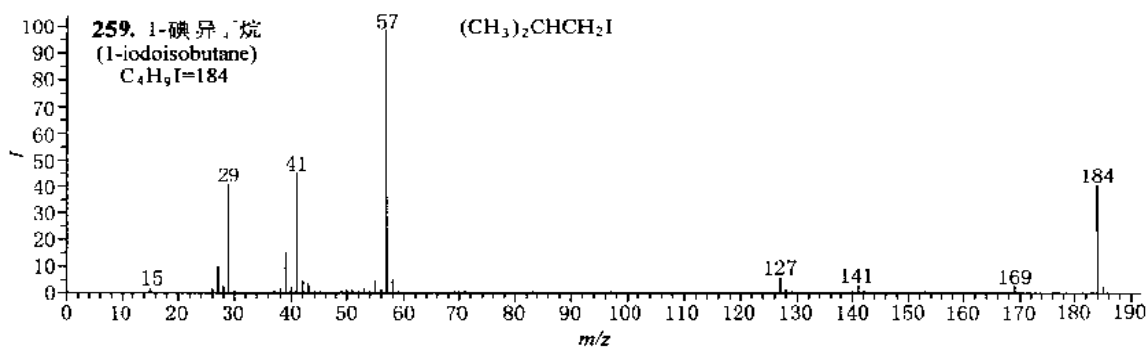
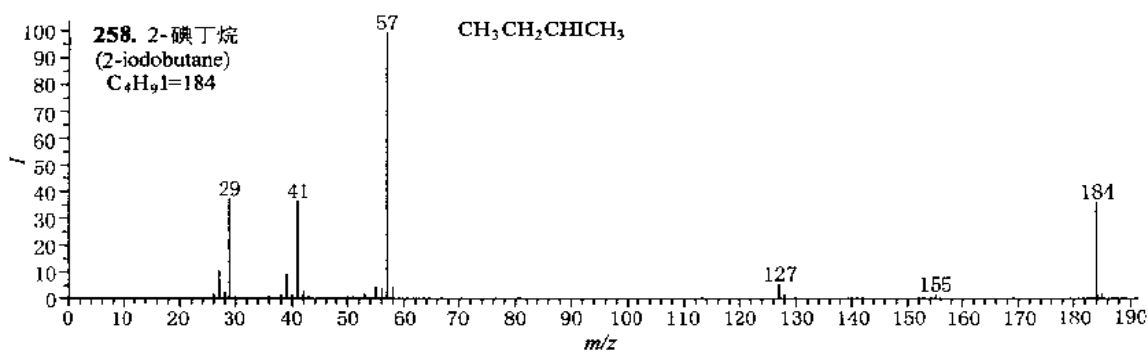
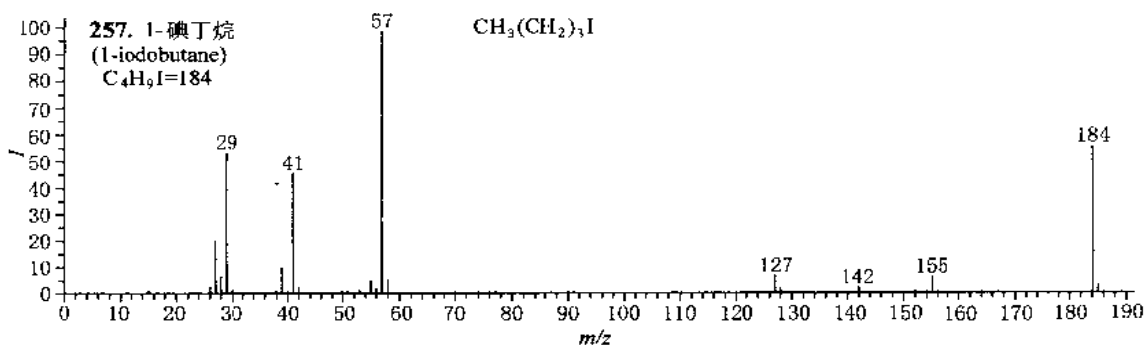
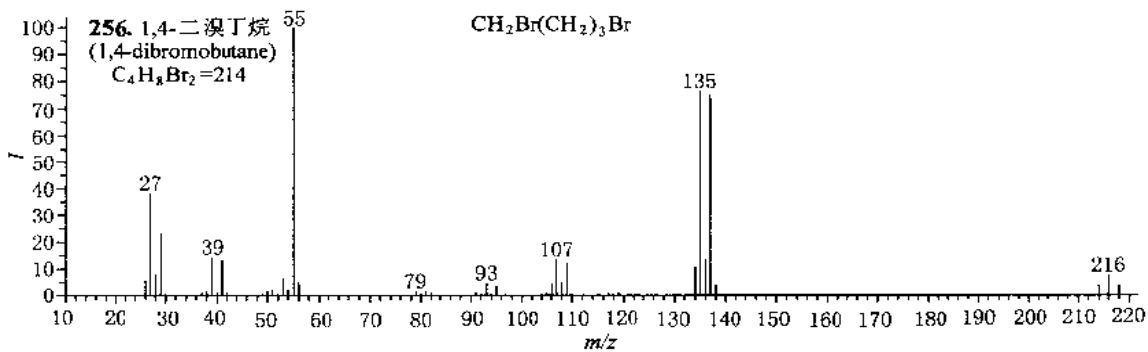


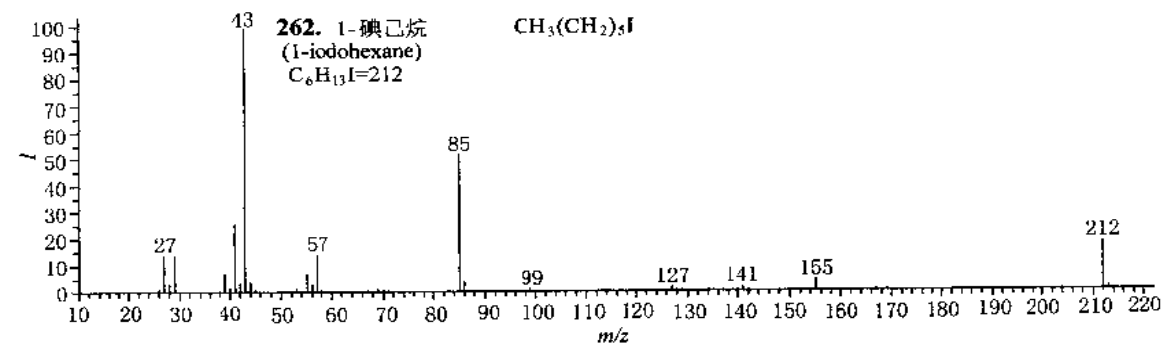
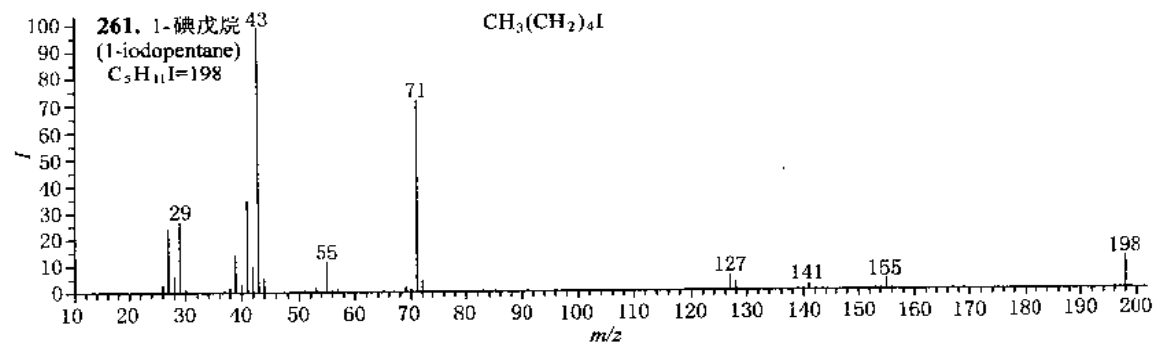
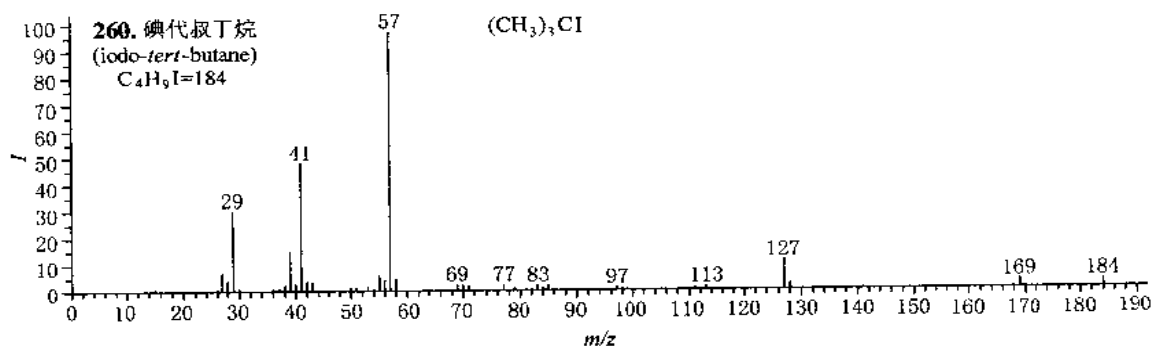






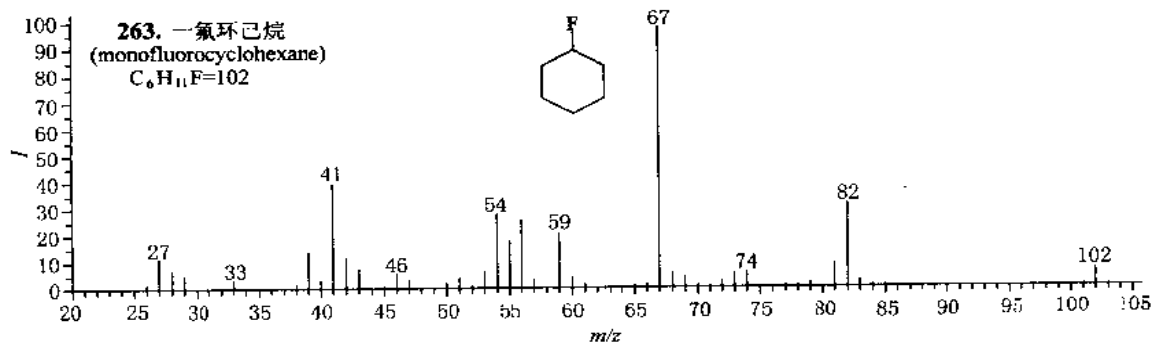


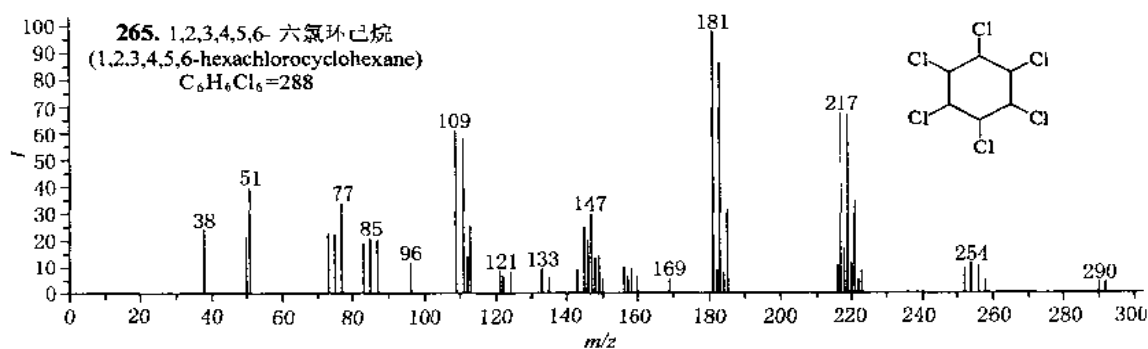
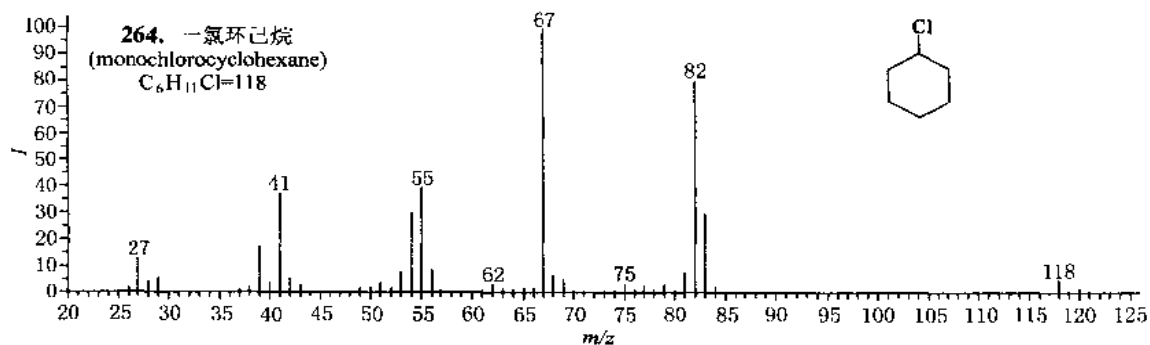




## 二、卤代环烷类

一氟环己烷 (263) 的主要裂解是失去氟化氢, 然后是重排失去甲基及进行 RDA 裂解。一氯环己烷 (264) 既能失氯也能失氯化氢, 然后也是重排失甲基和进行 RDA 裂解。1,2,3,4,5,6-六氯环己烷 (265) 的主要裂解是连续失去氯原子或氯化氢。





### 三、卤代烯类

(1) 3个一卤(氟、氯、溴)乙烯(266~268)的主要裂解是失去卤原子和卤化氢,一氟乙烯(266)还能失氢。

(2) 不论是1,1-二卤乙烯(269, 271)还是1,2-二卤乙烯(270, 272, 273),主要裂解都是失去卤原子和卤化氢,二氟乙烯(269, 270)还能生成 $CH_2F$ 和 $CF$ 离子,分别为 $m/z$  33和31。

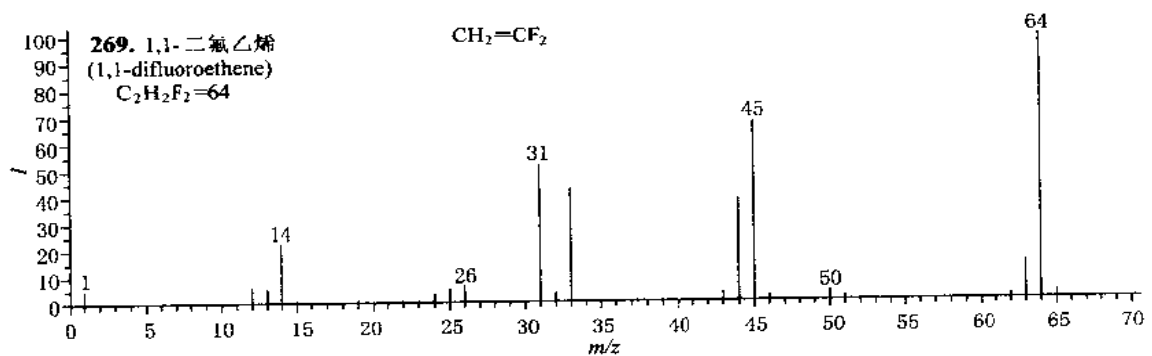
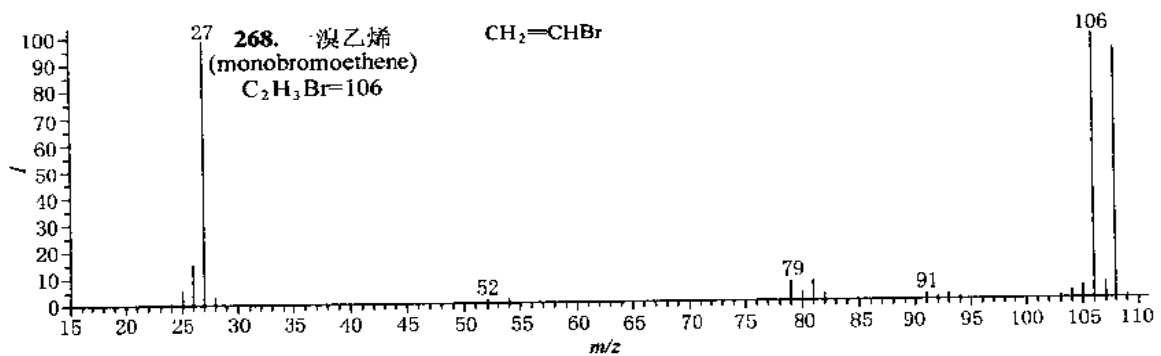
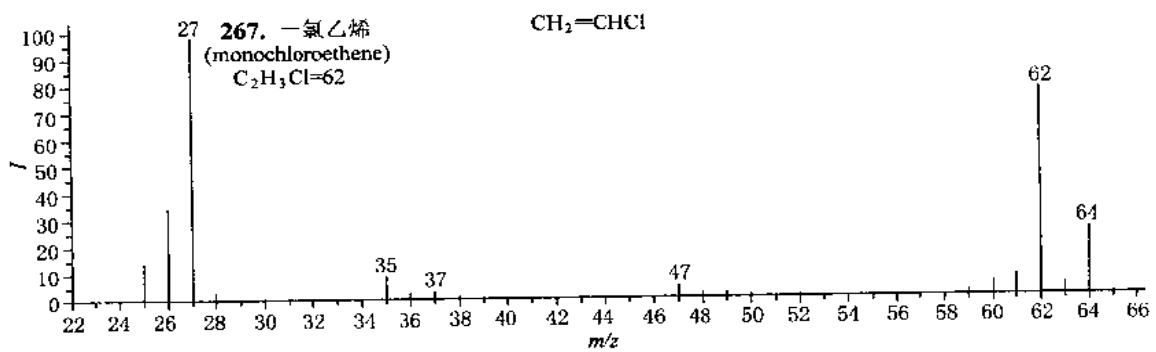
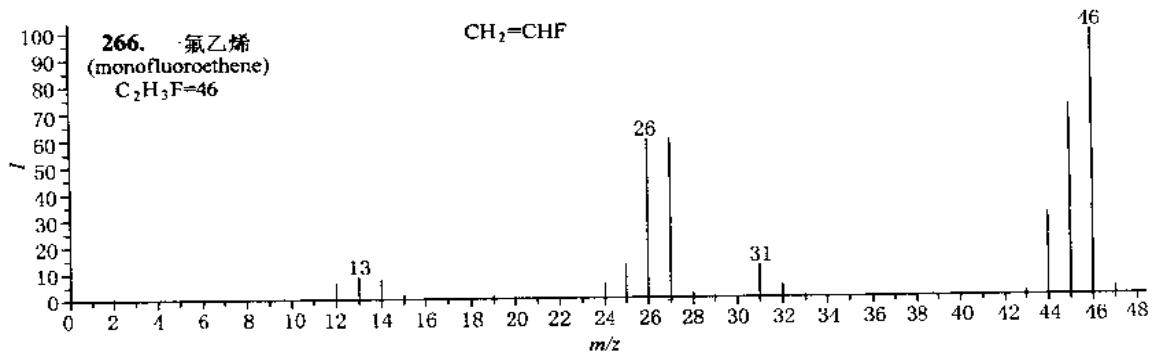
(3) 三卤乙烯类的主要裂解在三氟乙烯(274)中是失1个氟原子,并能生成 $CF_2$ 和 $CF$ 离子,在三氯(275)和三溴乙烯(276)中是连续失去2个卤原子。

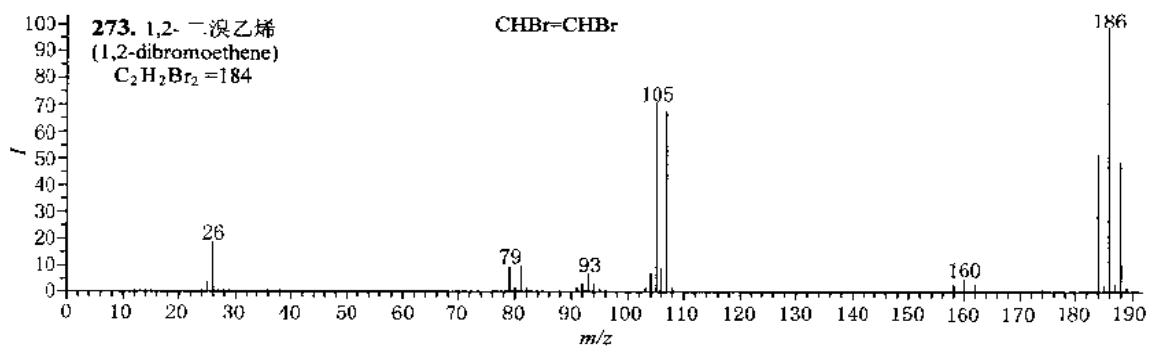
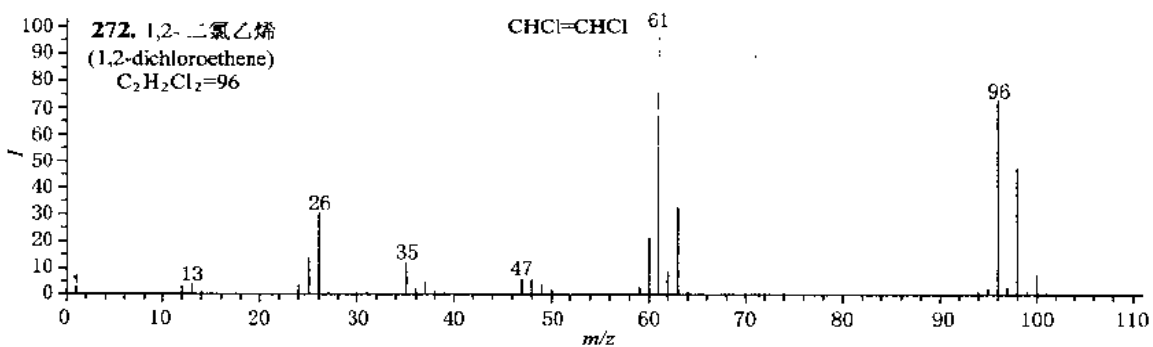
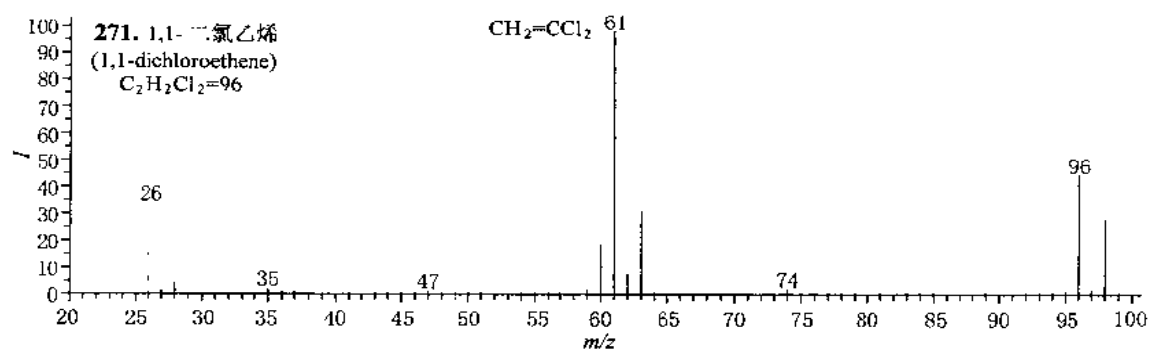
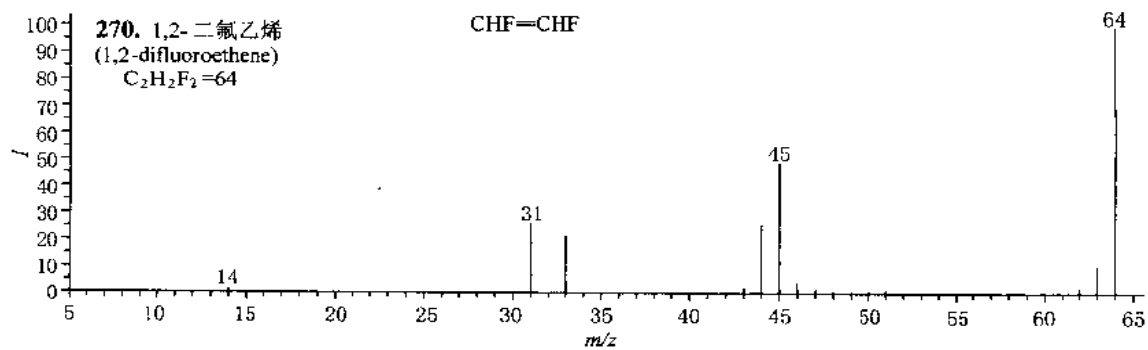
(4) 四卤乙烯中的四氟乙烯(277)类似于三氟乙烯,即只失去1个氟原子,并形成 $CF_2$ 和 $CF$ 离子。四氯(278)和四溴乙烯(279)是连续失去3个卤原子,这也与三卤化合物一致。

(5) 一氟-氯乙烯(280)不论取代位置如何,都以失去氯原子为主要裂解,因 $C-F$ 键比 $C-Cl$ 键更坚固。

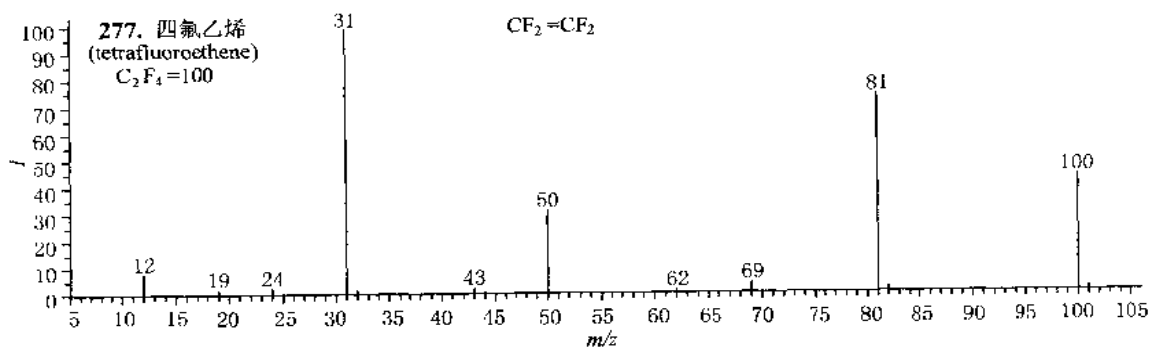
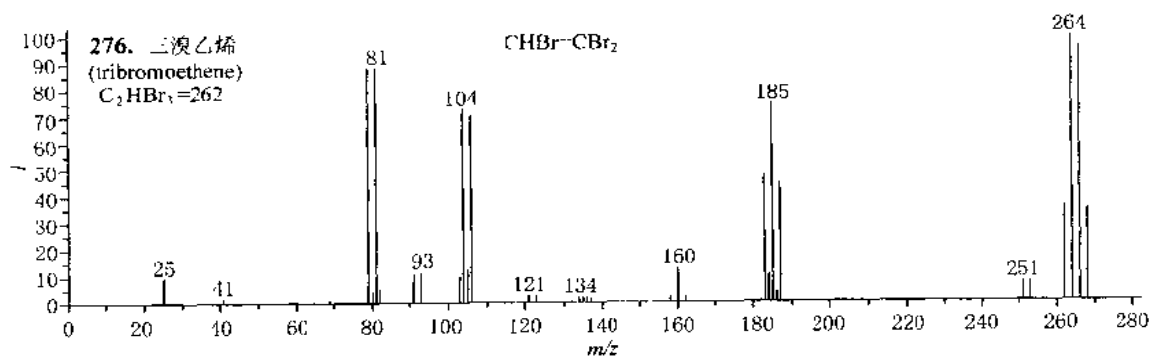
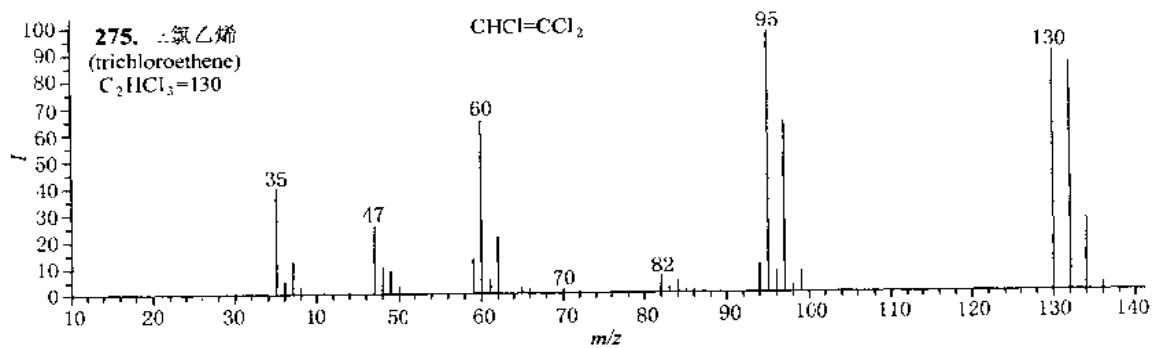
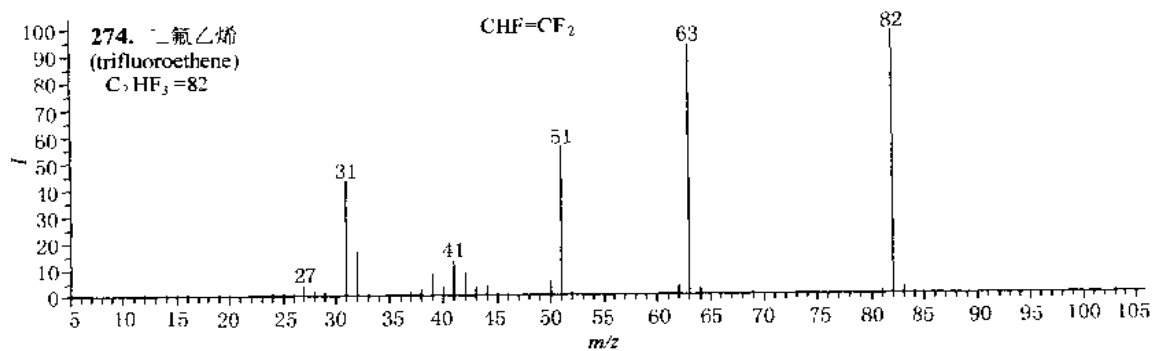
(6) 一溴丙烯类(282~284)不论取代位置如何,都是失去溴原子。

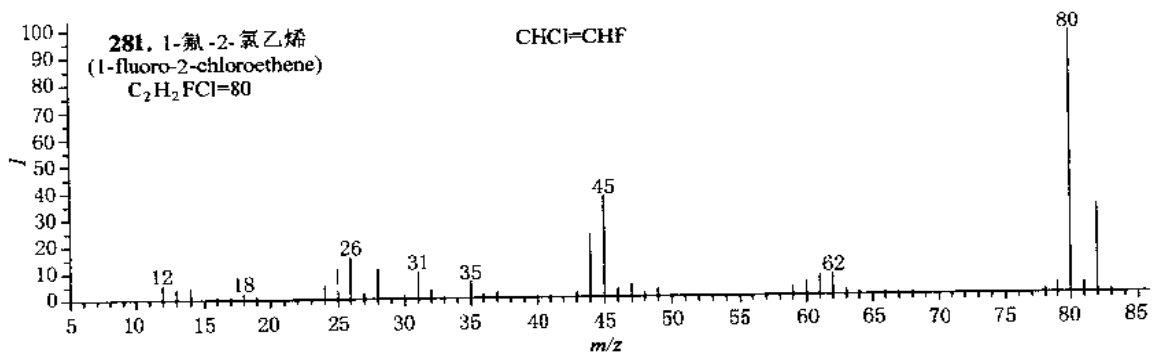
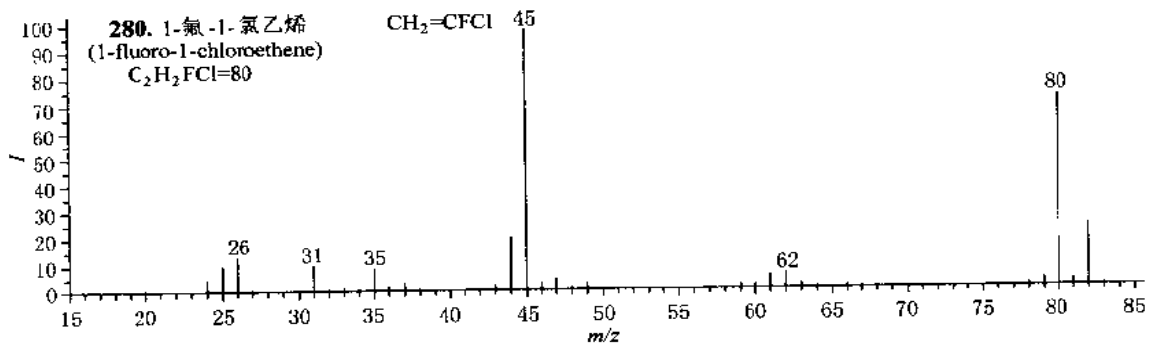
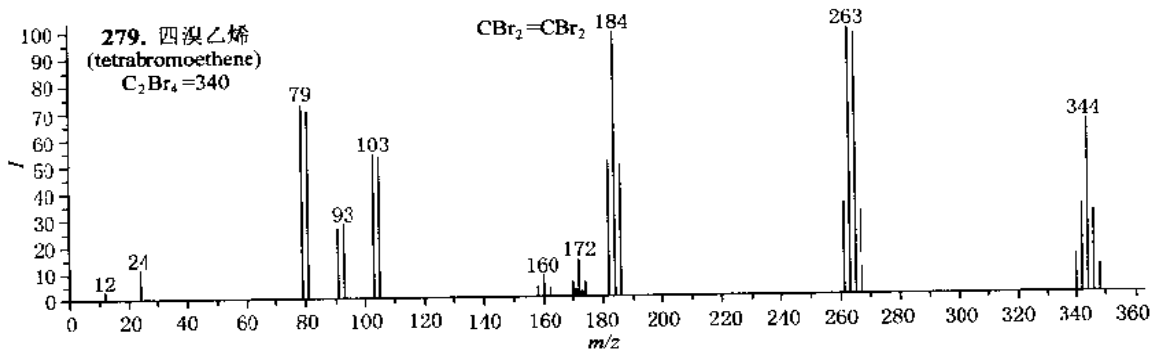
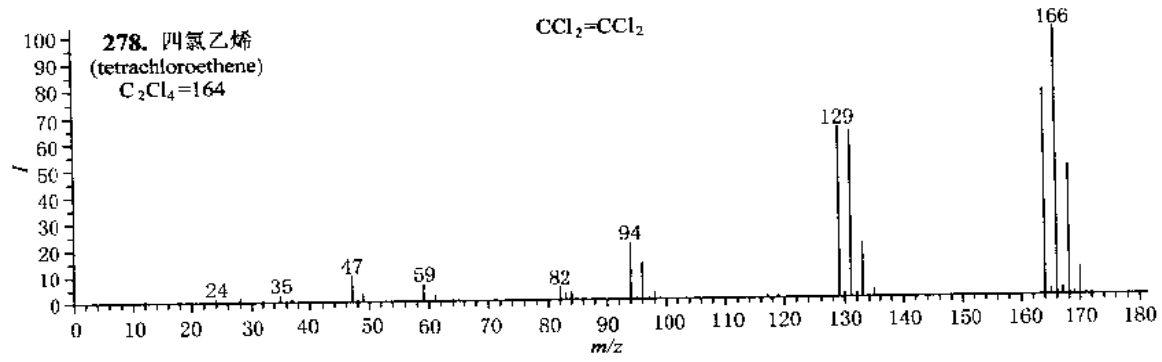
(7) 3,3,3-三氟丙烯(285)的主要裂解是 $M-1$ 和 $M-19$ ,也生成 $CF_3$ 和 $CHF$ 离子,而失去 $CF_3$ 的离子 $m/z$  27为基峰。

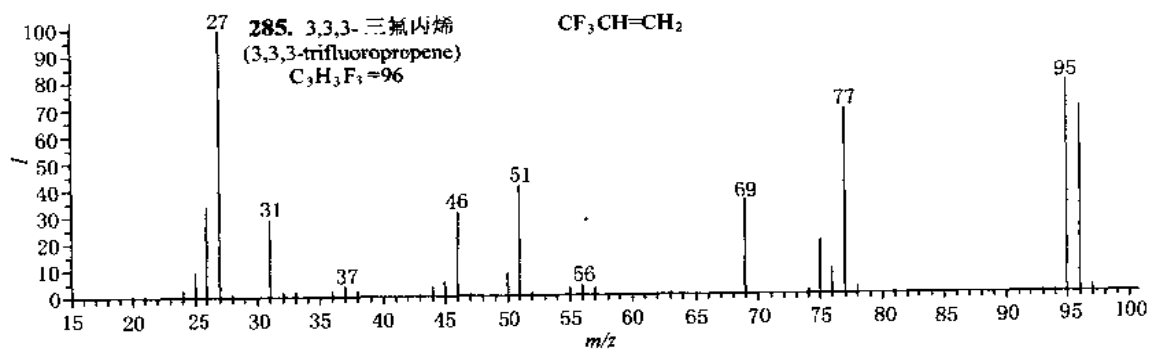
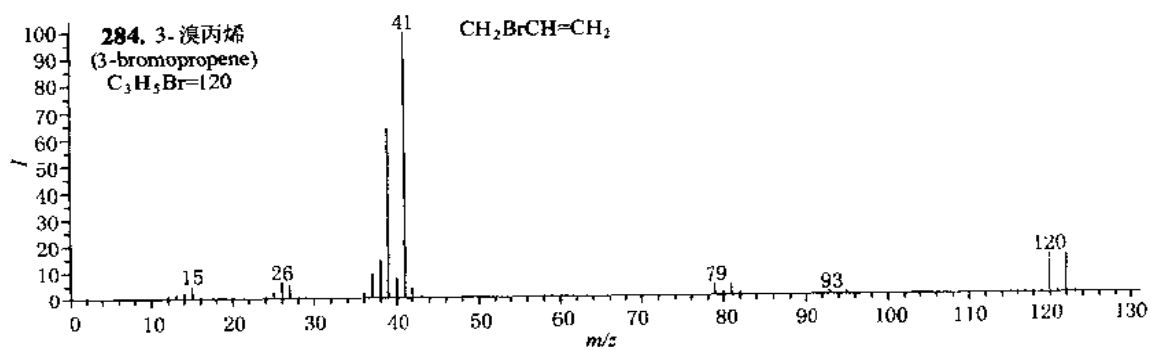
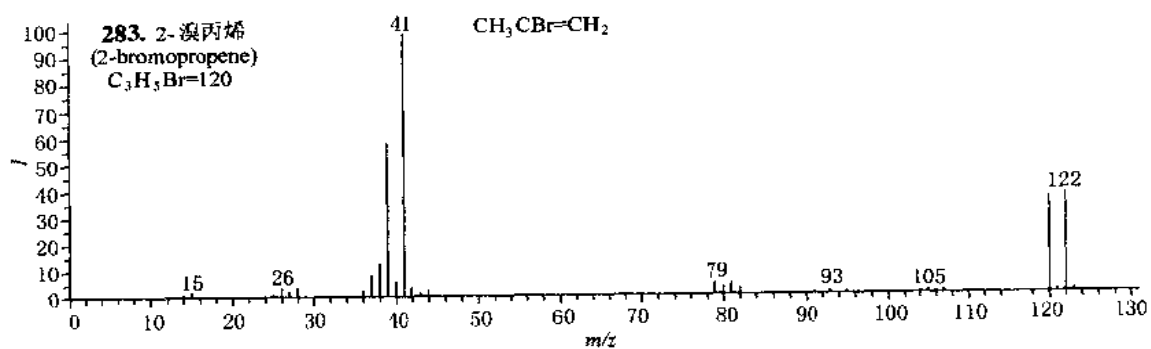
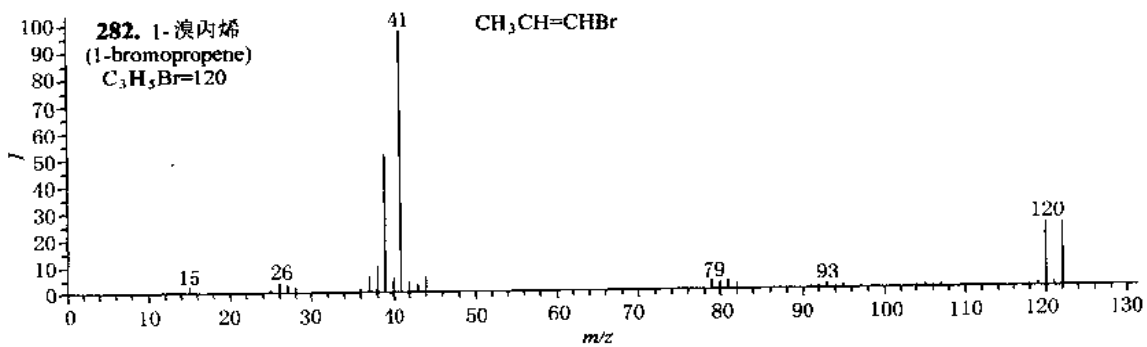








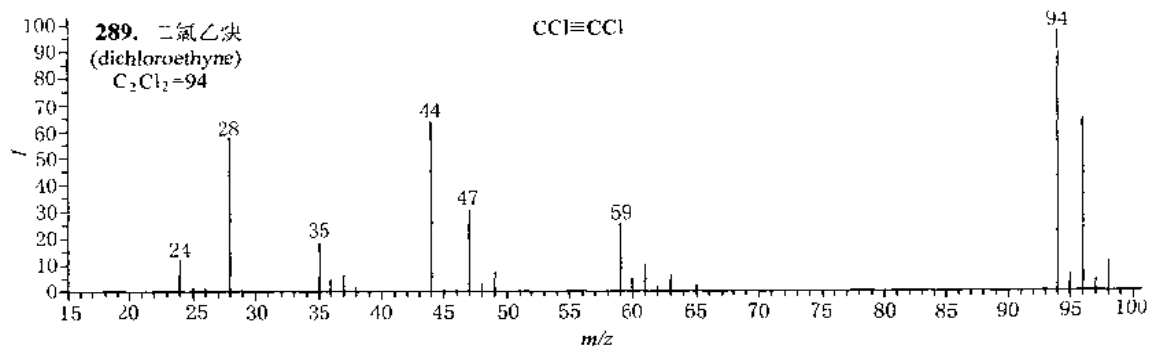
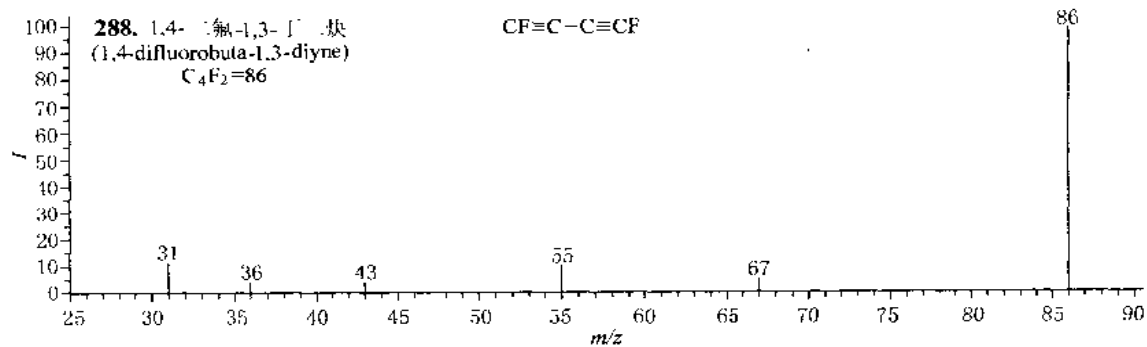
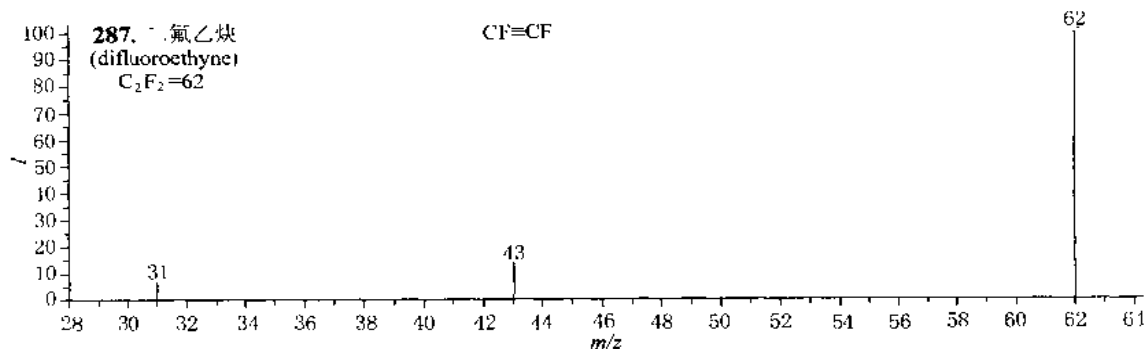
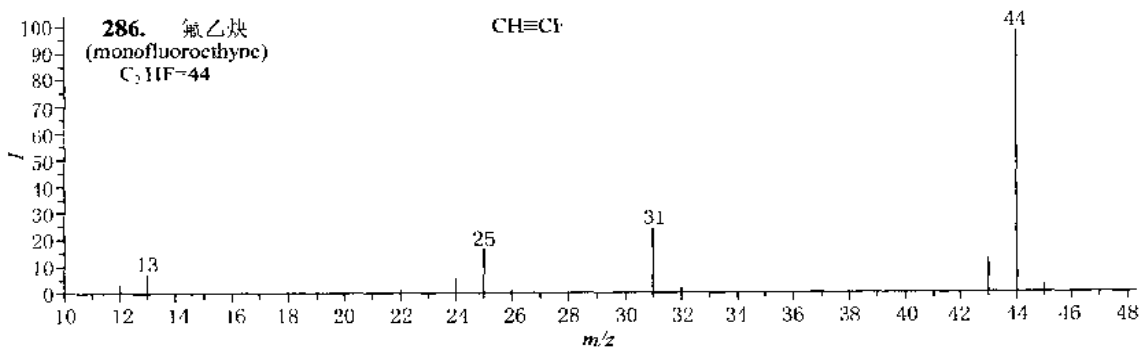


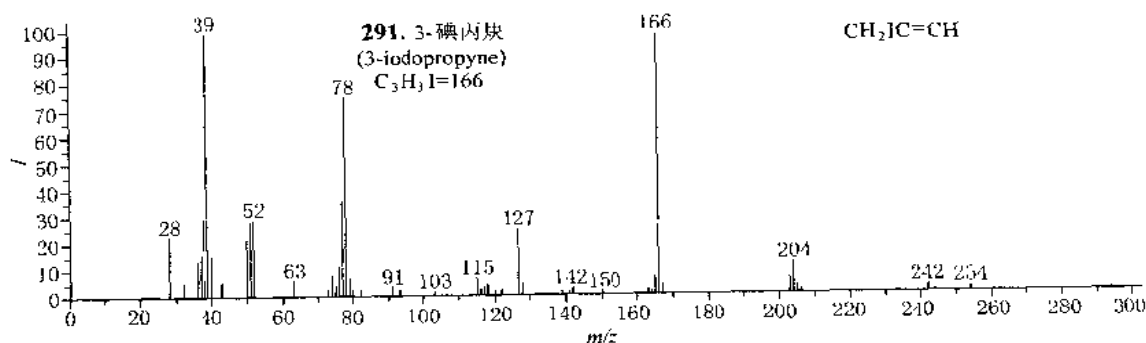
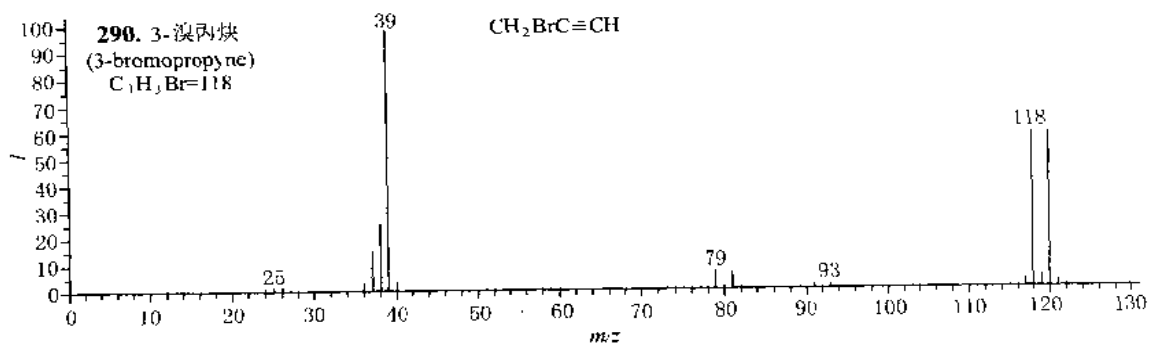


## 四、卤代炔类

(1) 一氟乙炔 (286) 的主要裂解是失氟原子和失 CH, 二氟乙炔 (287) 和二氟丁炔 (288) 是失氟原子和失 CF 基团。

(2) 氯、溴、碘代炔类 (289~291) 主要是失去卤原子。





## 五、卤代苯类

(1) 氟代苯类：如前所述，这类化合物（292~297）由于C-F键坚固，所以失去氟原子虽能出现，但常伴以失去CF基团，有时则失氢或失去乙炔。

(2) 其他一卤代苯类（298~300）的主要裂解是失去卤原子和乙炔。

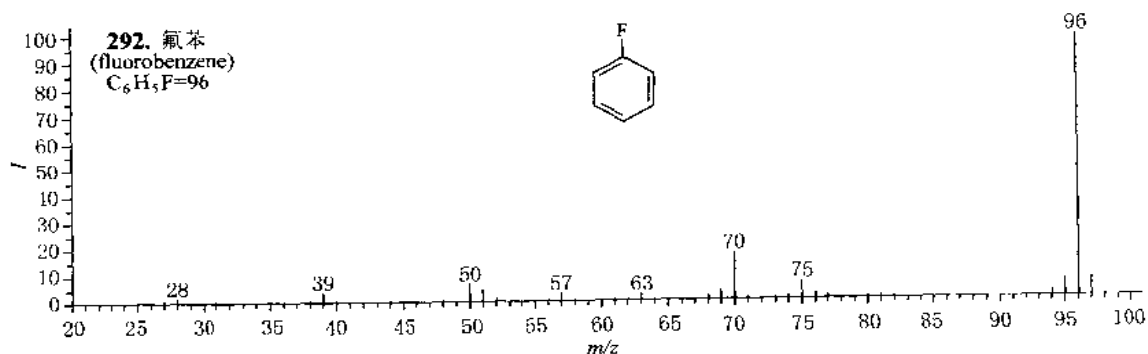
(3) 多卤代苯中的氯溴代苯类（301~316）则主要是连续失去卤原子和卤化氢。

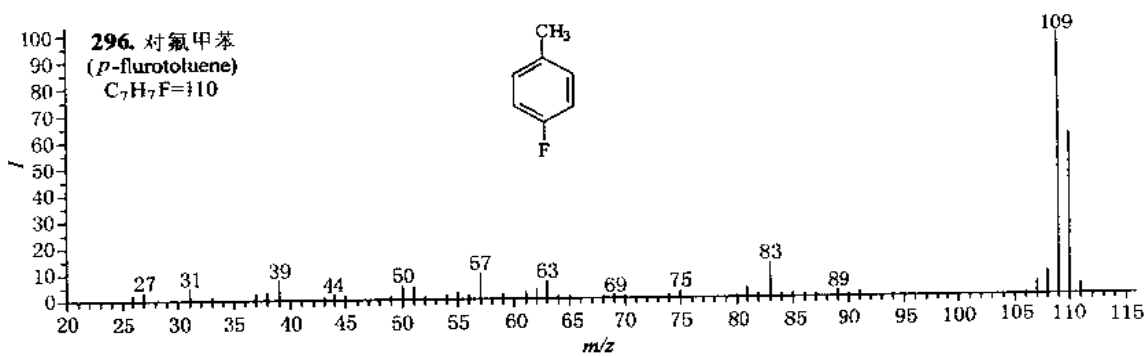
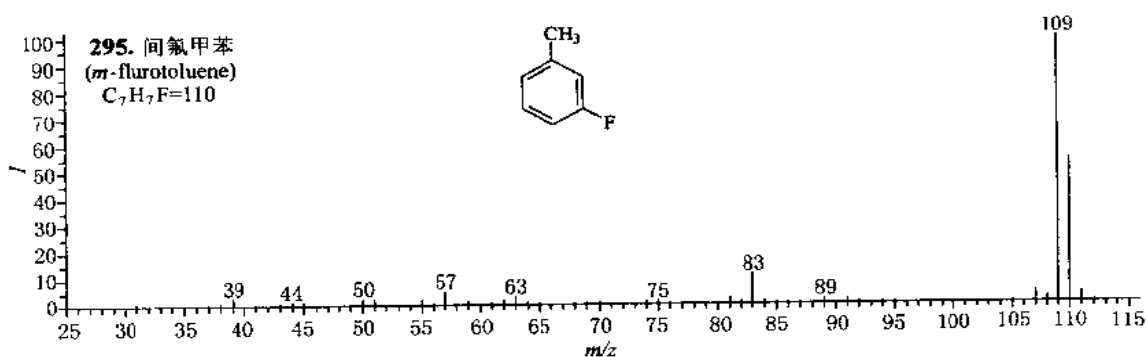
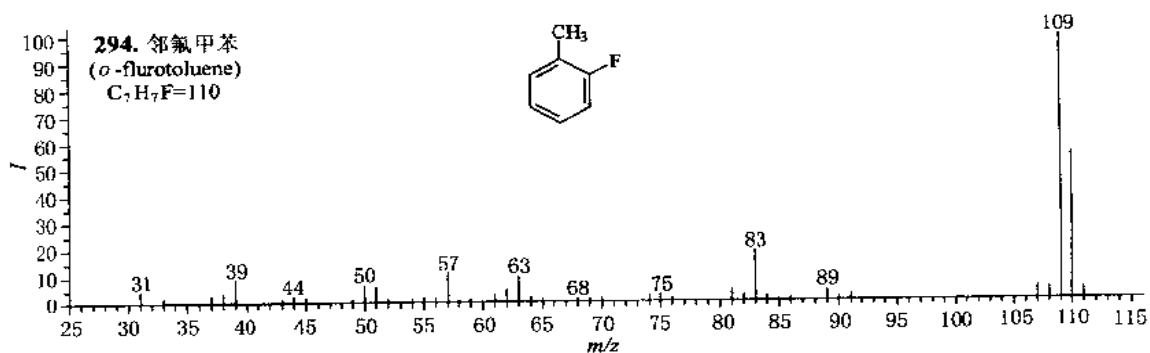
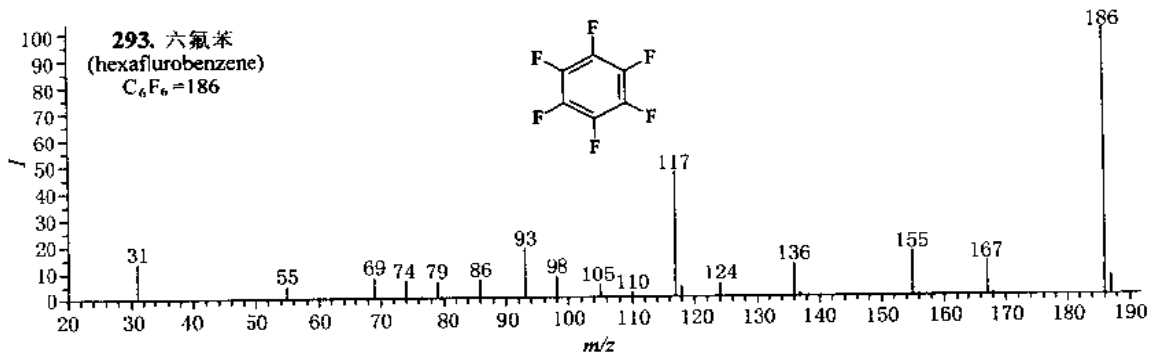
(4) 氯溴混合代苯类（317~319）以失溴为主失氯为辅，失溴后的继续裂解是失氯化氢。

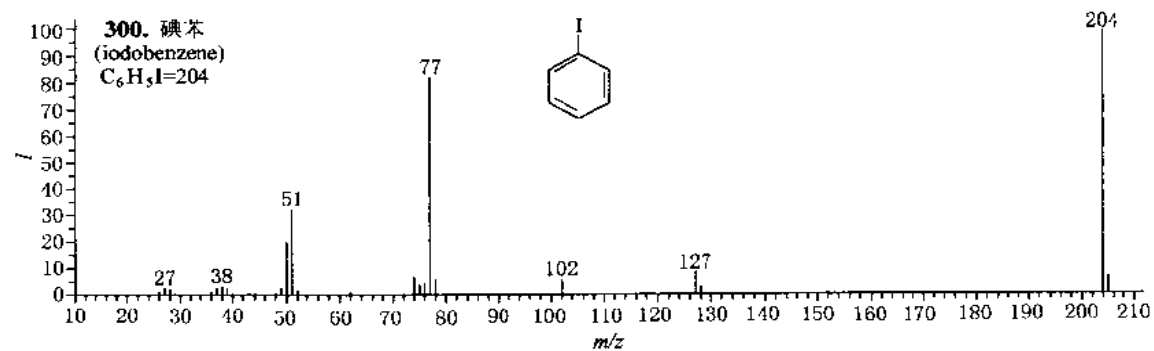
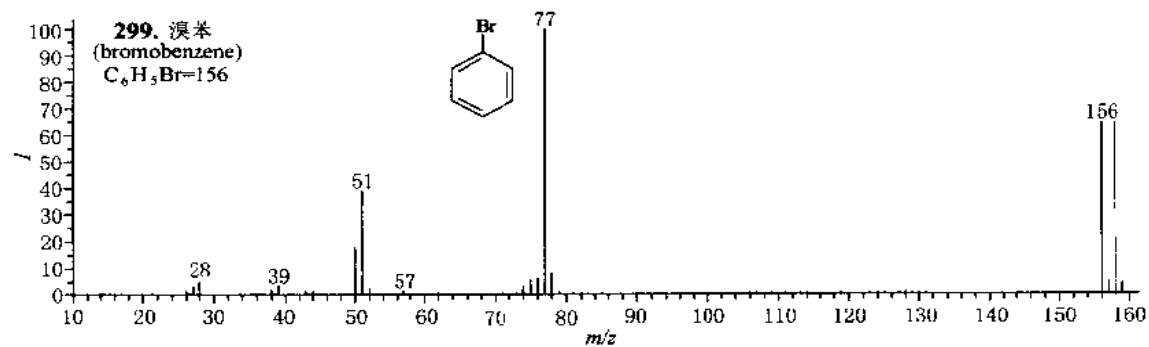
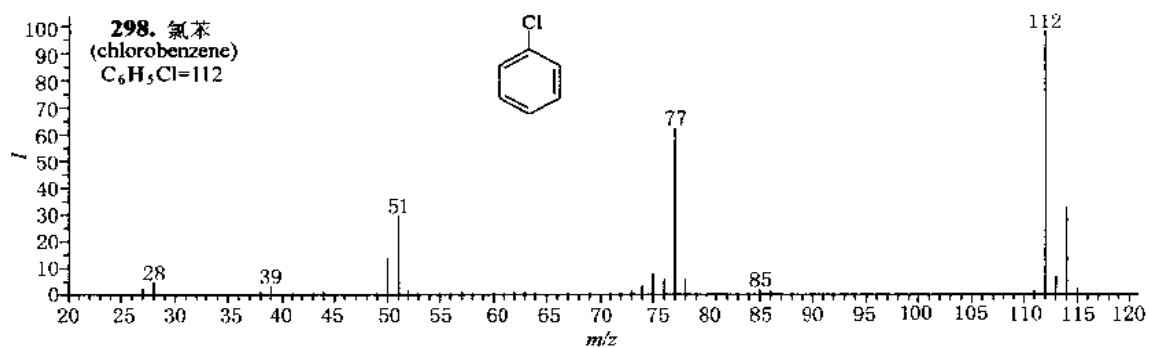
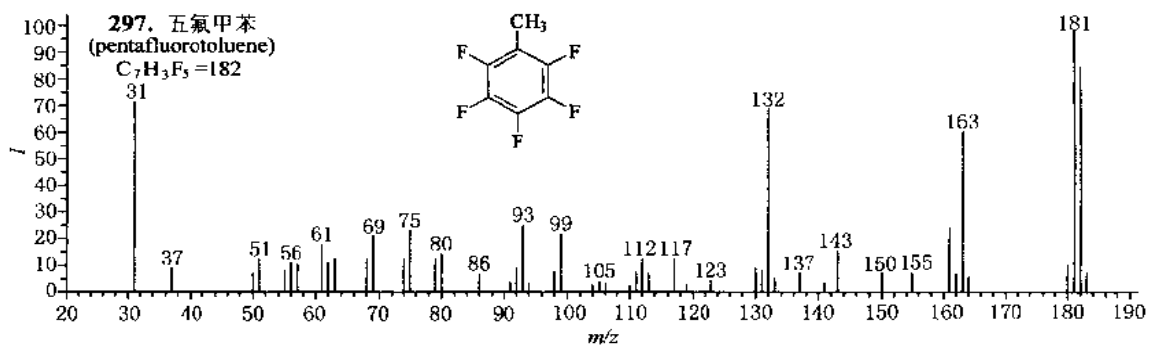
(5) 一氯、一溴或一碘代甲苯类（320~328）主要是失去卤原子，一氯二甲苯类（329~332）亦如此。

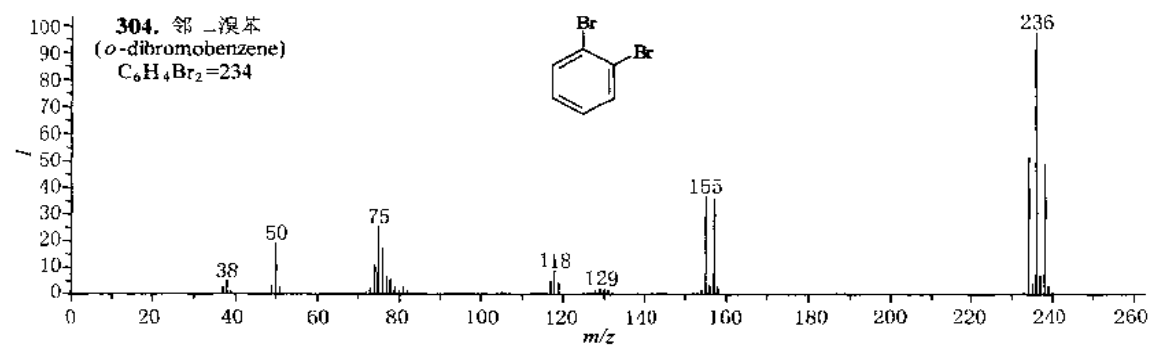
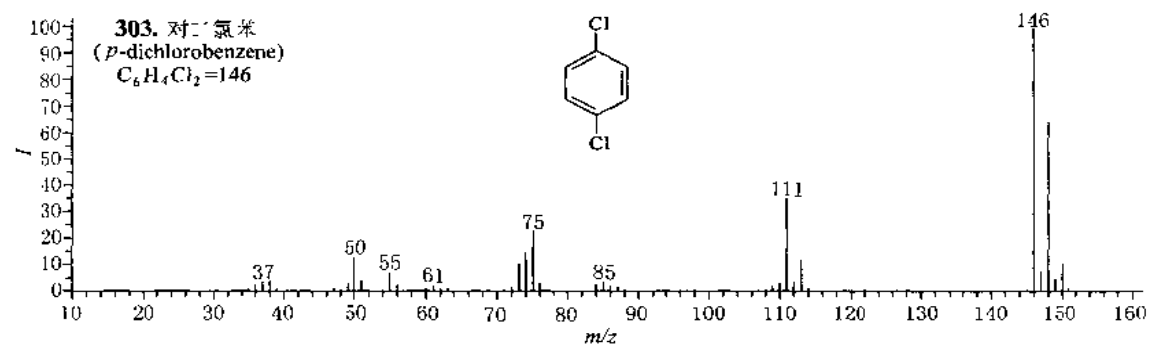
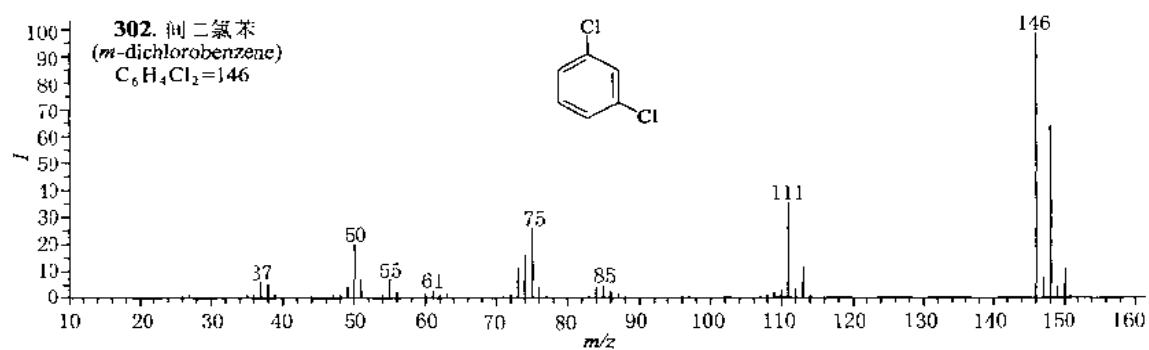
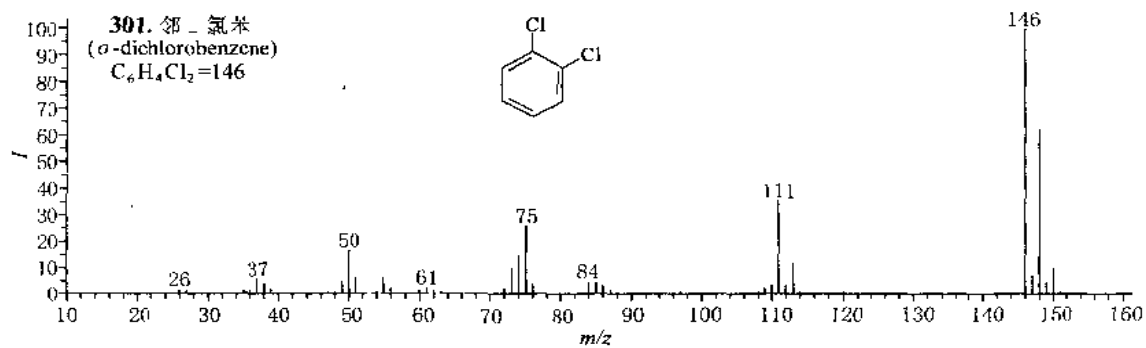
(6) 二溴甲苯类（333, 334）是连续失去溴原子和溴化氢。

(7) 间三氯甲苯（335）主要是失去氯原子和两分子氯化氢。

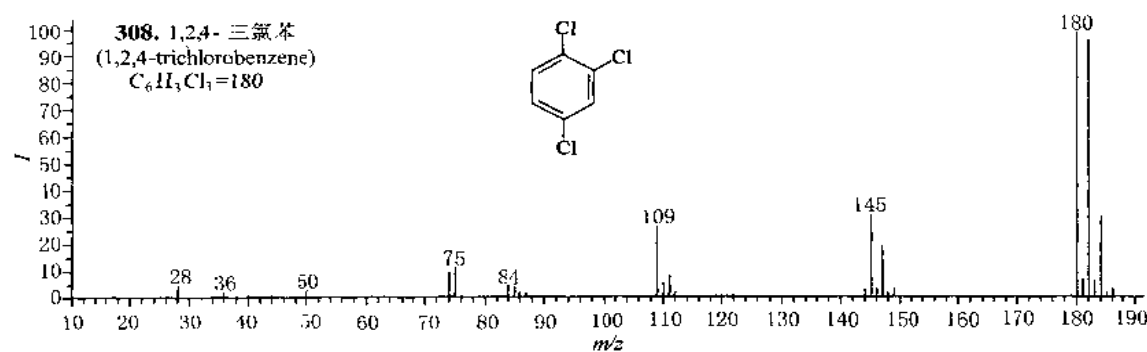
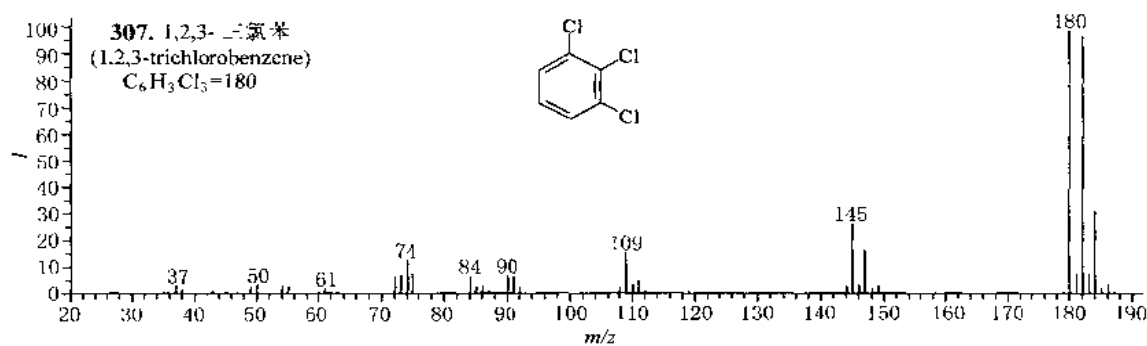
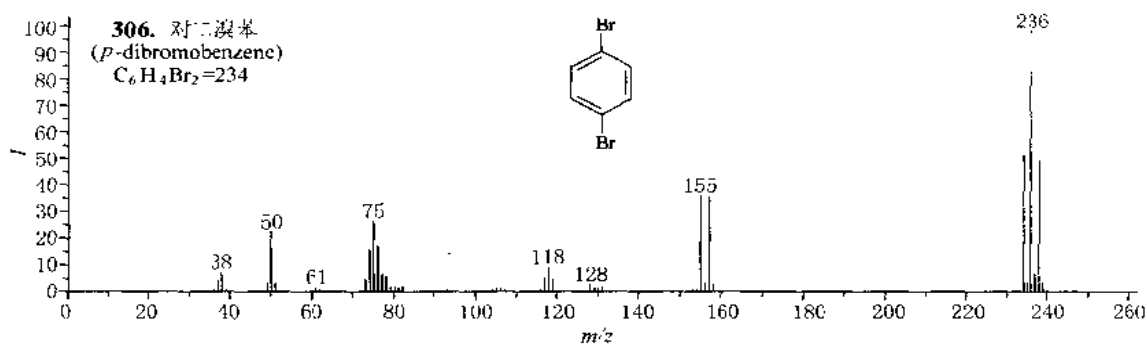
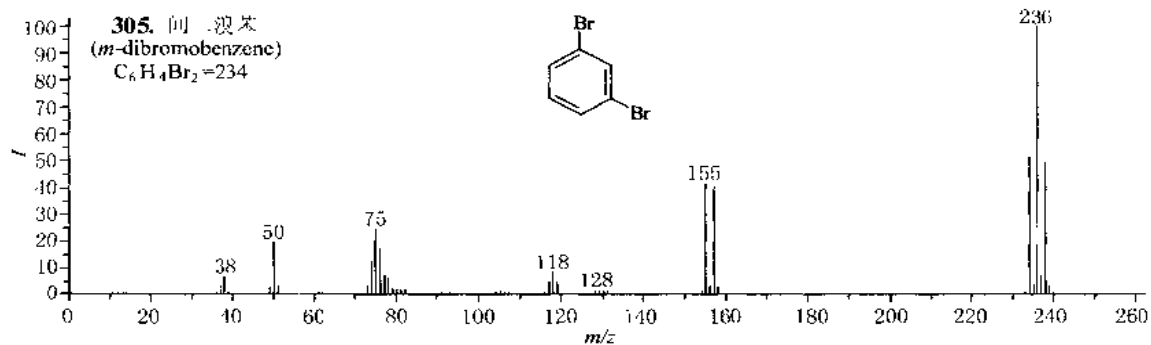


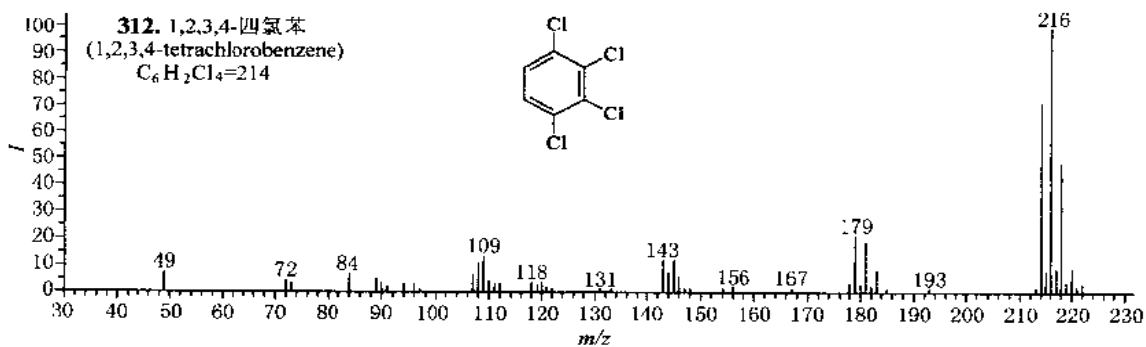
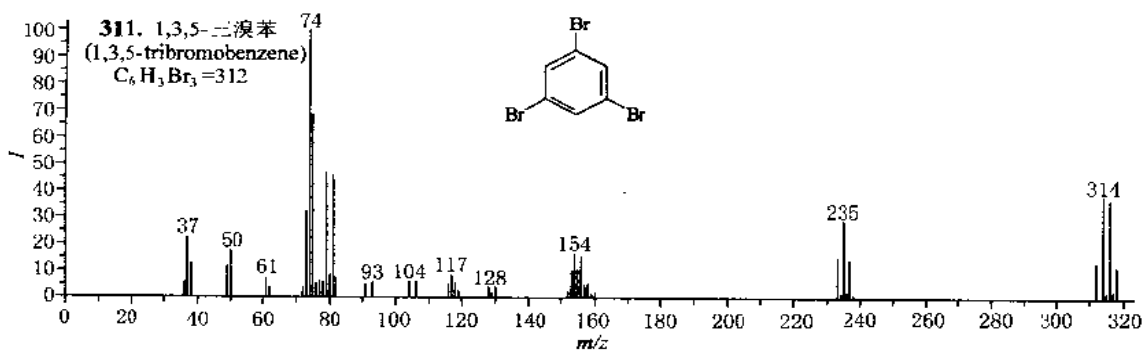
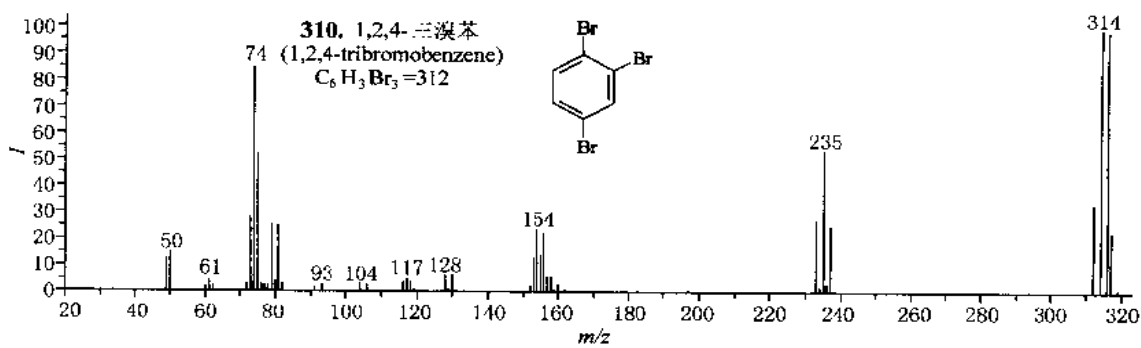
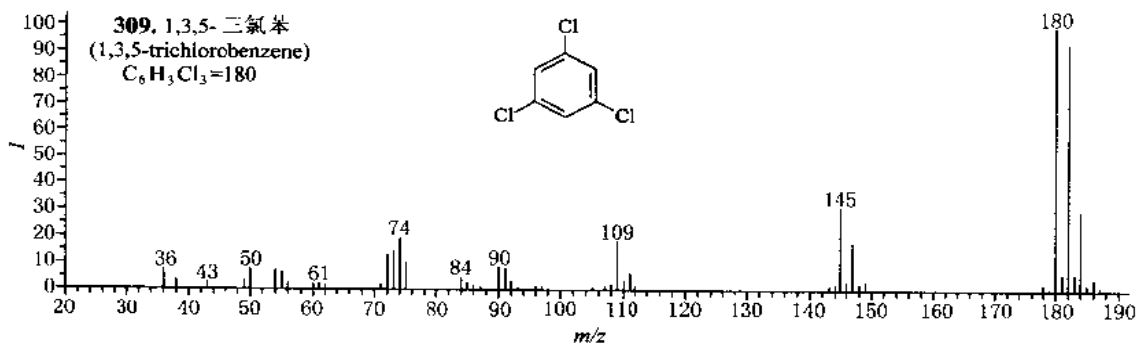


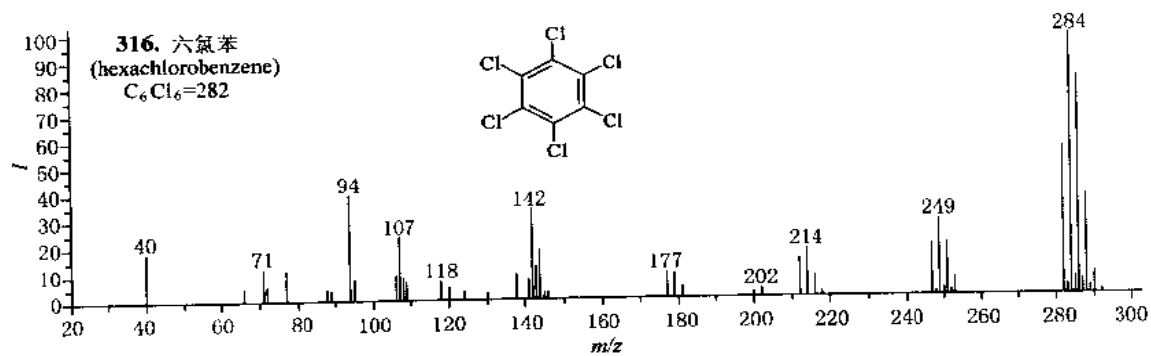
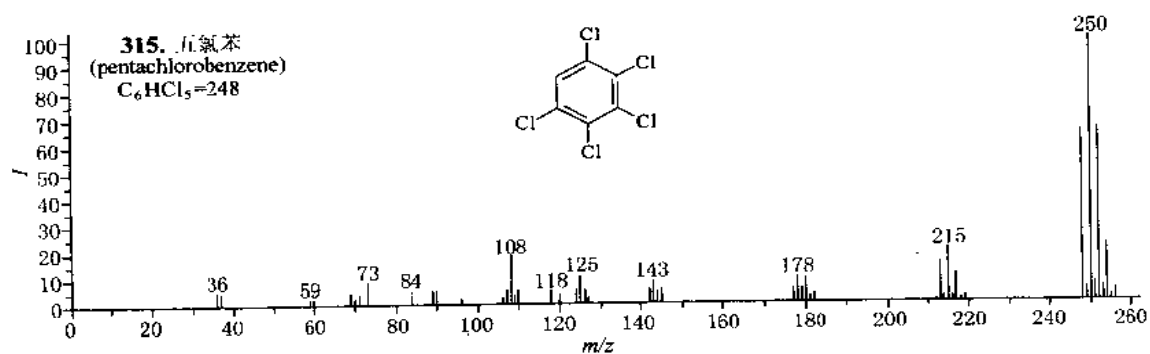
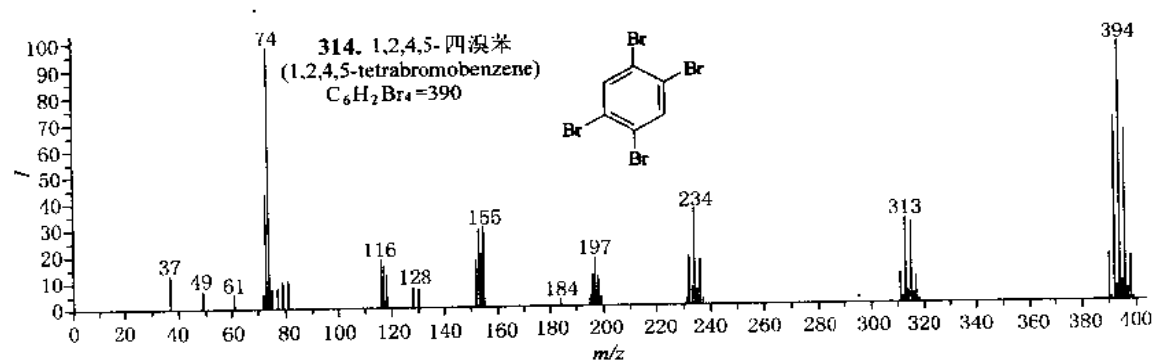
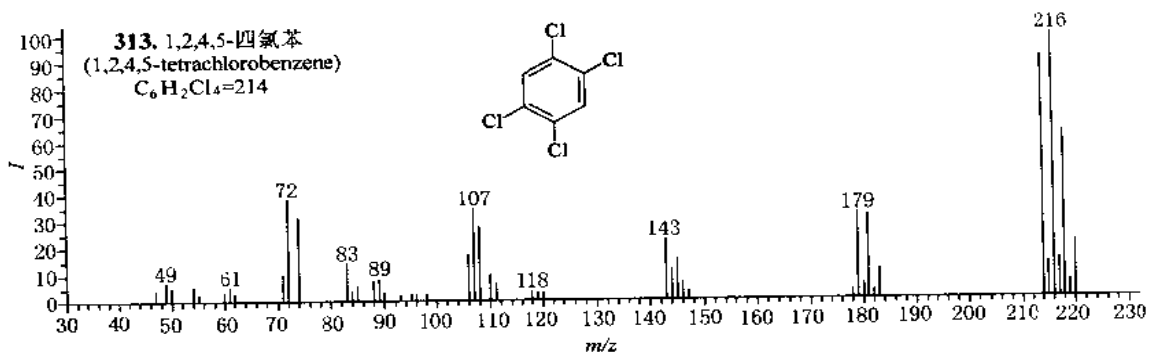


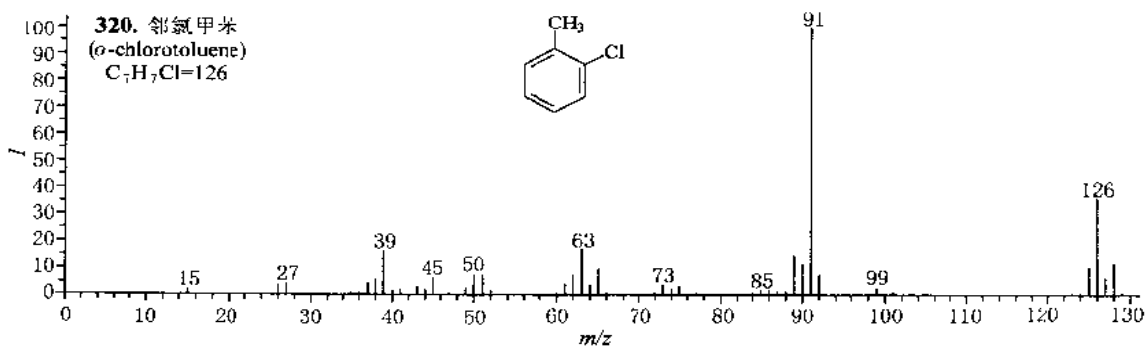
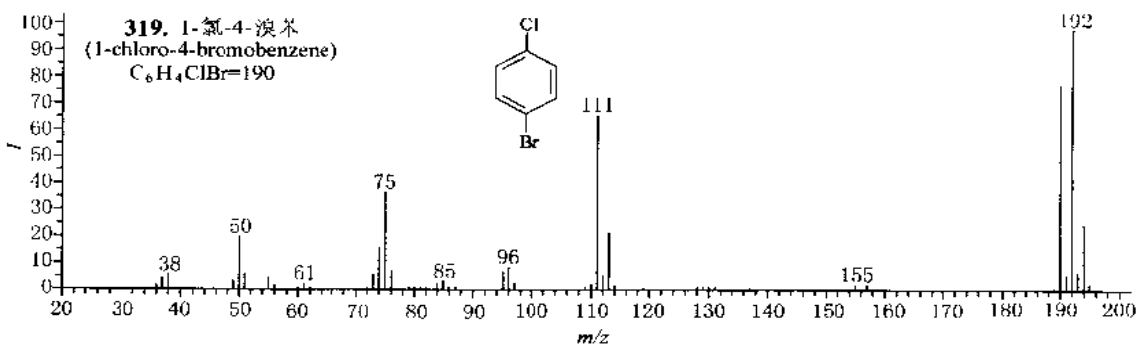
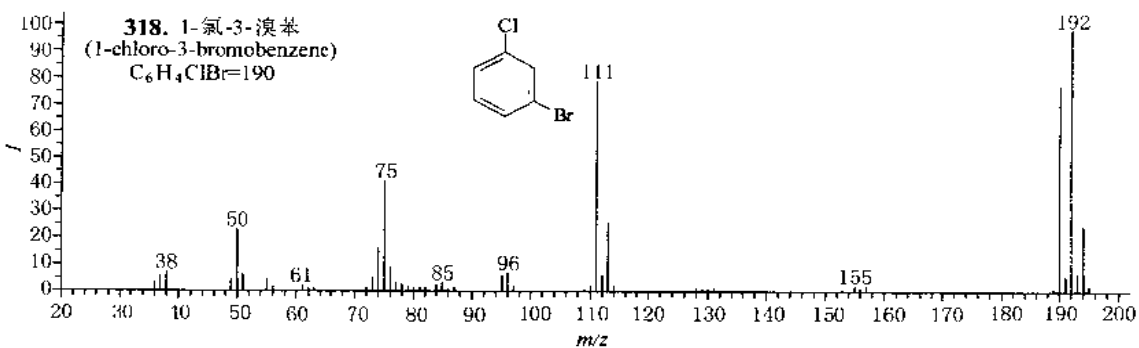
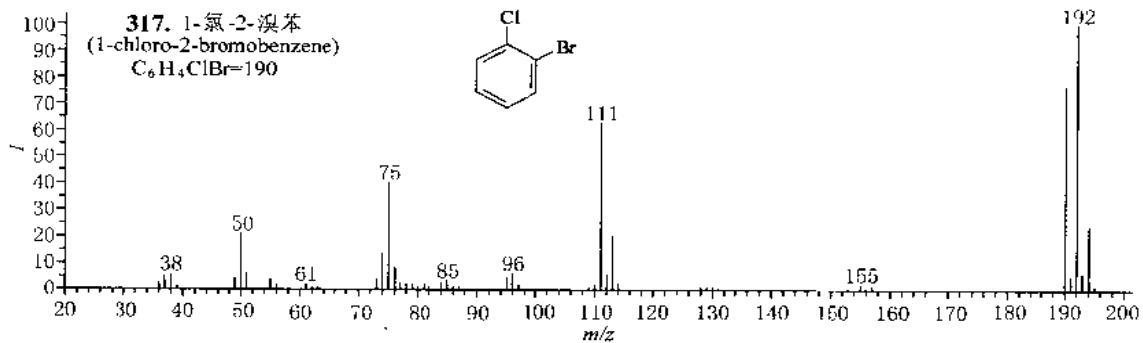


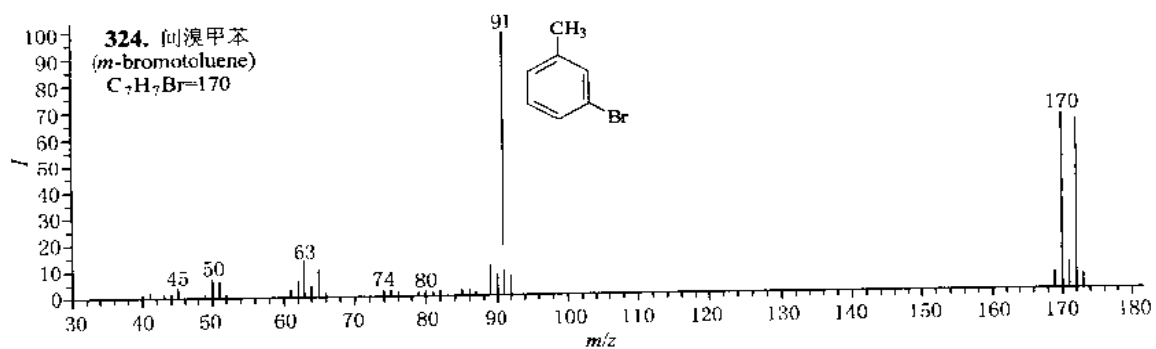
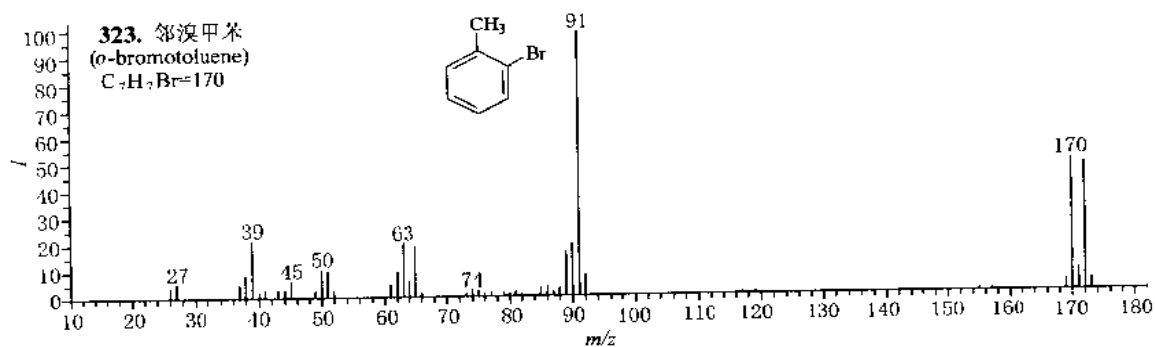
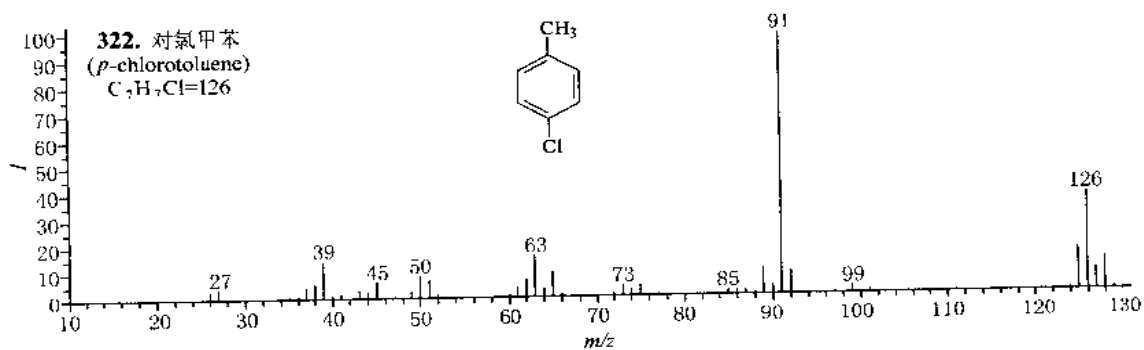
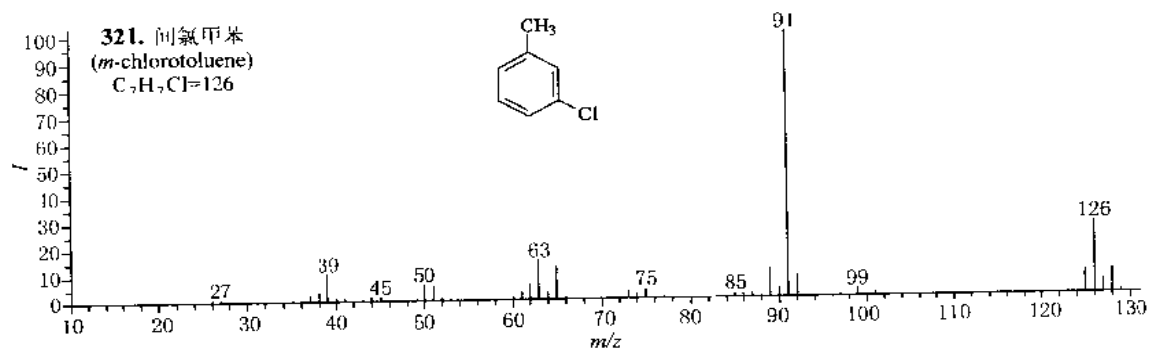


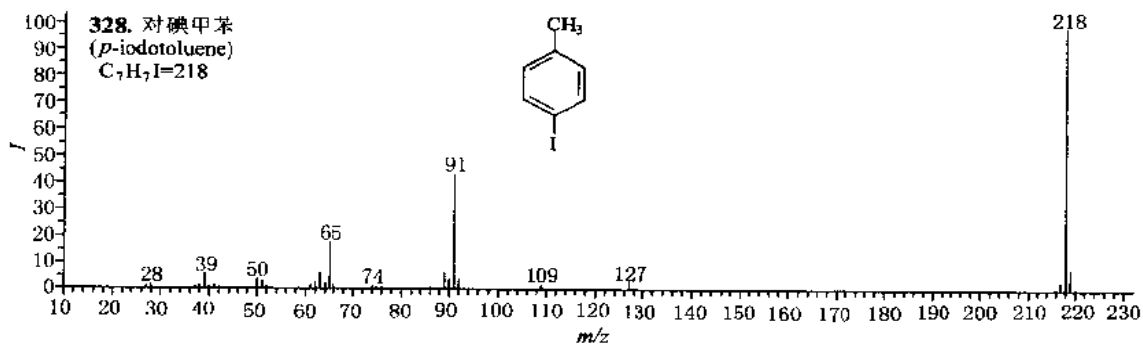
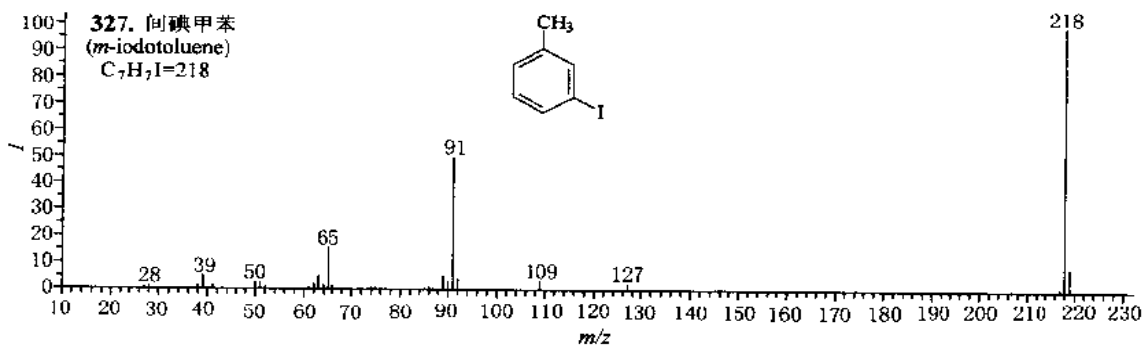
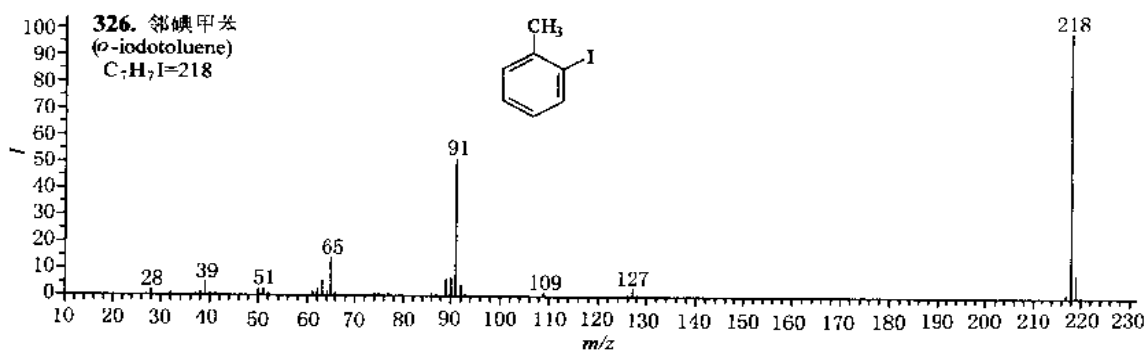
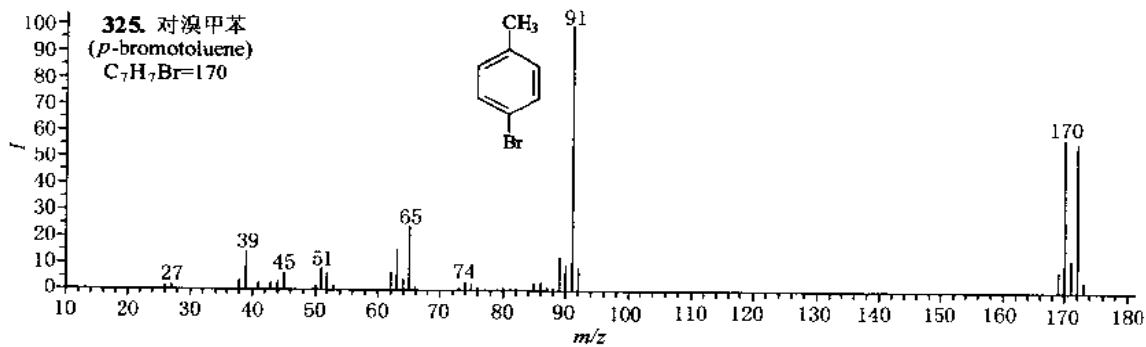


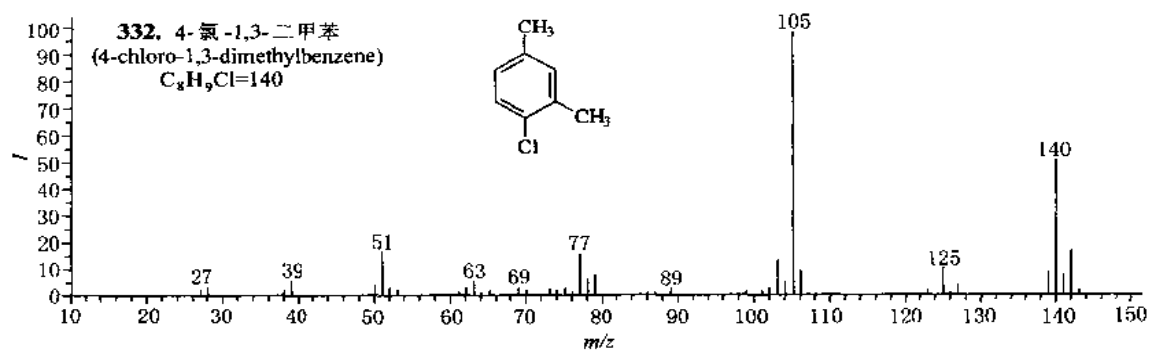
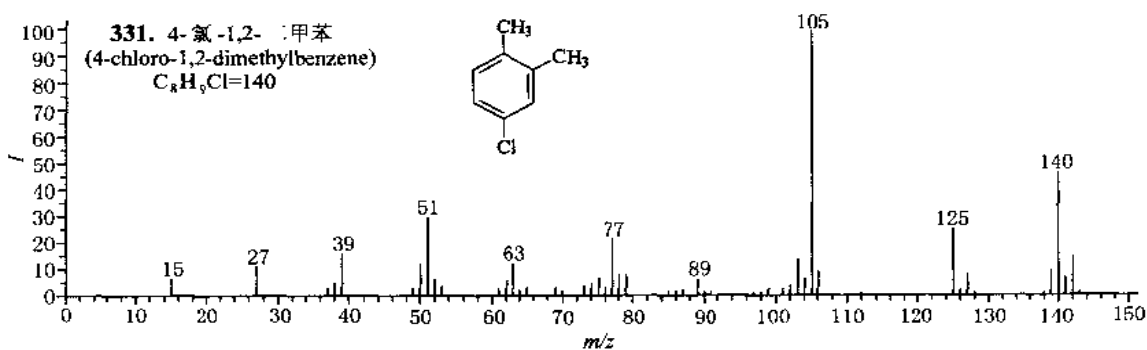
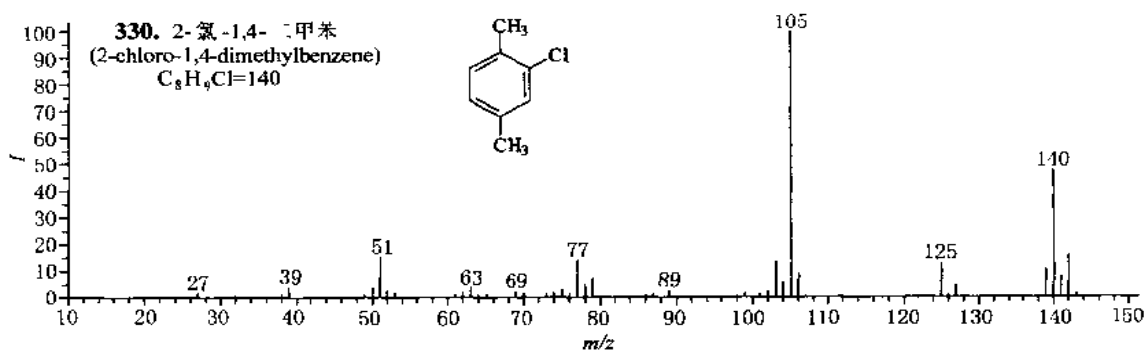
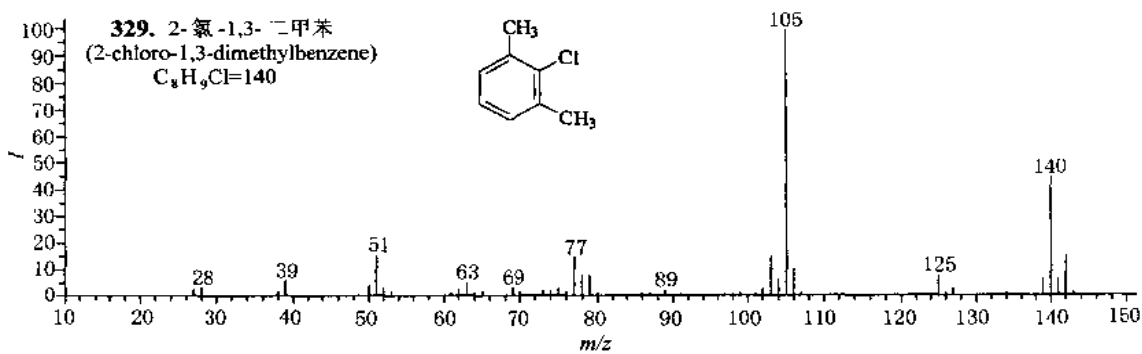


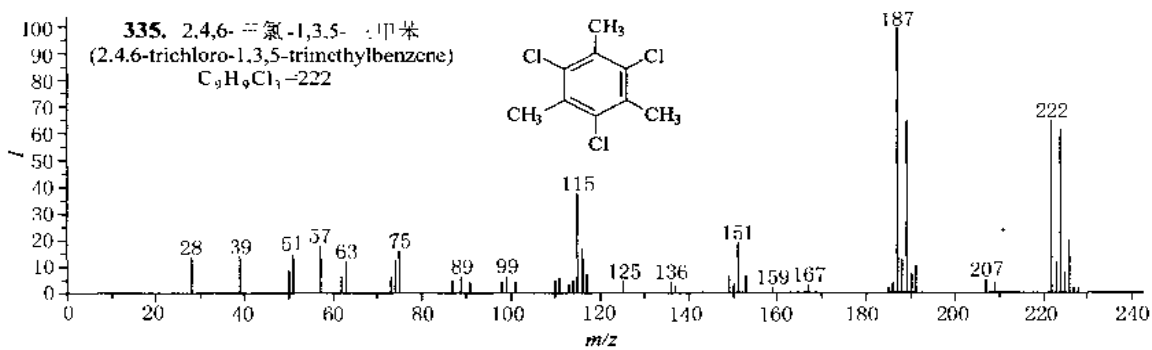
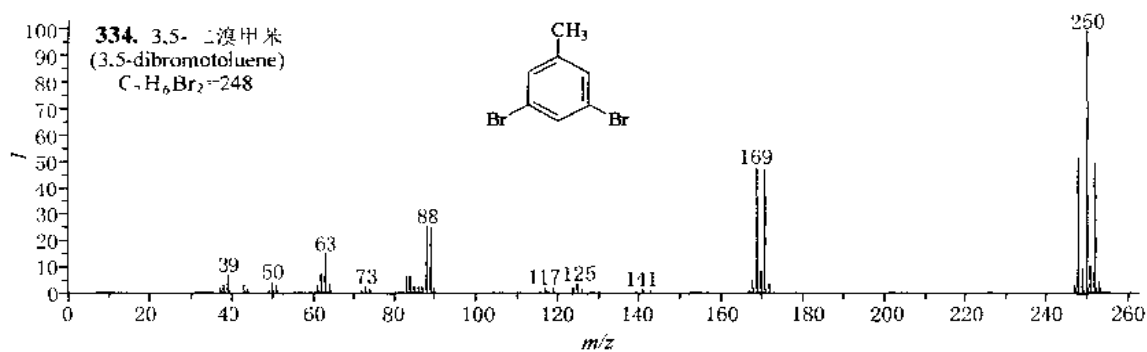
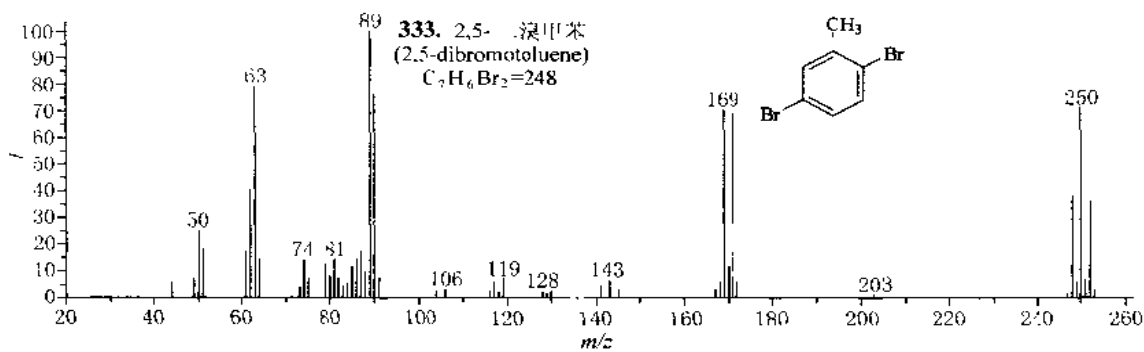






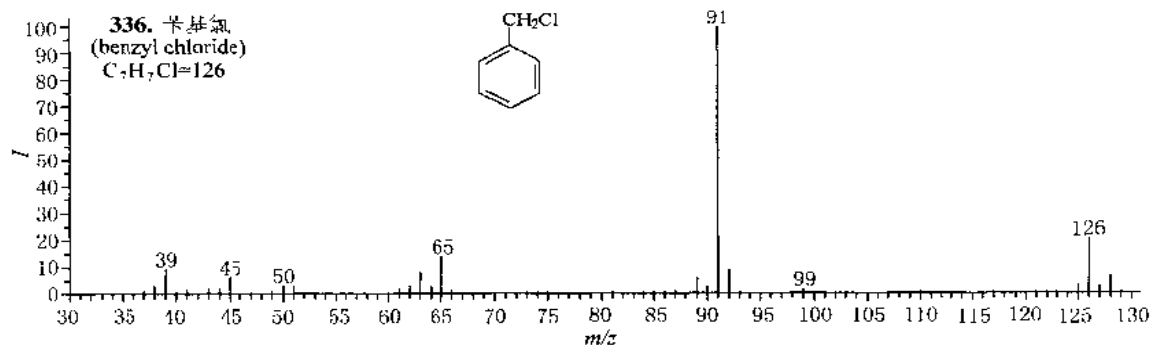




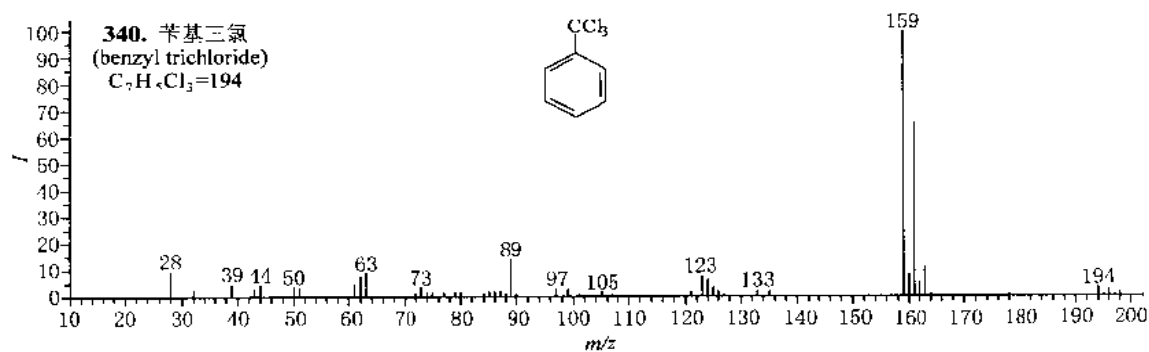
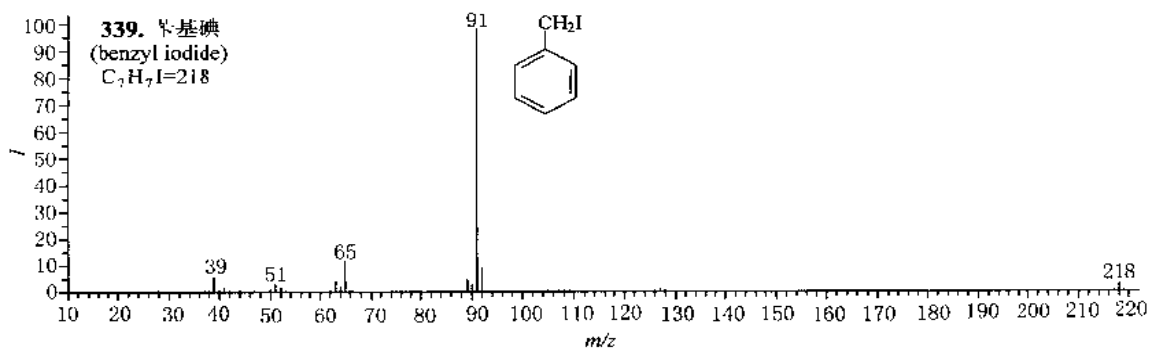
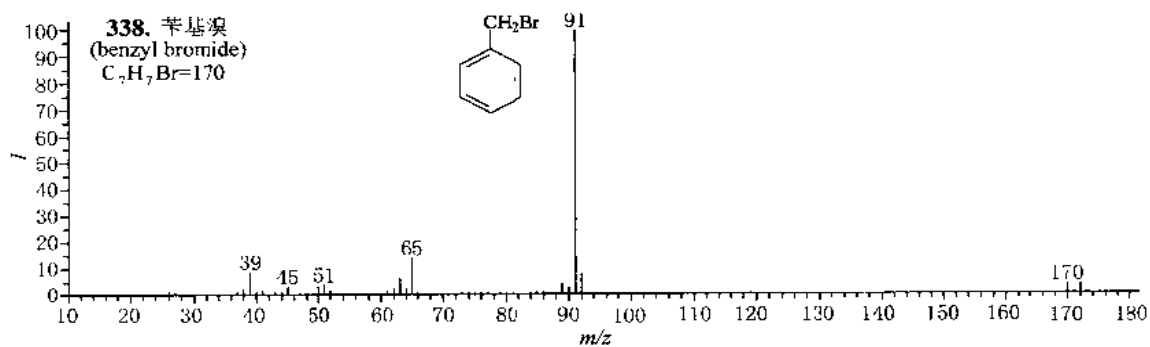
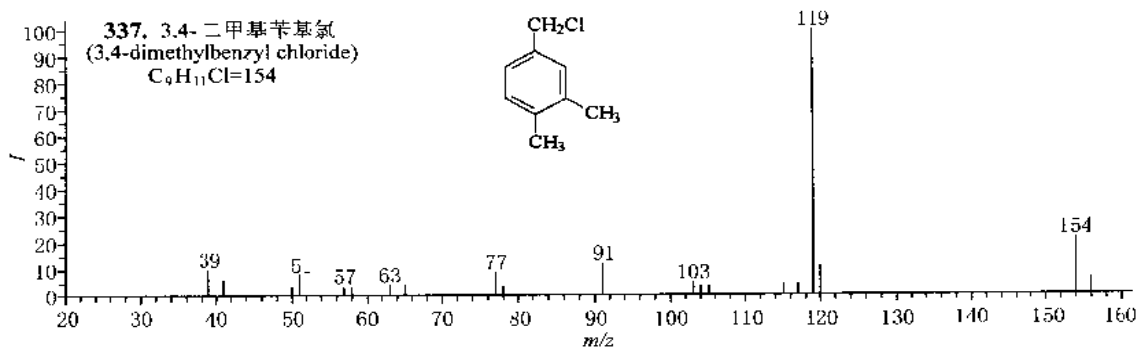


## 六、卤苯类

单卤苯类 (336~339) 主要是失卤原子和失乙炔, 多卤苯 (340) 是失氯。



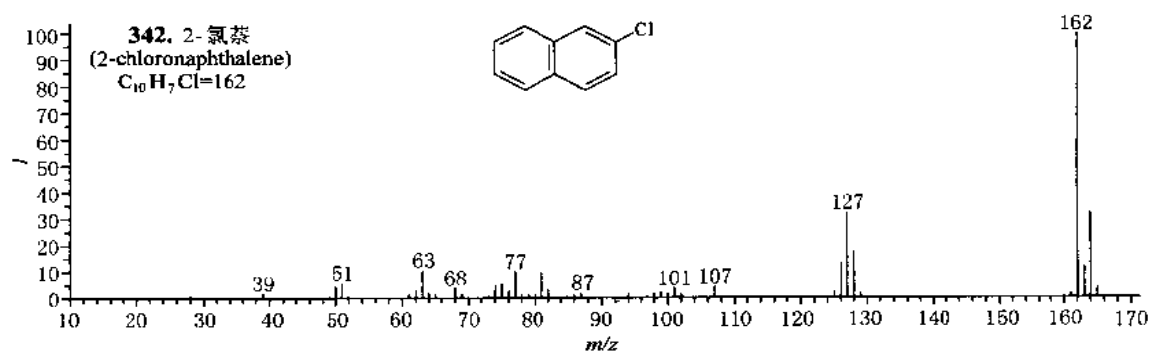
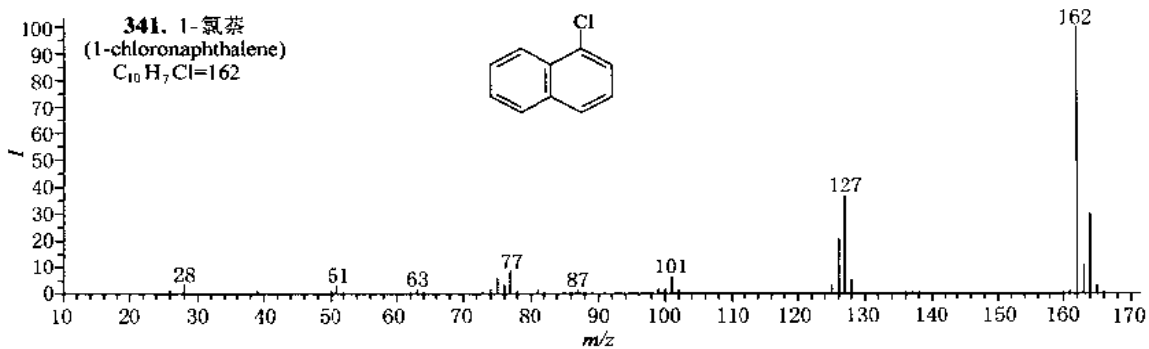




## 七、卤代萘类

一氯萘类 (341, 342) 主要是失去氯原子。

含卤化合物中的氯化物和溴化物, 都有一定的同位素峰强度比值, 请参阅文献 4 的 P. 23。



## 第五章 醇、酚和醚类

### 第一节 醇 类

#### 一、伯 醇 类

(1) 甲醇 (343)、乙醇 (344) 丙醇 (345) 和丁醇 (346) 的主要裂解是  $\alpha$ -裂解生成  $M-1$  和强峰  $m/z$  31 ( $\text{CH}_2=\overset{\cdot}{\text{O}}\text{H}$ ), 分子离子的强度渐次减弱。

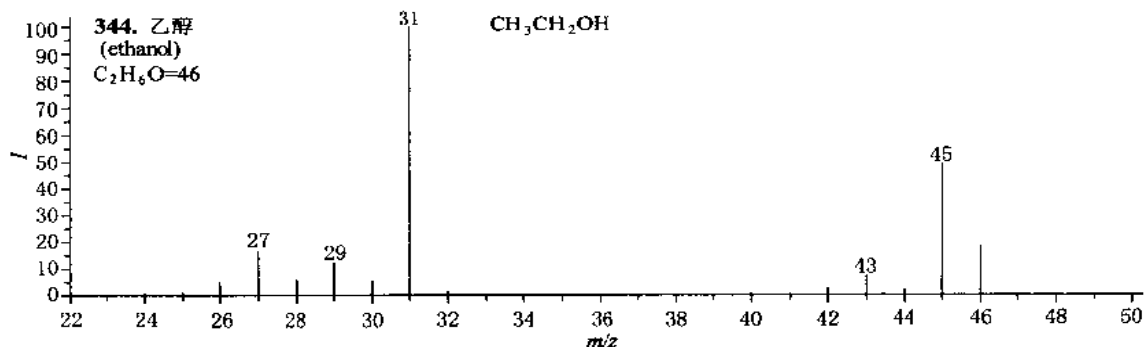
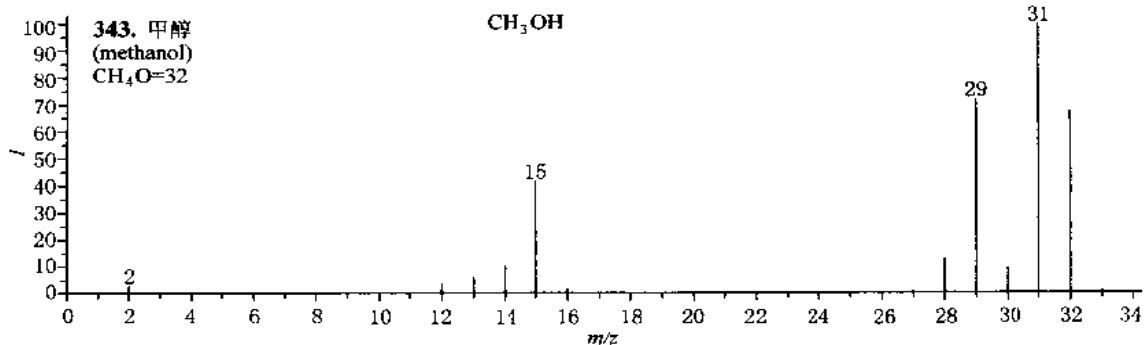
(2) 自丙醇 (345) 开始,  $M-\text{H}_2\text{O}$  离子渐次增强, 这些离子是  $m/z$  42 (丙醇), 56 (丁醇), 70 (戊醇), 84 (己醇), 98 (庚醇), 126 (壬醇) 和 154 (十一醇) 等。

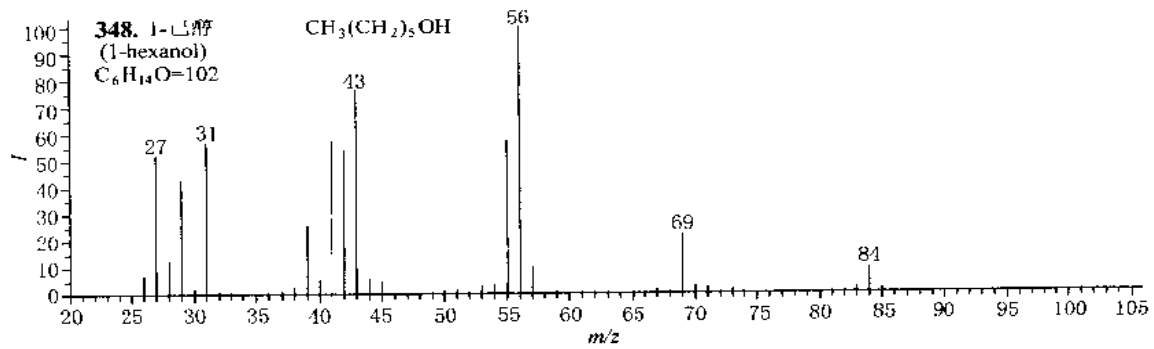
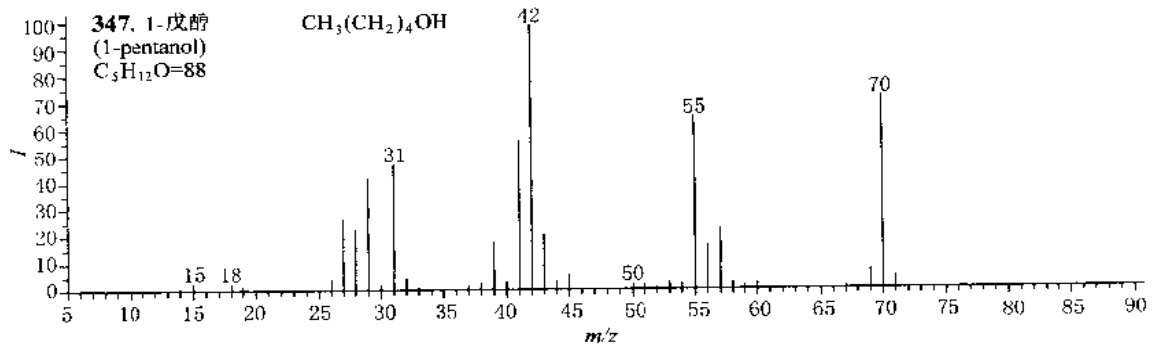
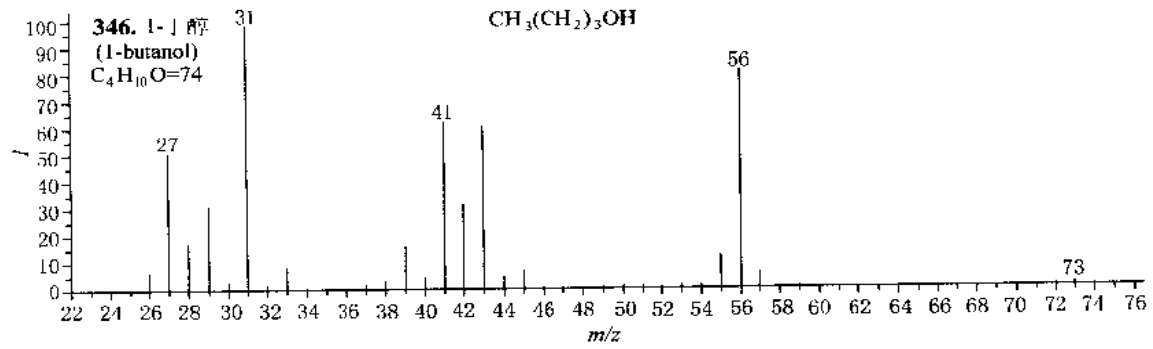
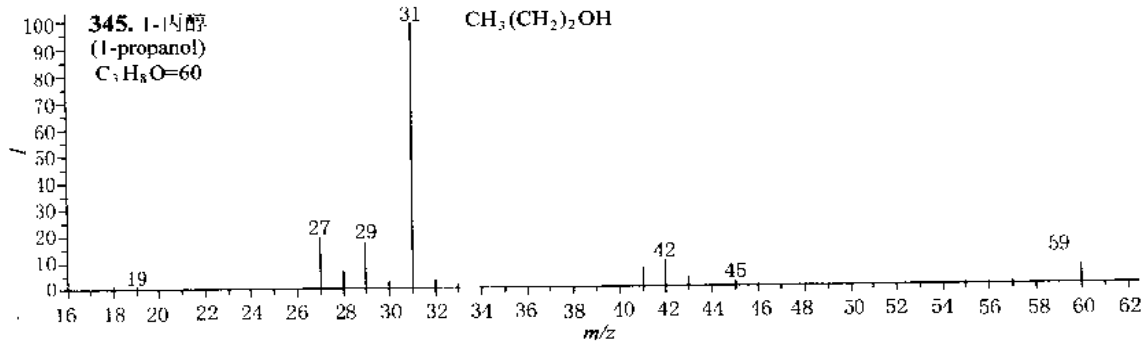
(3) 自戊醇 (347) 开始,  $M-\text{H}_2\text{O}$  离子能继续失去乙烯, 这些离子是  $m/z$  42 (戊醇), 56 (己醇), 70 (庚醇), 84 (壬醇), 126 (十一醇) 和 140 (十二醇) 等。

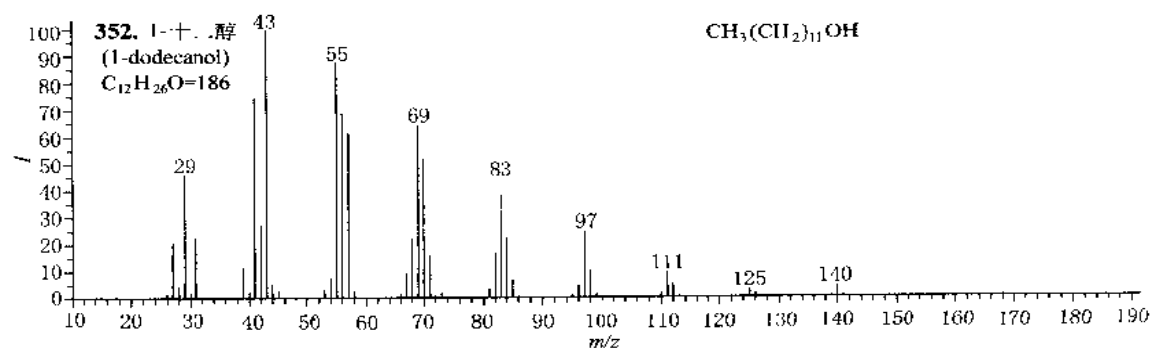
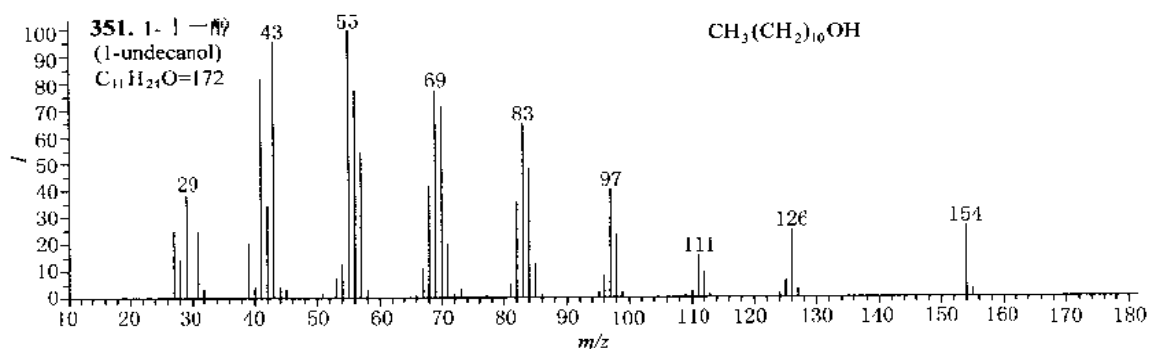
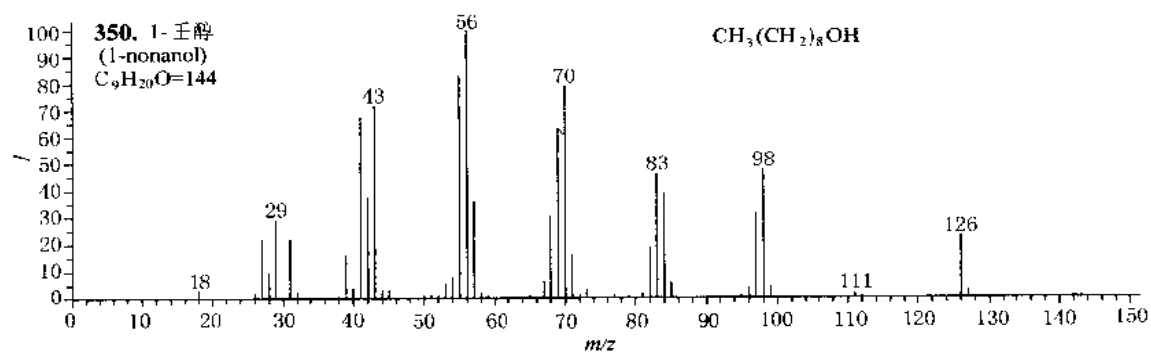
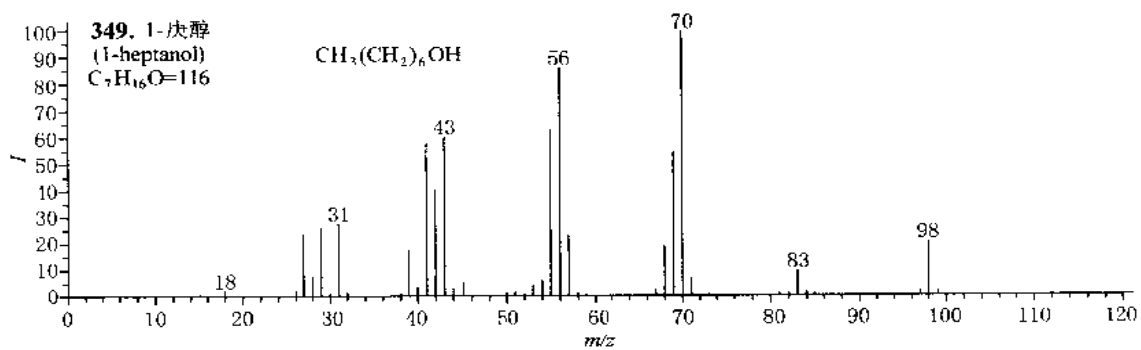
(4) 长链伯醇 (348~363) 的  $M-\text{H}_2\text{O}$  离子和  $M-\text{H}_2\text{O}-\text{C}_2\text{H}_4$  离子仍很明显, 这 2 个离子的出现对于鉴定伯醇类很有意义。

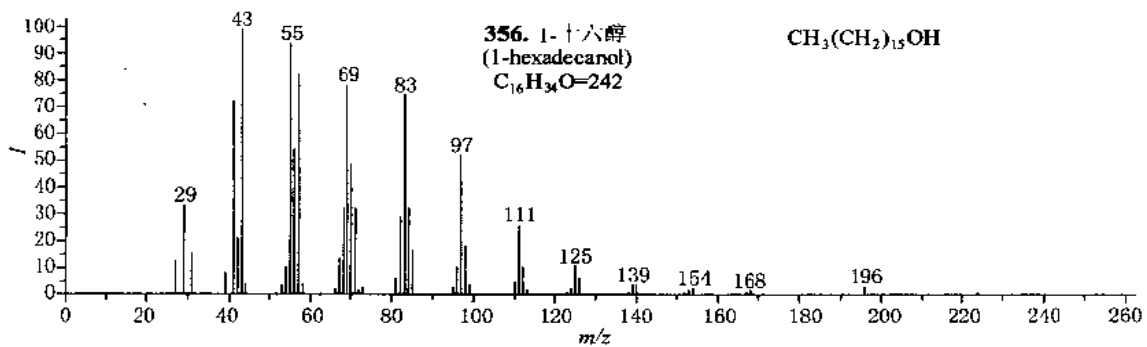
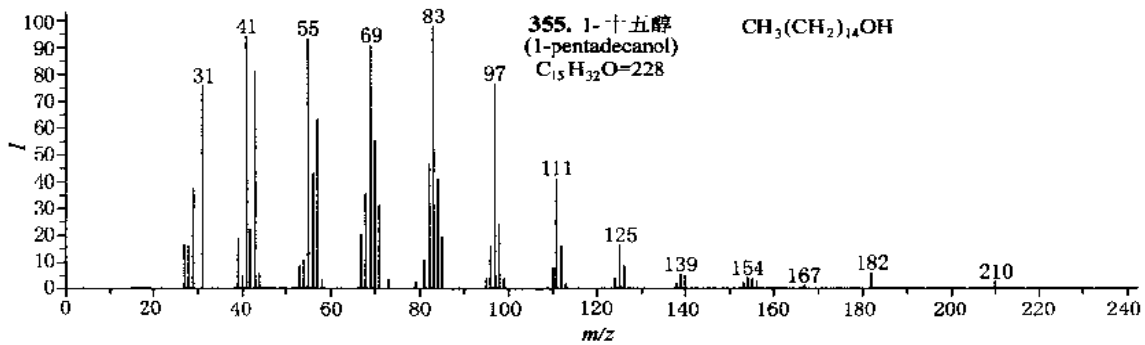
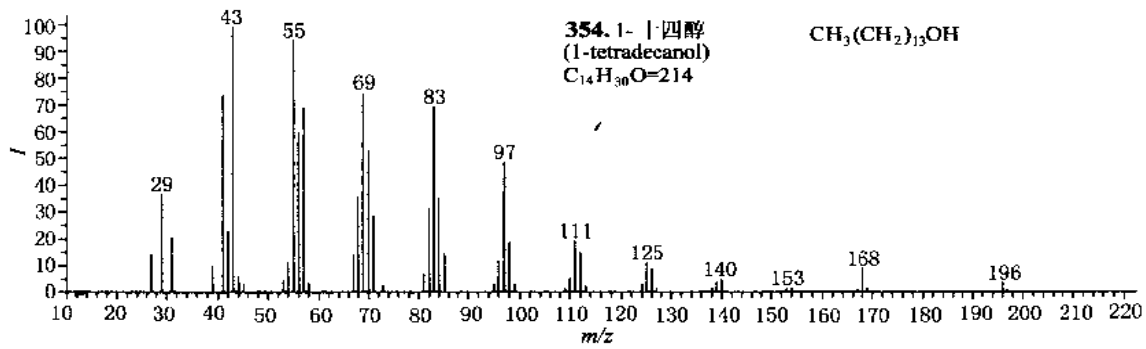
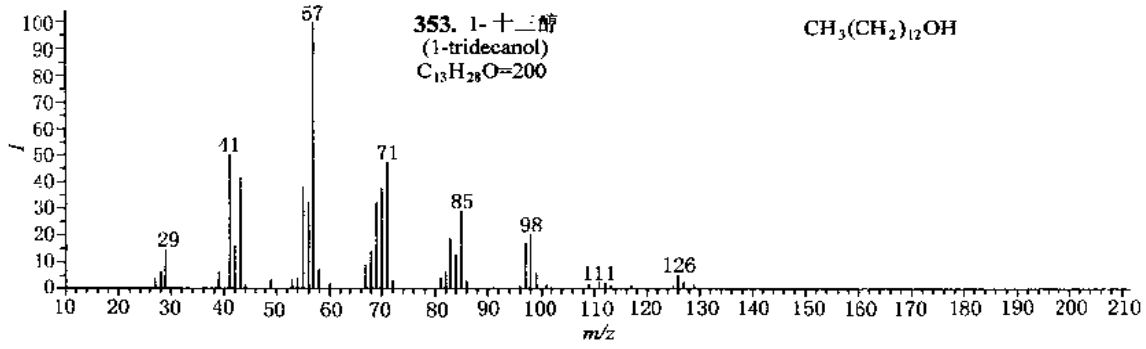
(5)  $\beta$ -氨基乙醇 (364) 的主要裂解是  $\alpha$ -裂解生成基峰  $m/z$  30 ( $\text{CH}_2=\overset{+}{\text{N}}\text{H}_2$ )。

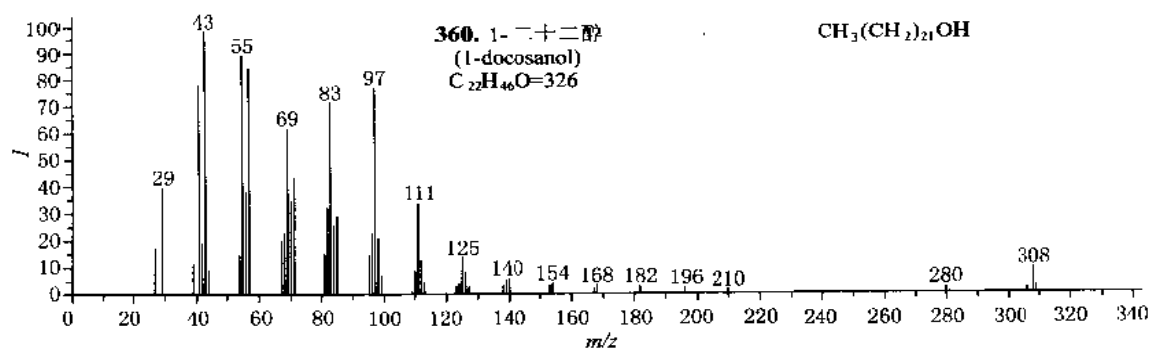
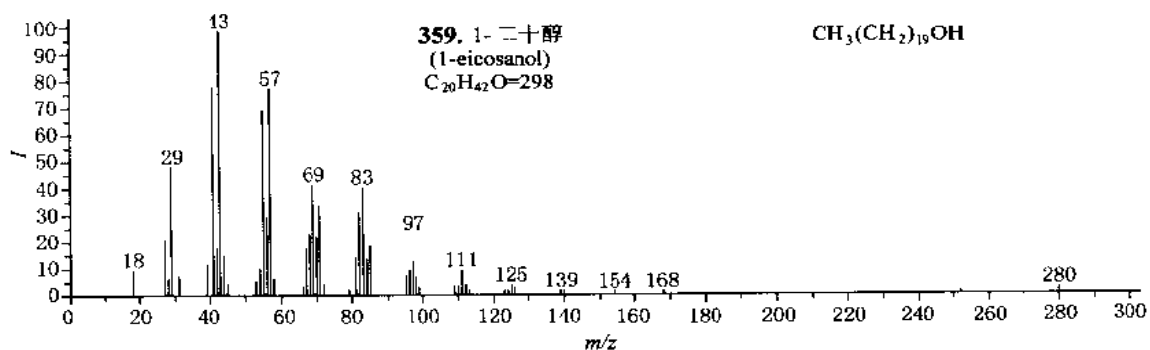
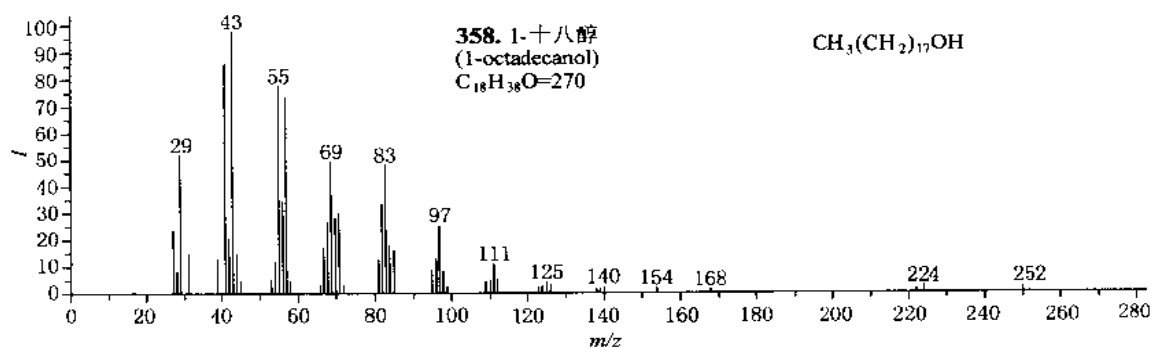
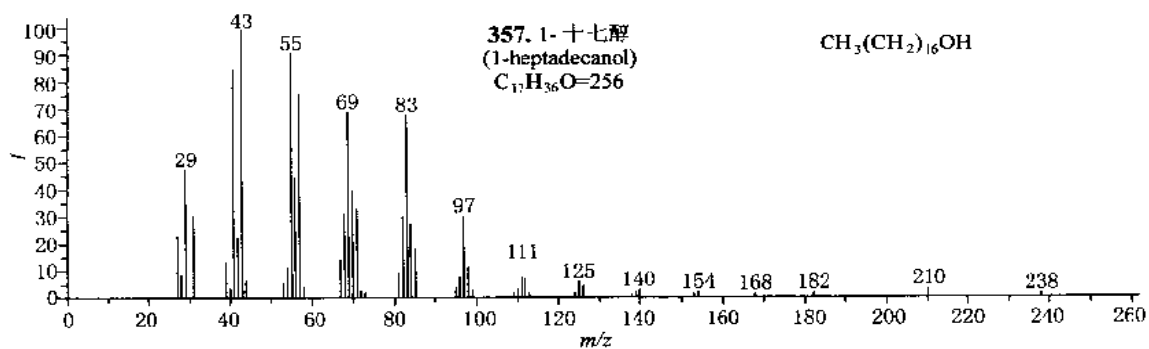
(6) 2-溴乙醇 (365) 的主要裂解是失溴和  $\alpha$ -裂解生成离子  $m/z$  31 ( $\text{CH}_2=\overset{\cdot}{\text{O}}\text{H}$ ), 3-溴-1-丙醇 (366) 的主要裂解与丙醇相同, 即能失水 ( $m/z$  120) 和生成离子  $m/z$  31, 另外是能失溴和失溴化氢。

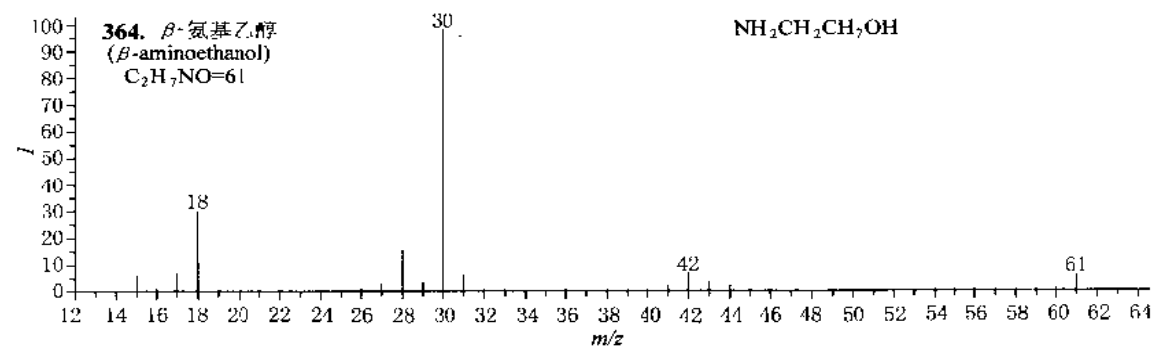
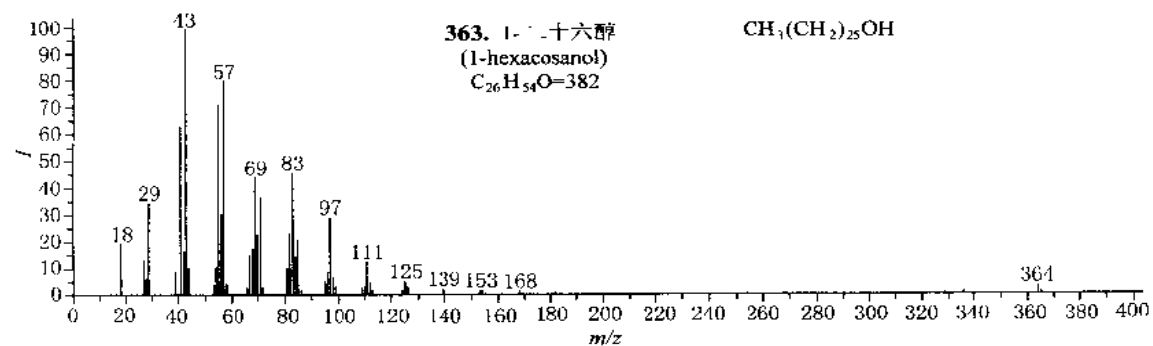
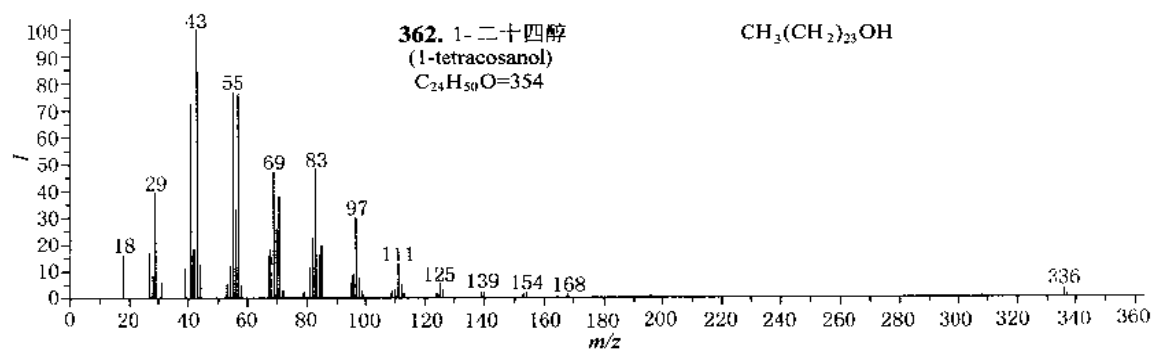
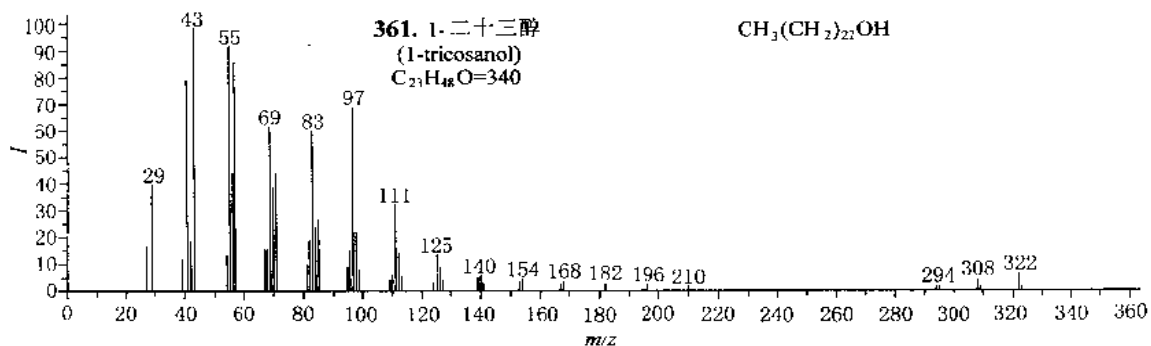




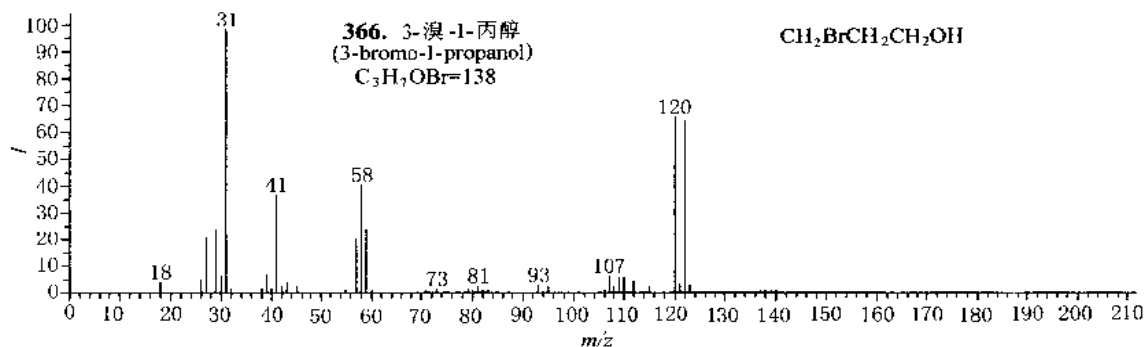
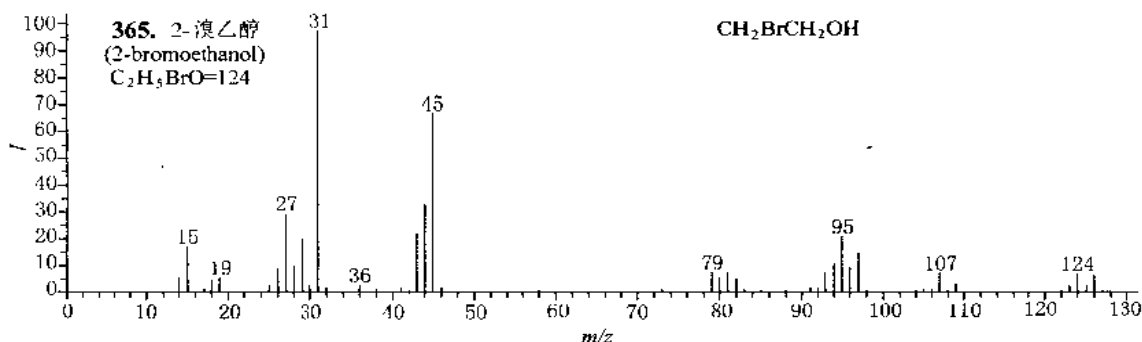






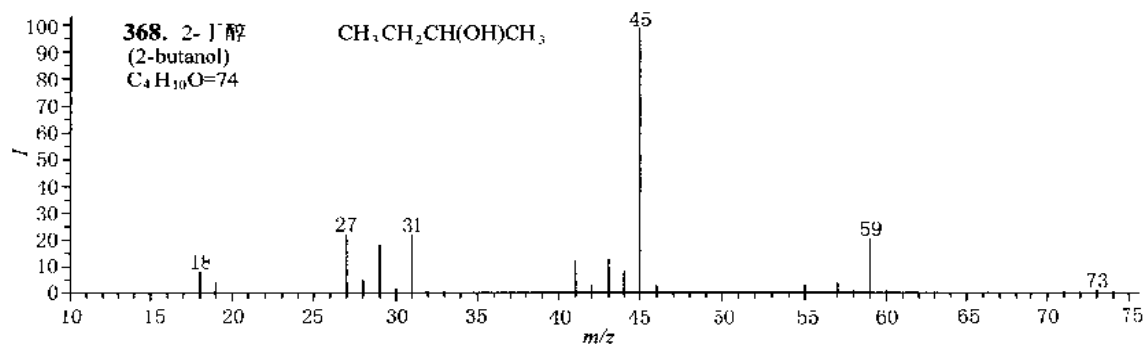
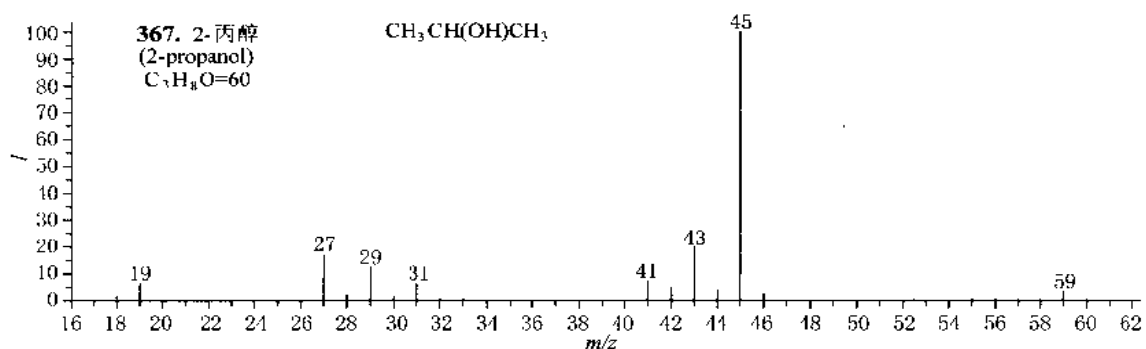


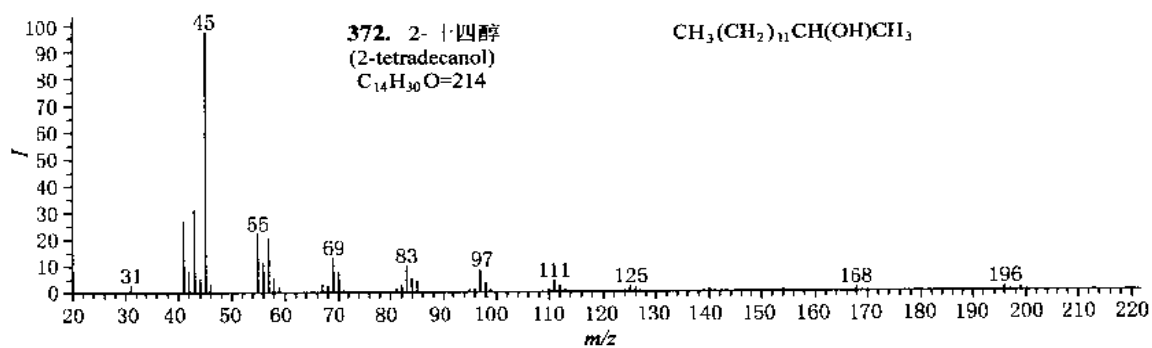
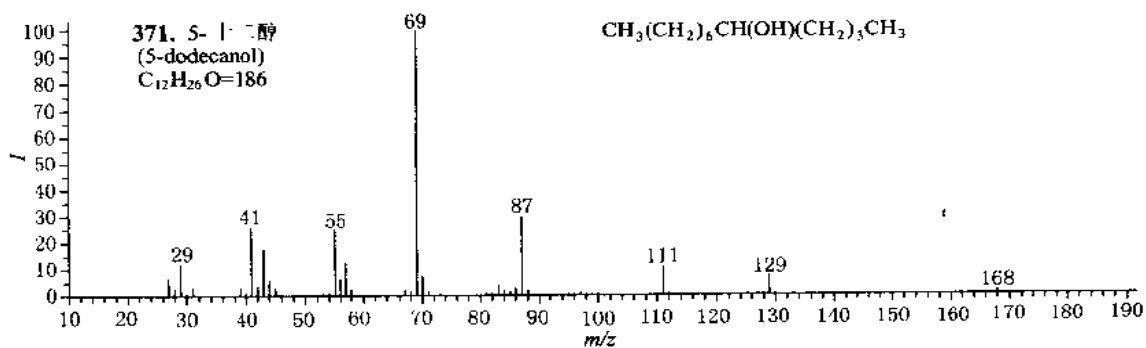
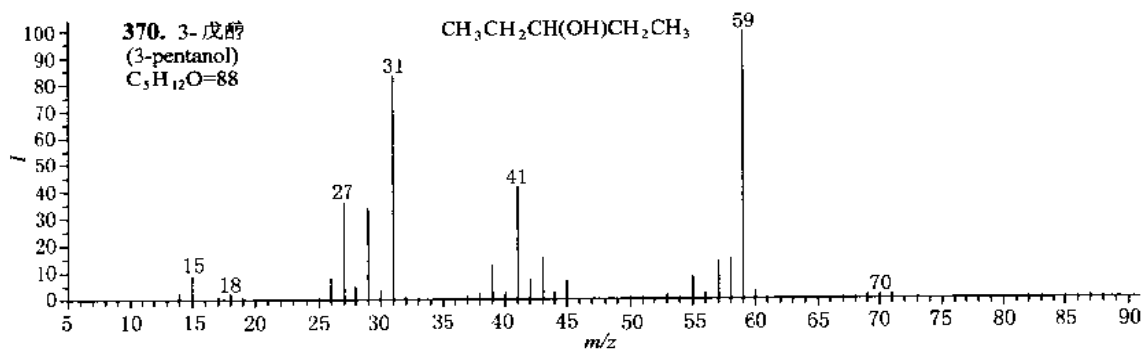
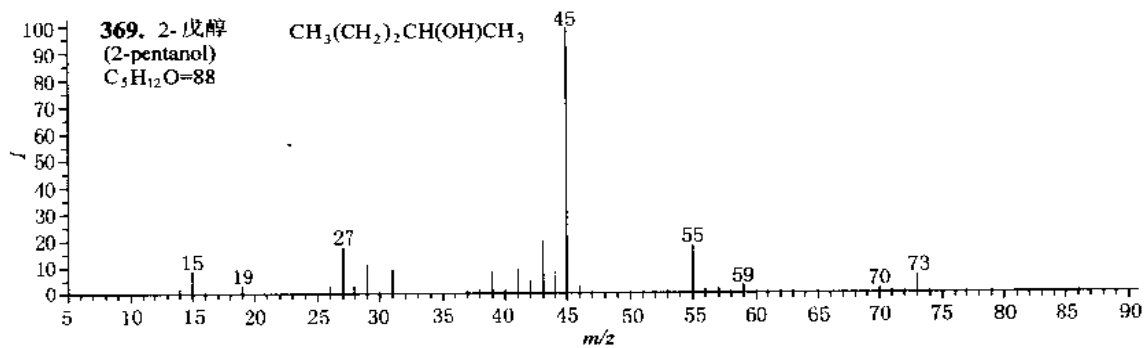


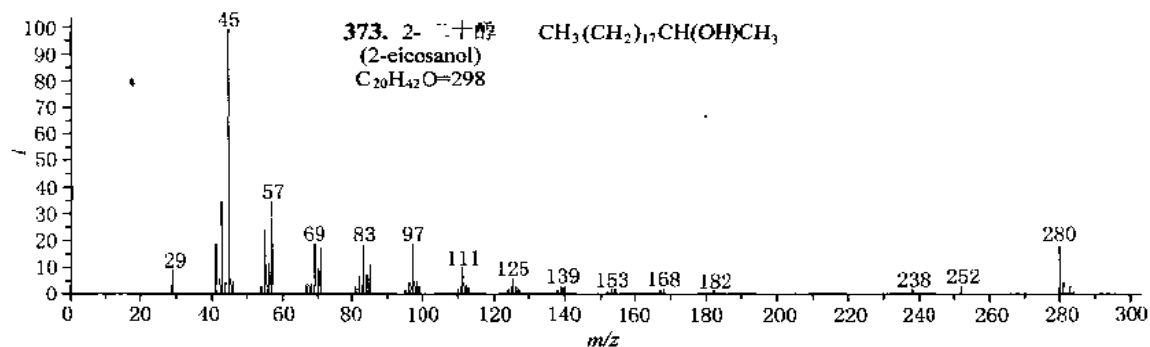


## 二、仲醇类

仲醇类 (367~373) 的主要裂解是羟基两侧的  $\alpha$ -裂解, 产物是 2 个含羟基的离子, 其中质量小者有更大的相对丰度。继续的裂解有的是失水, 有的是失乙烯。大分子仲醇多出现  $M-CH_3$  和  $M-H_2O$  离子, 但都较弱。

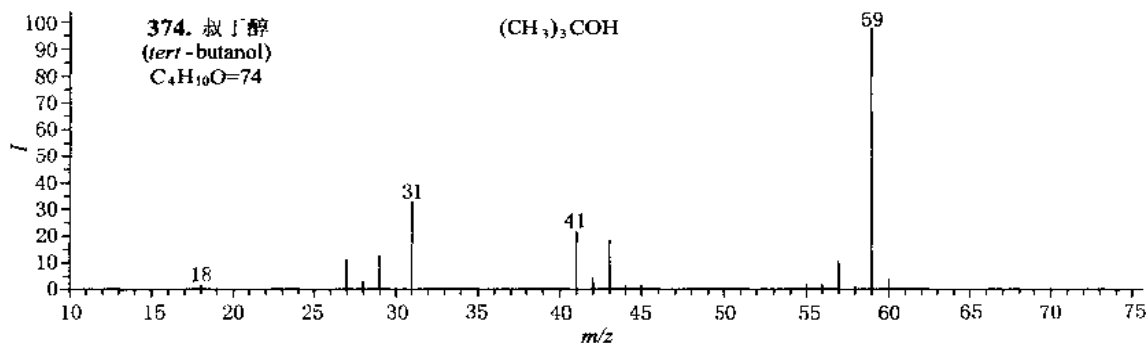






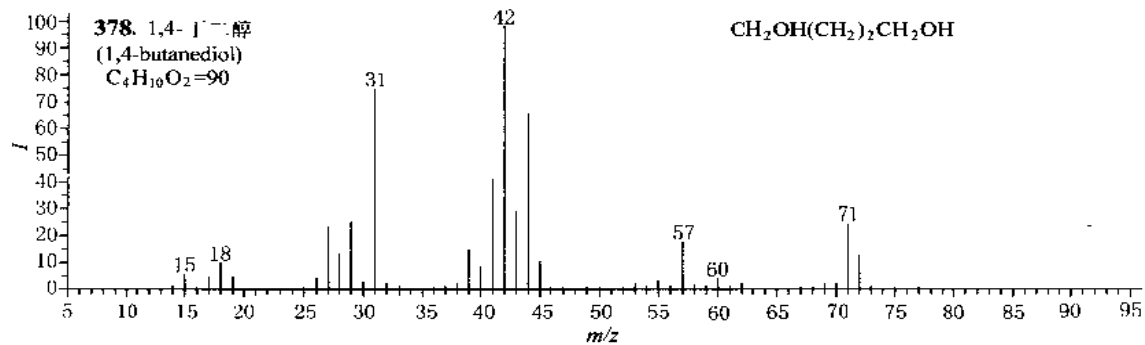
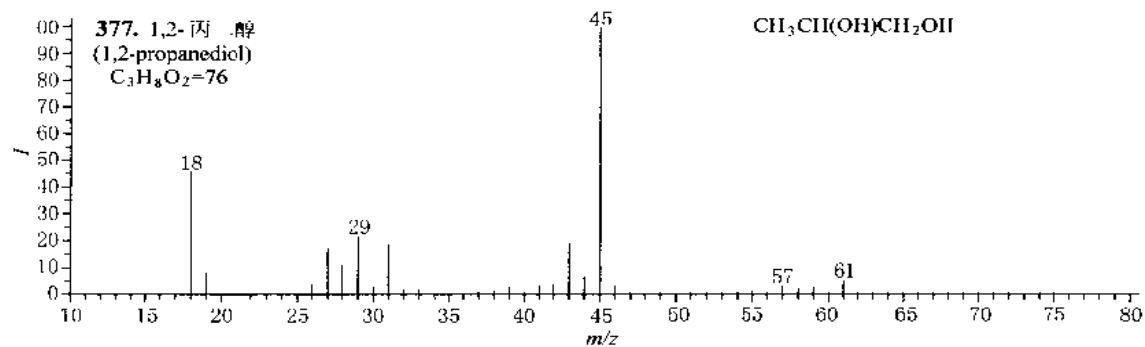
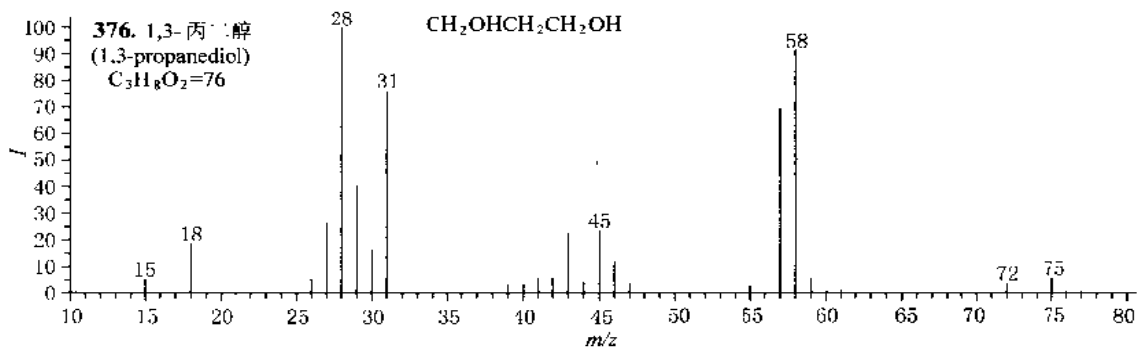
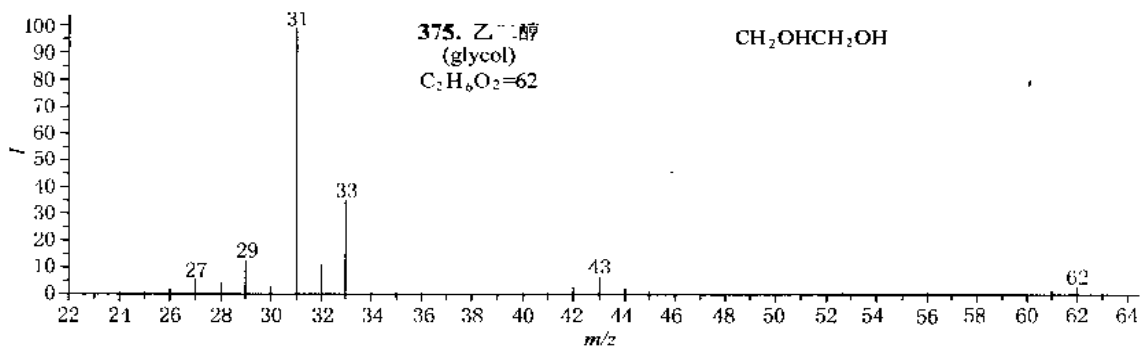
### 三、叔醇类

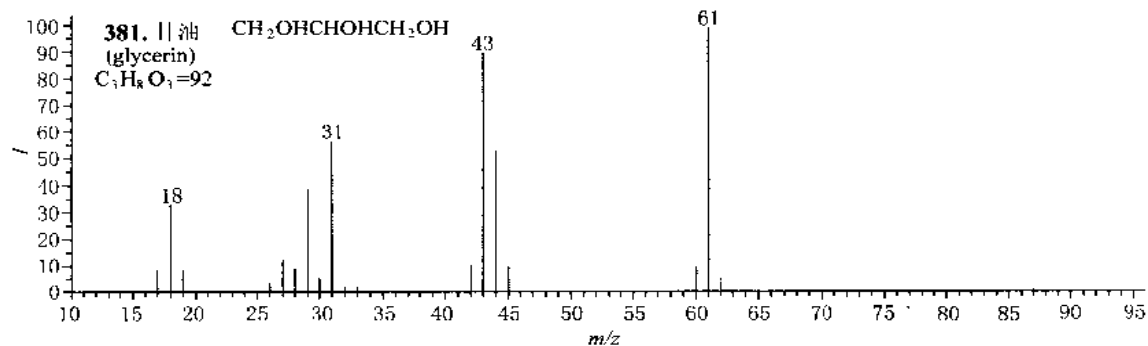
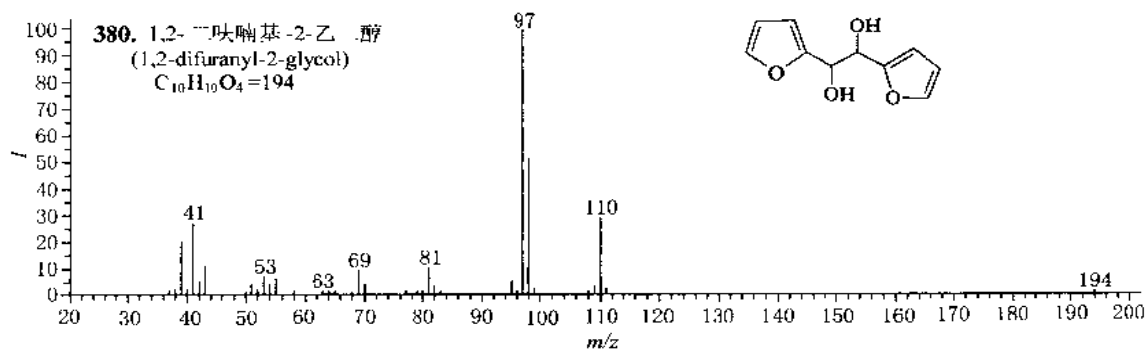
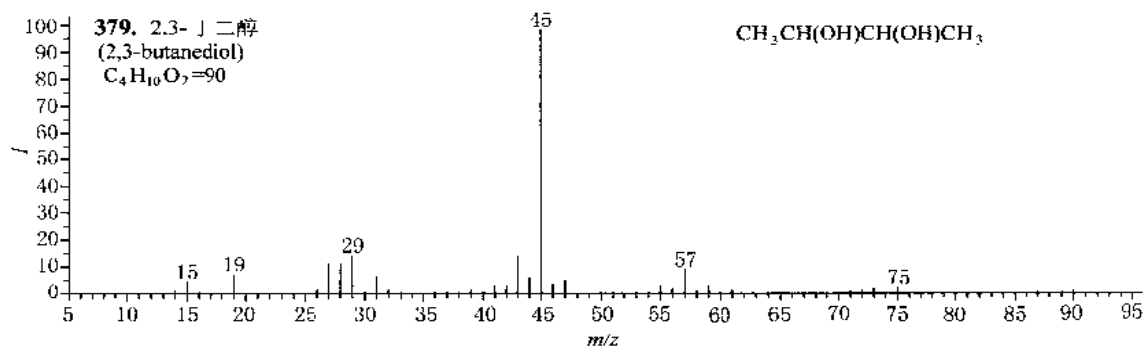
叔丁醇 (374) 的主要裂解是  $\alpha$ -裂解失去甲基, 裂解之强烈致使分子离子 ( $m/z$  74) 没有出现。



### 四、多元醇类

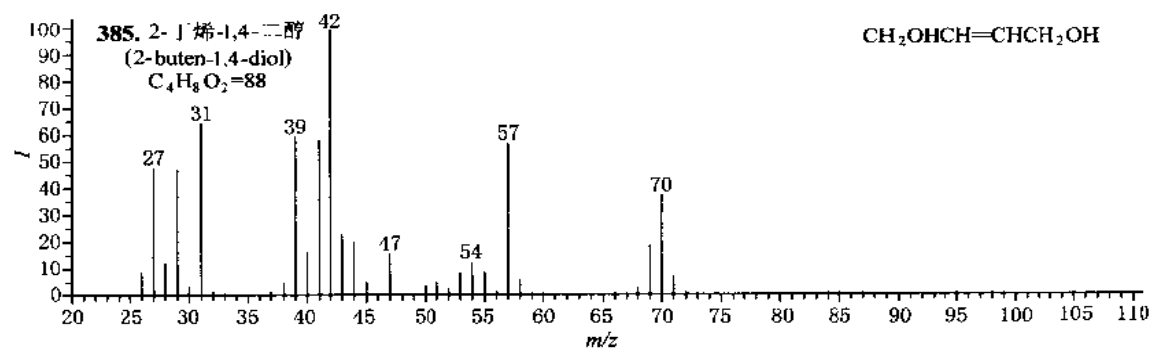
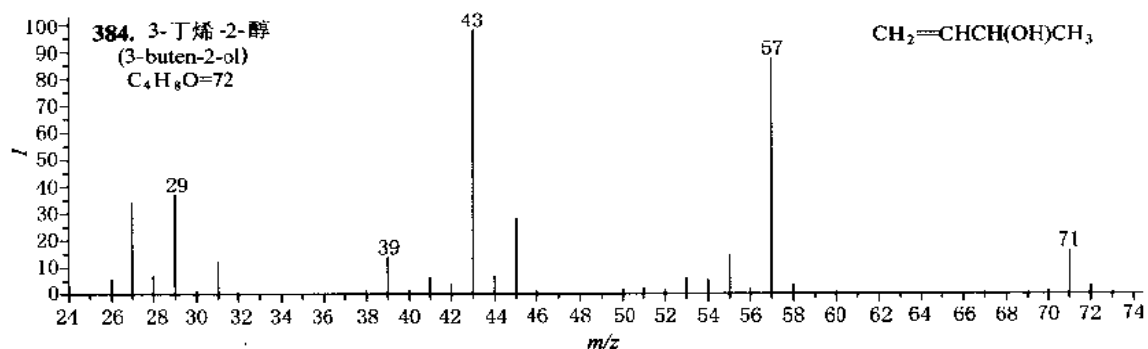
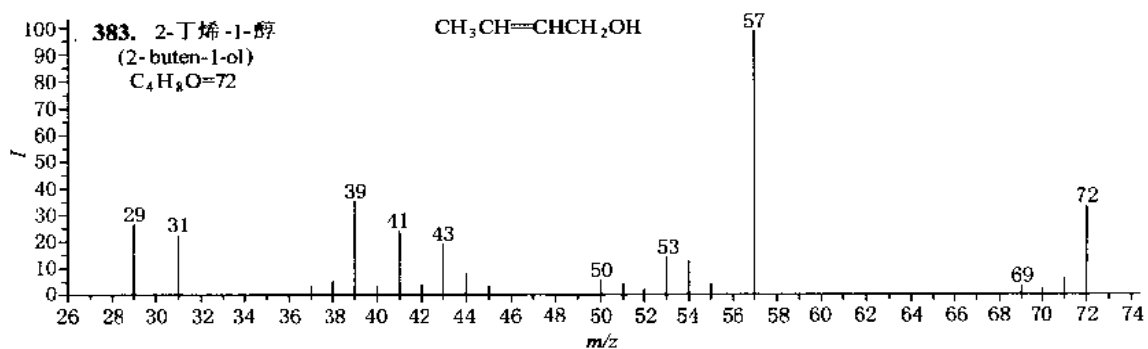
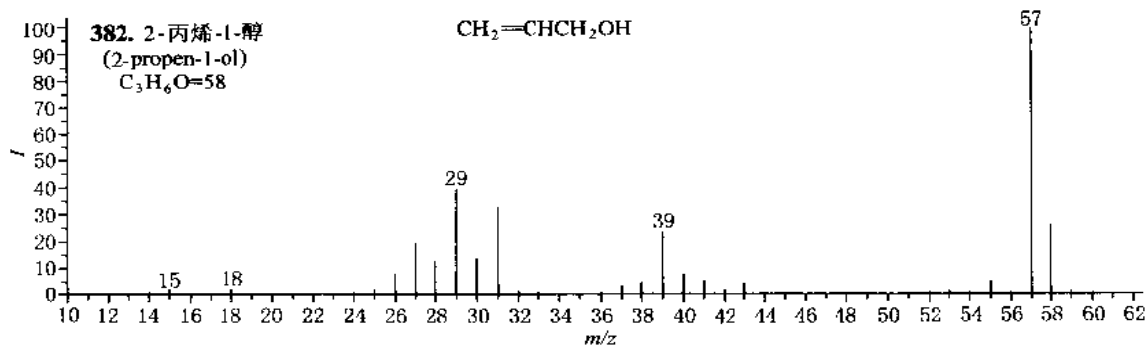
乙二醇 (375) 的主要裂解是双  $\alpha$ -裂解使分子离子一分为二, 得基峰  $m/z$  31。1,3-丙二醇 (376) 的主要裂解是失水并再失 1 个氢,  $\alpha$ -裂解生成离子  $m/z$  31 和 45。1,2-丙二醇 (377) 也是  $\alpha$ -裂解生成这 2 个离子, 但裂解更强烈。1,4-丁二醇 (378) 与 1,3-丙二醇 (376) 相似, 也是先失水再失氢, 失水离子能进行麦氏重排失去甲醛得基峰  $m/z$  42,  $\alpha$ -裂解产生的离子  $m/z$  31 也存在。2,3-丁二醇 (379) 的裂解类似于乙二醇 (375) 的, 也是  $\alpha$ -裂解把分子离子一分为二, 得基峰  $m/z$  45。二呋喃基乙二醇 (380) 也进行同样的裂解, 得基峰  $m/z$  97, 而进行双键的麦氏重排并转移羟基上的氢原子到呋喃环上, 则得离子  $m/z$  98, 离子  $m/z$  110 是失去 1 个呋喃环和 1 个羟基的离子。甘油 (丙三醇, 381) 的主要裂解是  $\alpha$ -裂解生成离子  $m/z$  61 和 31, 前者再失 1 个分子水得强峰  $m/z$  43。

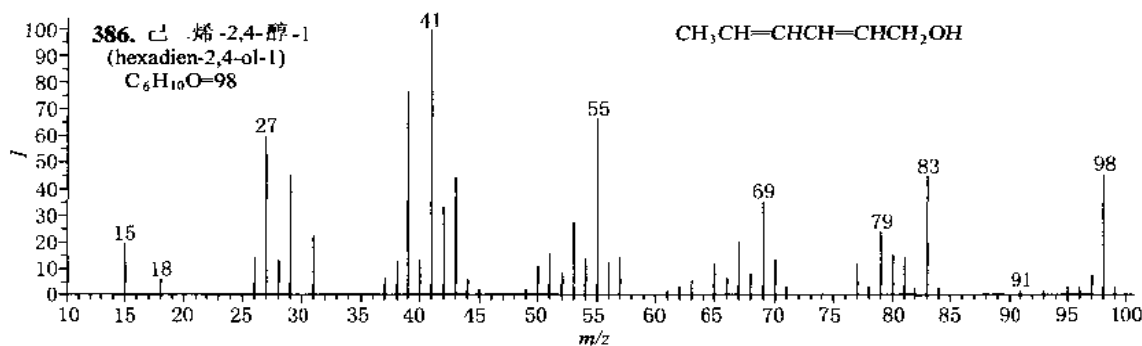




## 五、烯醇类

2-丙烯-1-醇(382)的最主要裂解是  $M-1$ ,  $\alpha$ -裂解不重要。2-丁烯-1-醇(383)的重要裂解是重排氢原子后失去甲基, 3-丁烯-1-醇(384)的  $M-1$  离子也很强, 但重要的裂解是失甲基, 离子  $m/z$  43 可能是重排双键后失去乙基生成的乙酰基离子。2-丁烯-1,4-二醇(385)的重要裂解是  $\alpha$ -裂解生成互补离子  $m/z$  31 和 57, 次要的裂解是失水, 然后重排失去乙烯, 分别生成离子  $m/z$  70 和 42。2,4-己二烯-1-醇(386)的裂解是失甲基和再失乙烯,  $m/z$  41 是烯丙离子。





## 六、环醇类

(1) 环丁醇 (387) 的重要裂解是失去乙烯。

(2) 环戊醇 (388) 的重要裂解是重排失去乙基。1-甲基环戊醇 (389) 也是重排失去乙基, 但也能重排生成丙酮离子  $m/z$  58, 然后失去甲基得离子  $m/z$  43, 后者也有可能来自离子  $M-C_2H_5$  重排失去乙烯和分子离子重排产生的  $C_3H_7^+$  离子。2-甲基环戊醇 (390) 是失水、失乙基和失丙基。

(3) 1,3-环戊二醇 (391) 的主要裂解是失水并再失去乙基, 得离子  $m/z$  84 和 55, 也能失去乙烯醇、乙醇基和乙醇, 分别得离子  $m/z$  58, 57 和 56。

(4) 环戊烯-3-二醇-1,2 (392) 的主要裂解是失水及生成乙烯醇离子。环戊烯-2-二醇-1,4 (393) 也是失水, 并能生成乙酰基离子。

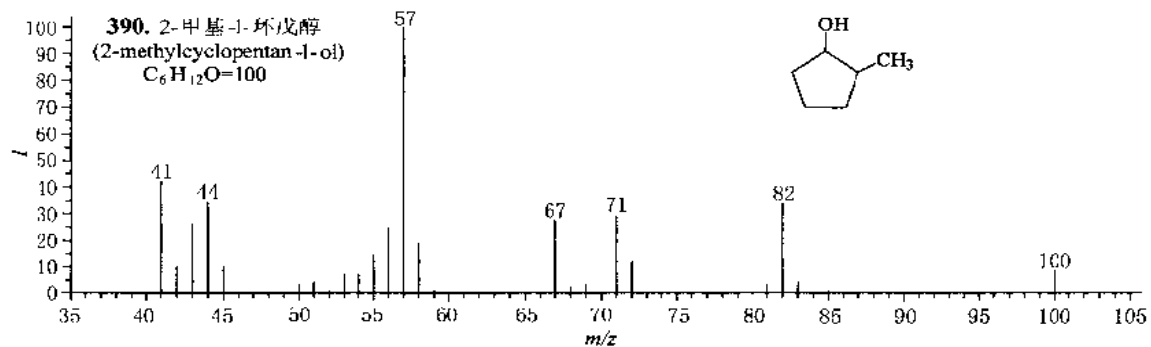
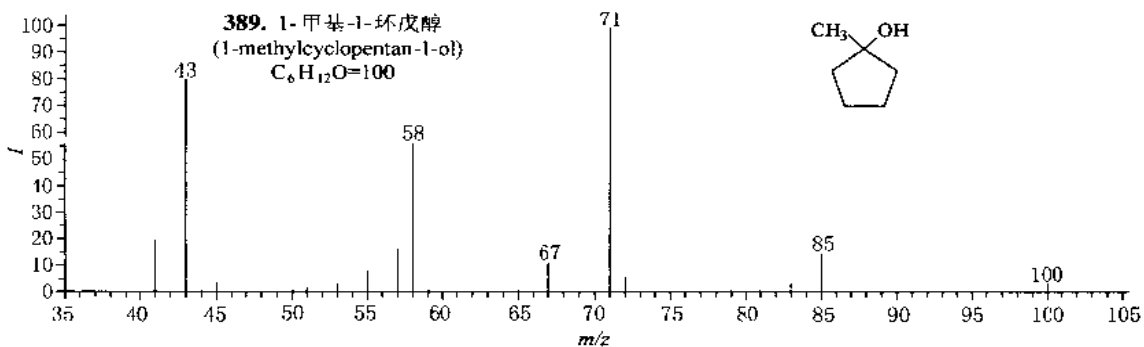
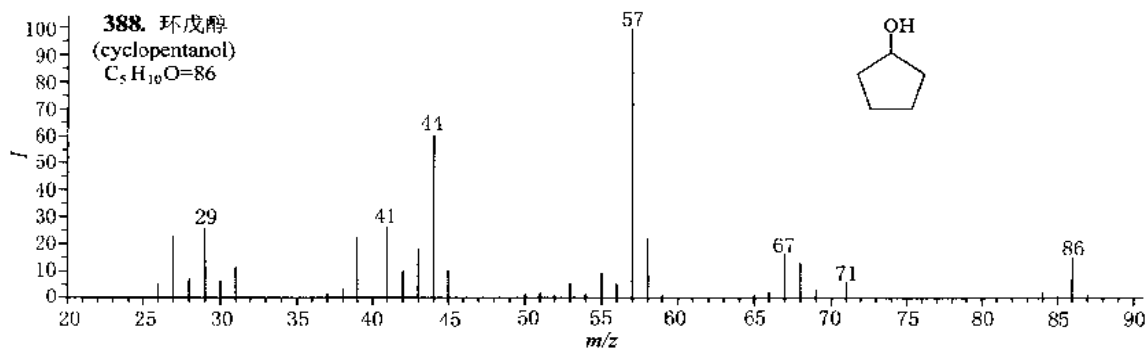
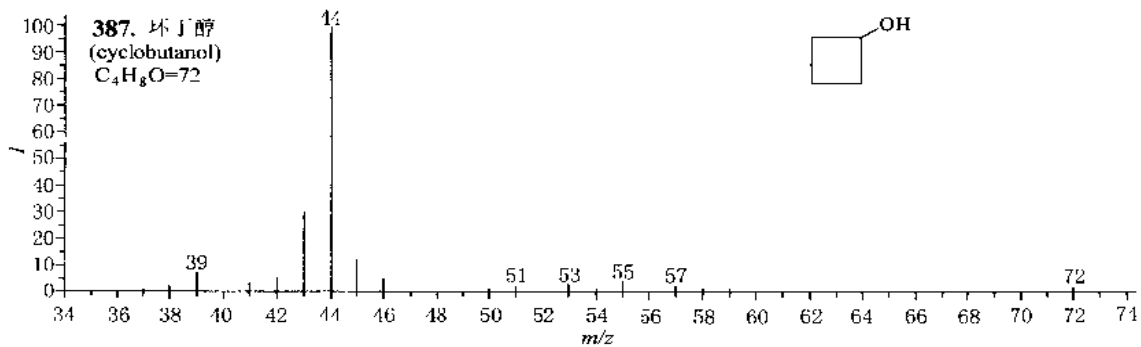
(5) 环己醇 (394) 主要是失水和重排失去  $C_3H_7$ 。2-甲基环己醇 (395) 也是失水, 但重排失去的是  $C_4H_9$ , 3-甲基环己醇 (396) 的裂解与环己醇 (394) 相同, 4-甲基环己醇 (397) 的裂解与 2-甲基环己醇 (395) 的相似。2,6-二甲基环己醇 (398) 和 3,5-二甲基环己醇 (399) 都是重排失去  $C_4H_9$ 。

(6) 1,2-环己二醇 (400) 的主要裂解是重排失去乙醇和重排失去丙醇基, 1,3-环己二醇 (401) 的裂解是失水, 再进行 RDA 裂解失去乙烯, 得离子  $m/z$  98, 80 和 70, RDA 裂解的另一产物是乙烯醇离子  $m/z$  44。离子  $m/z$  54 可能是离子  $m/z$  98 失去乙烯醇的产物  $CH_2=CH-CH=CH_2^{+}$ 。1,4-环己醇 (402) 也是失水, 而分子离子的对半裂解可得离子  $m/z$  58。

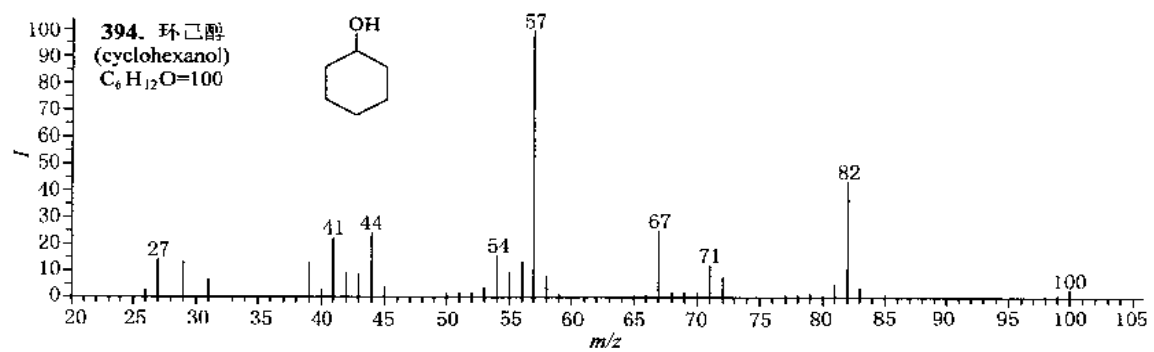
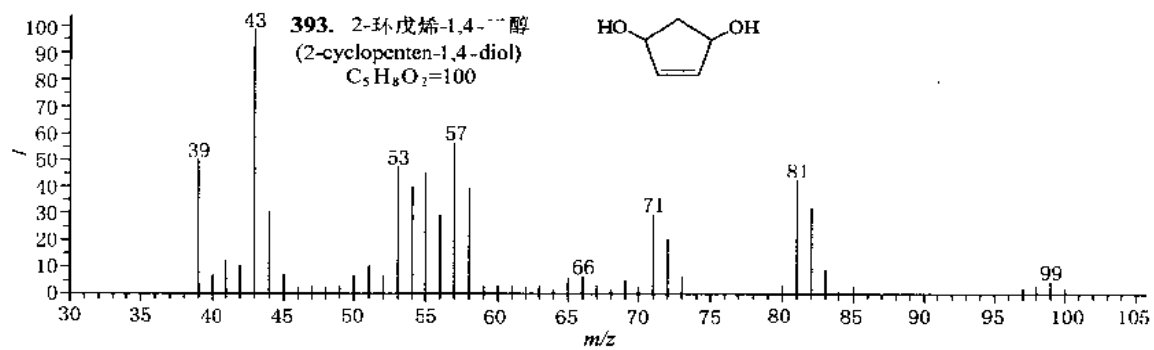
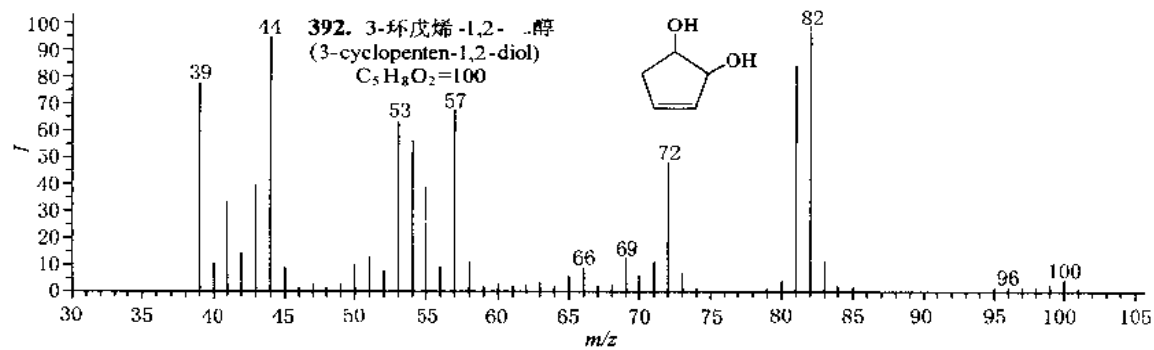
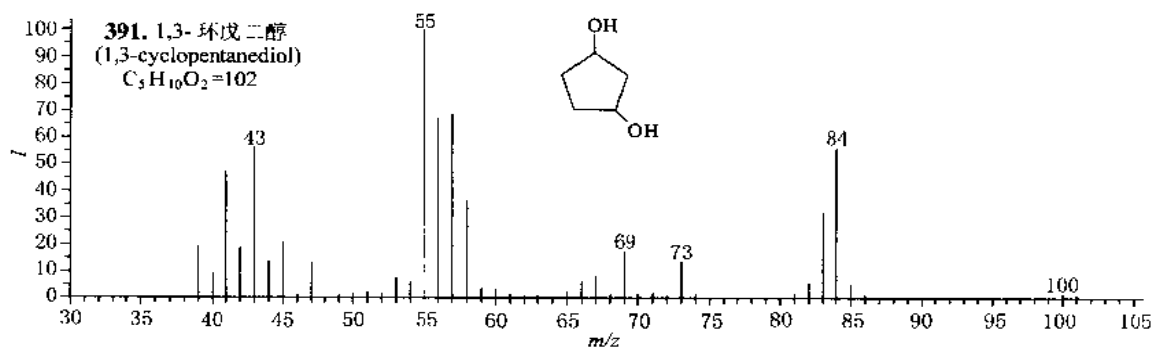
(7) 3个环己三醇类 (403~405) 都有失水离子  $m/z$  114, 也有再失去乙烯醇的离子  $m/z$  70。但 1,2,4-环己三醇的乙烯醇离子较强, 1,3,5-环己三醇的重排失去  $C_3H_7O$  产生的离子  $m/z$  73 是基峰, 因而易于相互区别。

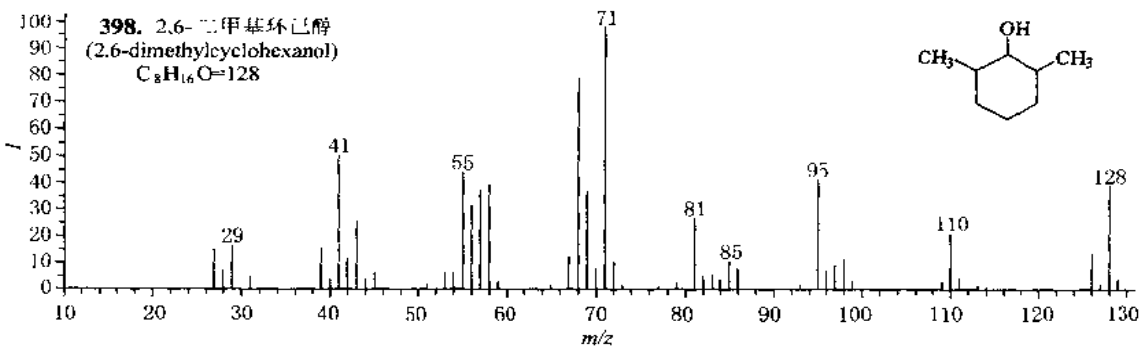
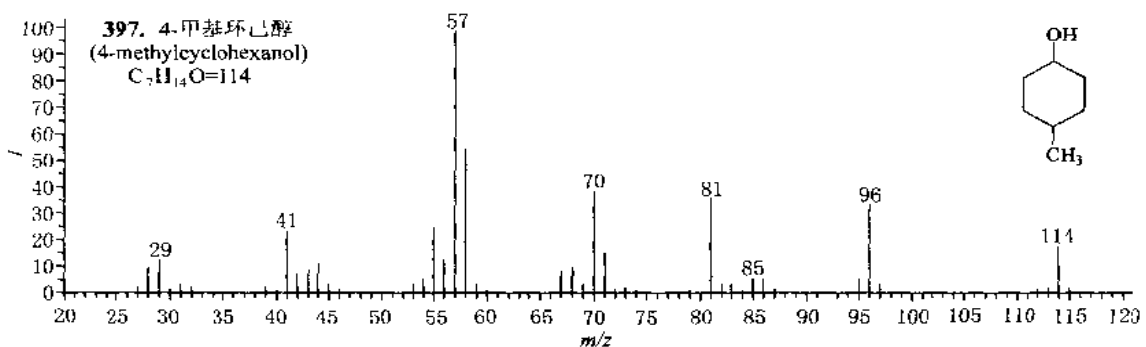
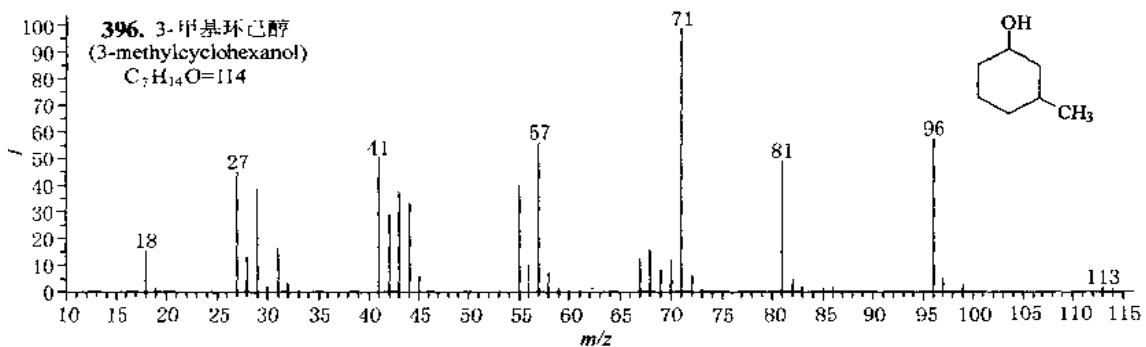
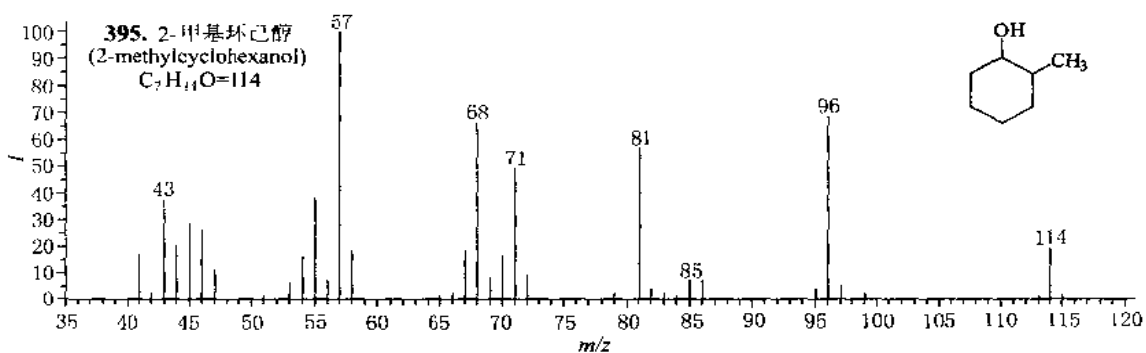
(8) 1,2,3,4-环己四醇 (406) 的裂解是连续失去两分子水得离子  $m/z$  130 和 112, 离子  $m/z$  130 进行 RDA 裂解失去乙烯醇得基峰  $m/z$  86, 离子  $m/z$  73 可能是分子离子重排失去  $C_3H_7O_2$  的产物。1,2,4,5-环己四醇 (407) 也有离子  $m/z$  130, 86 和 73, 但离子  $m/z$  57 是基峰, 可能来自离子  $m/z$  130 失去  $C_3H_7O_2$ 。

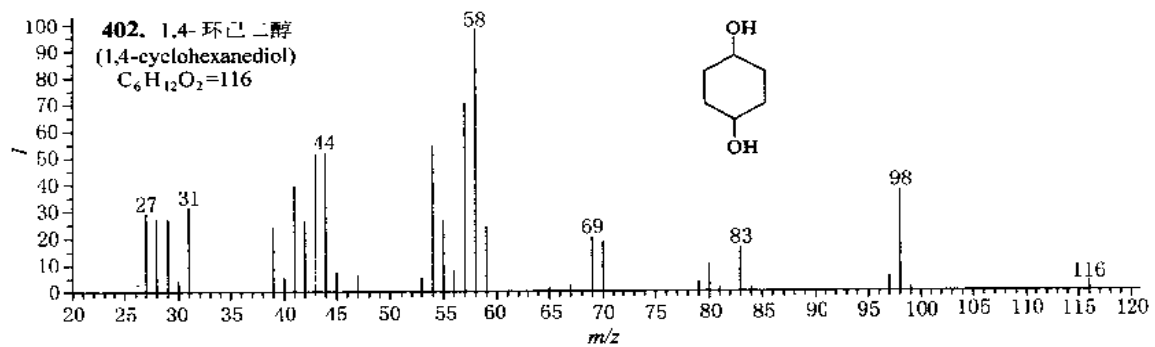
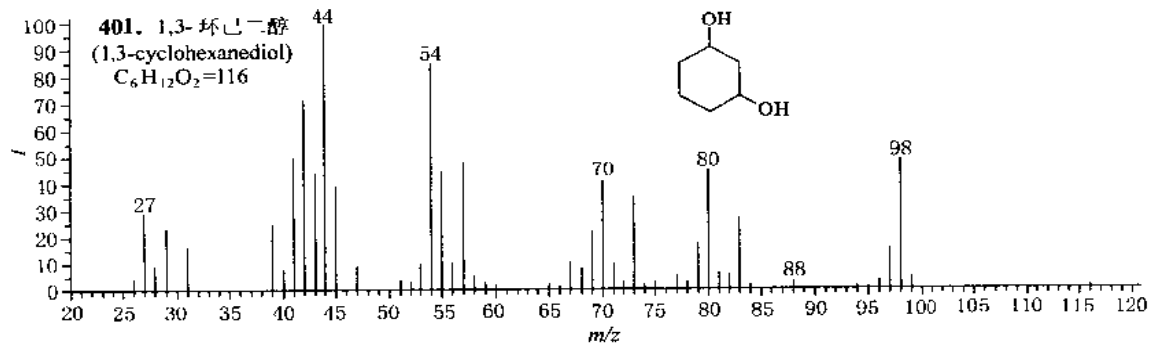
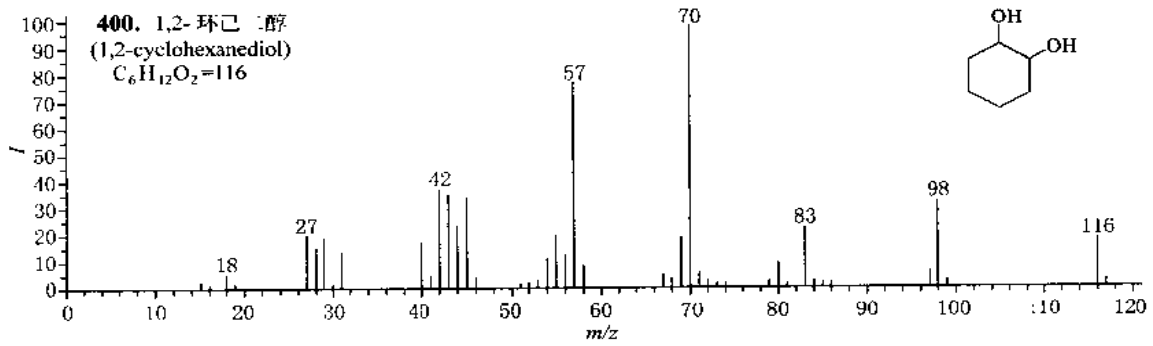
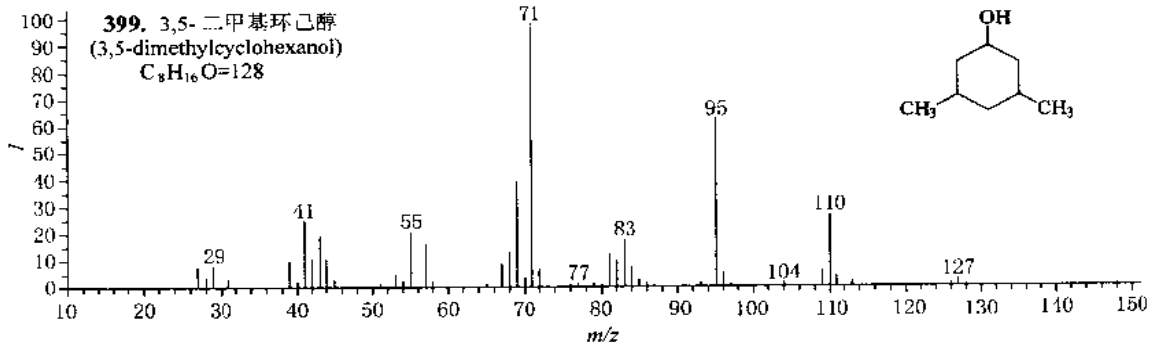
(9) 肌醇 (408) 的基峰是  $m/z$  73, 为分子离子失去 1 个分子水、得到的离子  $m/z$  162 再进行对半裂解生成的  $C_3H_5O_2^+$  离子。离子  $m/z$  144 是分子离子失去 2 个分子水的产物, 而失去 1 个分子水得到的离子  $m/z$  162 再进行 RDA 裂解, 则得互补离子  $m/z$  102 ( $C_4H_6O_3$ ) 和 60 ( $C_2H_4O_2$ )。1-甲基肌醇 (409) 的基峰  $m/z$  73 和次强峰  $m/z$  87 来源同肌醇。

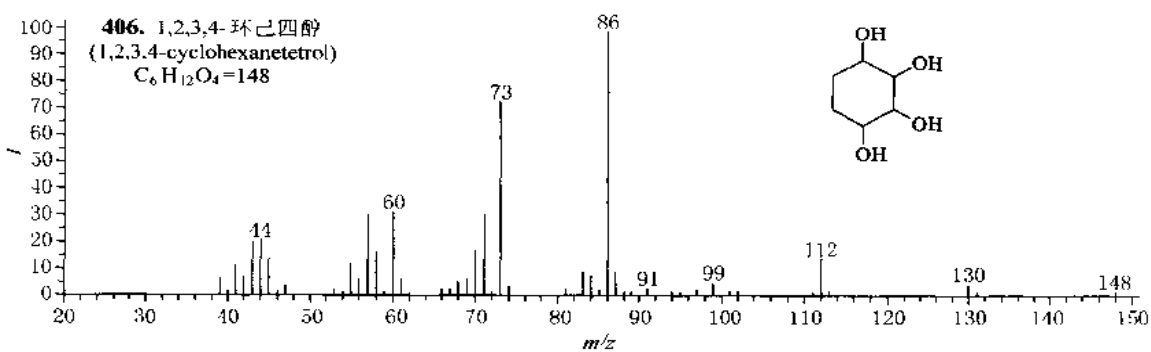
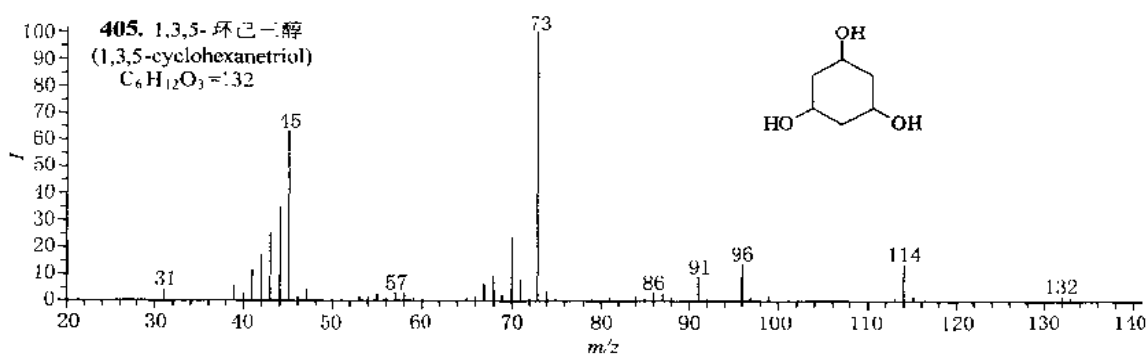
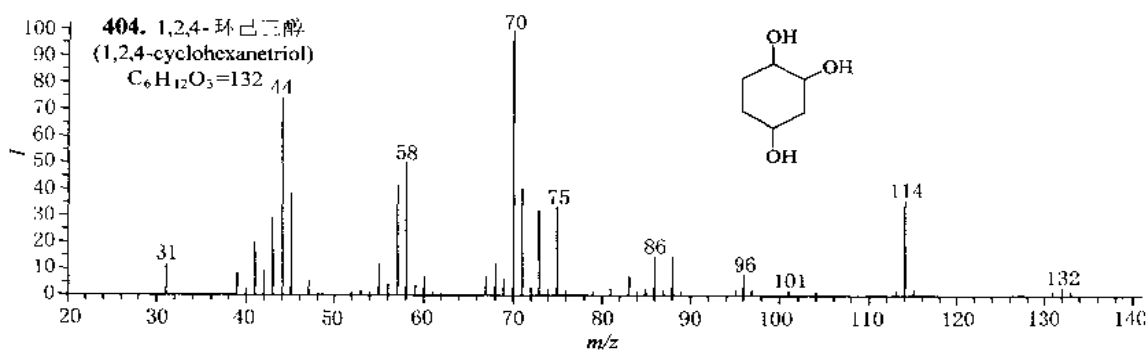
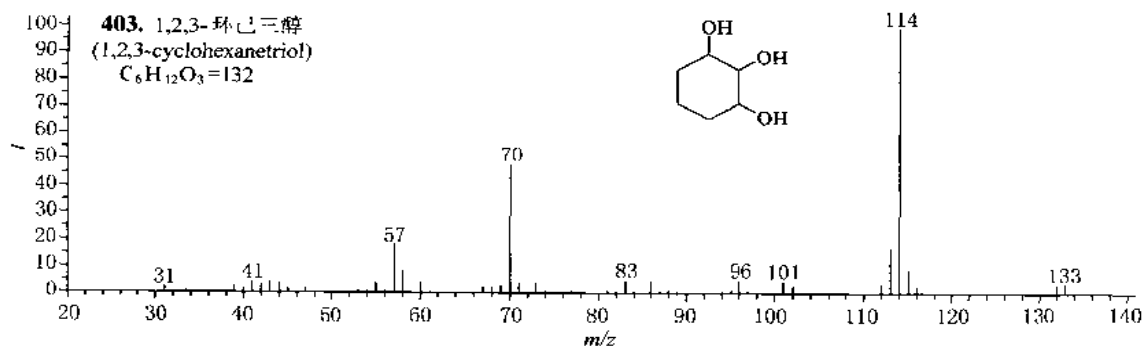


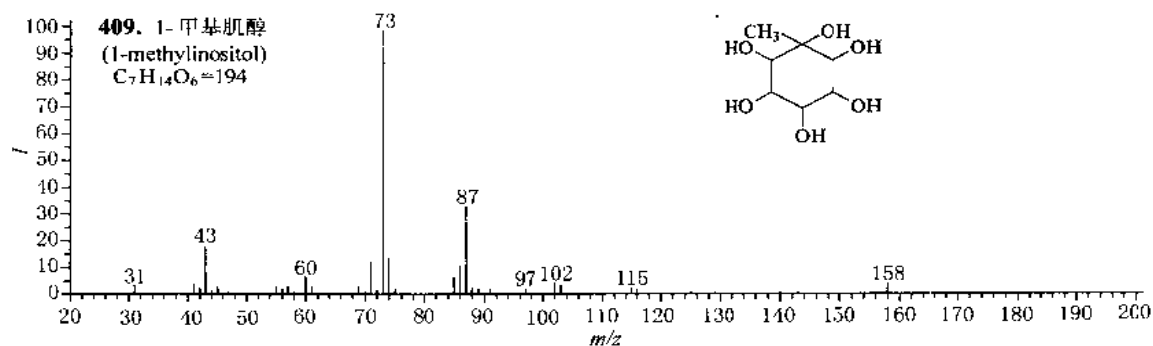
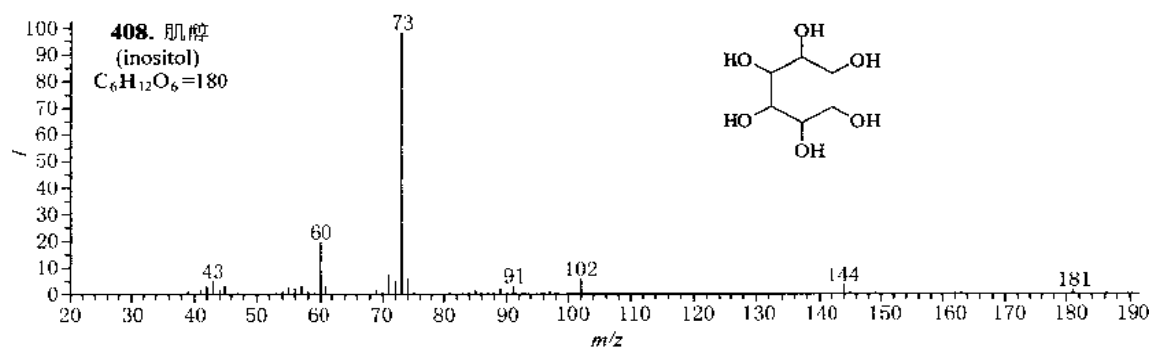
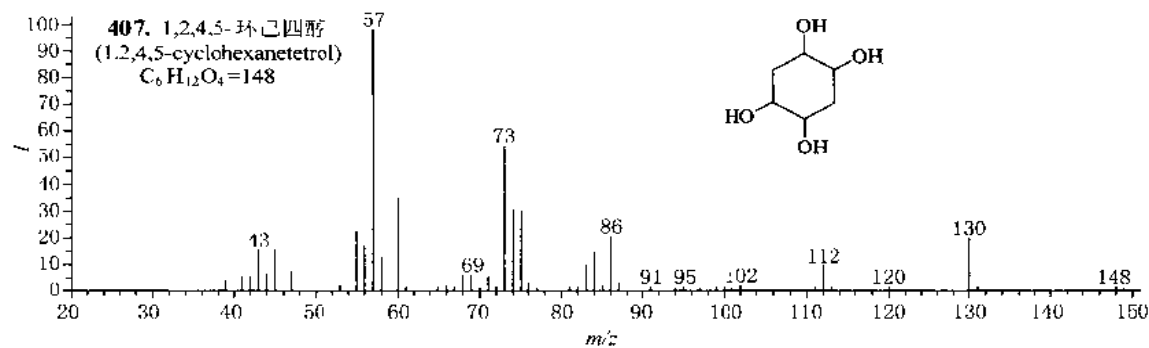












## 七、苯醇类

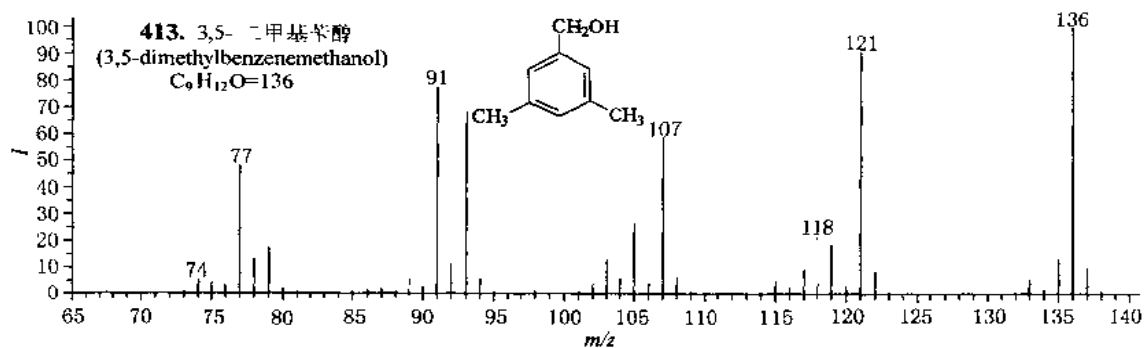
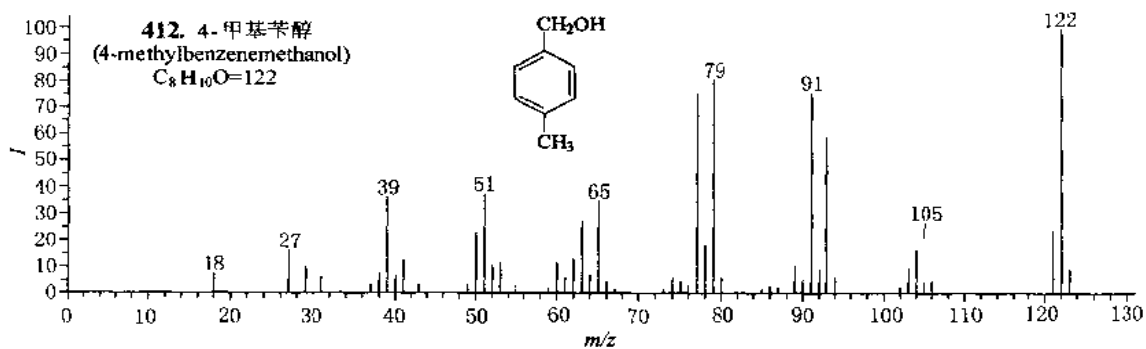
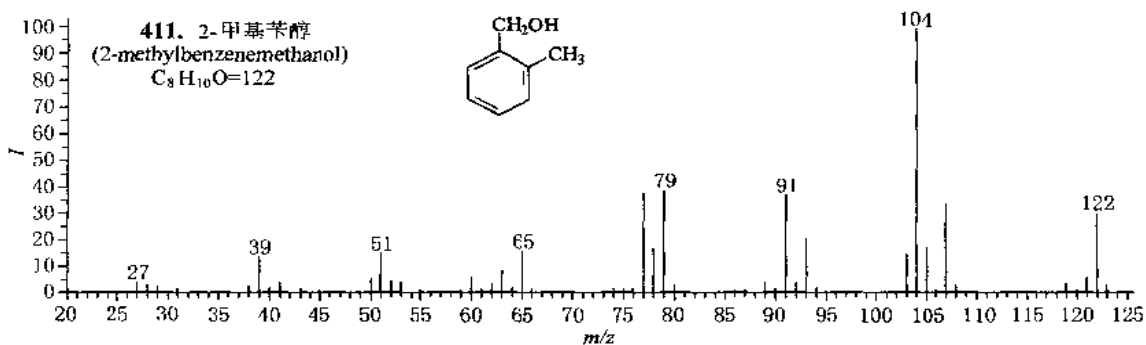
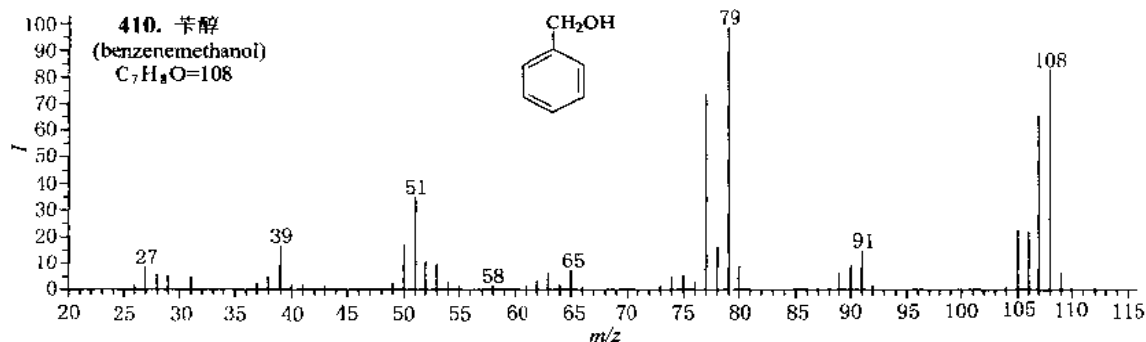
(1) 苯醇 (410) 的主要裂解是失氢、再失一氧化碳和再失 2 个氢, 分别得离子  $m/z$  107、79 和 77。

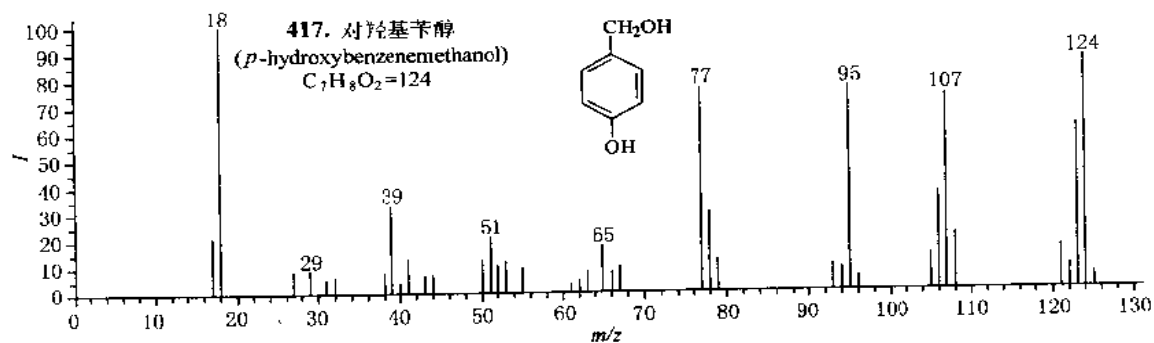
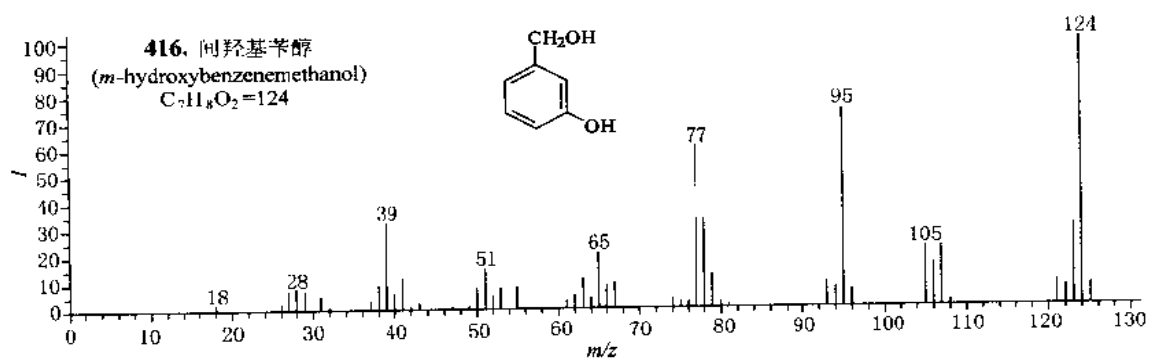
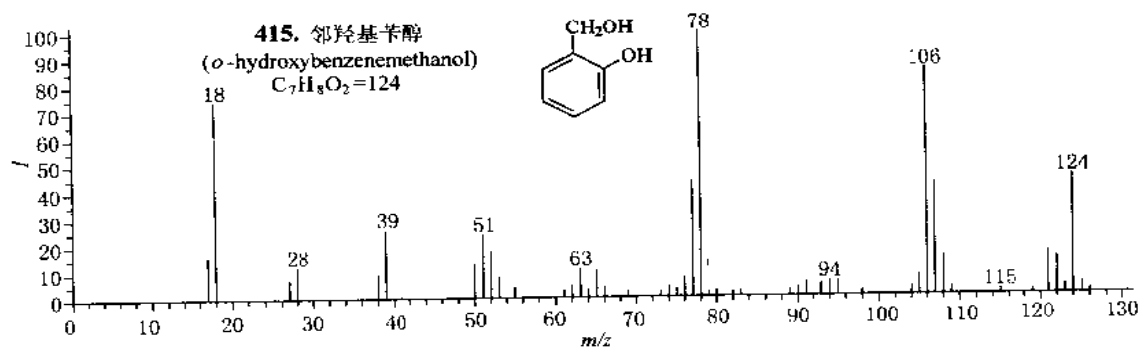
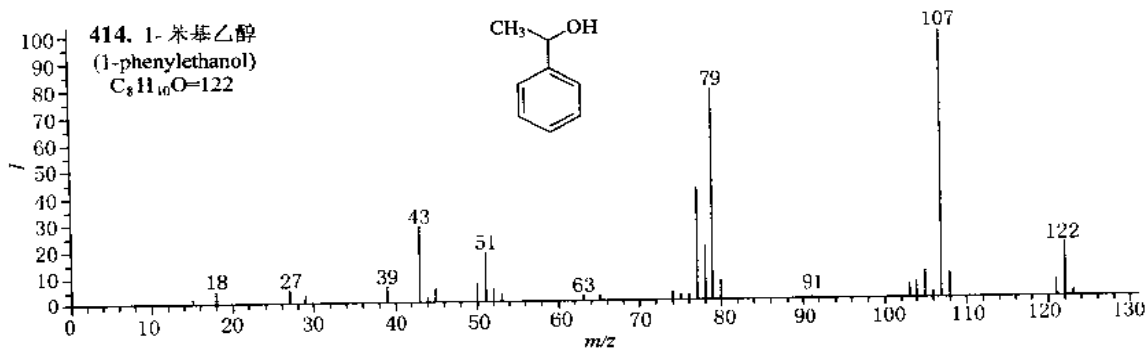
(2) 邻甲基苯醇 (411) 主要是失水, 次要裂解是失甲基、再失一氧化碳和再失 2 个氢, 也有失氢再失一氧化碳和 2 个氢的裂解。对甲基苯醇 (412) 的失水离子很小, 其他裂解类似于邻甲基苯醇的, 但其失羟基的离子较强, 2 个甲基苯醇容易区别。3,5-二甲基苯醇 (413) 的裂解也是  $M-H-CO$  和  $M-H-CO-2H$  以及  $M-CH_3-CO$  和  $M-CH_3-CO-2H$ , 1-苯基乙醇 (414) 只有  $M-CH_3-CO$  和  $M-CH_3-CO-2H$ 。

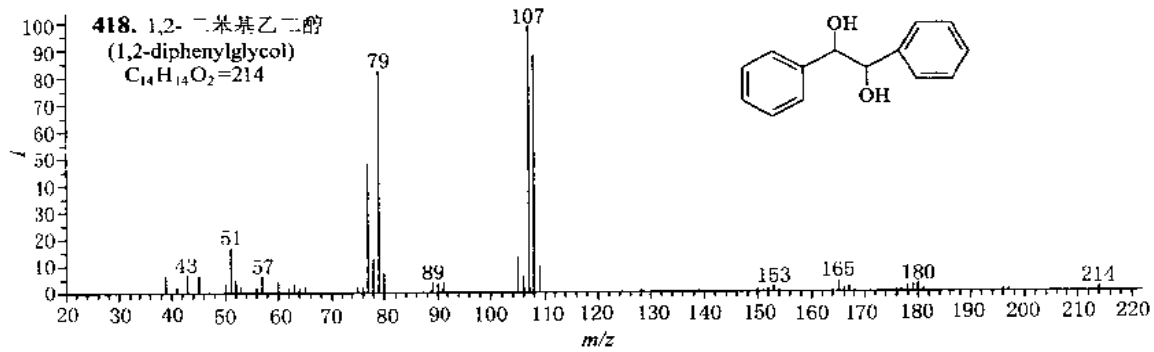
(3) 邻羟基苯醇 (415) 主要是失水、再失一氧化碳和 1 个氢, 失羟基较强。间羟基苯醇 (416) 的主要裂解是  $M-H$ ,  $M-H-CO$  和  $M-H-CO-H_2O$ , 对羟基苯醇 (417) 既有邻羟

基苄醇的裂解方式，也有间羟基苄醇的裂解方式。

(4) 1,2-二苯基乙二醇(418)的主要裂解是苄基裂解把分子离子一分为二，得离子  $m/z$  107，再失一氧化碳和2个氢、情况同苄醇的。但麦氏重排裂解也很强，转移羟基的氢原子到苯环双键上，得次强离子  $m/z$  108。



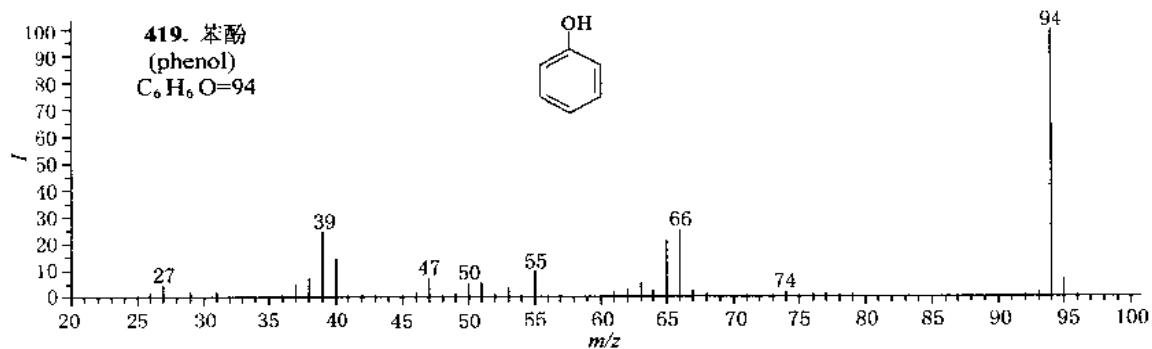




## 第二节 酚 类

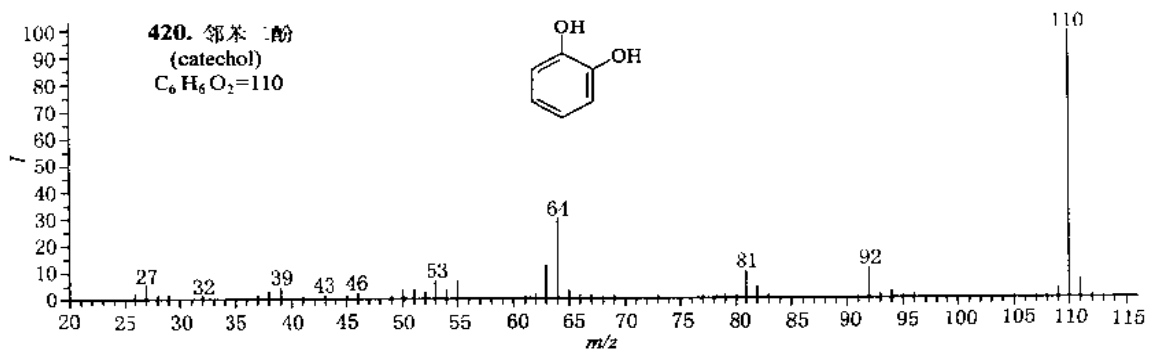
### 一、一元酚

苯酚 (419) 的分子离子 ( $m/z$  94) 是基峰, 主要裂解是失去一氧化碳和再失 1 个氢, 分别得离子  $m/z$  66 和 65, 二者各再失乙炔, 又得离子  $m/z$  40 和 39, 双电荷离子  $m/z$  47 也明显可见。

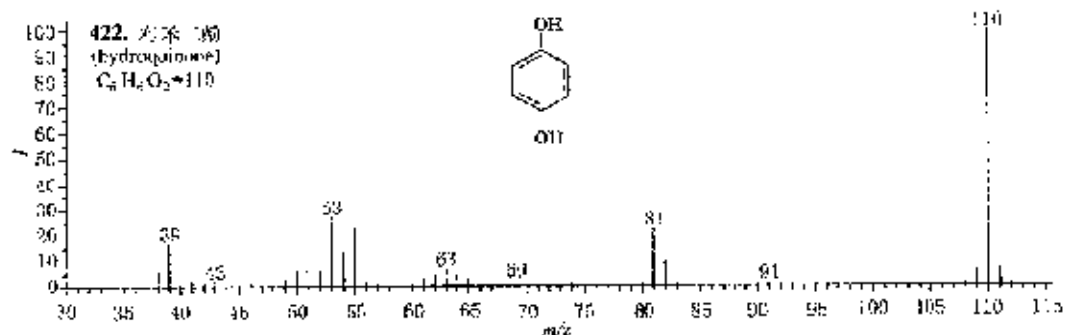
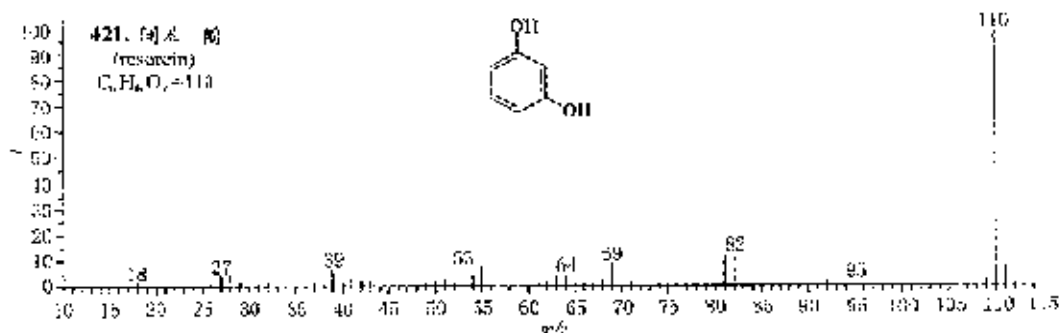


### 二、二元酚

邻苯二酚 (420) 的主要裂解是失水和再失一氧化碳, 间苯二酚 (421) 和对苯二酚 (422) 的主要裂解是失一氧化碳和再失氢, 所得离子还能失去一氧化碳。

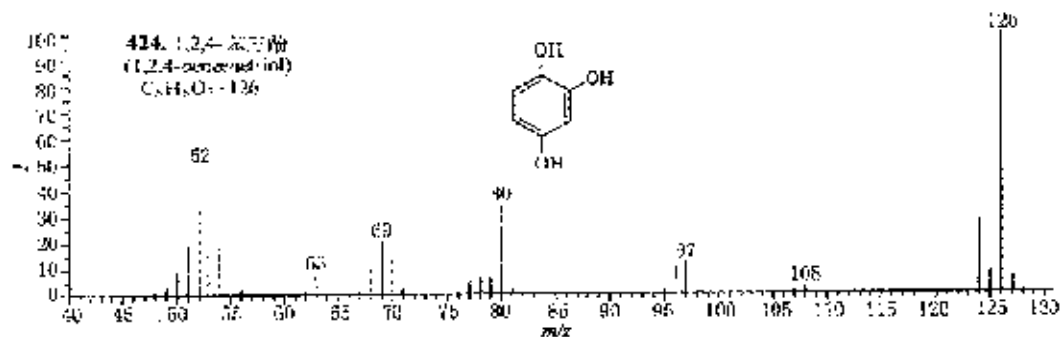
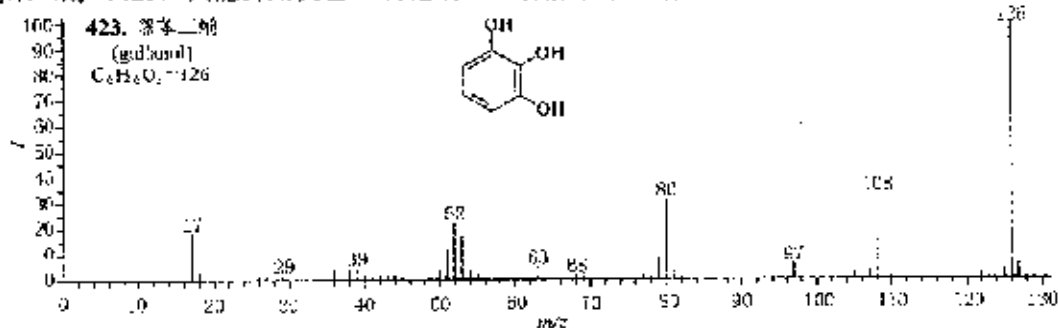


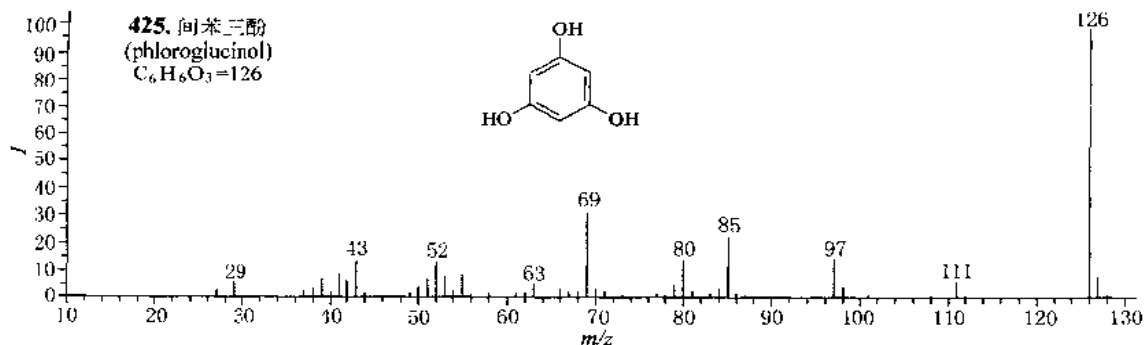




### 三、三元酚

邻苯三酚 (423) 首先是失水得离子  $m/z$  108, 然后是连续失去 2 个一氧化碳分子, 1, 2, 4 苯三酚 (424) 也能失水, 并再连续失去 2 个一氧化碳分子, 但有  $M-CO$  和  $M-CHO$  离子。间苯三酚 (425) 只能连续失去一氧化碳, 三者能够用质谱区别。





#### 四、烷基酚

(1) 邻甲基苯酚(426)的主要碎片离子来自苯基裂解由甲基失去氢,其次是失水和M-H<sub>2</sub>O以及再失2个氢。间甲基苯酚(427)和对甲基苯酚(428)的裂解类同邻甲基苯酚的,但M-H<sub>2</sub>O峰较弱,对甲基苯酚(428)的M-H离子是基峰,这是由于共振离子的形成。三者易用质谱区别。

(2) 各种二甲基、三甲基和四甲基苯酚类(429~439)的主要裂解都是失去甲基,然后是失去一氧化碳和再失2个氢,同分异构体不易用质谱区别。各化合物的M-H离子也有一定强度。

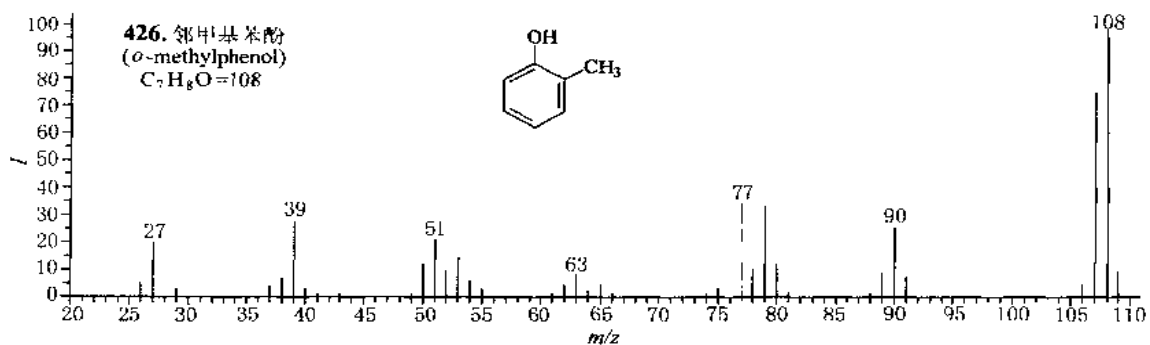
(3) 3个乙基苯酚(440~442)的裂解也很相似,主要裂解都是苯基裂解失去甲基,然后再失一氧化碳和2个氢。与甲基苯酚类的主要区别是M-H离子弱得多,依此可以用质谱与二甲基苯酚类相区别。

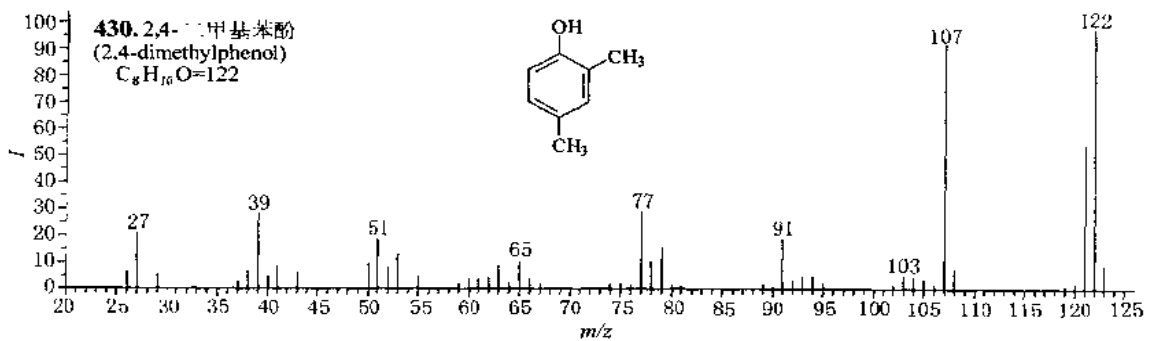
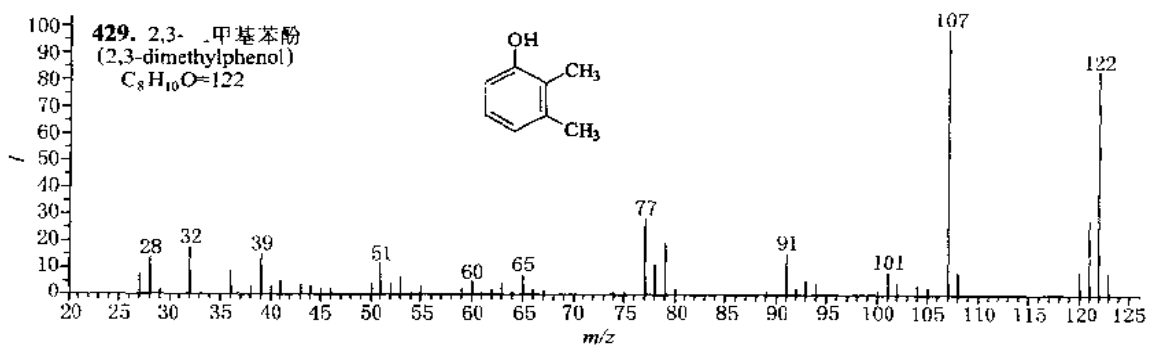
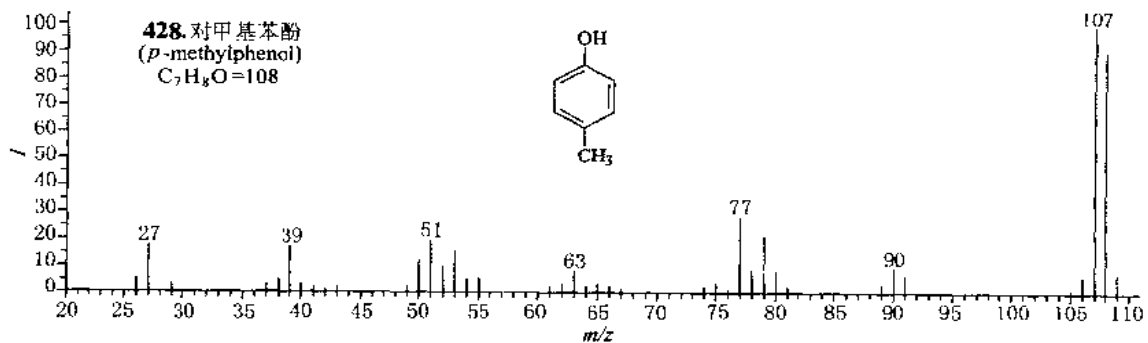
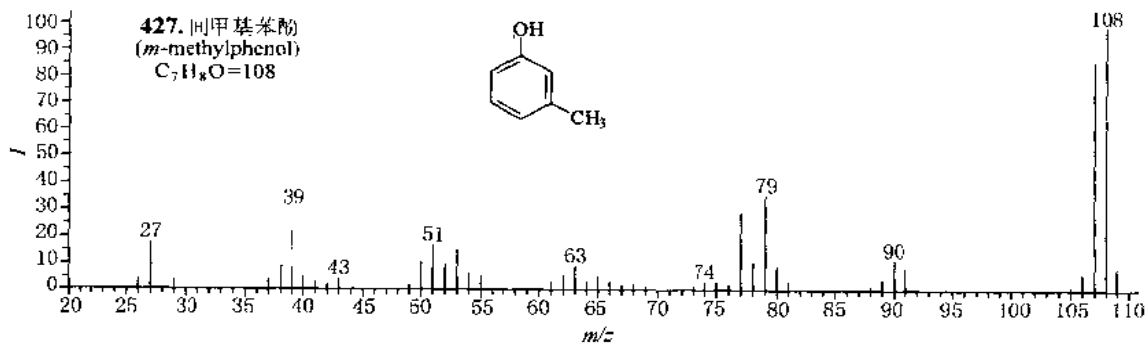
(4) 正丙基苯酚(443)的主要裂解是失去乙基,而异丙基苯酚(444)的主要裂解是失去甲基,后者的分子离子较弱,依此可与三甲基苯酚类相区别。

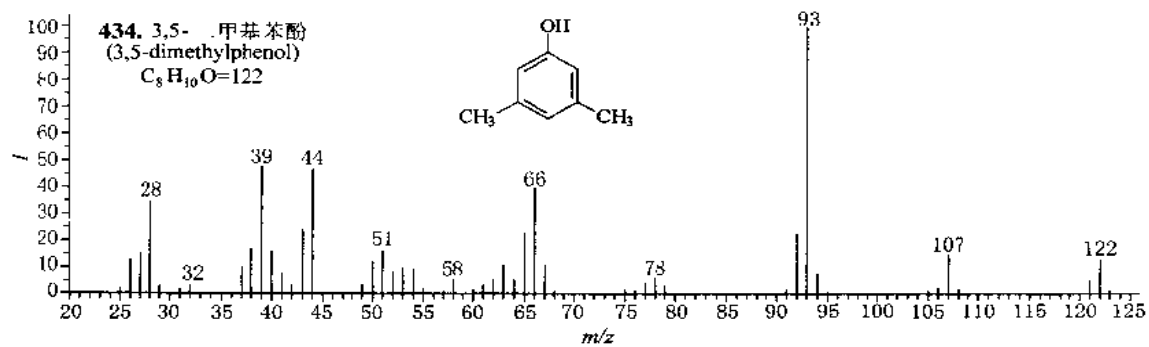
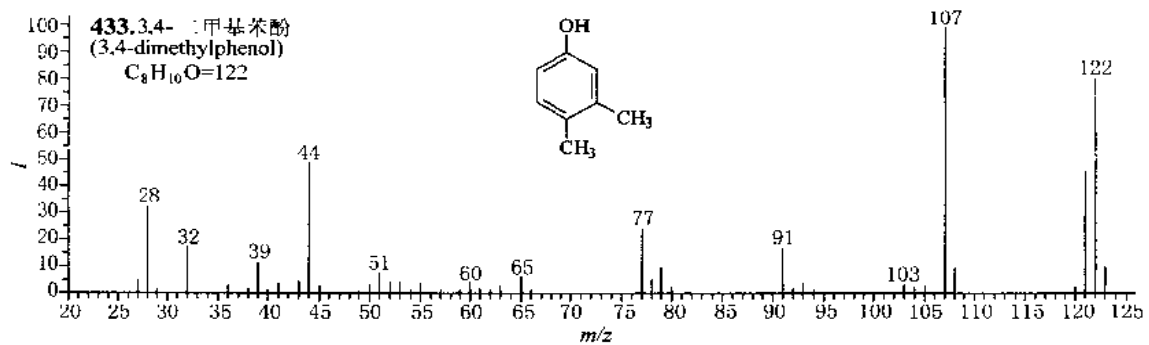
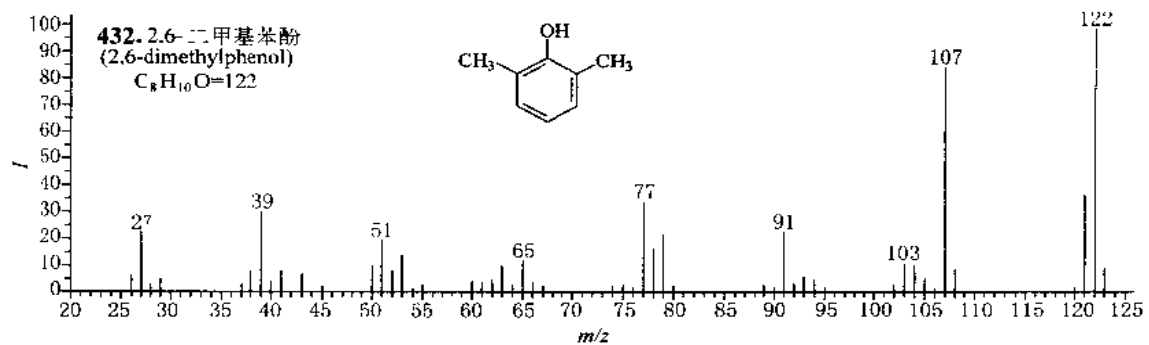
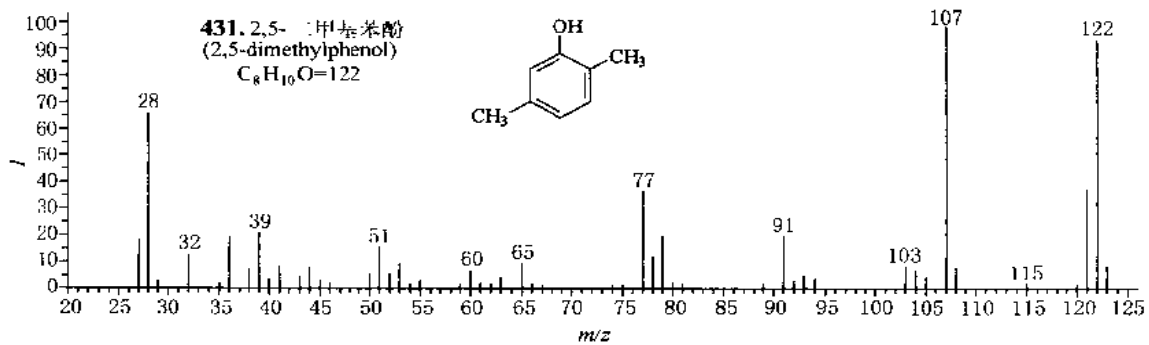
(5) 3-甲基儿茶酚(445)的主要裂解是失水和再失一氧化碳,4-甲基儿茶酚(446)亦如此,两者的M-H离子均较强。后者还有中强峰m/z 94,可能来自M-H离子再失一氧化碳和失氢。离子m/z 65是M-H-CO-H离子(m/z 94)失去一氧化碳。4-甲基儿茶酚的如此裂解有点特殊,原因尚不清楚。

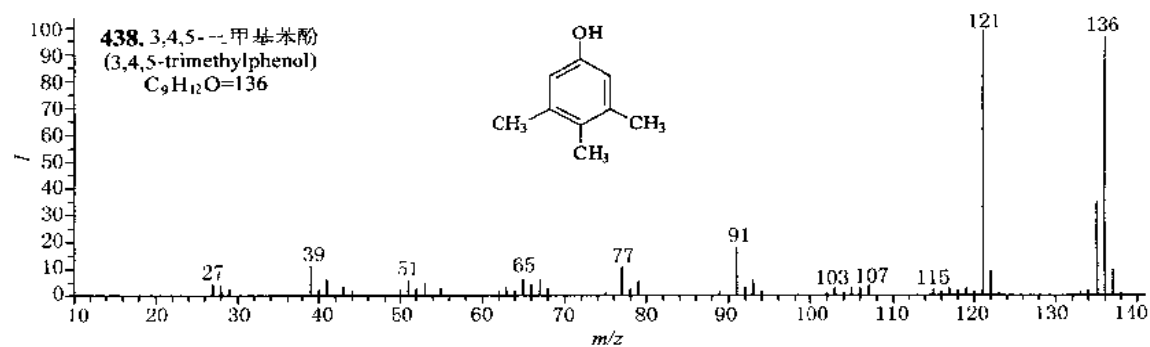
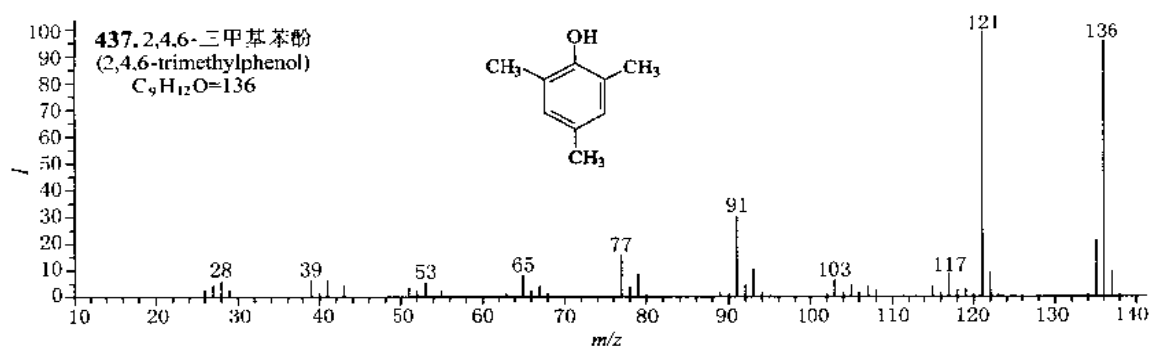
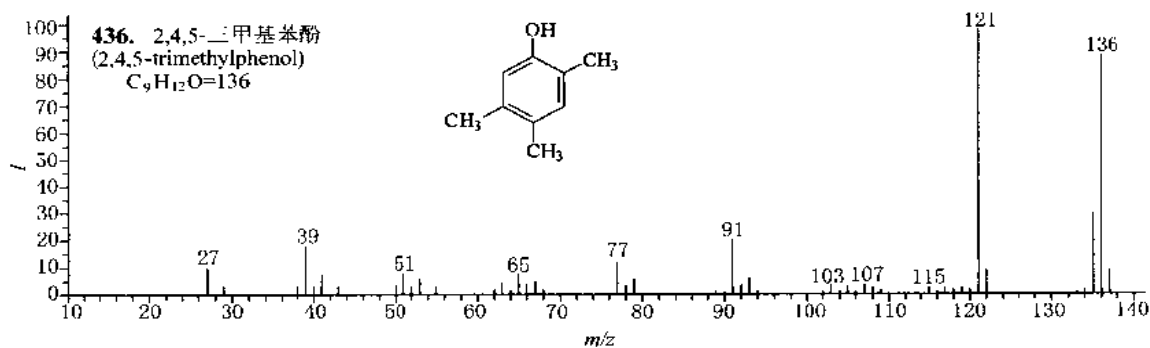
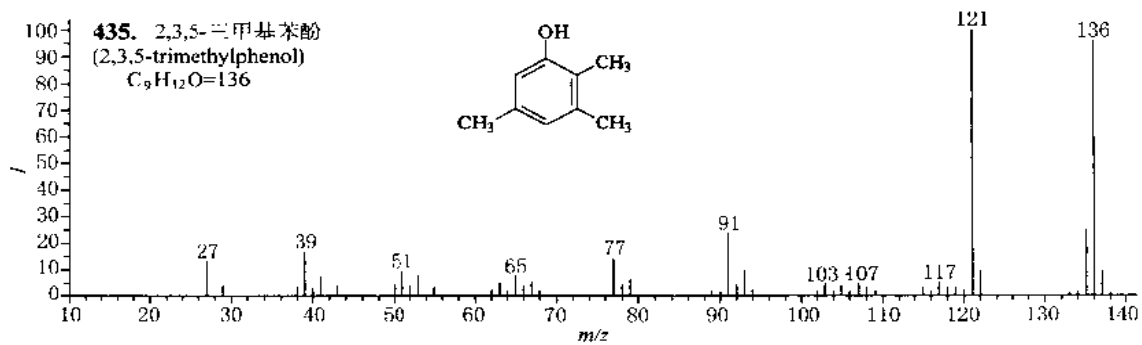
(6) 2个甲基间苯二酚(447, 448)用质谱易于区别,2-甲基间苯二酚的分子离子较弱,主要离子是m/z 78,它来自M-H<sub>2</sub>O离子m/z 106失去一氧化碳。5-甲基间苯二酚的分子离子是基峰,而M-H<sub>2</sub>O-CO离子很弱。另外,二者的M-H离子较强,这是甲基取代苯酚类的普遍特征。

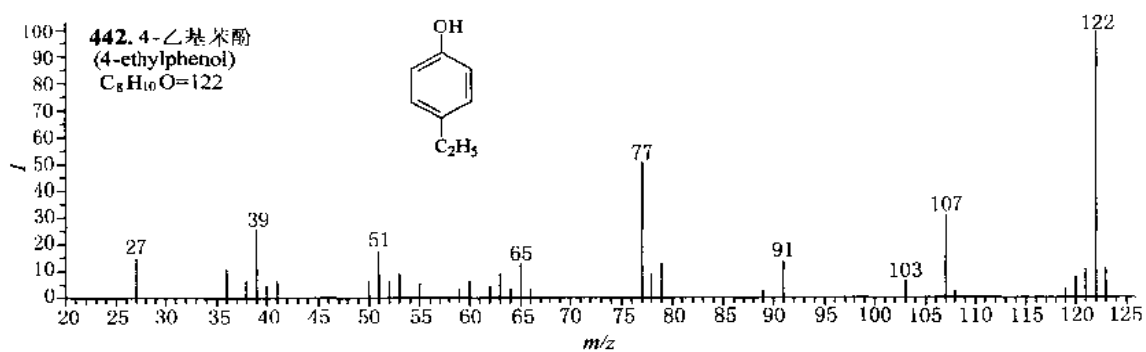
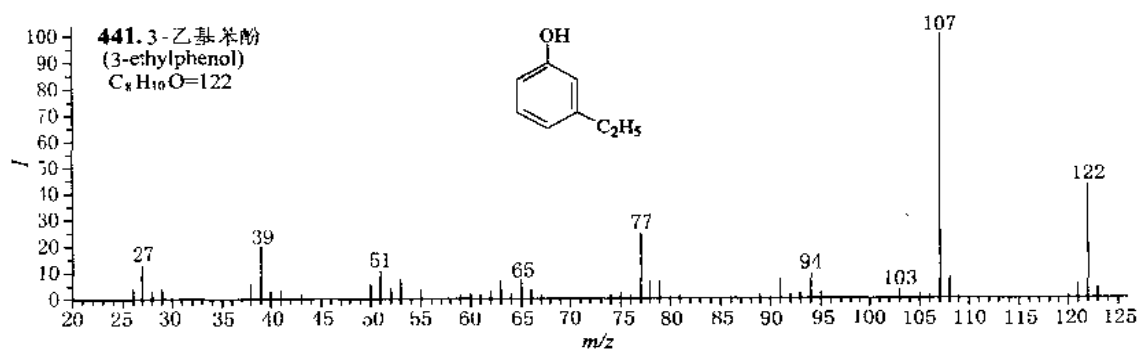
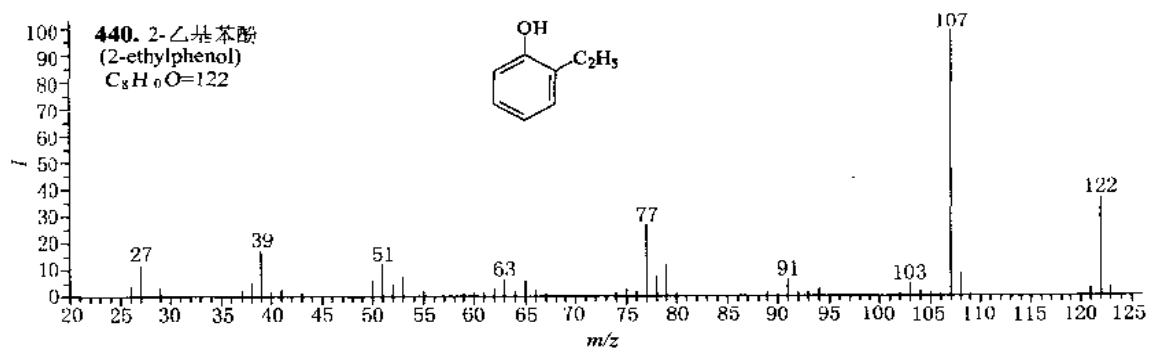
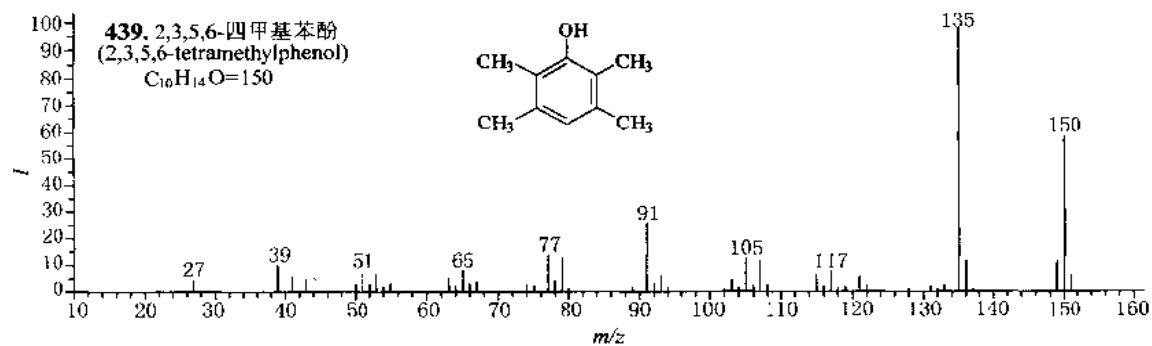
(7) 二甲基间苯二酚(450)的M-H和M-CH<sub>3</sub>离子都很强,这与二甲基苯酚类相似。

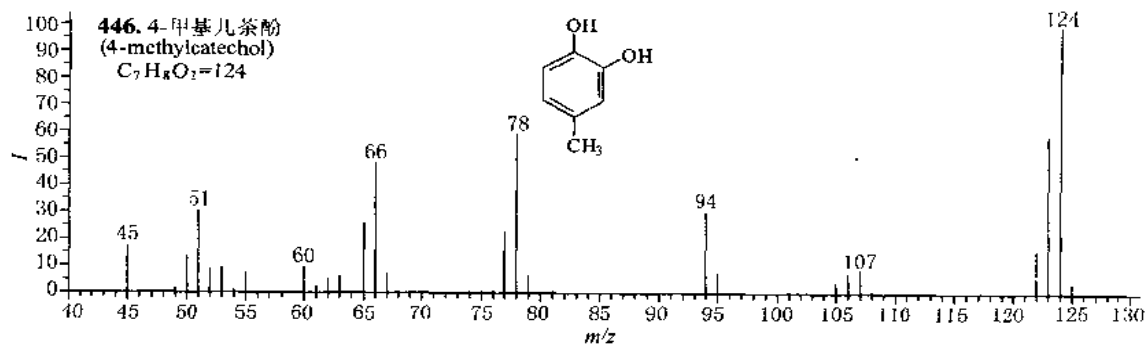
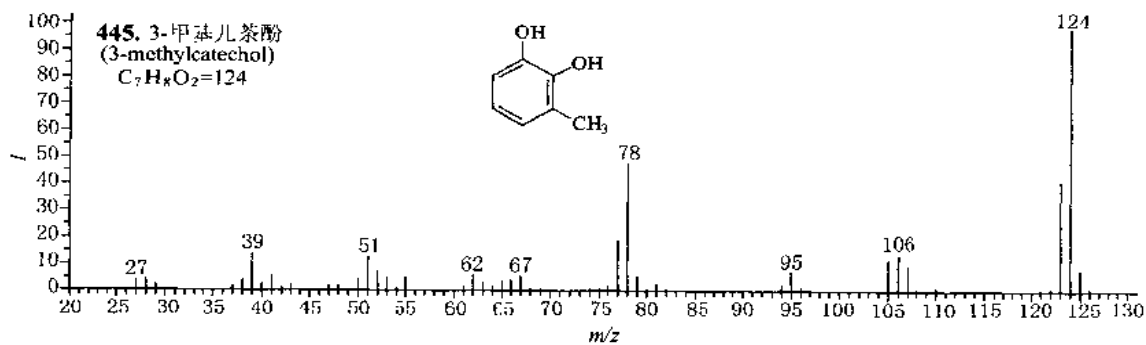
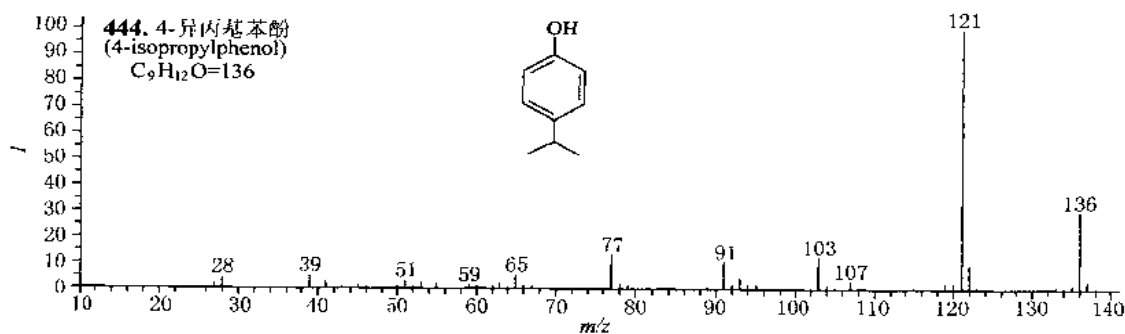
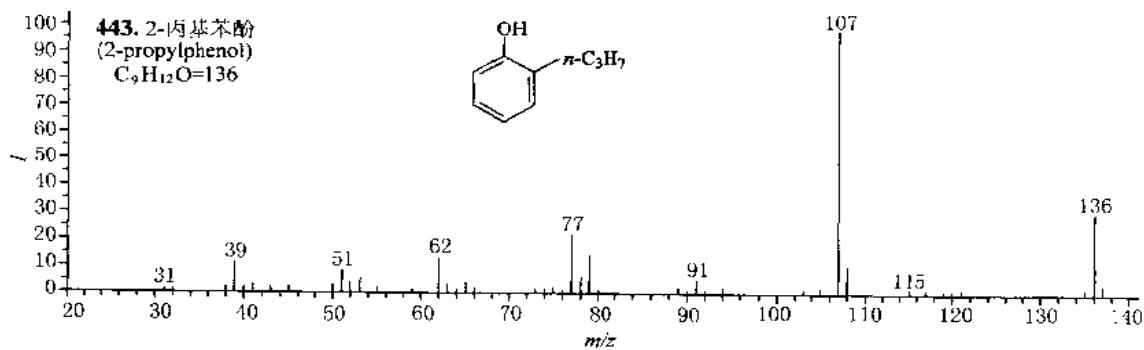


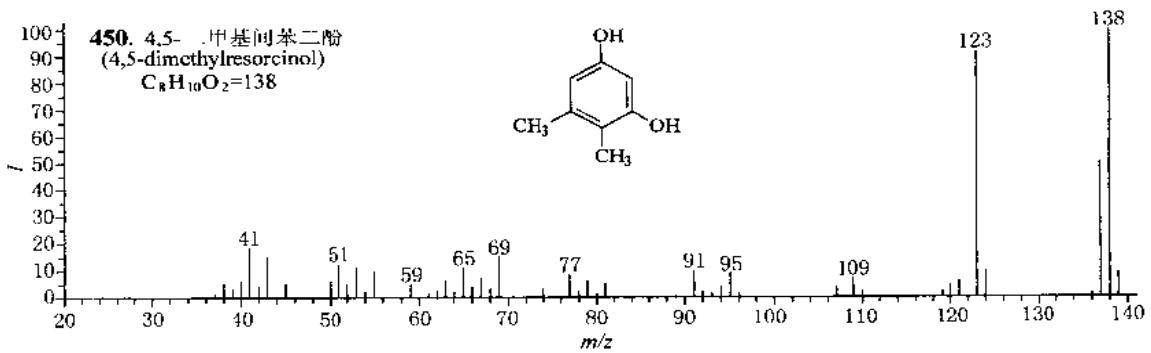
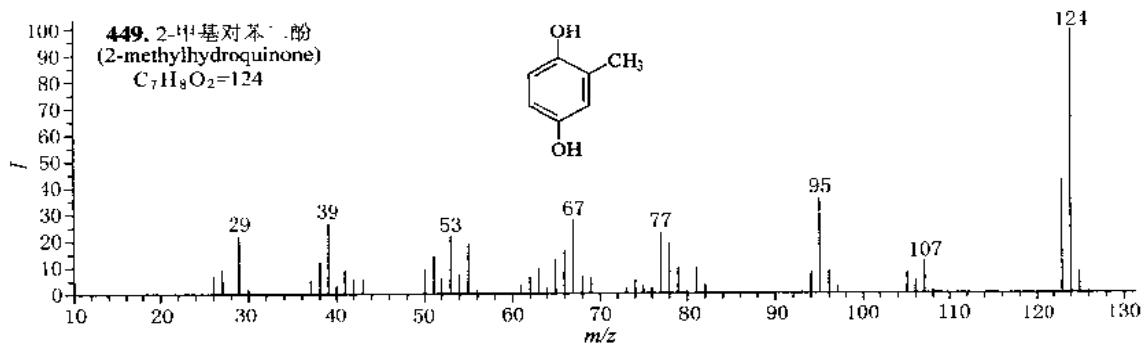
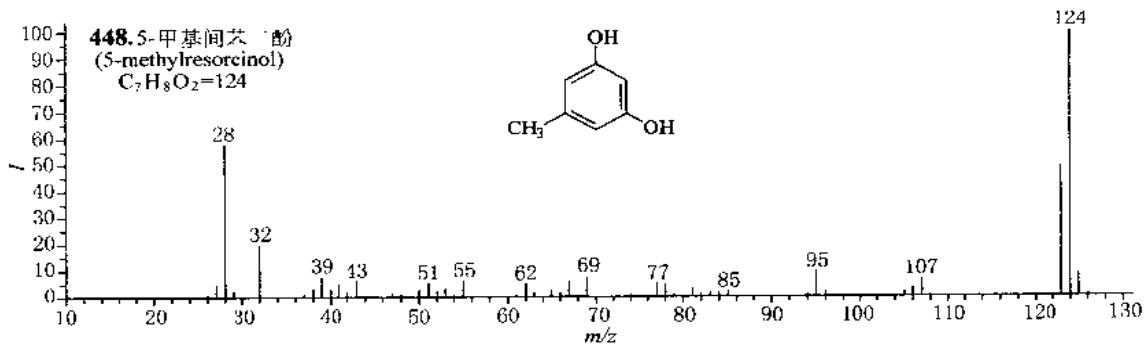
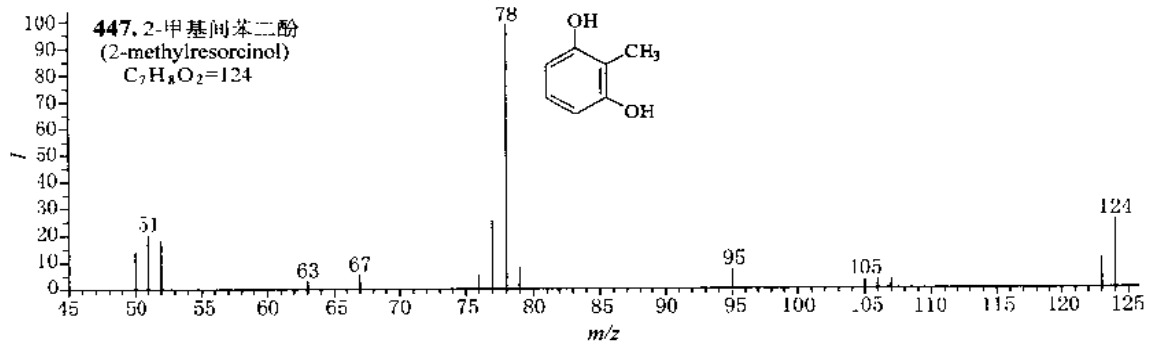










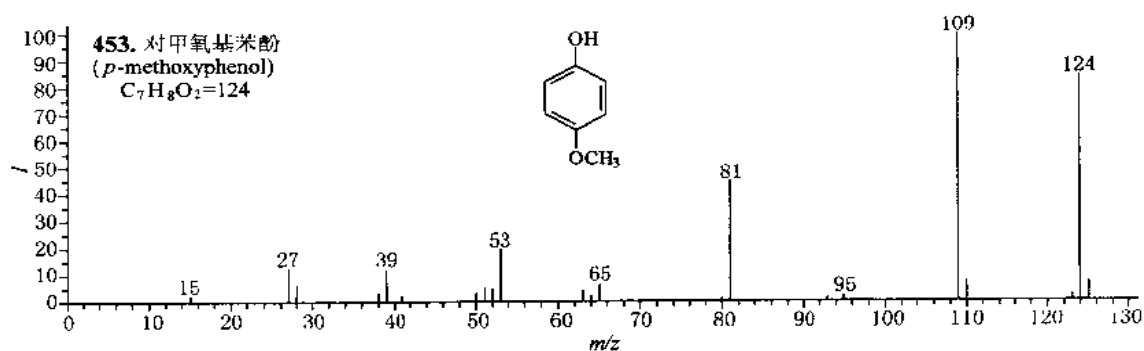
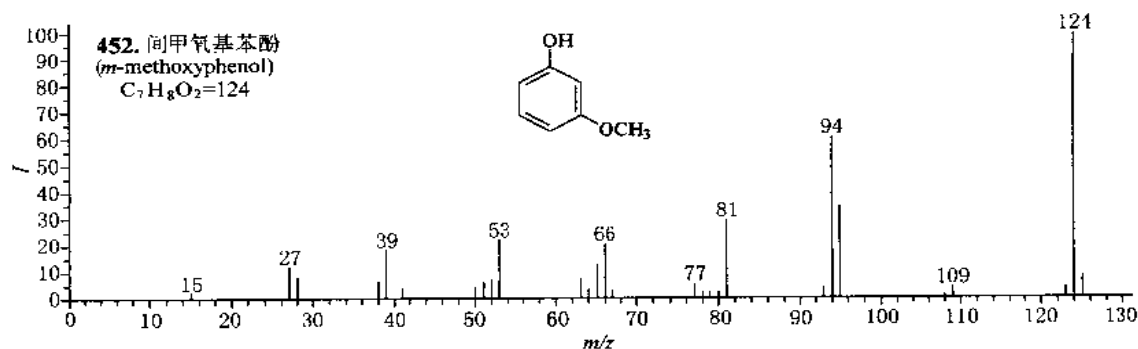
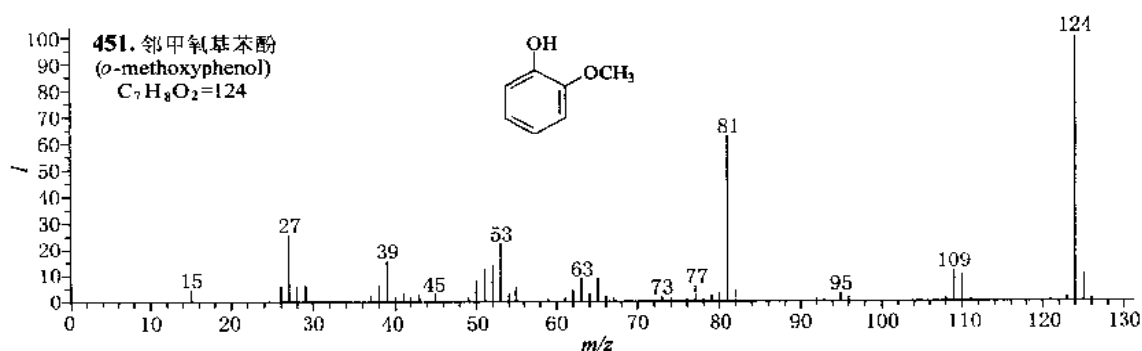


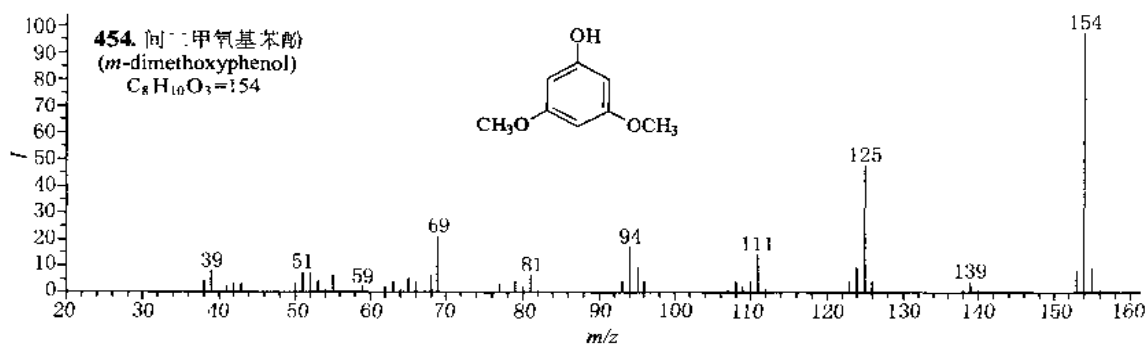


### 五、甲氧基苯酚

3个甲氧基苯酚类(451~453)都能失去甲基,然后是失2个一氧化碳分子,分别得离子 $m/z$  109, 81和53,但对甲氧基苯酚的失甲基离子最强(基峰),间甲氧基苯酚另有强峰 $M-CHO$  ( $m/z$  95)和 $M-CH_2O$  ( $m/z$  94)及后者再失一氧化碳离子( $m/z$  66),所以三者易用质谱区别。三者的 $M-H$ 离子很弱,因而易与甲基苯二酚类区别。

间二甲氧基苯酚(454)的主要裂解是失去甲酰基,可以与二甲基苯三酚区别。





## 六、卤代酚类

(1) 3个氯代苯酚类(455~457)能用质谱彼此区别:邻氯苯酚是先失氯化氢,再失一氧化碳,分别得离子  $m/z$  92和64,间氯苯酚有较强的  $M-CHO$  离子  $m/z$  99,而对氯苯酚有较强的  $M-CO$  离子  $m/z$  100。三者的离子  $m/z$  65应是来自  $M-Cl$  离子  $m/z$  93再失一氧化碳的裂解。

(2) 3个溴代苯酚类(458~460)的主要裂解是失溴、再失一氧化碳和乙炔,间溴取代者这种裂解最强,但彼此区别较难。

(3) 3个碘代苯酚类(461~463)的主要裂解是失碘、再失一氧化碳和乙炔,且间碘取代者这种裂解最强。另外,对碘取代者的分子离子较弱,所以三者能够区别。

(4) 6个二氯代苯酚类(464~469)的主要裂解都是  $M-HCl-CO-Cl$ , 2位有氯者似更明显些。

(5) 2个二溴苯酚(470, 471)的裂解类似于二氯代物,最后离子都是  $m/z$  63。

(6) 三氯代苯酚类(472~477)的典型裂解途径是  $M-HCl-CO-Cl-Cl$ , 分别得离子  $m/z$  160, 132, 97和62,彼此不易区别。三溴代苯酚(478)的裂解途径与三氯代物的相同,即  $M-HBr-CO-Br-Br$ 。

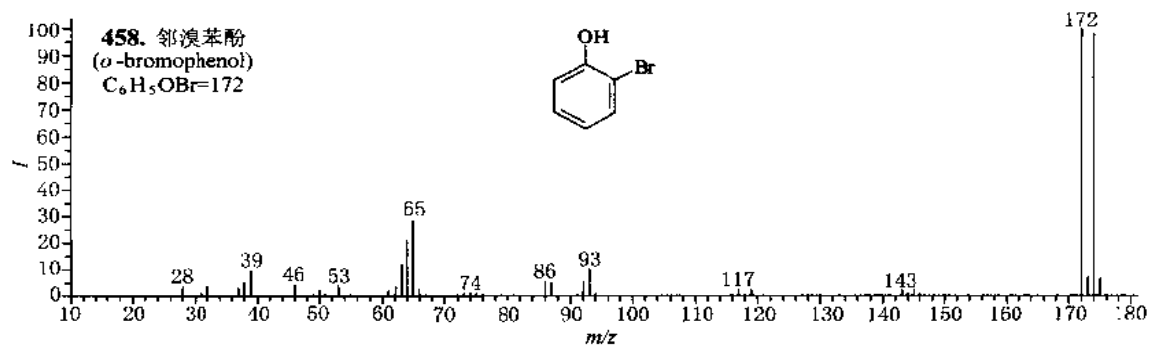
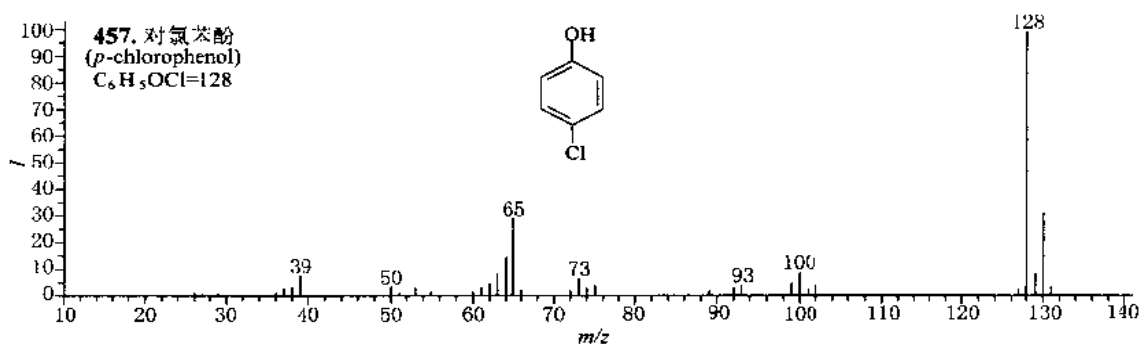
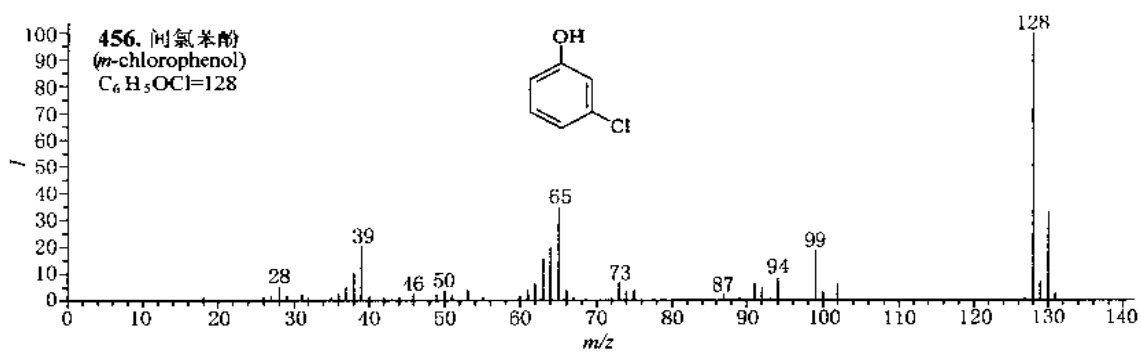
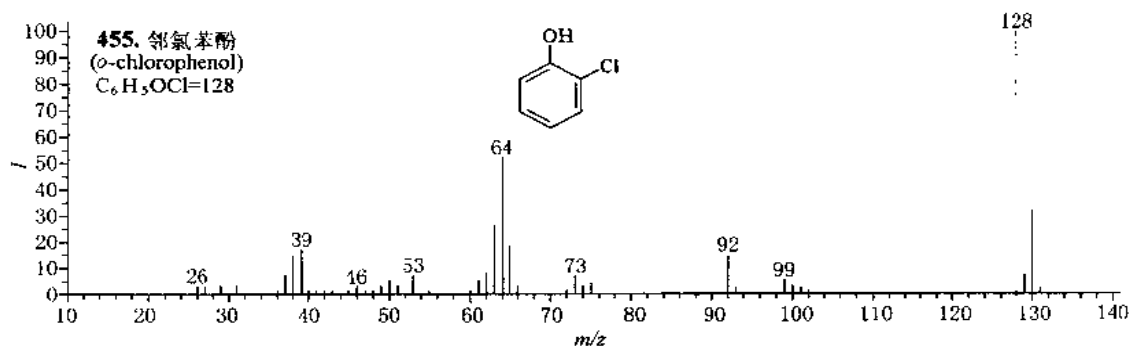
(7) 四氯代苯酚类(479~481)的裂解途径都是  $M-HCl-CO-Cl-Cl-Cl$ 。

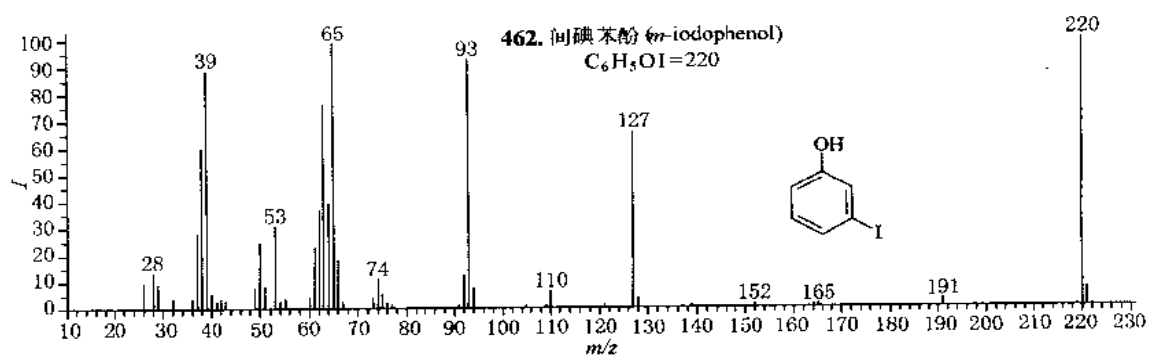
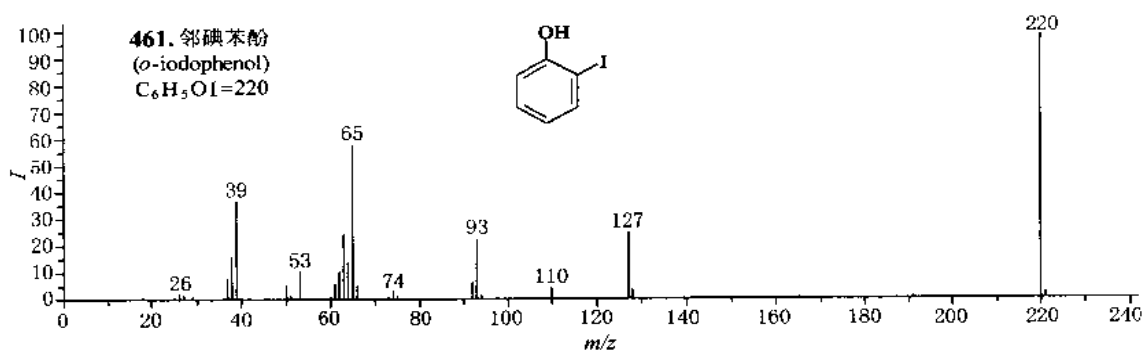
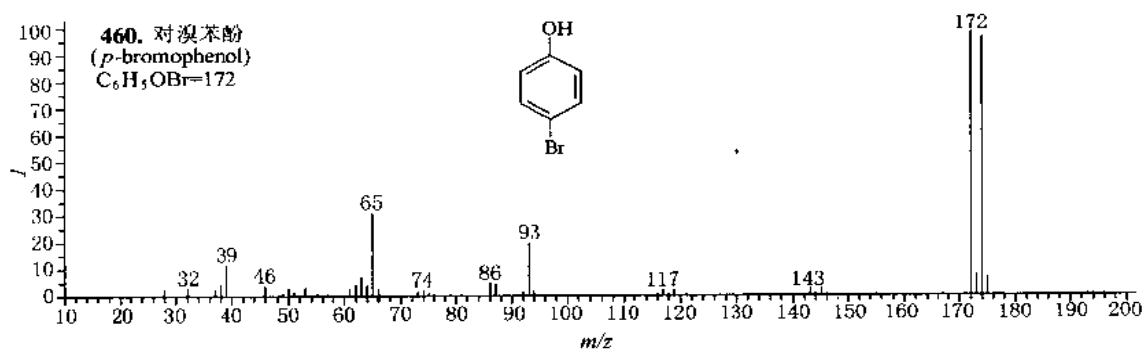
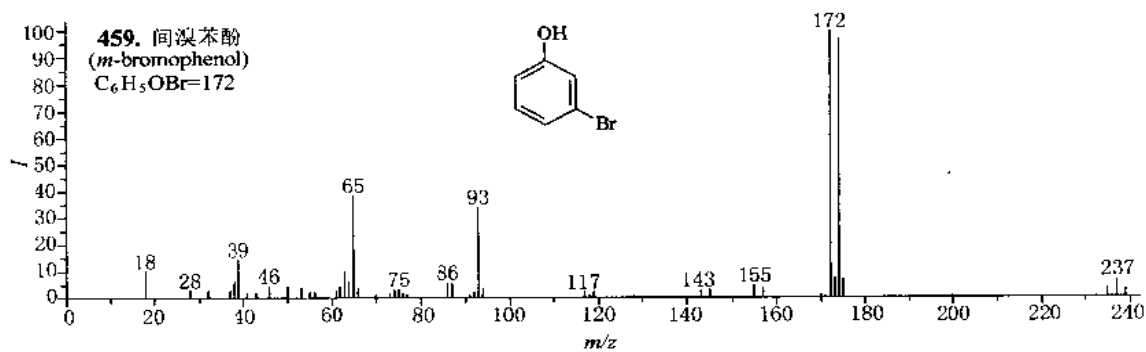
(8) 五氟苯酚(482)有  $M-F$ 和  $M-CHO-F-F$ 两条裂解途径。五氯苯酚(483)的裂解与前述相同,但要再多失一氯原子,即  $M-HCl-CO-Cl-Cl-Cl-Cl$ 。

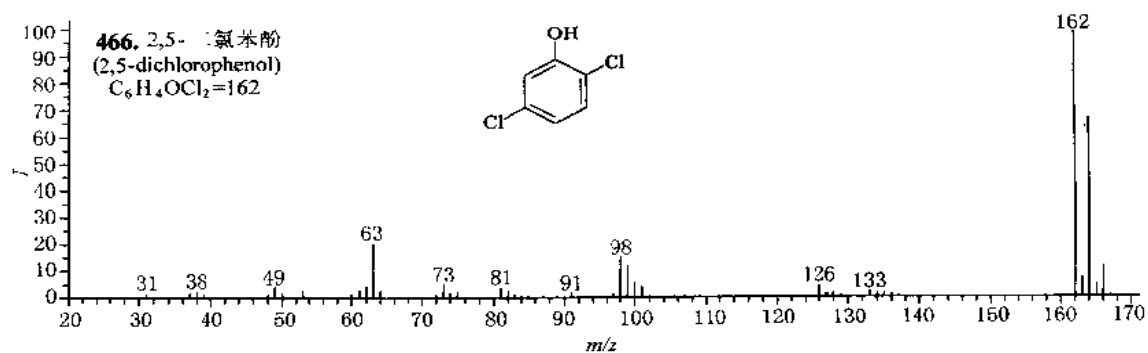
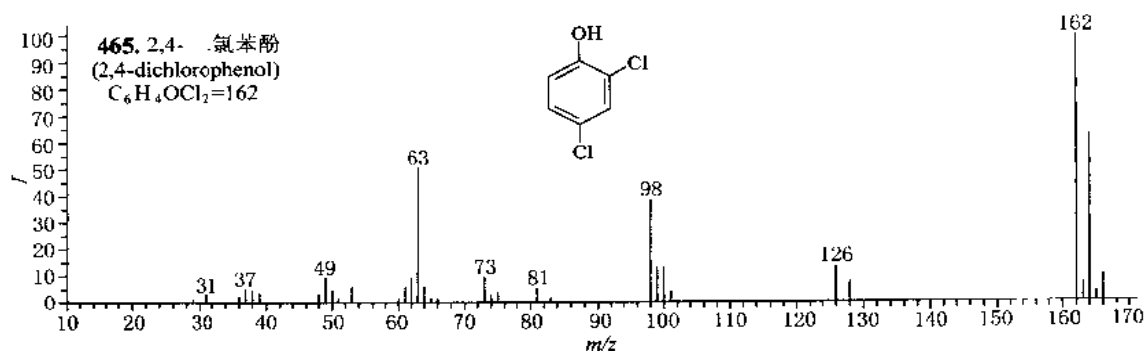
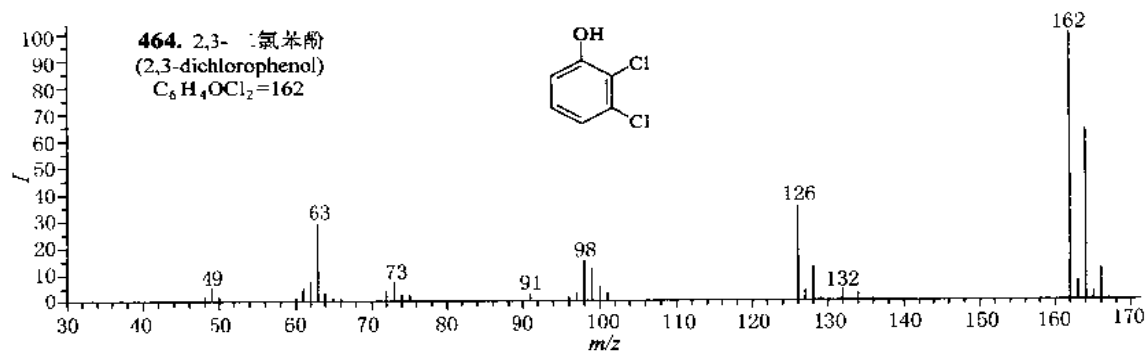
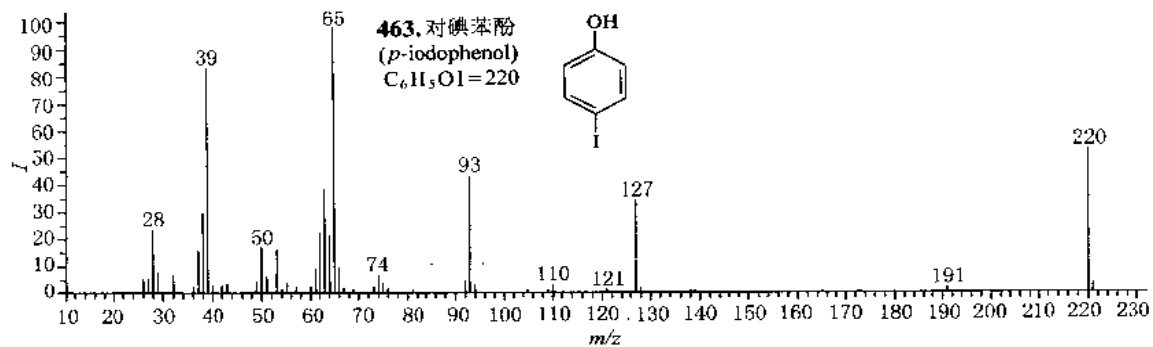
(9) 间二氯间苯二酚(484)的裂解是间隔地失去氯原子,即  $M-CHO-Cl-CO-Cl$ 或  $M-Cl-CO-CHO-Cl$ 。对二氯对苯二酚(485)的裂解也是两条途径,即  $M-CHO-Cl-CO-Cl$ 和  $M-HCl-CO-CO-Cl$ 。

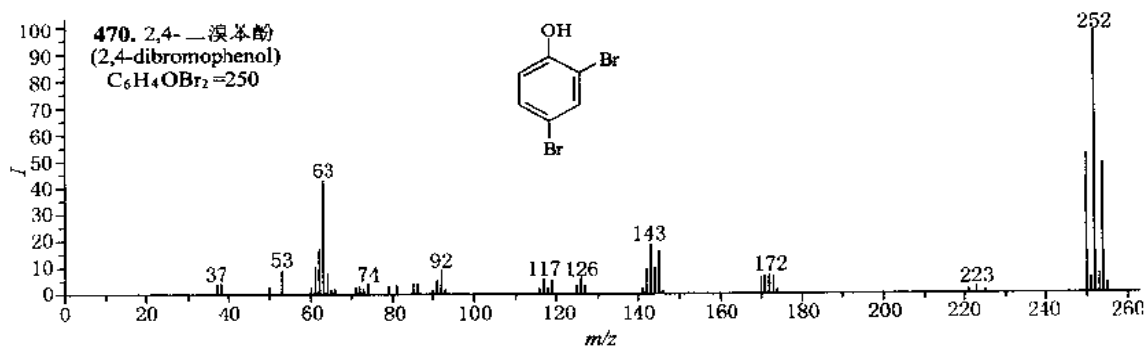
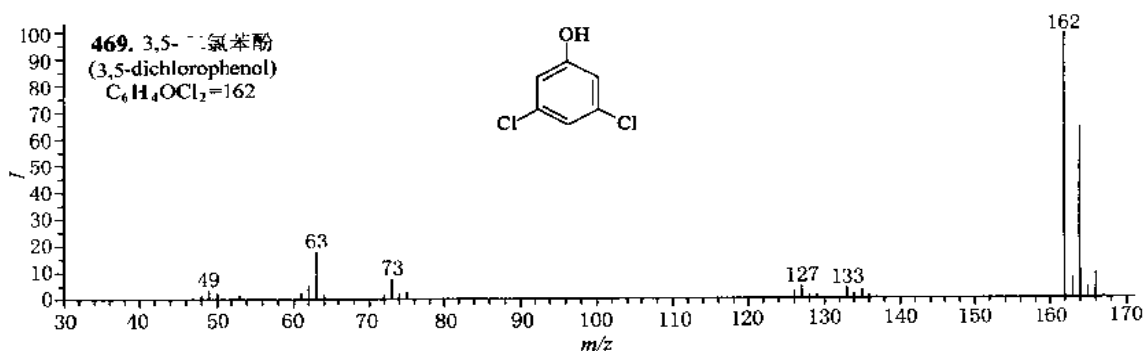
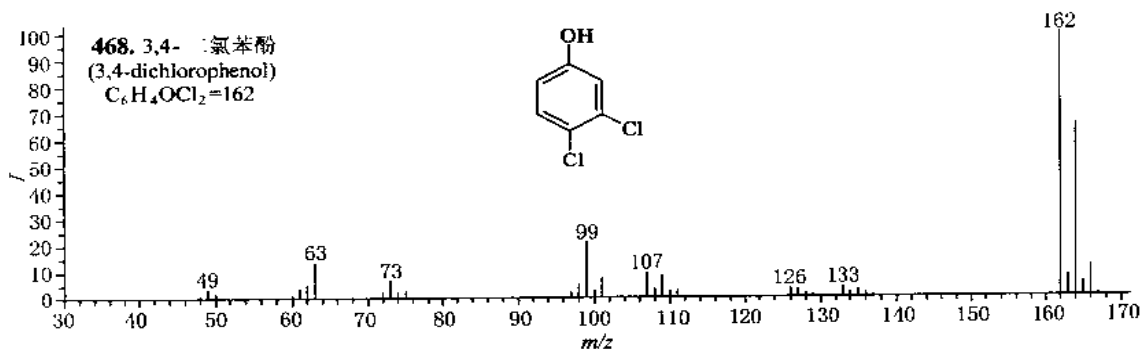
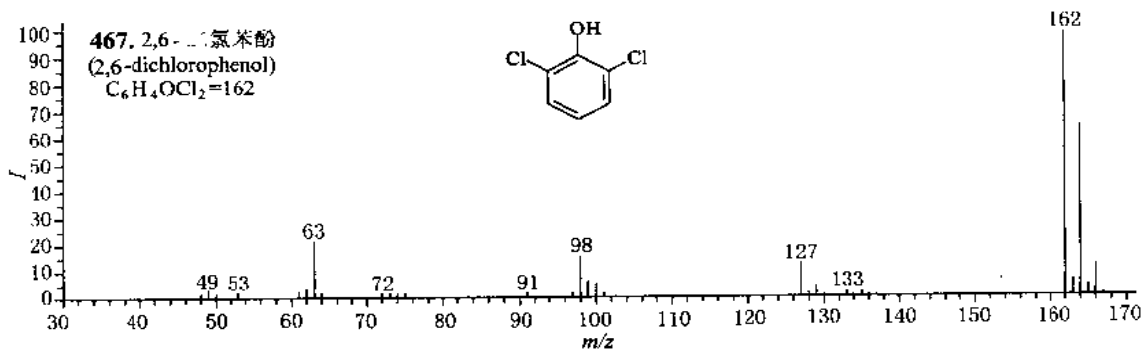
(10) 四氟间苯二酚(486)和四氟对苯二酚(487)的主要碎片离子都是  $m/z$  134和106,前者应当是  $M-F-CHO$ 的产物,再失一氧化碳即得后者。

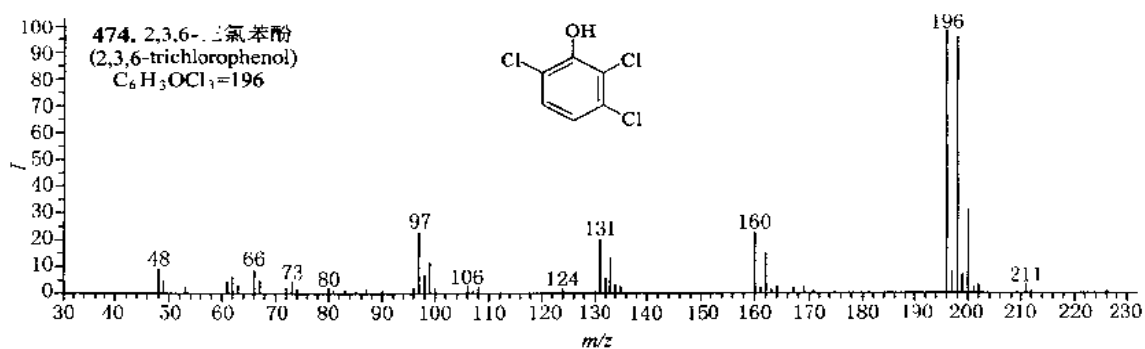
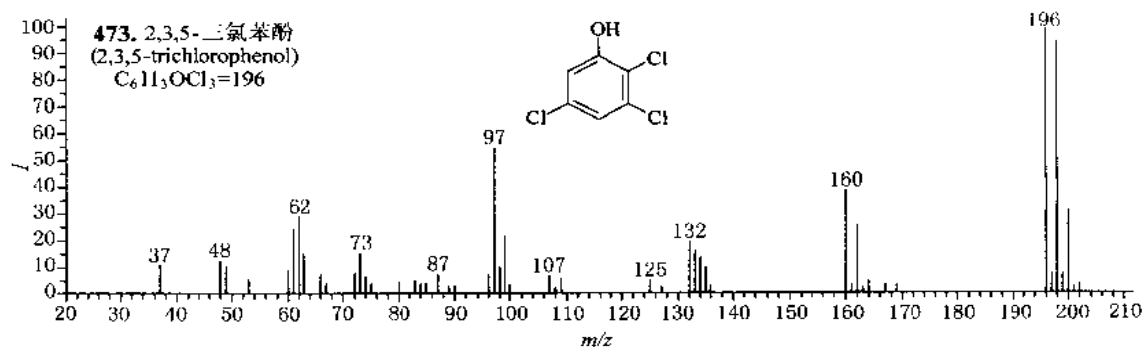
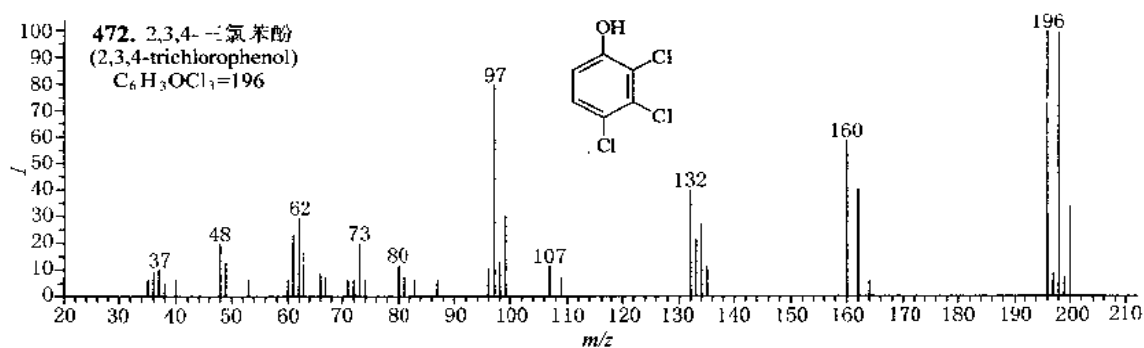
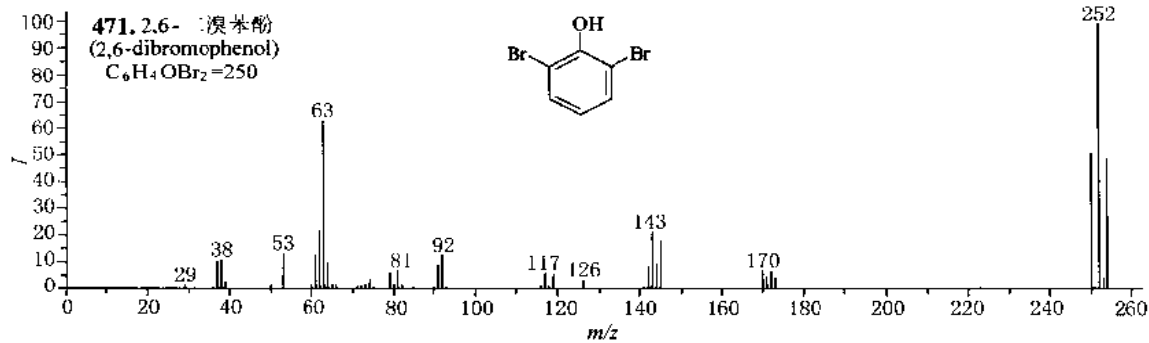
(11) 四氯邻苯二酚(488)和四氯对苯二酚(489)的主要裂解途径都是  $M-HCl-CO-Cl-HCl$ ,彼此难以区别。

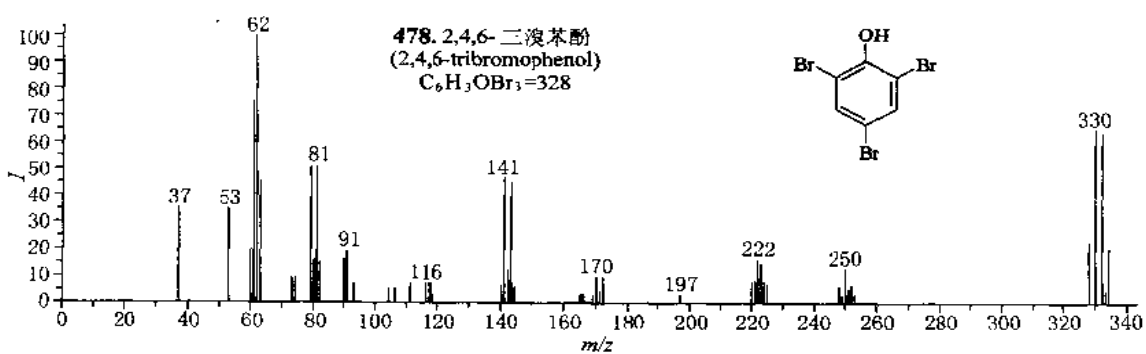
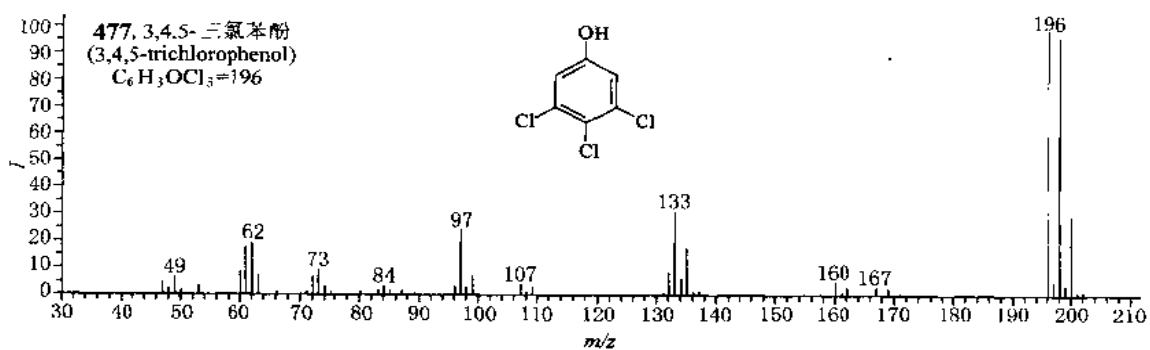
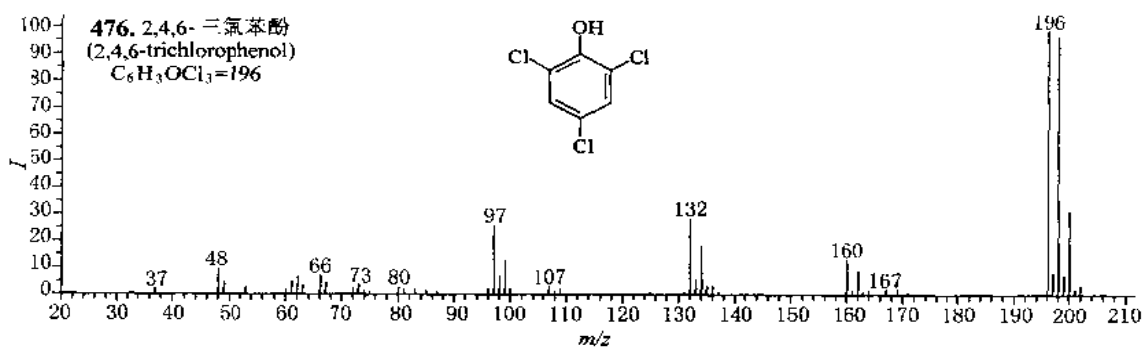
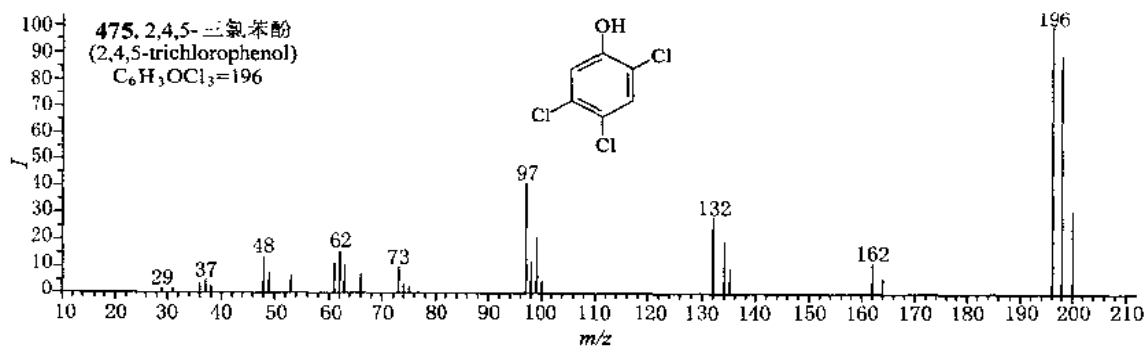




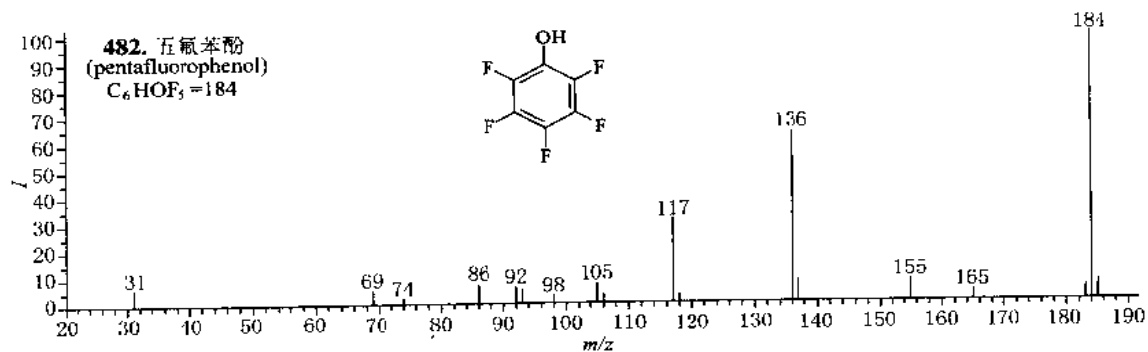
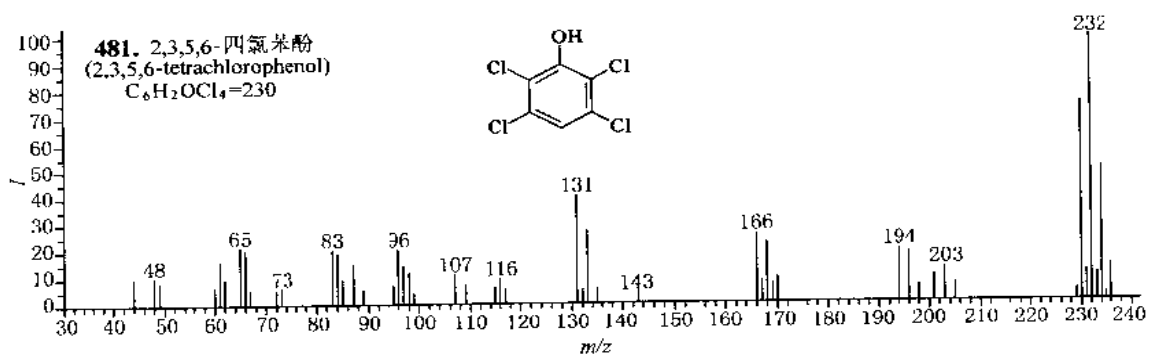
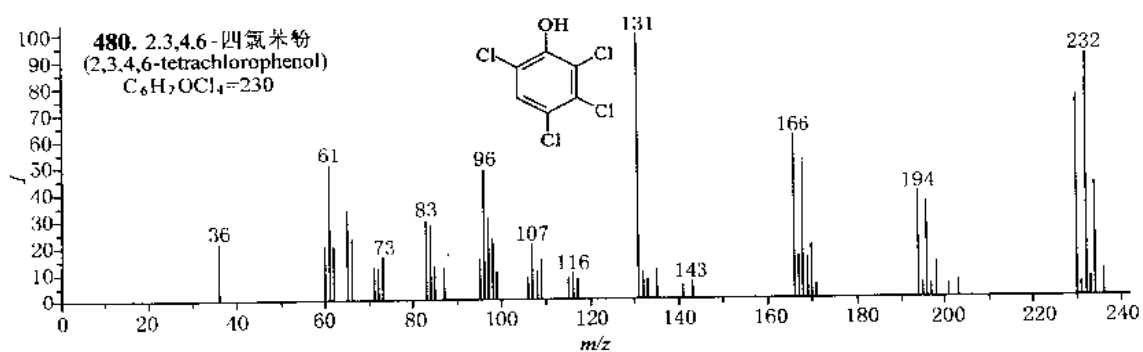
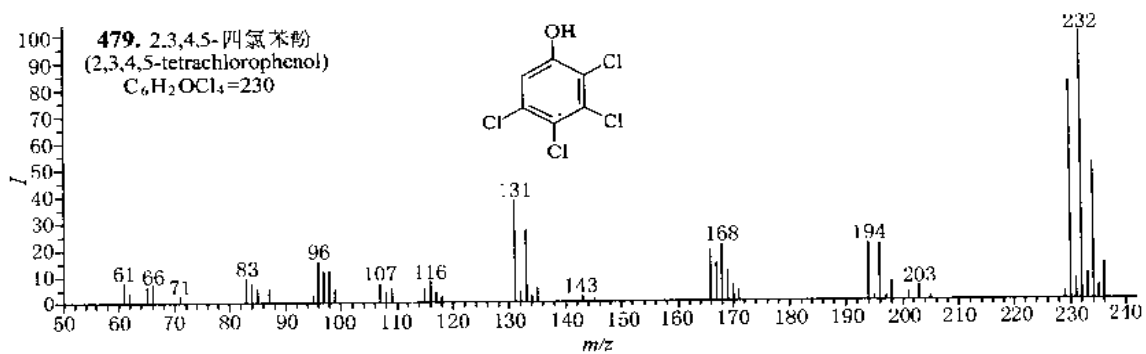


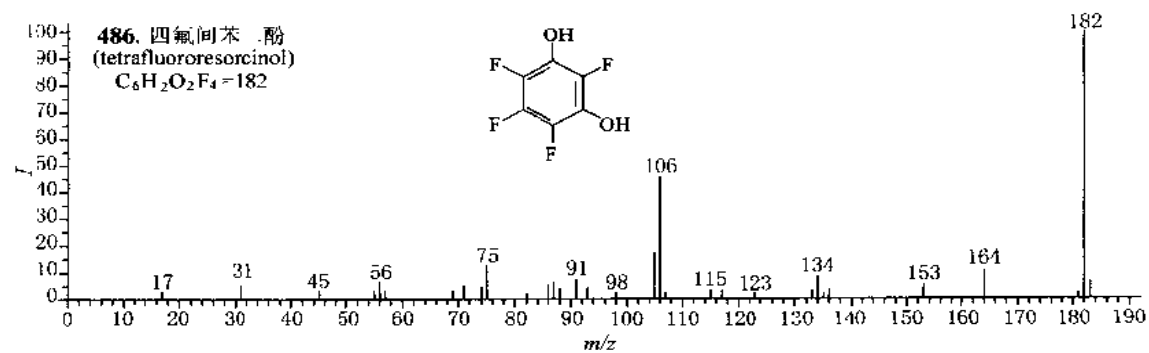
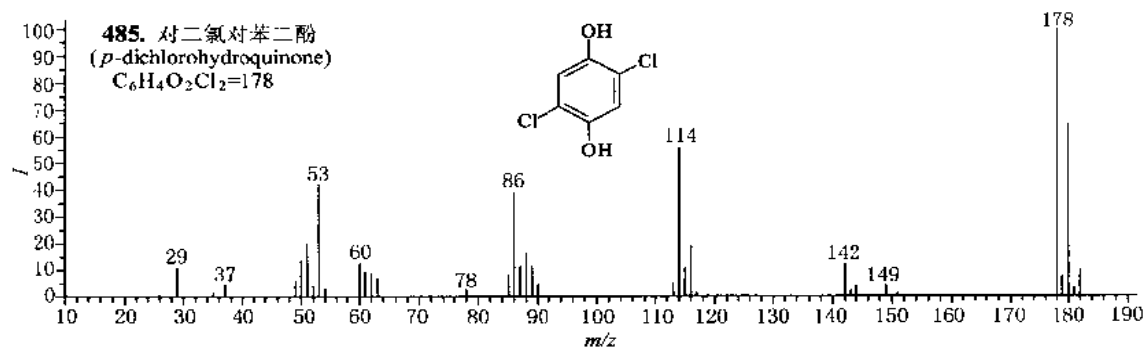
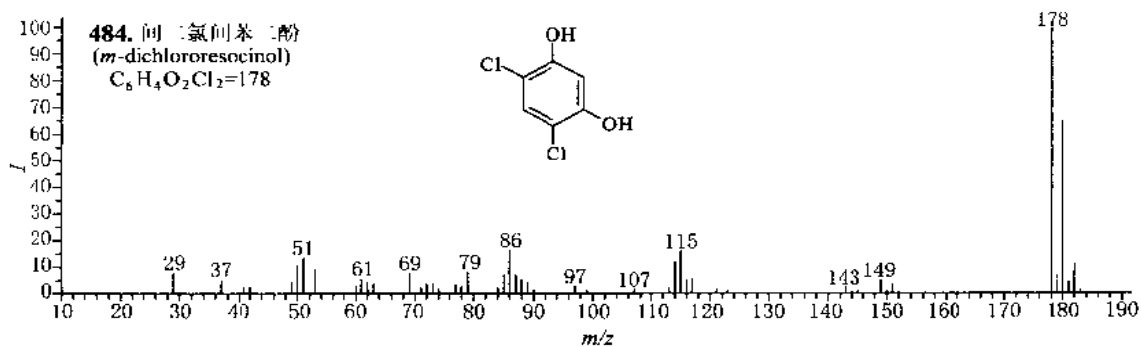
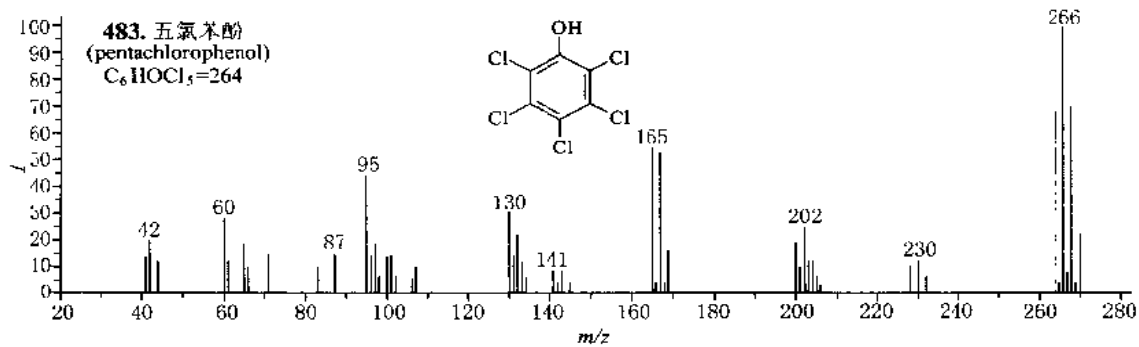


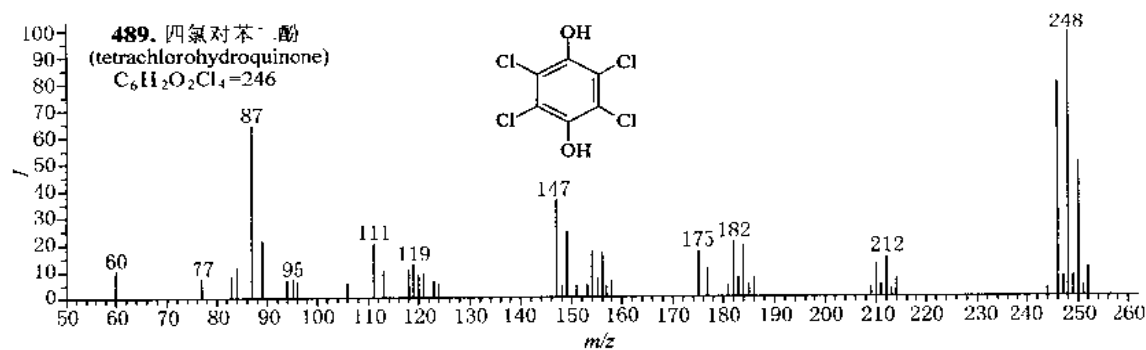
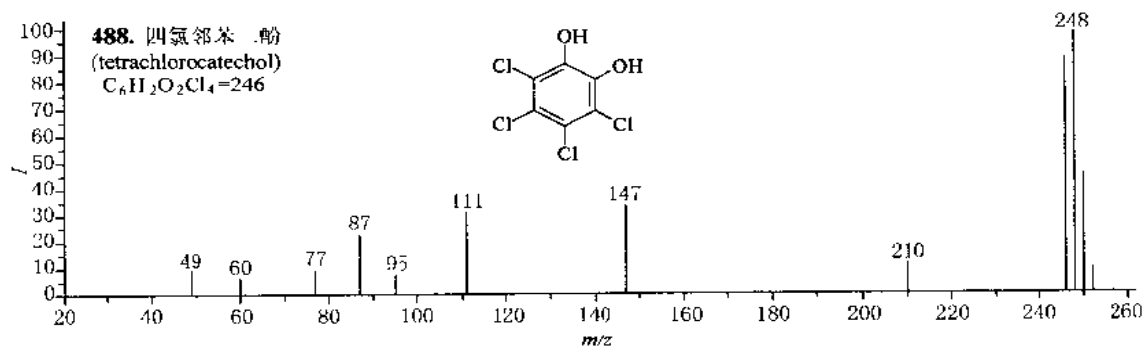
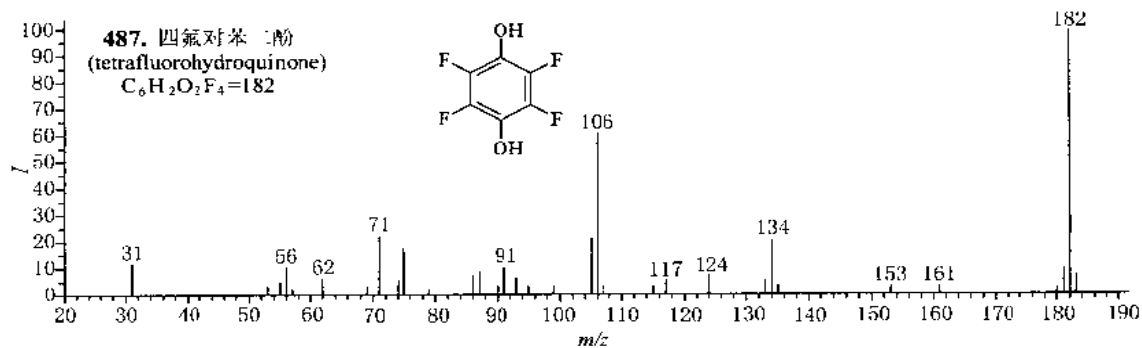






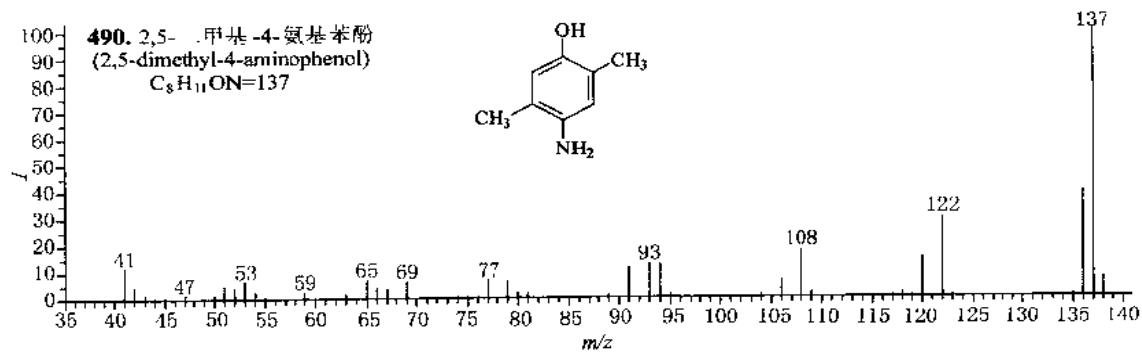






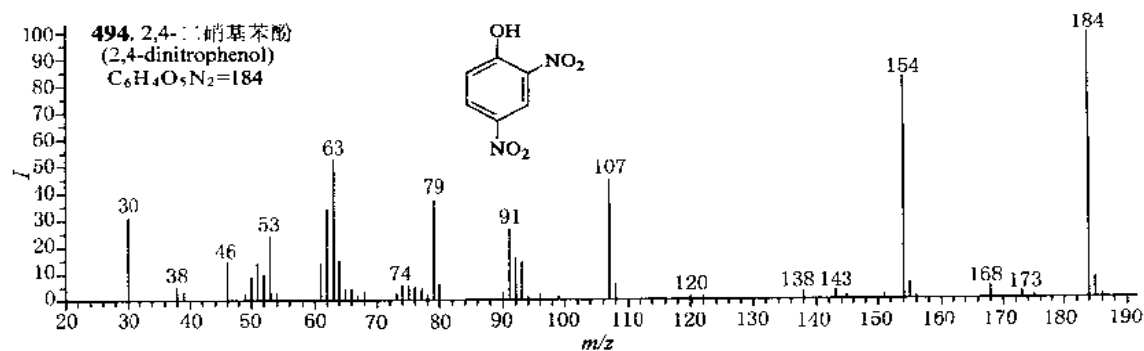
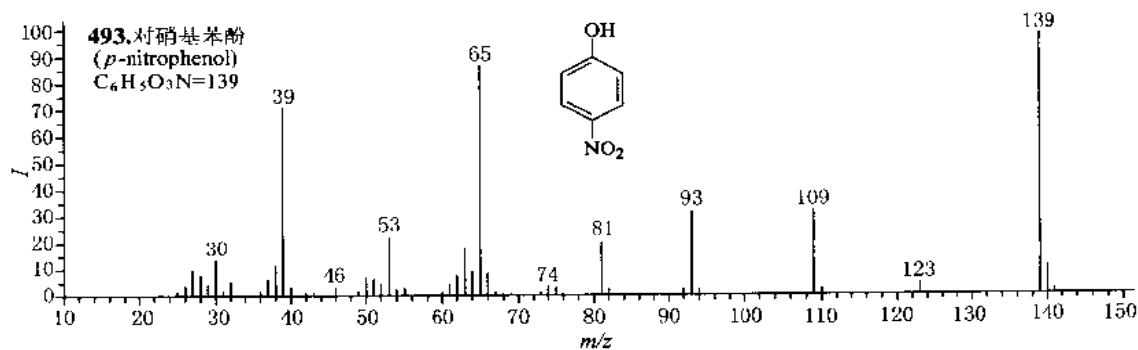
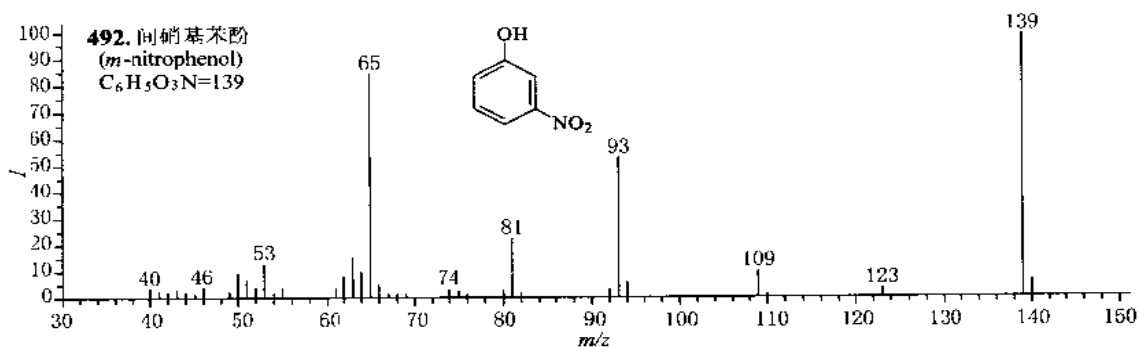
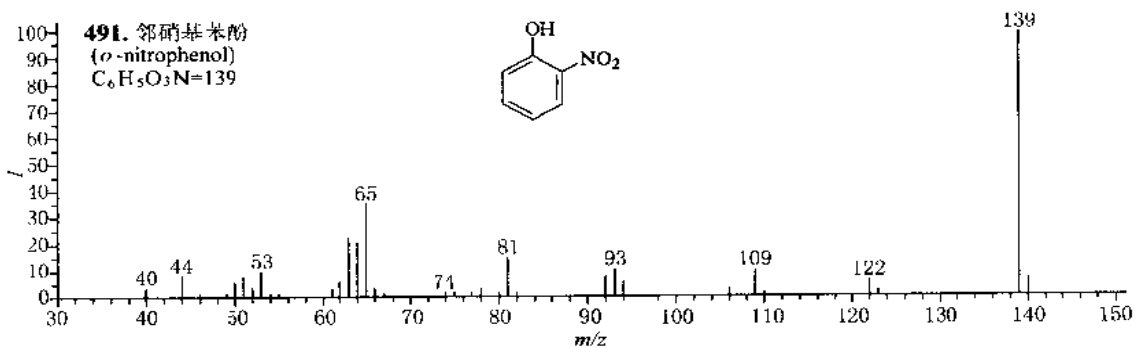
## 七、氨基酚类

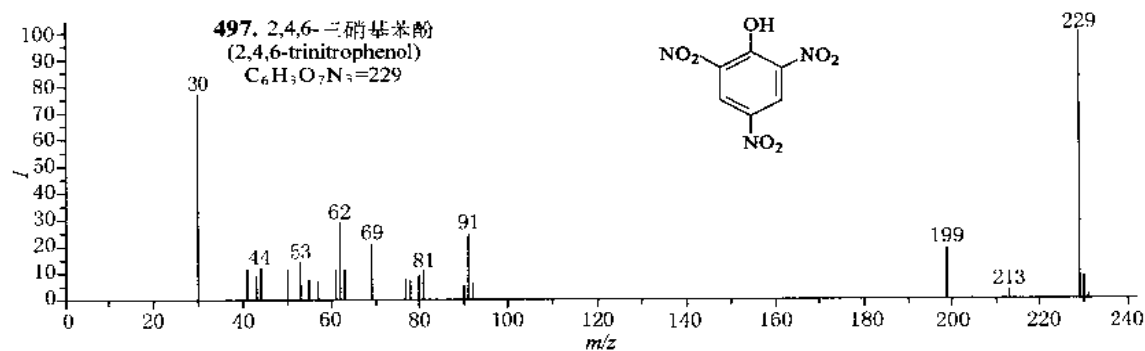
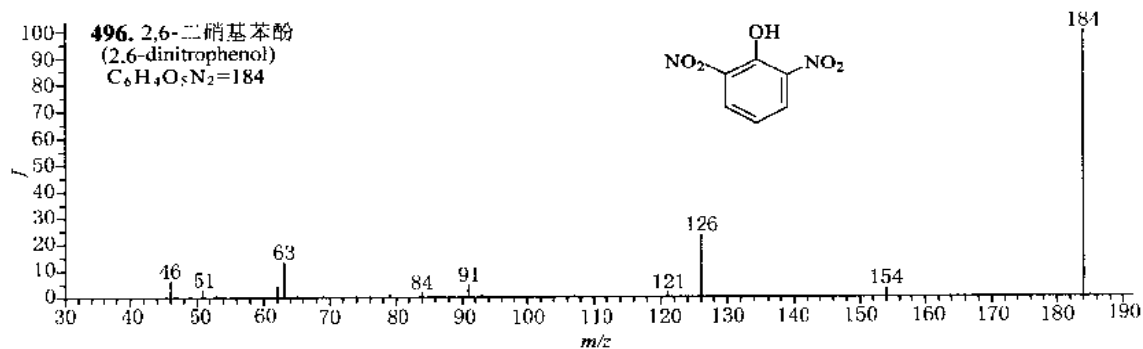
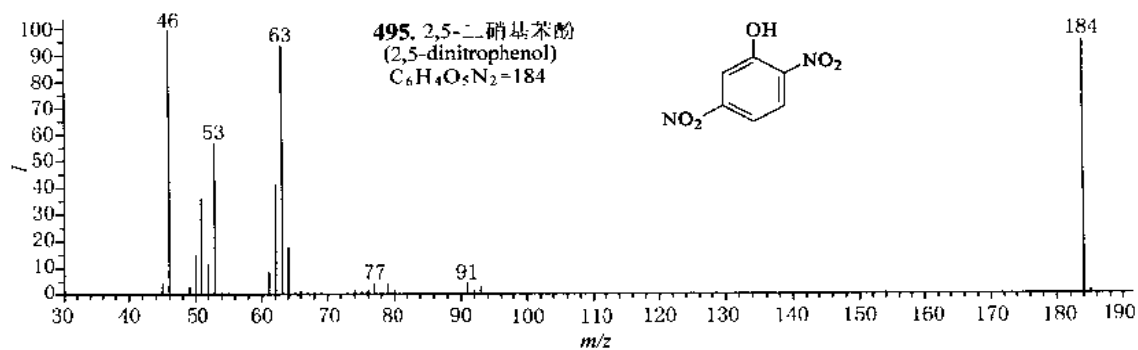
2,5-二甲基-4-氨基苯酚 (490) 的裂解有三条途径, 即  $M-H-CO$ ,  $M-CH_3-CO$  和  $M-NH_2-CHO$ 。



## 八、硝基酚类

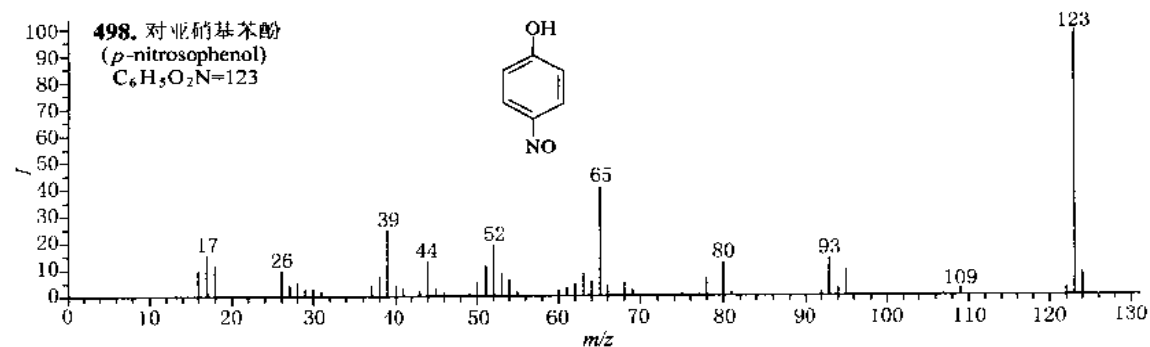
3个硝基苯酚类(491~493)的裂解有两条途径,即 $M-OH-CHO-CO-C_2H_2$ 和 $M-NO-CO-CO$ ,彼此不易区别。多硝基酚类(494~497)都有 $M-NO$ 离子。

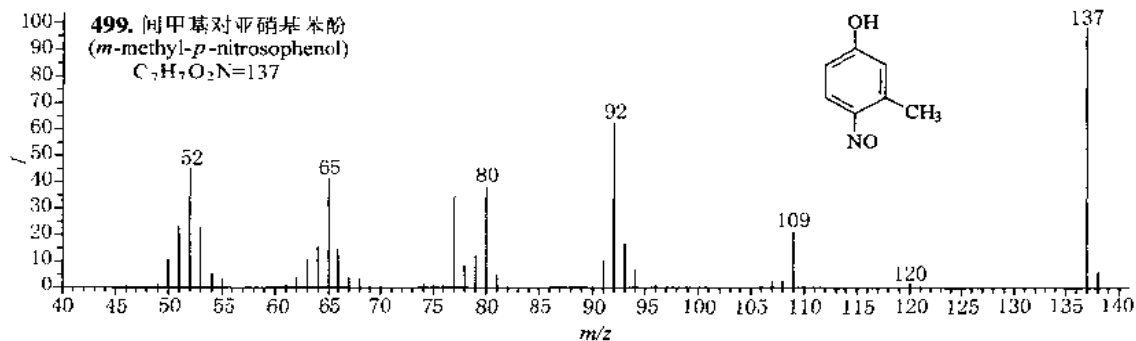




## 九、亚硝基酚类

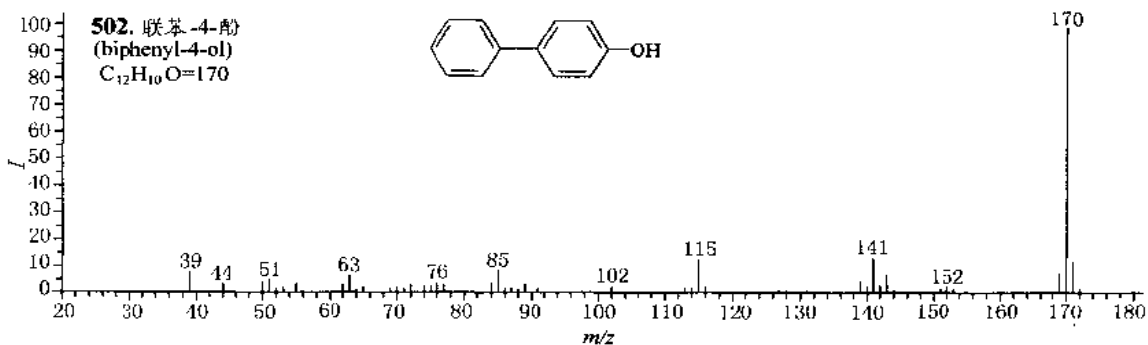
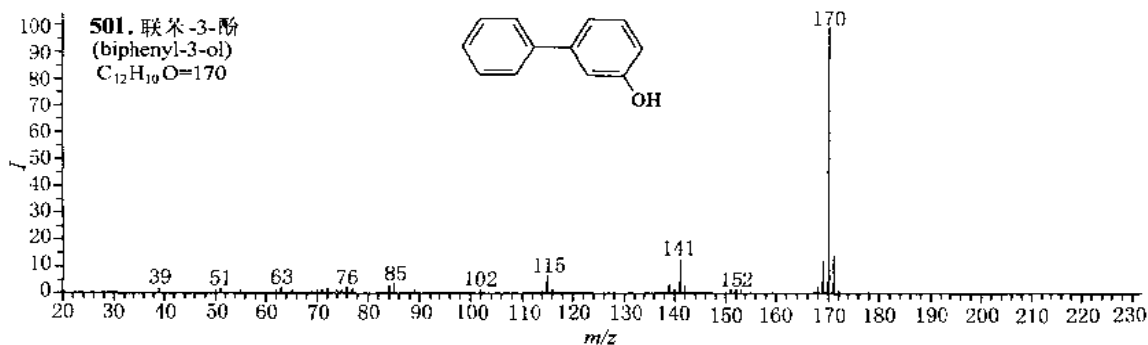
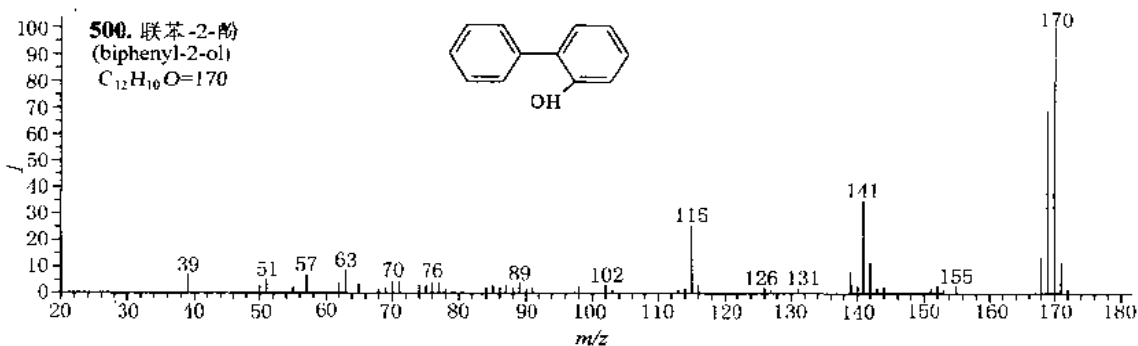
对亚硝基苯酚(498)的主要裂解是  $M-NO-CO-C_2H_2$ , 间甲基对亚硝基苯酚(499)的裂解途径是  $M-CO-OH$ 。

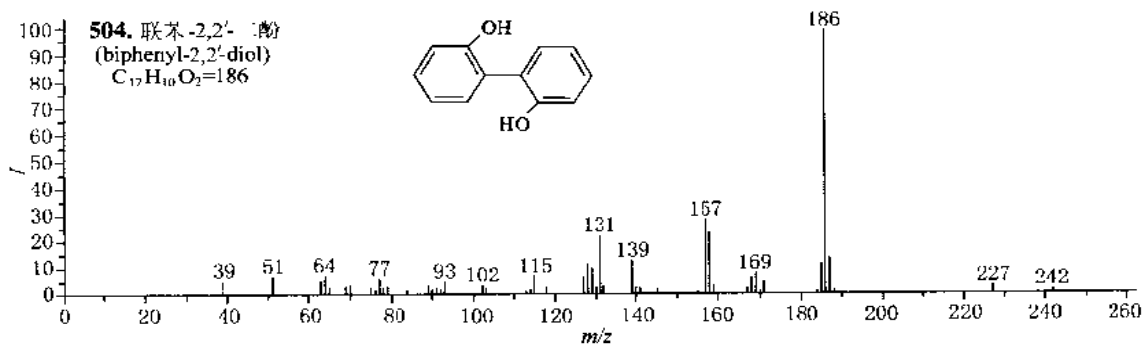
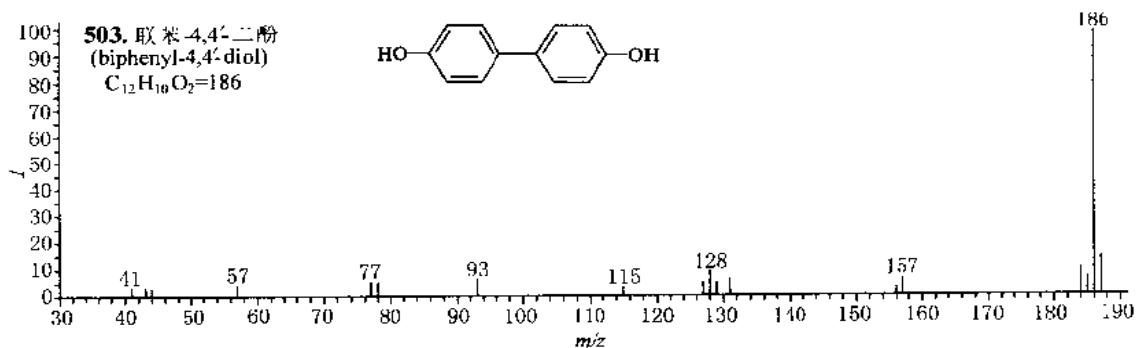




### 十、联苯酚类

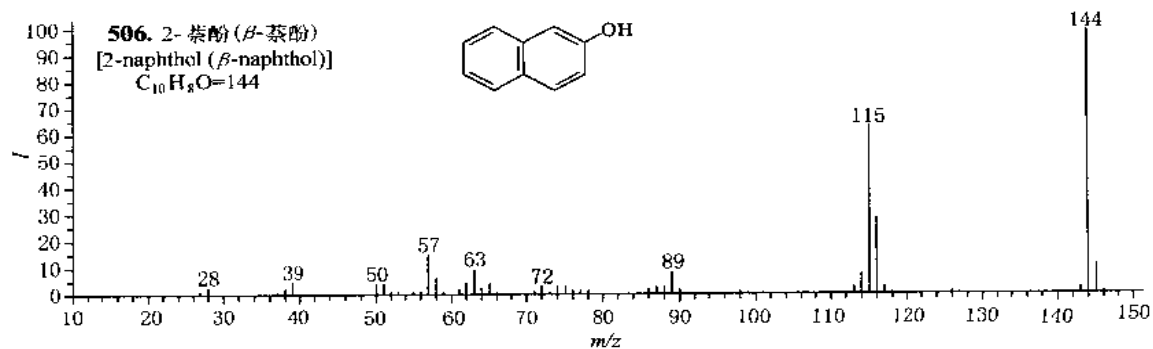
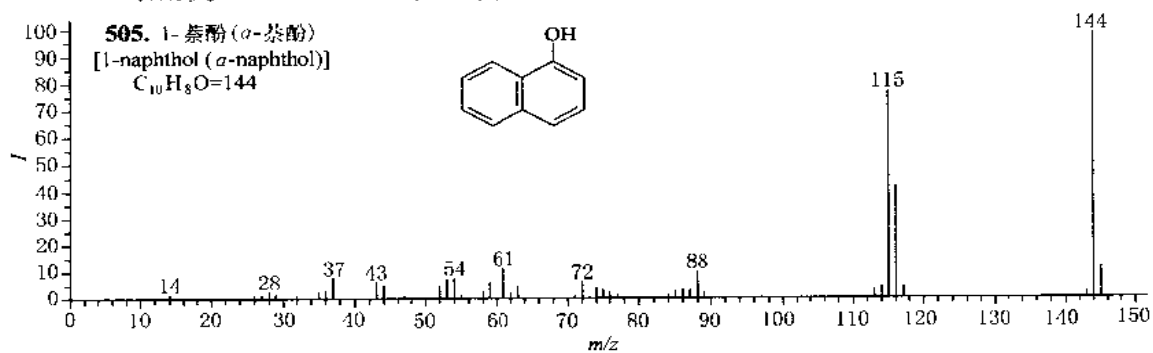
联苯酚类 (500~502) 的裂解途径是  $M-H-CO-C_2H_2$ , 联苯二酚类 (503、504) 是  $M-CHO-CHO$ 。

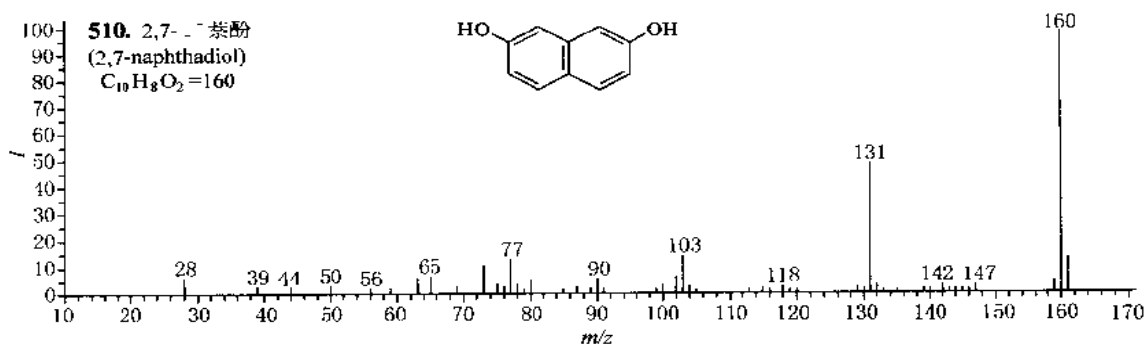
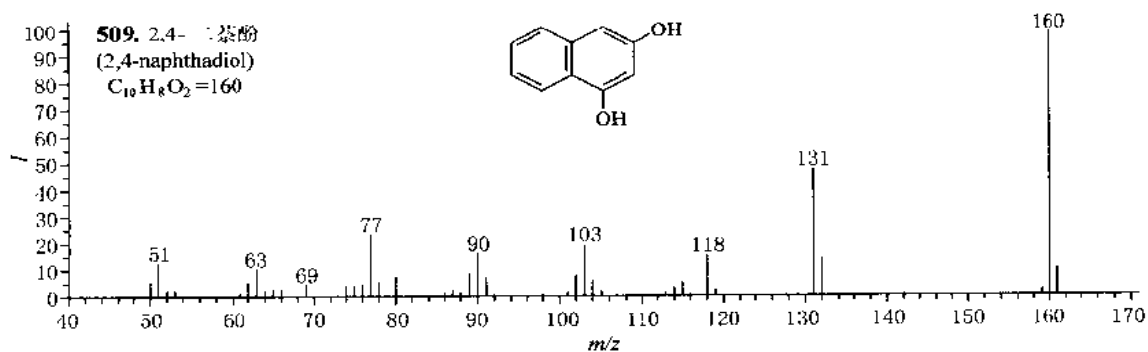
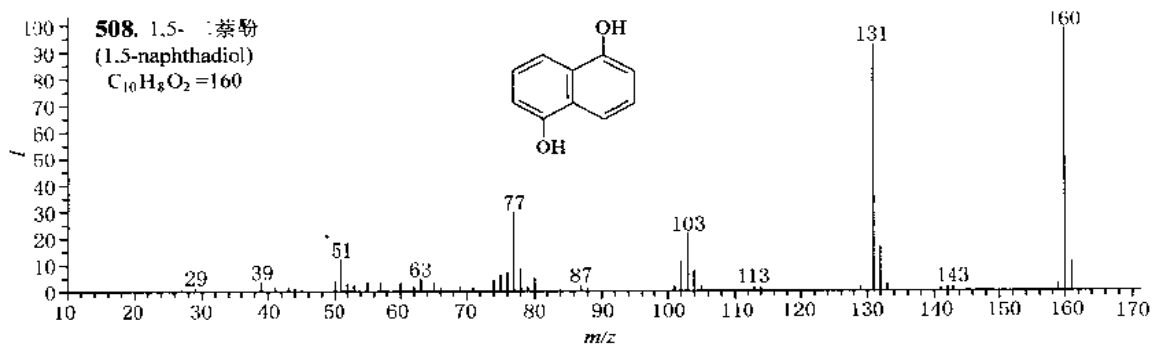
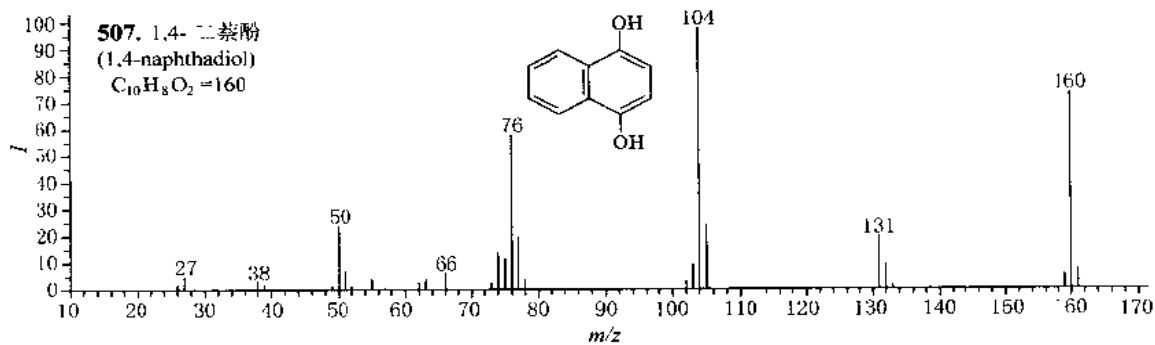




## 十一、萘酚类

- (1)  $\alpha$ -萘酚 (505) 和  $\beta$ -萘酚 (506) 的主要裂解是失一氧化碳和再失氢。  
(2) 二萘酚类 (507~510) 的主要裂解是  $M-CO-CO$  或  $M-CHO-CO$ 。







### 第三节 醚 类

#### 一、直链脂肪醚类

这类化合物的主要裂解是 $\alpha$ -裂解以及碳-氧键的裂解,产物是分子离子失去烷基的离子和生成烷基离子。

(1) 二甲醚(511)的主要离子是 $M-H$ 和甲基离子,离子 $m/z$  29可能是甲酰基离子,这有点特殊。

(2) 甲乙醚(512)的主要裂解是 $M-H$ 和 $M-CH_3$ 。

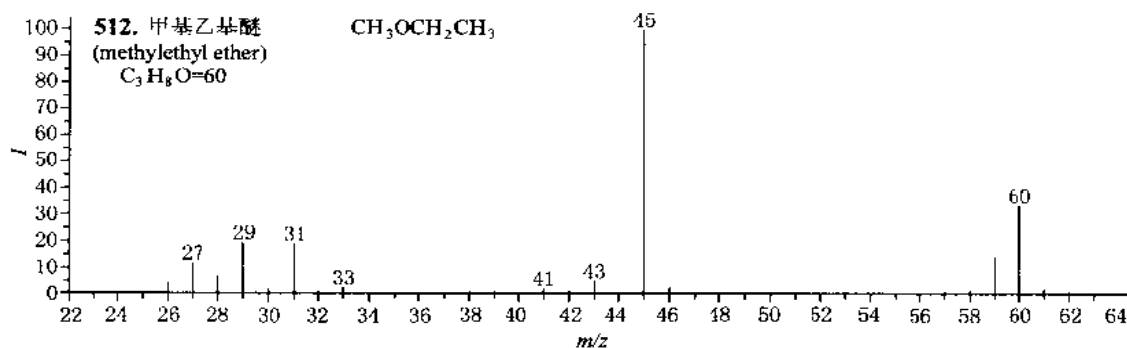
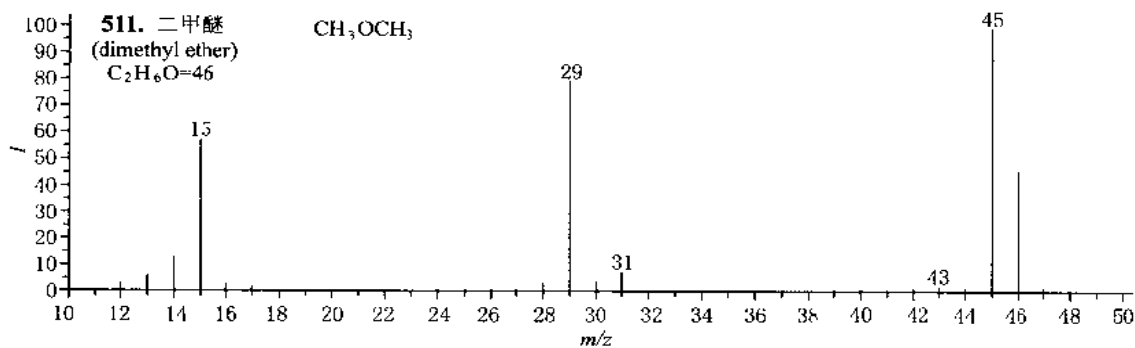
(3) 二乙醚(513)的主要离子是 $M-CH_3$ ,  $M-C_2H_5$ 以及 $m/z$  29,离子 $m/z$ 31来自 $M-CH_3$ 再失乙烯。

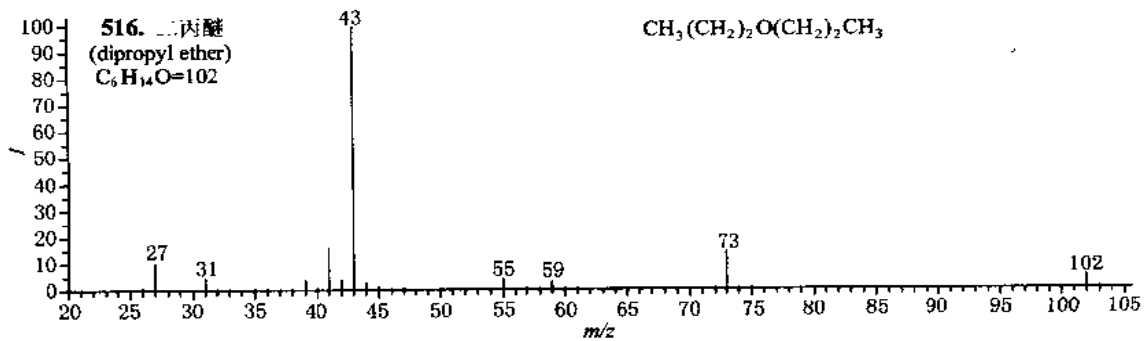
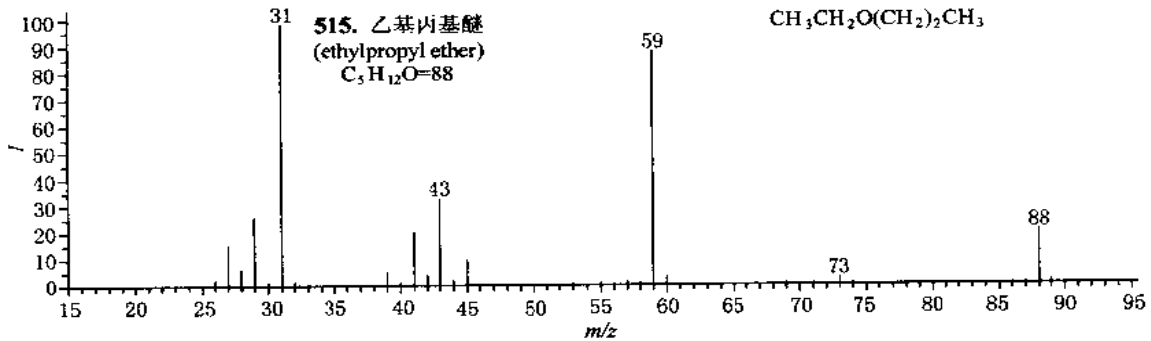
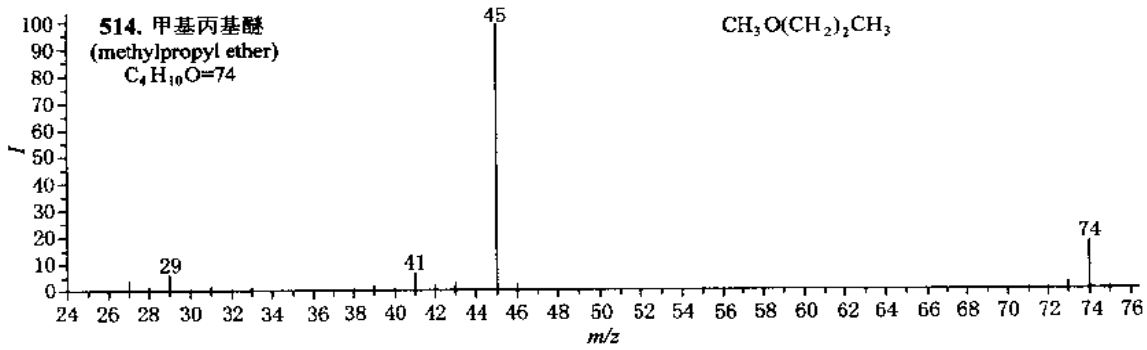
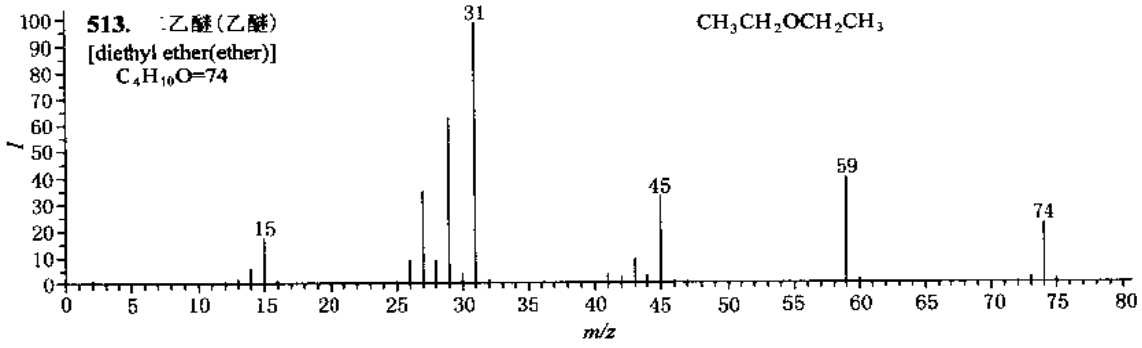
(4) 甲基丙基醚(514)只有1个强的 $\alpha$ -裂解离子 $m/z$  45( $M-C_2H_5$ ),乙基丙基醚(515)的 $M-C_2H_5$ 离子能再失去乙烯。

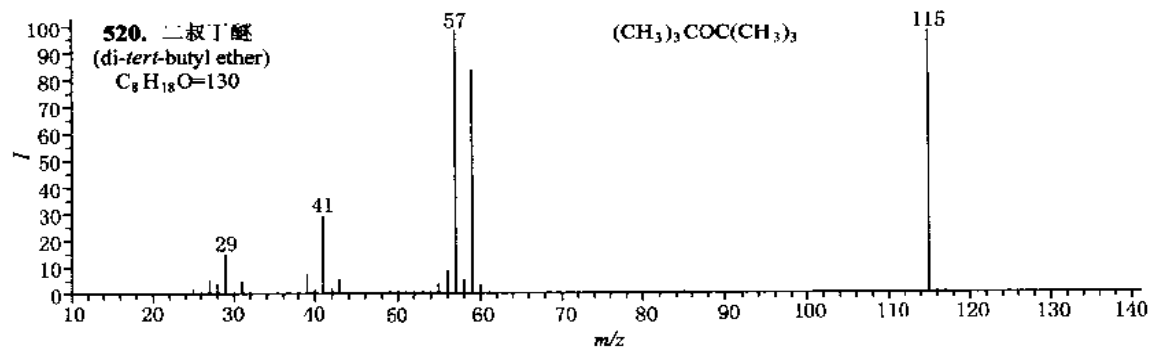
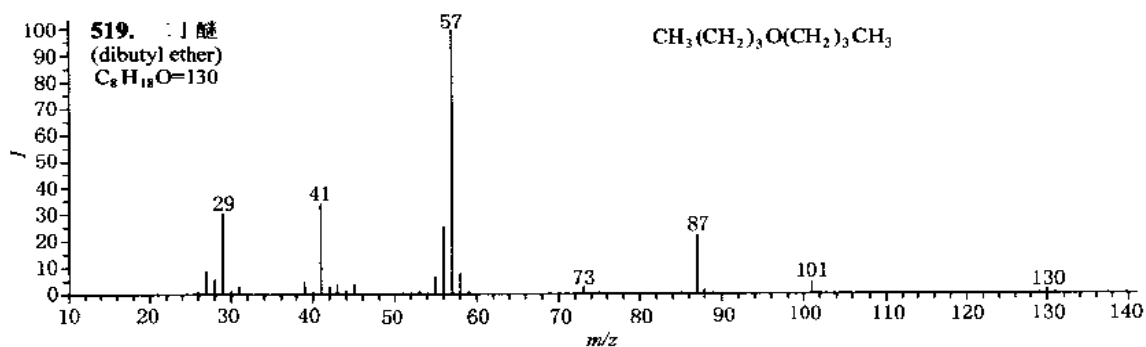
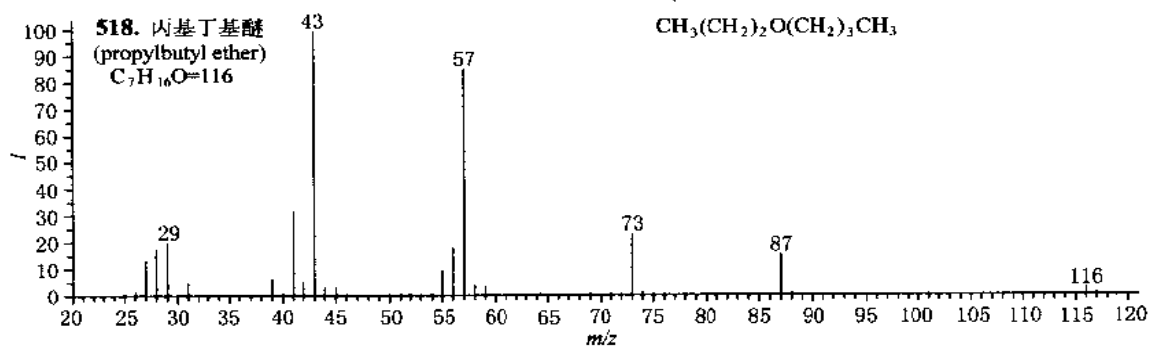
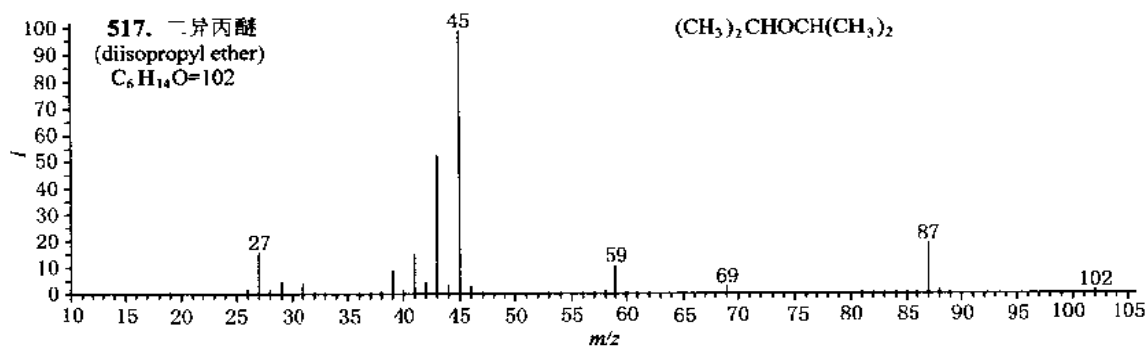
(5) 二丙醚(516)的2个碎片离子是 $M-C_2H_5$ 和 $C_3H_7^+$ ,二异丙醚(517)进行 $\alpha$ -裂解得 $M-CH_3$ 离子,再失去丙烯得 $M-CH_2-C_3H_6$ 离子, $m/z$  43是 $C_3H_7^+$ 离子。

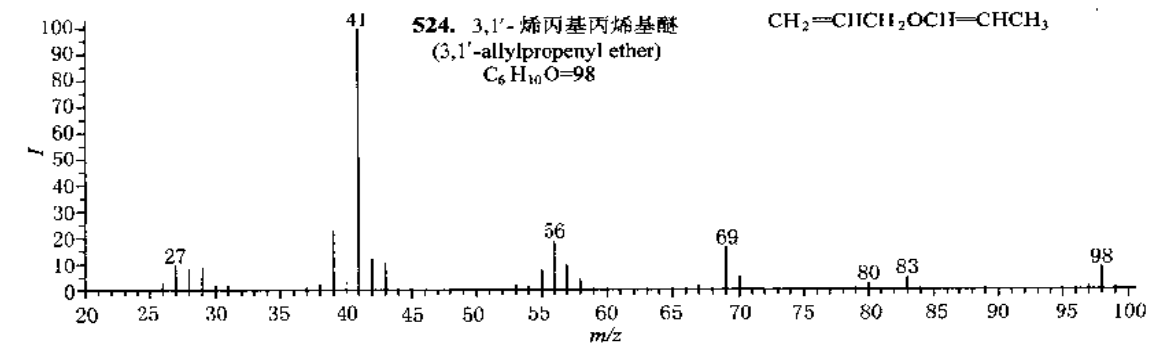
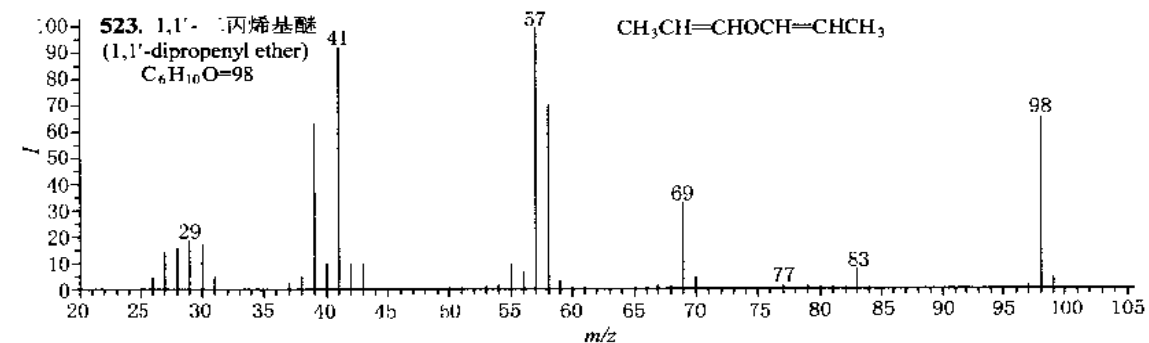
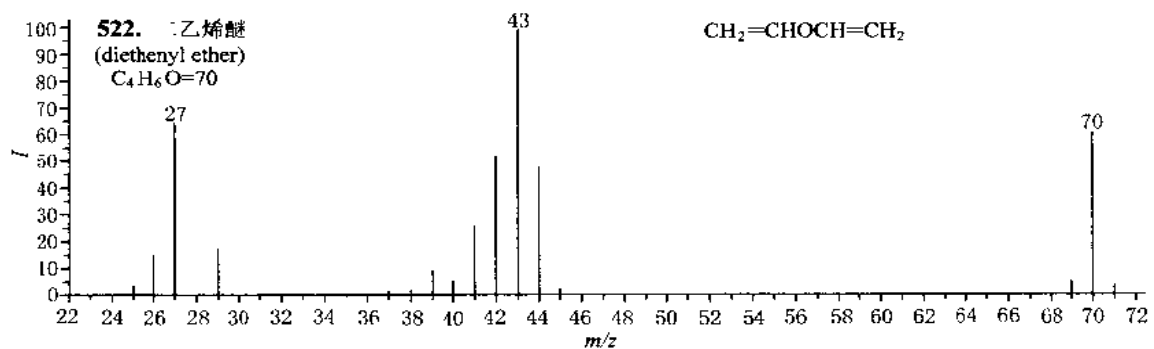
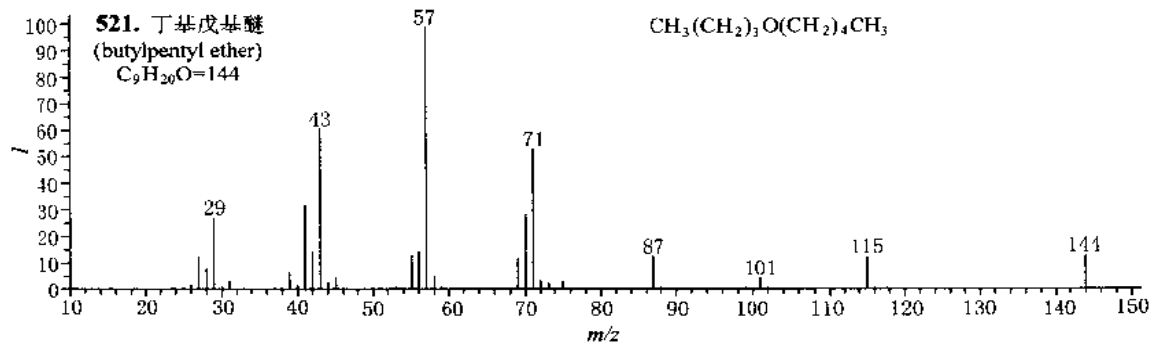
(6) 丙基丁基醚(518)有4个碎片离子,即 $M-C_2H_5$ ,  $M-C_3H_7$ ,  $C_4H_9^+$ 和 $C_3H_7^+$ 。二丁醚(519)的主要离子是 $M-C_3H_7$ 和 $C_4H_9^+$ 离子。二叔丁醚(520)的主要离子是 $M-CH_3$ ,  $M-CH_2-C_4H_8$ 和 $C_4H_9^+$ 。丁基戊基醚(521)的离子是 $M-C_2H_5$ ,  $M-C_3H_7$ ,  $M-C_4H_9$ ,  $C_5H_{11}^+$ ,  $C_4H_9^+$ ,  $C_3H_7^+$ 和 $C_2H_5^+$ 。

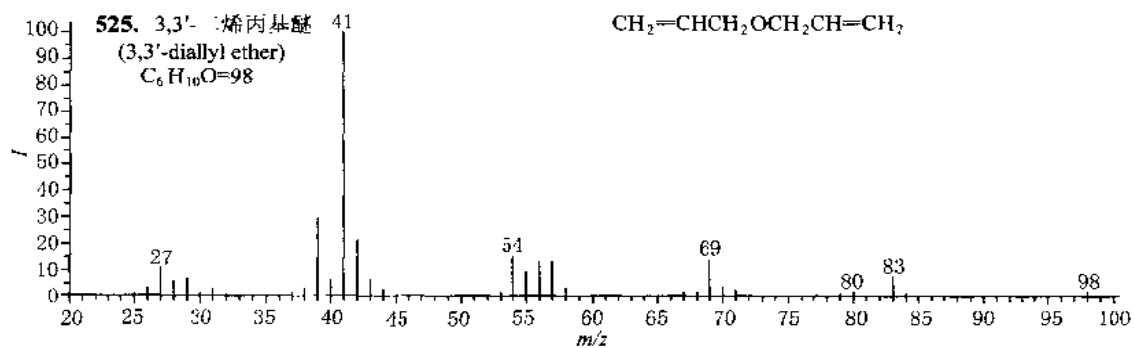
(7) 二乙烯醚(522)的主要裂解是 $M-C_2H_2$ 和 $M-C_2H_3$ 。二丙烯醚(523)是 $M-C_3H_4$ 和 $M-C_3H_5$ 。烯丙基丙基醚(524)的主要离子是烯丙离子。二烯丙基醚(525)的主要离子也是烯丙离子。







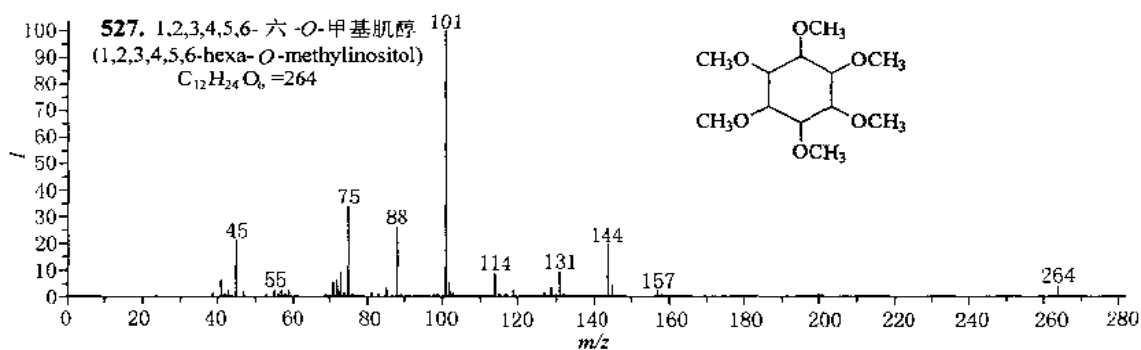
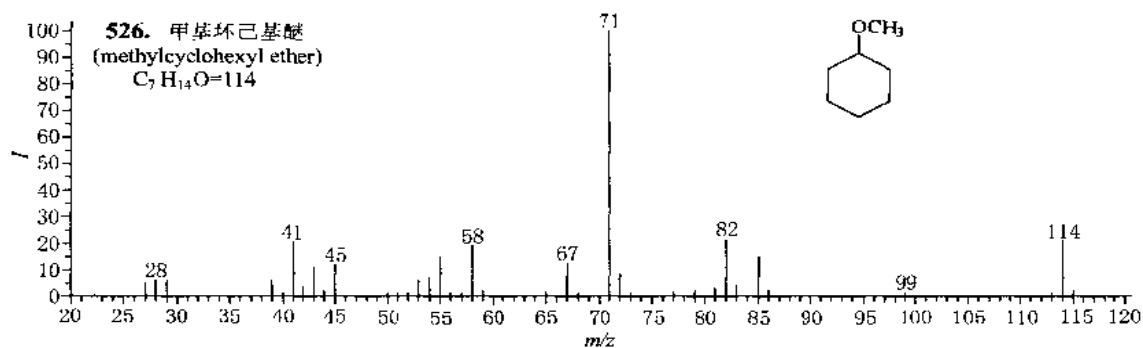




## 二、脂环烷基醚类

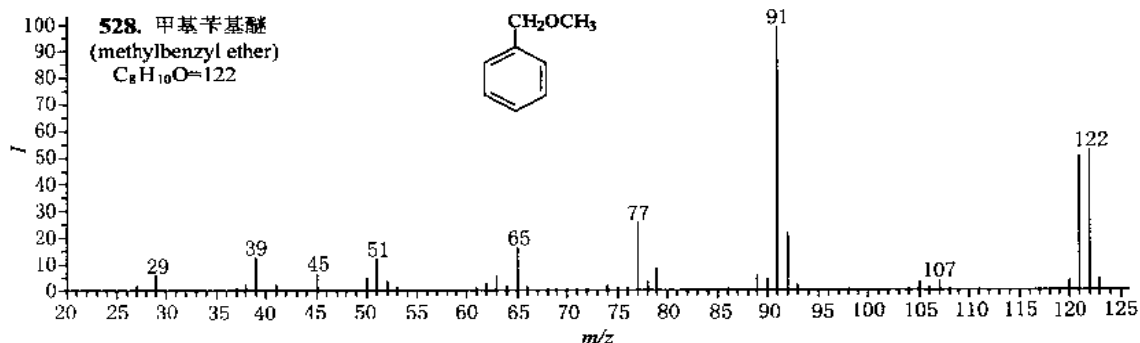
(1) 甲基环己基醚 (526) 的主要离子  $m/z$  71 来自  $C_1-C_2$  键的  $\alpha$ -裂解, 然后转移  $C_6$  上的氢原子到  $C_2$  自由基上, 最后是  $C_1-C_6$  键裂解失去  $C_3H_7$  得到这个离子:  $CH_3O^+-CH-CH=CH_2$ 。

(2) 六-*O*-甲基肌醇 (527) 可能也有同样的裂解, 但要再失一分子甲醛才能得到主要离子  $m/z$  101。



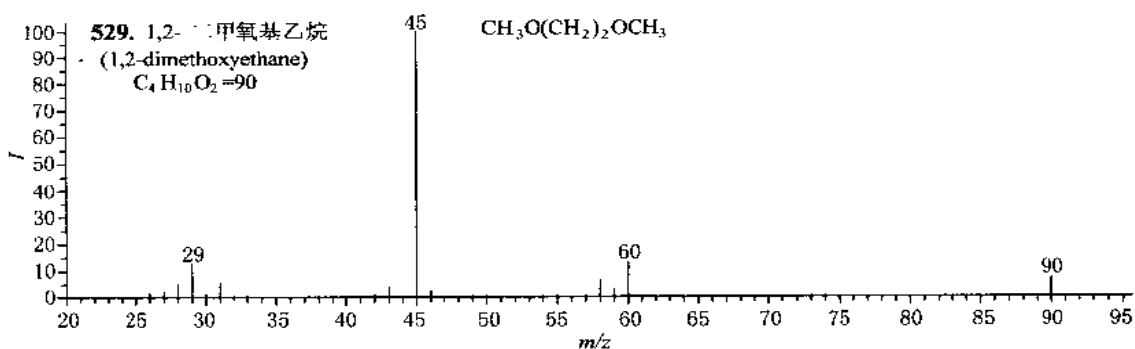
## 三、苄基醚类

甲基苄基醚 (528) 的主要裂解是  $M-H$  和  $M-OCH_3$ 。



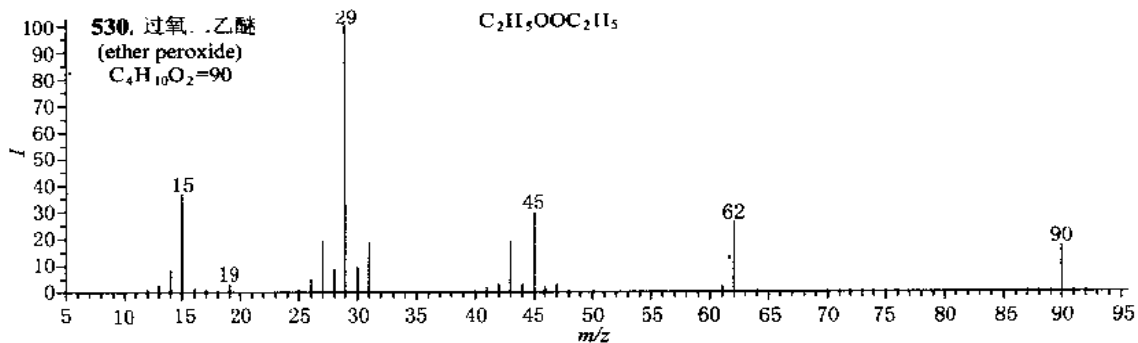
## 四、二醚类

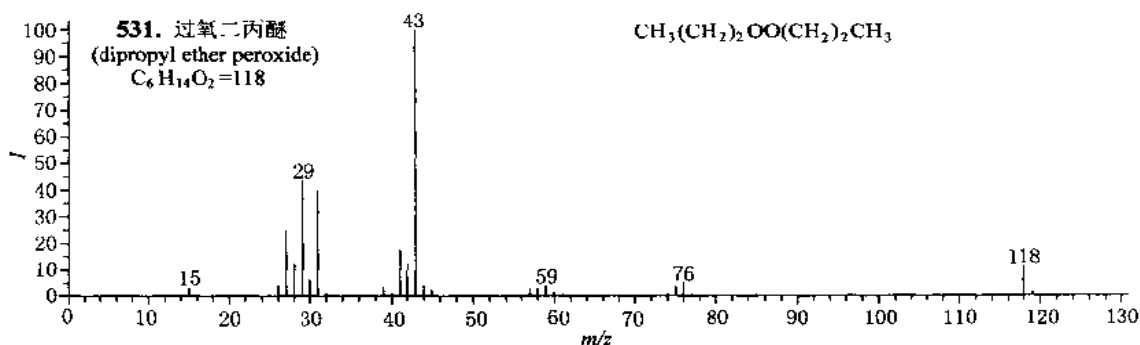
1,2-二甲氧基乙烷 (529) 的主要裂解是  $M-CH_2O$  和分子离子的对半裂解。



## 五、过氧醚类

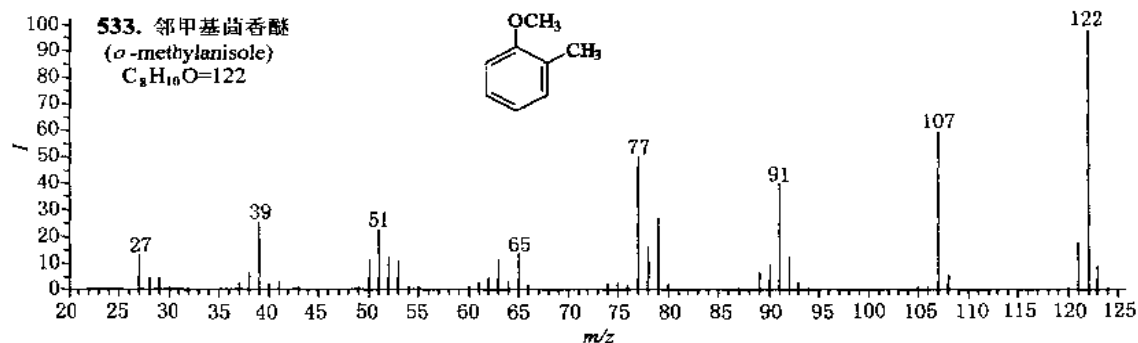
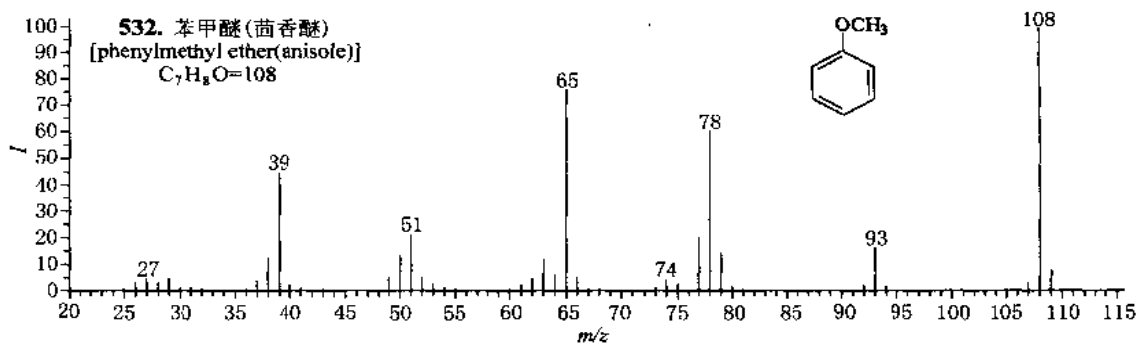
过氧醚类化合物 (530, 531) 的主要离子是烷基离子。

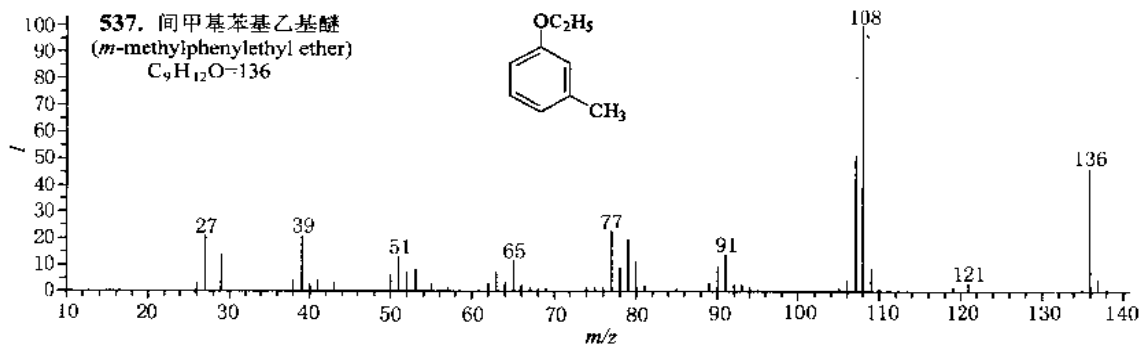
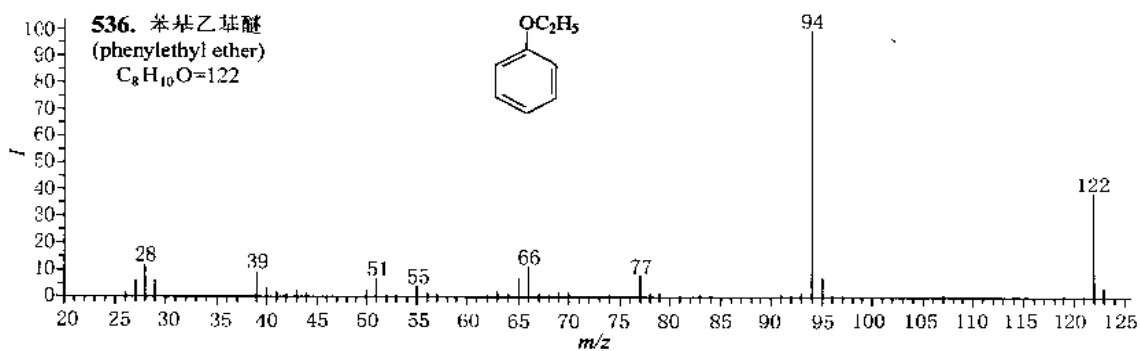
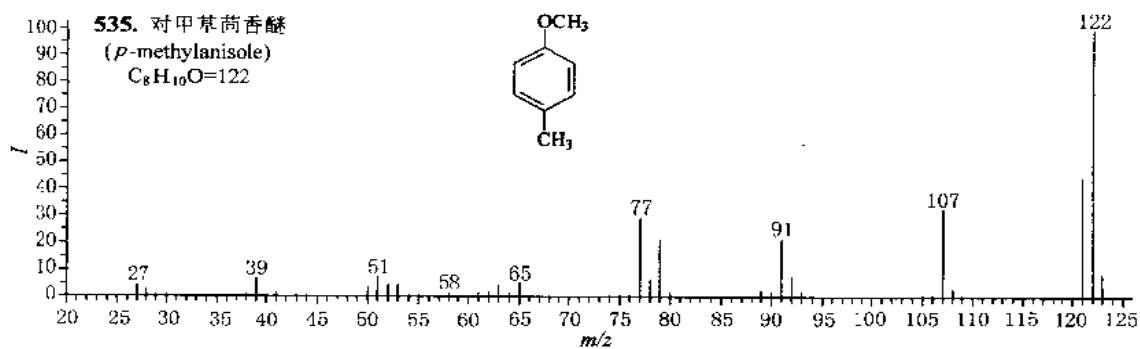
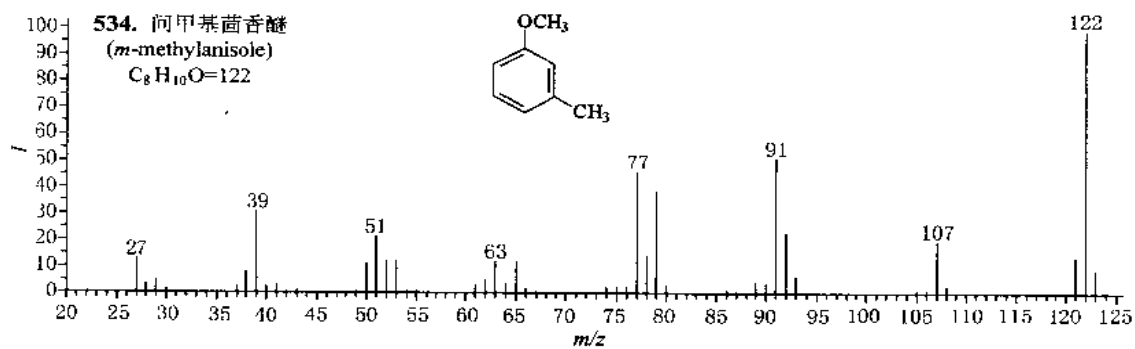




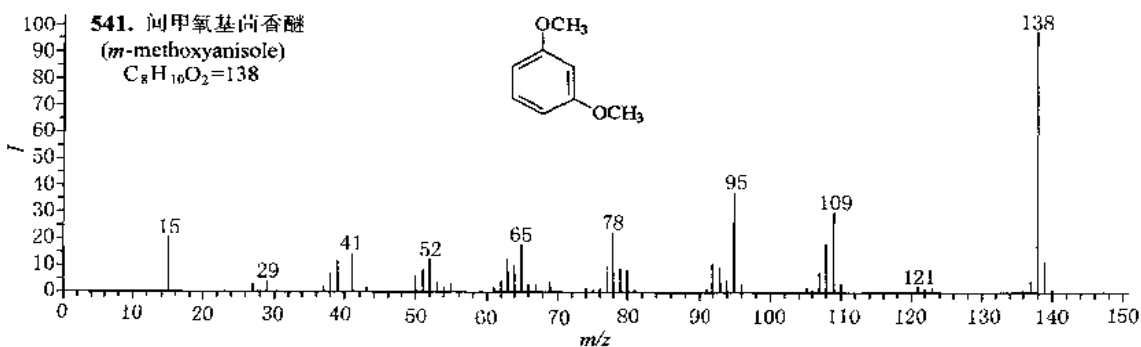
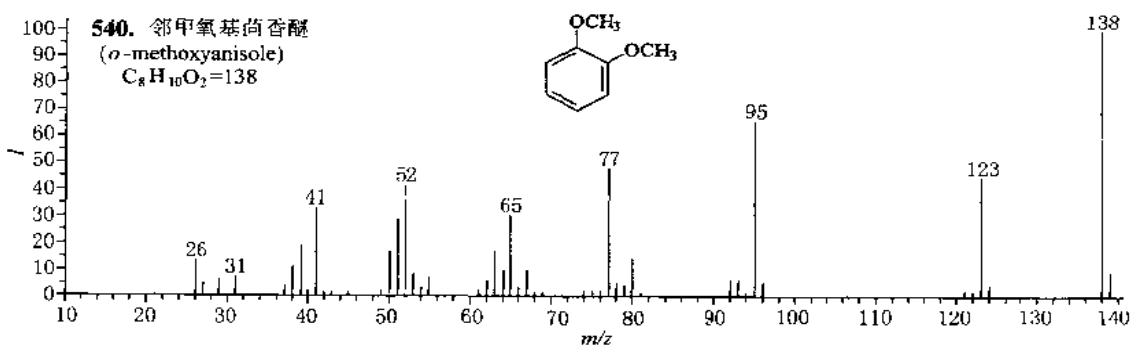
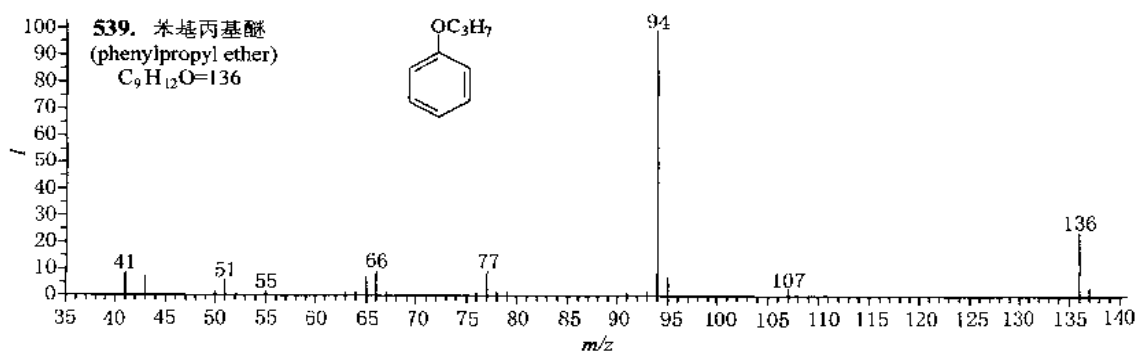
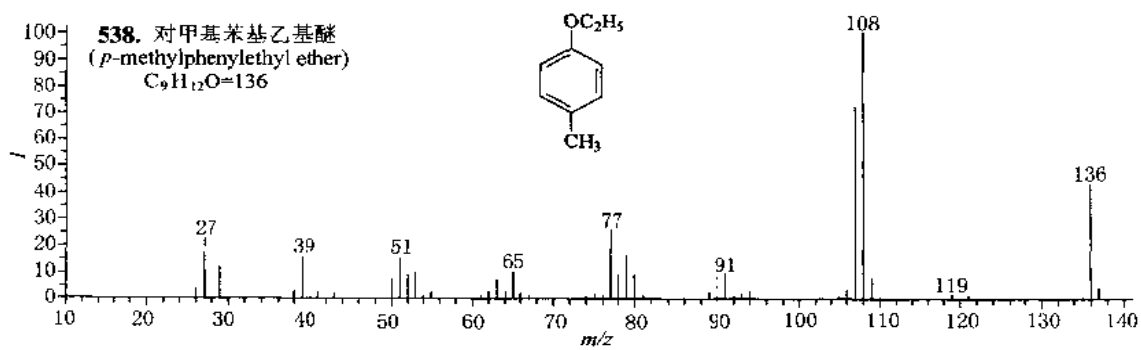
## 六、芳香醚类

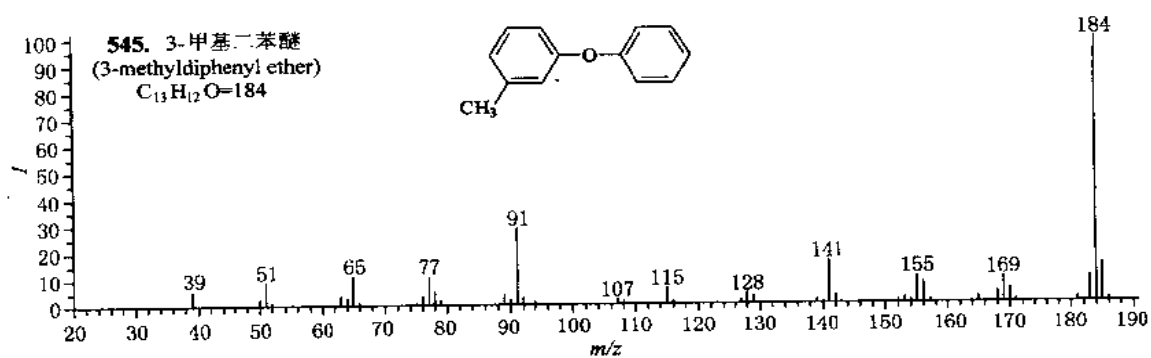
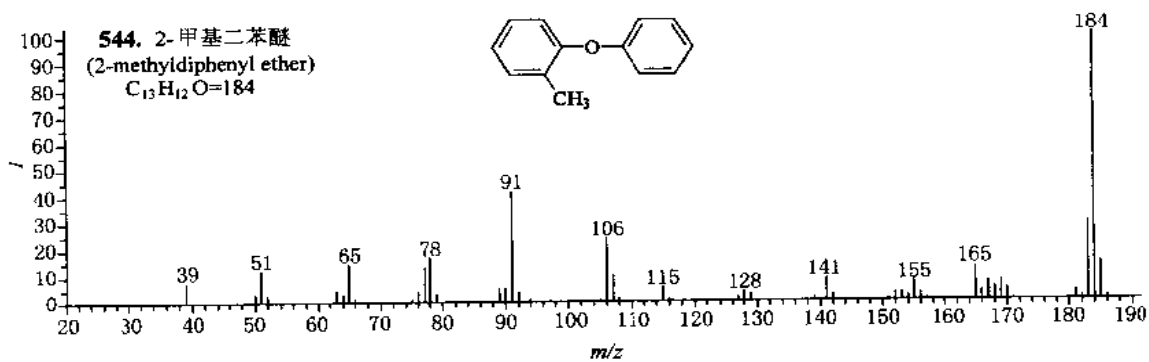
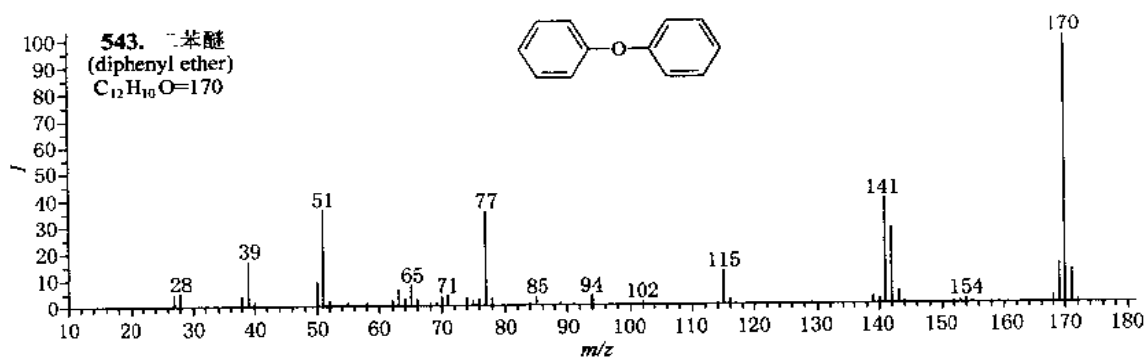
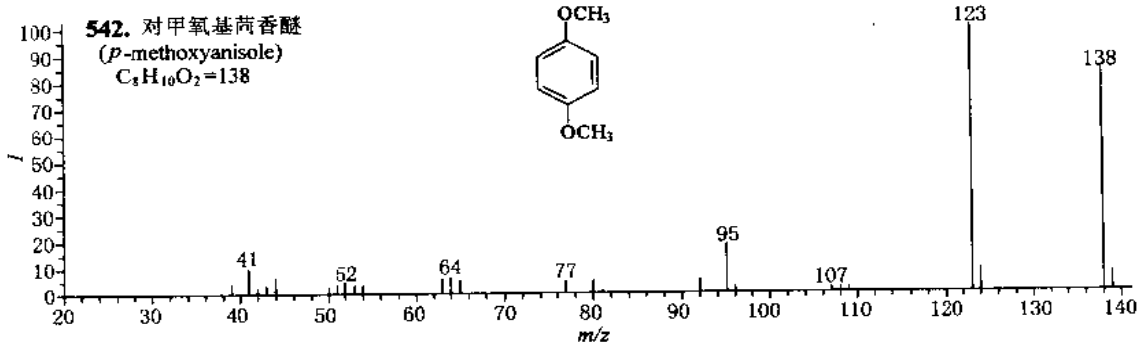
- (1) 苯甲醚 (532) 的主要裂解途径是  $M-CH_3-CO-C_2H_2$  和  $M-CH_2O$ 。
- (2) 甲基苯甲醚类 (533~535) 的主要裂解途径是  $M-CH_3-CO-H$  和  $M-OCH_3$ 。
- (3) 自苯基乙基醚开始, 以上的醚类 (536~539) 能进行侧链的麦氏重排裂解, 生成酚性离子, 若再有甲基取代, 生成的酚性离子能再失氢原子。
- (4) 苯二甲醚类 (540~542) 的主要裂解是  $M-CH_3$  和  $M-CH_3-CO$ , 3 个异构体能用质谱区别。
- (5) 二苯醚类 (543~546) 的主要裂解是失去苯氧基。

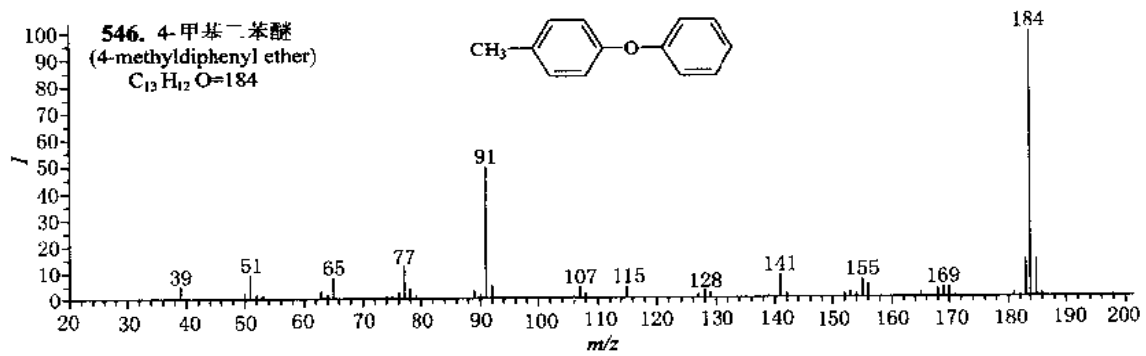












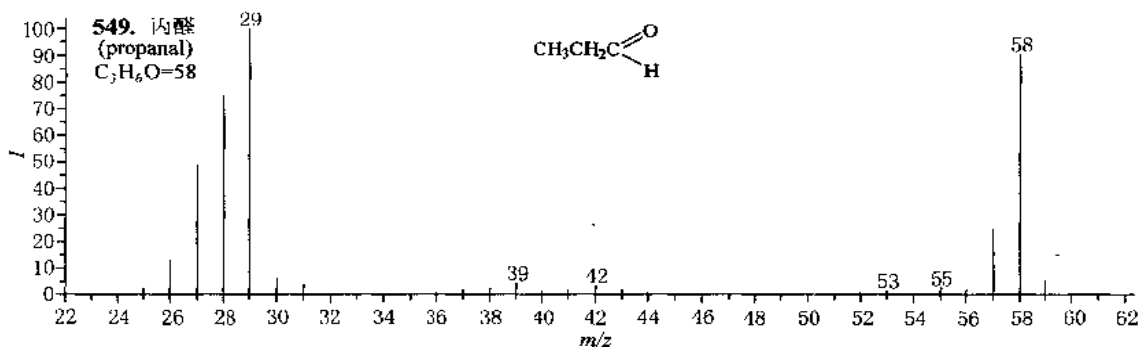
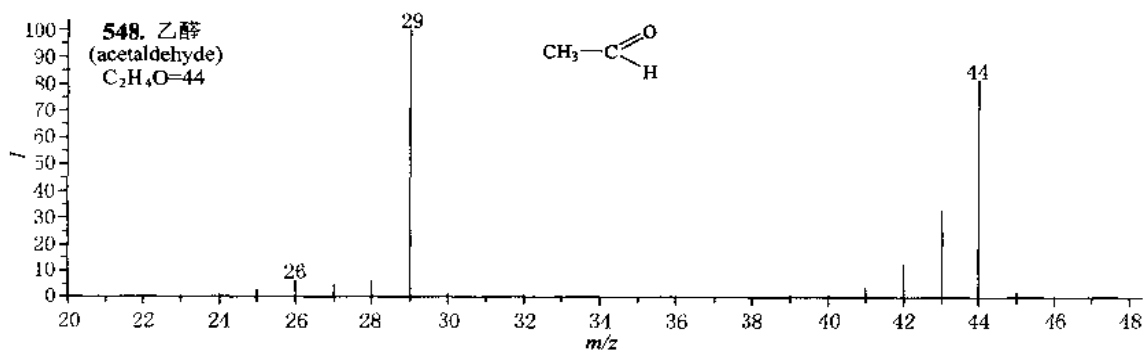
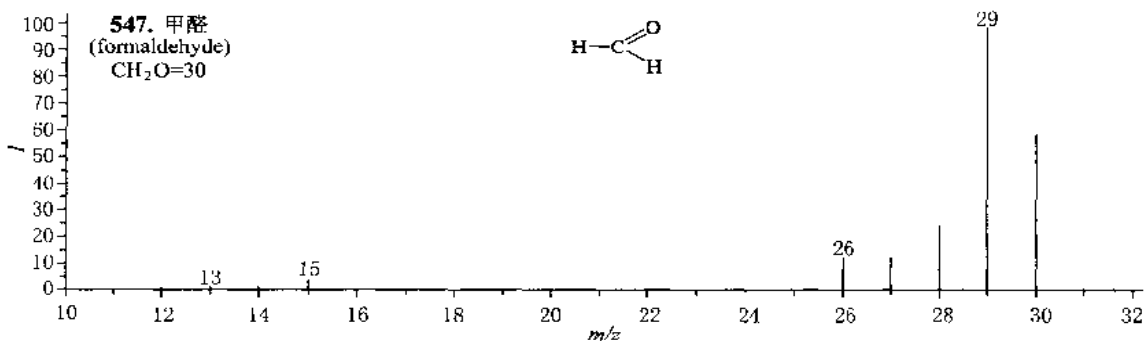
# 第六章 醛 和 酮

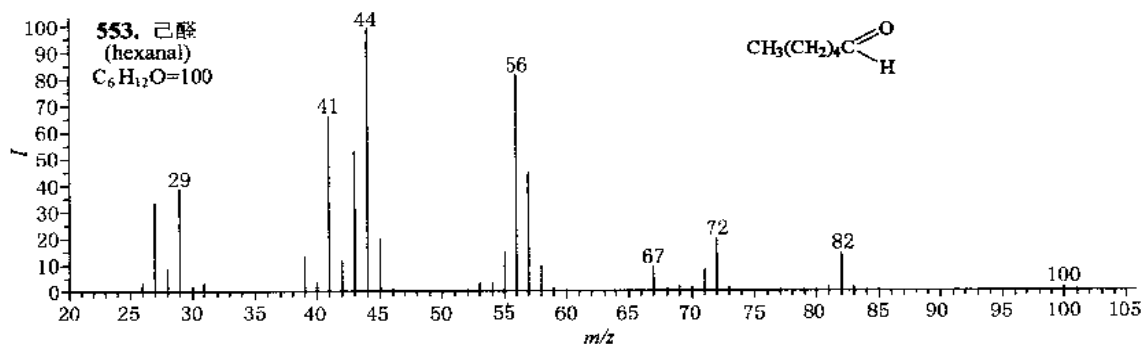
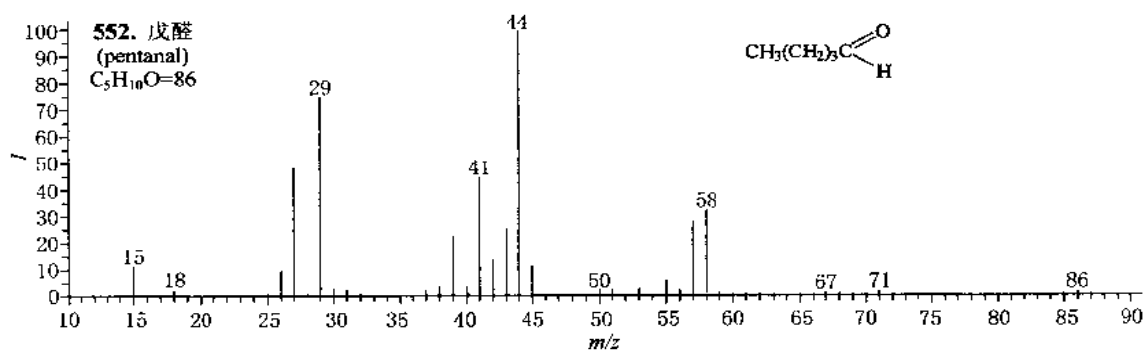
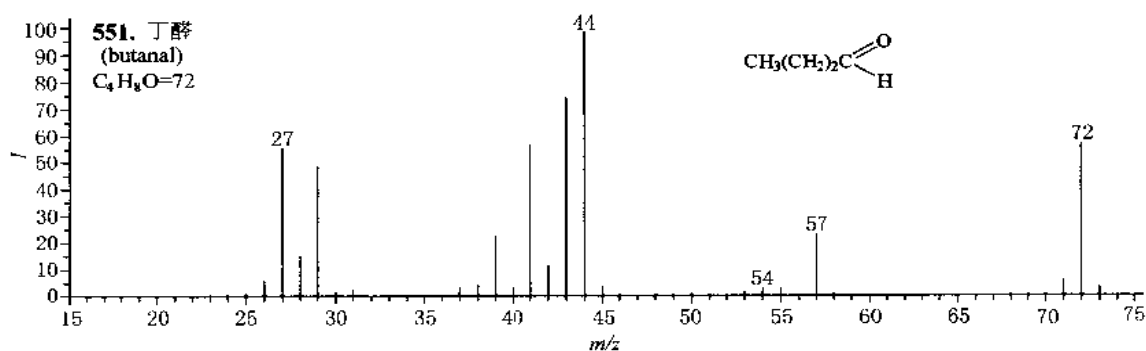
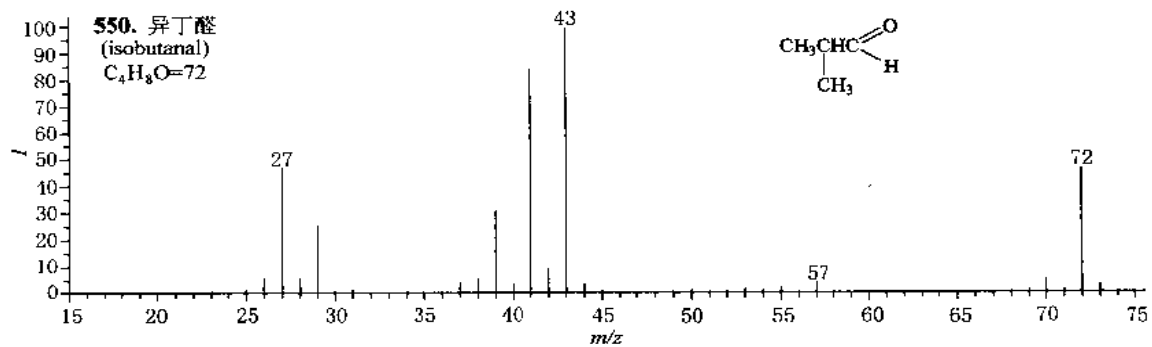
## 第一节 醛 类

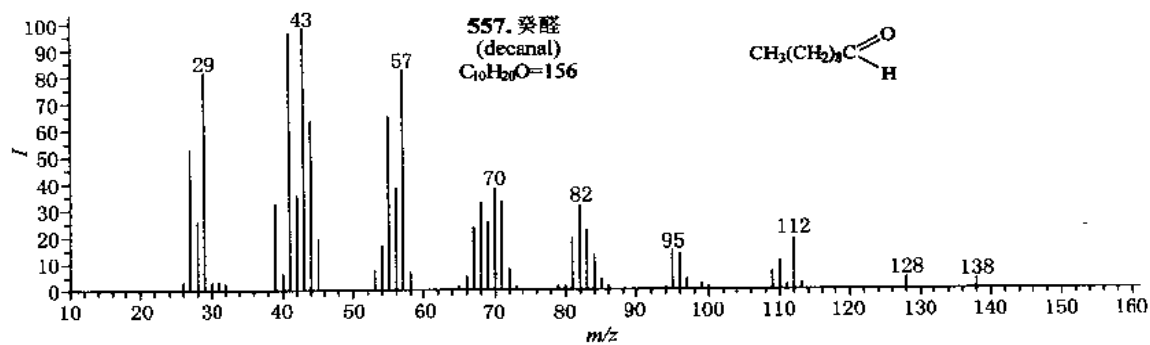
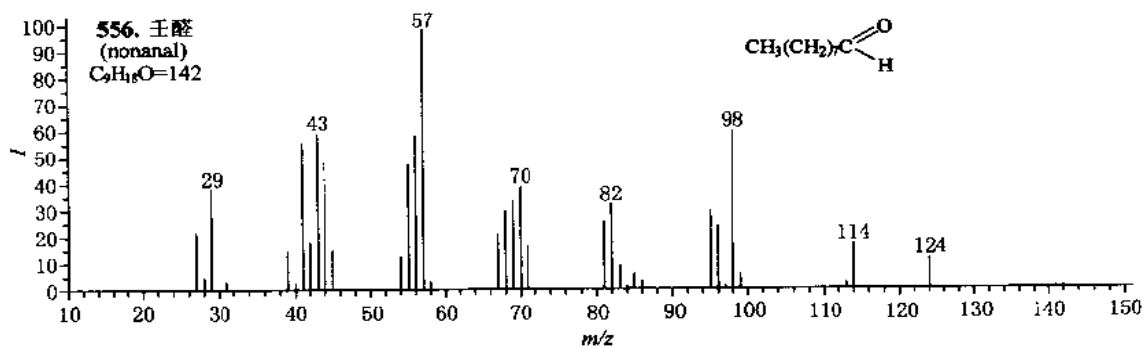
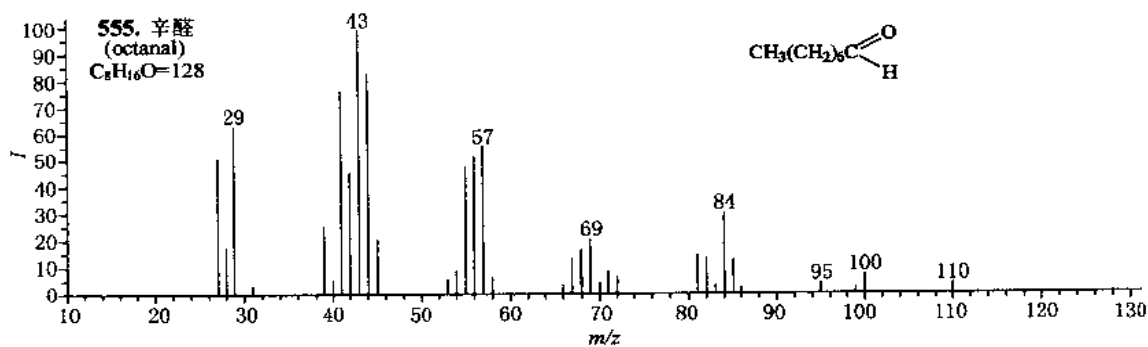
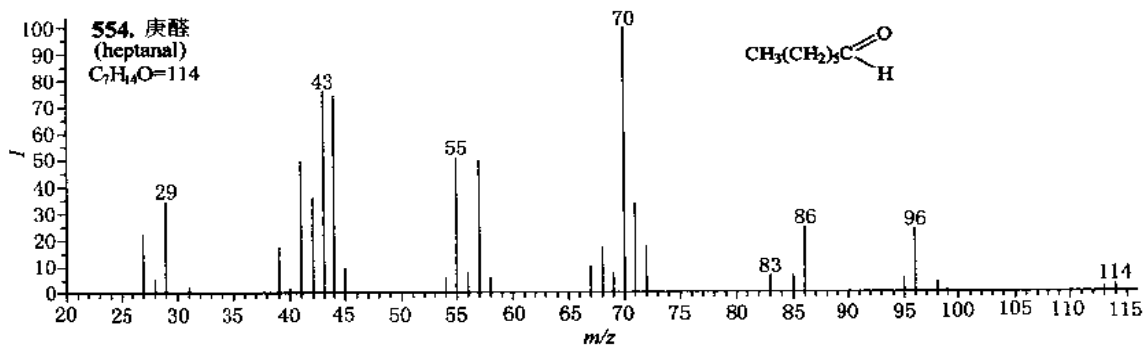
### 一、脂肪醛类

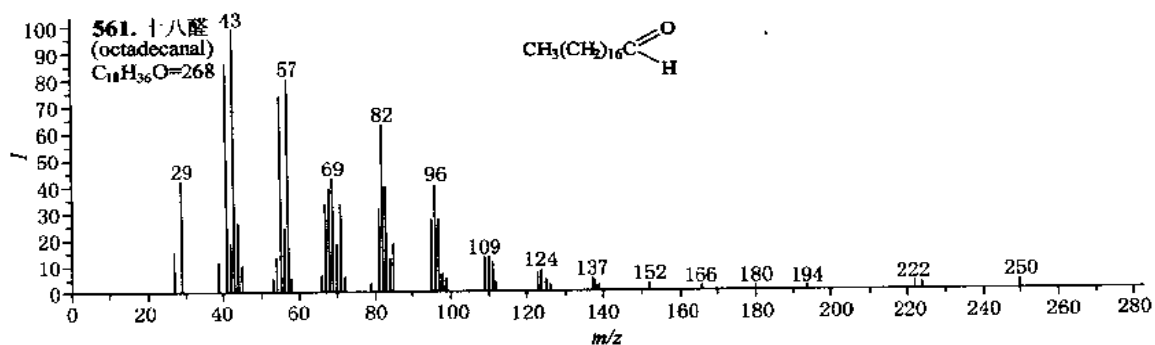
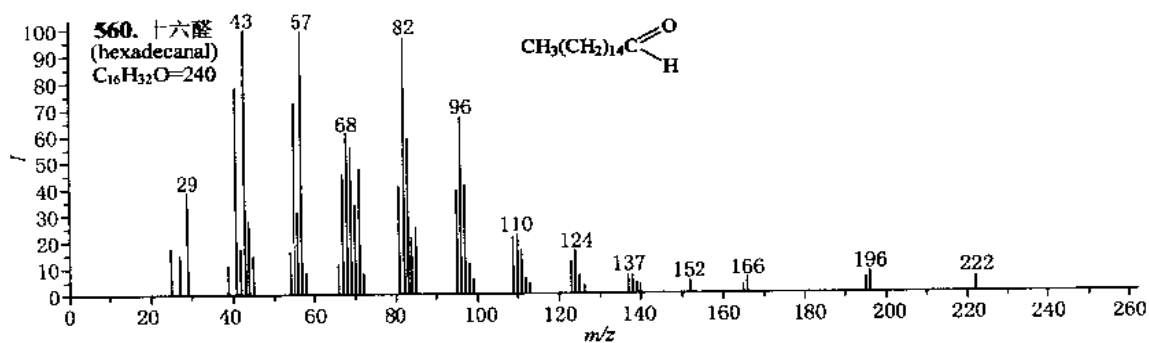
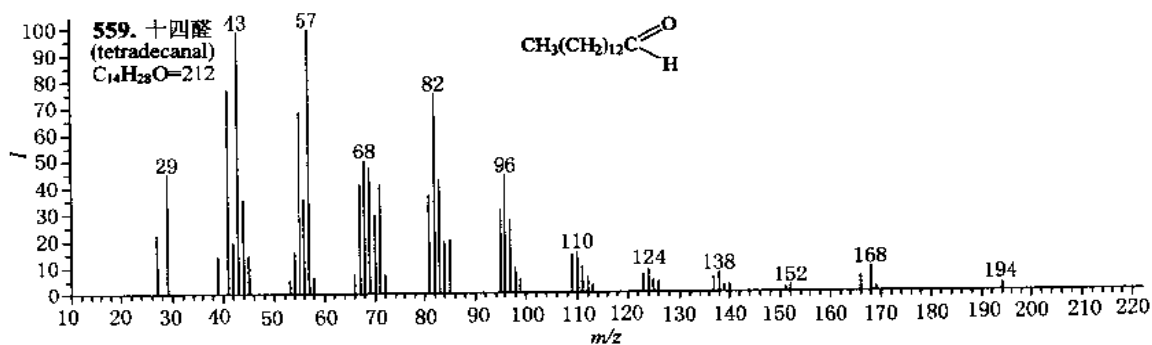
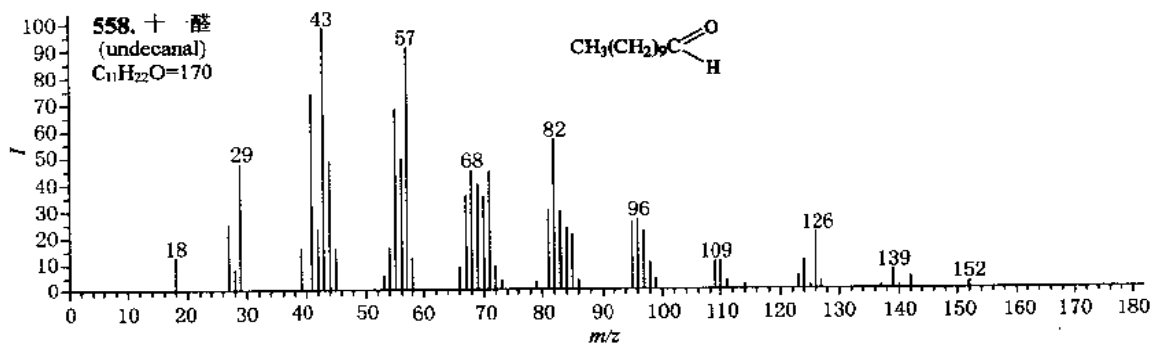
(1) 甲醛 (547)、乙醛 (548)、丙醛 (549) 和异丁醛的主要裂解是  $M-H$ ,  $M-CH_3$  和  $M-C_2H_5$ 。

(2) 自丁醛 (551) 起, 以上各直链醛都能进行麦氏重排裂解, 生成含氧离子  $m/z$  44 和不含氧离子  $M-44$  两片互补离子。



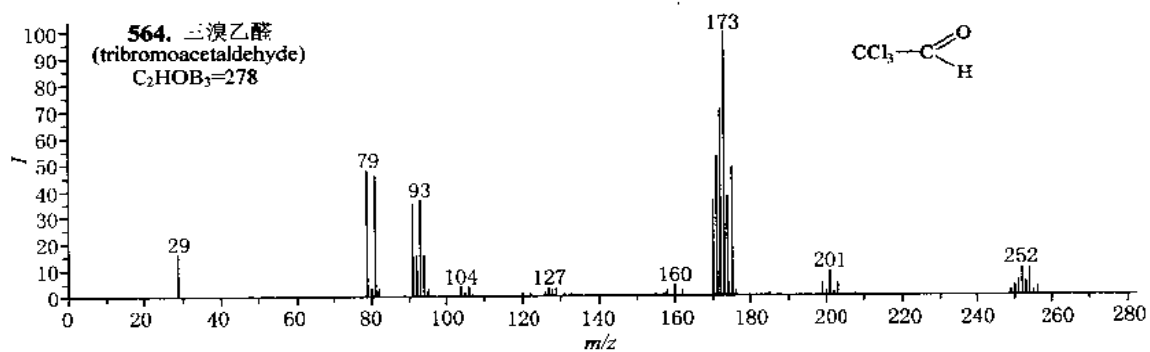
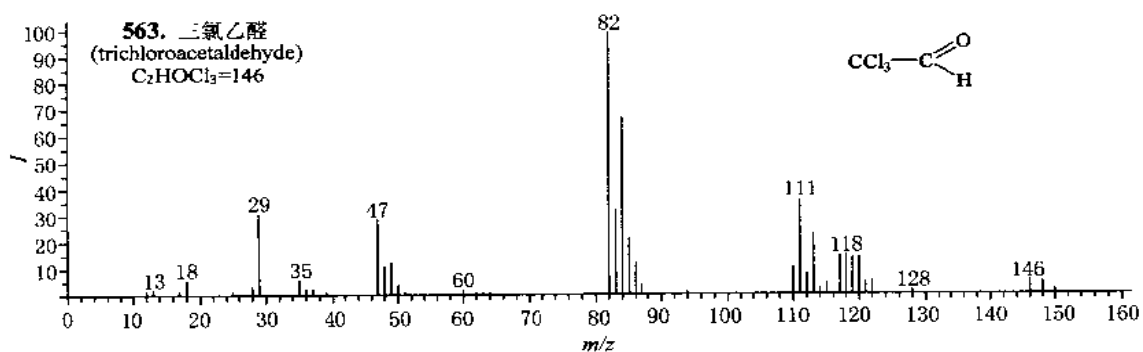
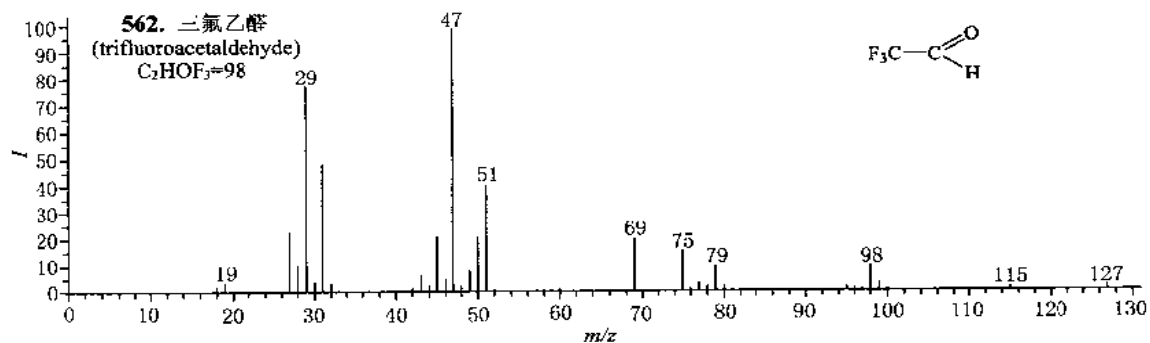






## 二、卤代脂肪醛类

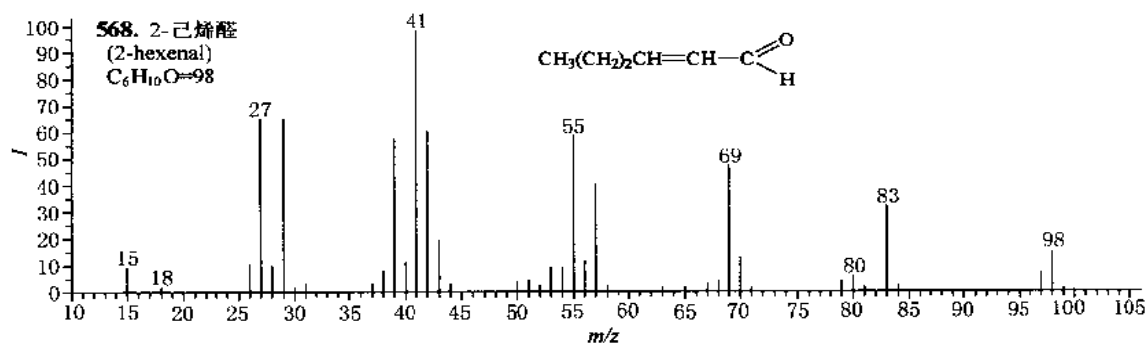
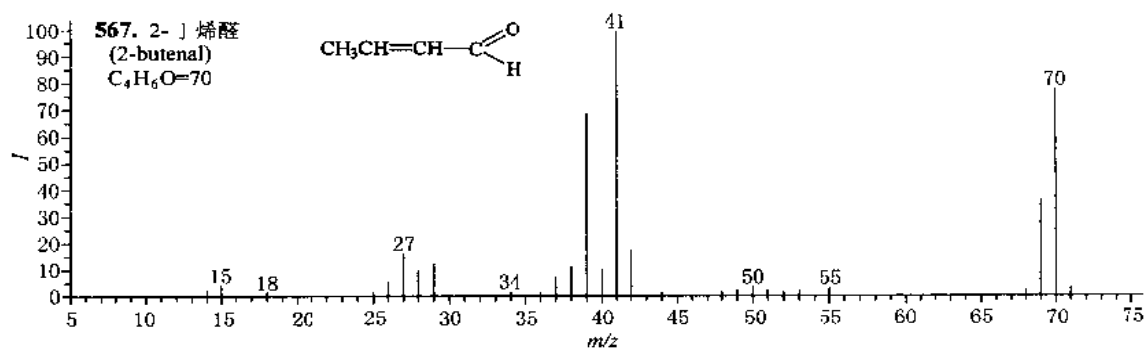
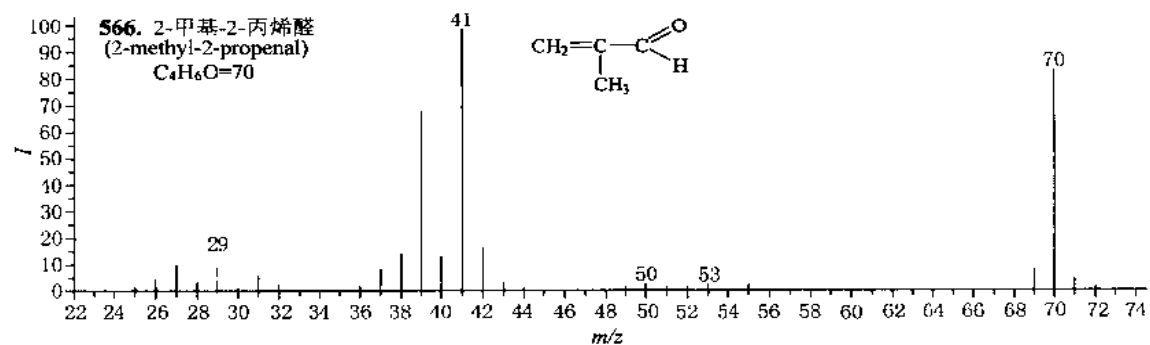
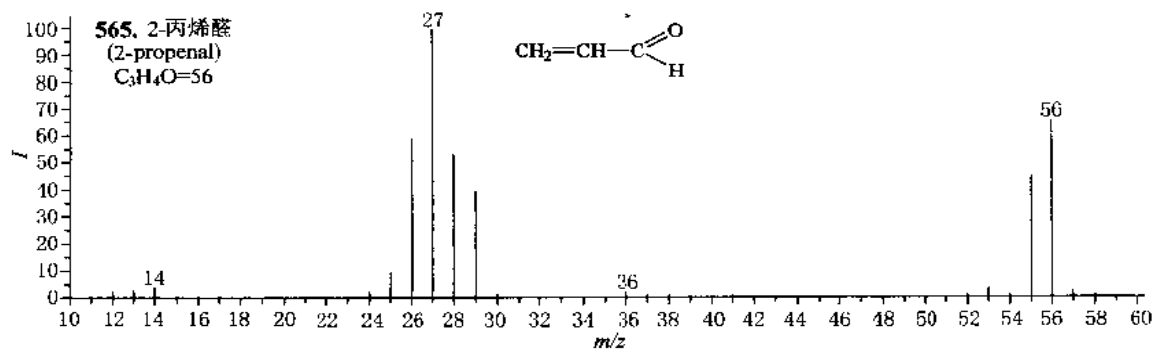
3个三卤乙醛(562~564)的主要裂解是 $M-X$ ,  $M-CHO$ , 并有 $CX_3$ ,  $CX_2$ 和 $CX$ 离子, 甲酰基离子也存在。



## 三、烯醛类

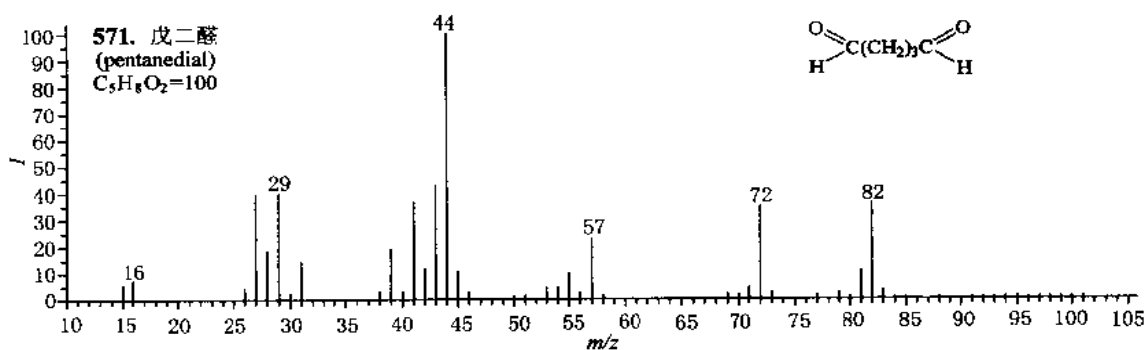
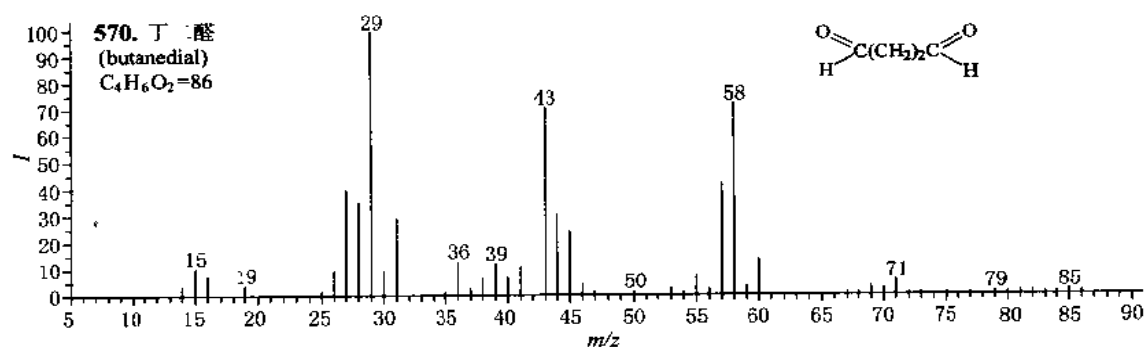
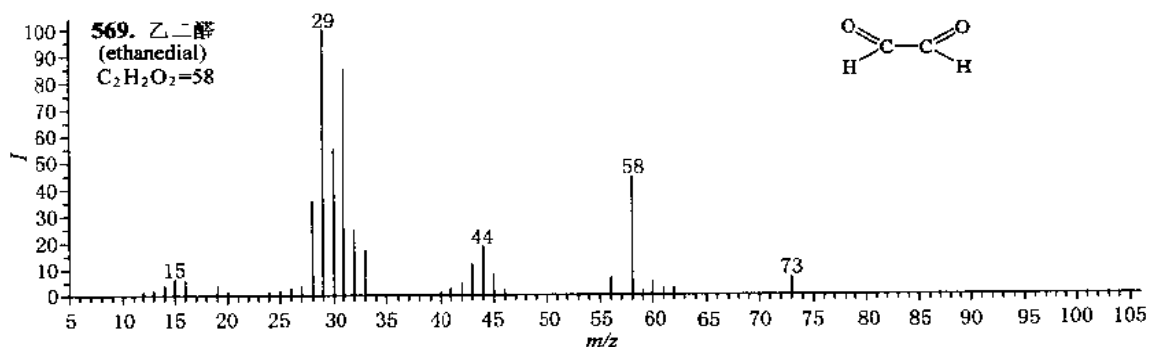
几个烯醛类化合物(565~568)都出现了 $M-CHO$ 离子。





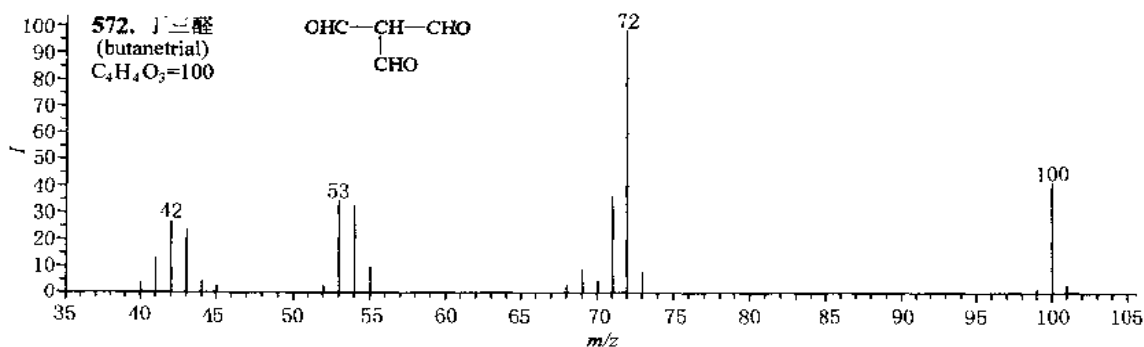
## 四、二 醛 类

二醛类 (569~571) 都有  $M-CHO$  离子, 戊二醛能进行麦氏重排裂解生成离子  $m/z$  44。



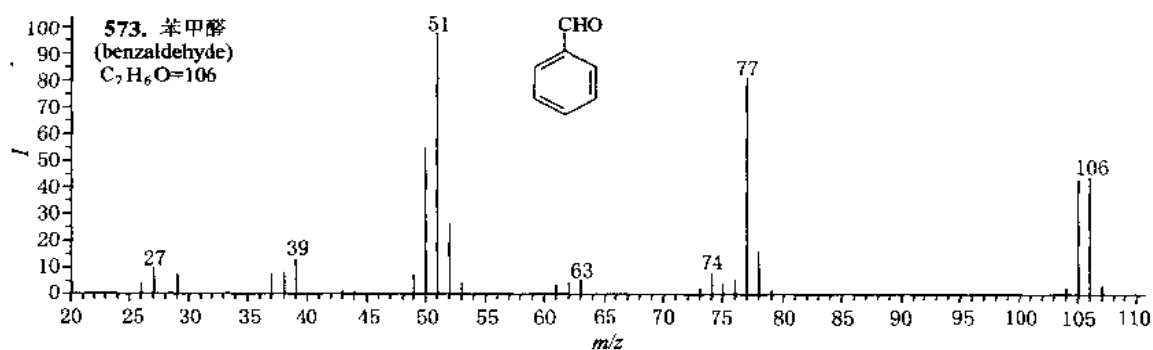
## 五、三 醛 类

丁三醛 (572) 的主要裂解是失去一氧化碳和甲酰基。



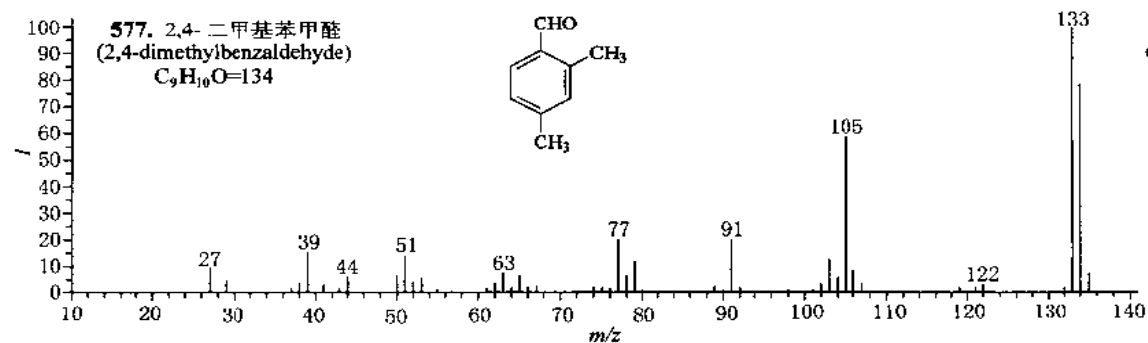
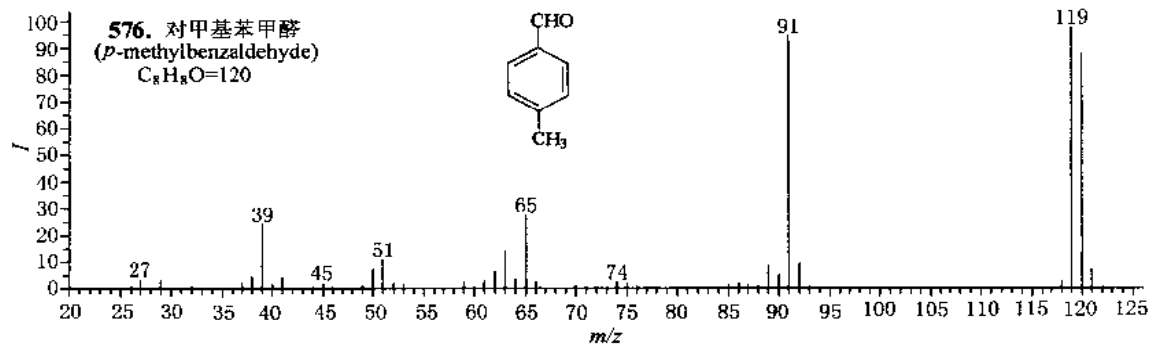
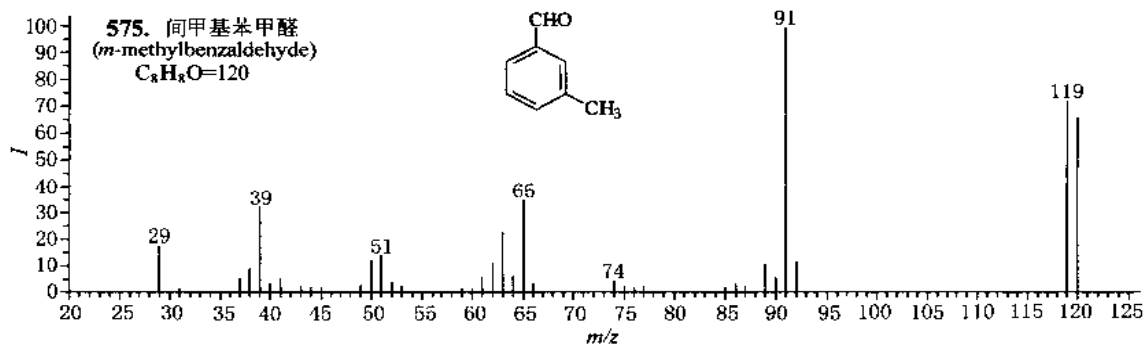
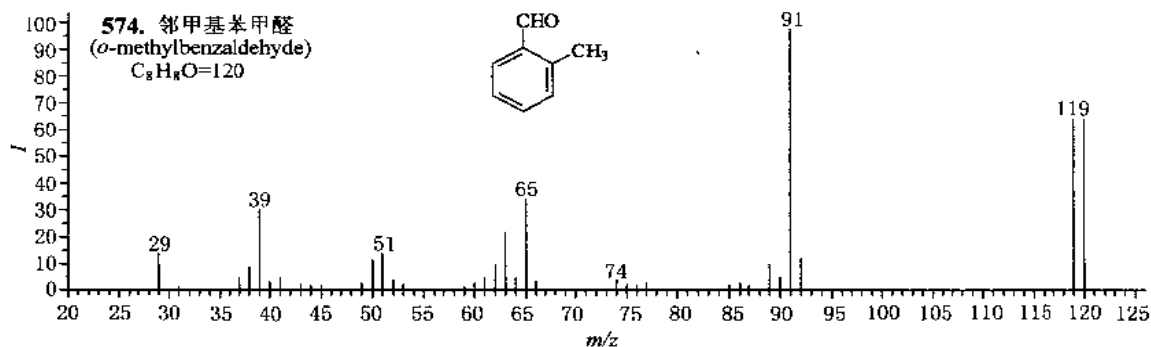
## 六、芳香醛类

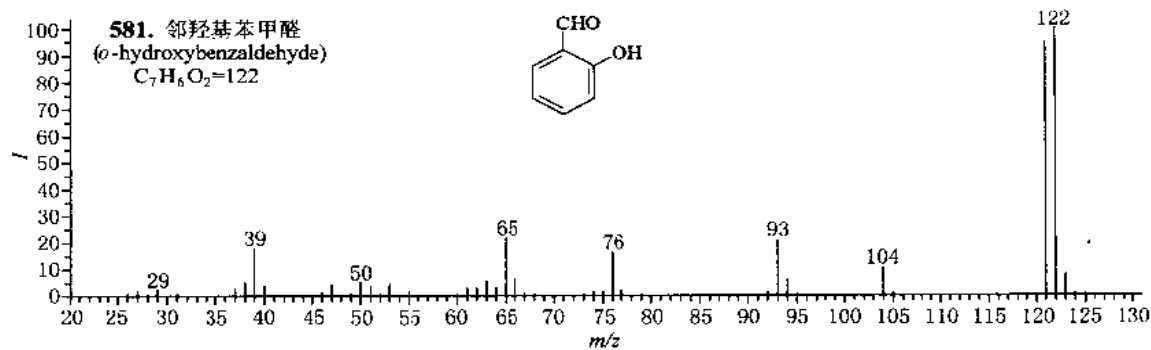
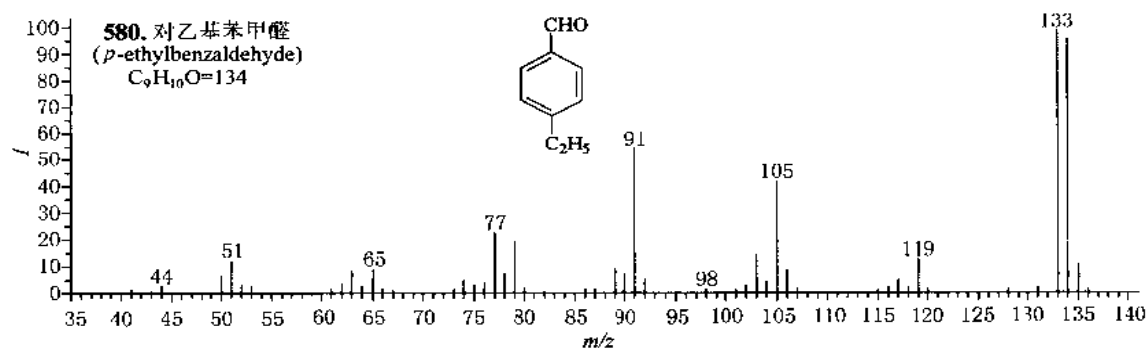
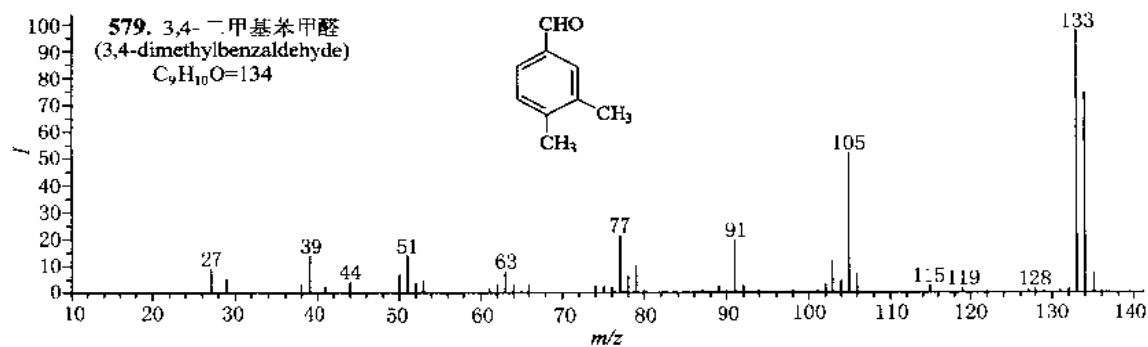
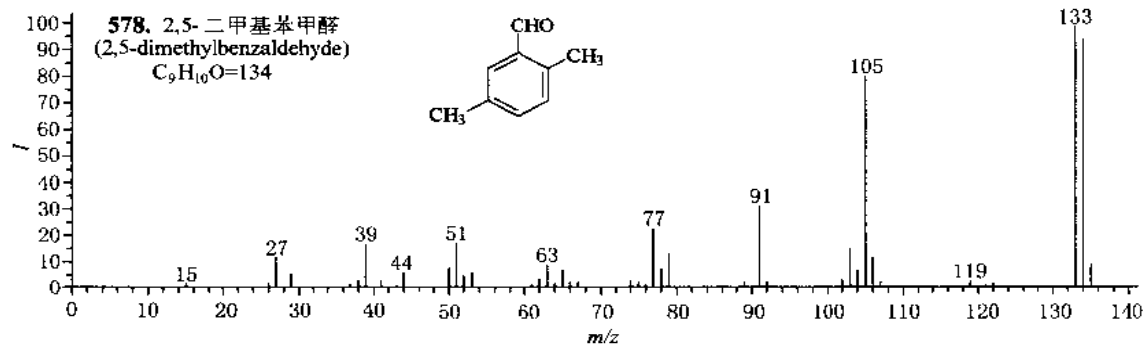
- (1) 苯甲醛 (573) 的裂解途径是  $M-H-CO-C_2H_2$ 。
- (2) 甲基取代的苯甲醛类 (574~576) 的裂解是再多失去一分子乙炔, 即  $M-H-CO-C_2H_2-C_2H_2$ 。
- (3) 二甲基取代的苯甲醛类 (577~579) 主要裂解是  $M-H-CO$ 。
- (4) 乙基苯甲醛 (580) 有两条裂解途径, 即  $M-H-CO$  和  $M-CH_3-CO$ 。
- (5) 羟基苯甲醛类 (581~583) 的裂解类似于甲基取代者, 即  $M-H-CO-C_2H_2-C_2H_2$ , 但邻位取代者能失水, 对位取代者  $M-H$  离子最强, 因有共振离子形成。
- (6) 甲氧基苯甲醛类 (584~586) 的裂解次序为  $M-H-CO-CH_2O$ , 离子  $m/z$  92 来自  $M-CH_3-CHO$ 。
- (7) 甲基和邻位羟基二取代的苯甲醛类 (587~589), 主要裂解途径有两条, 即  $M-H-CO-CO$  和  $M-H_2O-CO$ 。甲基和非邻位羟基二取代的苯甲醛类 (590, 591) 只有第一条裂解途径。
- (8) 3-羟基-4-甲氧基苯甲醛也有两条裂解途径, 即  $M-H-CO-CO-CO$  和  $M-CH_3-CO-CO-CO$ 。
- (9) 氟代苯甲醛类 (593, 594) 的裂解途径是  $M-H-CO-F$ , 氯代苯甲醛类 (595~597) 的裂解途径是  $M-H-CO-Cl-C_2H_2$ 。
- (10) 亚硝基苯甲醛 (598) 的裂解途径是  $M-NO-CO-C_2H_2$ 。
- (11) 二甲氨基苯甲醛 (599) 的主要裂解是  $M-H$ , 次要裂解是  $M-N(CH_3)_2-CO$ 。
- (12) 胡椒醛 (600) 的裂解途径是  $M-H-CO-CH_2O-C_2H_2$  和  $M-H-CH_2O-CO-C_2H_2$ 。

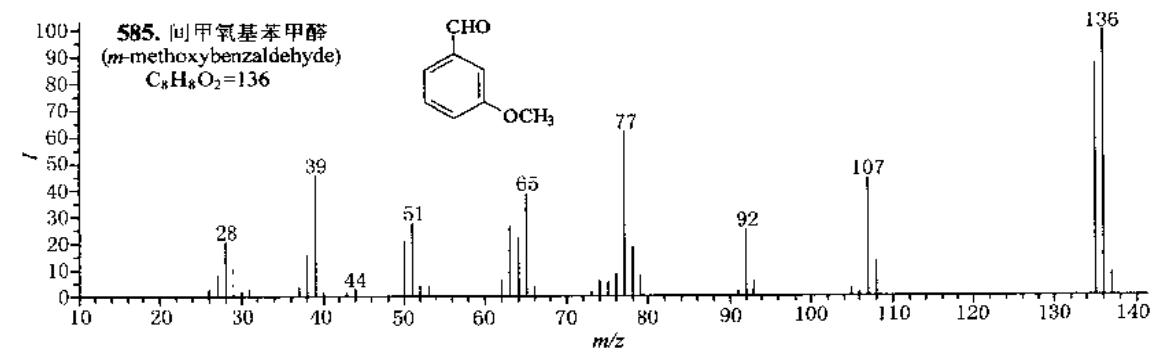
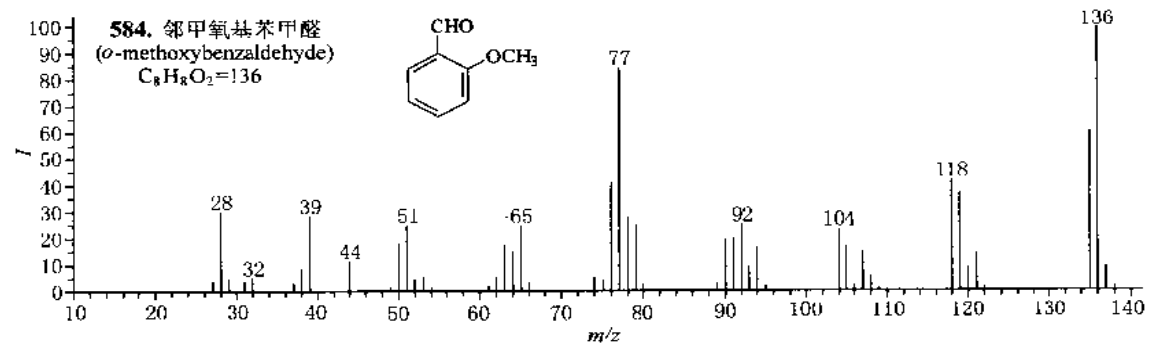
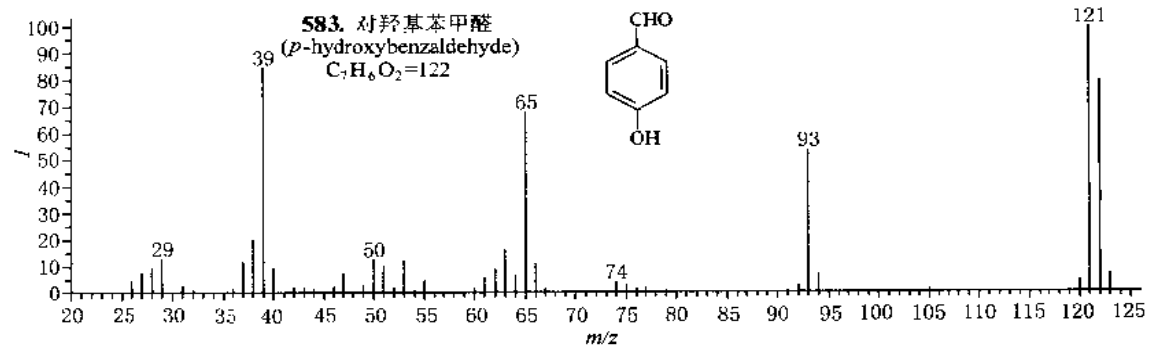
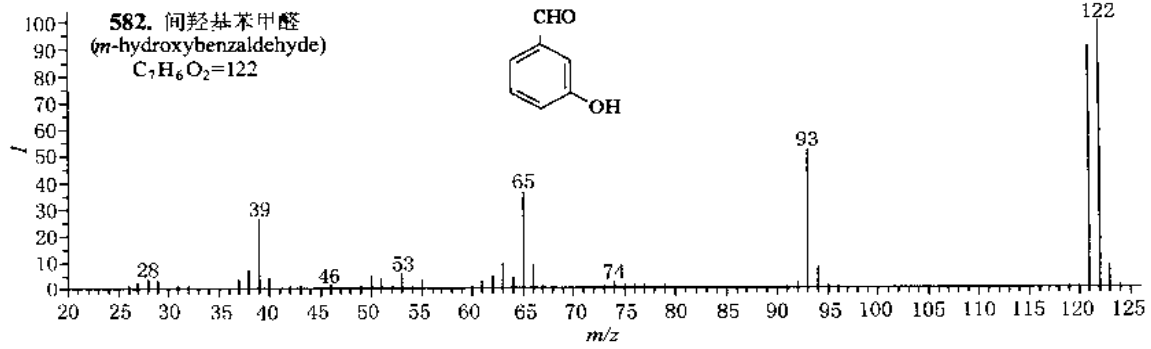


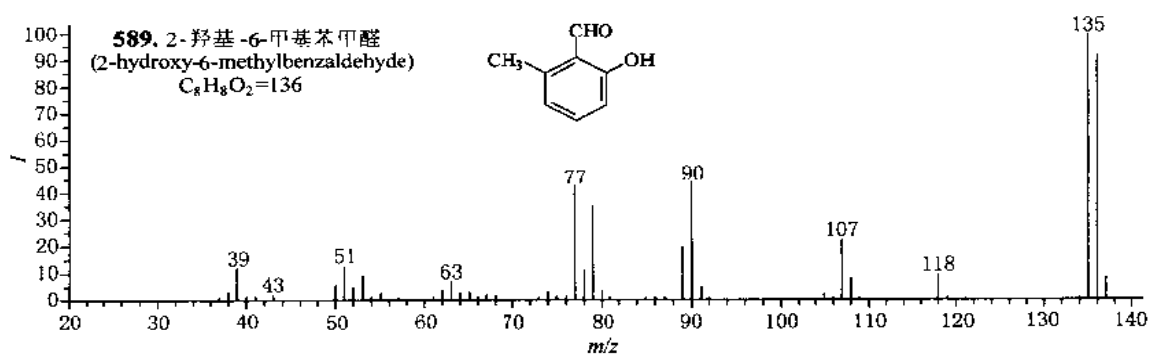
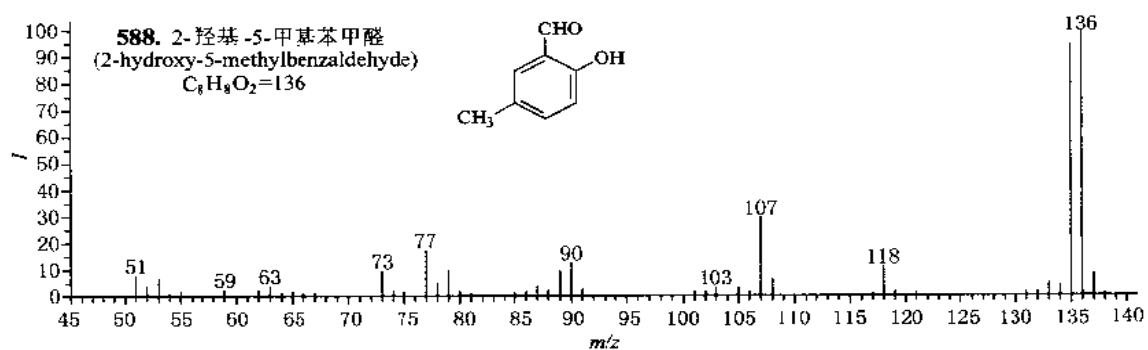
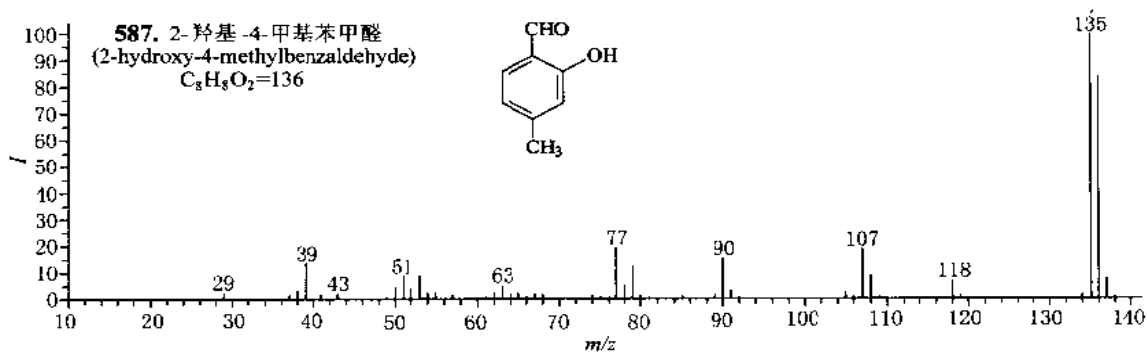
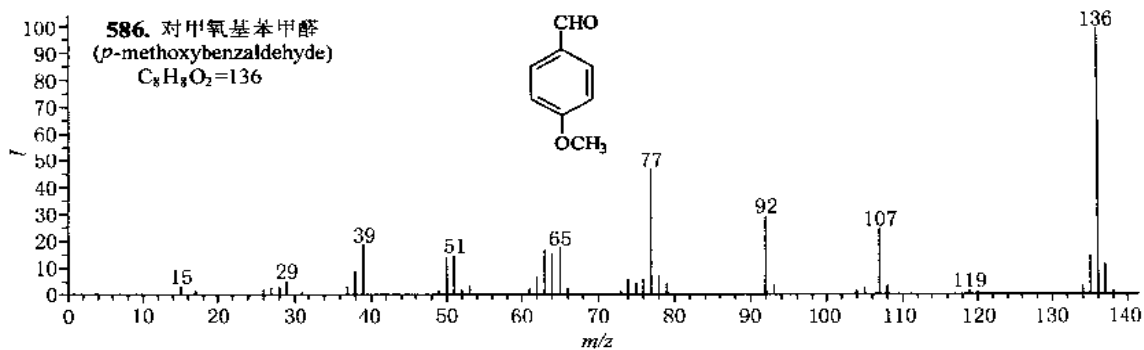
(13) 苯二甲醛类 (601, 602) 的主要裂解途径是  $M-H-CO-CO-C_2H_2$ , 邻苯二甲醛另有  $M-CO-CO$ 。

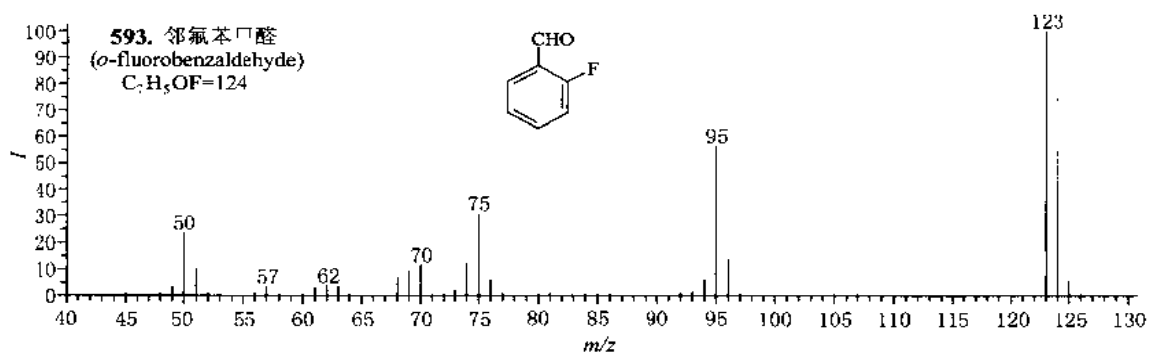
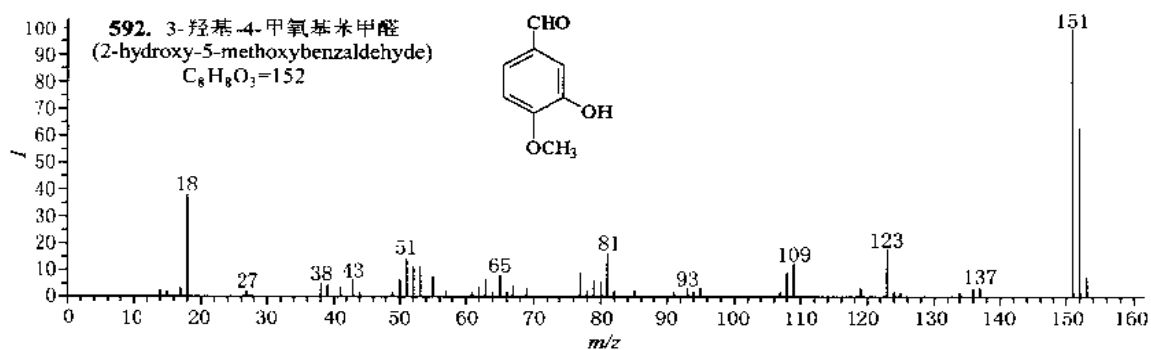
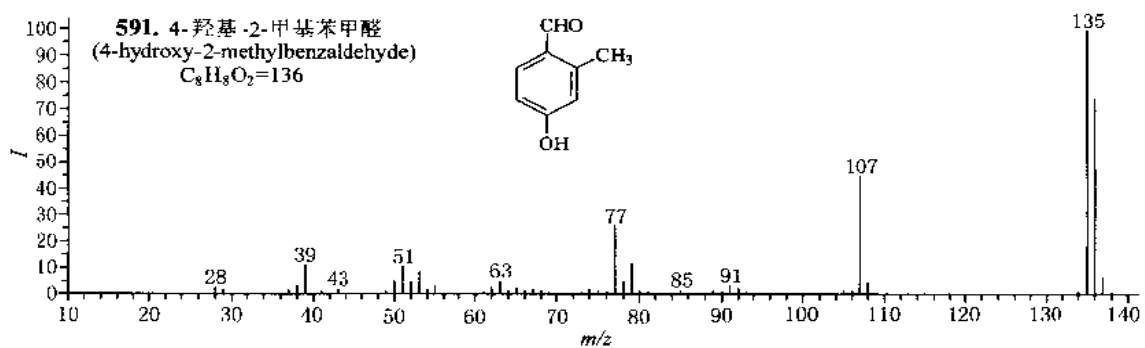
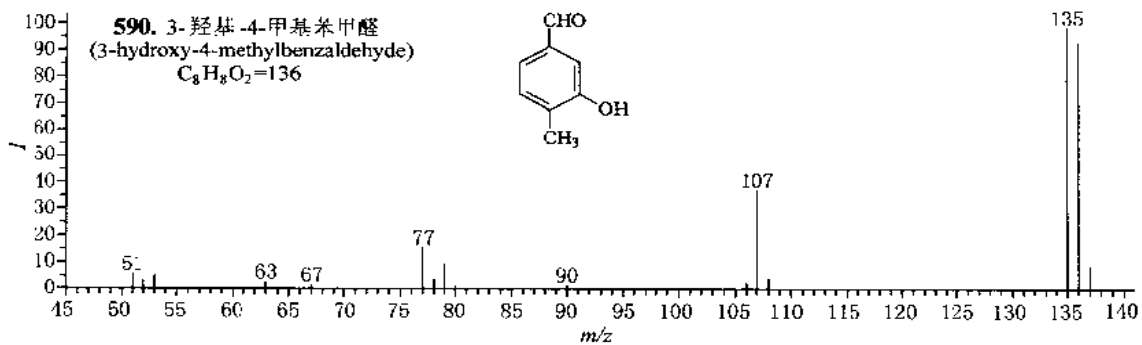
(14) 呋喃醛类 (603~607) 的  $M-H$  离子较强, 裂解途径是先失甲酰基, 然后是失一氧化碳, 直到所有的氧原子失尽为止。



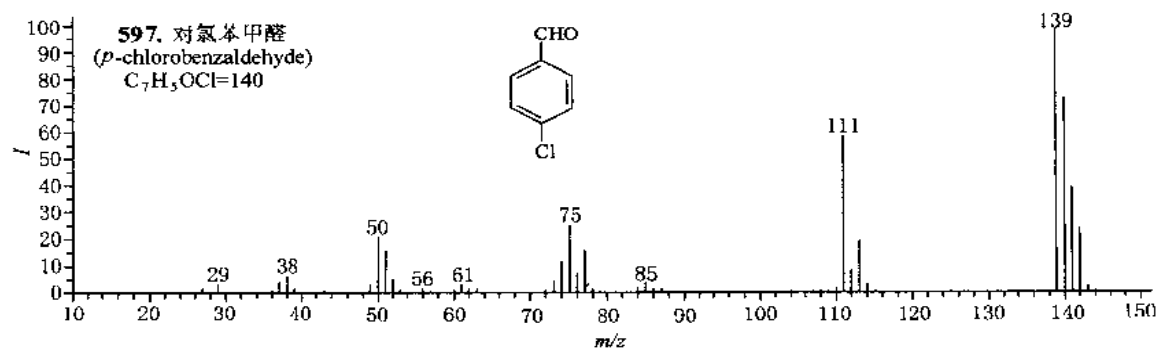
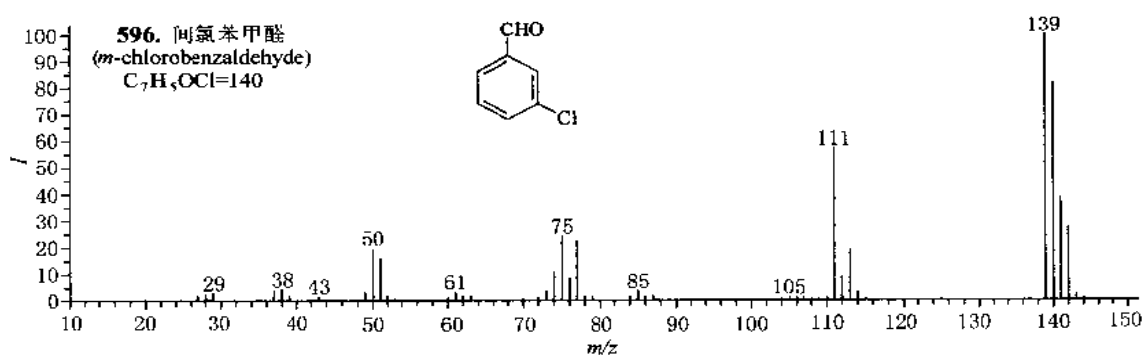
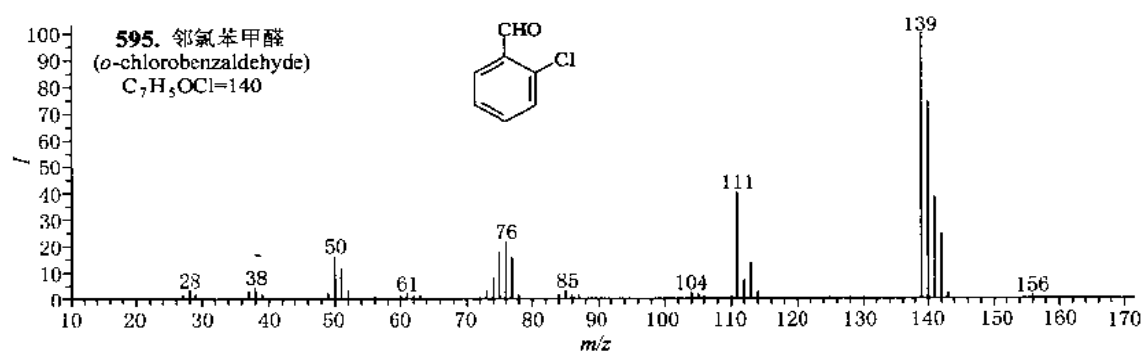
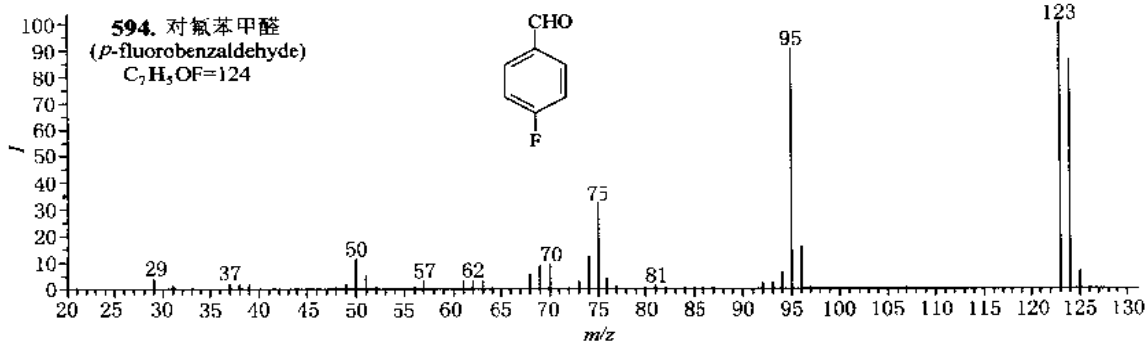


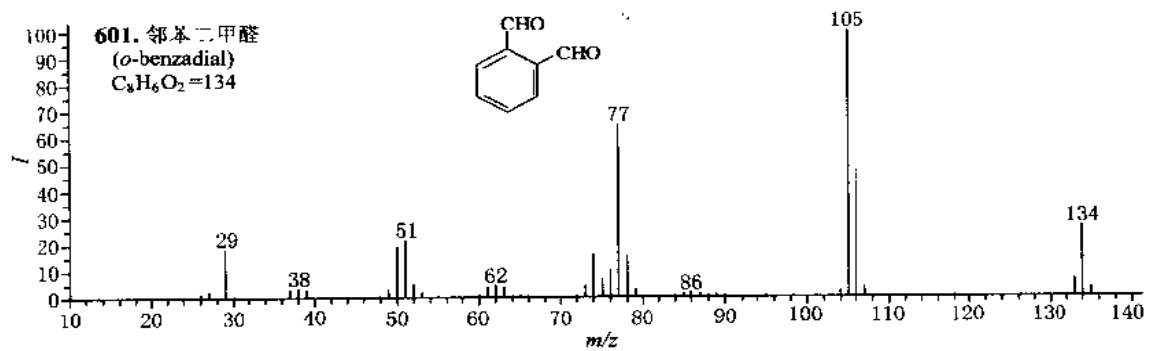
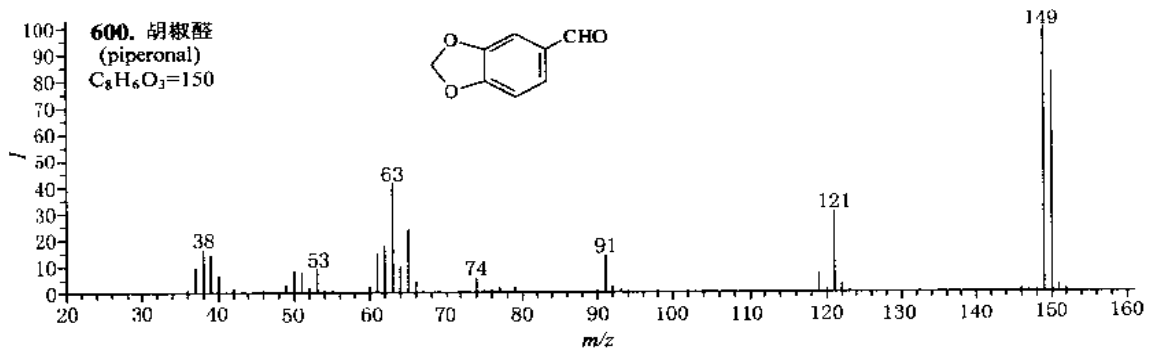
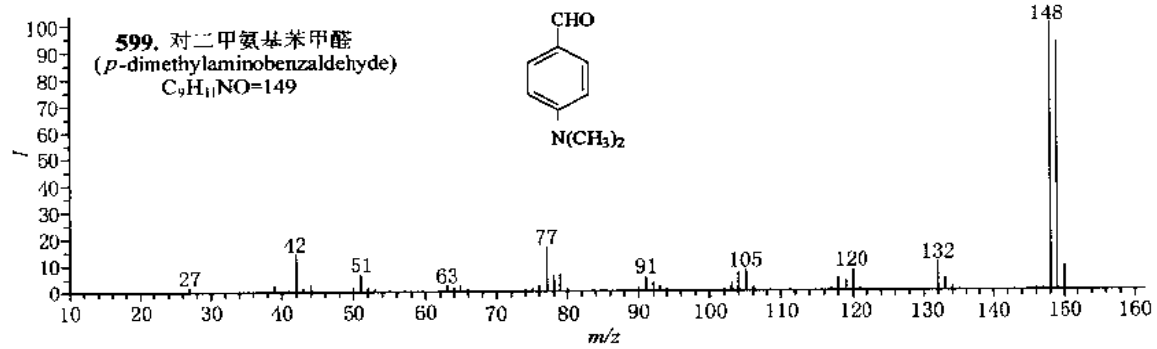
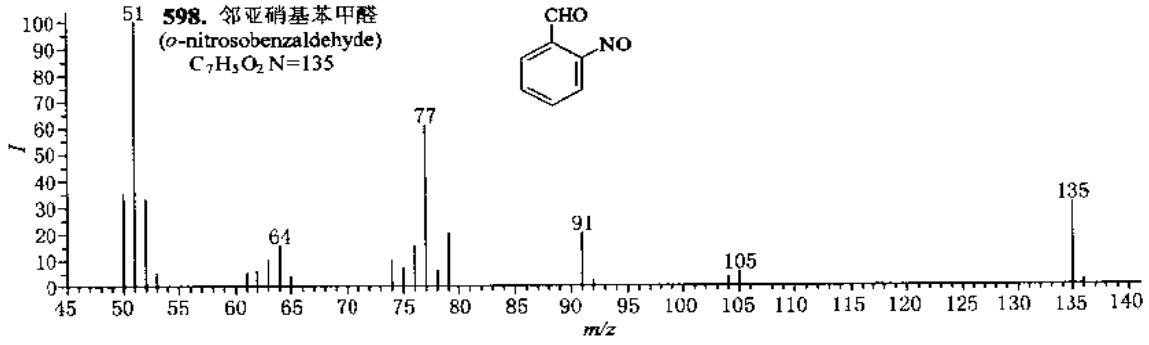


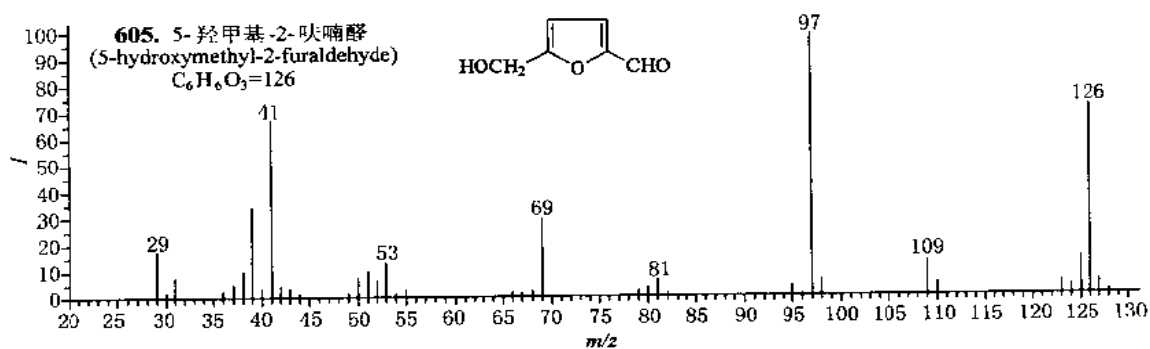
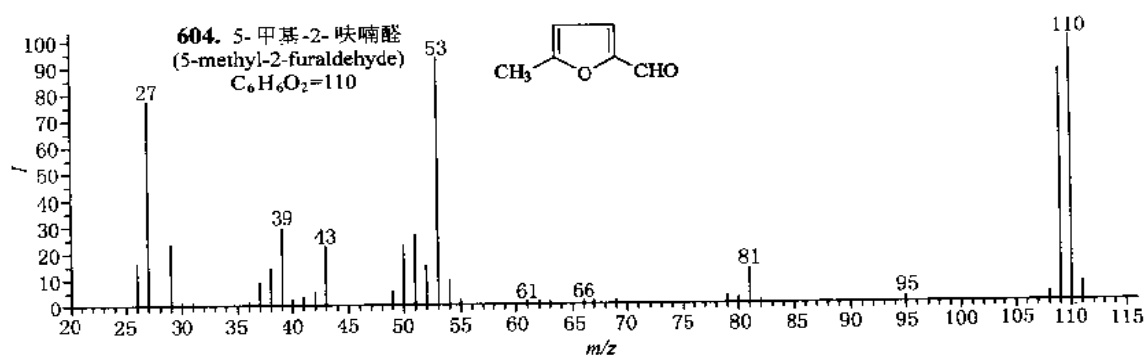
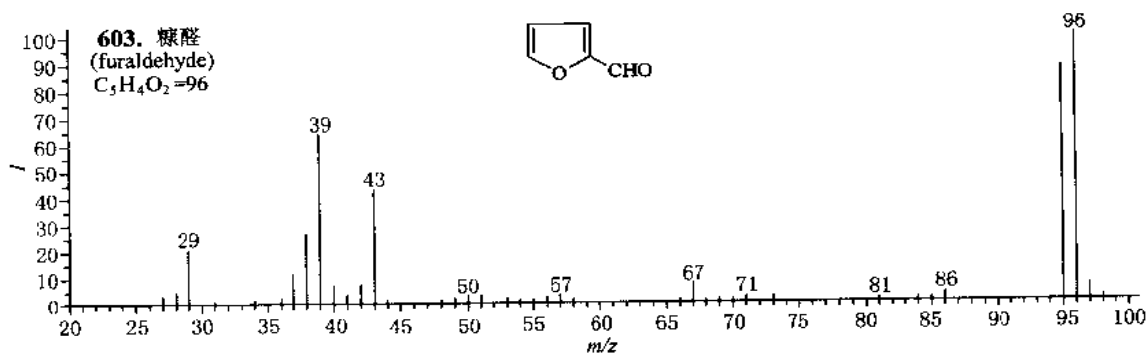
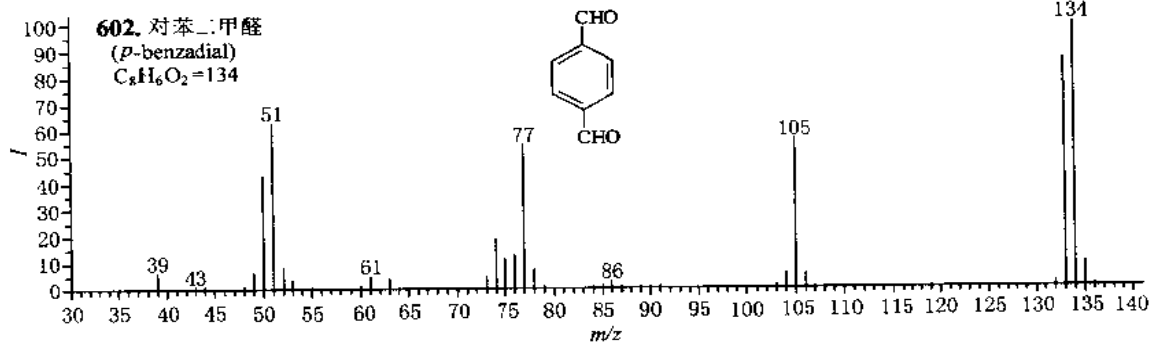


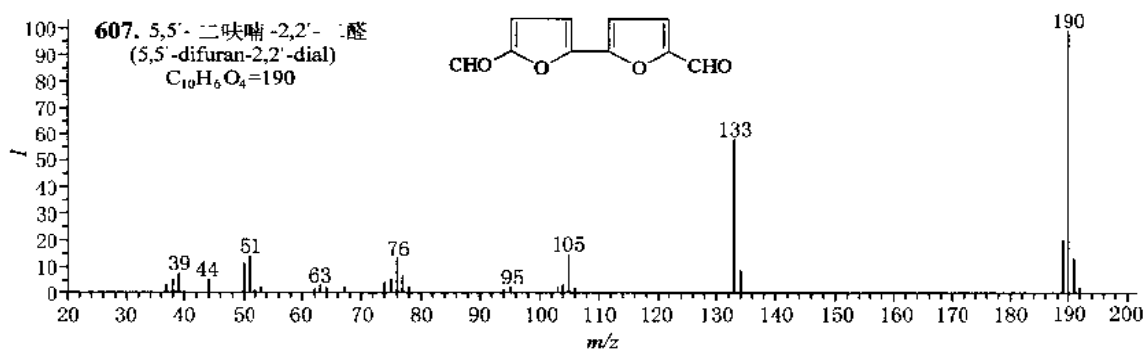
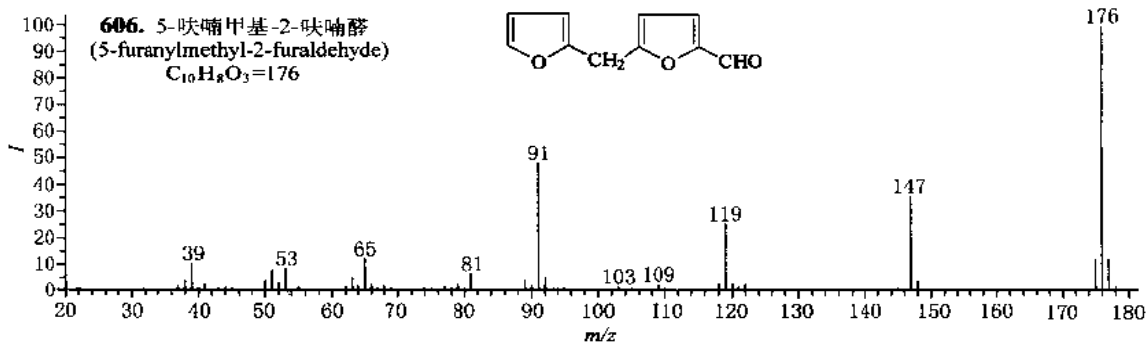






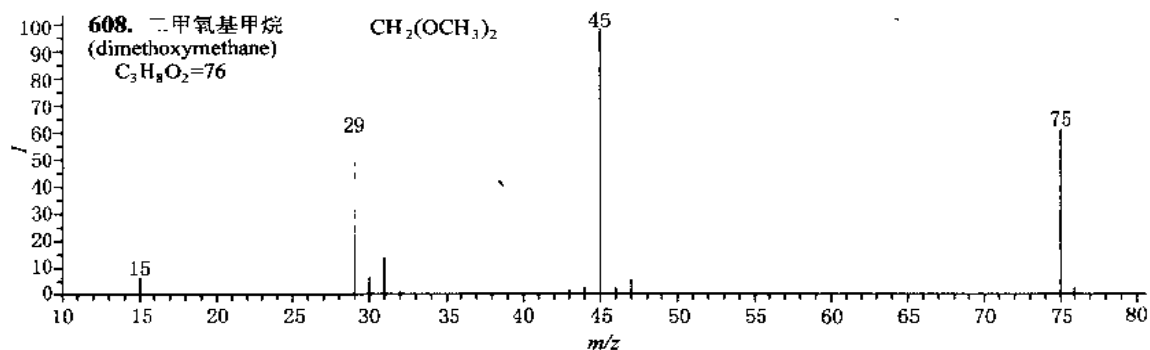


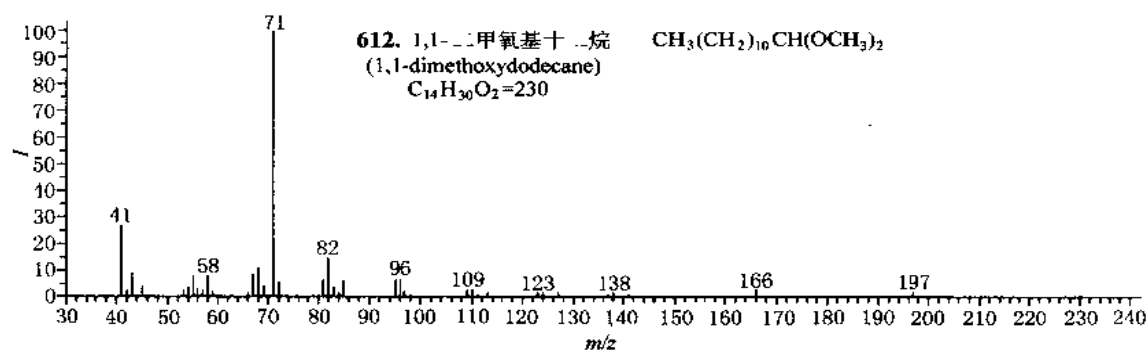
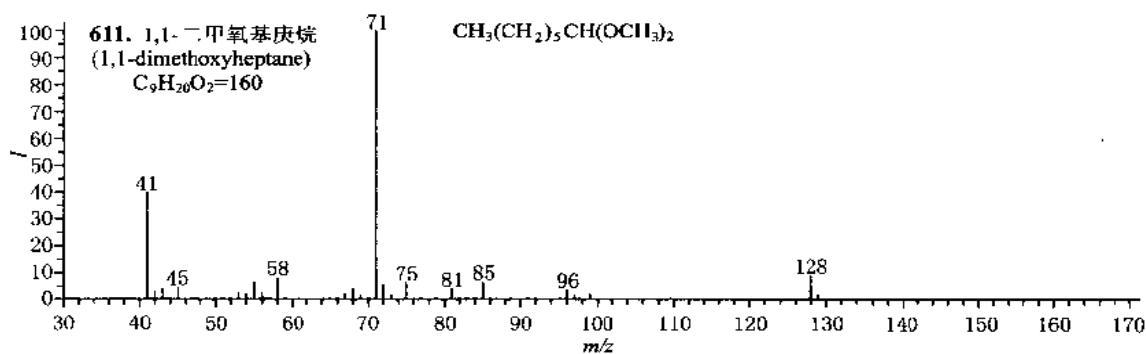
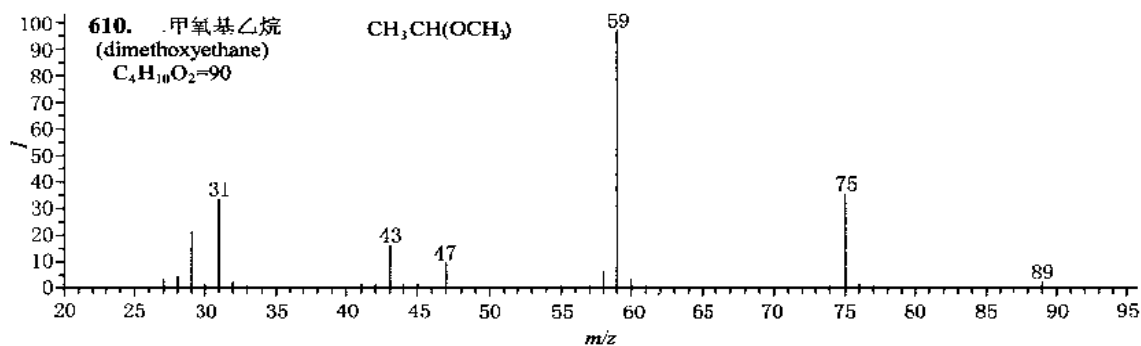
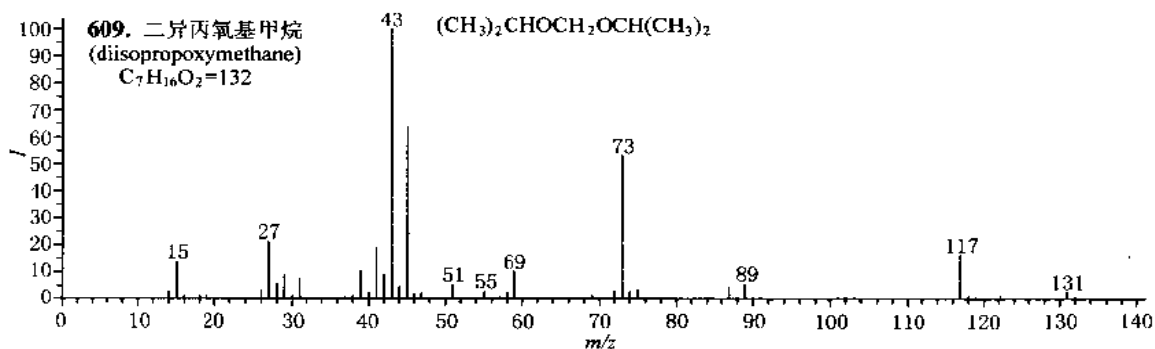


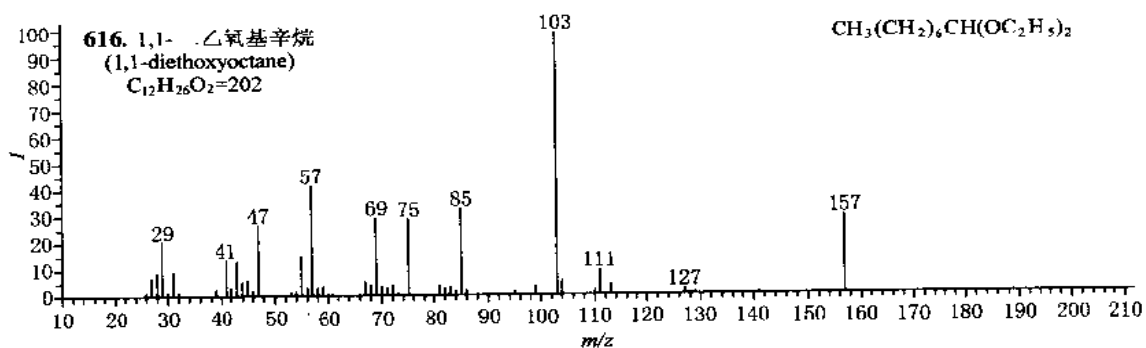
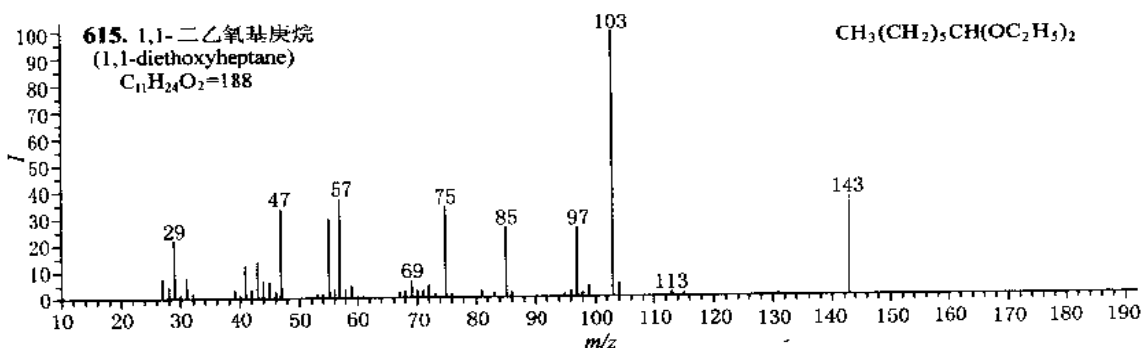
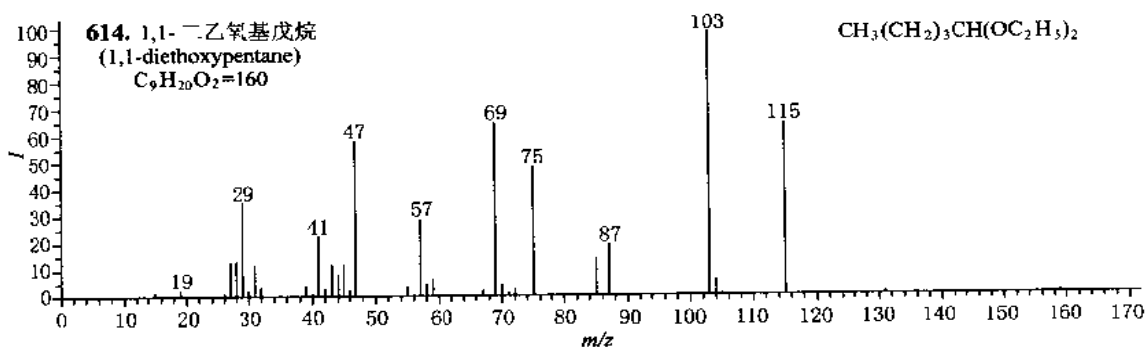
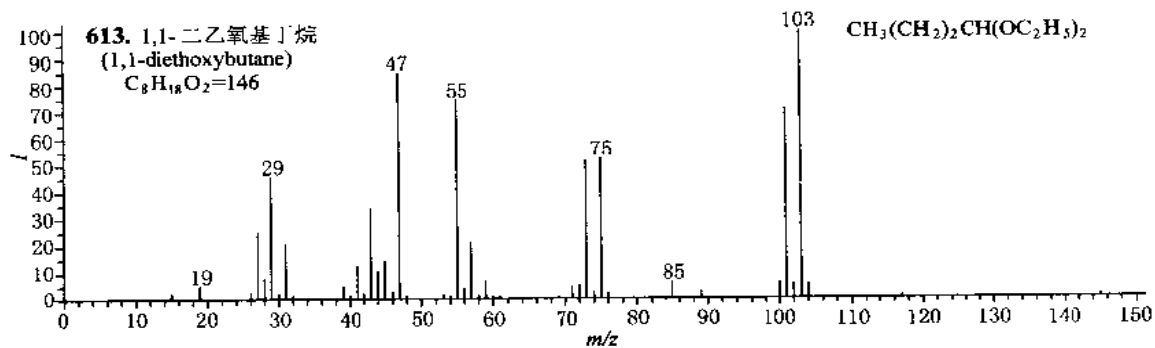


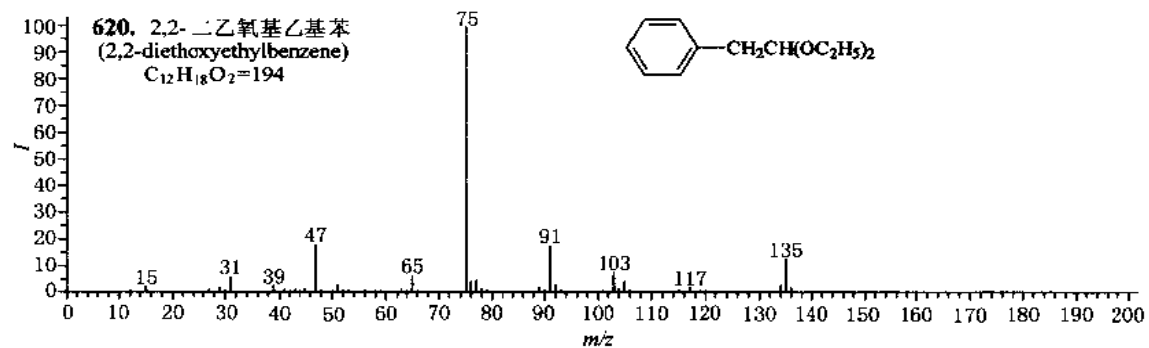
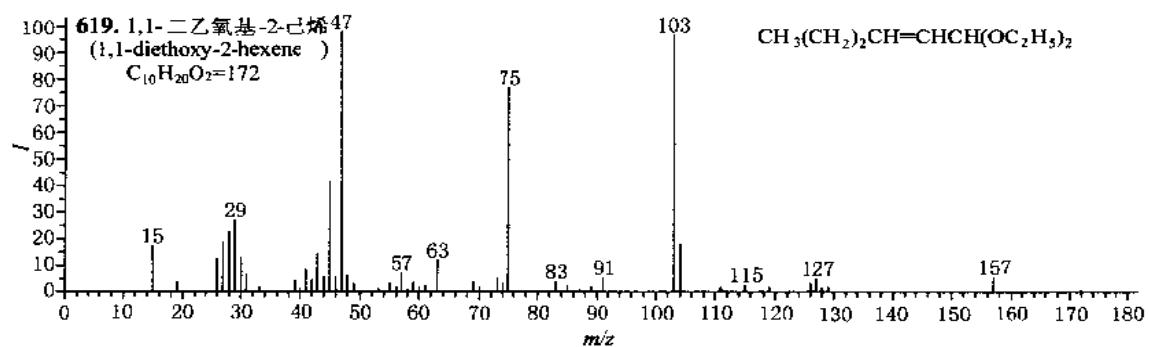
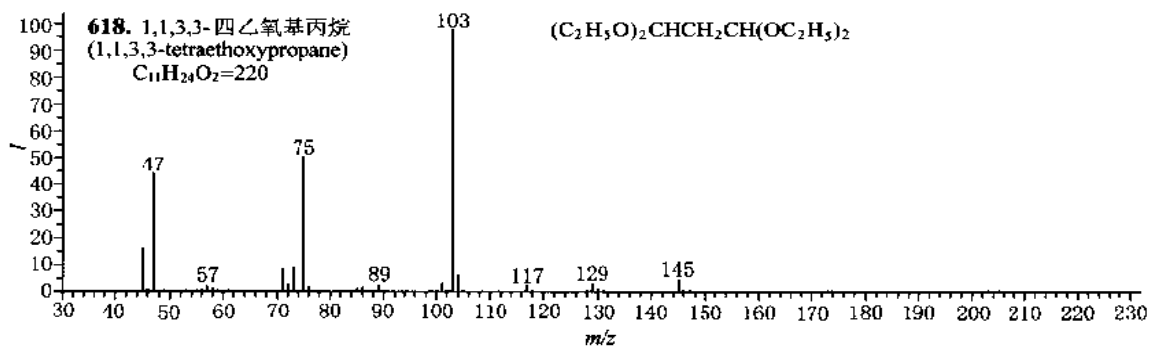
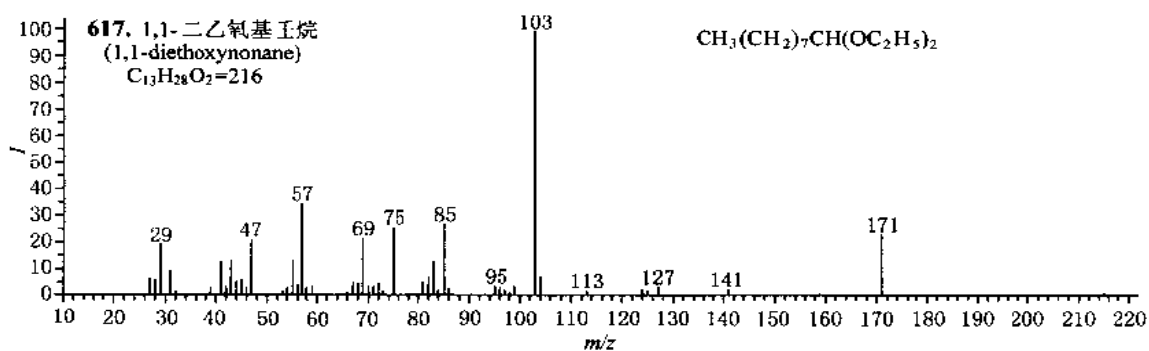
## 七、缩醛类

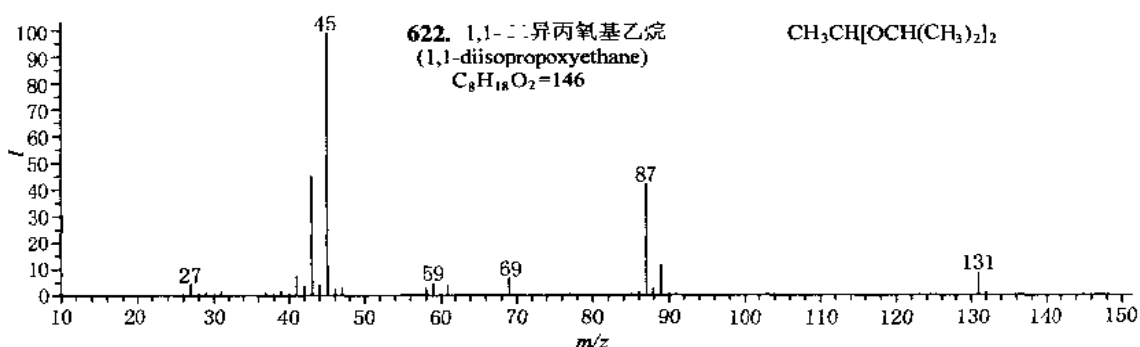
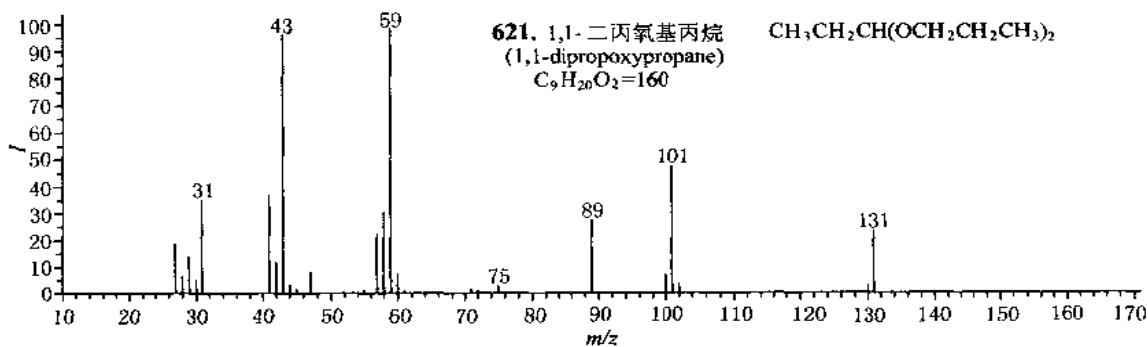
- (1) 甲缩醛类 (608), M-H 离子一般较强, 其次是失去甲氧基。
- (2) 丙缩醛类 (609), M-H 离子也较强, 并且也能失去丙氧基。
- (3) 长链甲缩醛类 (610~612) 自乙醛开始还能失去甲基和其他烷基, 产生二甲氧基次甲基离子  $m/z$  75。
- (4) 乙缩醛类 (613~620) 有两条裂解途径, 即 M-烷基-乙烯-乙烯和 M-烷氧基-乙烯。丙缩醛类 (621, 622) 的裂解途径是 M-烷基-丙烯和 M-烷氧基-丙烯。











## 第二节 酮 类

### 一、直链脂肪酮类

(1) 烯酮 (623) 的裂解只有  $\text{M}-\text{H}$ 。

(2) 丙酮 (624) 的裂解是失去甲基, 丁酮-2 (625) 的裂解是羰基两侧的  $\alpha$ -裂解, 或失甲基或失乙基, 3-丁烯酮-2 (626) 的裂解也是羰基两侧的  $\alpha$ -裂解。

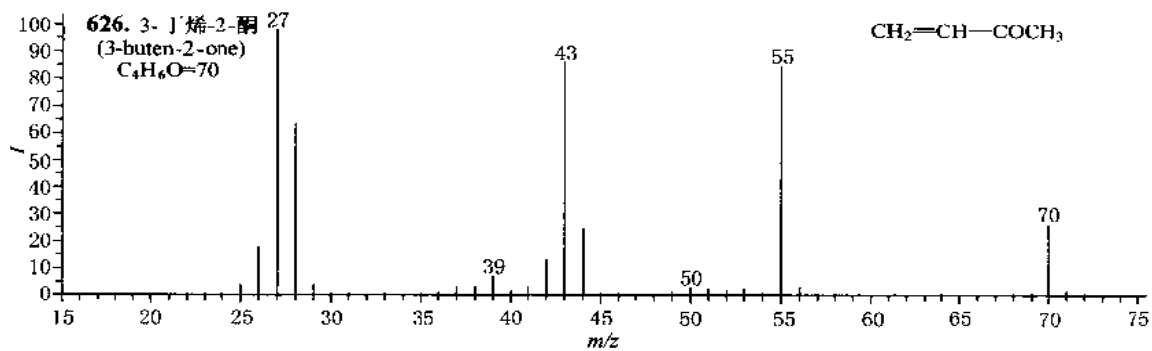
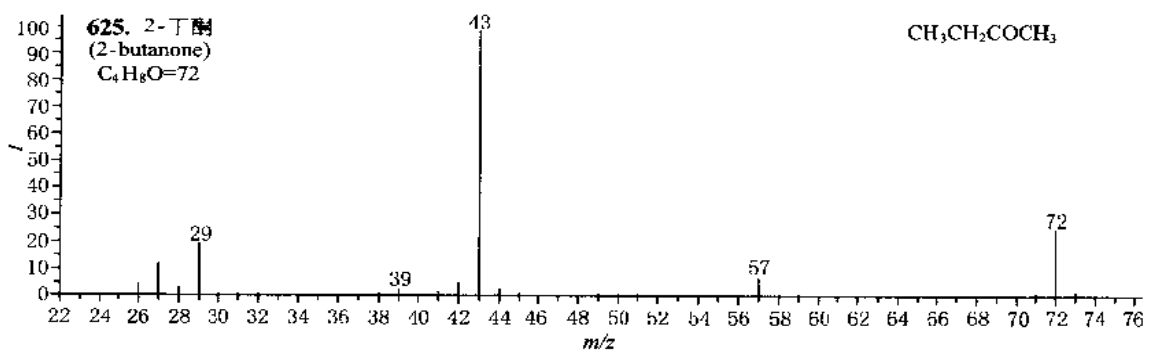
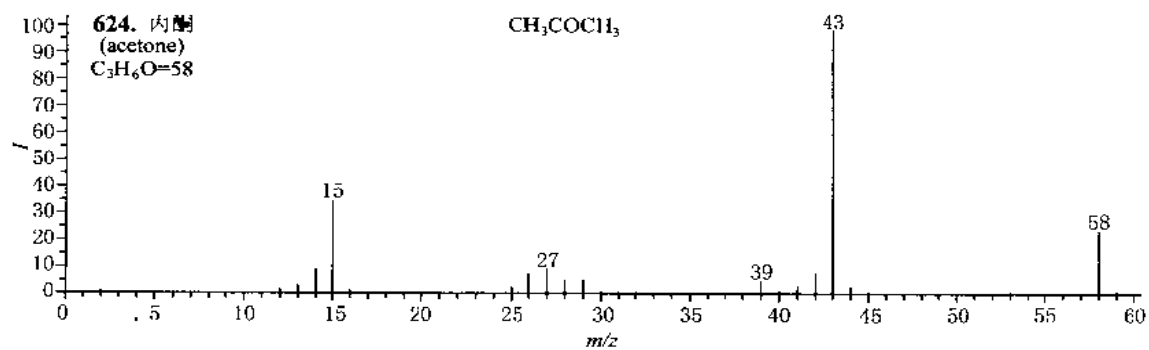
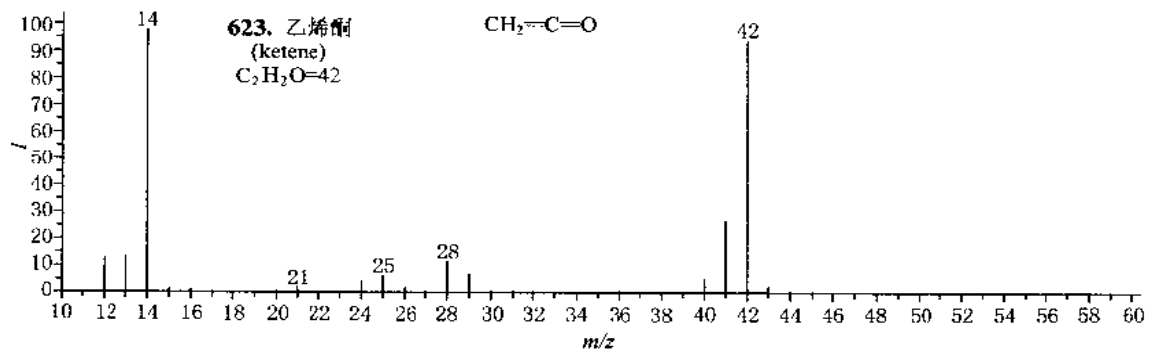
(3) 自2-戊酮 (627) 开始, 以上的直链脂肪酮类, 既有羰基两侧的  $\alpha$ -裂解, 也有羰基一侧或两侧的麦氏重排裂解, 化合物 627 只有一侧的麦氏重排裂解, 而4-庚酮 (631) 能进行羰基两侧的麦氏重排裂解。

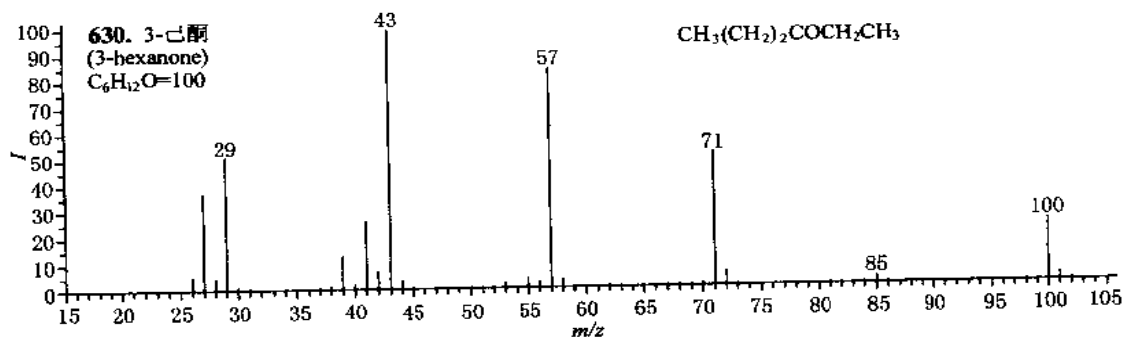
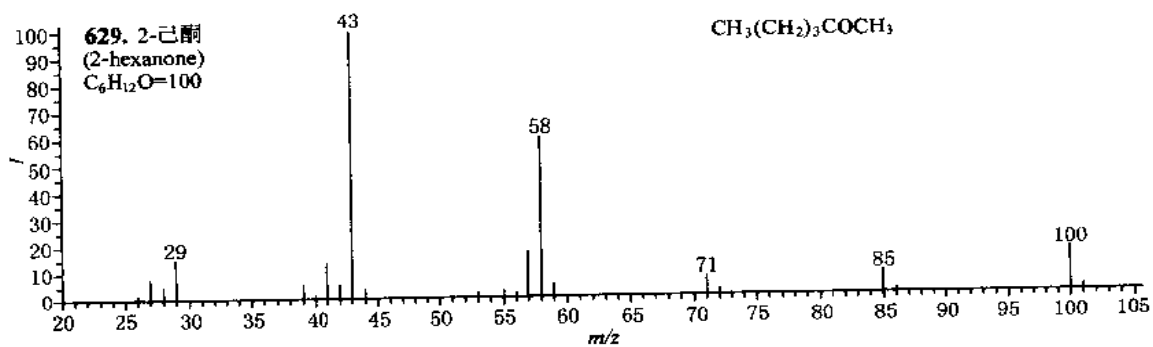
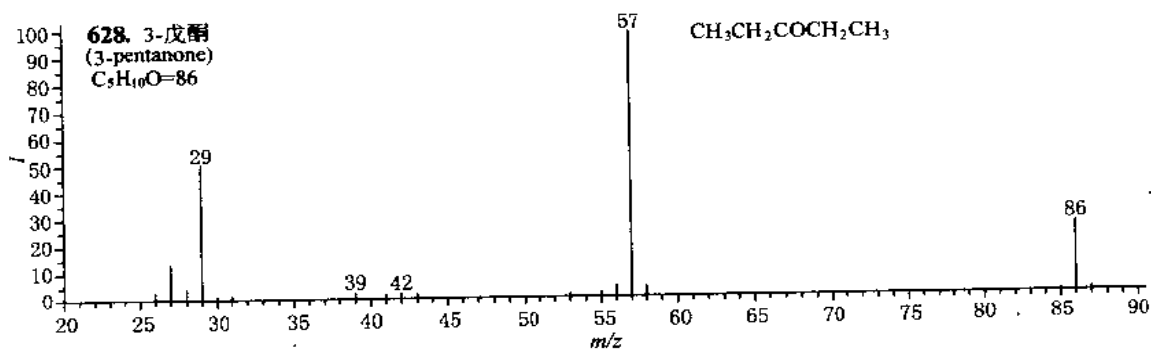
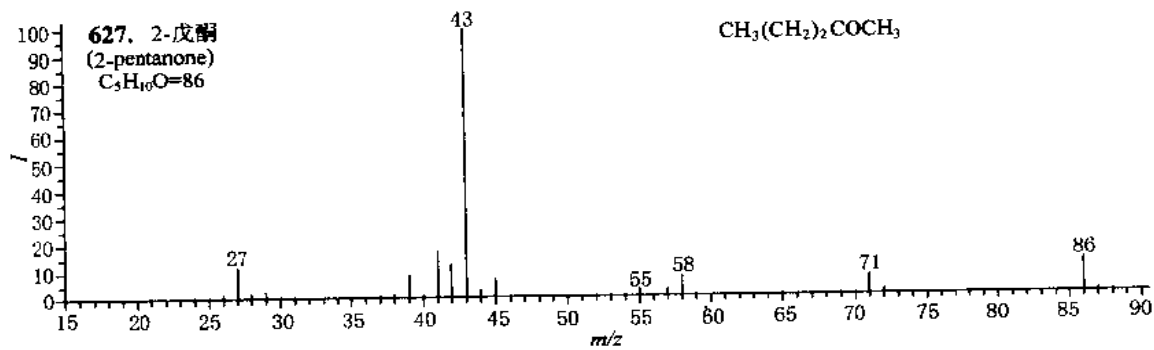
(4) 长链甲基酮除能进行一侧的麦氏重排裂解外, 都有强的乙酰基离子  $m/z$  43。长链甲基酮的麦氏重排离子是  $m/z$  58, 长链乙基酮是离子  $m/z$  72, 长链丙基酮是离子  $m/z$  86, 丁基酮是离子  $m/z$  100, 以及戊基酮是离子  $m/z$  114 等等。因此离子  $m/z$  58, 72, 86, 100 和 114 等是长链甲基、乙基、丙基、丁基和戊基酮类的特征离子。

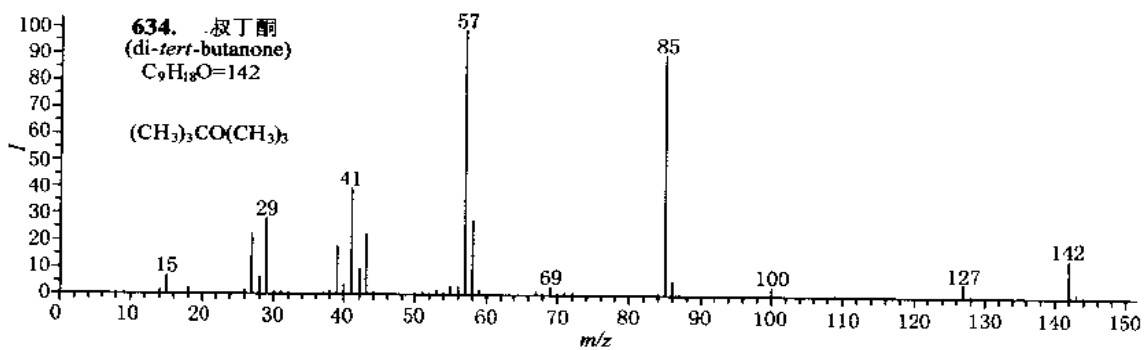
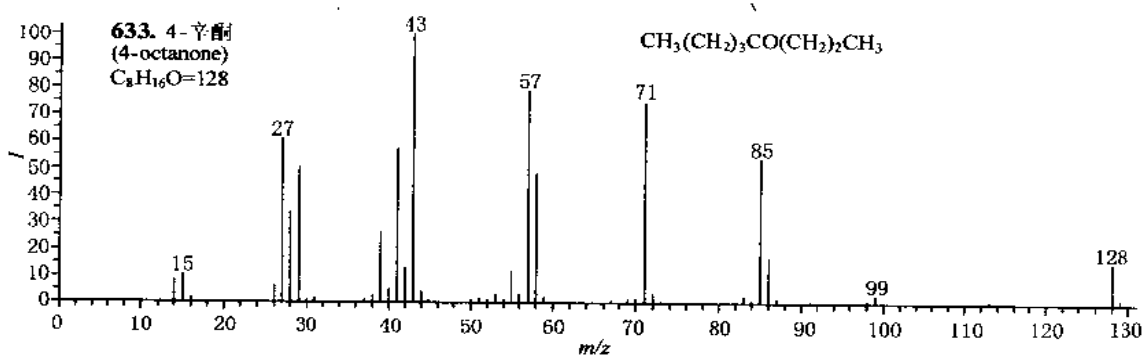
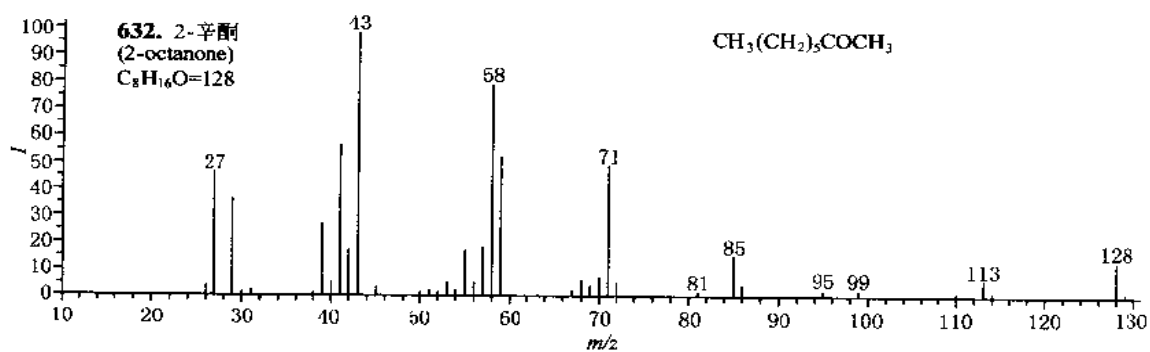
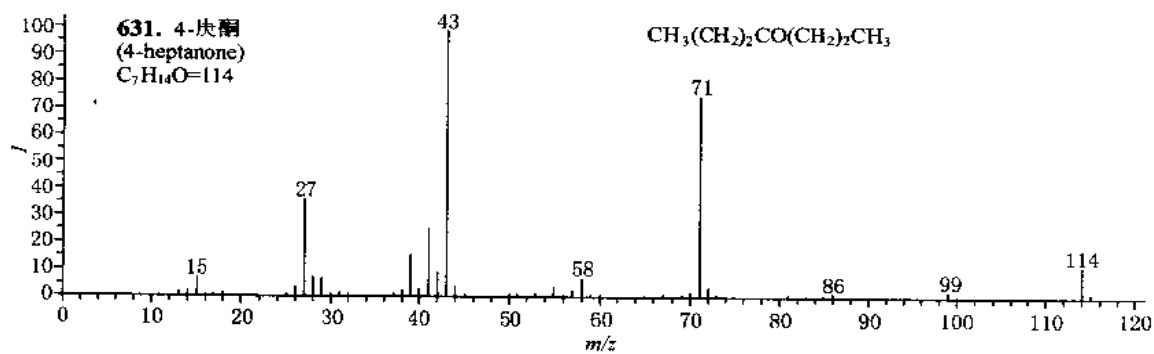
(5) 6-甲基-5-庚烯-2-酮 (647) 能进行八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解, 得互补离子  $m/z$  58 和 68。

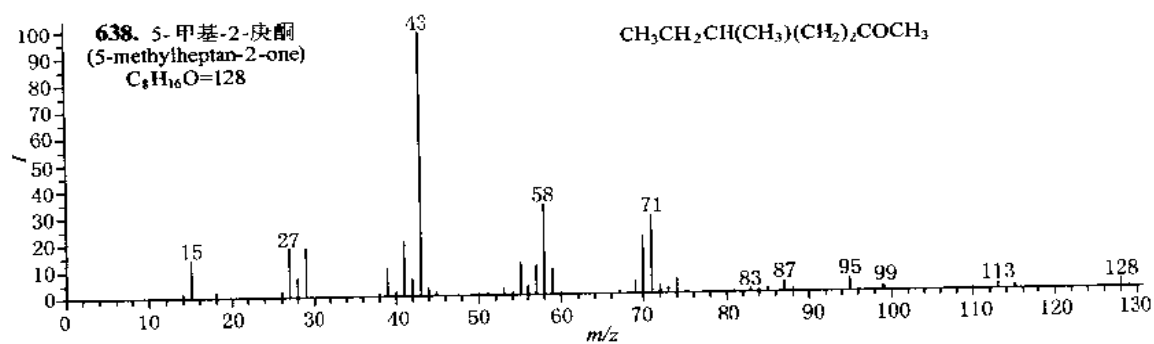
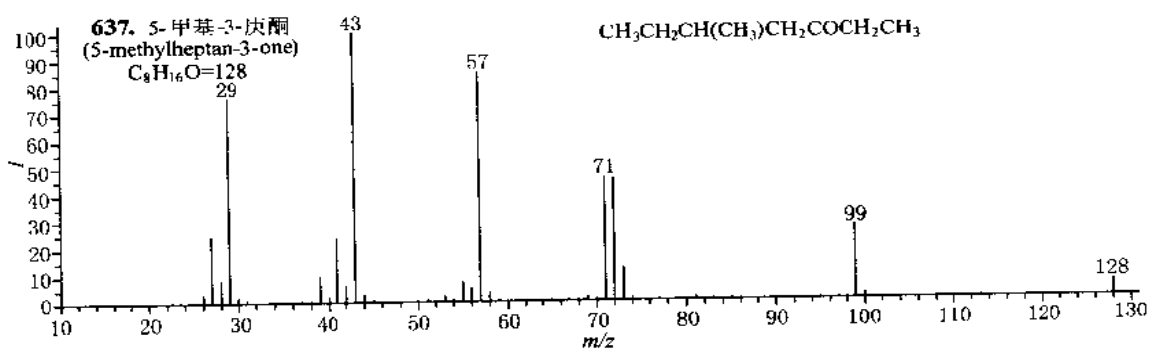
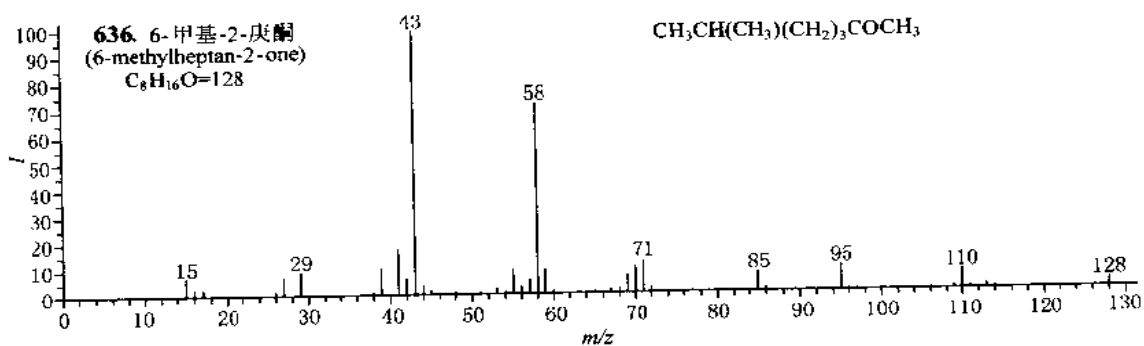
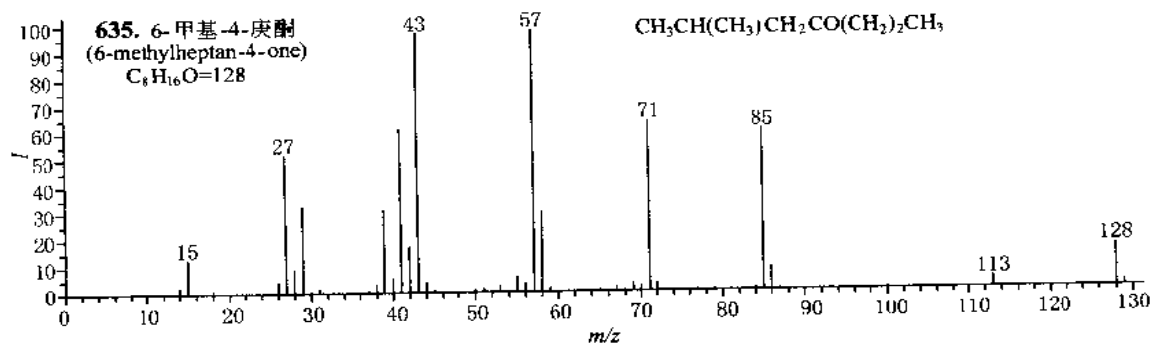
(6) 2,3-丁二酮 (649) 的主要裂解是分子离子的对半裂解。

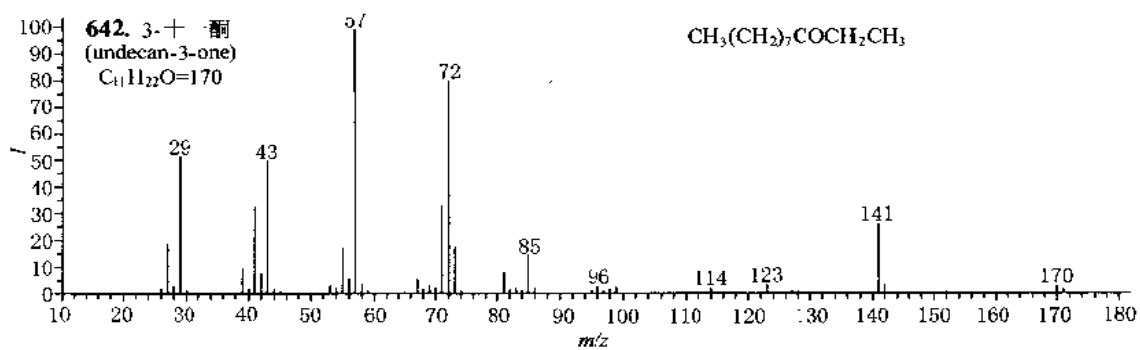
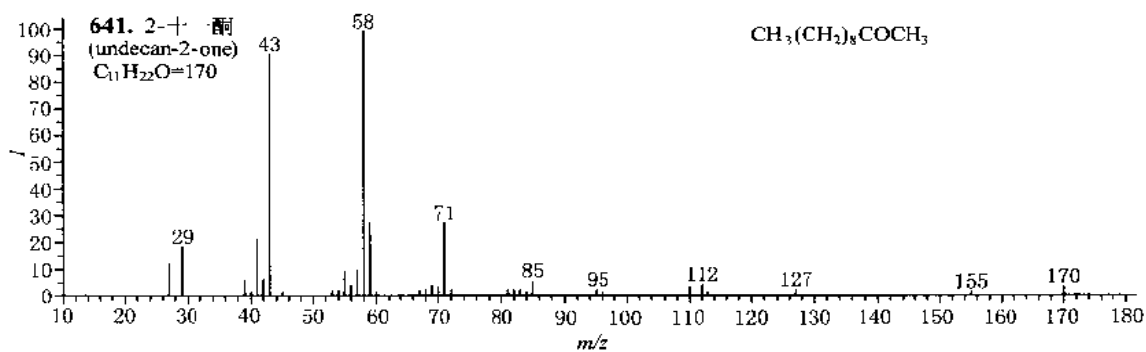
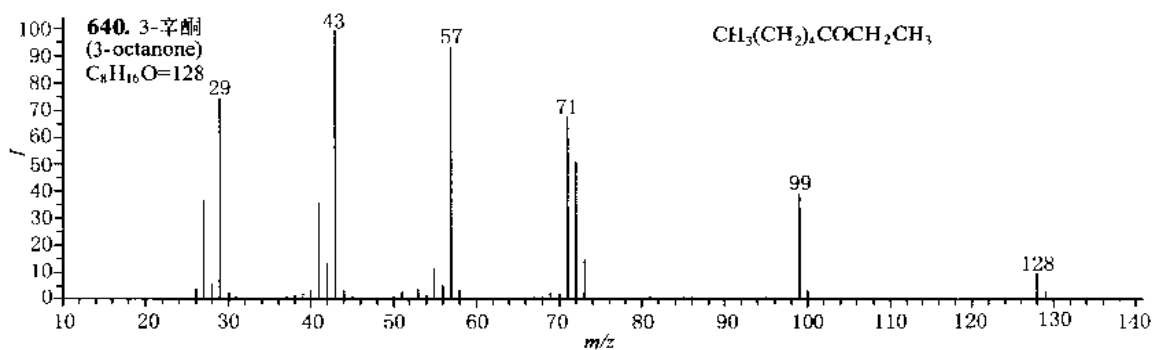
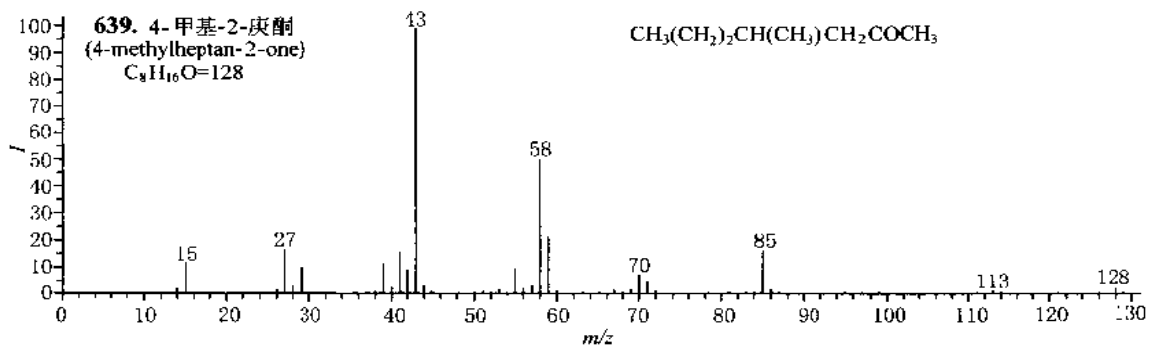


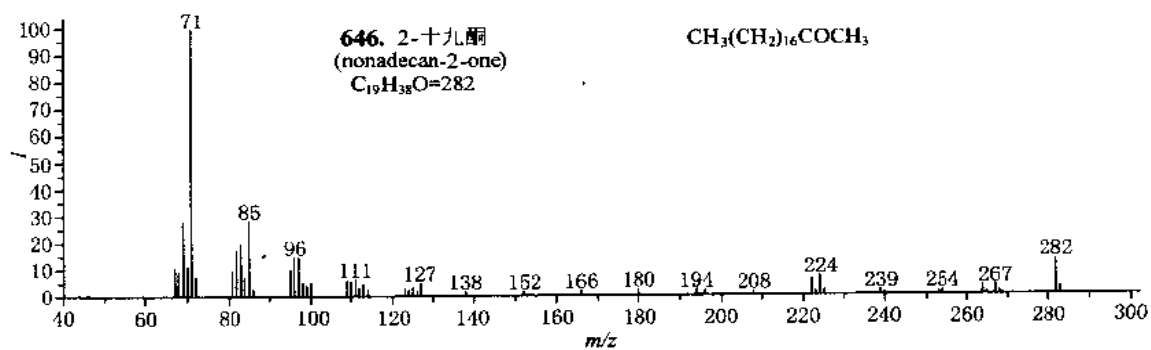
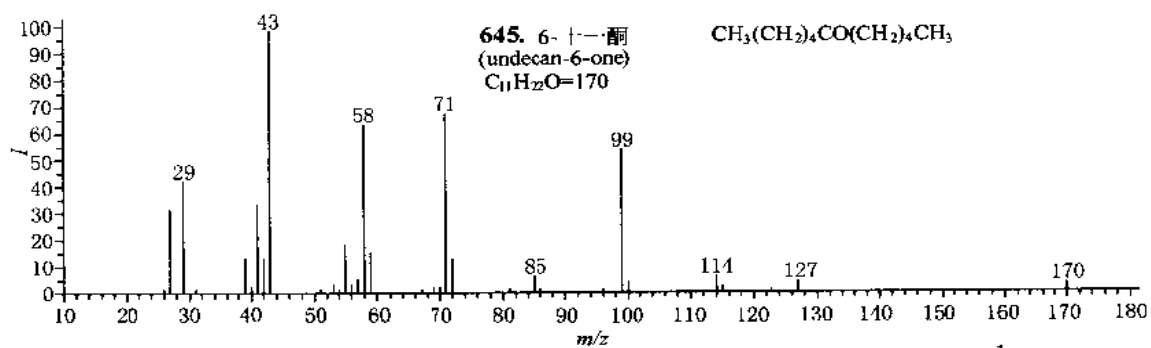
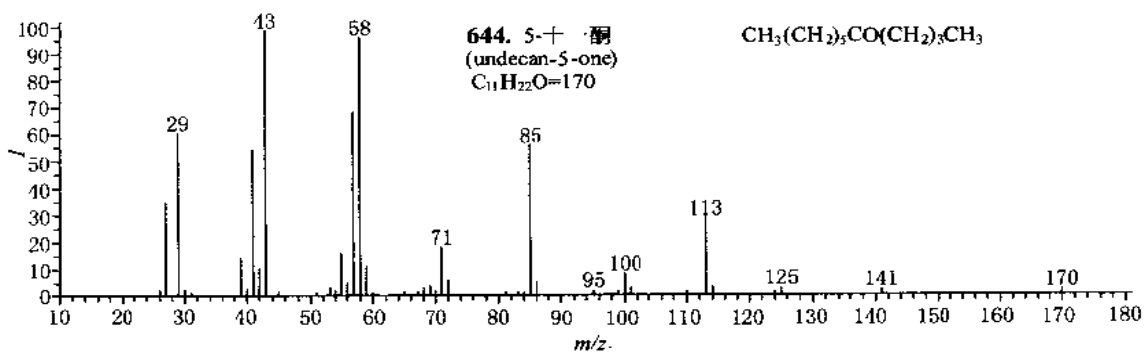
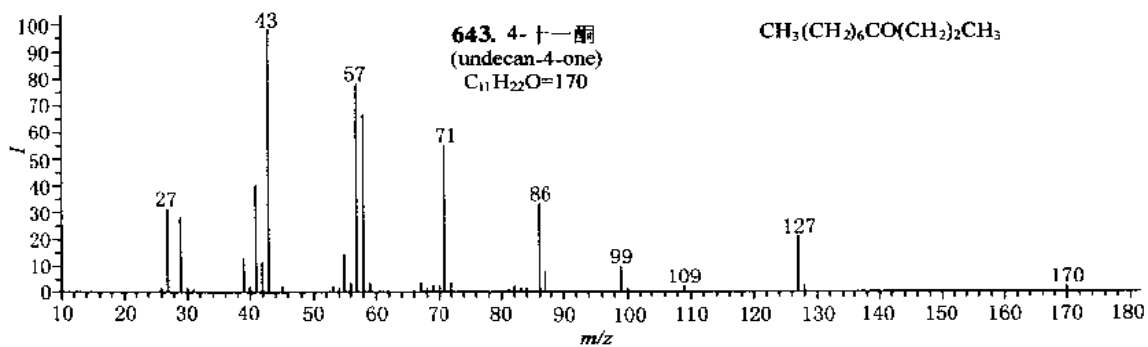


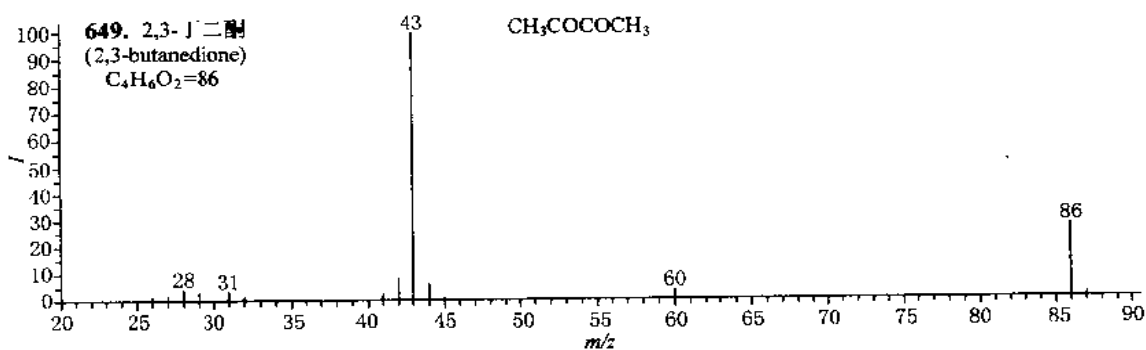
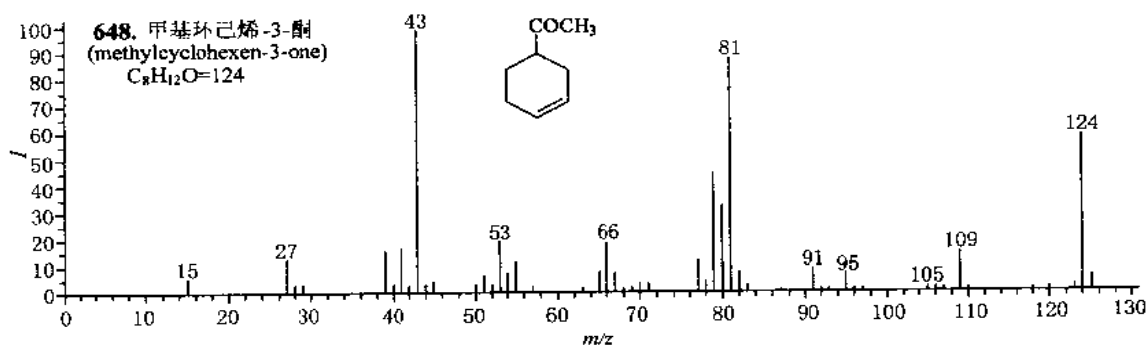
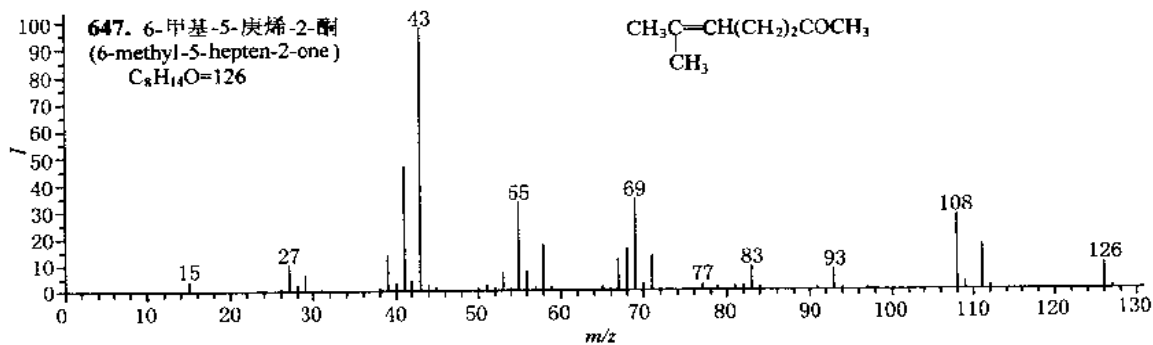






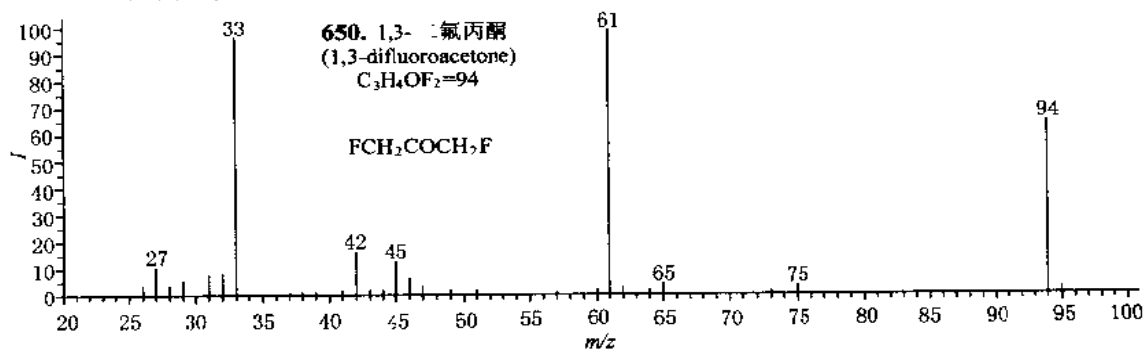


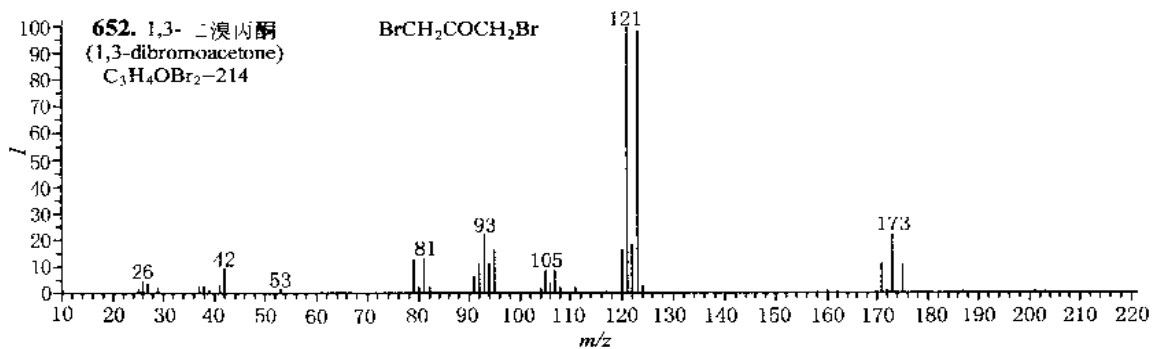
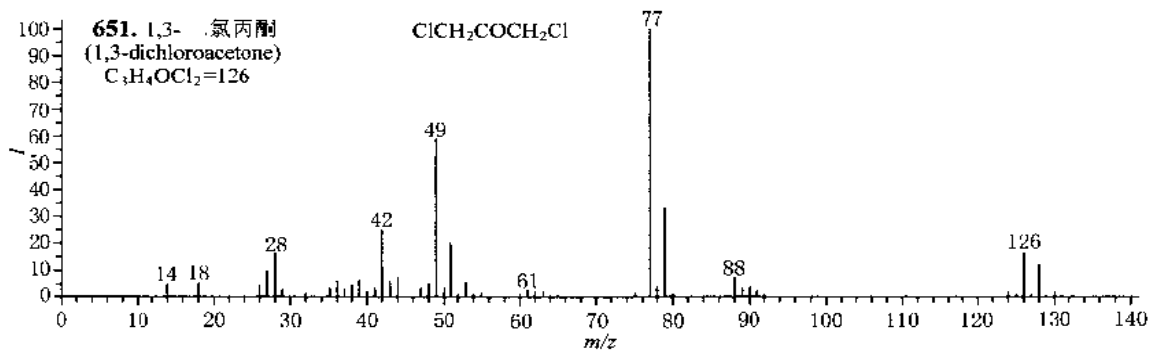




## 二、卤代脂链酮类

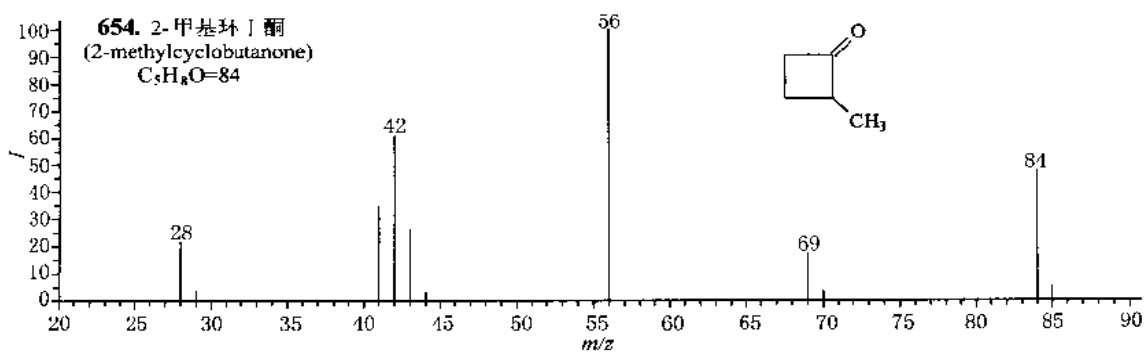
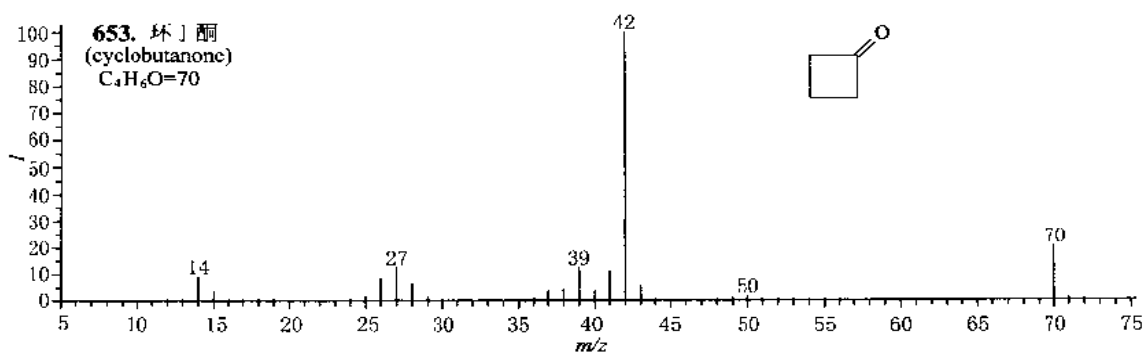
1,3-二卤丙酮类 (650~652) 都有  $M-CH_2X$  和  $CH_2X$  离子, 其他裂解很少。



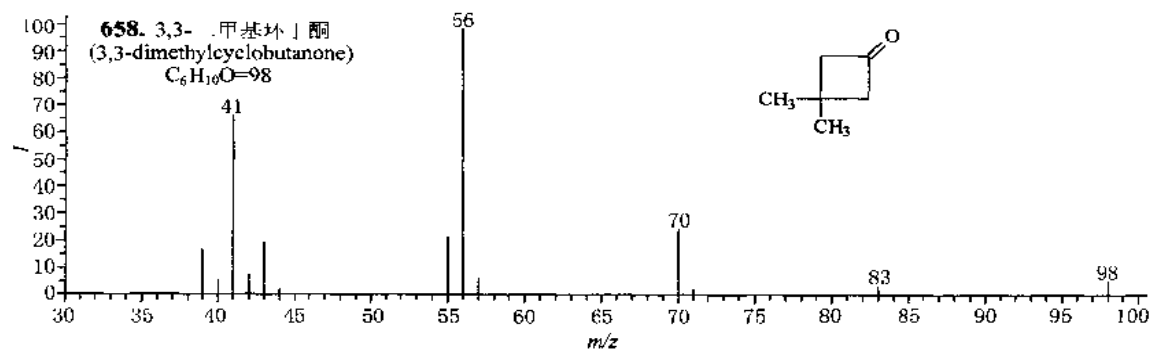
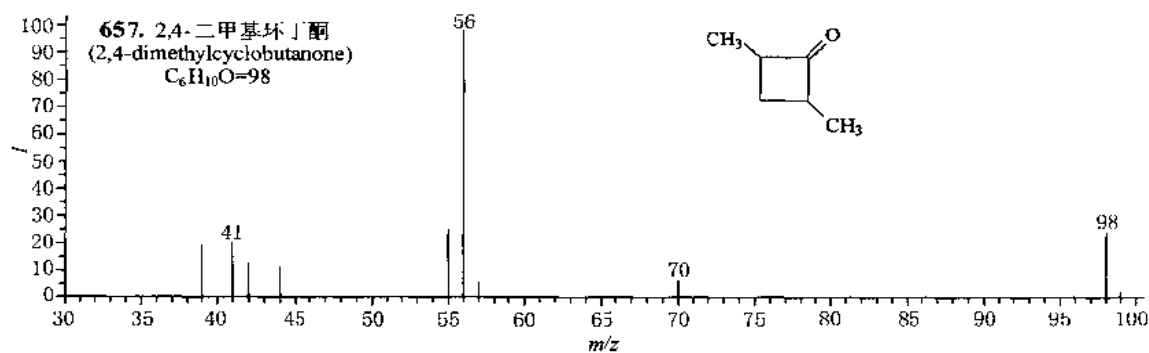
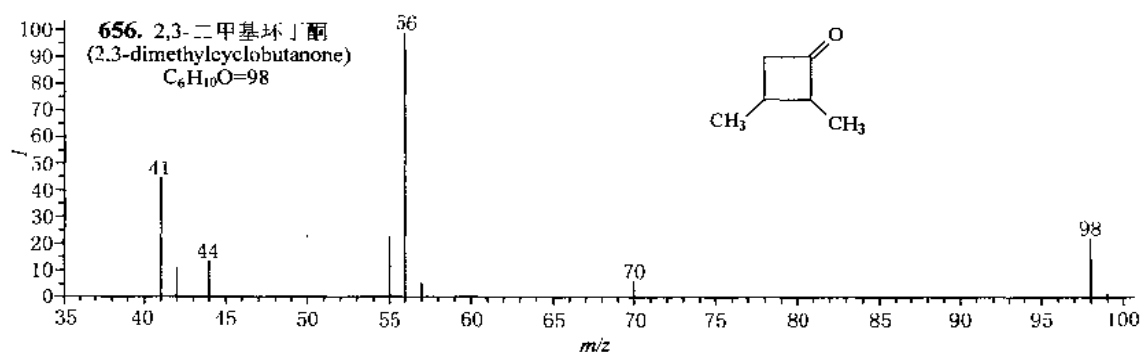
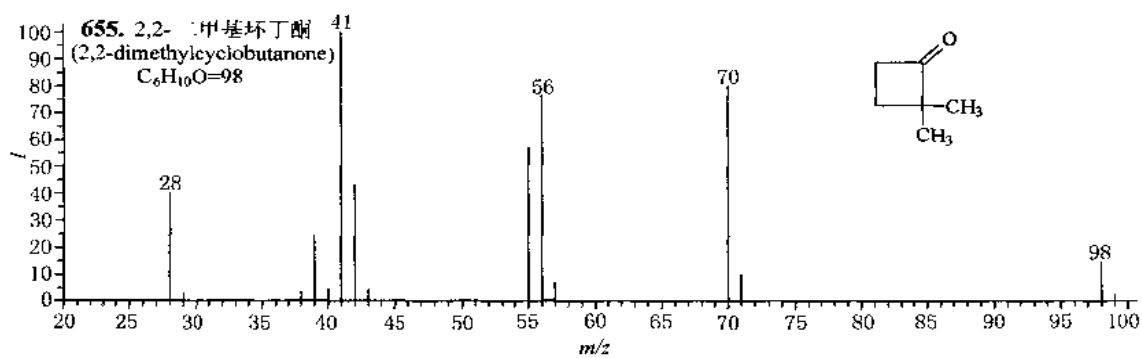


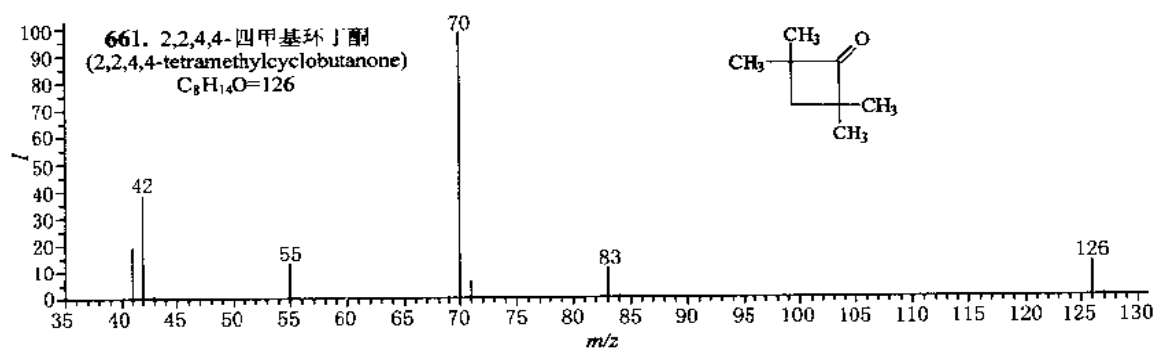
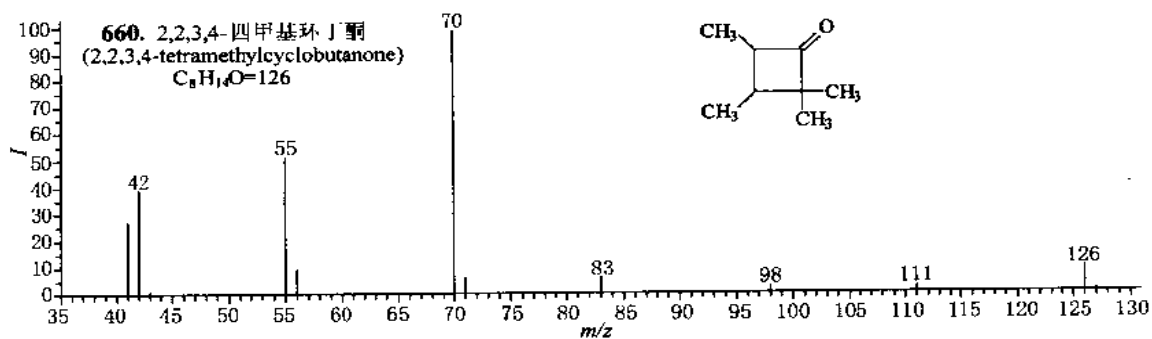
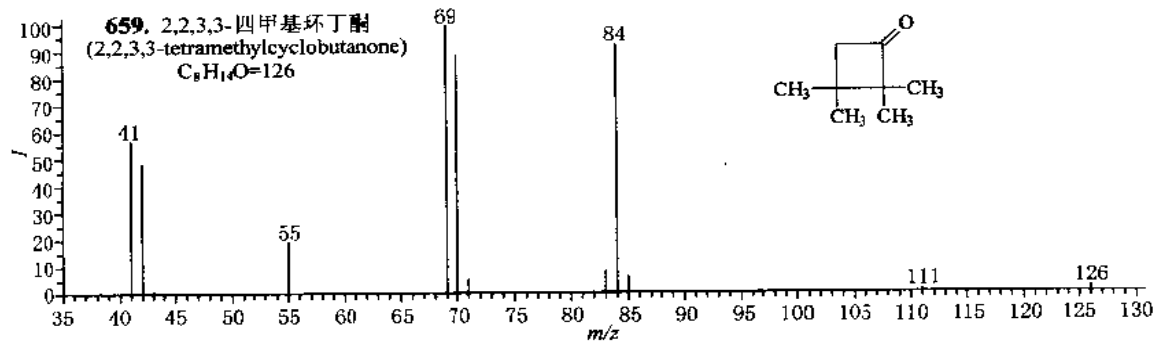
### 三、环丁酮类

环丁酮 (653) 的基本裂解是生成互补离子  $CH_2CO^+$  和  $C_2H_4^+$ , 各种甲基取代化合物 (654~661) 的裂解则是得到甲基取代的乙烯酮离子和甲基取代的乙烯离子。



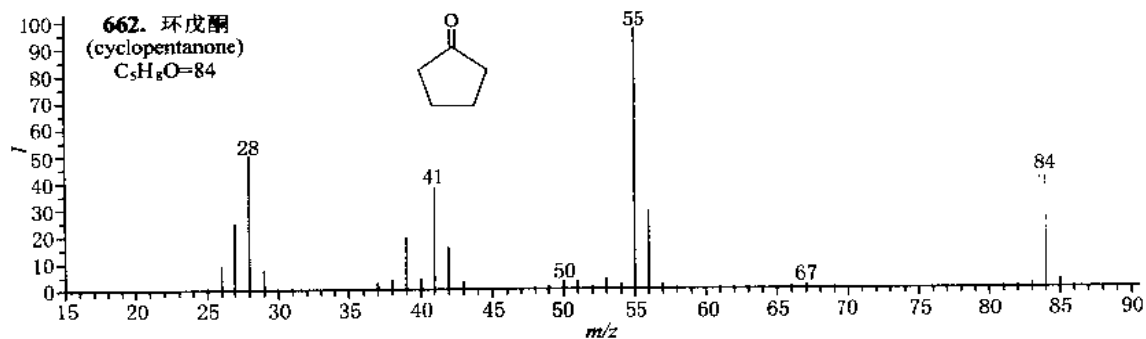


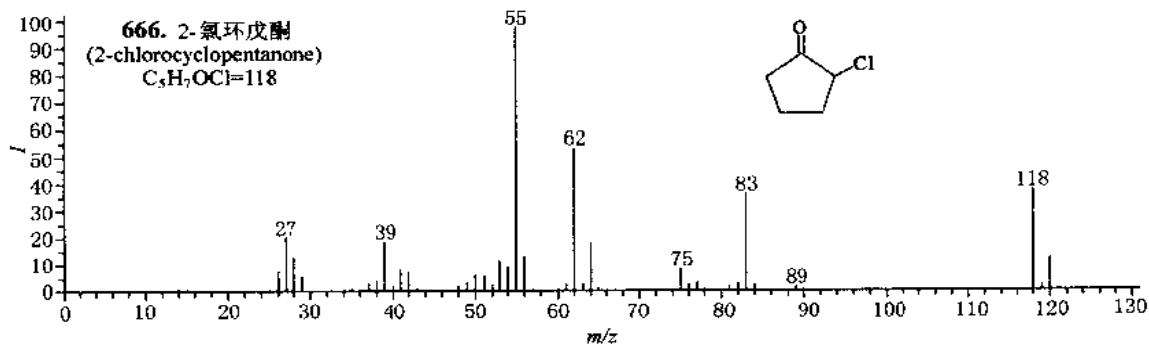
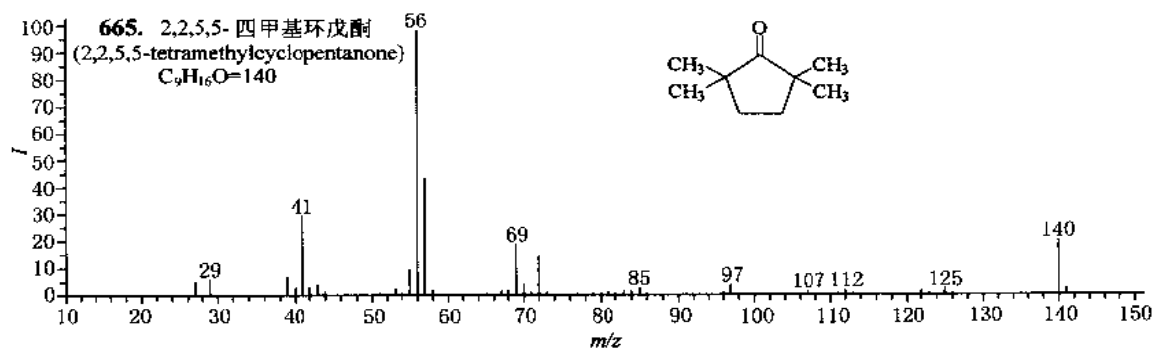
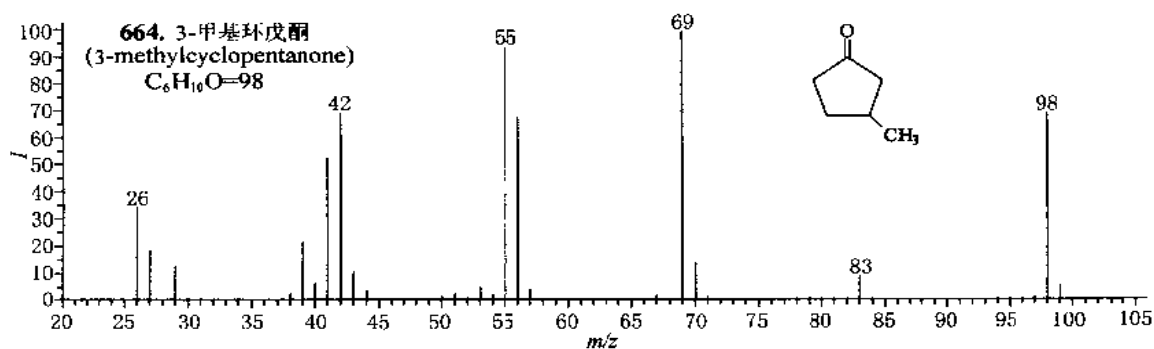
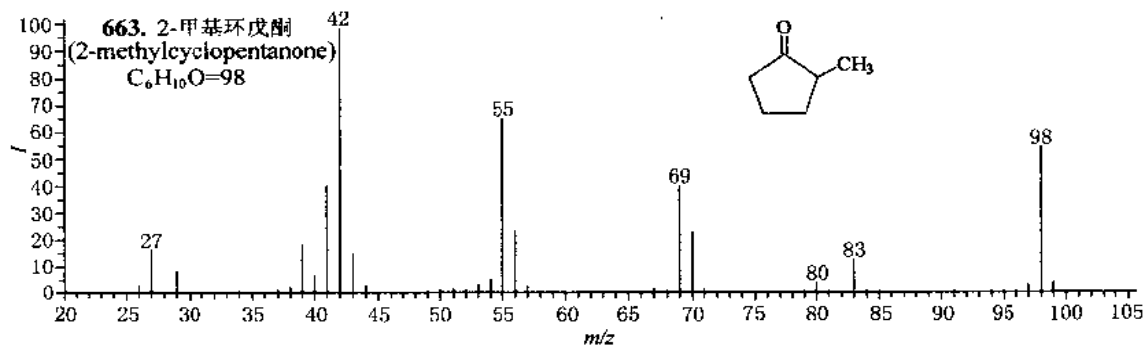




#### 四、环戊酮类

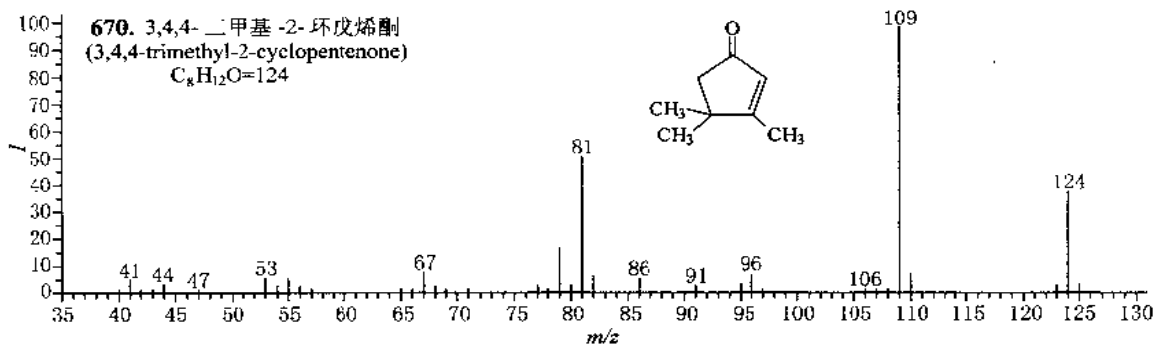
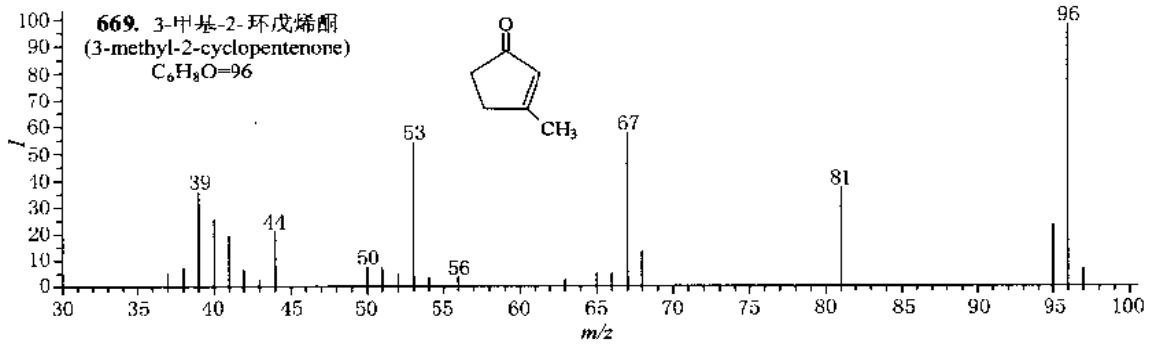
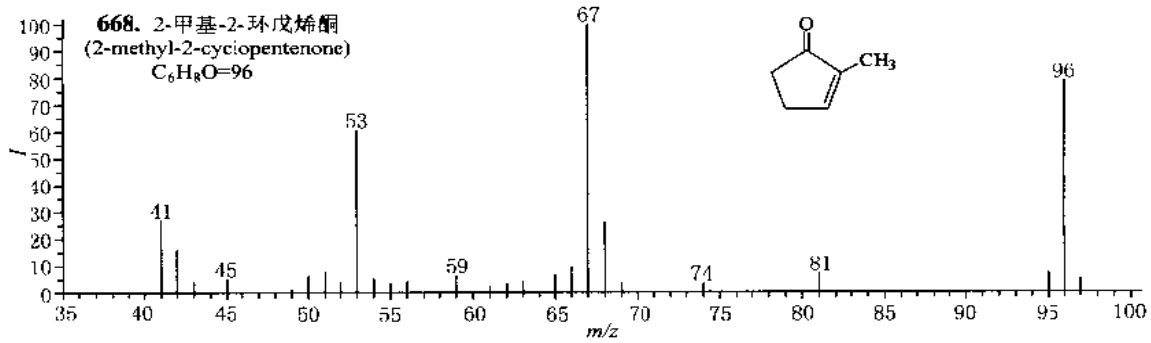
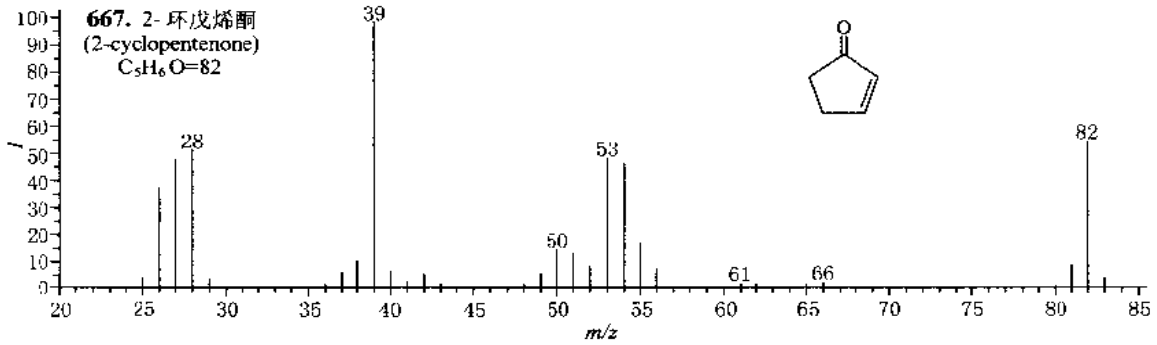
环戊酮类(662~665)的裂解主要生成乙烯酮和烷基乙烯酮以及乙烯和烷基乙烯离子,失去烷基的离子也存在。2-氯环戊酮(666)的主要裂解是失氯、失氯代烷基和生成氯乙烯离子。





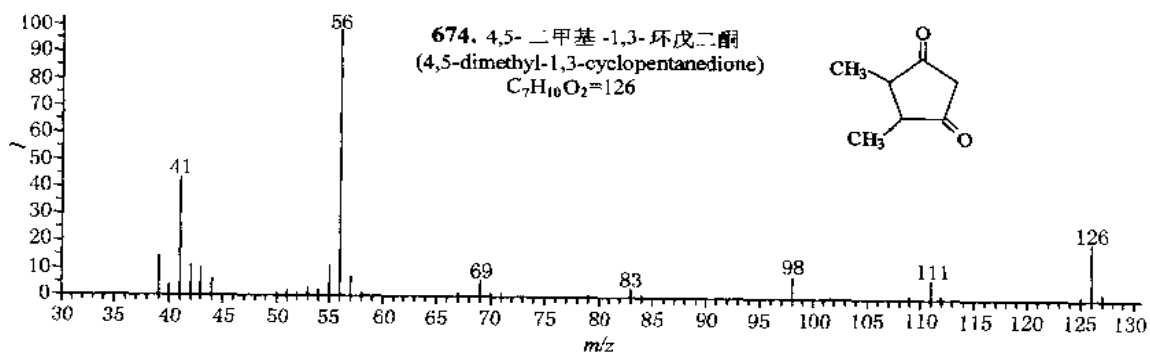
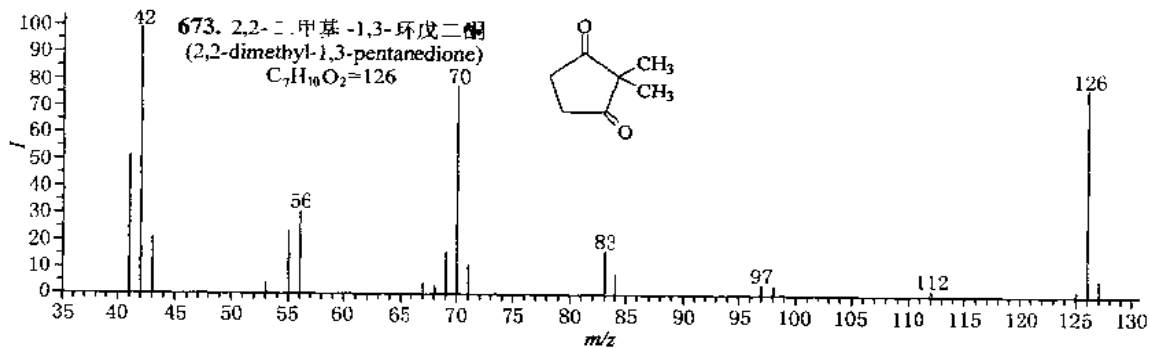
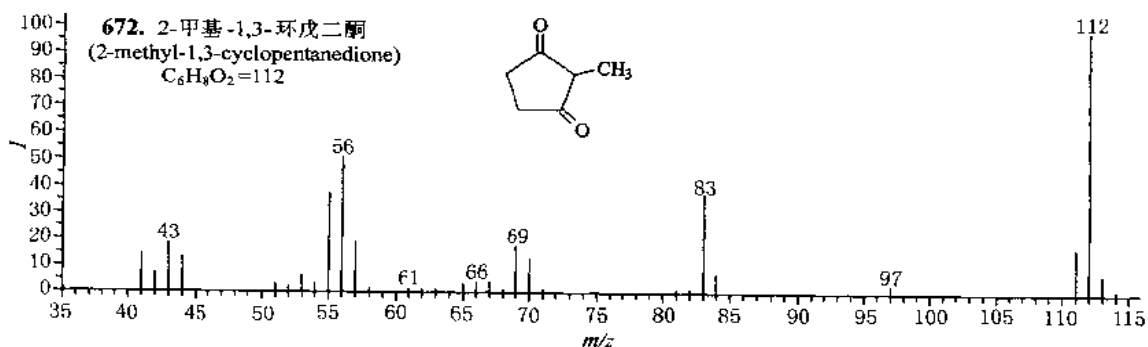
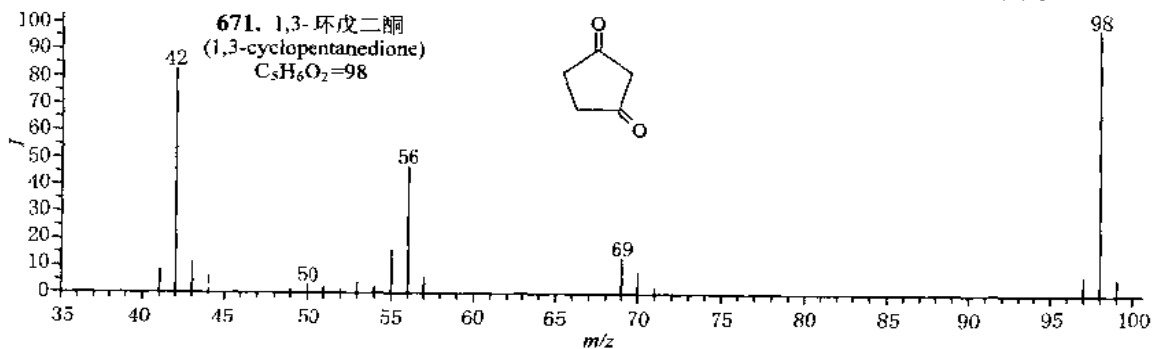
五、 $\alpha, \beta$ -环戊烯酮类

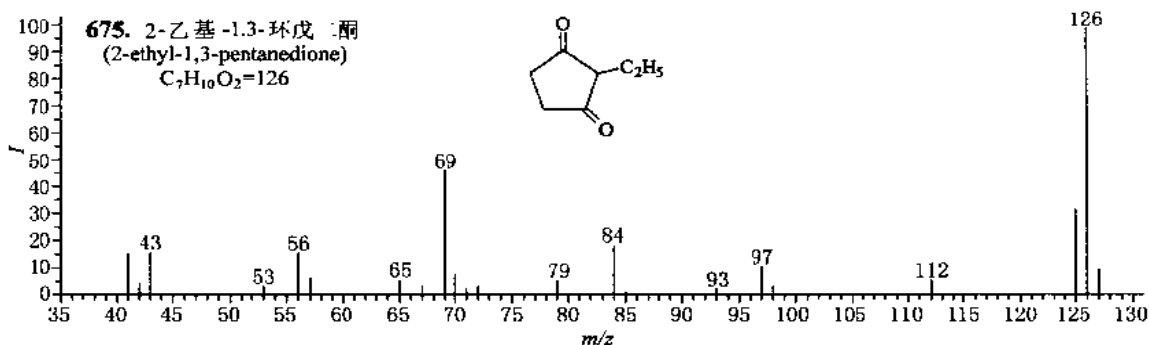
$\alpha, \beta$ -环戊烯酮类 (667~670) 的主要裂解是  $M-CO$ ,  $M-CHO$  和  $M-CH_3CO$ 。



## 六、环戊二酮类

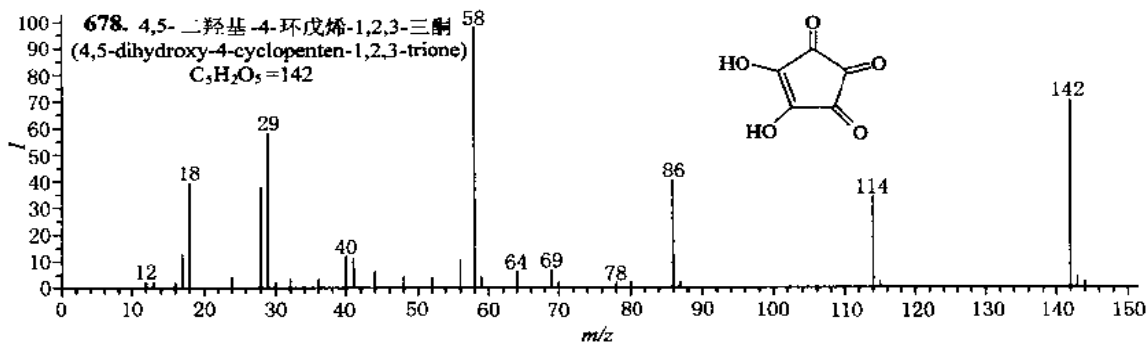
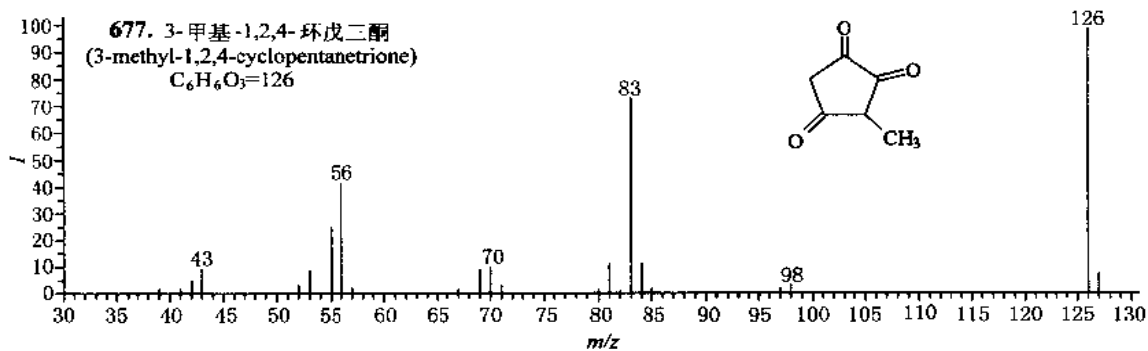
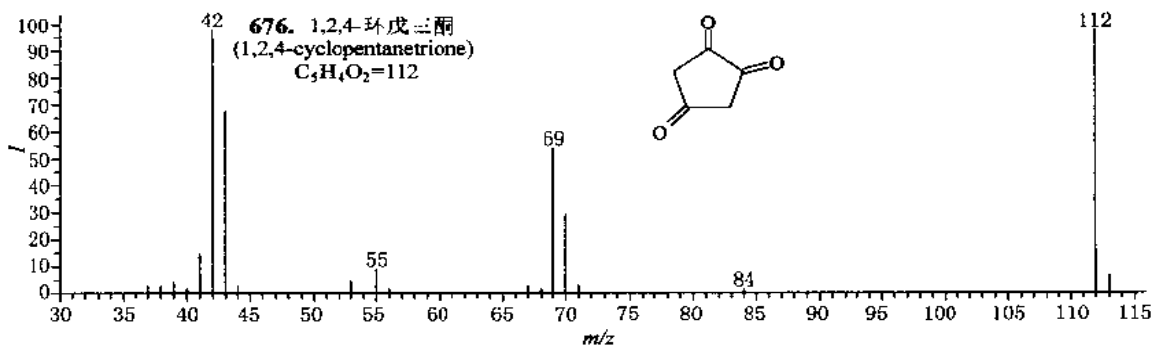
环戊二酮类 (671~675) 的裂解与上述相似, 但另有乙烯酮或烷基乙烯酮离子。





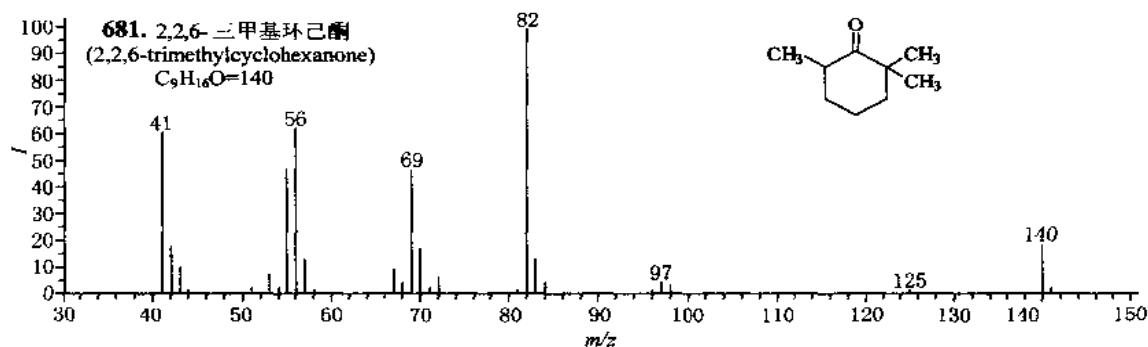
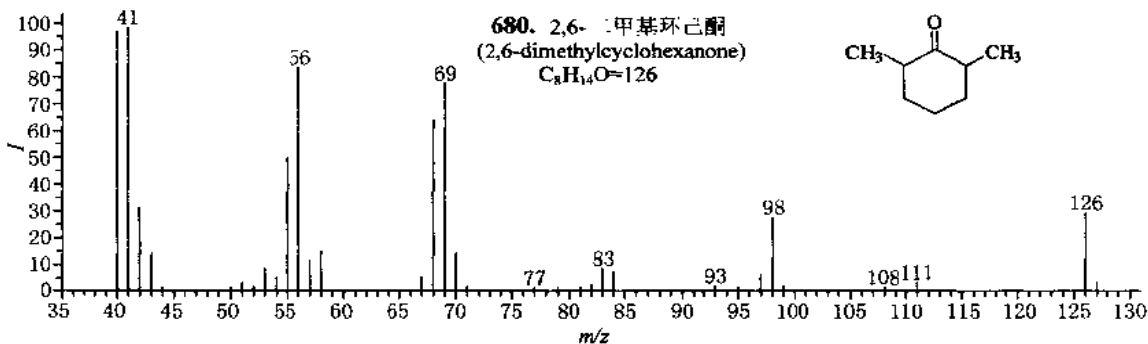
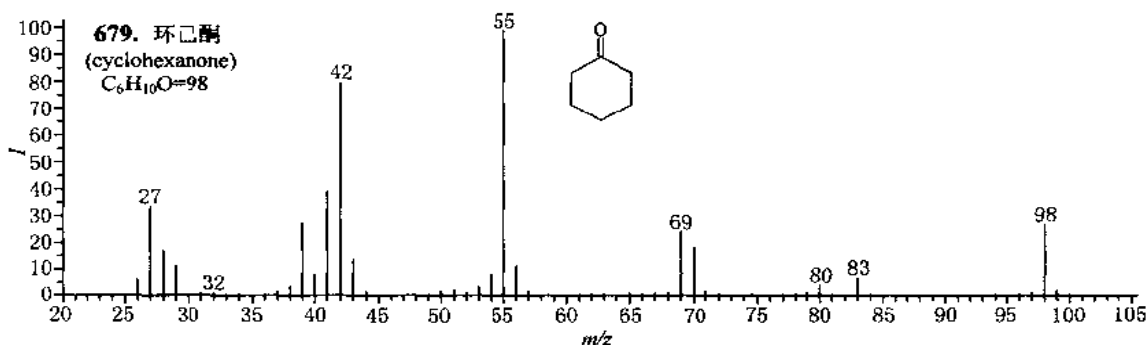
## 七、环戊三酮类

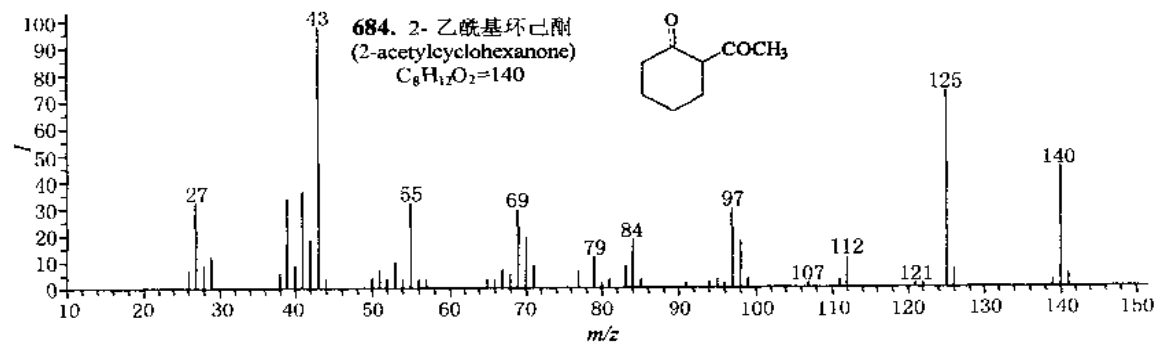
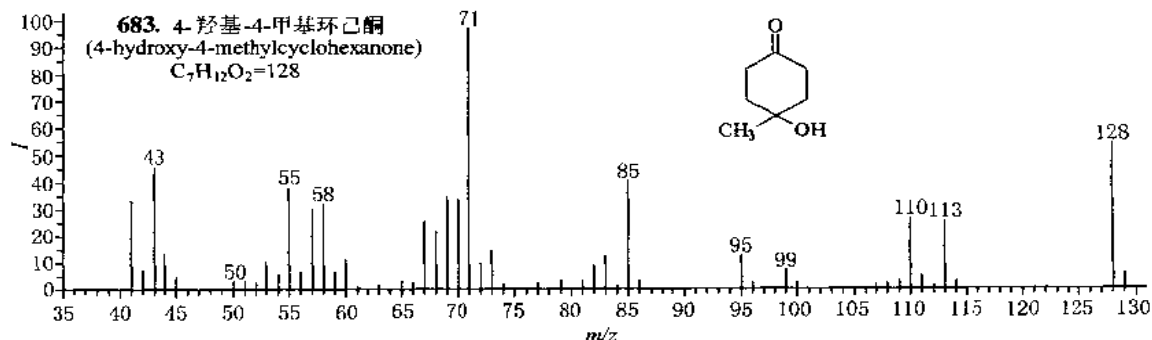
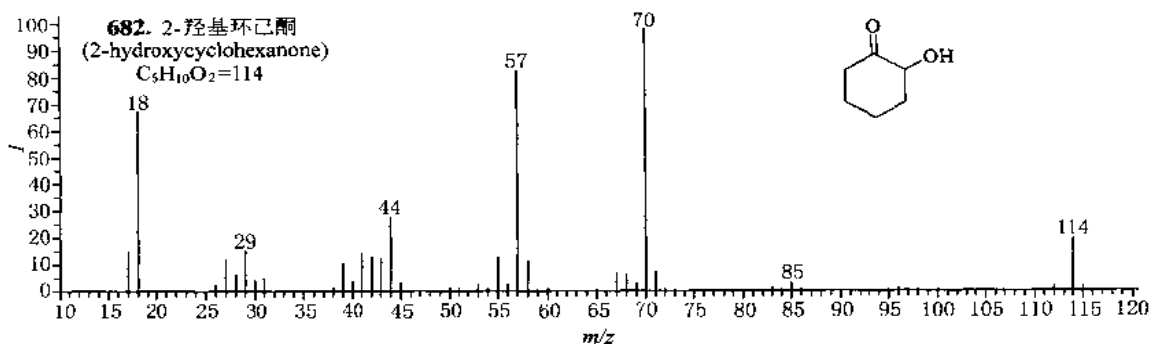
环戊三酮类 (676, 677) 的裂解有  $M-CO$ ,  $M-CHO$ ,  $M-CH_2CO$ ,  $M-CH_3CO$  和  $M-CO-CO$ 。4,5-二羟基-4-环戊烯-1,2,3-三酮 (678) 的裂解是连续失去一氧化碳。



## 八、环己酮类

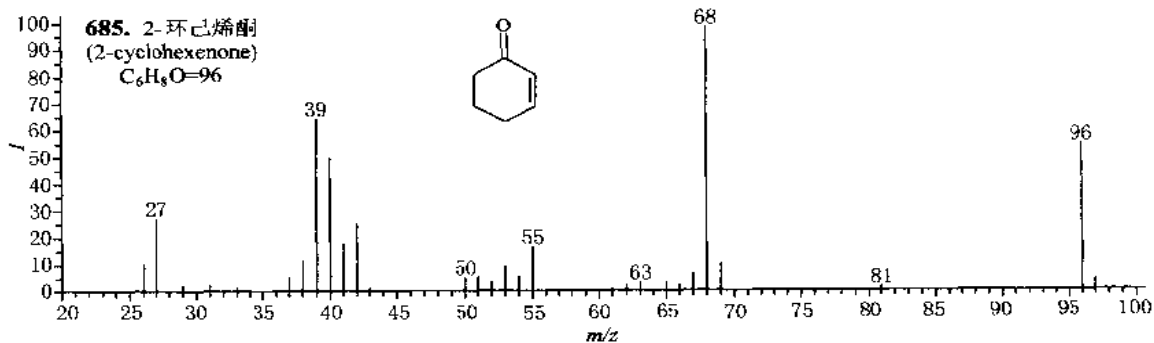
- (1) 环己酮 (679) 的裂解是  $M-CO$ ,  $M-CHO$  和  $M-C_3H_7$ , 并有乙烯酮离子。
- (2) 2-甲基环己酮 (680) 的裂解是  $M-CO$ ,  $M-CHO$ ,  $M-C_4H_9$  和  $M-C_4H_{10}$ , 并有甲基乙烯酮离子。
- (3) 2,2,6-三甲基环己酮 (681) 有  $M-C_4H_{10}$  和甲基乙烯酮离子。
- (4) 邻羟基环己酮 (682) 有失去乙烯醇的离子  $m/z$  70 和乙烯醇离子  $m/z$  44, 另有  $M-CHO-CO$  离子  $m/z$  57。
- (5) 4-羟基-4-甲基环己酮 (683) 的主要离子是  $M-C_3H_5O$  离子  $m/z$  71。
- (6) 2-乙酰基环己酮 (684) 的主要离子是  $M-CH_3$ ,  $M-CO$ ,  $M-C_3H_7$ ,  $M-C_4H_8$ ,  $M-C_3H_6COCH_3$  和乙酰基离子。



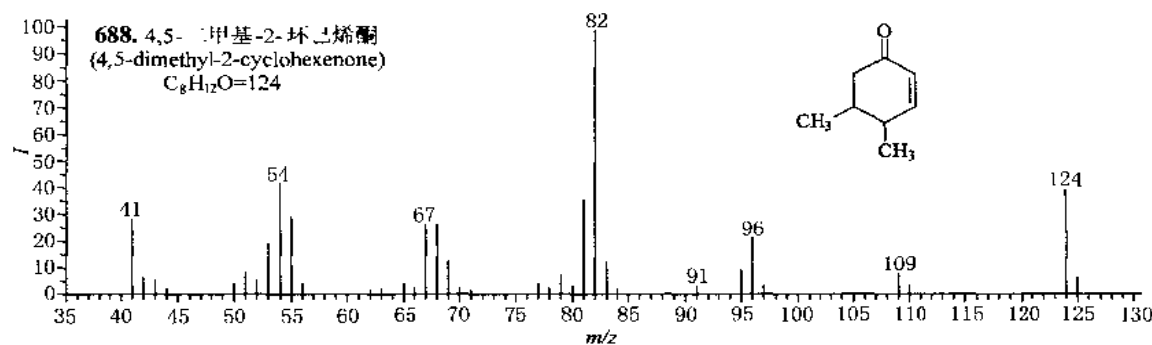
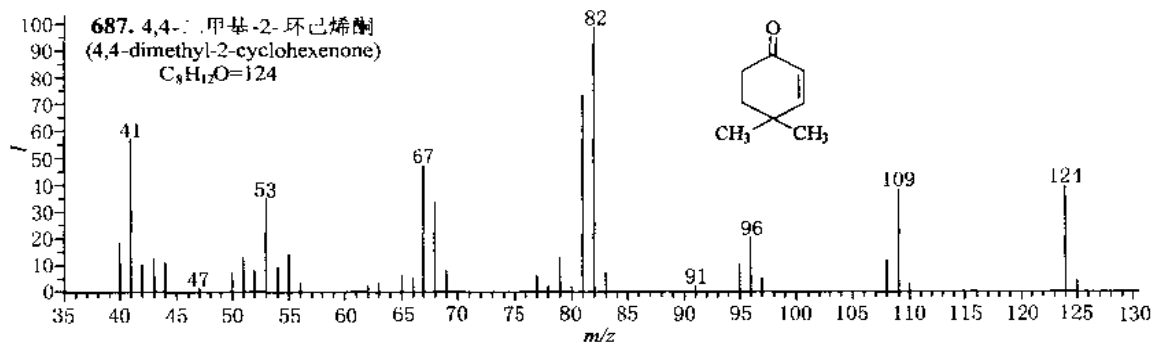
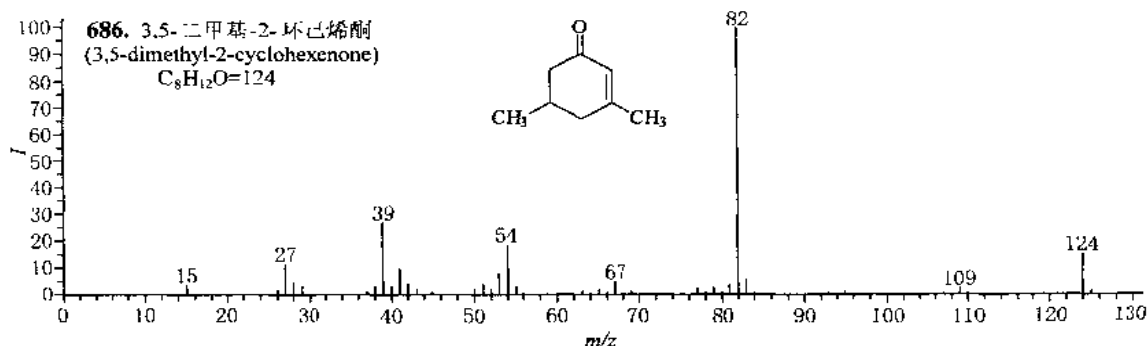


### 九、环己-2-烯酮类

环己-2-烯酮类 (685~688) 的主要裂解是 RDA 裂解失去乙烯或丙烯, 然后是失去·氧化碳, 但 4,4-二甲基衍生物 (687) 还能产生  $M-CH_2CO$  离子和  $M-CH_3CO$  离子。

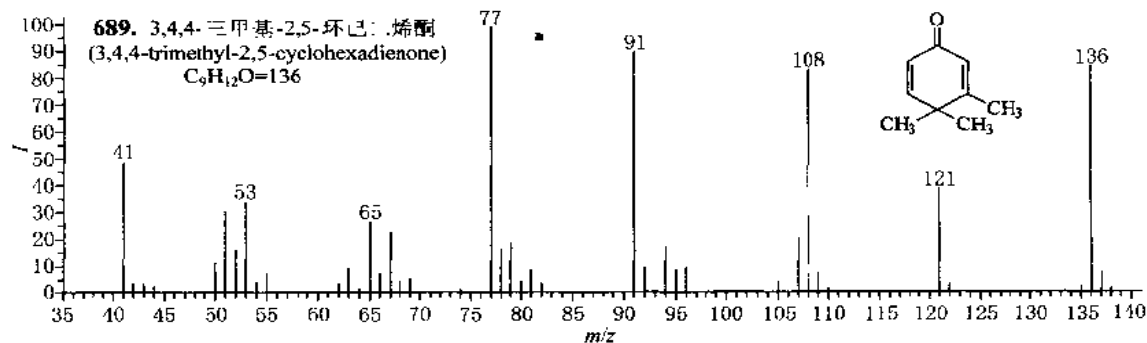






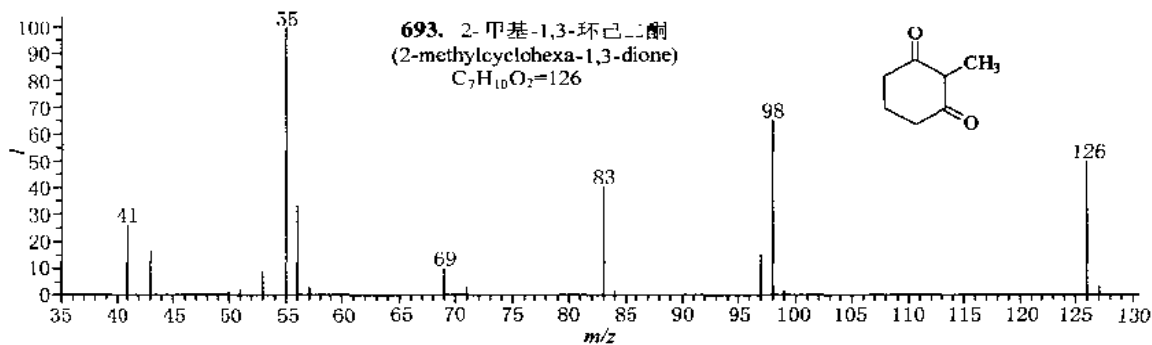
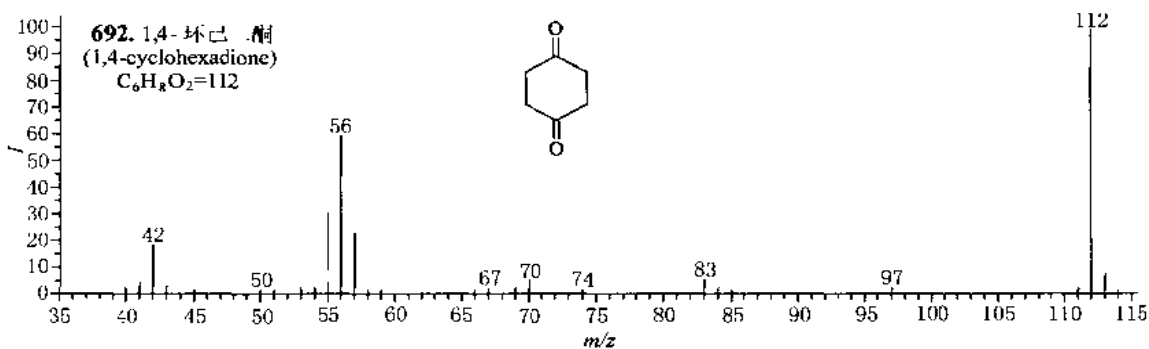
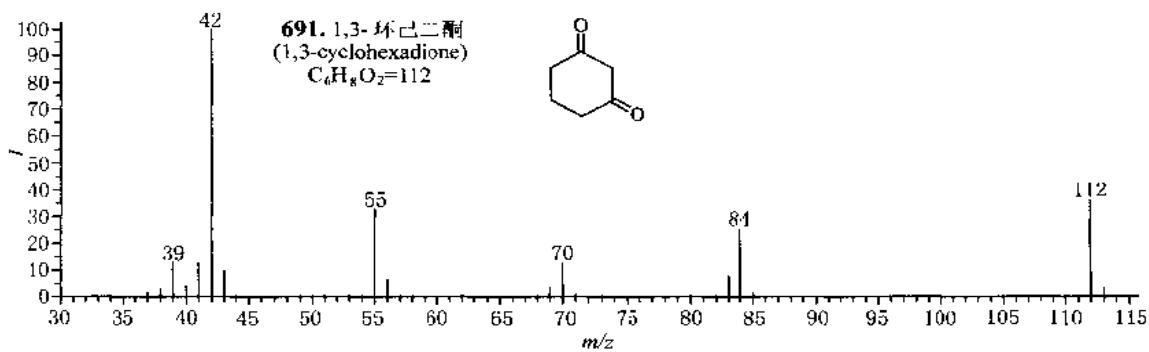
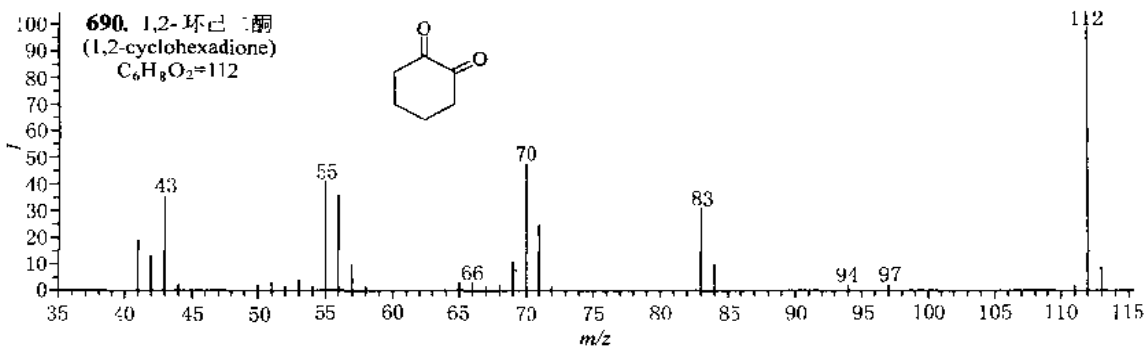
## 十、2,5-环己二烯酮类

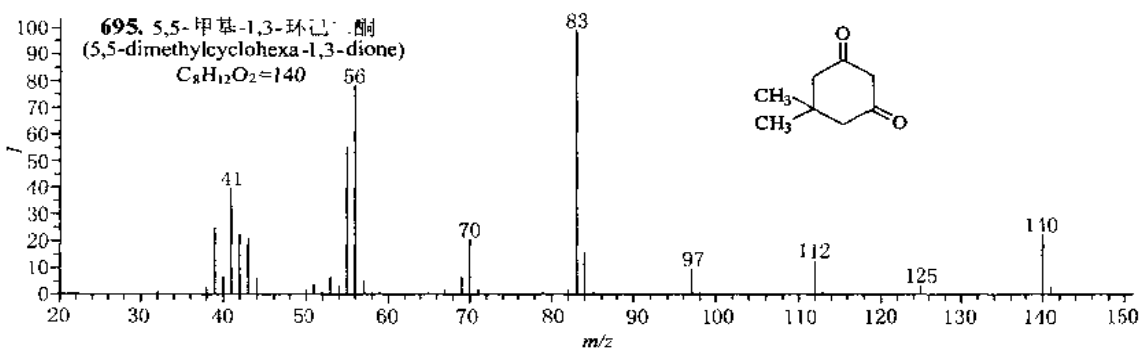
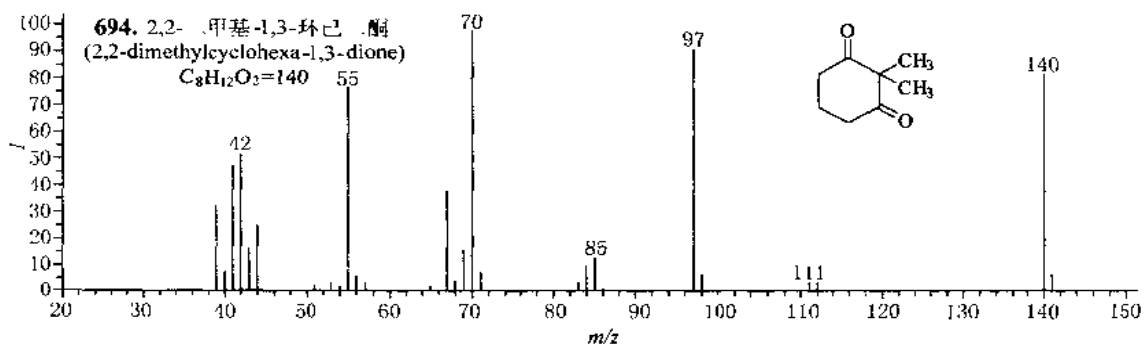
2,5-环己二烯酮类中的3,4,4-三甲基取代物(689),主要是失甲基,失一氧化碳,离子 $m/z$  91和 $m/z$  77是重排出的草蓿离子和苯基离子。



## 十一、环己二酮类

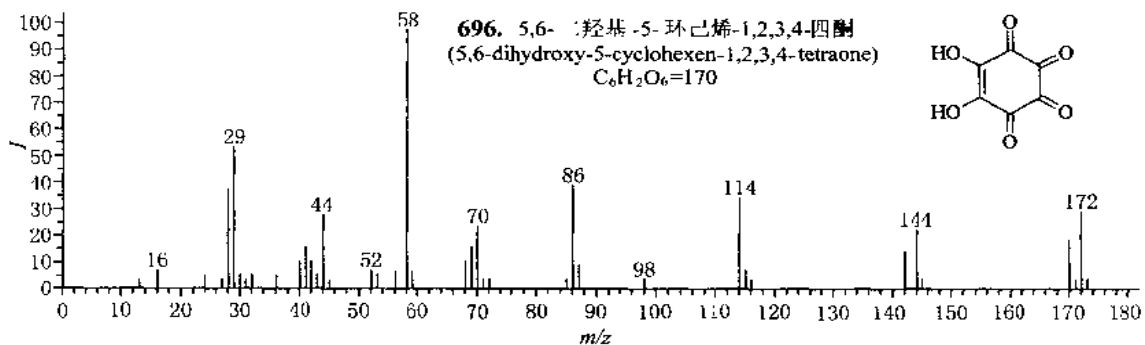
这类化合物 (690~695) 的主要离子有  $M-CO$ ,  $M-CHO$ ,  $M-CH_2CO$ ,  $M-CH_3CO$  以及  $C_2H_4CO^+$ 、 $C_3H_5O^+$  和  $CH_2CO^+$ 。有甲基取代时则加入甲基。





## 十二、环己四酮类

5,6-二羟基衍生物(696)的主要裂解是  $M-CO-CO$  以及  $M-2H-CO-CO-CO-CO$ 。



## 十三、芳香酮类

(1) 苯乙酮(697)和烷基苯乙酮类(698~702)的裂解途径都是  $M-CH_3-CO-C_2H_5$ 。

(2) 羟基苯乙酮类(703~706)的裂解途径是  $M-CH_3-CO-CO-C_2H_5$ ，二羟基苯乙酮要再多失去一分子一氧化碳而不失乙炔。

(3) 甲氧基环己酮(707)的主要裂解途径是  $M-CH_3-CO-CH_2O-C_2H_5$ ，另一裂解途径是失乙醛和重排失一氧化碳。

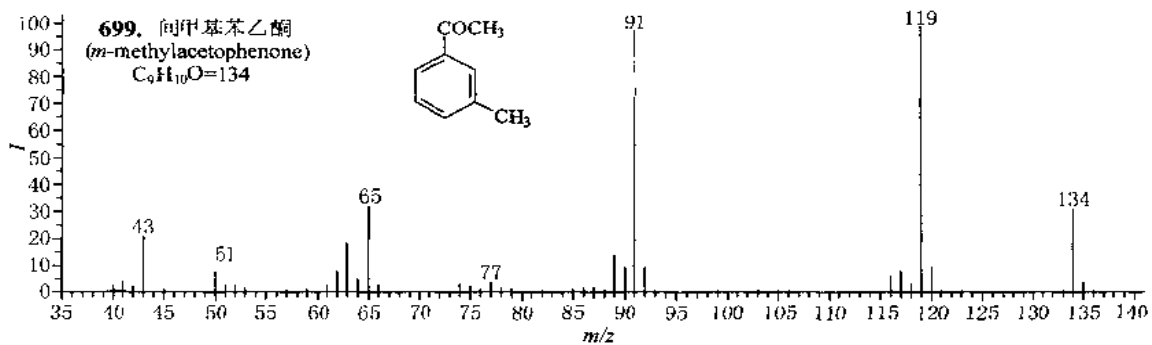
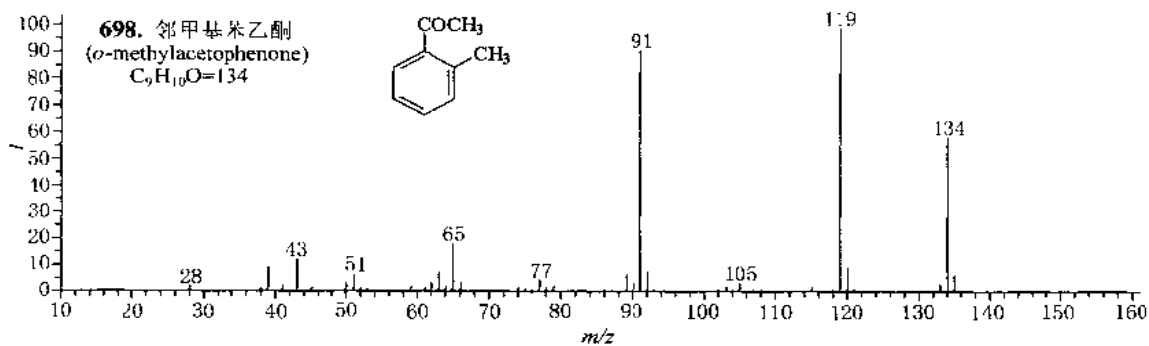
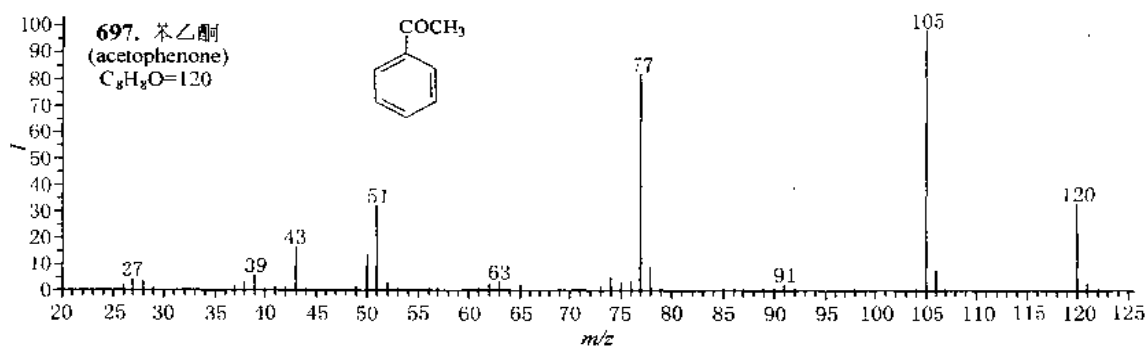
(4) 乙酰基苯乙酮(709, 710)的裂解途径与羟基苯乙酮一样，即  $M-CH_3-CO-CO-$

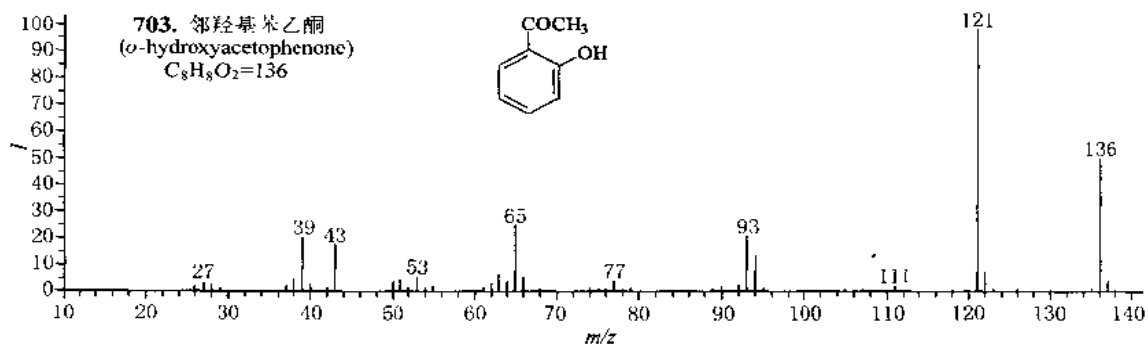
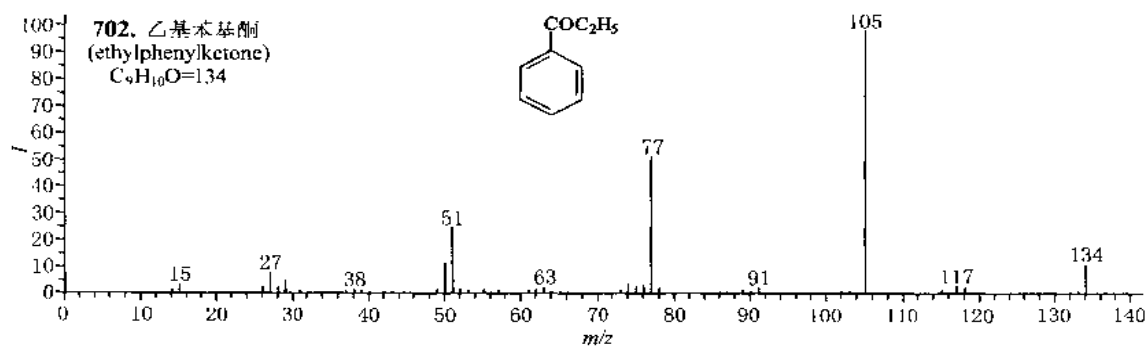
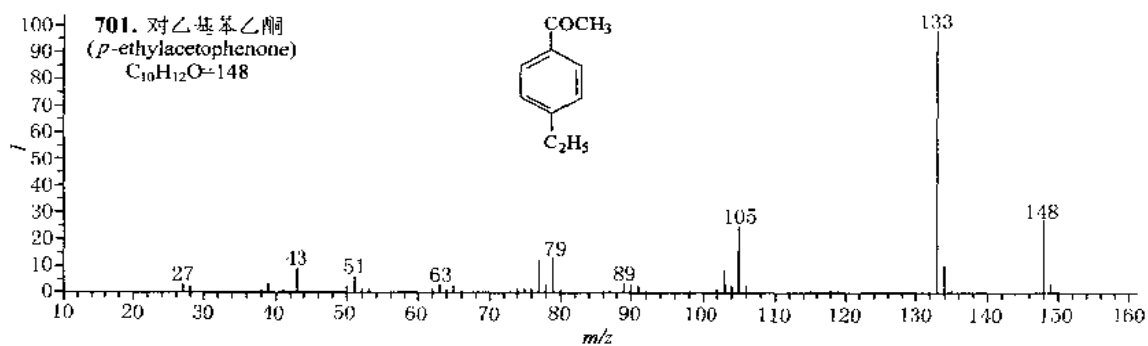
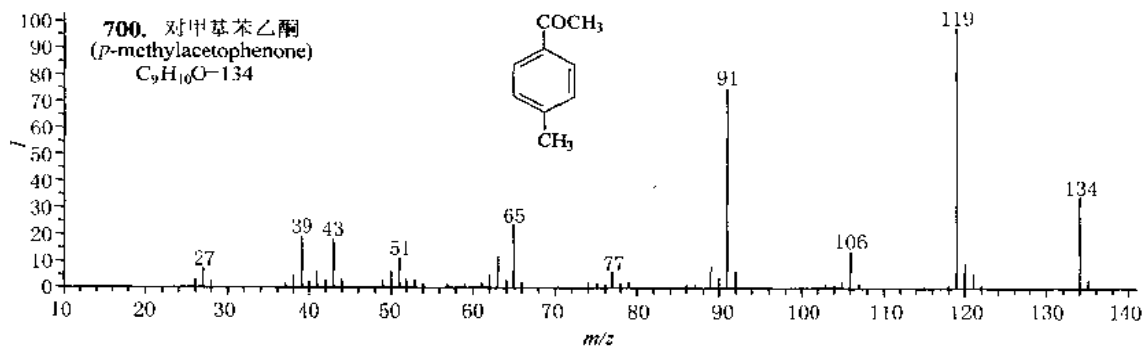
$C_2H_2$ ，失去第二分子一氧化碳时要发生甲基的重排反应。

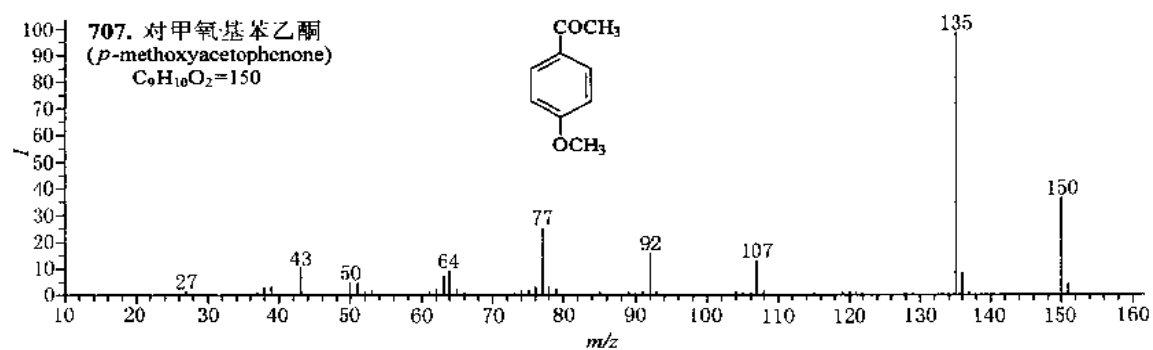
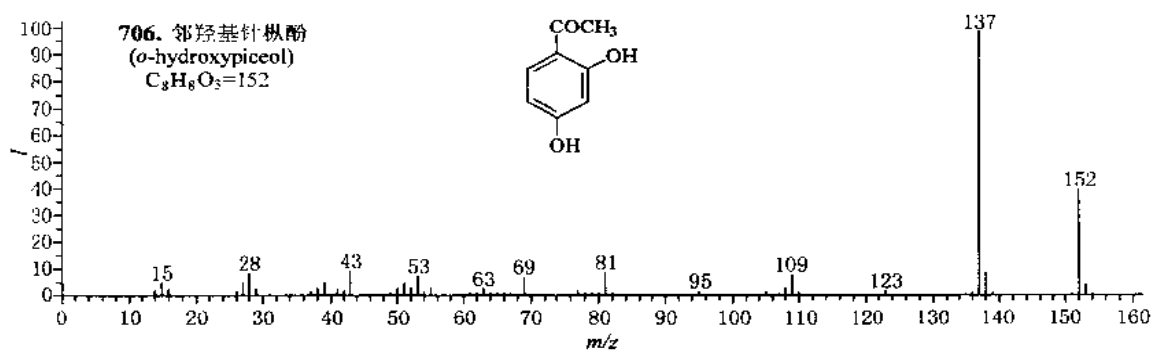
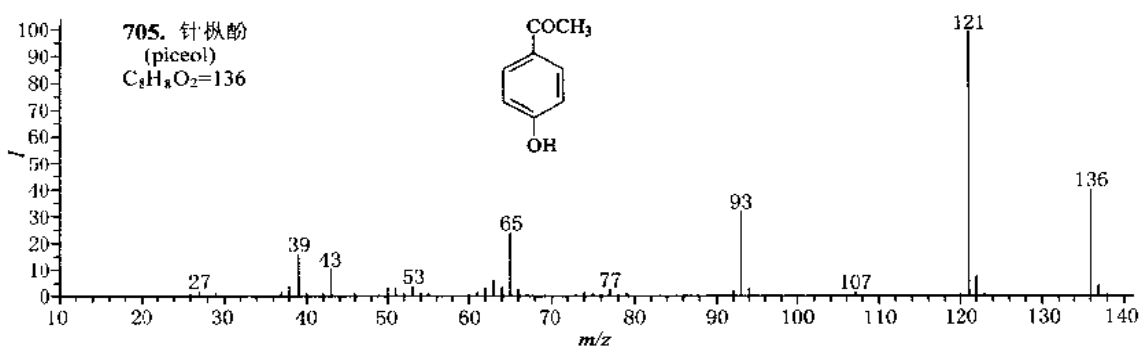
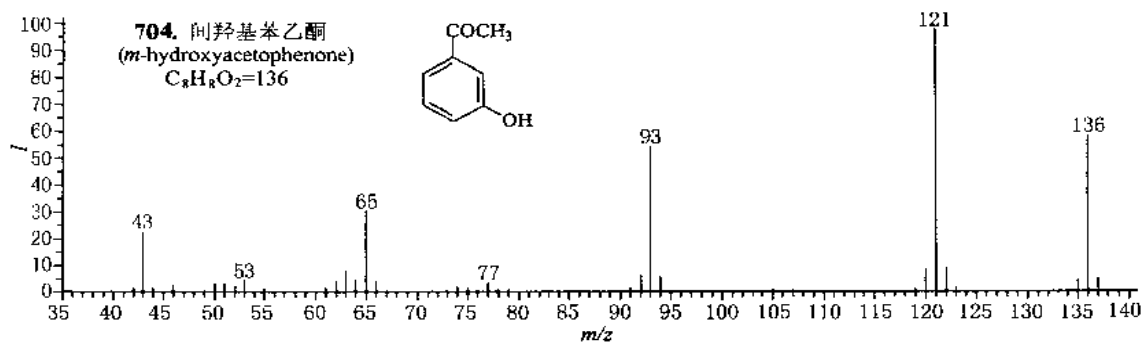
(5) 二苯酮 (711) 的裂解途径是  $M - C_6H_5 - CO - C_2H_2$ ，二苯基乙二酮 (712) 则为  $M - C_6H_5CO - CO - C_2H_2$ 。

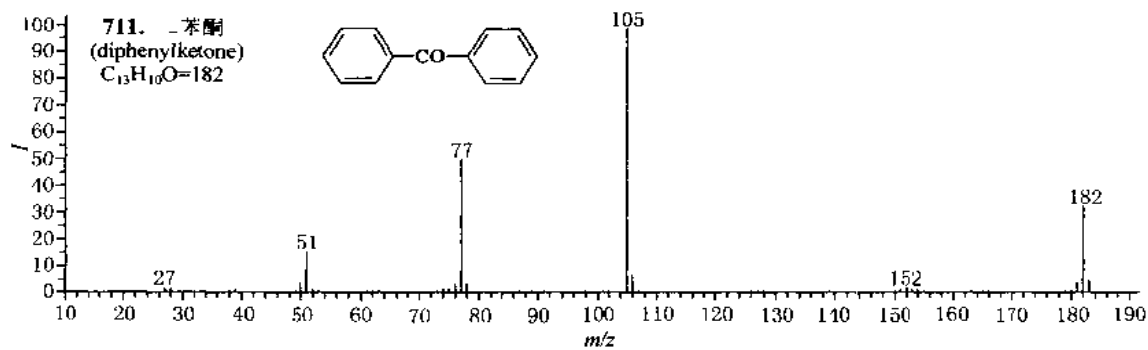
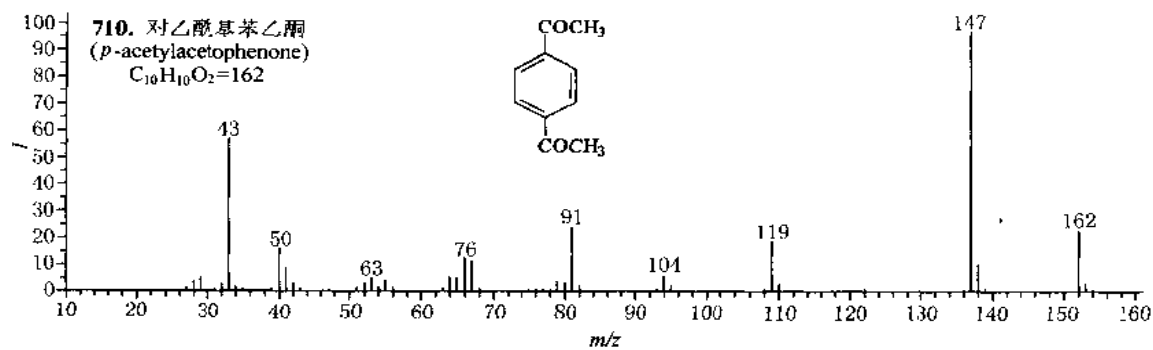
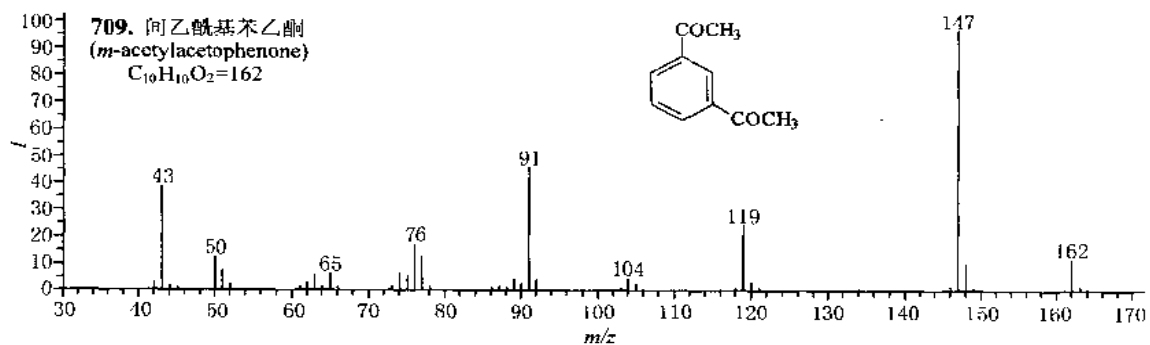
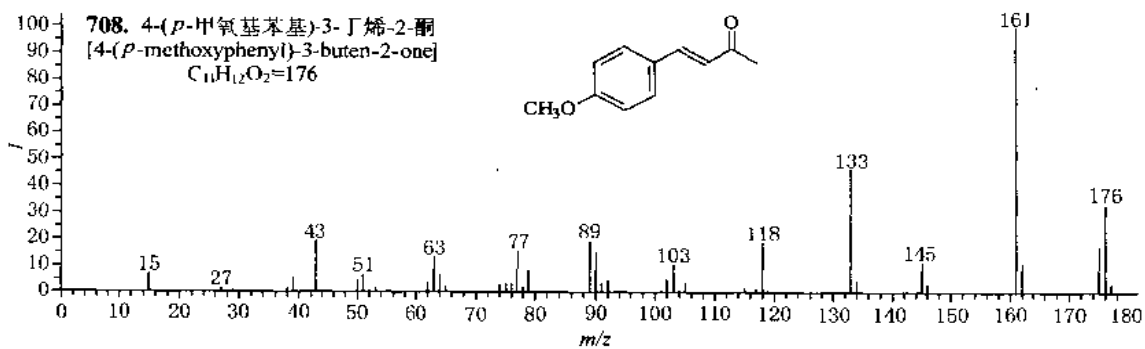
(6) 环庚三烯酮 (713) 的裂解途径是  $M - CO - C_2H_2$ 。

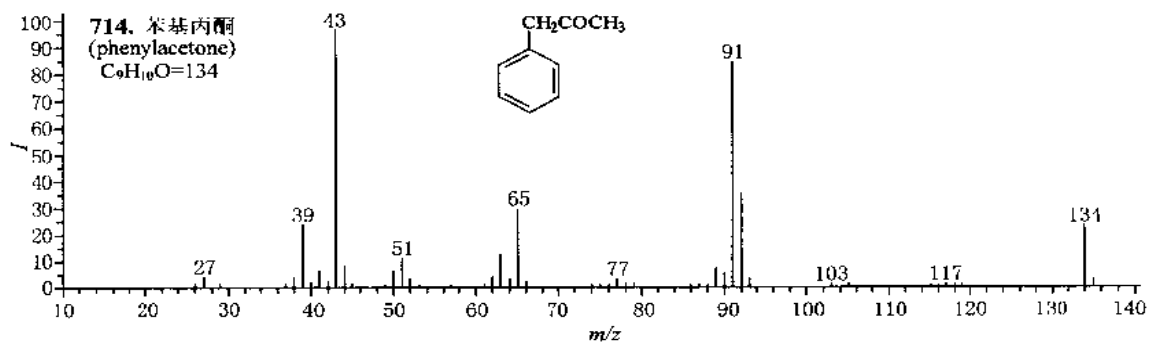
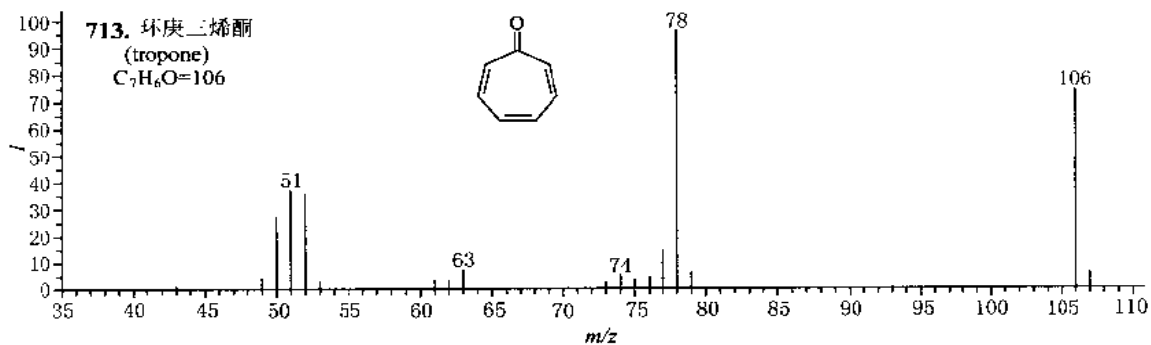
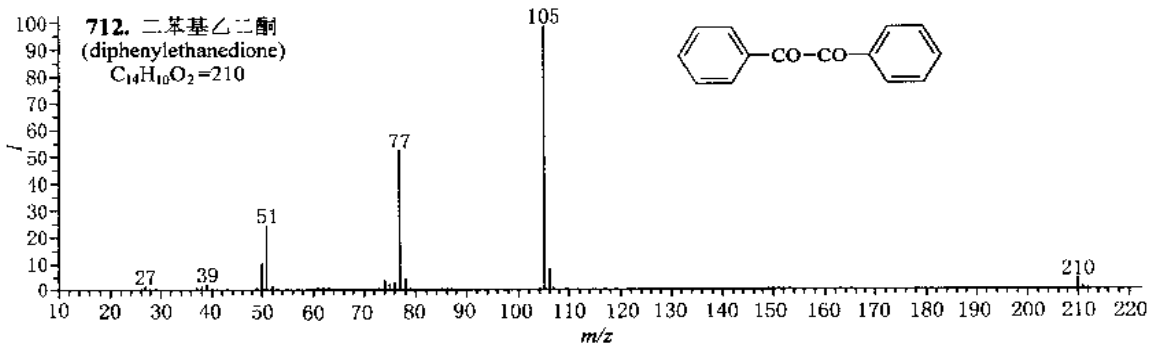
(7) 苯基丙酮 (714) 的主要裂解途径是  $M - CH_3CO - C_2H_2$ ，另有离子  $m/z$  43 ( $CH_3CO^+$ ) 和能进行麦氏重排裂解失去乙烯酮得离子  $C_7H_8^+$  ( $m/z$  92)。













## 第七章 羧酸、酸酐、酰卤、酰胺和酯

### 第一节 羧酸类

#### 一、直链脂肪一元酸类

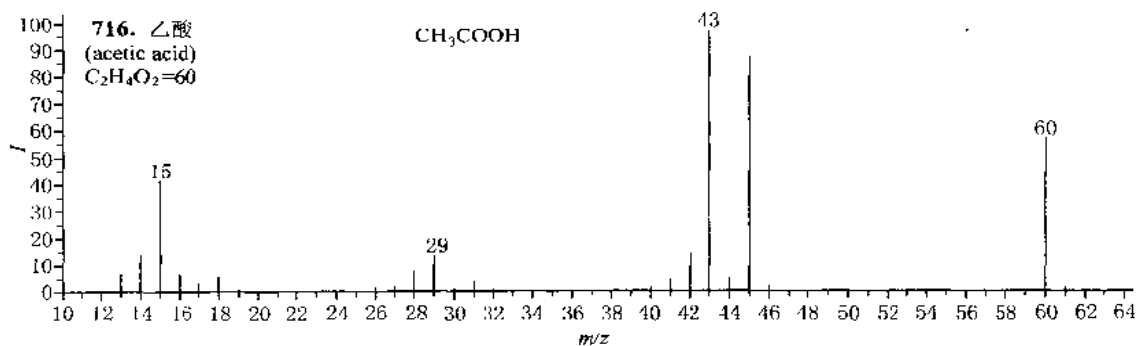
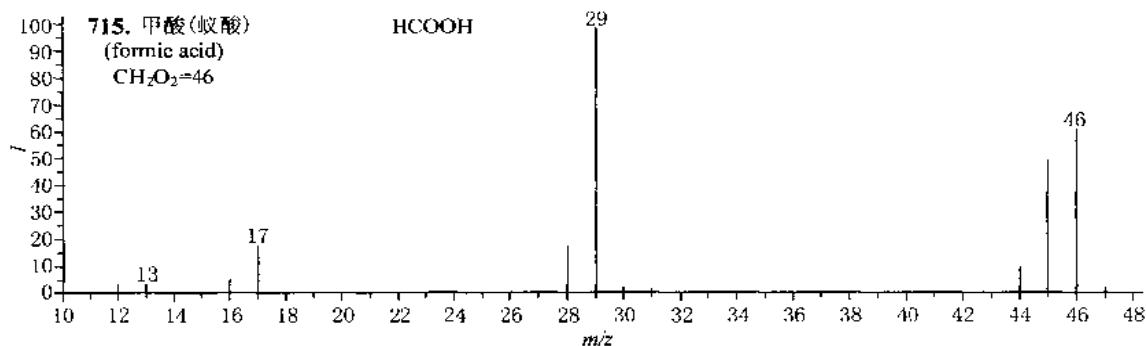
(1) 甲酸(715)、乙酸(716)和丙酸(717)都能进行羰基两侧的 $\alpha$ -裂解,失去氢、甲基、乙基和羟基。

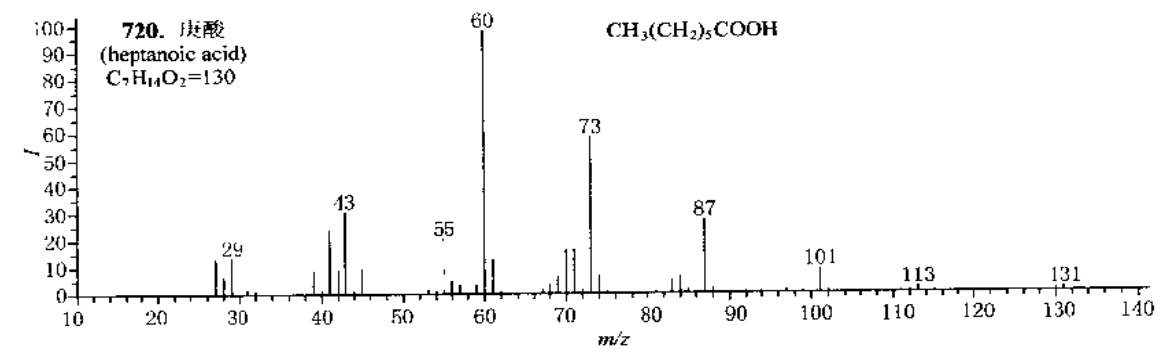
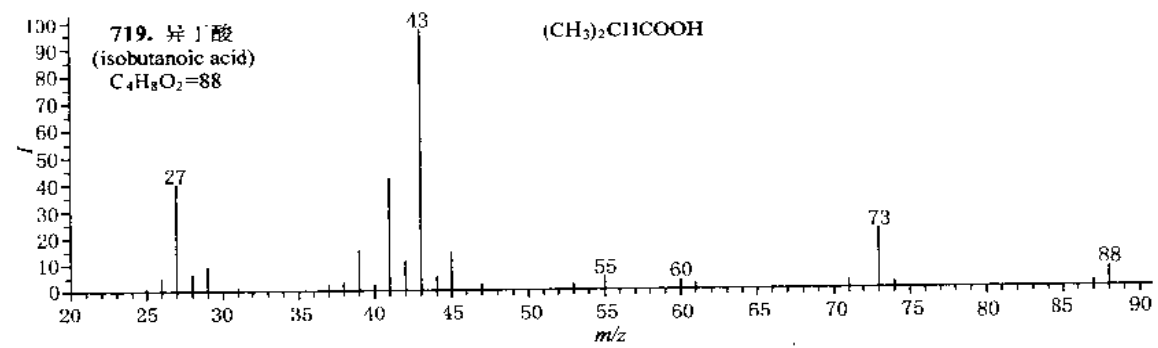
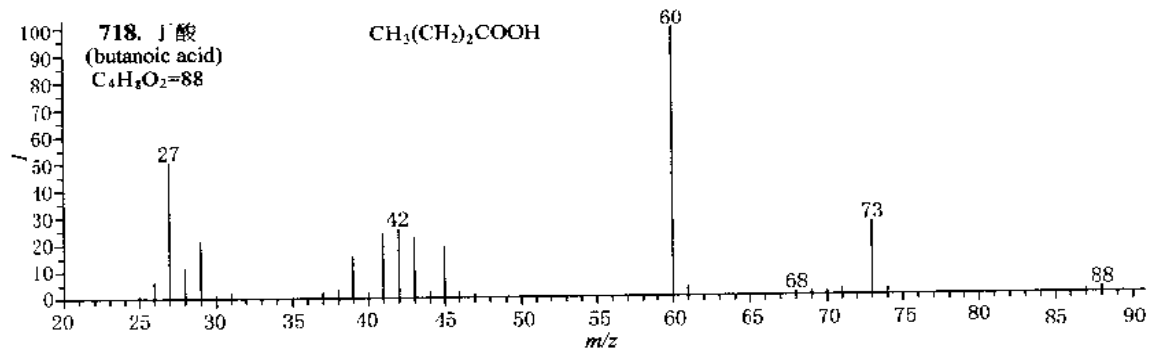
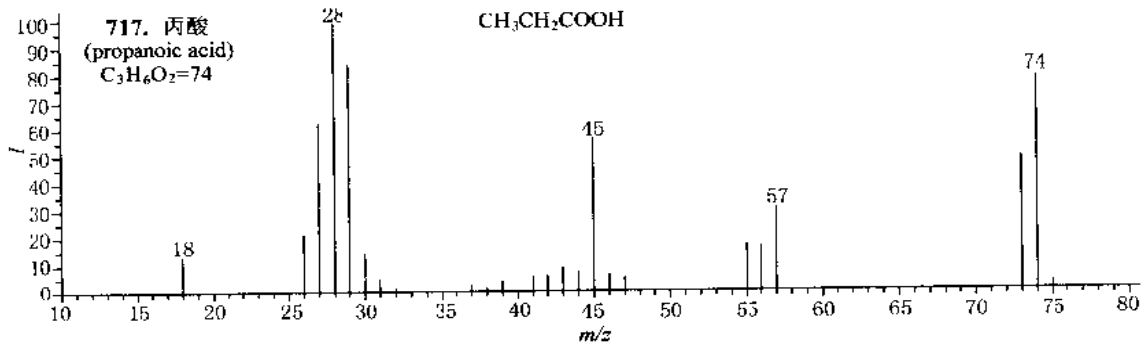
(2) 自丁酸(718)开始以上的各羧酸,都有麦氏重排离子 $m/z$  60,羧基离子 $m/z$  45则普遍存在。

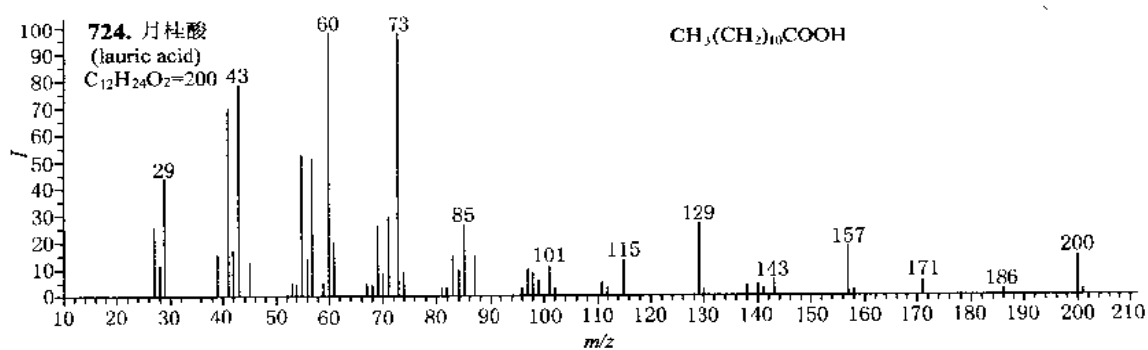
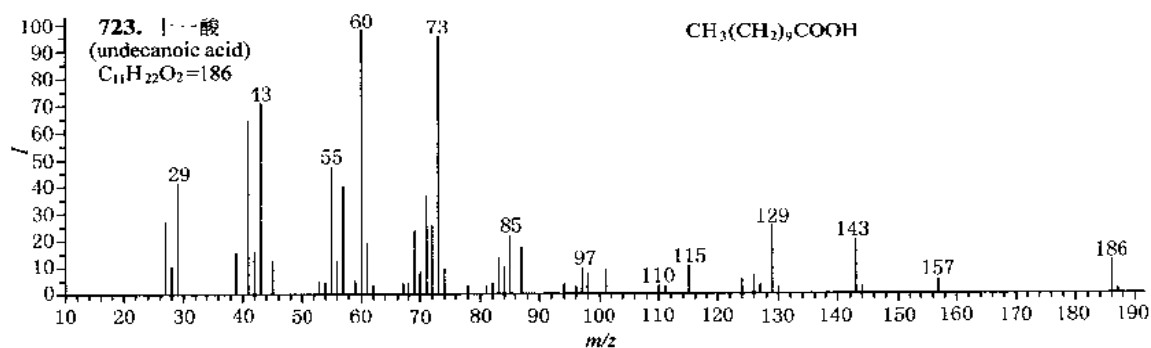
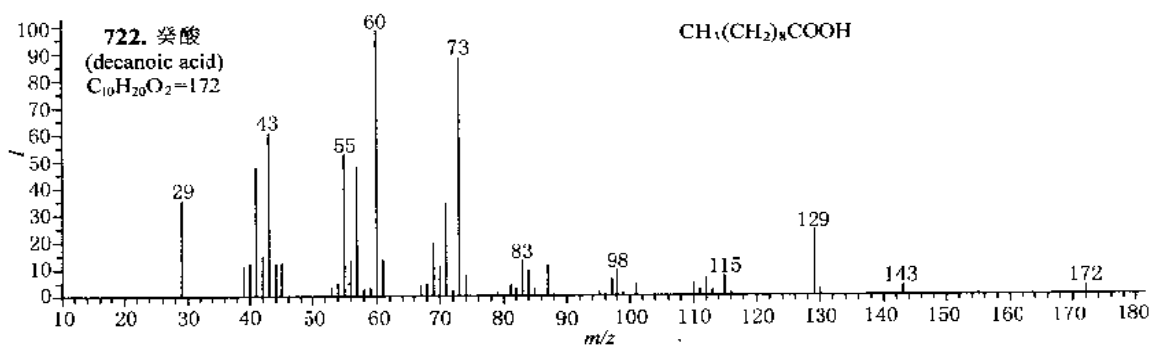
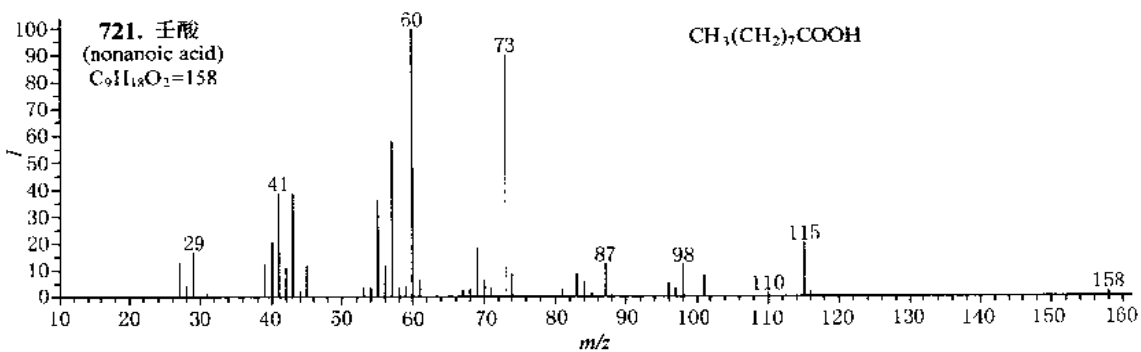
(3) 自丁酸(718)开始以上的各羧酸,都有强峰 $m/z$  73( $^-CH_2CH_2COOH$ ),随着烷链的加长,由 $m/z$  73开始,每增加4个亚甲基,即出现1个较强的含羧基的离子,这些离子可用通式 $^-CH_2)_nCOOH$ 表示, $n=2, 6, 10, 14$ 等,分别为 $m/z$  73, 129, 185, 241, 297...各离子相差 $56u$ 。

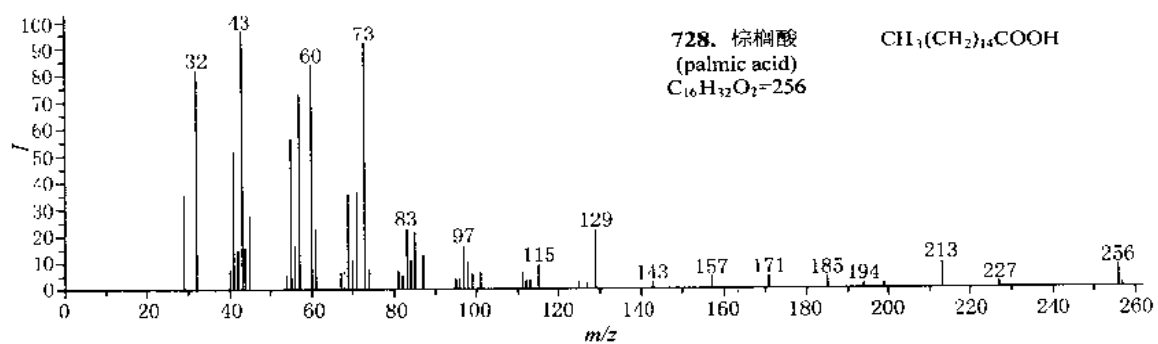
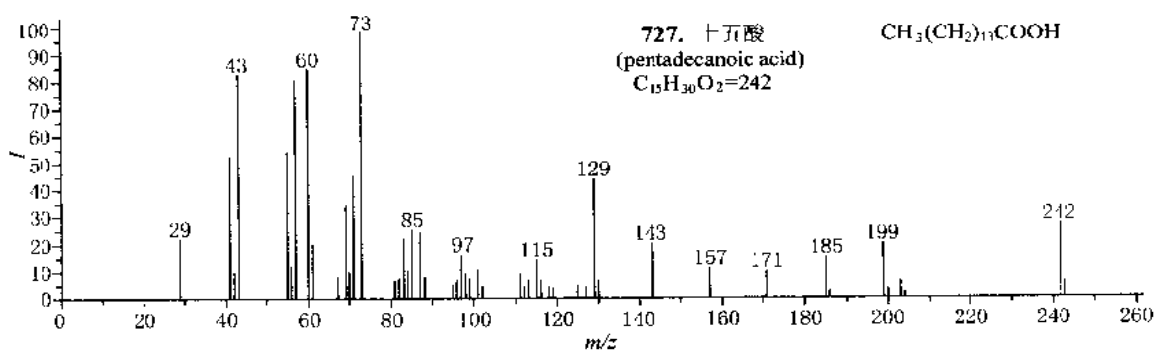
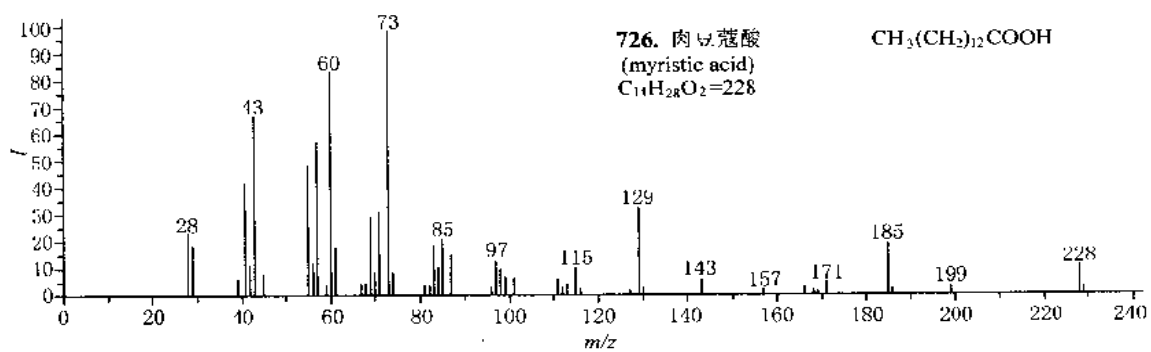
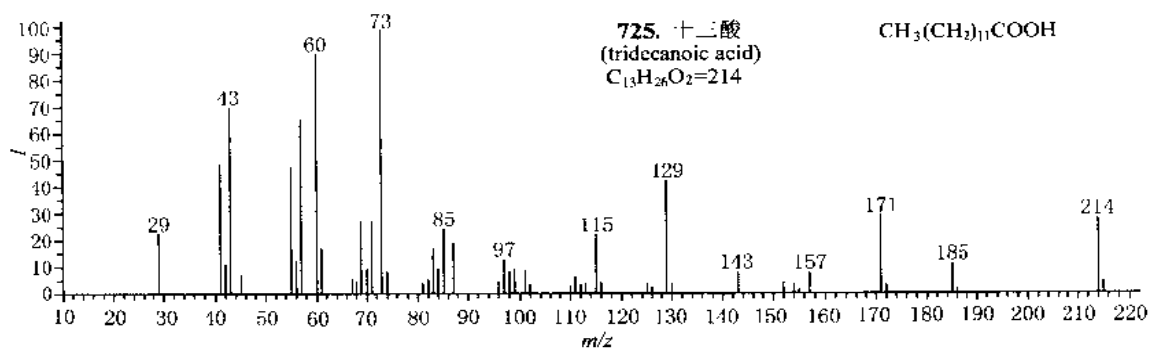
(4)  $\alpha$ -羟基乙酸(735)的主要离子是 $m/z$  31( $CH_2-OH$ ), $\alpha$ -羟基丁酸(736)有麦氏重排离子 $m/z$  76,其他离子是 $M-COOH$ 和 $M-COOH-C_2H_5$ 。

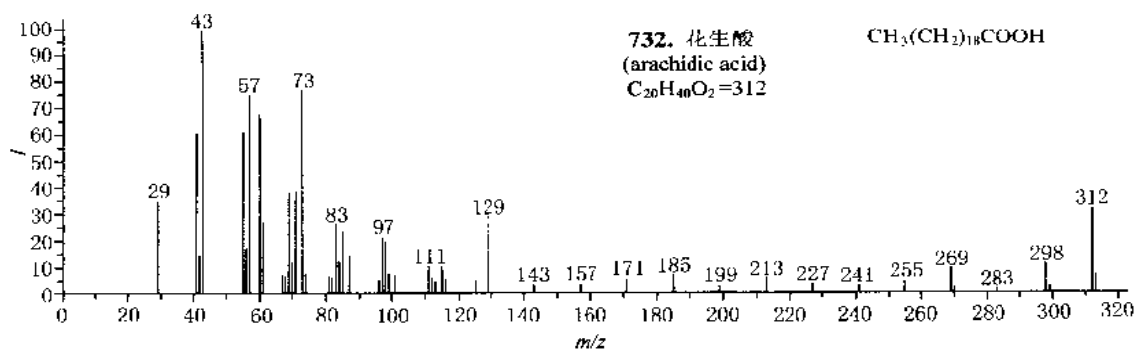
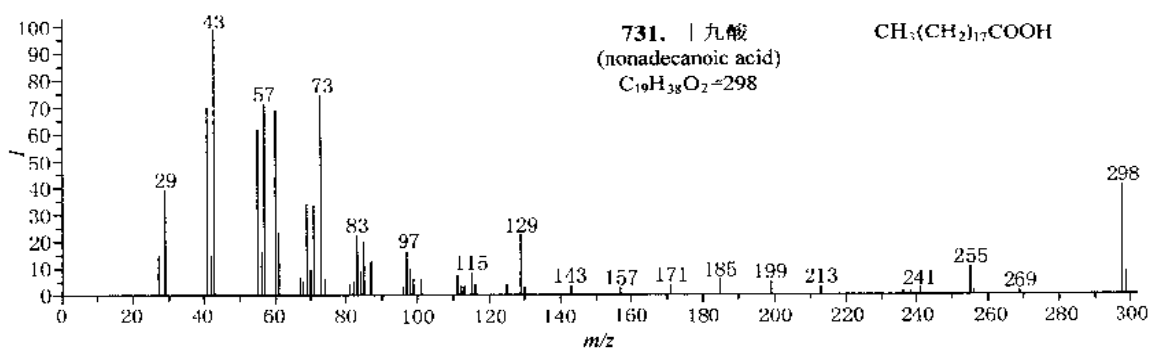
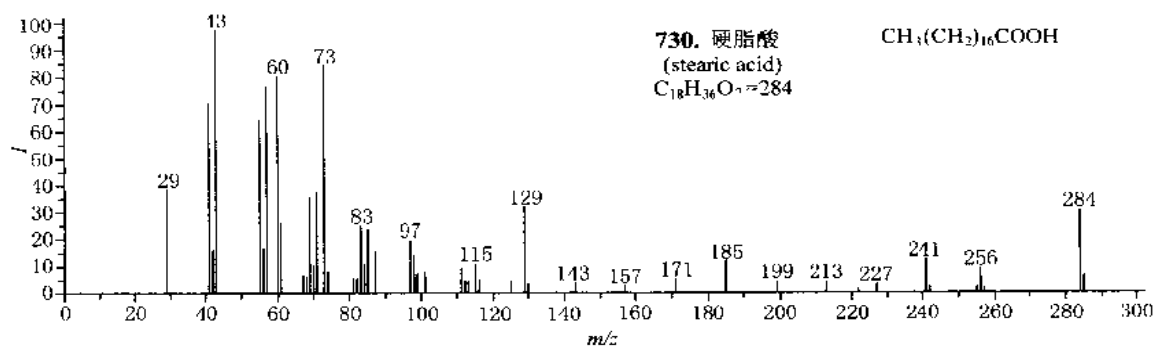
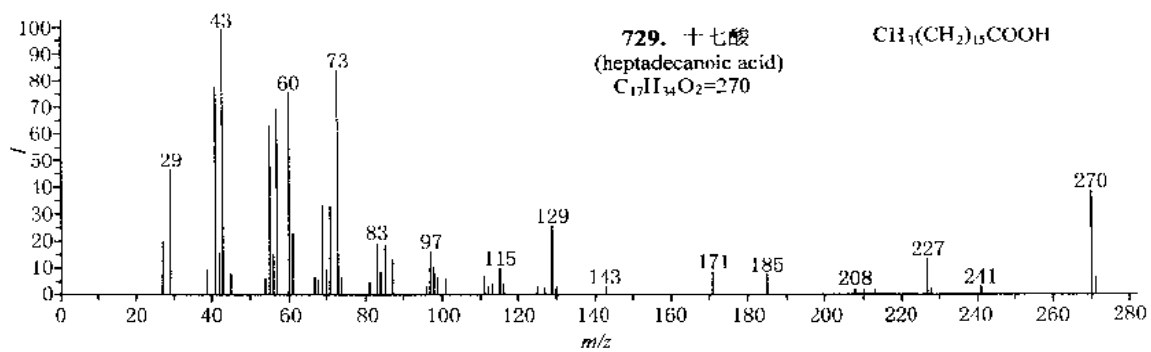
(5) 烯酸类(737~739)都有 $M-OH$ 和含双键的烃基离子。

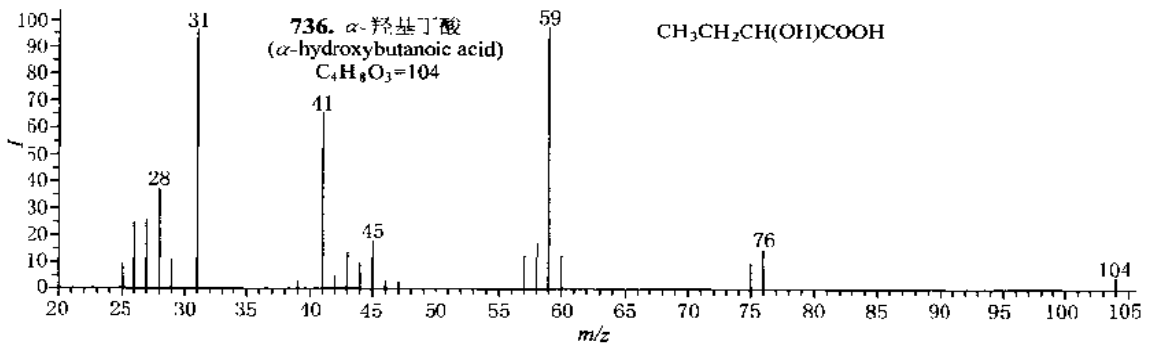
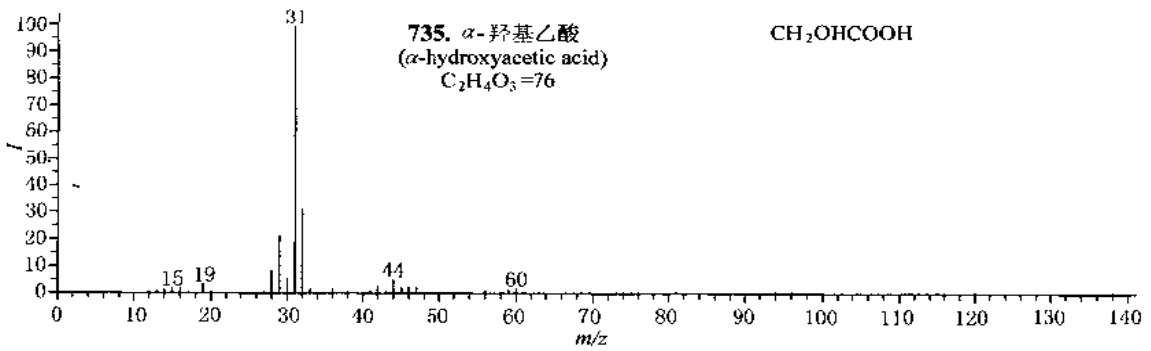
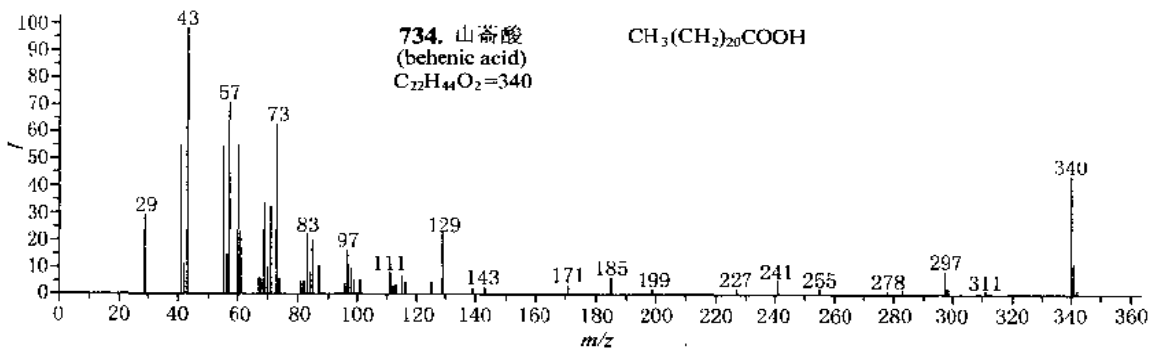
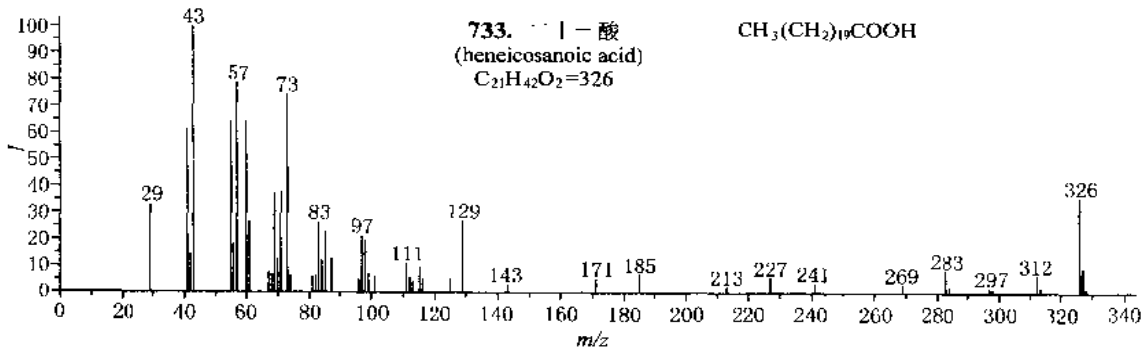


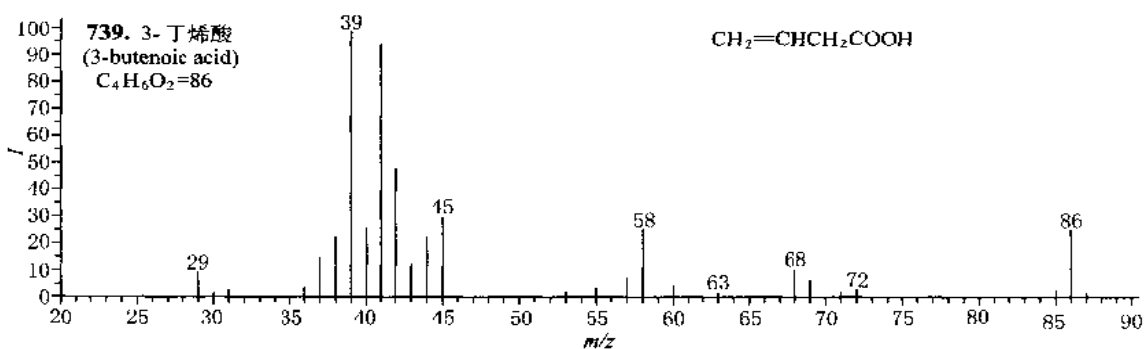
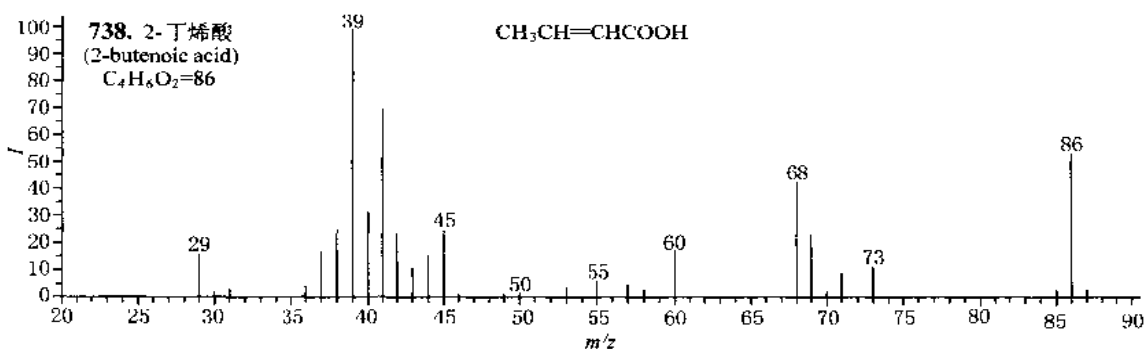
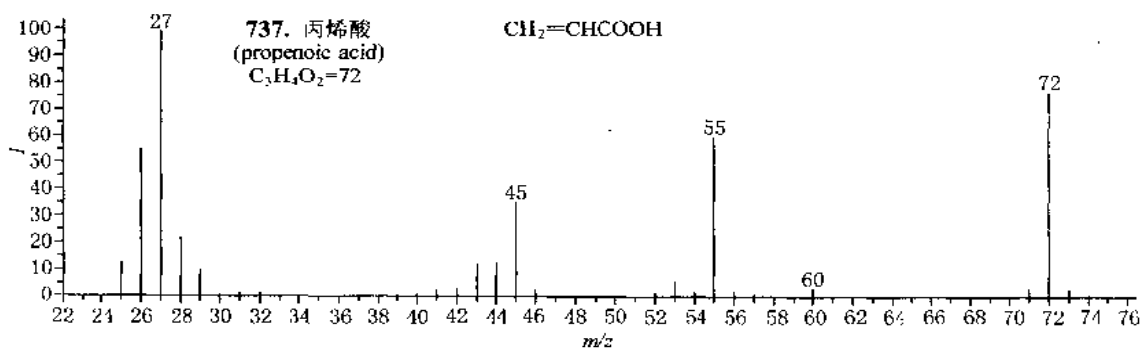










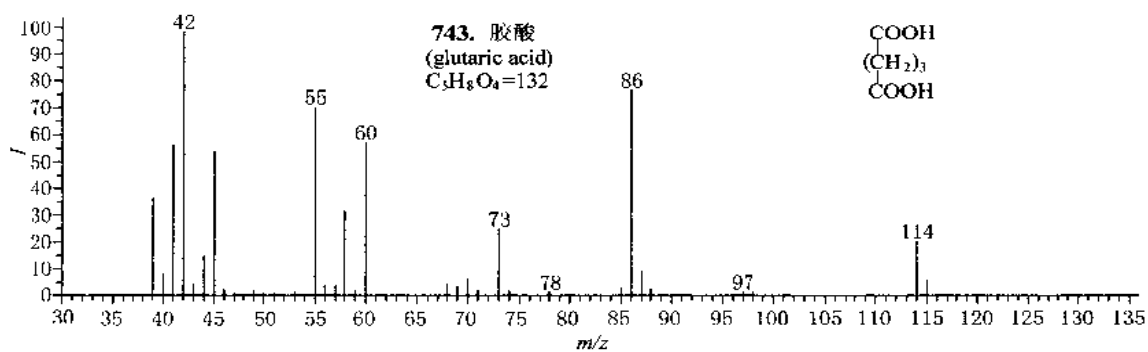
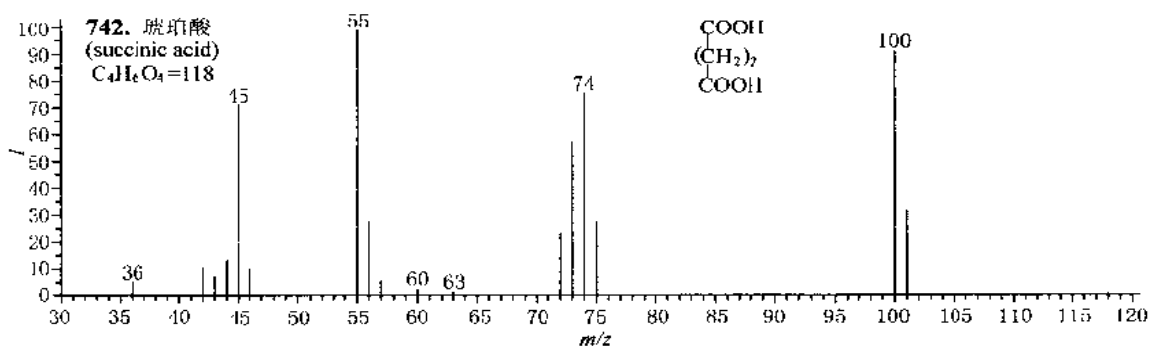
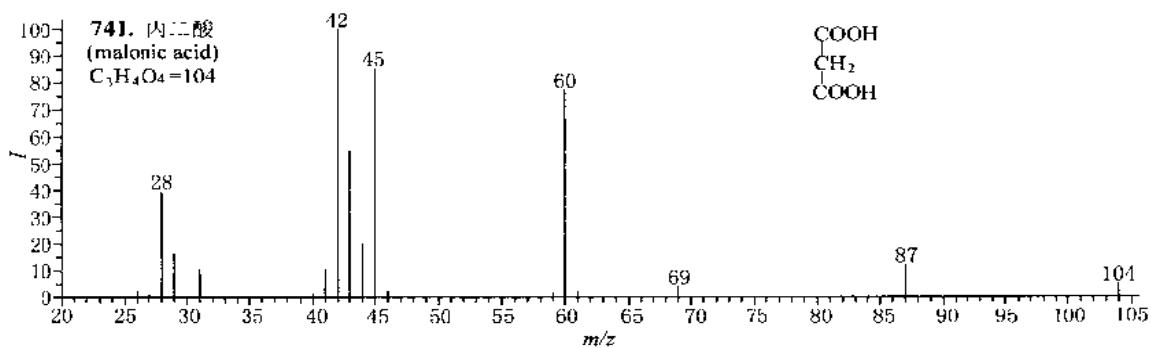
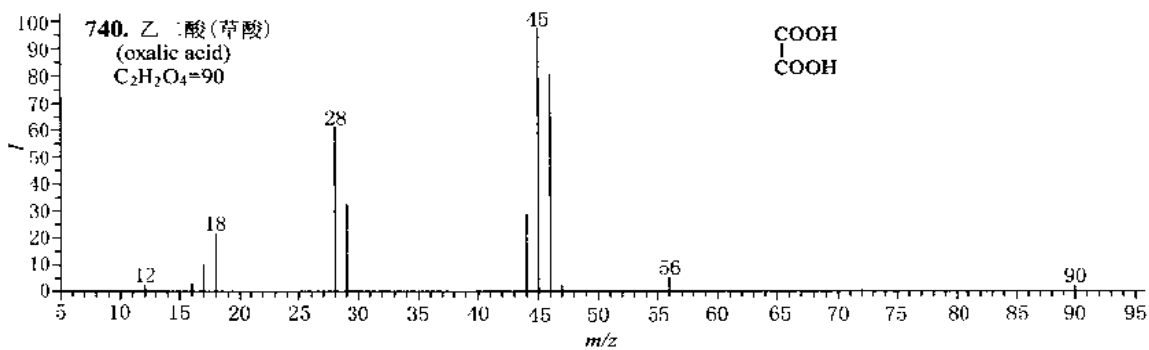


## 二、直链脂肪二元酸类

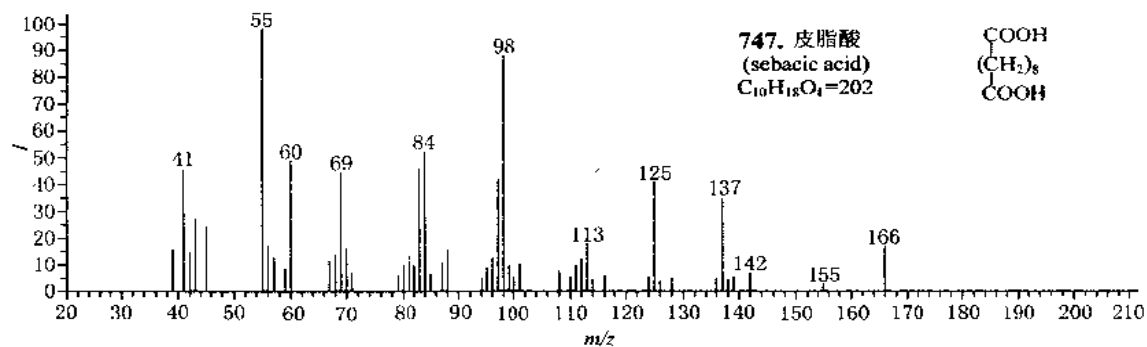
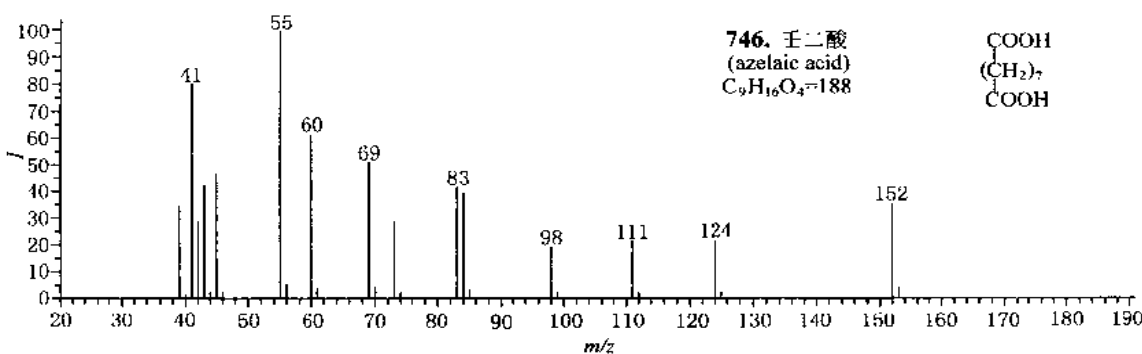
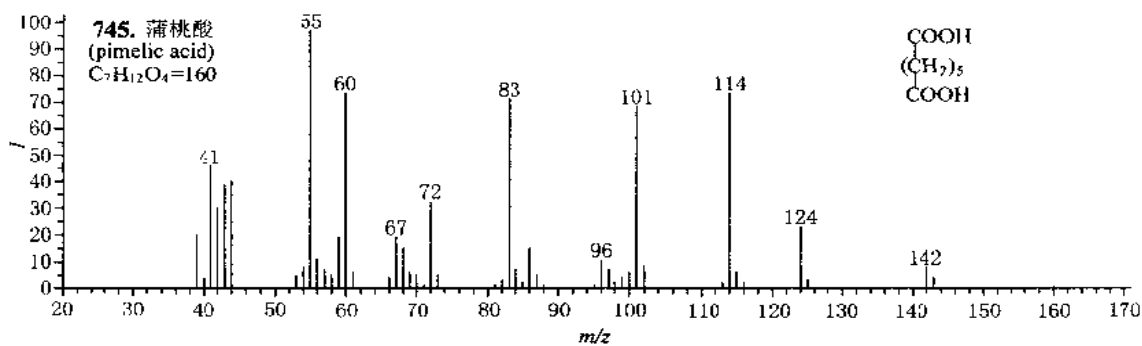
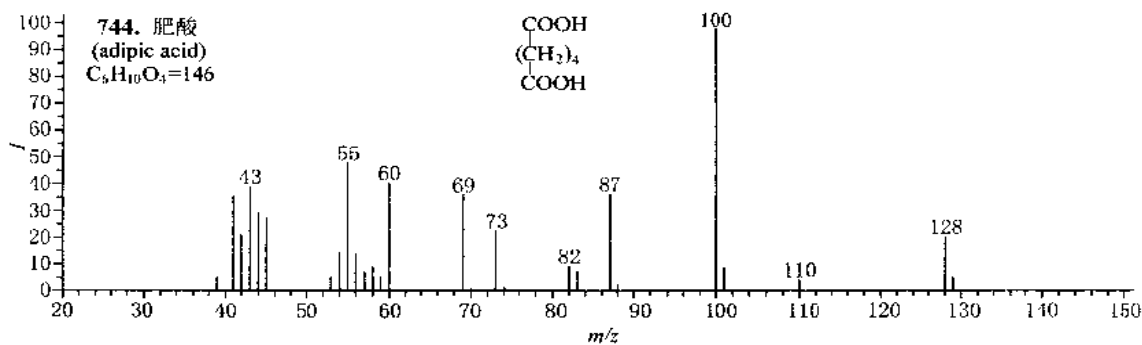
(1) 乙二酸 (740)、丙二酸 (741)、琥珀酸 (742)、胶酸 (743)、肥酸 (744) 和蒲桃酸 (745) 都有  $M-OH$ ,  $M-H_2O$ ,  $M-CO_2$ ,  $M-COOH$  和  $M-HCOOH$  以及羧基离子。丙二酸 (741) 的离子  $m/z$  42 是  $M-CO_2-H_2O$  生成的乙烯酮离子, 琥珀酸 (742) 的离子  $m/z$  55 是  $M-H_2O-COOH$  的产物。自胶酸 (743) 起以上各酸都有  $M-CH_2COOH$  离子和麦氏重排离子。

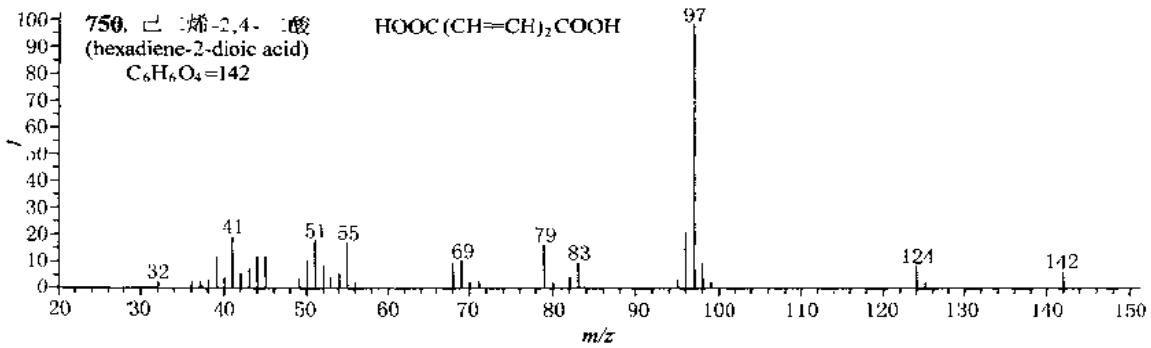
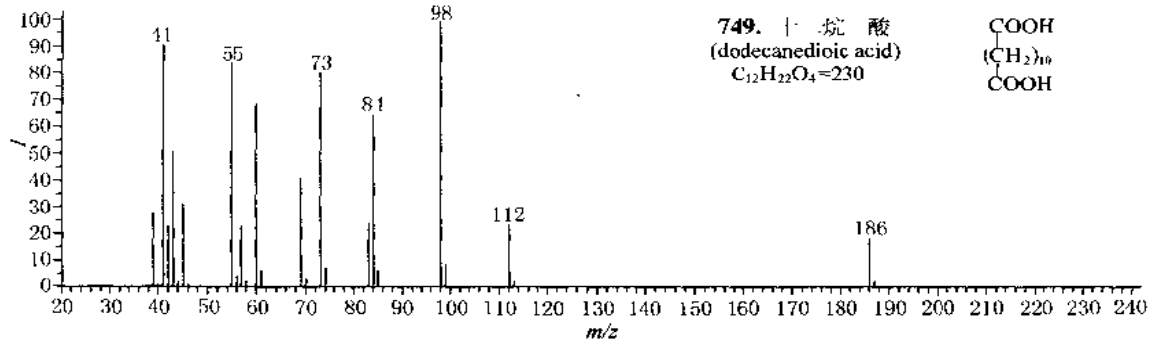
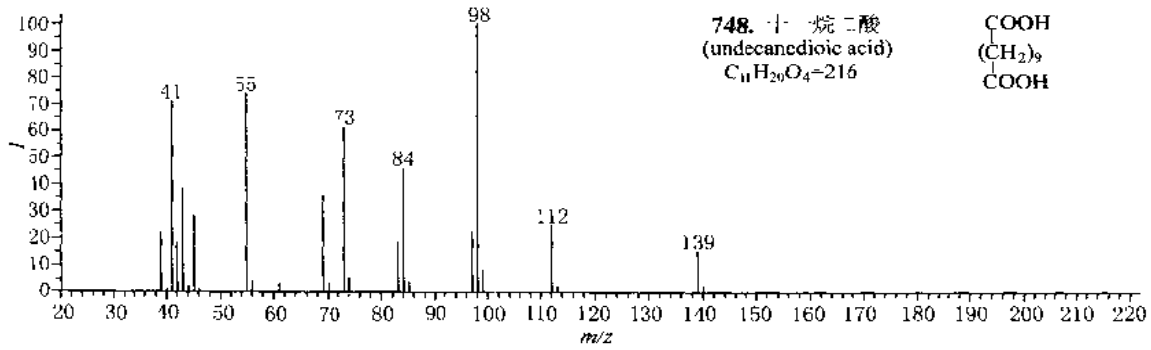
(2) 壬二酸以上各酸 (746~749) 的麦氏重排离子 ( $m/z$  60) 仍存在,  $^+CH_2CH_2COOH$  离子也存在, 其他离子尚难解释。

(3) 己二烯-2,4-二酸 (750) 的强峰  $m/z$  97 是  $M-COOH$  离子。



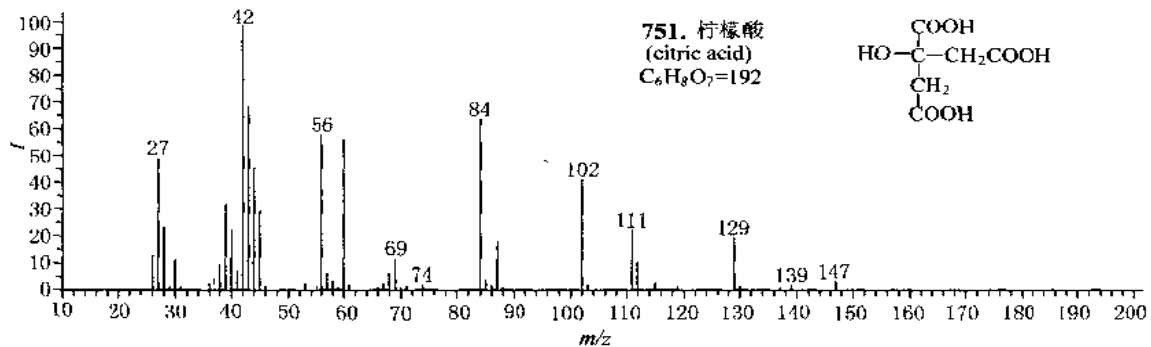






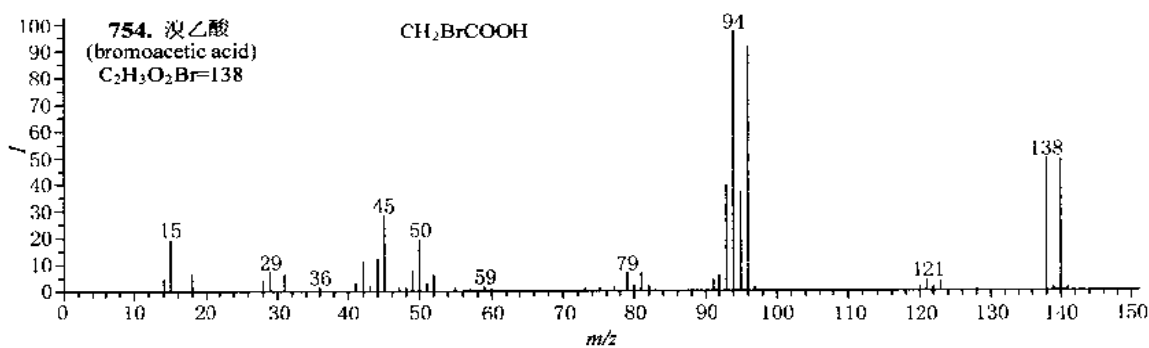
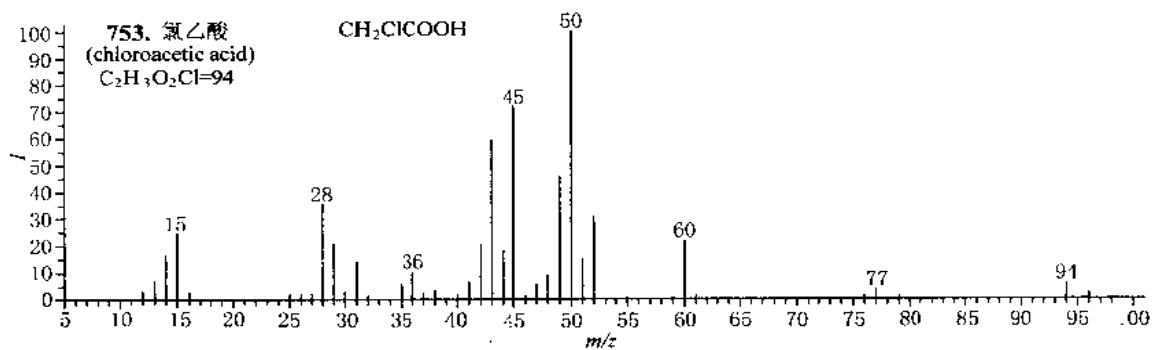
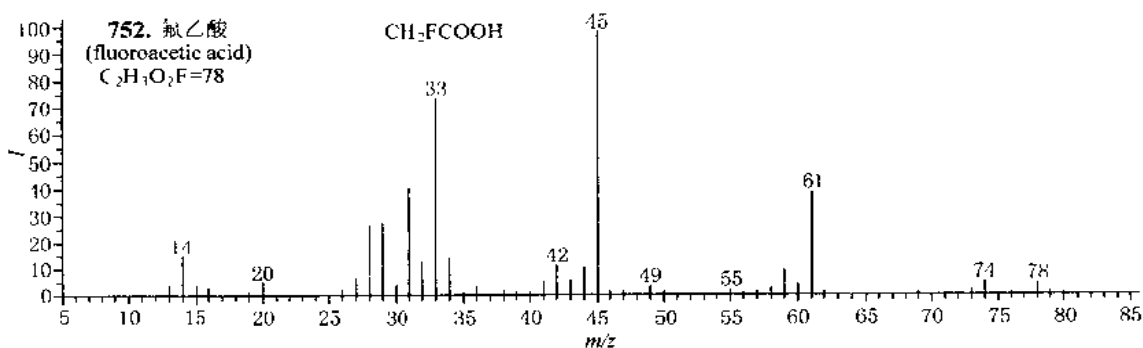
### 三、直链脂肪三元酸类

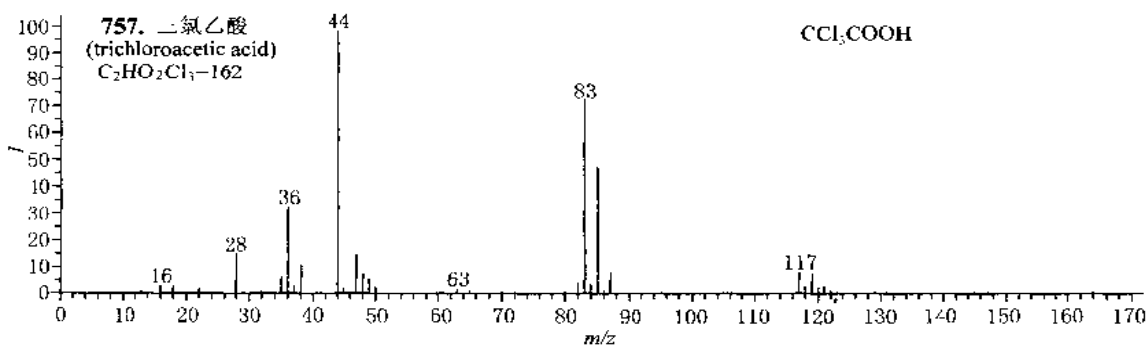
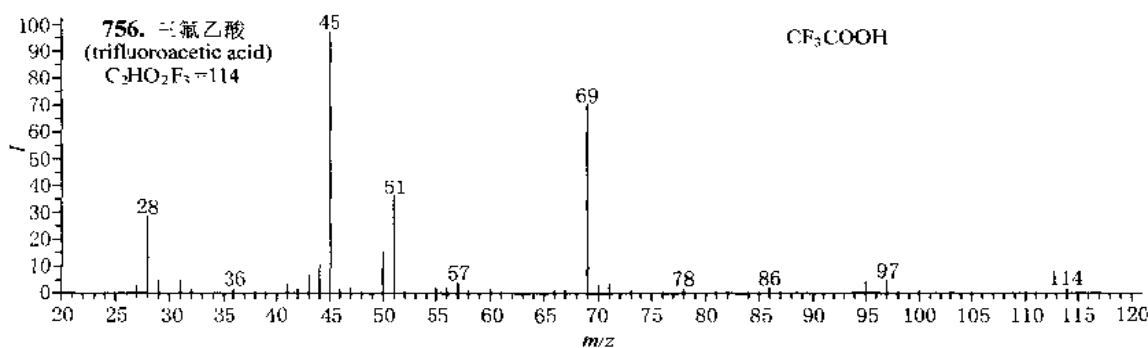
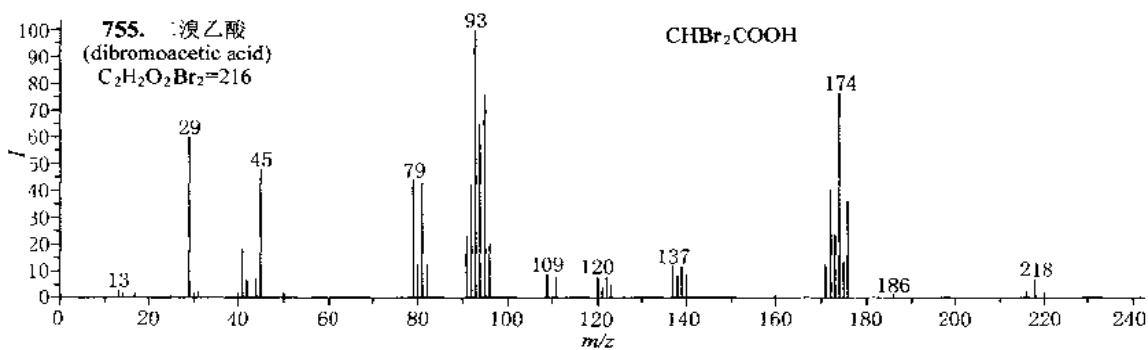
柠檬酸 (751) 的主要裂解是  $M-\text{COOH}$ ,  $M-\text{COOH}-\text{H}_2\text{O}$ ,  $M-\text{COOH}-2\text{H}_2\text{O}$ ,  $M-\text{COOH}-\text{COOH}$  和  $M-2\text{COOH}-\text{H}_2\text{O}$ 。



## 四、卤代直链脂肪酸类

- (1) 一卤乙酸 (752~754) 的裂解有  $M-OH$ ,  $M-CH_2X$ ,  $M-CO_2$  和  $M-COOH$ 。  
 (2) 二溴乙酸 (755) 的裂解是  $M-CO_2$ ,  $M-COOH$  和  $M--COOH-Br$ 。  
 (3) 三卤乙酸 (756, 757) 的裂解有  $M-X$ ,  $M-OH$ ,  $M-COOH$ ,  $M-CO_2-X$ , 并有羧基离子  $m/z$  45。





## 五、芳香酸类

(1) 苯甲酸 (758) 的裂解途径是  $M-OH-CO-C_2H_5$ 。

(2) 甲基取代的苯甲酸类 (759~762), 邻位取代者裂解途径有两条, 即  $M-OH-CO-C_2H_5-C_2H_5$  和  $M-H_2O-CO-C_2H_5$ 。间位和对位取代者的裂解途径类似于苯甲酸的, 即  $M-OH-CO-C_2H_5-C_2H_5$ 。

(3) 羟基苯甲酸类 (763~765) 中的邻位取代者, 裂解途径也有两条, 即  $M-OH-CO-CO-C_2H_5$  和  $M-H_2O-CO-CO-C_2H_5$ , 间位和对位取代者只有一条裂解途径, 即  $M-OH-CO-CO-C_2H_5$ 。

(4) 五倍子酸 (766) 有两条裂解途径, 即  $M-OH-CO-CO-CO$  和  $M-OH-H_2O-CO-CO$ 。

(5) 对甲氧基苯甲酸 (767) 的两条裂解途径是  $M-OH-CO-CH_2O$  和  $M-OH-CH_3-CO-CO$ 。

(6) 三甲氧基苯甲酸 (768) 的主要裂解途径是  $M-CH_3-CO-CH_2O-CH_2O$  和  $M-OH-CO-CH_2O$ 。

(7) 氨基苯甲酸 (769~771) 中的邻位取代者, 主要裂解是  $M-H_2O-CN H$ , 次要裂解是  $M-OH-CO$ , 间位和对位取代者的裂解是  $M-NH_2$ 、 $M-OH-CN H-CO$  和  $M-OH-CO-CN H_2$ 。3,5-二氨基苯甲酸 (772) 的裂解是  $M-OH-CO-CN H$  和  $M-CN H_2-CO$ 。

(8) 对乙酰氧基苯甲酸 (775) 的裂解是  $M-CH_2CO-OH-CO$ 。

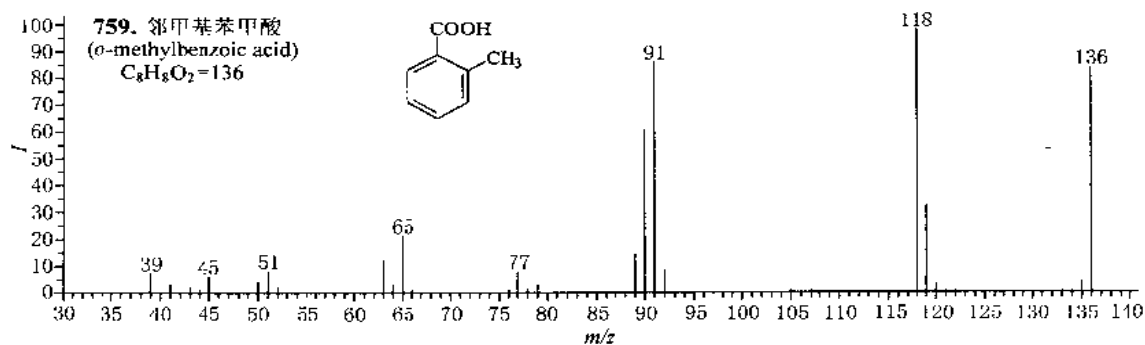
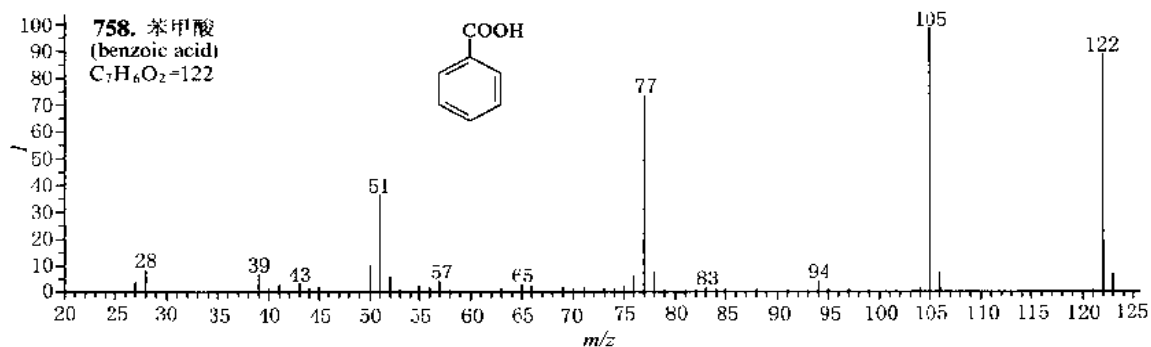
(9) 胡椒基酸 (776) 的裂解途径是  $M-OH-CO-CH_2O-C_2H_2$  和  $M-OH-CH_2O-CO-CO$ 。

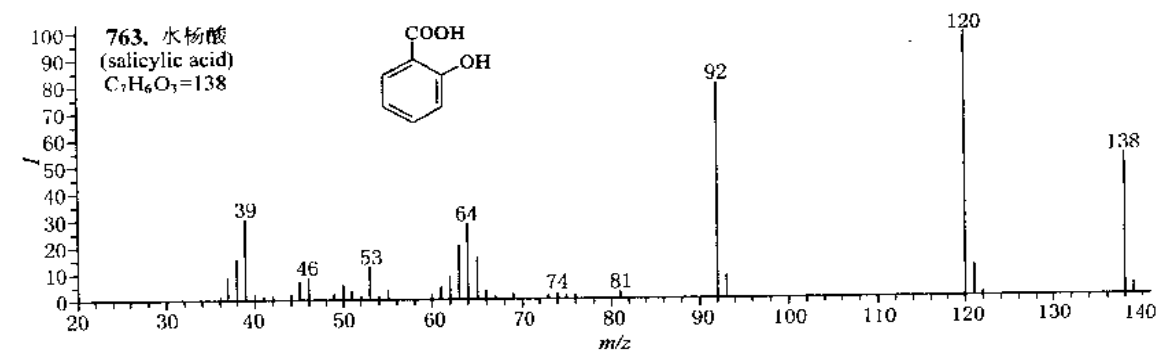
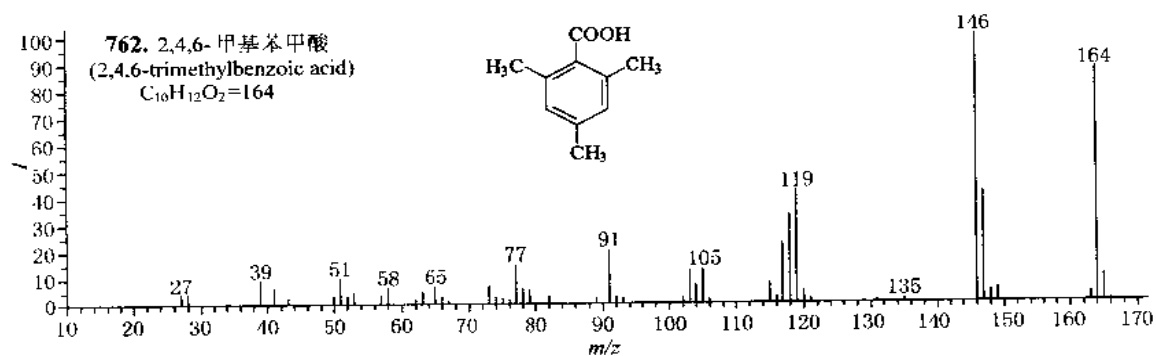
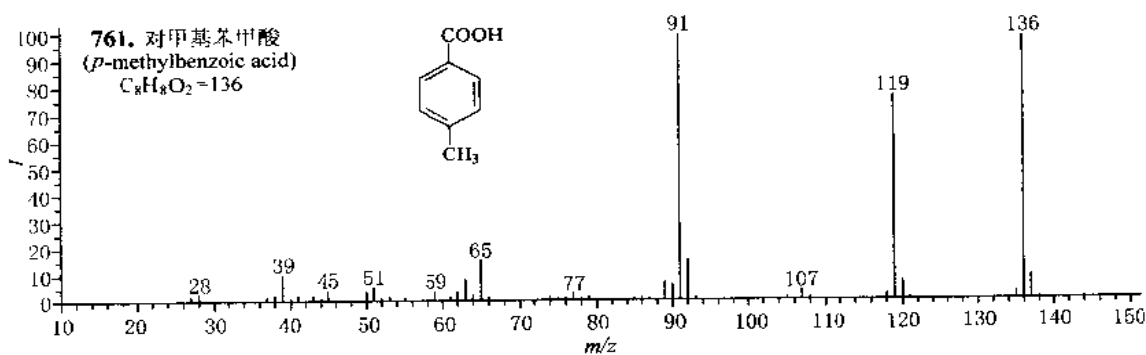
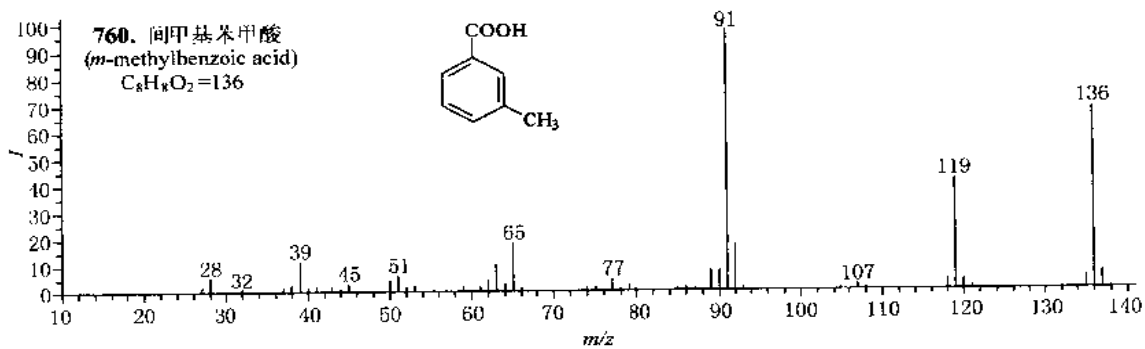
(10) 肉桂酸 (777) 的裂解途径是  $M-OH-CO$  和  $M-H_2O-CO$ 。离子  $M-H$  很强, 失去的氢来自苯环的邻位。其他离子有苯基离子和再失乙炔的离子。邻羟基肉桂酸 (778) 的裂解途径是  $M-OH-CO-CO-C_2H_2-C_2H_2$  和  $M-H_2O-CO-CO$ , 后一条途径是主要的。香豆酸 (779) 的主要裂解途径是  $M-OH-CO-CO-C_2H_2-C_2H_2$ 。O-甲基香豆酸 (780) 的主要裂解途径是  $M-OH-CO-CH_3-CO$ , 3-甲氧基香豆酸 (781) 的裂解是  $M-OH-CO$ 。

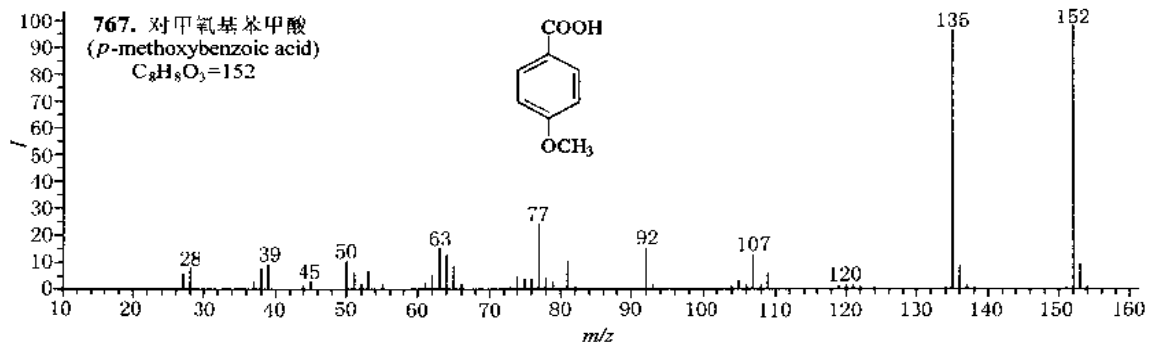
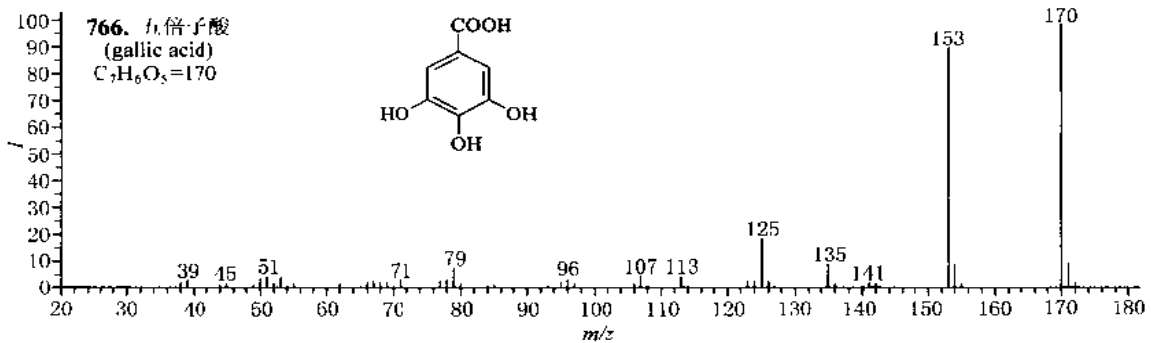
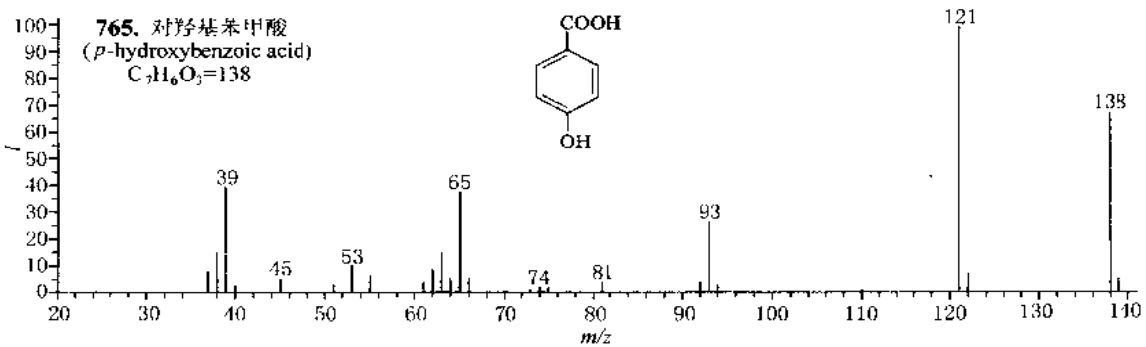
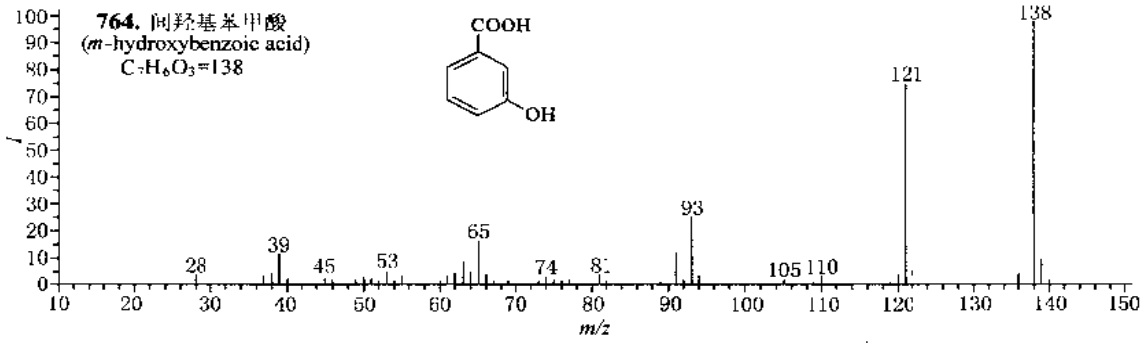
(11) 邻亚硝基苯甲酸 (782) 的主要裂解途径是  $M-NO-CO-CO$ , 在此过程中羟基要转移到邻位上, 羟基的转移较为少见。

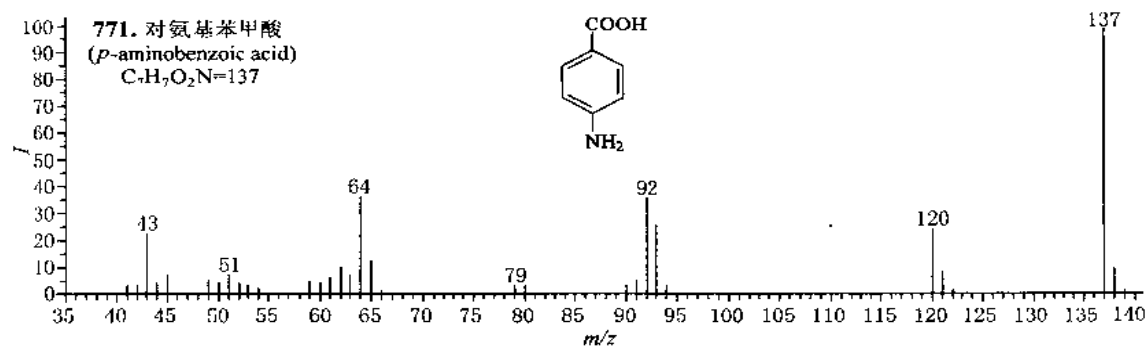
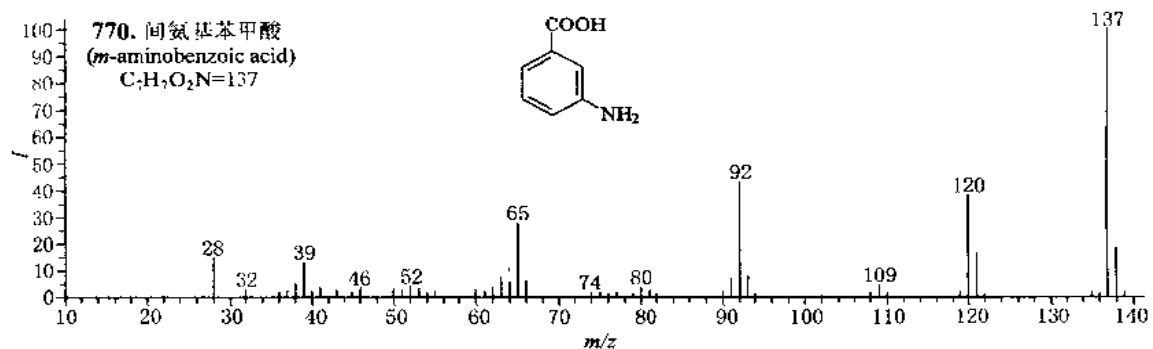
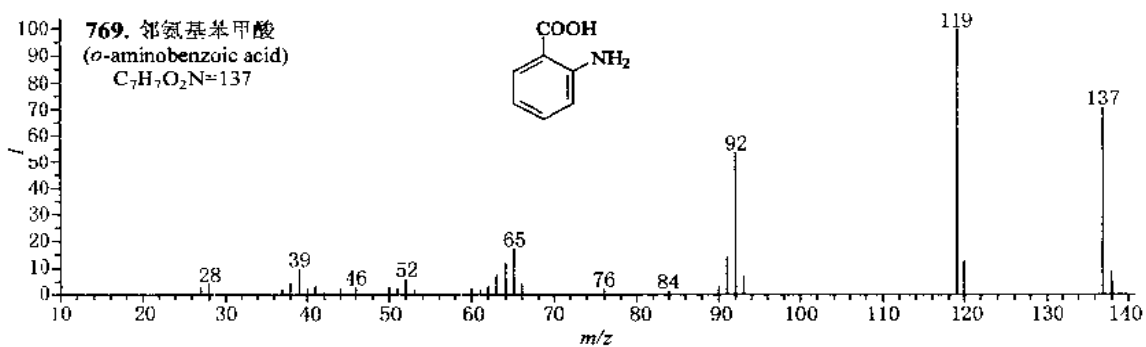
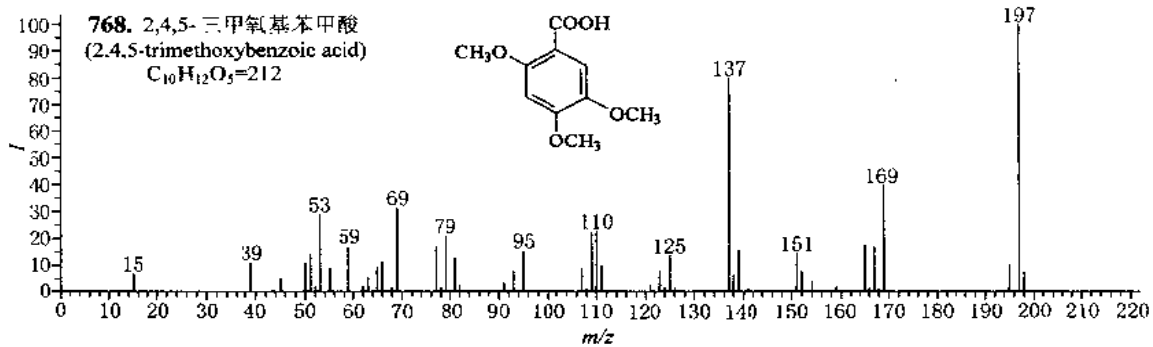
(12) 邻苯二甲酸 (783) 的裂解途径是  $M-H_2O-CO-CO-C_2H_2$ , 间位和对位者 (784, 785) 的裂解途径是  $M-OH-CO-CO-CO$  和  $M-CO_2-OH-CO-C_2H_2$ 。苯三羧酸类 (786, 787) 的基本裂解是有邻二羧酸者能失水, 无邻位取代者裂解自  $M-OH$  开始。

(13) 萘甲酸类 (788, 789) 的主要裂解是  $M-OH-CO-C_2H_2$ 。

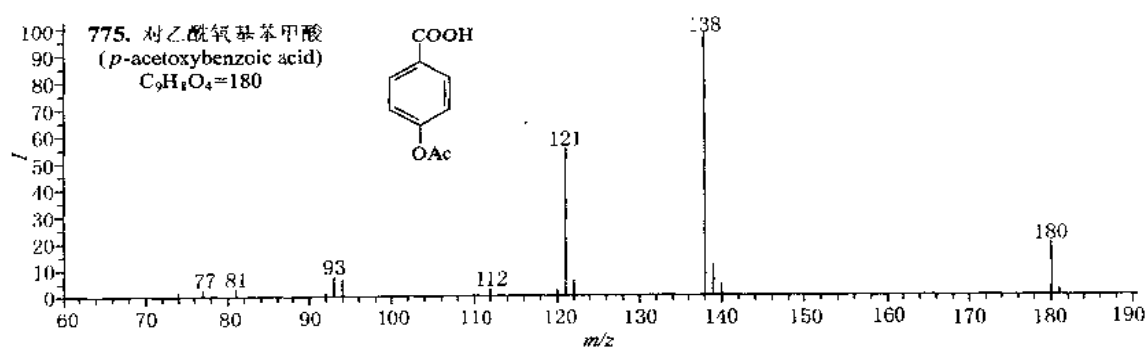
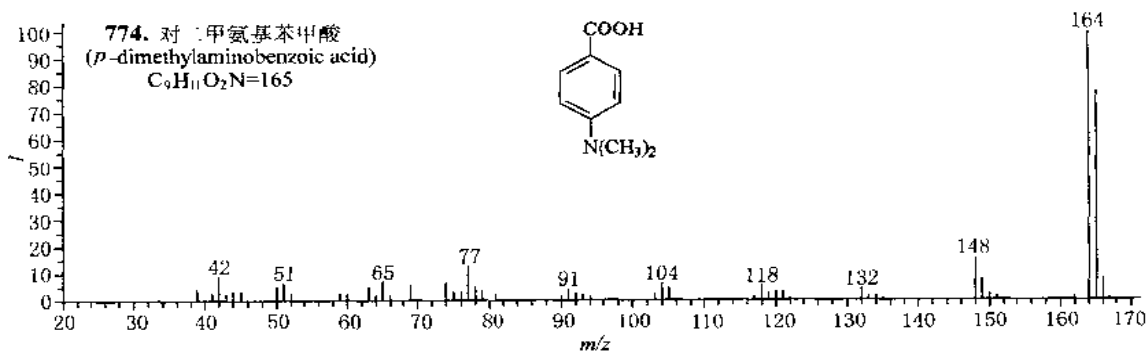
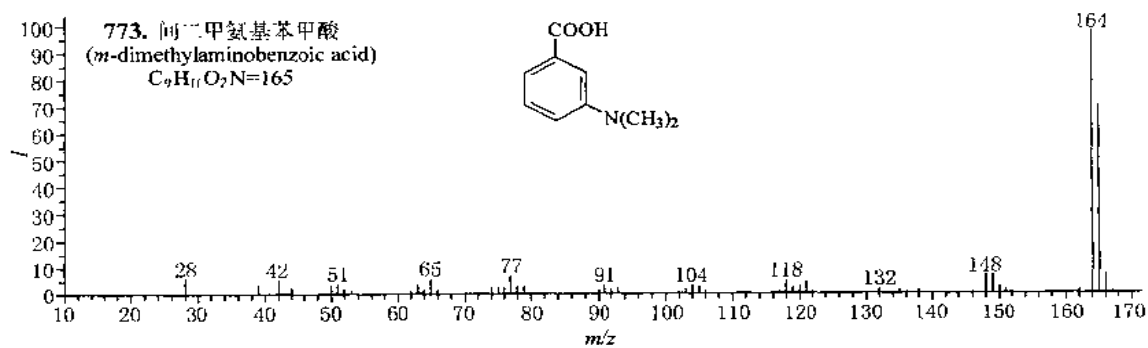
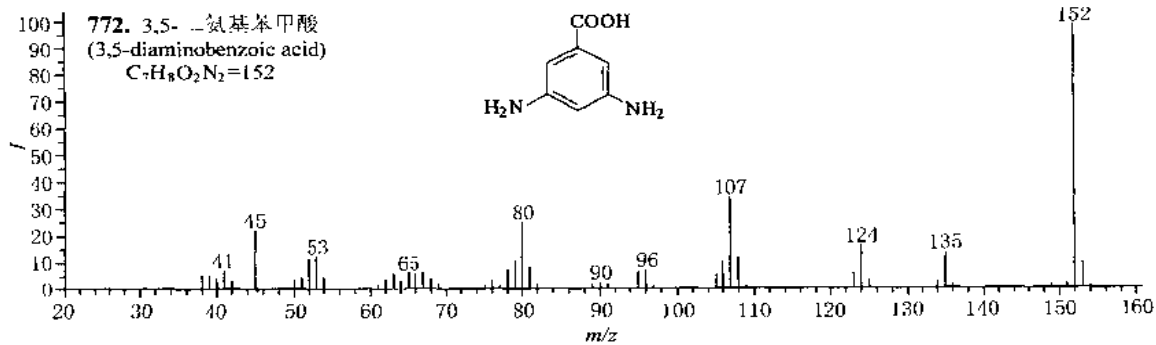


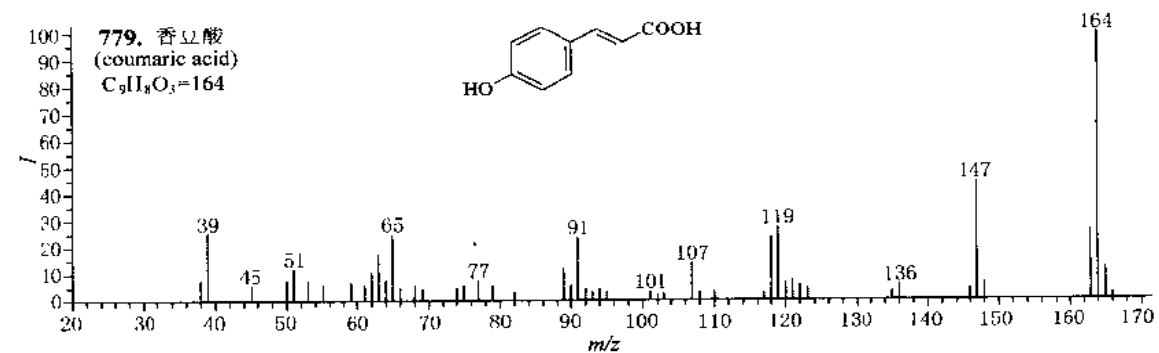
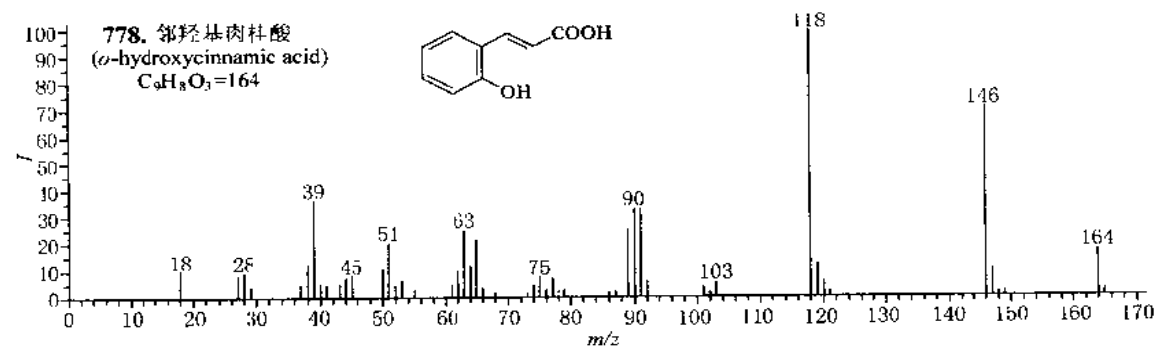
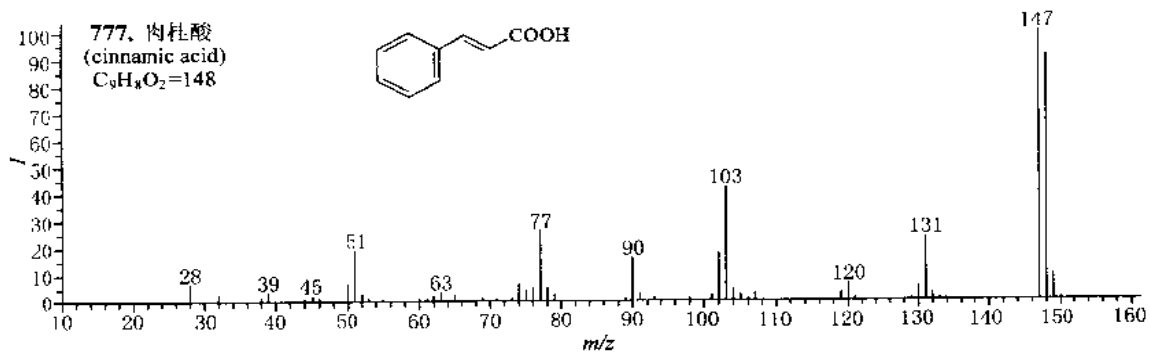
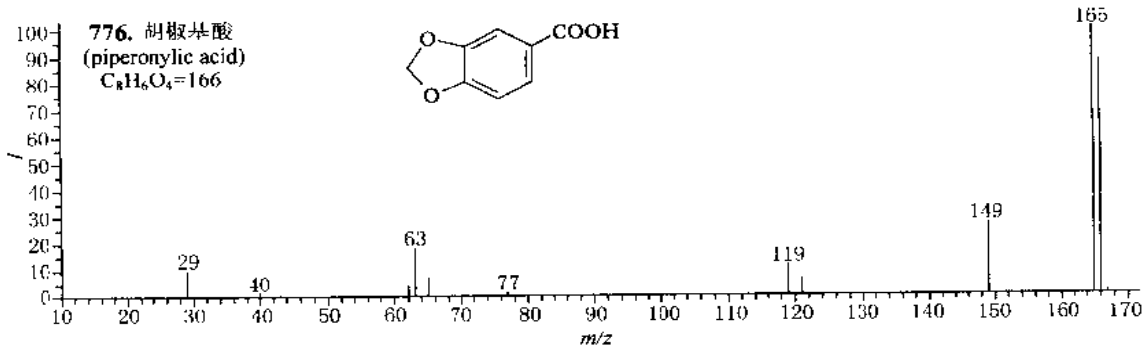


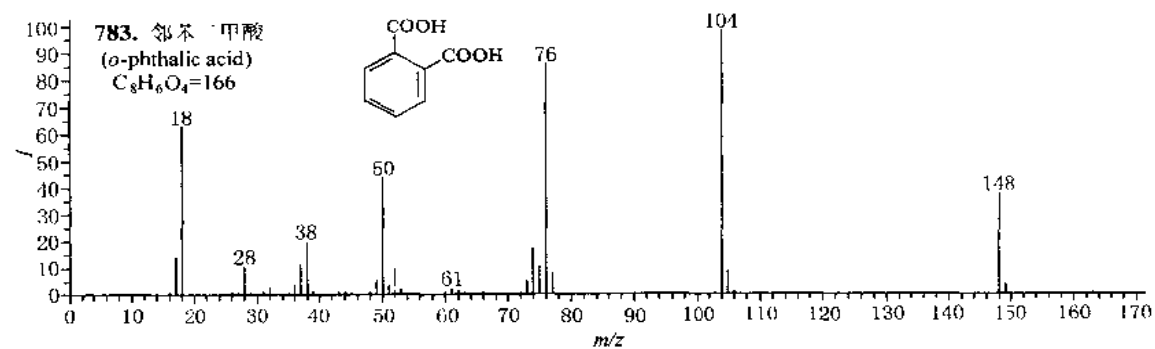
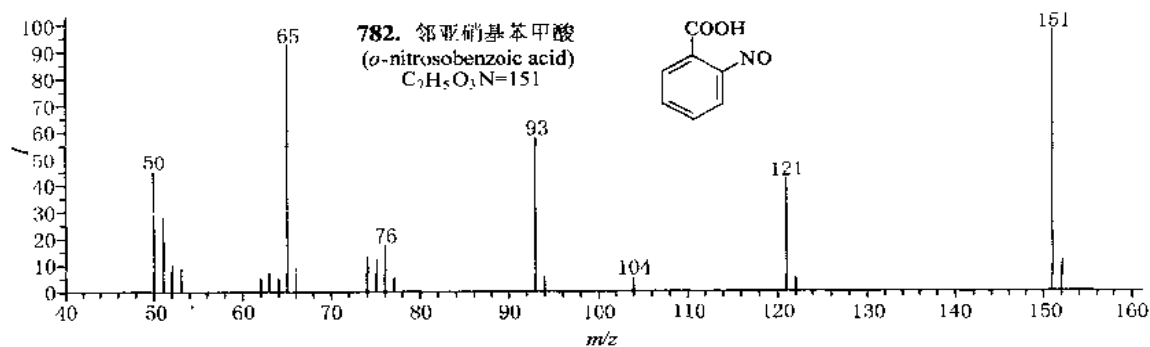
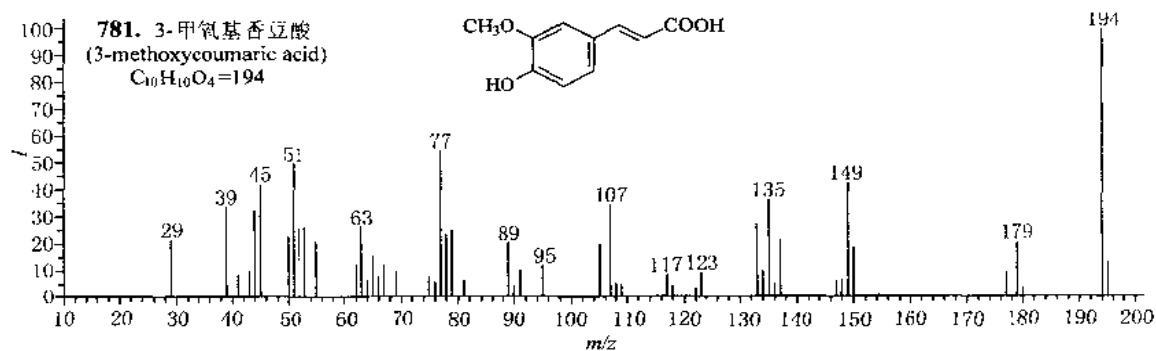
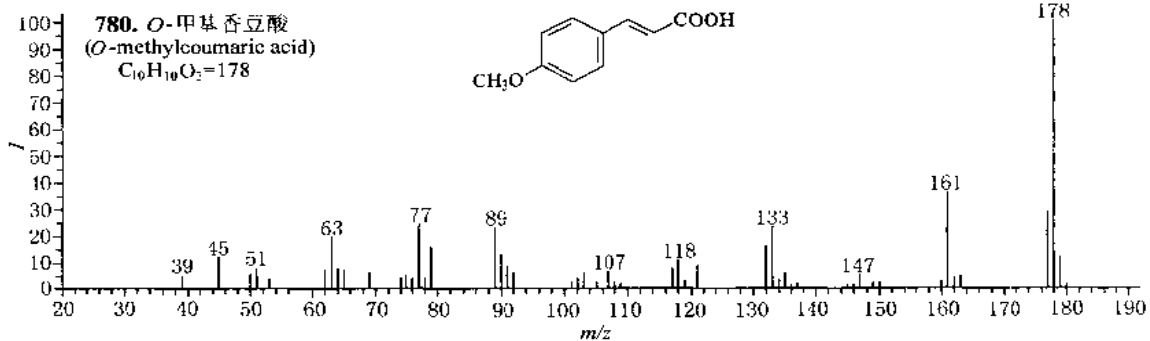


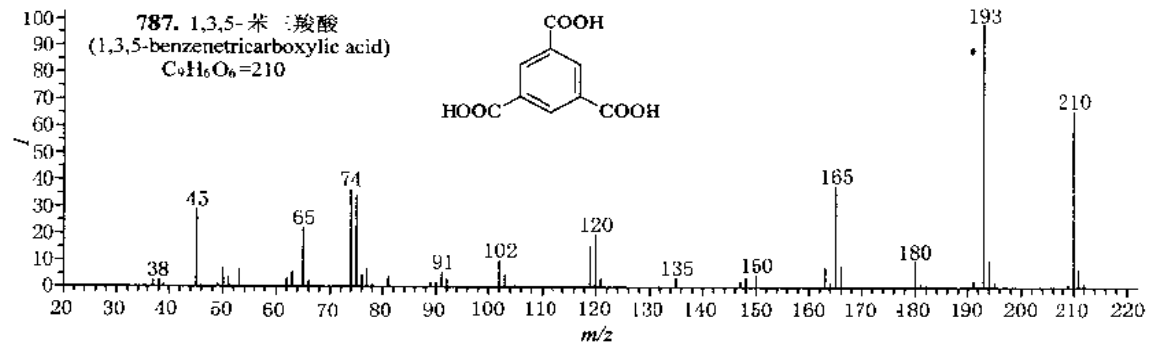
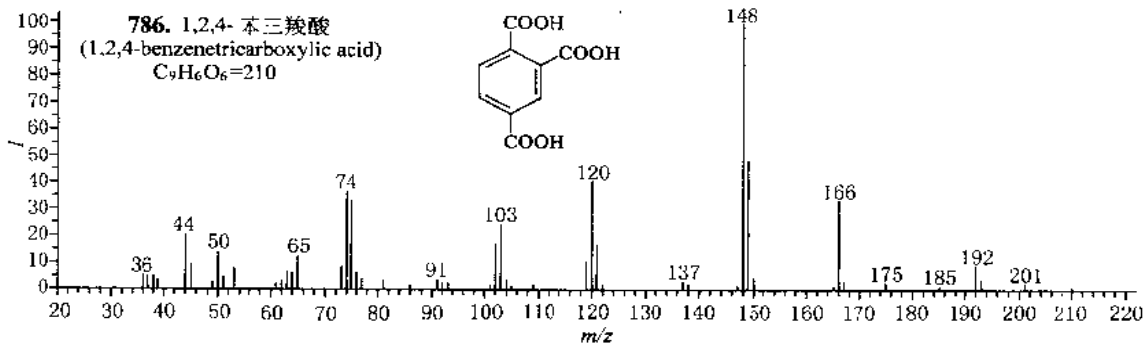
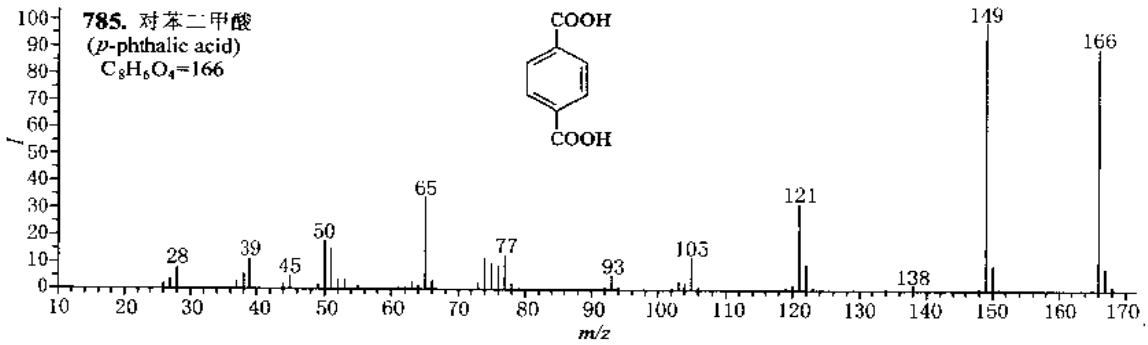
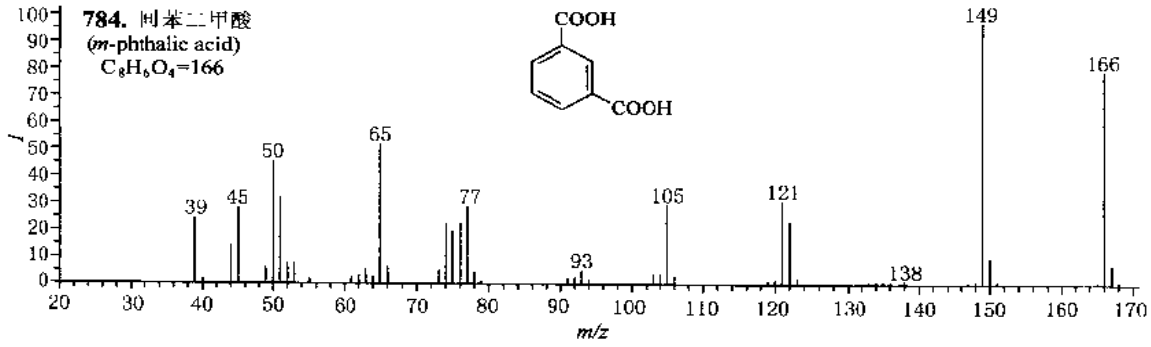


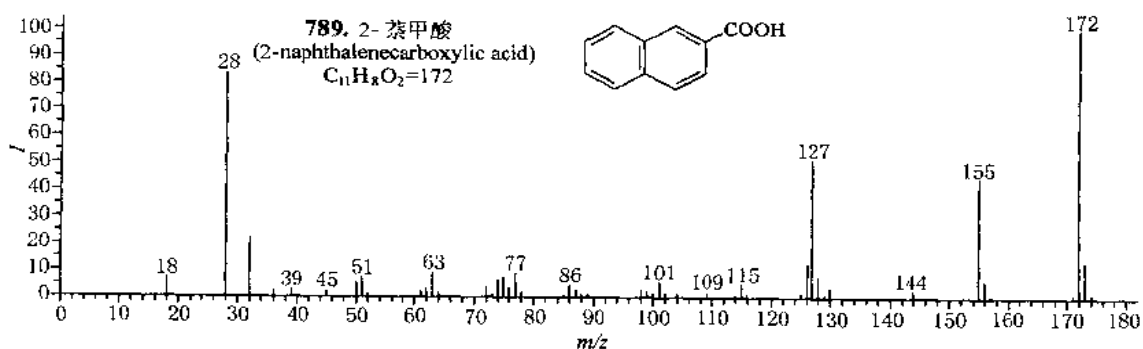
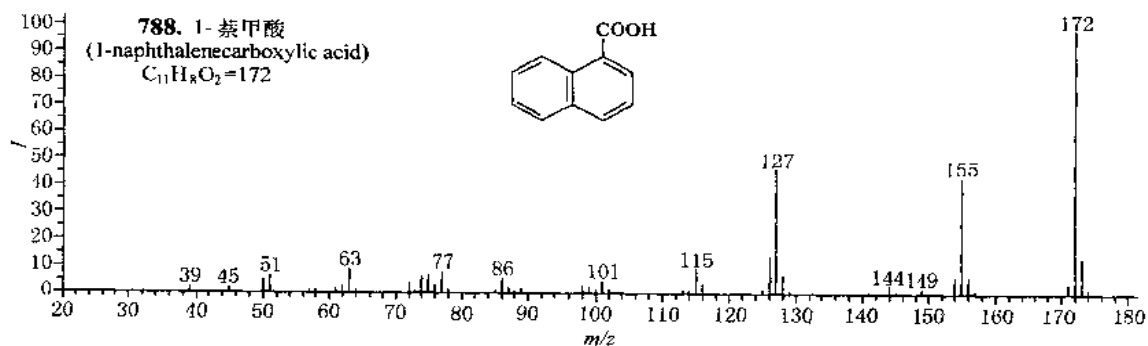








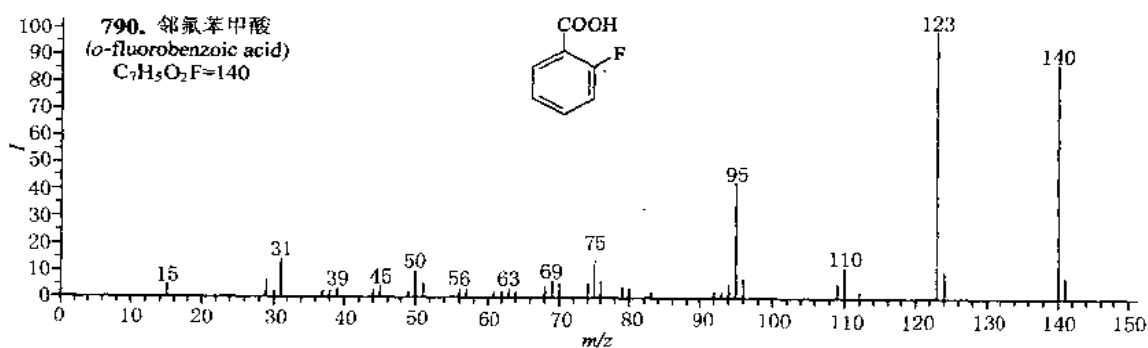


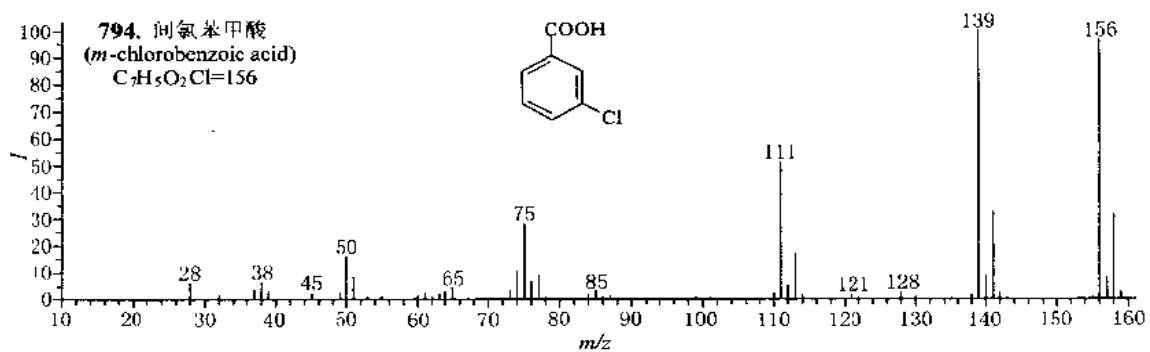
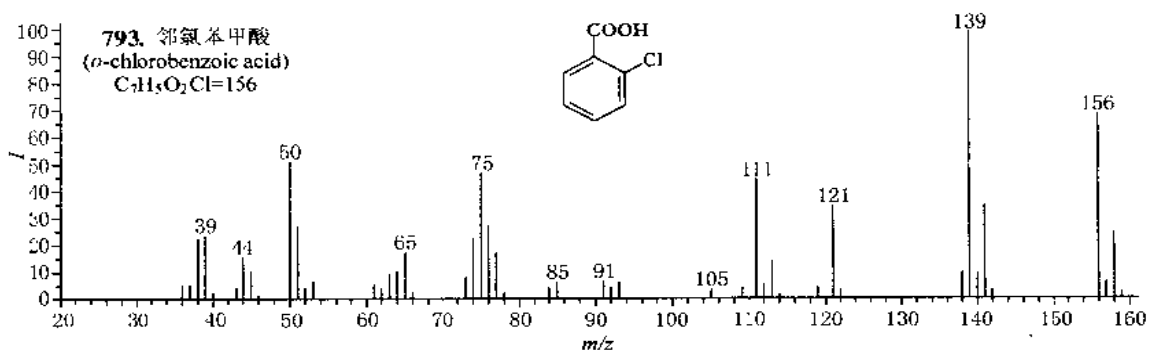
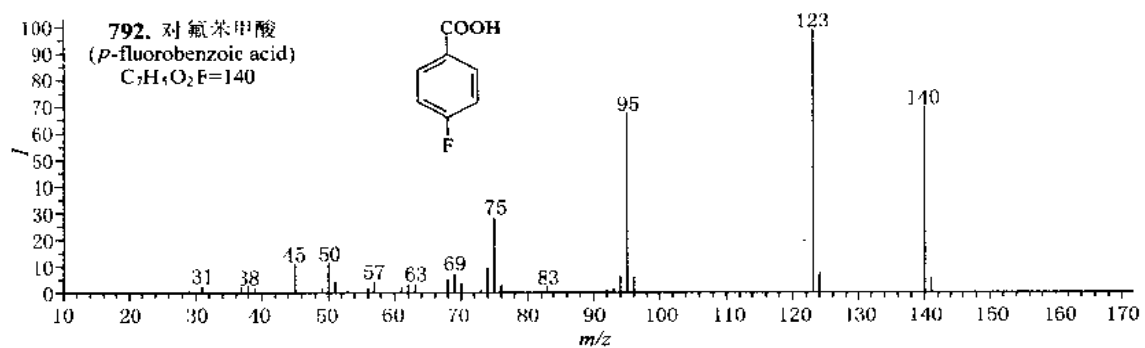
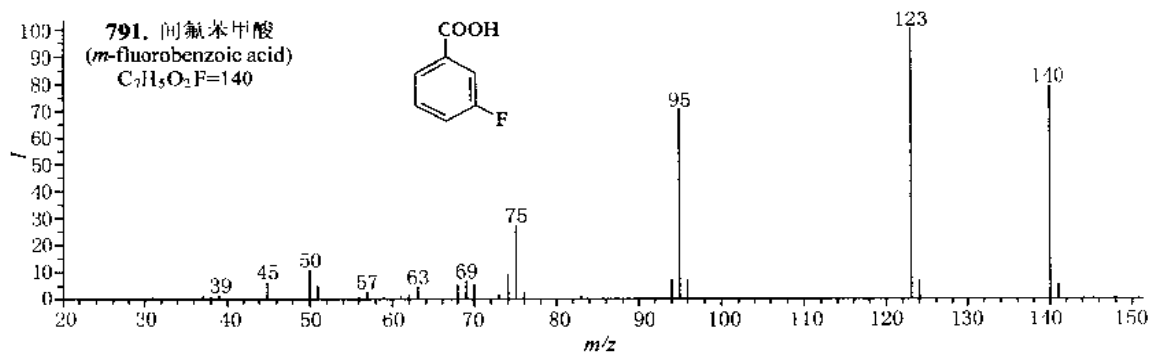


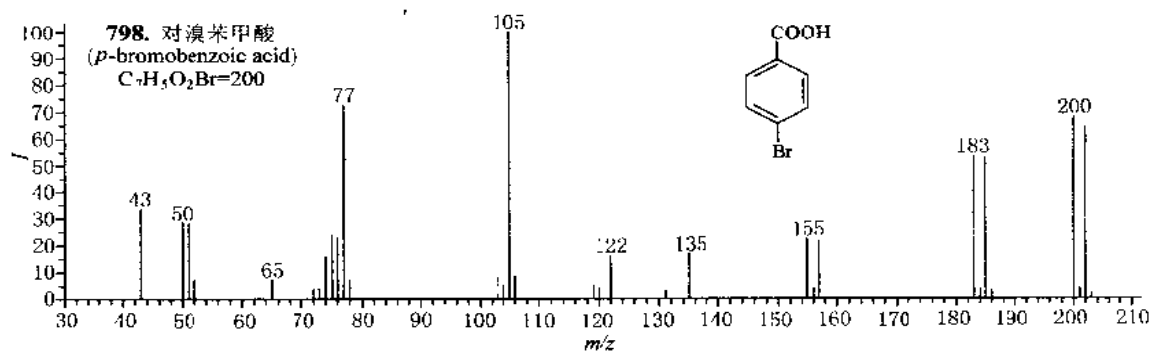
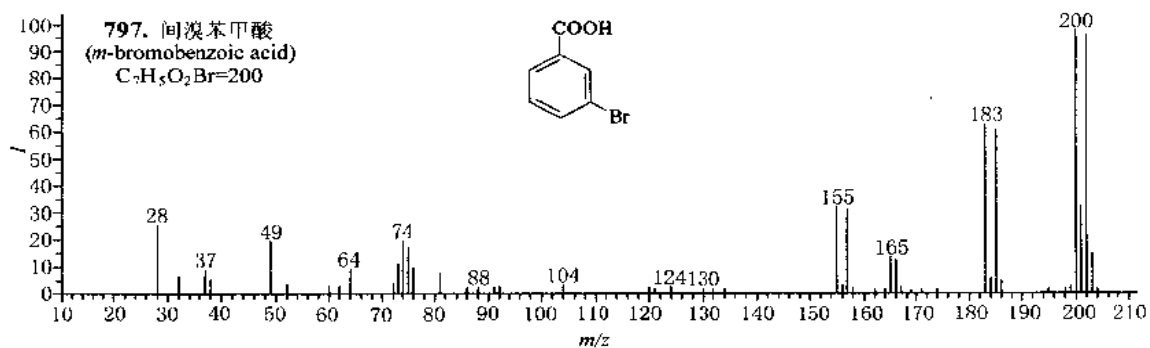
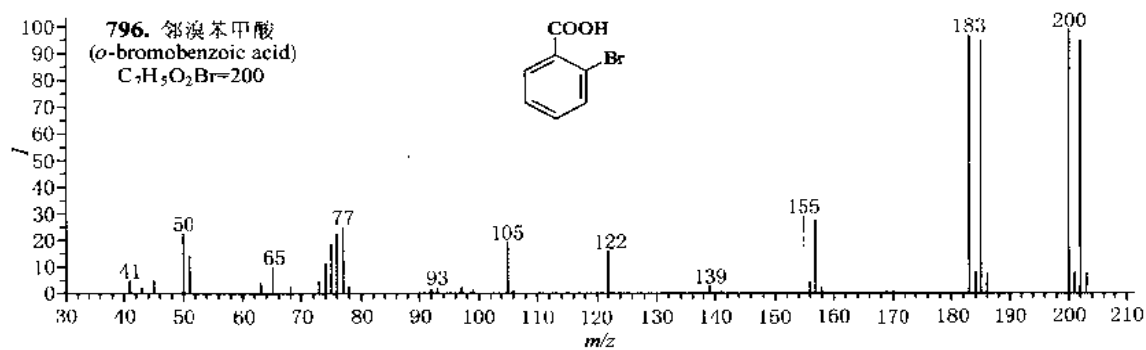
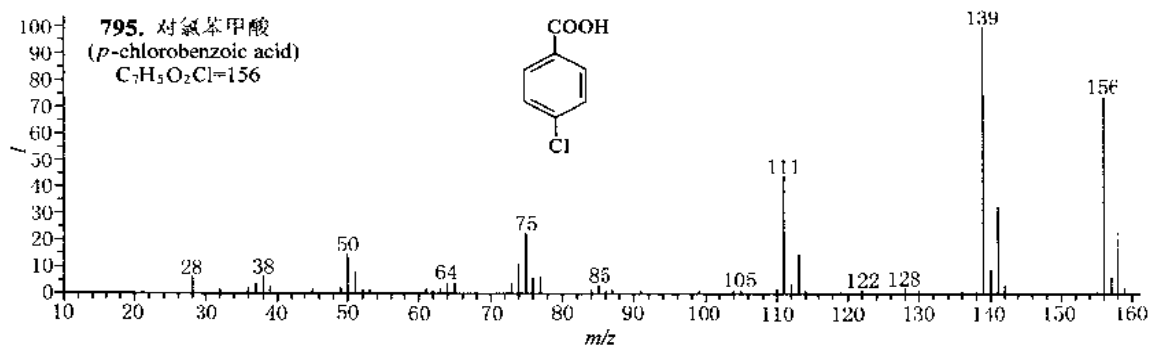
## 六、卤代芳香酸类

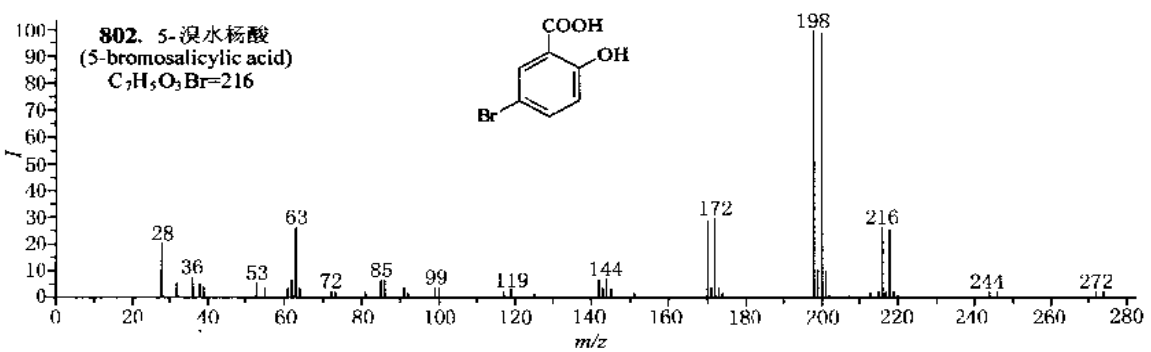
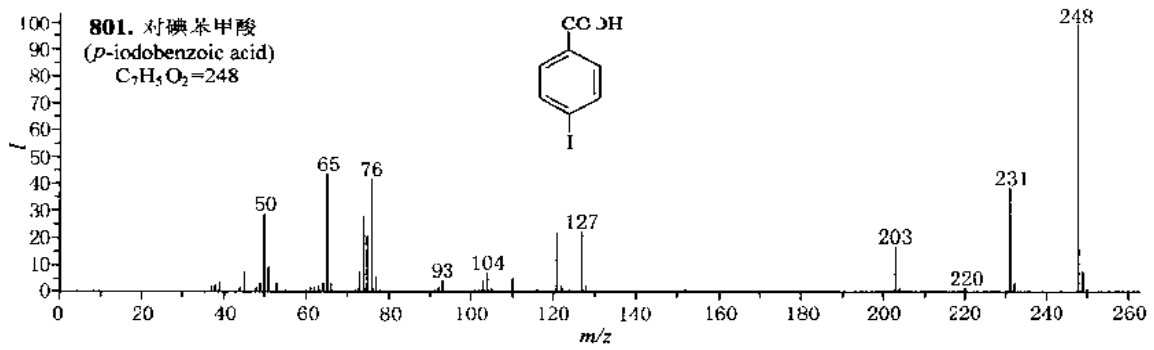
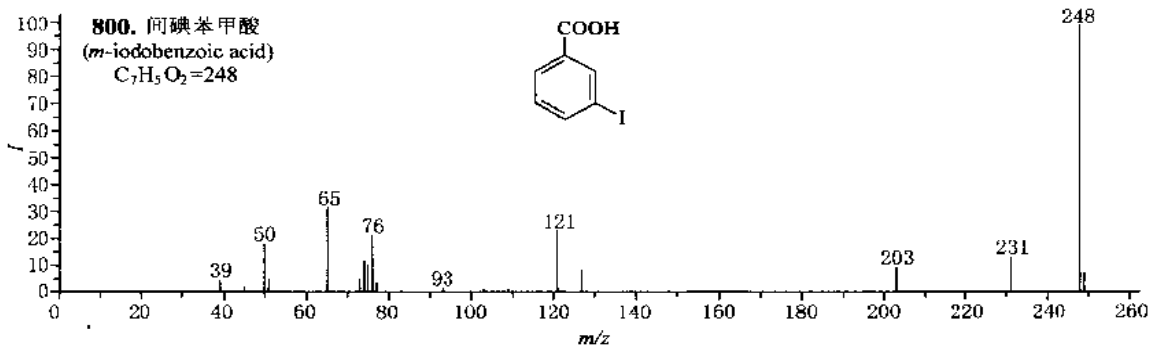
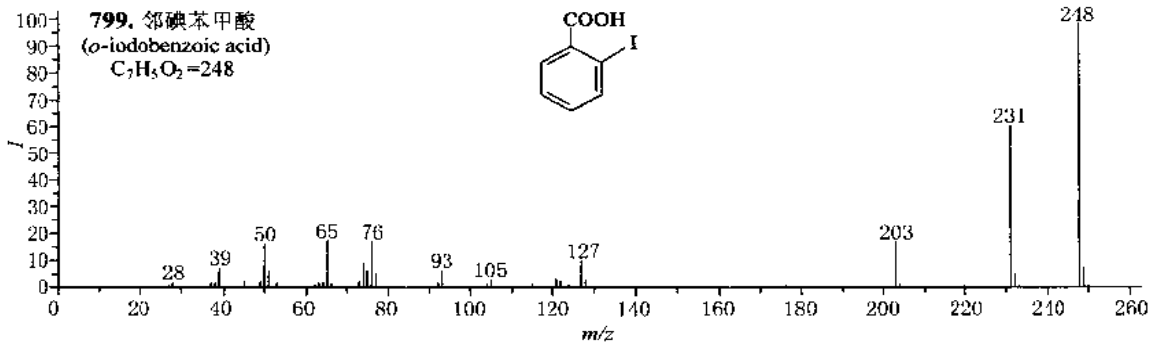
(1) 卤代苯甲酸 (790~801) 的裂解途径是  $M-OH-CO-HX$ , 只有碘代物最后一步裂解是失碘。

(2) 5-溴水杨酸 (802) 的裂解途径是  $M-H_2O-CO$ , 4-氯邻苯二甲酸 (803) 的裂解途径是  $M-H_2O-CO_2-CO-Cl$ .

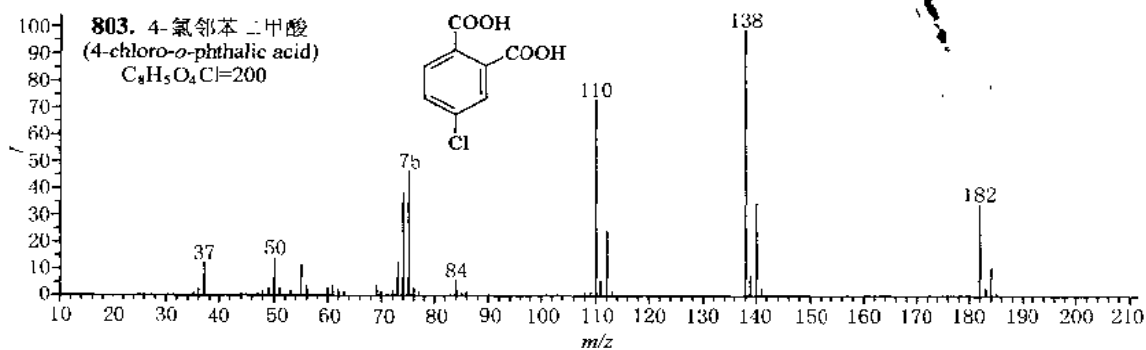






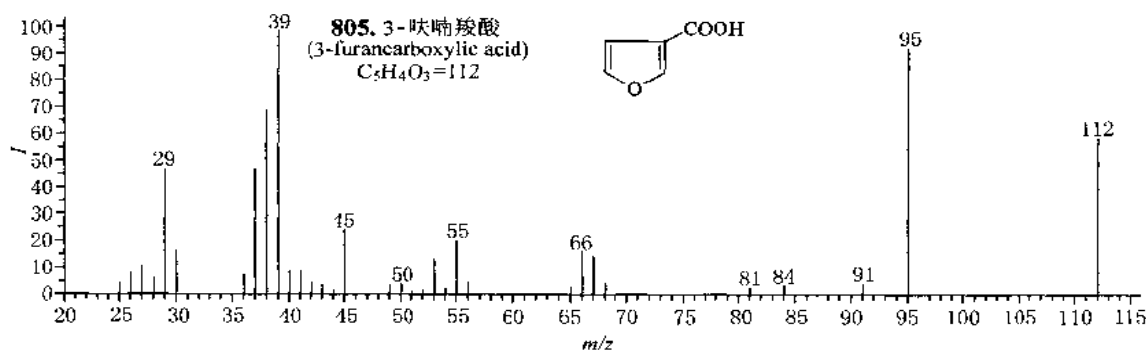
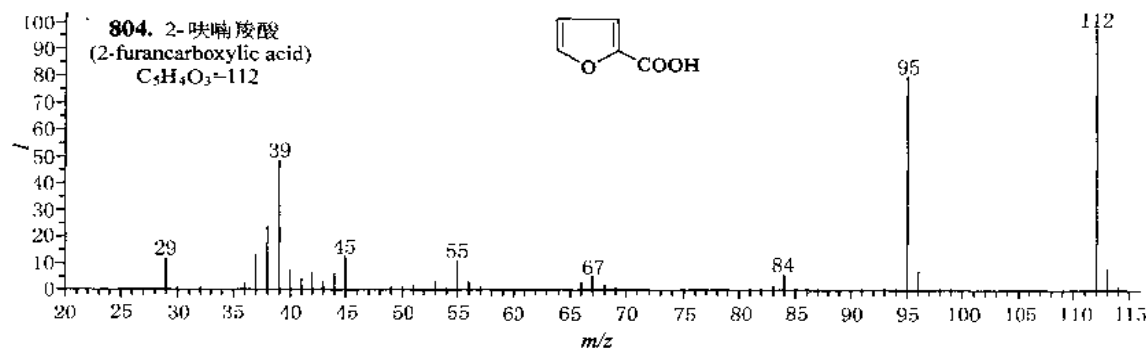






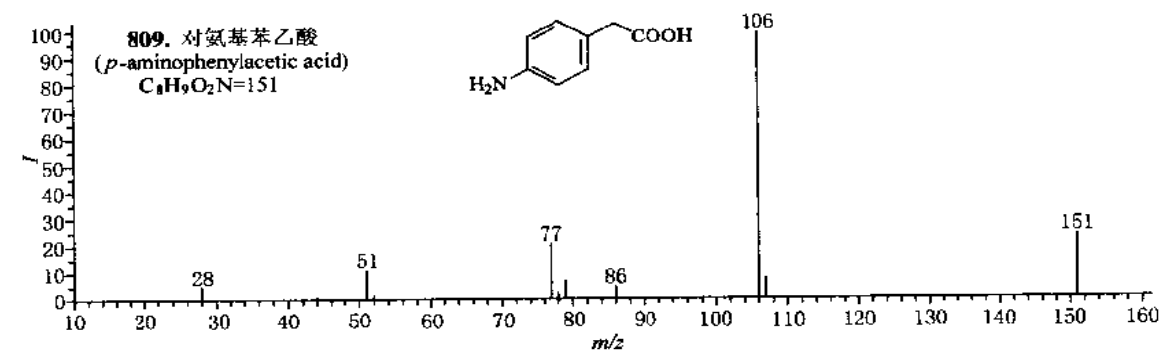
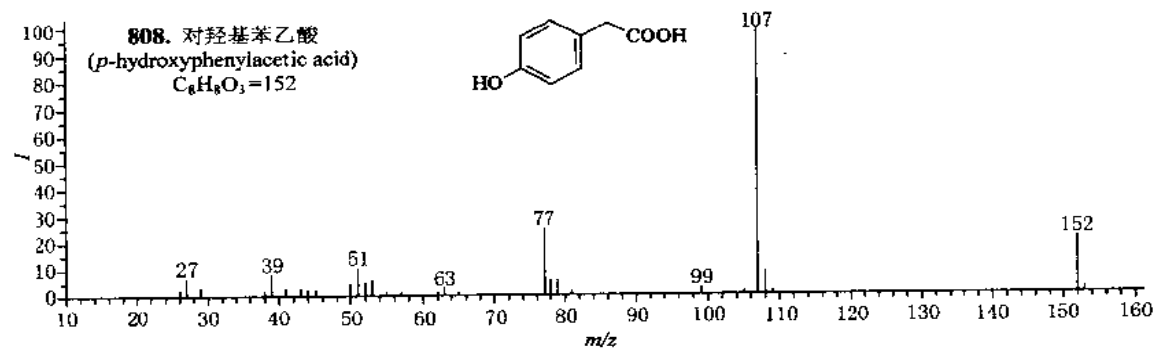
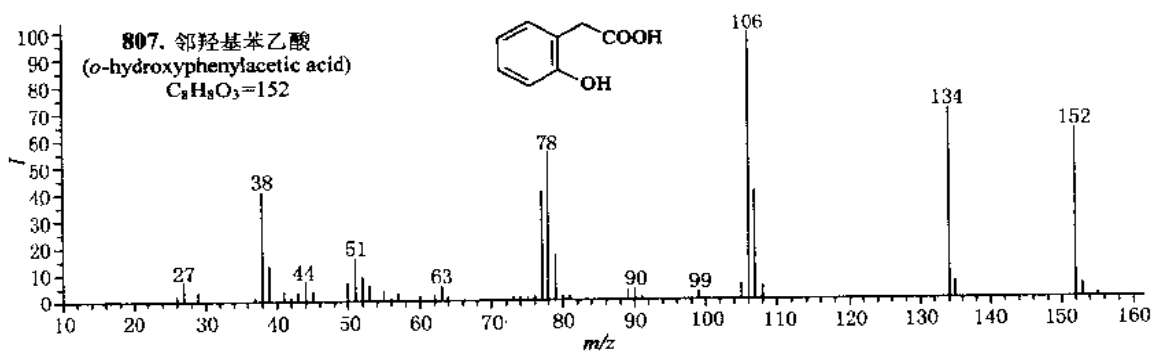
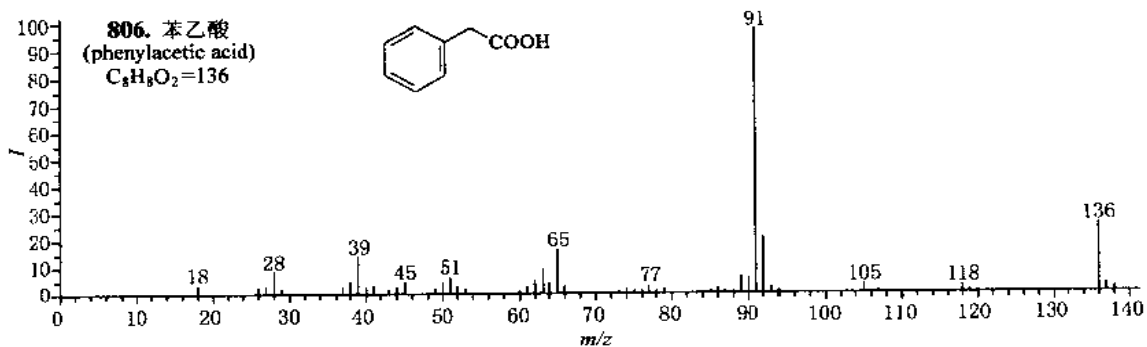
### 七、呋喃羧酸类

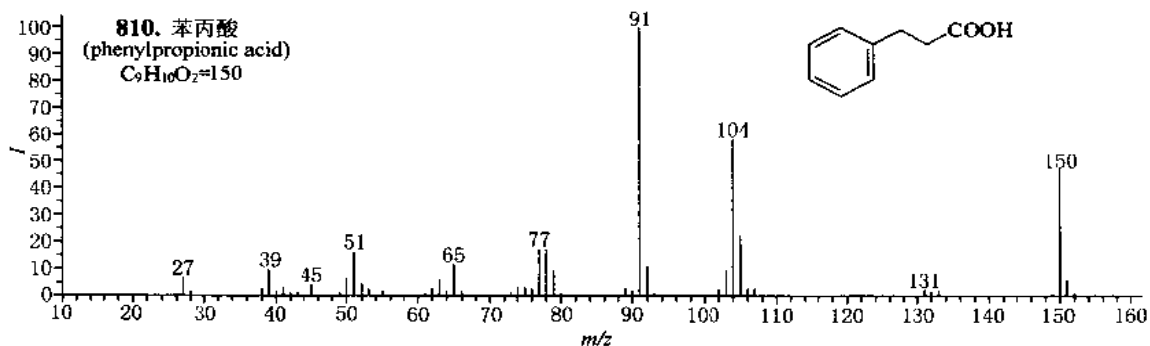
2个呋喃羧酸异构物(804, 805)的裂解途径都是  $M-OH-CO-CO$ 。



### 八、其他羧酸类

- (1) 苯乙酸(806)的裂解途径是  $M-COOH-C_2H_2-C_2H_2$ 。
- (2) 邻羟基苯乙酸(807)的裂解途径是  $M-H_2O-CO-CO-H-C_2H_2$  和  $M-COOH-CO$ , 对羟基取代者(808)是  $M-COOH-CO-2H-C_2H_2$ 。
- (3) 对氨基苯乙酸(809)的裂解途径是  $M-COOH-CN H_2-H_2-C_2H_2$ 。
- (4) 苯丙酸(810)有三种裂解, 即  $M-COOH$ ,  $M-HCOOH$  和  $M-CH_2COOH$ 。





## 第二节 酸 酐 类

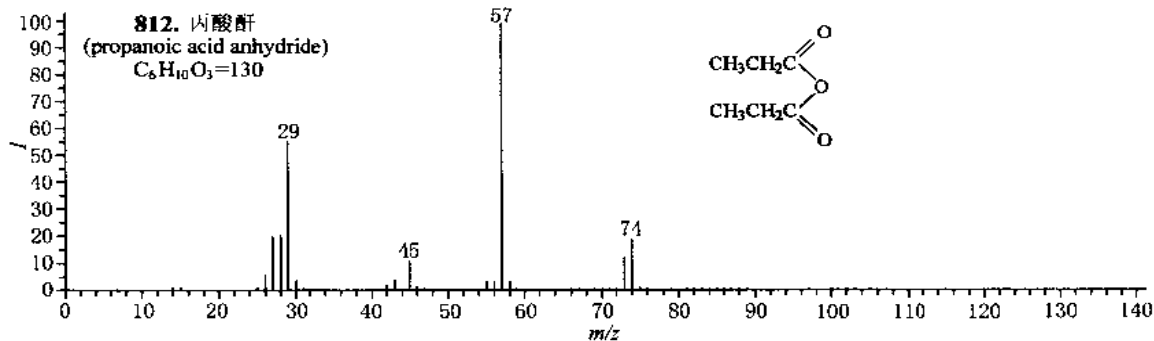
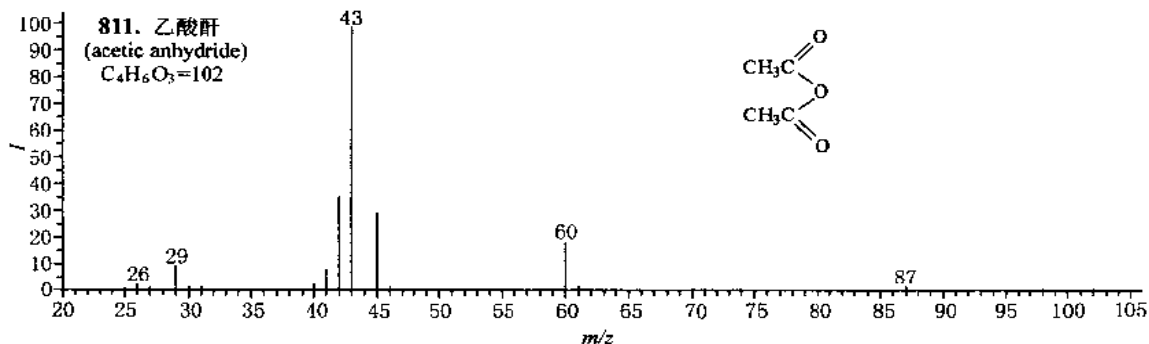
### 一、脂肪酸酐类

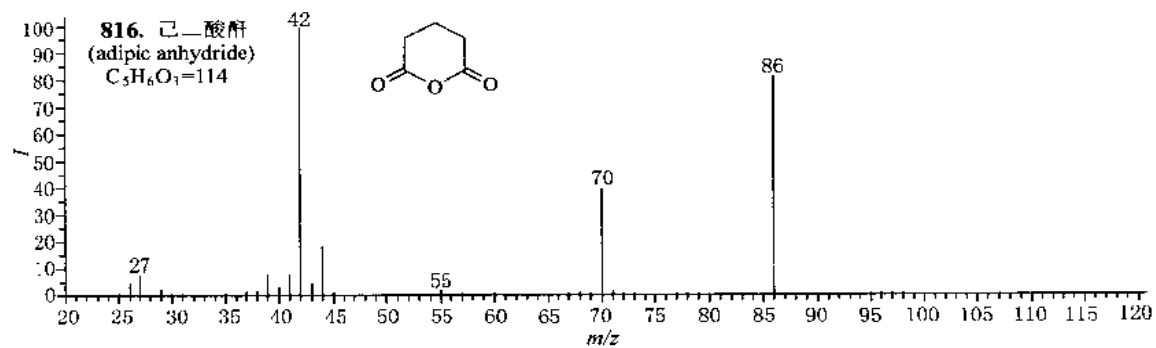
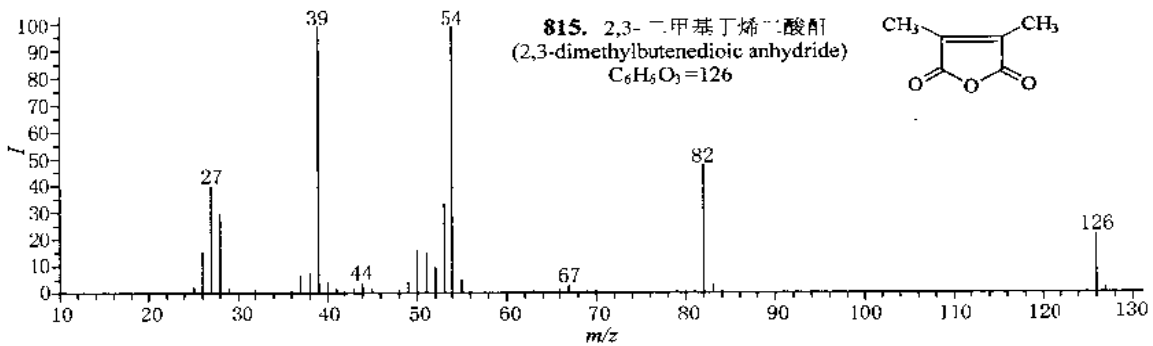
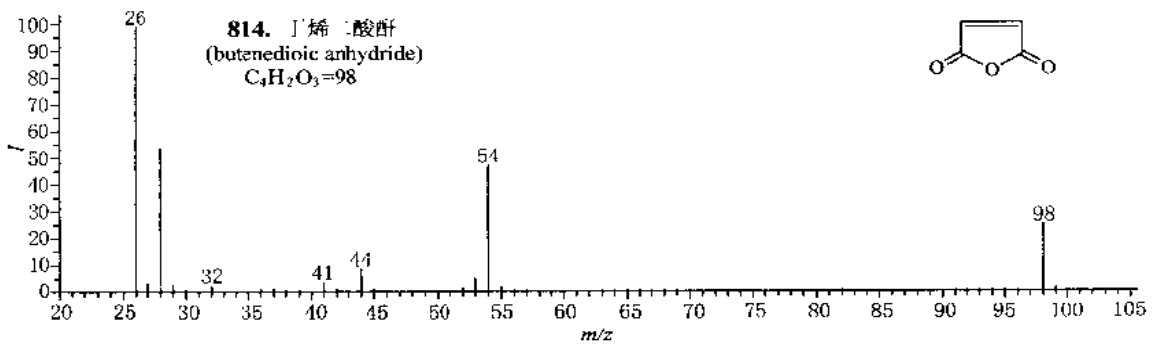
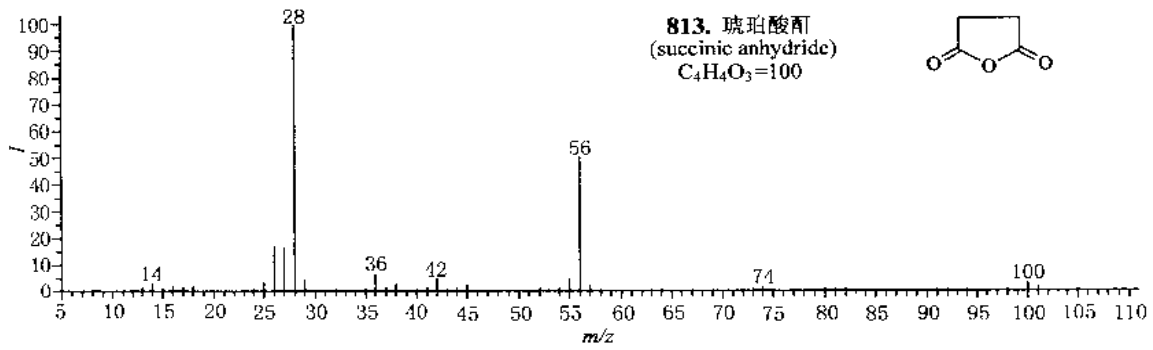
(1) 乙酸酐 (811) 的主要裂解是麦氏重排生成离子  $m/z$  60, 然后失甲基得离子  $m/z$  45,  $\alpha$ -裂解则生成乙酰基离子  $m/z$  43。

(2) 丙酸酐 (812) 的主要裂解也是麦氏重排, 生成离子  $m/z$  74, 再失羟基或  $\alpha$ -裂解生成丙酰基离子  $m/z$  57。

(3) 琥珀酸酐 (813) 的主要裂解是失二氧化碳, 丁烯二酸酐类 (814, 815) 也是失二氧化碳。

(4) 己二酸酐 (816) 有两条裂解途径, 即  $M-CO-CO_2$  和  $M-CO_2-CO$  或  $M-CO_2-C_2H_4$ 。

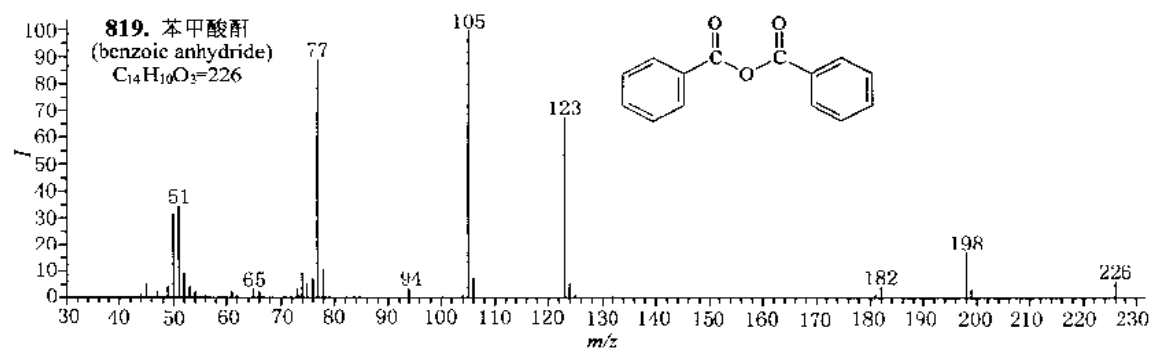
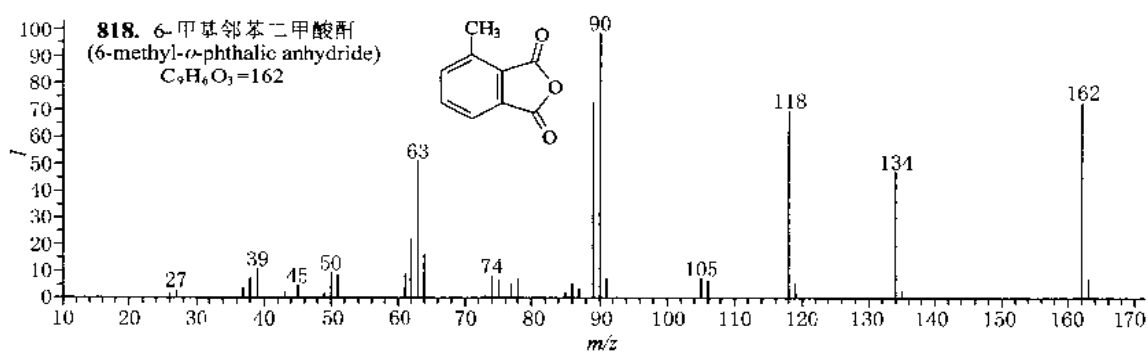
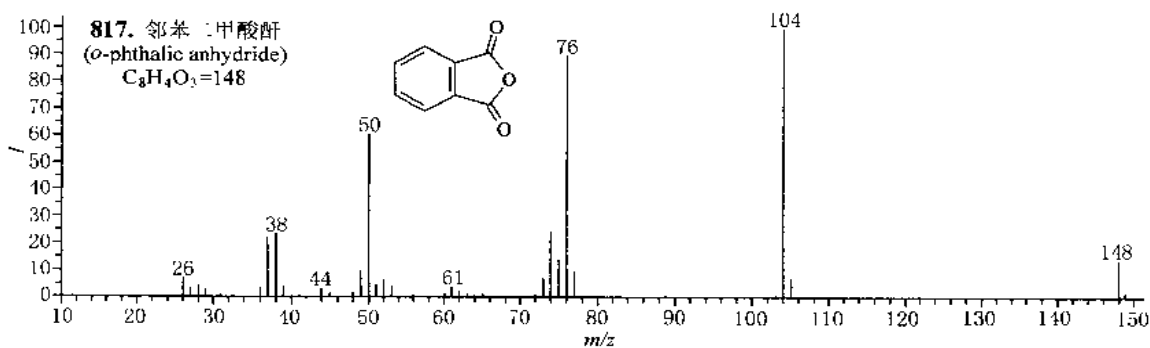




## 二、芳香酸酐类

(1) 邻苯二甲酸酐(817)的裂解途径是  $M - CO_2 - CO - C_2H_2$ , 6-甲基邻苯二甲酸酐(818)有两条裂解途径, 即  $M - CO - CO_2 - C_2H_2$  和  $M - CO_2 - CO - H - C_2H_2$ 。

(2) 苯甲酸酐(819)有  $M - CO$  和  $M - CO_2$  离子, 也有  $m/z$  123 离子, 这可能是苯甲酸加质子的离子。其他离子是  $m/z$  105、77、51 和 50, 后三者都由苯甲酰基离子( $m/z$  105)产生。

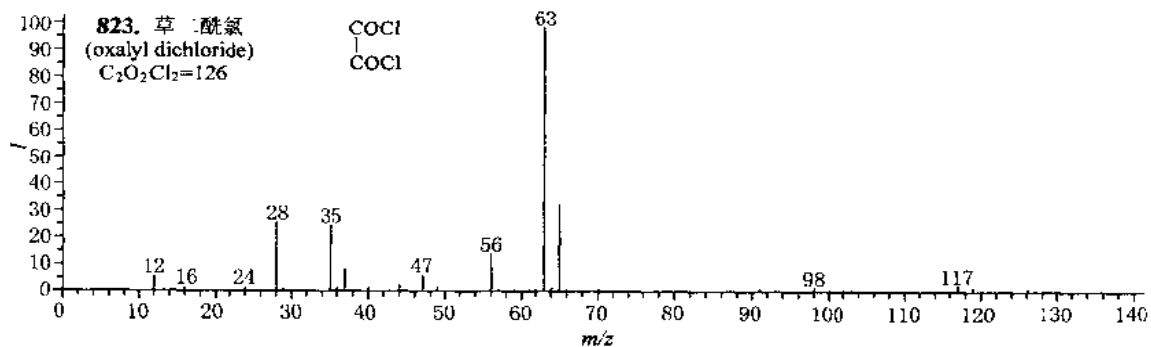
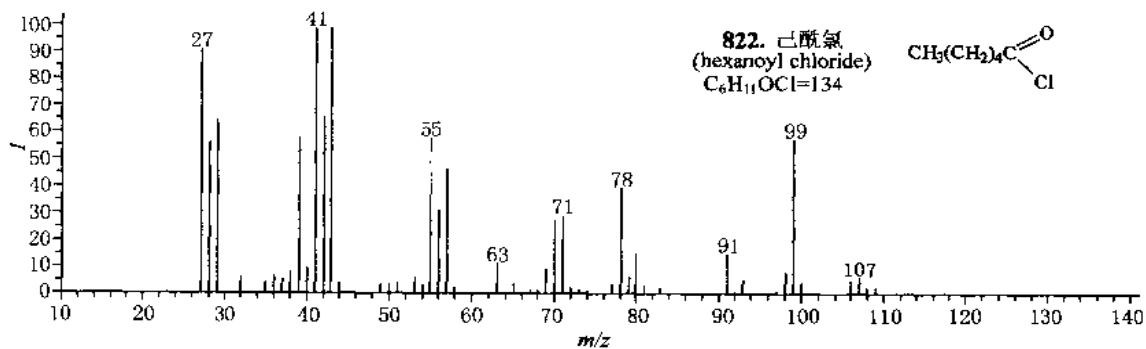
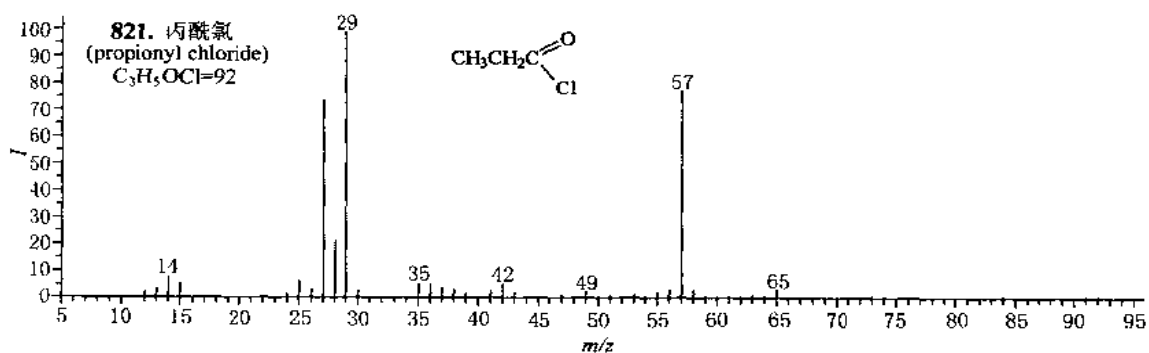
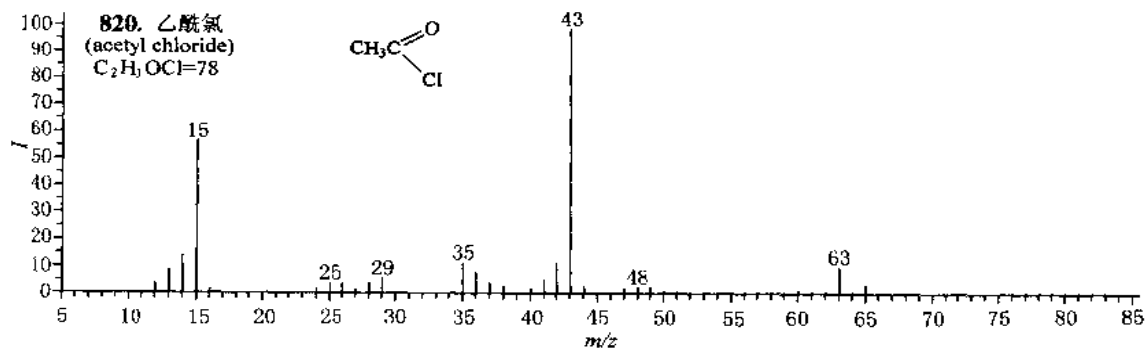


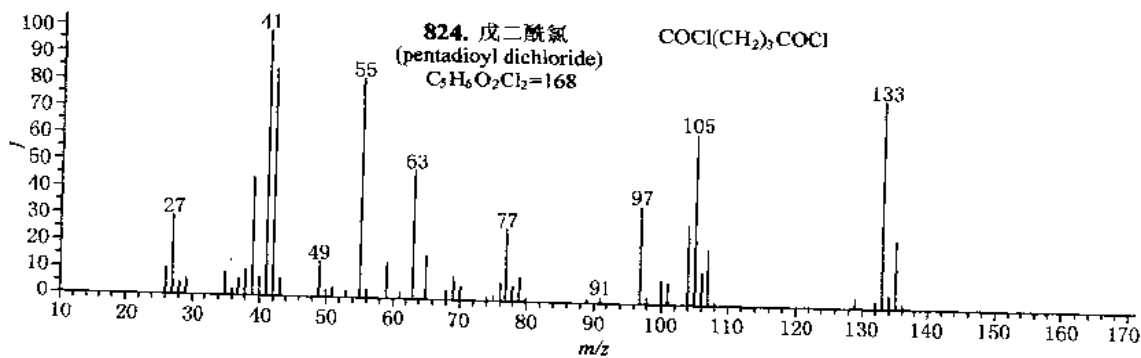
## 第三节 酰 卤 类

### 一、脂肪酰卤类

(1) 乙酰氯(820)、丙酰氯(821)和己酰氯(822)都有  $M - Cl$  和  $M - \text{烷基}$  的离子, 己酰氯还能进行麦氏重排裂解。

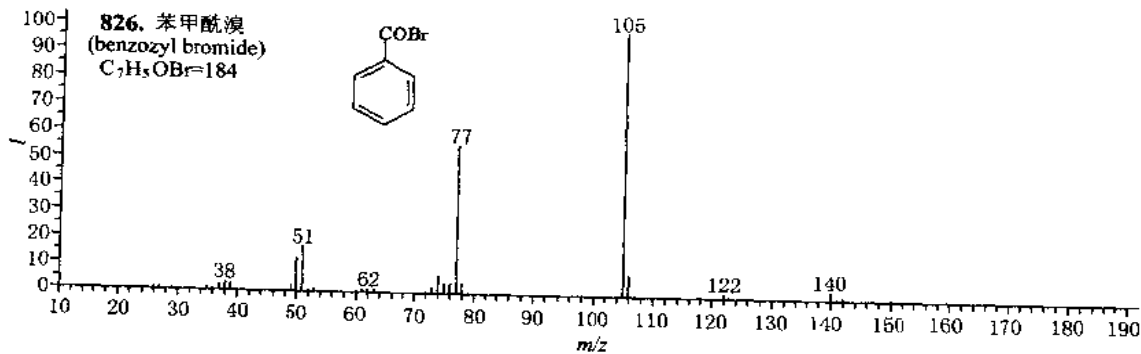
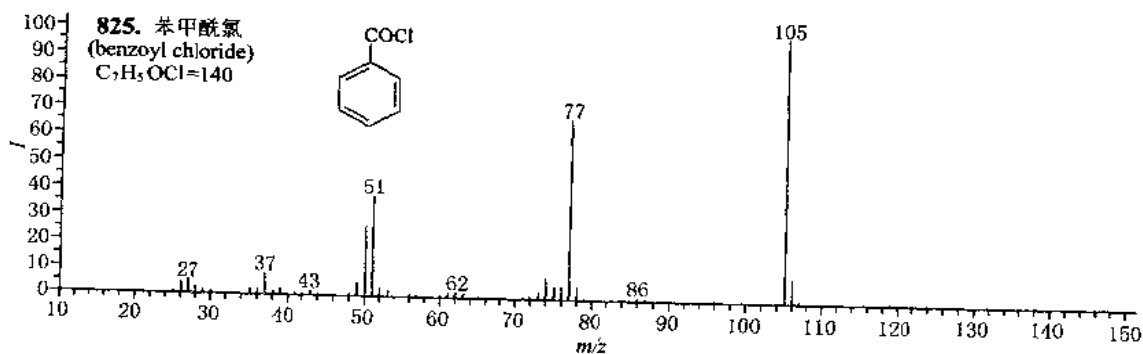
(2) 草酰氯 (823) 的主要碎片离子来自分子离子的对半裂解, 戊二酰氯 (824) 的主要碎片离子是  $M-Cl$ ,  $M-COCl$ ,  $M-Cl-HCl$  和  $\overset{+}{C}OCl$ 。

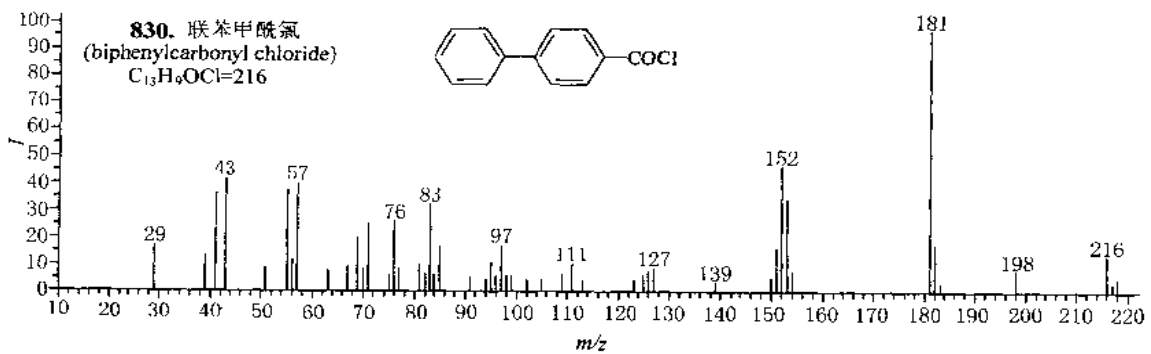
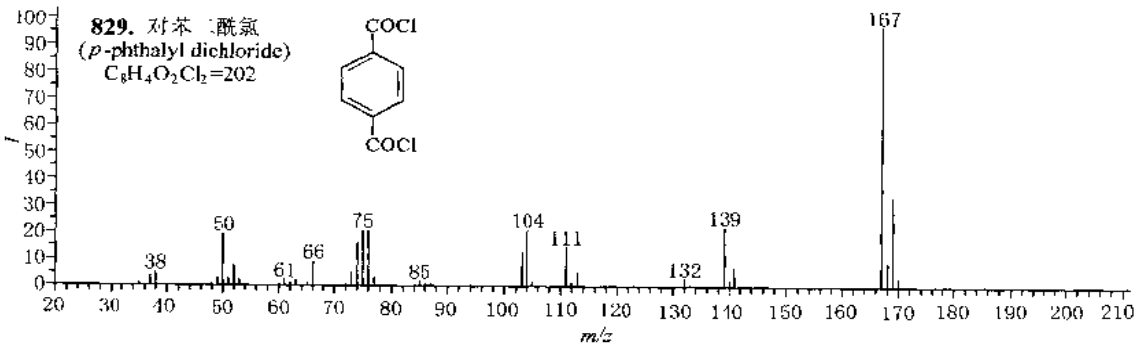
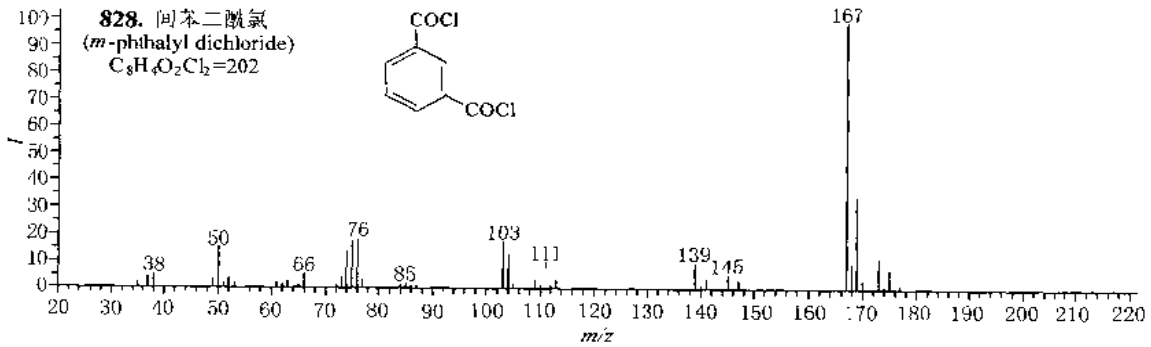
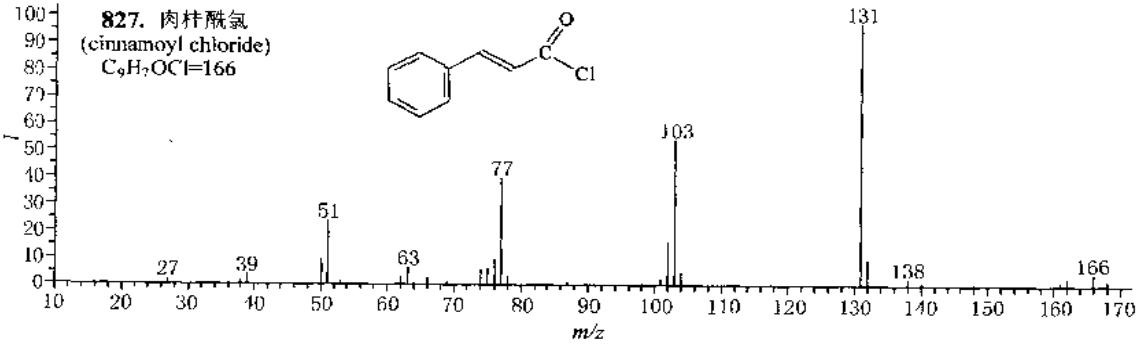




## 二、芳香酰卤类

- (1) 苯甲酰氯 (825) 和苯甲酰溴 (826) 的裂解途径都是  $M-X-CO-C_2H_2-H$ 。
- (2) 肉桂酰氯 (827) 的裂解途径是  $M-Cl-CO-C_2H_2-C_2H_2-H$ 。
- (3) 间和对苯二甲酰氯 (828, 829) 的裂解途径都是  $M-Cl-CO-Cl-CO-C_2H_2$ 。
- (4) 联苯甲酰氯 (830) 的裂解途径是  $M-Cl-CO-H$ 。







## 第四节 酰胺类

### 一、脂肪酰胺类

(1) 甲、乙、丙酰胺 (831~833) 的裂解是羰基两侧的  $\alpha$ -裂解失去氨基或失去烷基。

(2) 自丁酰胺 (834) 开始, 能进行麦氏重排反应生成离子  $m/z$  59, 丁酰胺 (834) 以上的酰胺也有  $M-NH_2$  和  $M$ -烷基的离子。

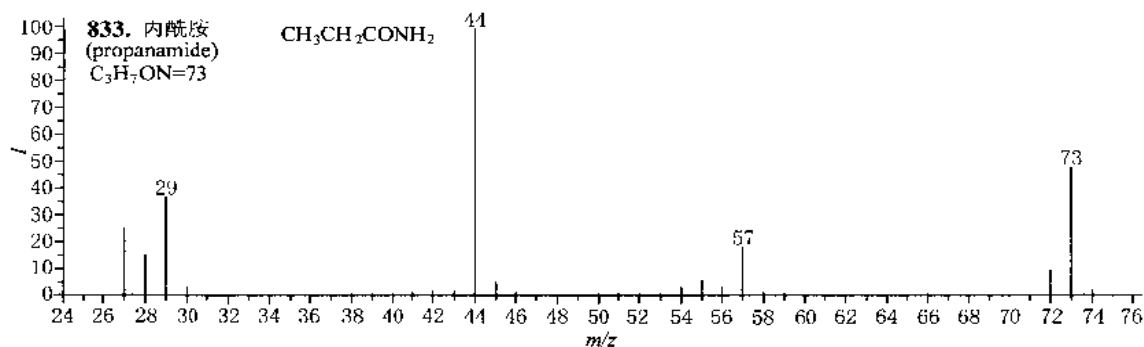
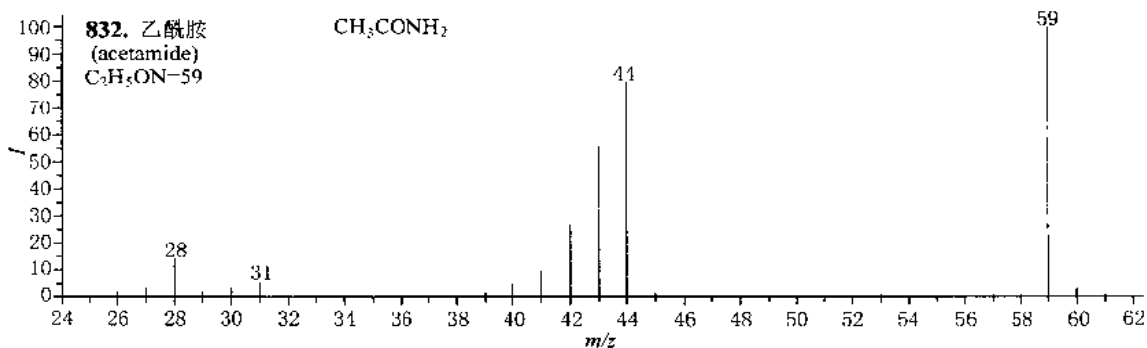
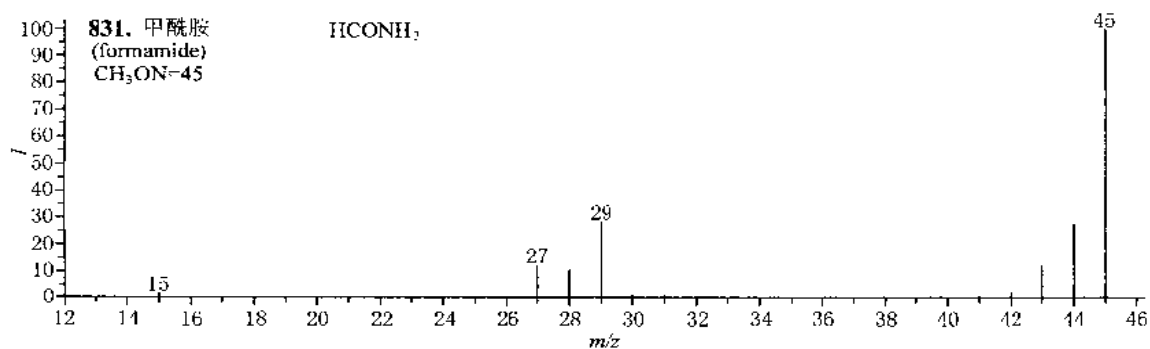
(3) 自丁酰胺 (834) 开始,  $+CH_2CH_2CONH_2$  离子变强。

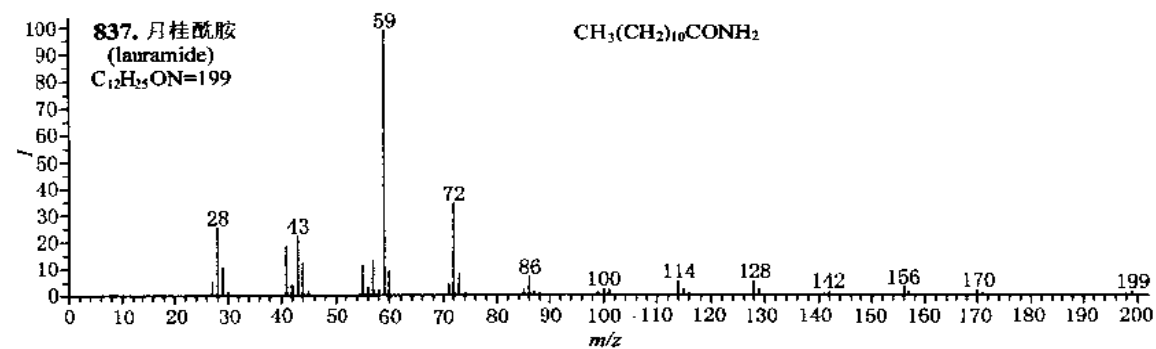
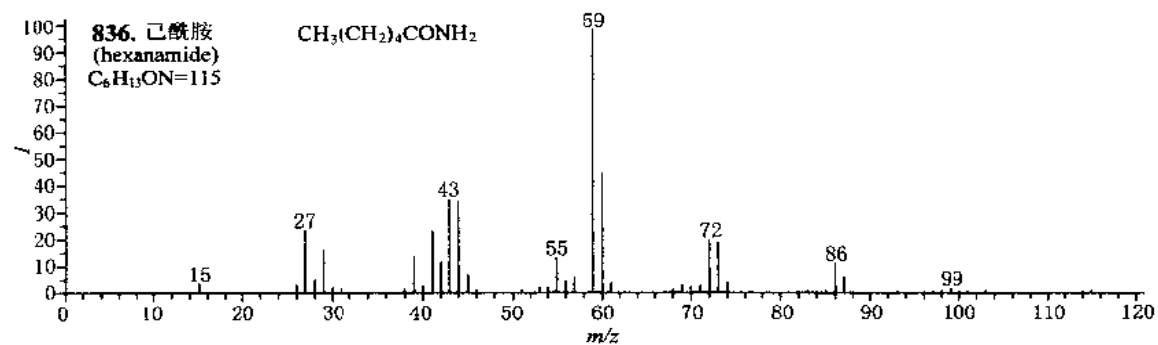
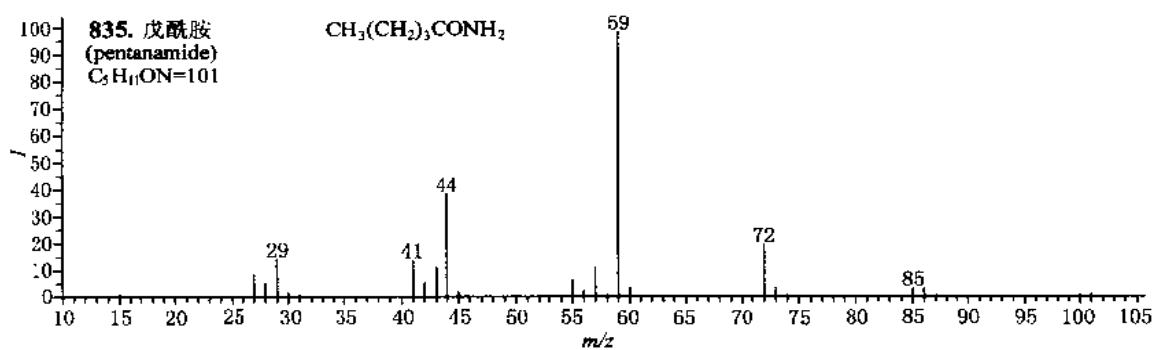
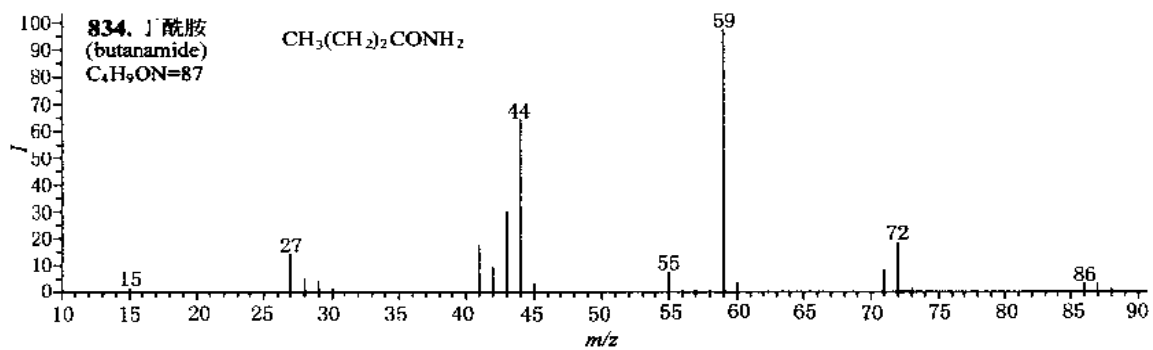
(4)  $N,N$ -二乙基甲酰胺 (840) 有  $M-CH_3$  离子再进行麦氏重排裂解生成的离子  $m/z$  58。

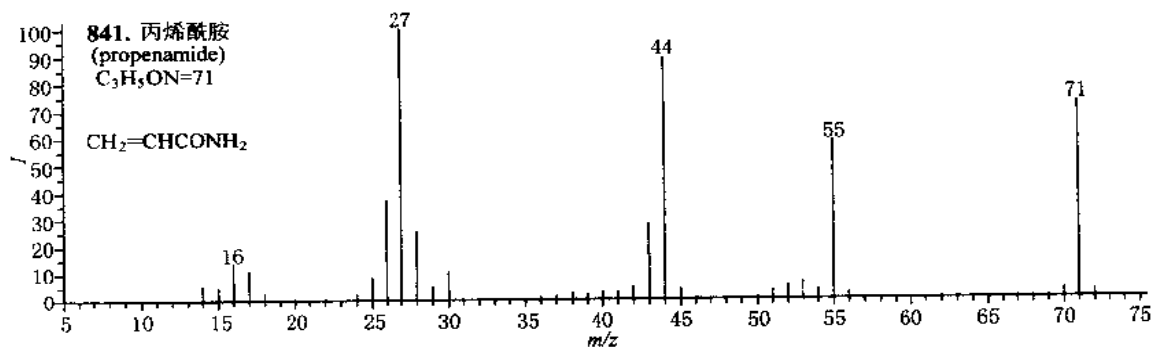
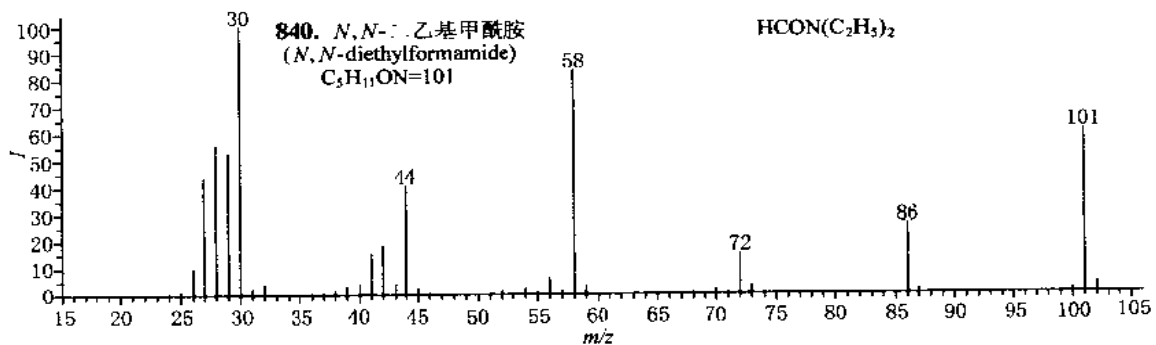
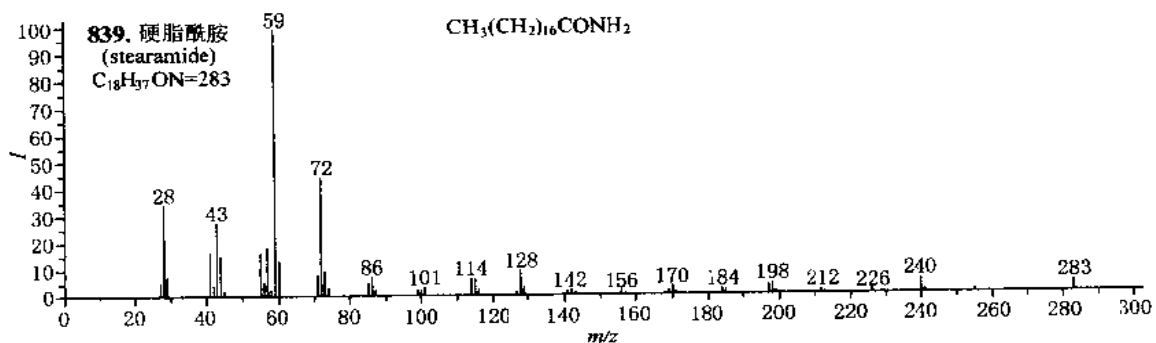
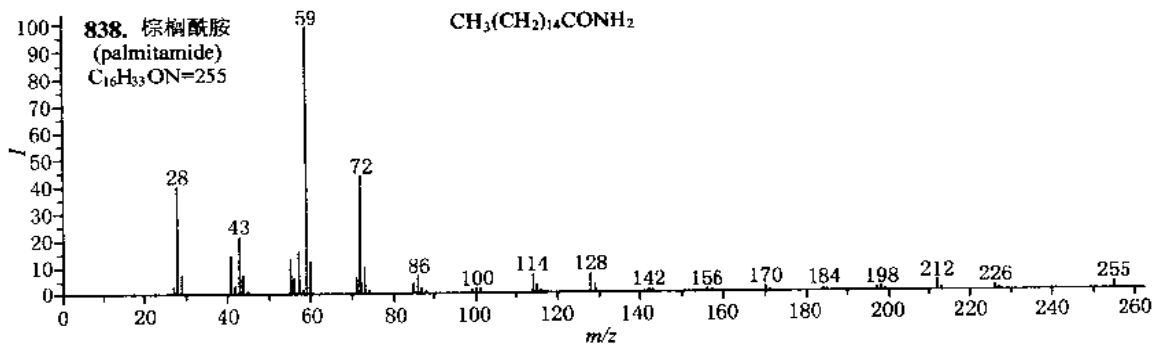
(5) 丙烯酰胺 (841) 的裂解是羰基两侧的  $\alpha$ -裂解。

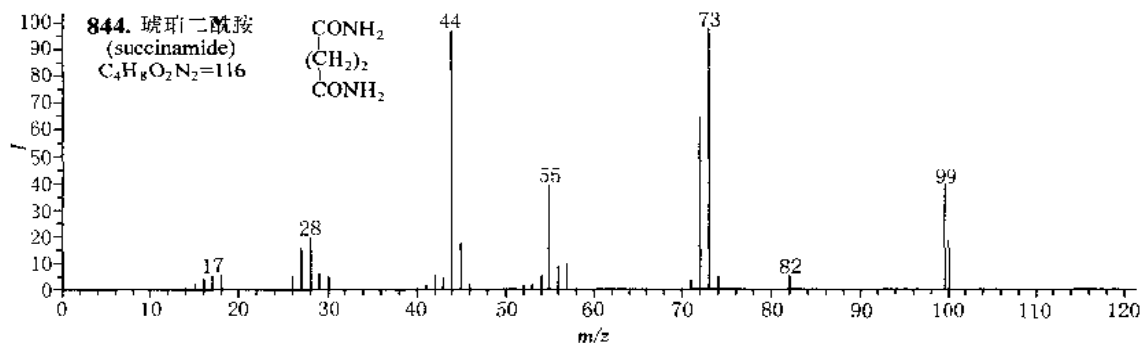
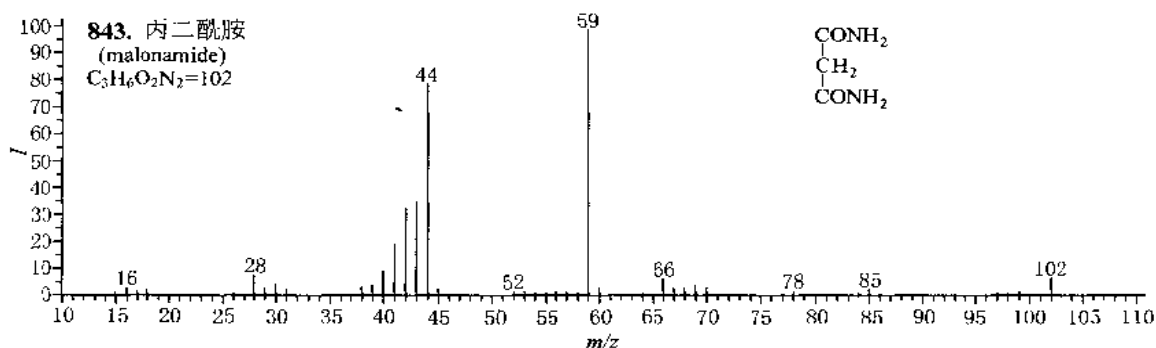
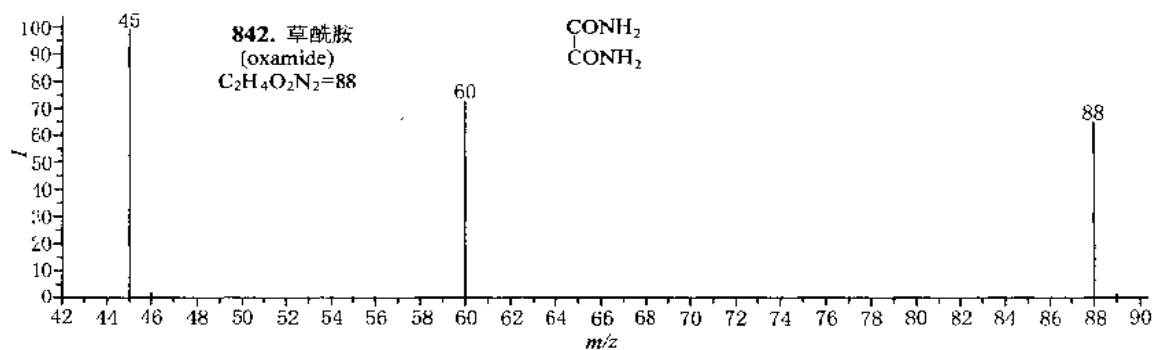
(6) 草酰胺 (842) 的裂解是重排氨基失去一氧化碳, 也能转移氢失去  $CONH$ 。

(7) 丙二酰胺 (843) 也能进行麦氏重排裂解, 琥珀二酰胺 (844) 的主要裂解是  $M-CONH$  和  $M-CONH_2$ 。









## 二、芳香酰胺类

(1) 苯甲酰胺 (845)、各种烷基氨基和苯基氨基取代物 (846, 847)、以及烷基苯甲酰胺类 (848, 849) 的裂解途径主要是  $M-NH_2-CO-C_2H_2-C_2H_2$ 。

(2) 氨基苯甲酰胺类 (850, 851) 的裂解途径是  $M-NH_2-CO-C_2H_2$  和  $M-NH_2-CO-CN$ 。

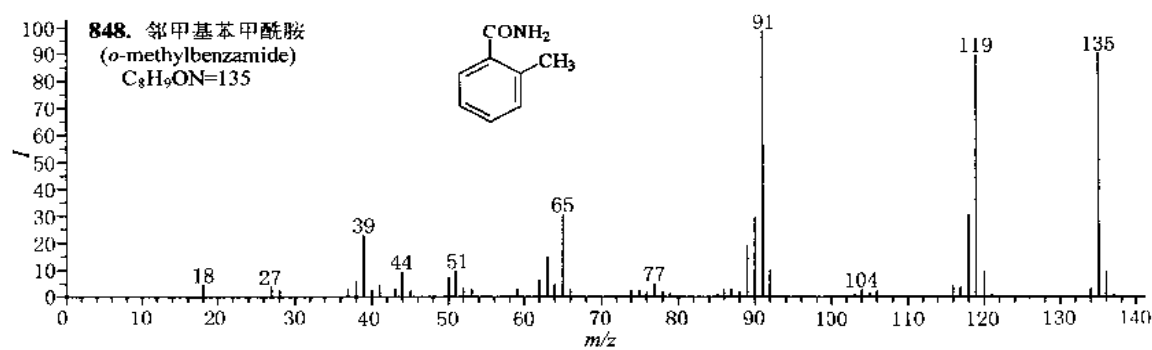
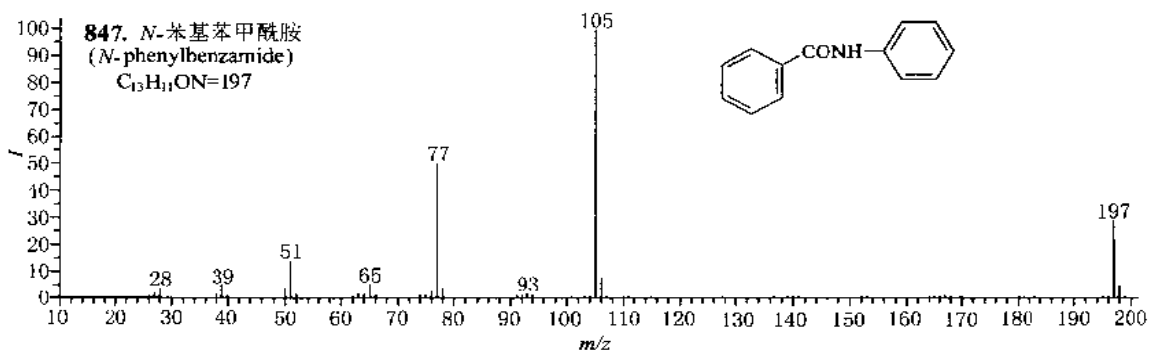
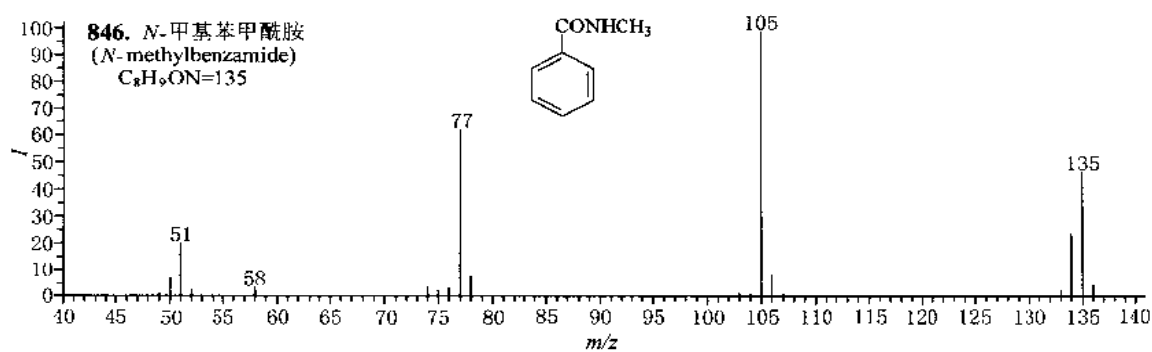
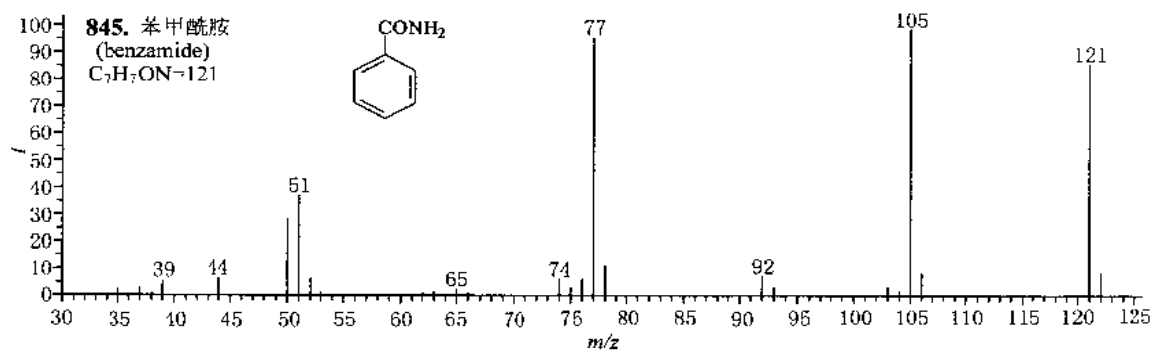
(3) 邻羟基苯甲酰胺 (852) 的裂解途径是  $M-NH_2-CO-CO$ 。

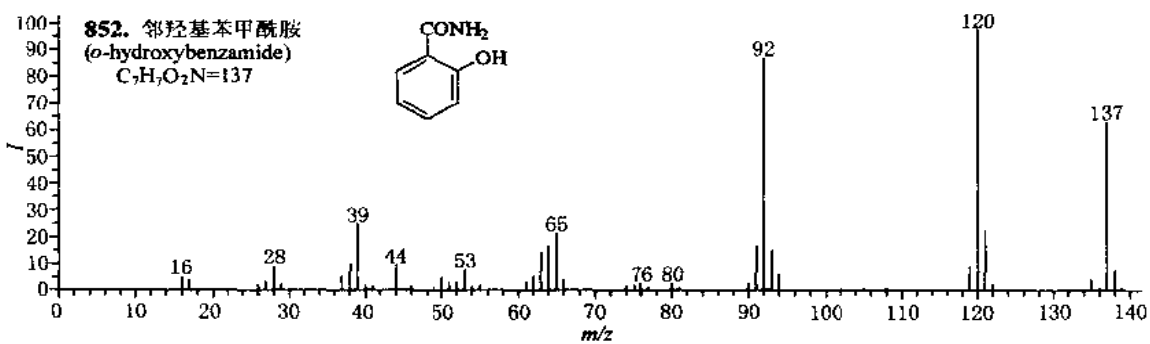
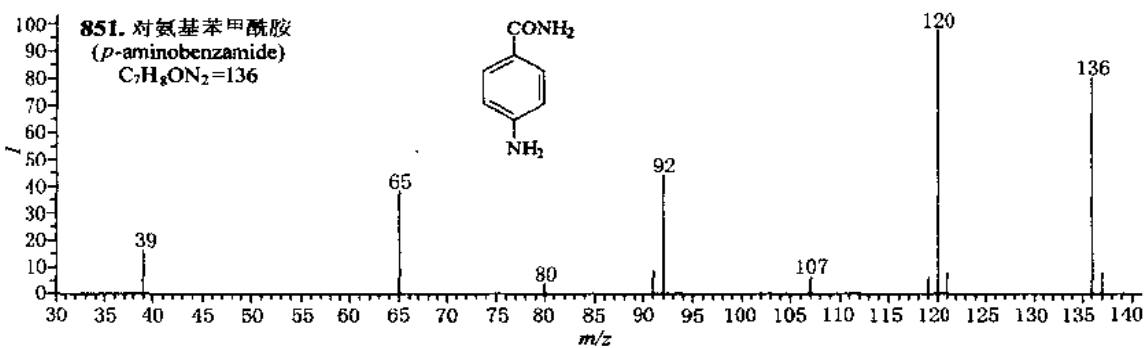
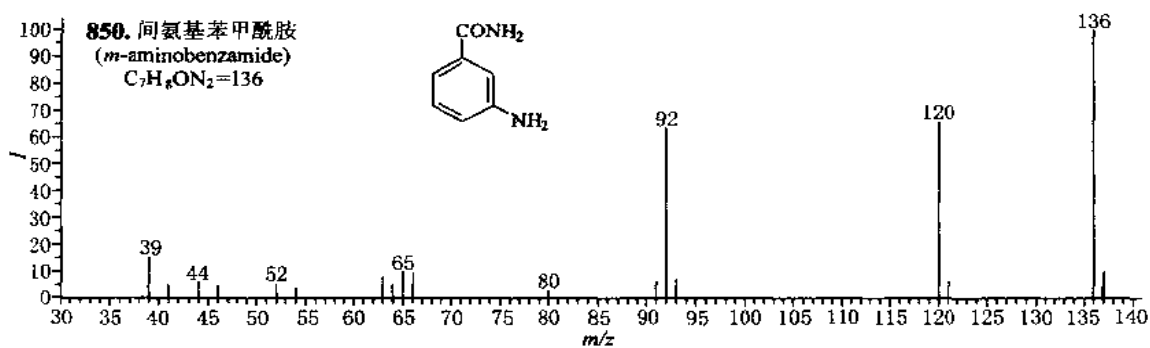
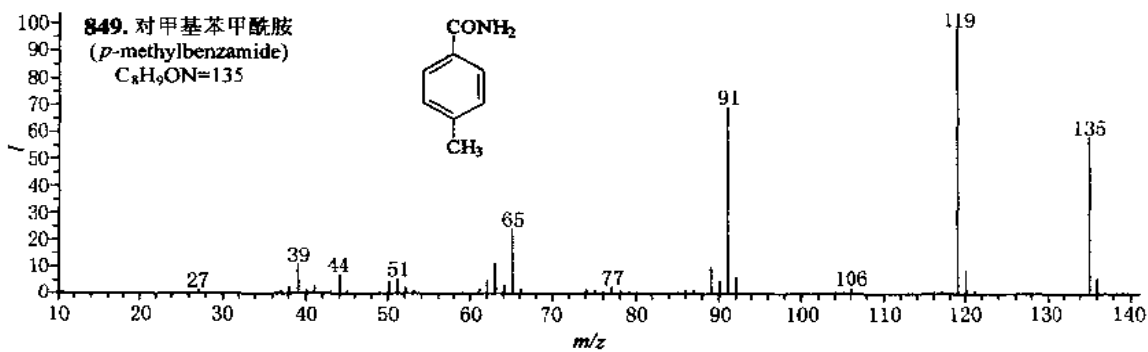
(4) 一氯代苯甲酰胺 (853, 854) 的裂解途径是  $M-NH_2-CO-HCl$ , 五氟苯甲酰胺 (855) 的裂解途径是  $M-NH_2-CO-CF_2$ 。

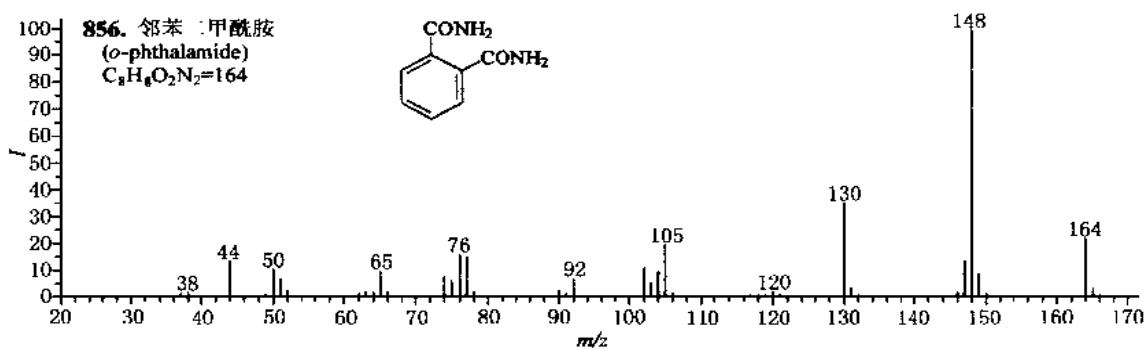
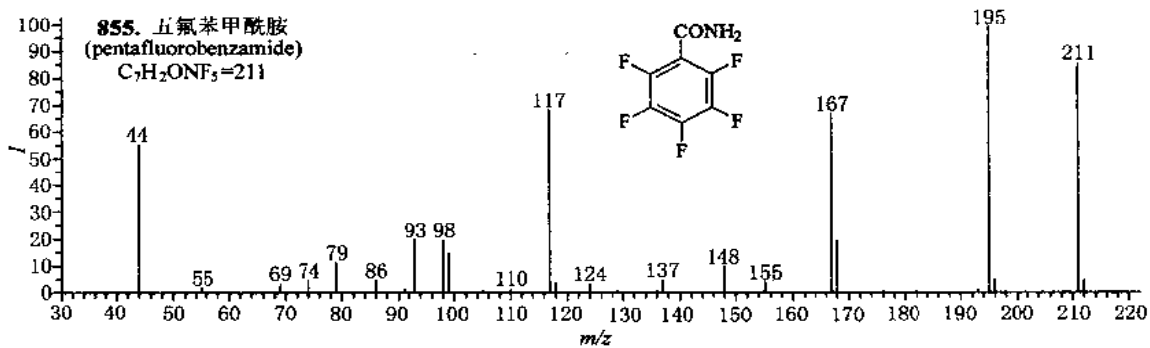
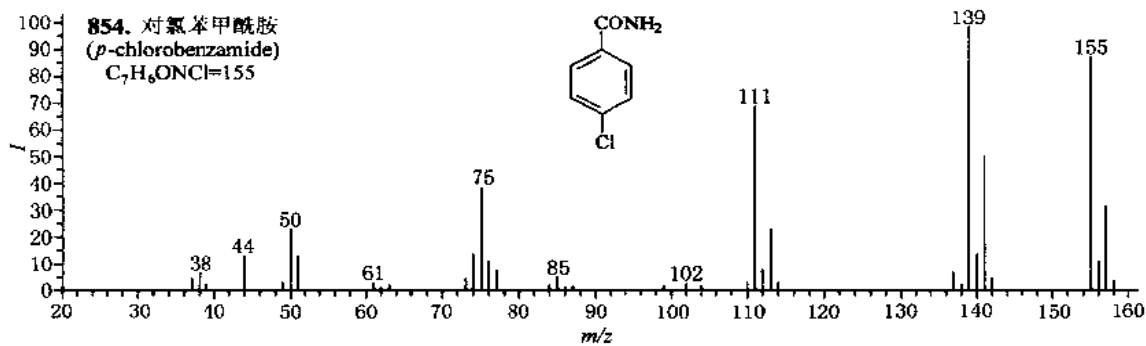
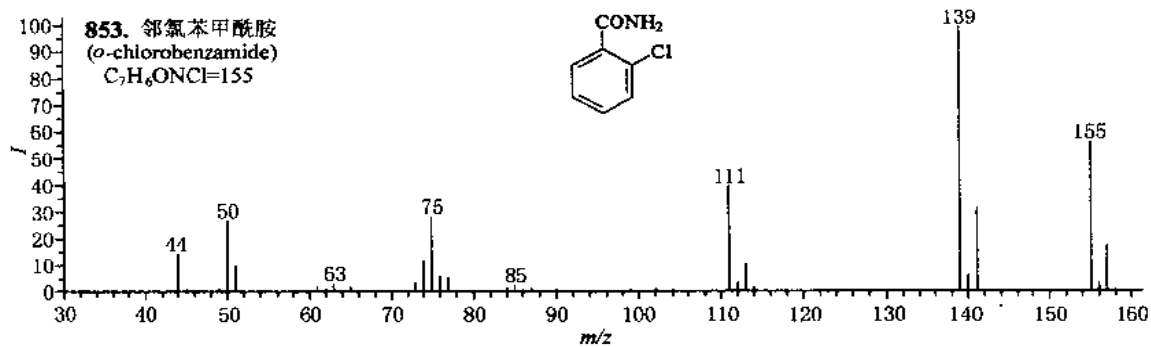
(5) 邻苯二甲酰胺 (856) 的裂解途径是  $M-NH_2-H_2O$ 。

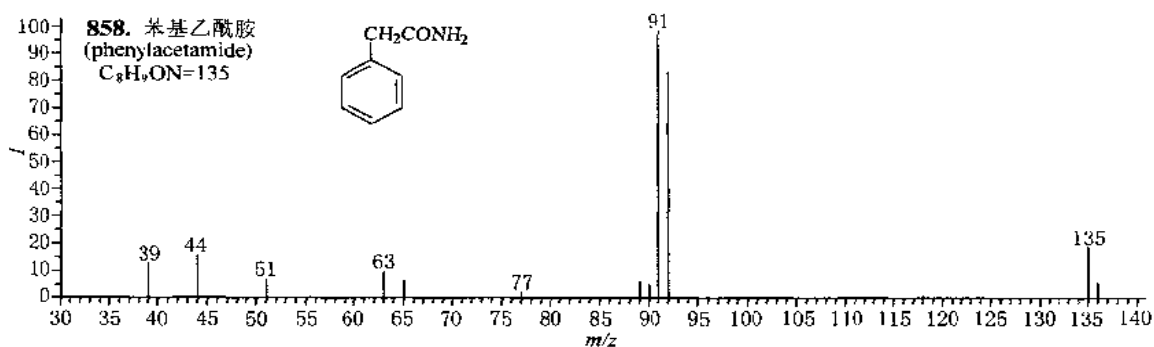
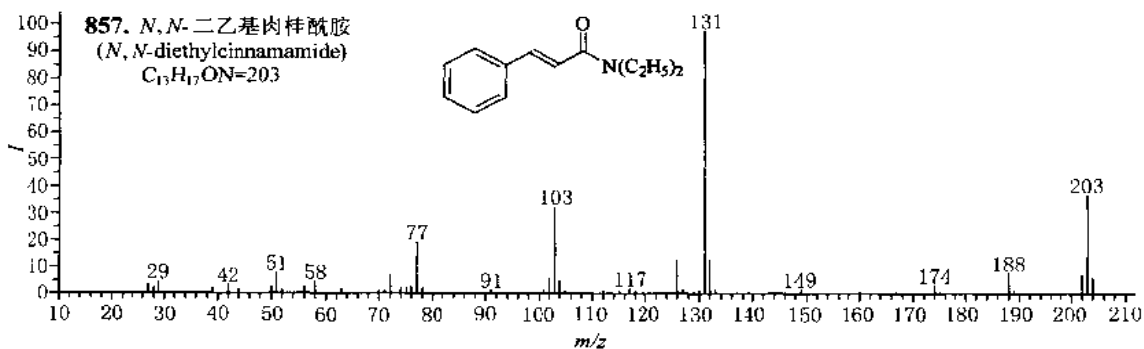
(6) *N,N*-二乙基肉桂酰胺 (857) 的裂解途径是  $M-N(C_2H_5)_2-CO-C_2H_2$ 。

(7) 苯乙酰胺 (858) 的裂解是麦氏重排失去 CONH 和苄基裂解失去 CONH<sub>2</sub>。



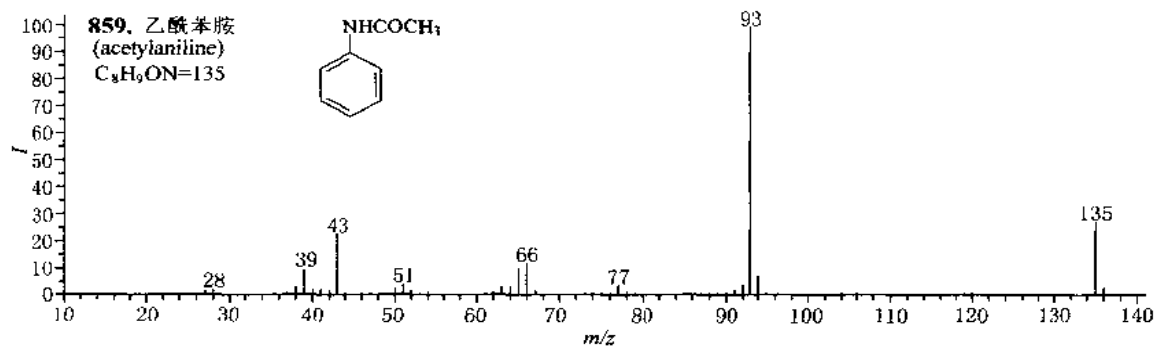




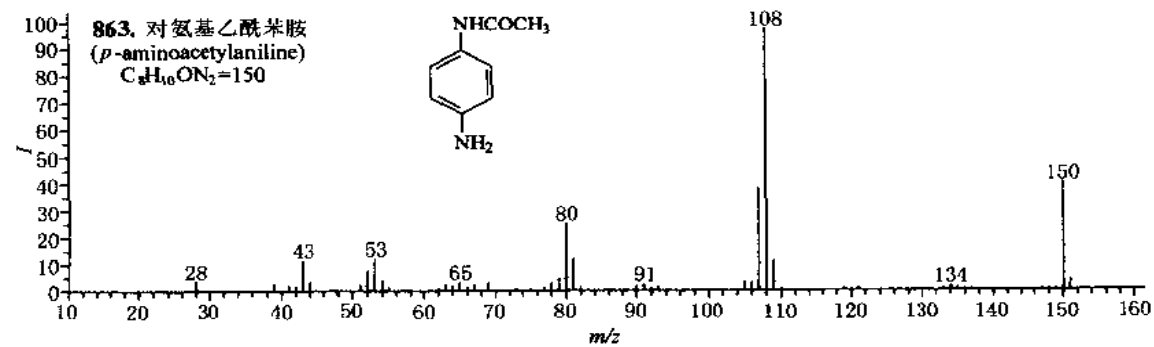
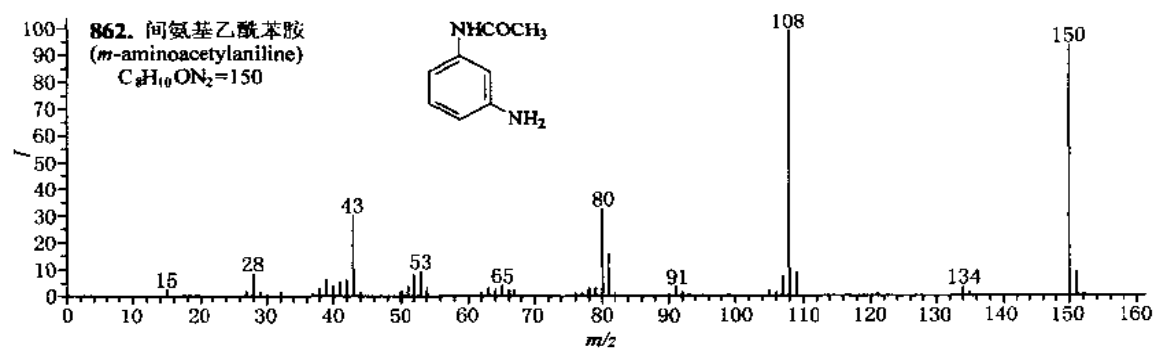
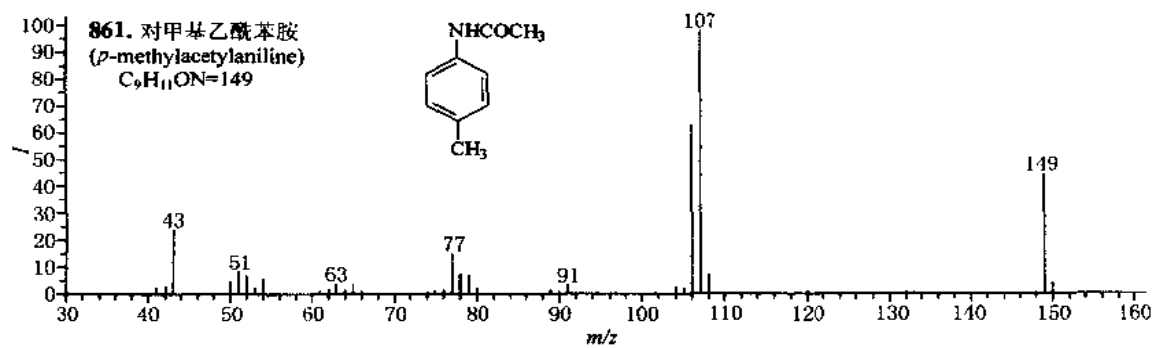
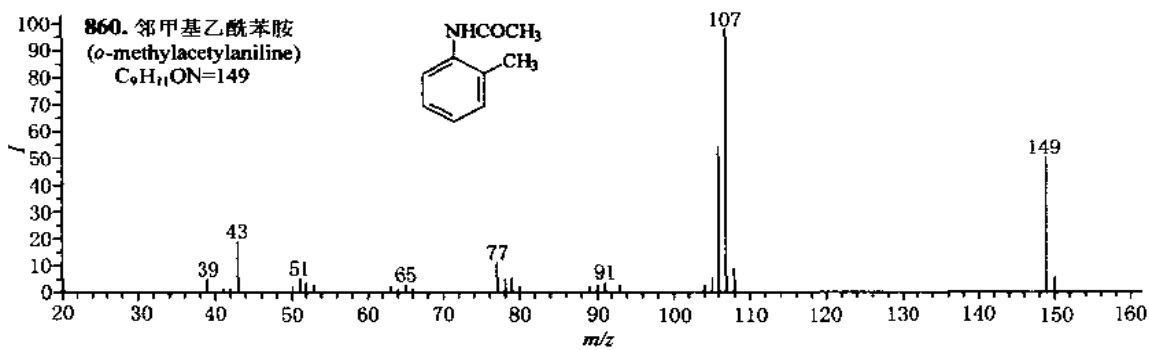


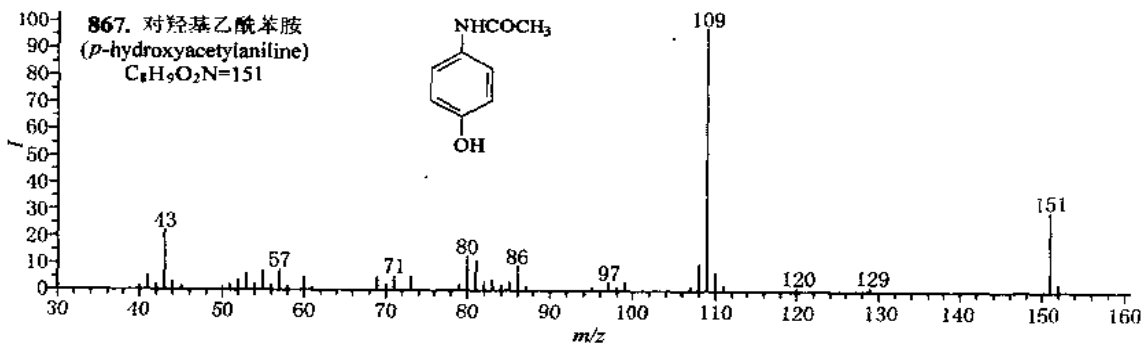
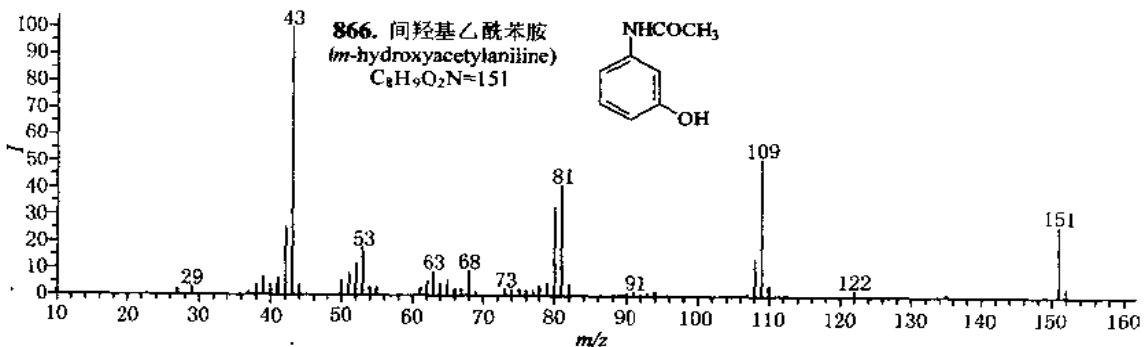
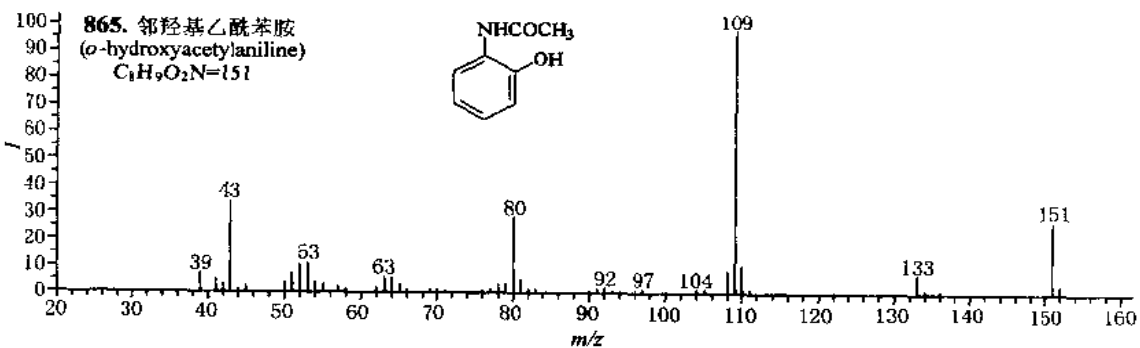
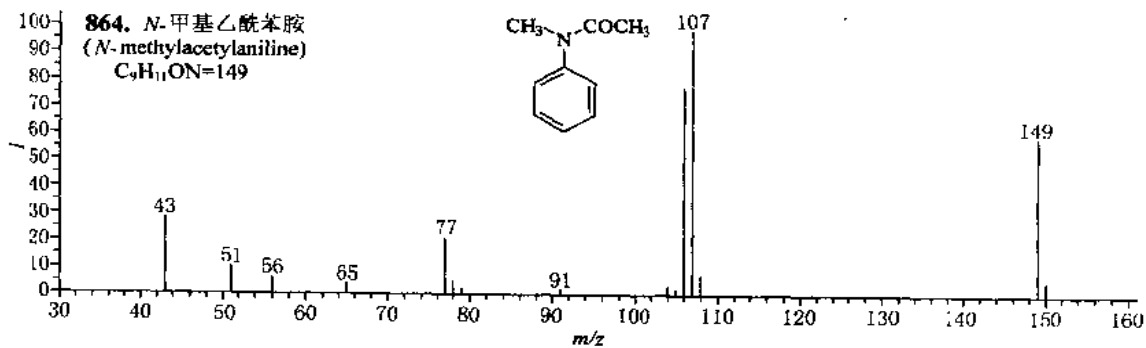
### 三、乙酰芳胺类

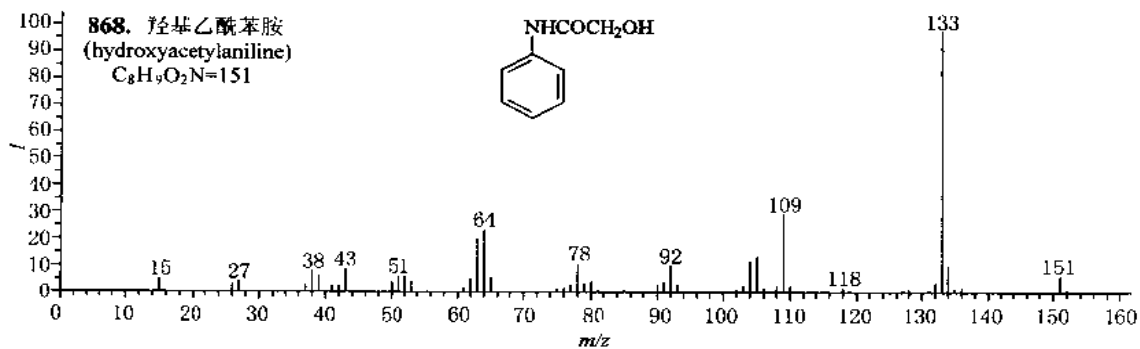
- (1) 所有乙酰芳胺类 (859~867) 的主要碎片离子都是由于麦氏重排裂解产生的  $M - CH_2CO$  离子。
- (2) 乙酰苯胺 (859) 的裂解途径是  $M - CH_2CO - CNH - H - C_2H_5$ 。
- (3) 甲基乙酰苯胺类 (860, 861) 的裂解是  $M - CH_2CO$  和  $M - CH_3CO$ 。
- (4) 氨基乙酰苯胺类 (862, 863) 的  $M - CH_2CO$  离子可再失去  $CNH$  或  $CNH_2$ 。
- (5) 邻、间、对羟基乙酰苯胺类 (865~867) 的裂解途径是  $M - CH_2CO - CO$  或  $M - CH_2CO - CHO$ 。
- (6) 羟基乙酰苯胺 (868) 的主要离子是  $M - H_2O$ 。







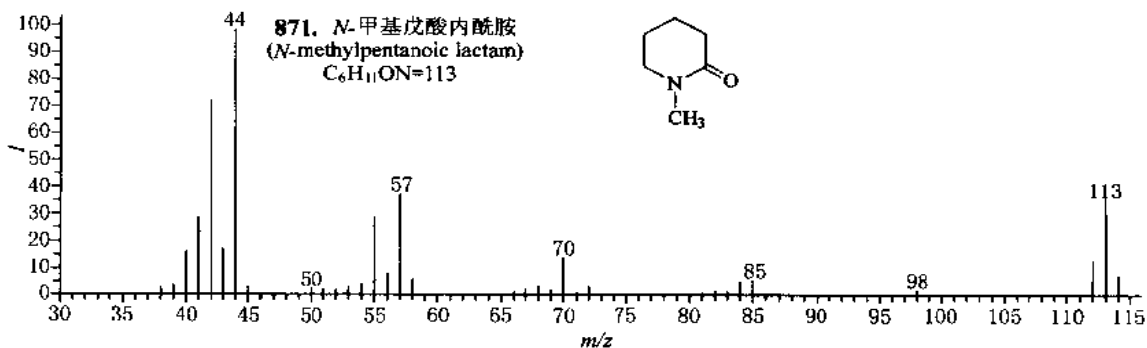
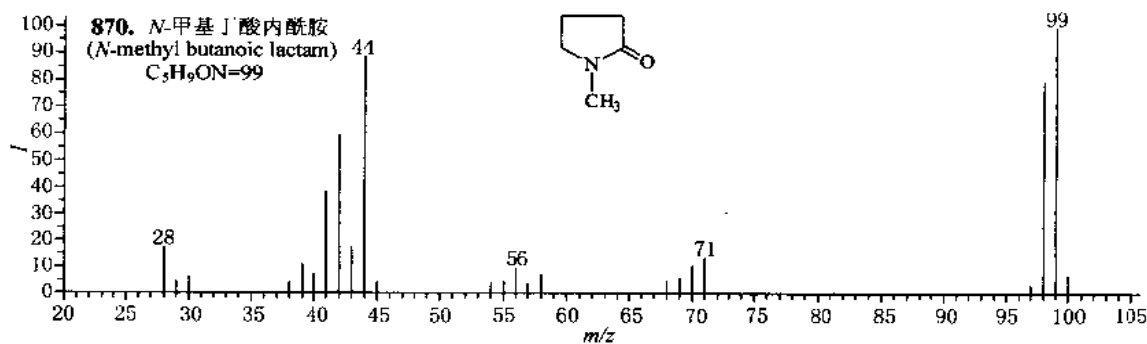
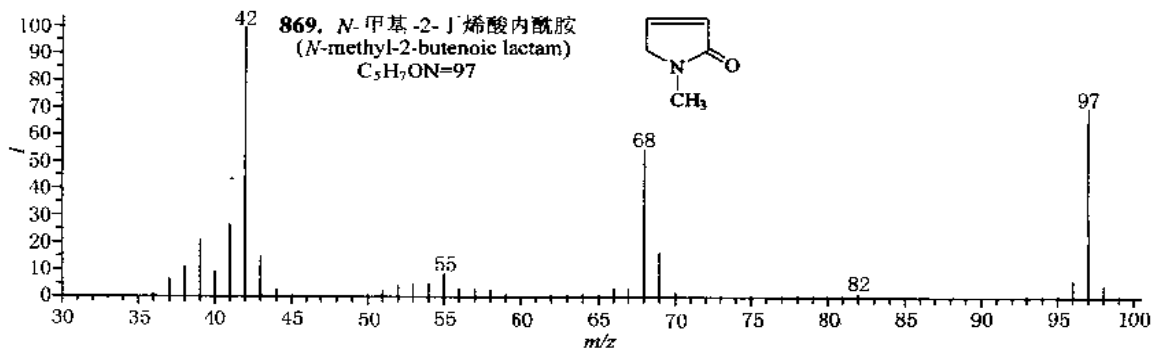


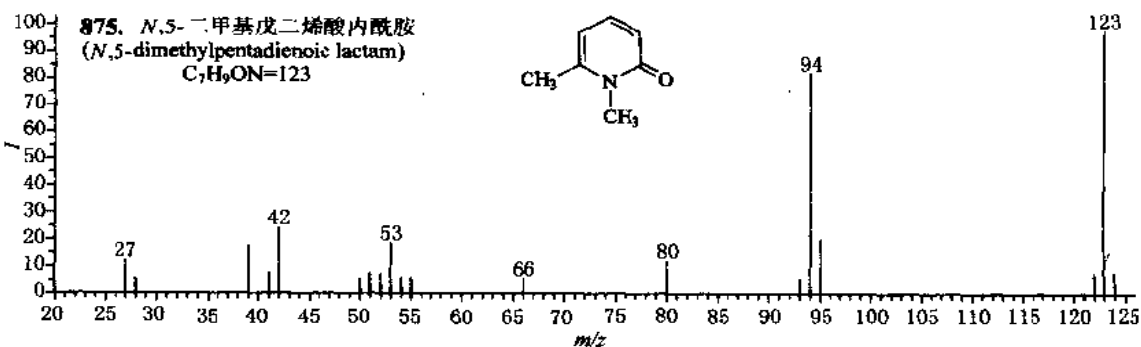
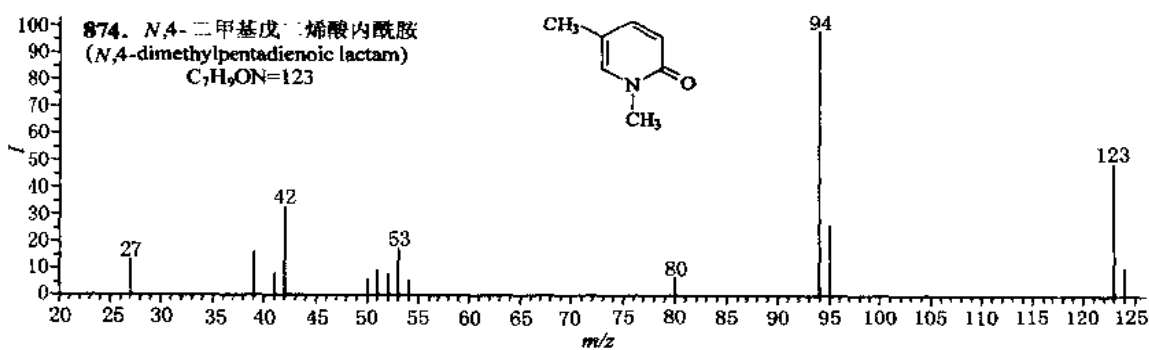
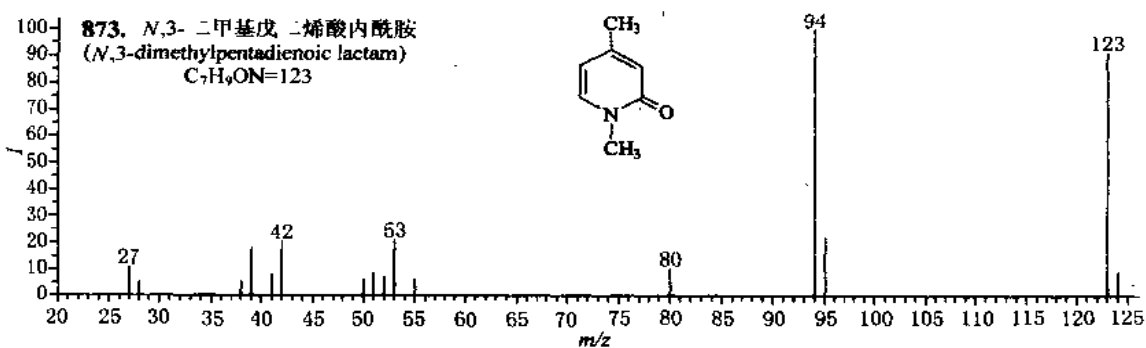
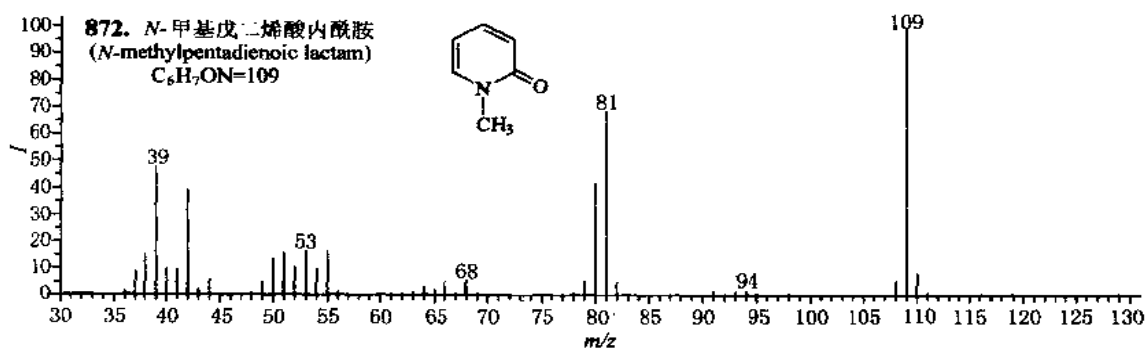


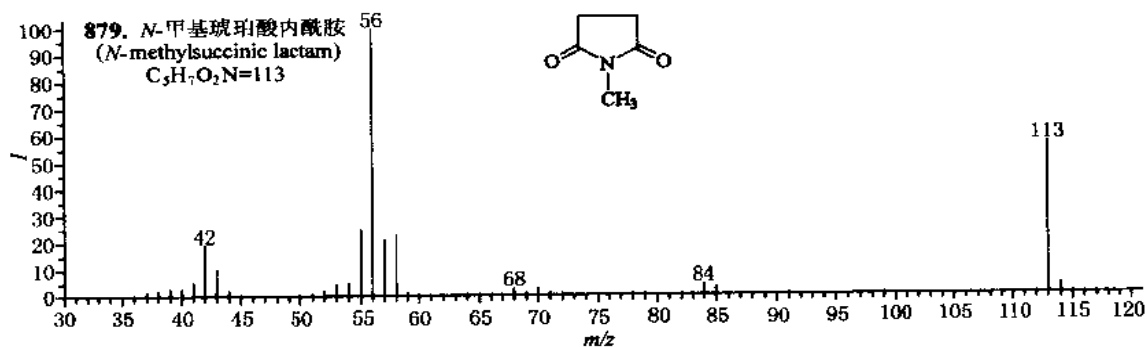
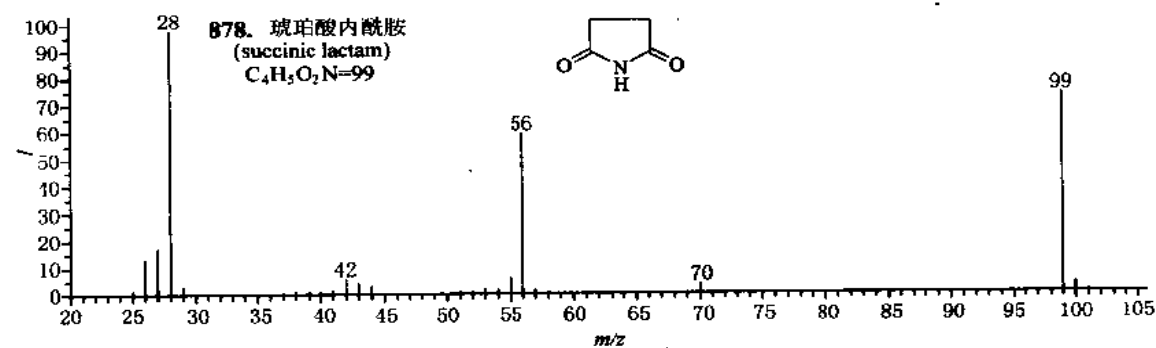
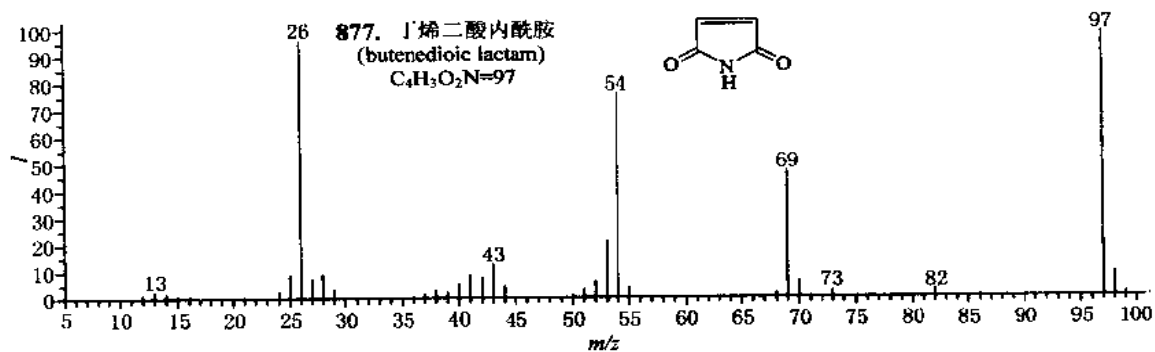
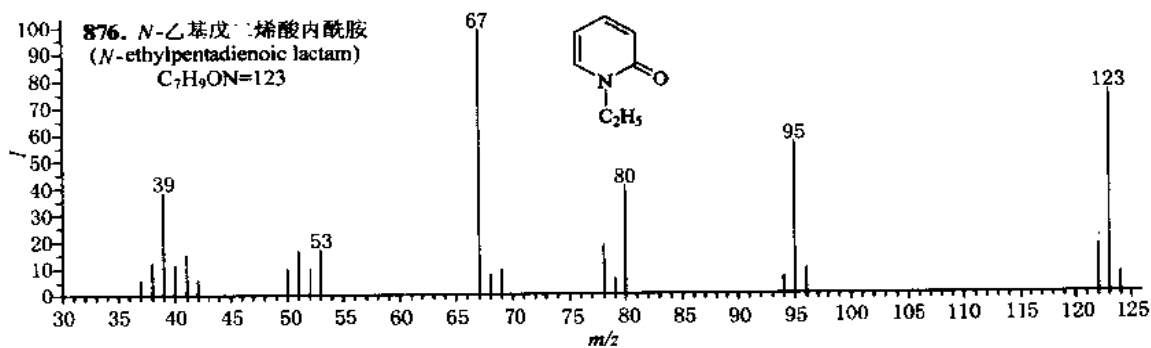
#### 四、内酰胺类

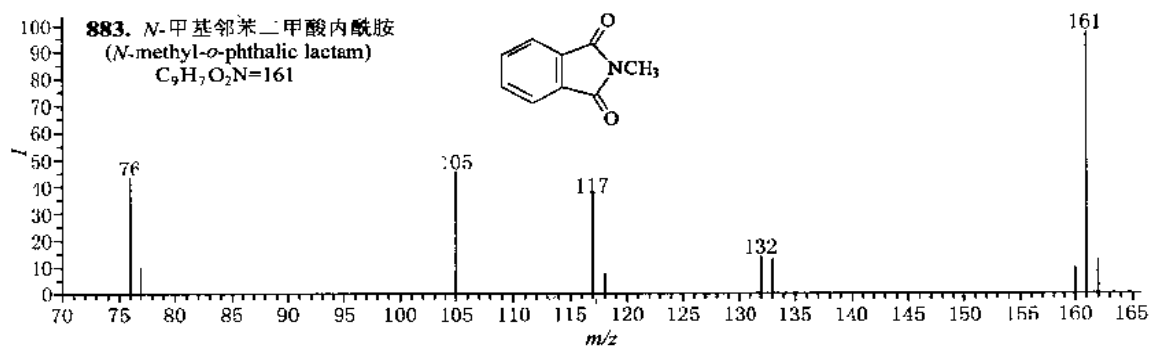
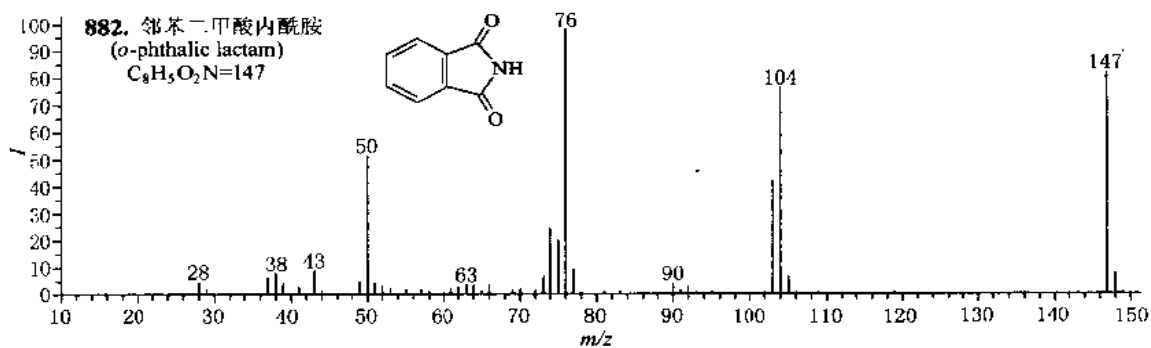
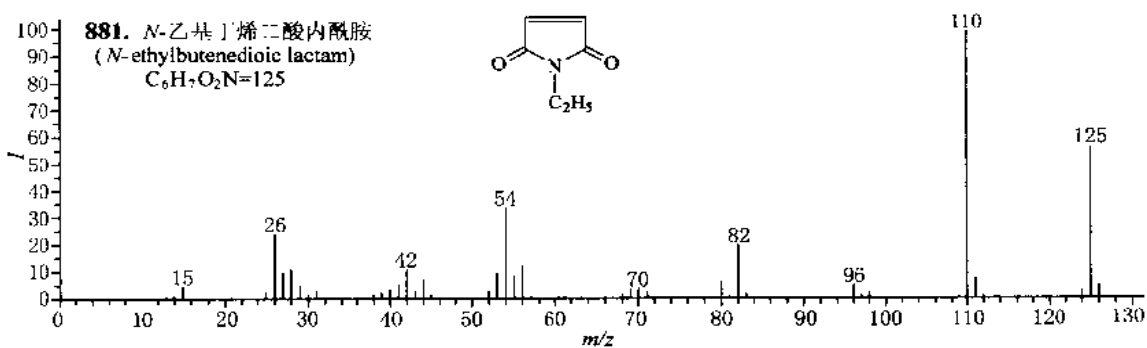
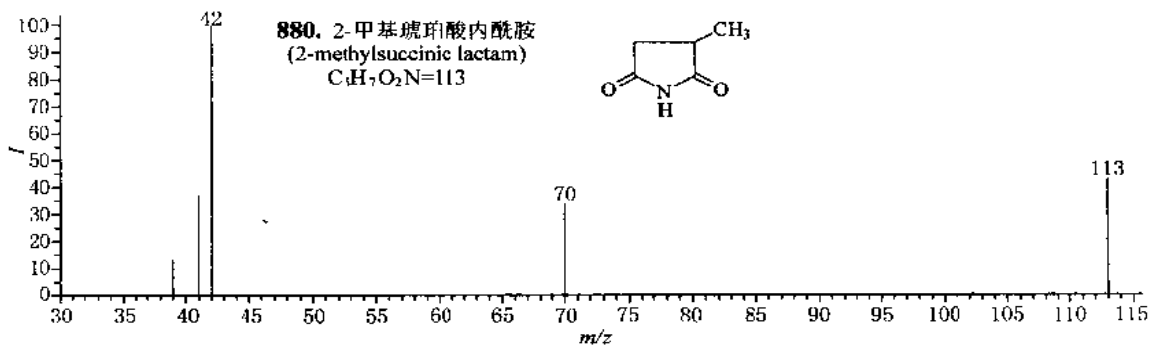
(1) 内酰胺类 (869~876) 的主要裂解途径都是  $M-CO-H$ 。

(2) 二酸内酰胺类 (877~883) 的主要裂解是失去  $CONR$ 。



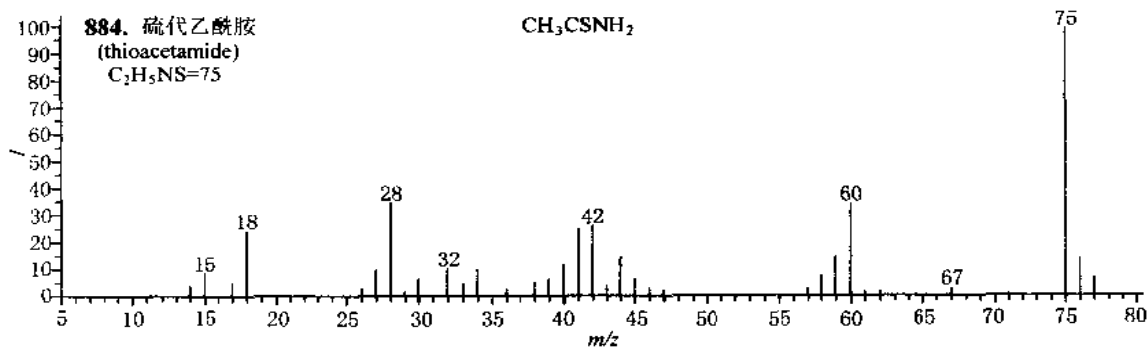






### 五、硫代酰胺类

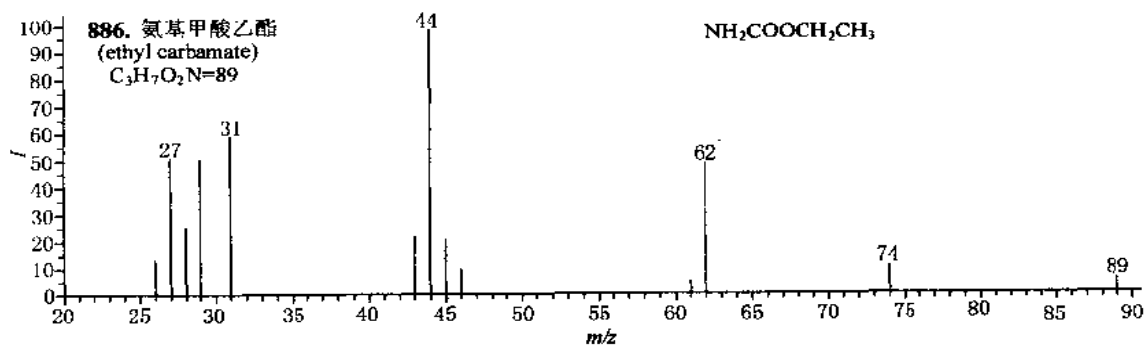
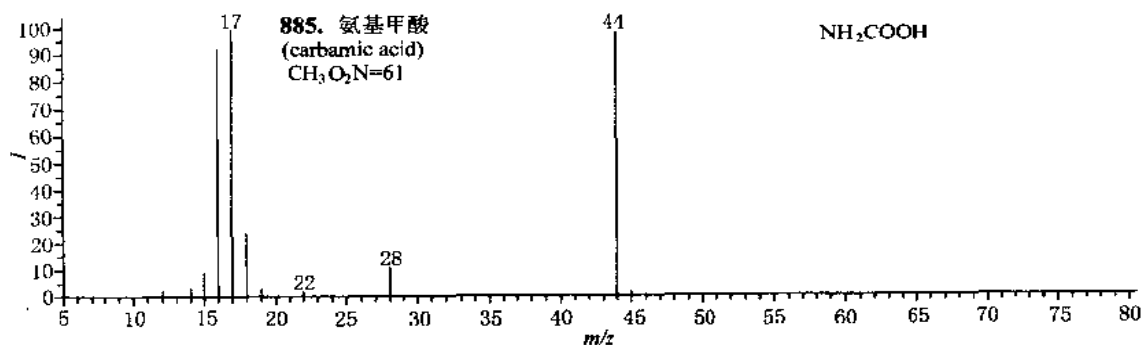
硫代乙酰胺 (884) 的主要裂解是失去甲基和失去氨基。



### 六、碳酰胺类

(1) 氨基甲酸 (885) 的裂解是失去羟基。

(2) 氨基甲酸乙酯 (886) 的裂解有  $M-CH_3$ ,  $M-C_2H_5$  (麦氏重排离子  $m/z$  61 加质子) 和  $M-OC_2H_5$ 。



## 第五节 酯 类

### 一、脂肪酸酯类

(1) 甲酯 甲酸甲酯(887)的裂解途径是  $M-CO$  和  $M-CO-H$ 。自乙酸甲酯(888)起,以上各甲酯均有  $M-OCH_3$  离子和  $M$ -烷基离子。自丁酸甲酯(891)起,以上各甲酯均有麦氏重排离子  $m/z$  74,并随着烷链的加长,离子 $^+(CH_2)_nCOOCH_3$  ( $n=2, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30, 34$ )变强。琥珀酸单甲酯(913)的主要碎片离子是  $M-OCH_3$  离子,3-甲基-2,6-庚二烯酸甲酯(914)的离子  $m/z$  100 和  $m/z$  55 都是重排产物,三氯乙酸甲酯(915)的主要碎片离子是  $M-Cl$ ,  $M-COOCH_3$ ,  $M-COOCH_3-Cl$  和  $^+COOCH_3$  离子。

(2) 乙酯 甲酸乙酯(916)的主要裂解是  $M-CO$ ,  $M-CO-H$  和  $M-CO-CH_3$ , 乙酸乙酯(917)的主要裂解是  $M-CH_3$  和  $M-OC_2H_5$ , 长链羧酸乙酯(918~923)都有麦氏重排离子  $m/z$  88,  $M-OC_2H_5$  和较强的  $^+(CH_2)_nCOOC_2H_5$  ( $n=2, 6, 10, 14, \dots$ ) 离子。

(3) 二甲酯 草酸二甲酯(924)的主要裂解是分子离子的对半裂解,其他二酸二甲酯(925~929)都有  $M-OCH_3$  和  $^+COOCH_3$  离子,而分子离子很弱或不出现。胶酸二甲酯(927)以上的化合物都有麦氏重排离子  $m/z$  74。

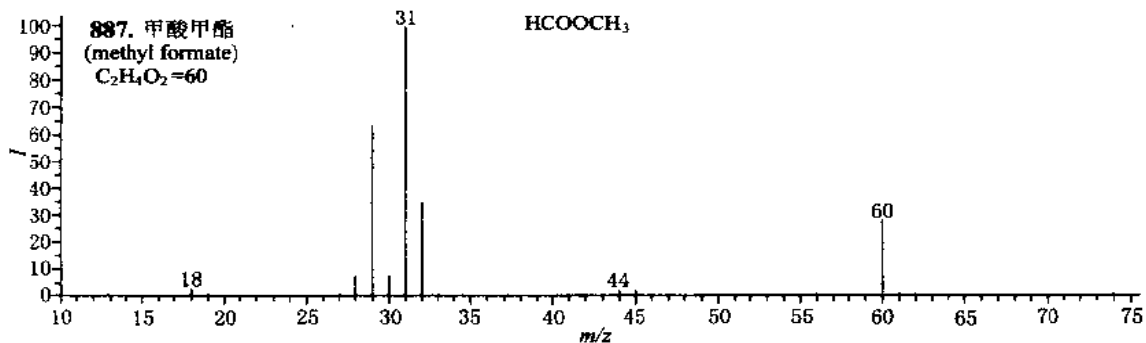
(4) 二乙酯 草酸二乙酯(930)的主要裂解也是分子离子的对半裂解,但要重排氢原子。丙二酸以上的二酸二乙酯(931~934)的主要裂解都是  $M-OC_2H_5$  和再失一氧化碳。

(5) 丙酯 甲酸丙酯类(935~938)的裂解都是失一氧化碳和氢原子,失一氧化碳后产物是相应的醇,然后按醇的裂解。丁酸丙酯的主要离子是  $M-OC_3H_7$  和丙基离子,离子  $m/z$  89

可能有  $C_3H_7C \begin{matrix} \overset{+}{O}H \\ \diagup \\ \diagdown \\ OH \end{matrix}$  的结构。

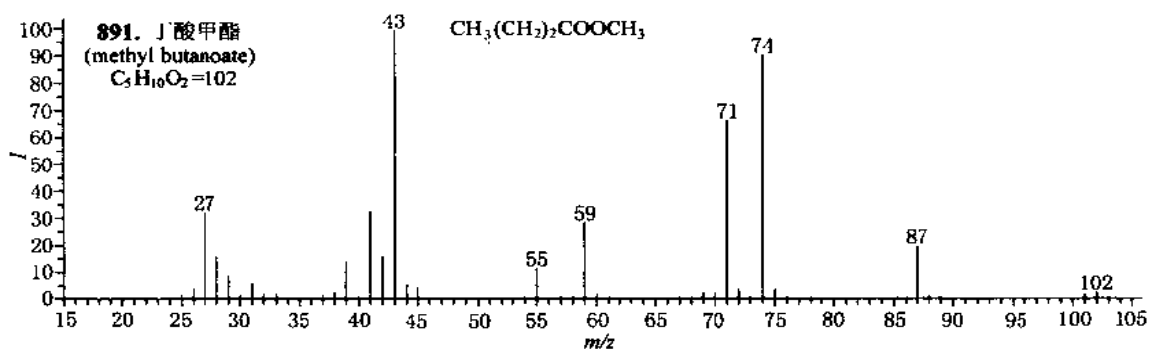
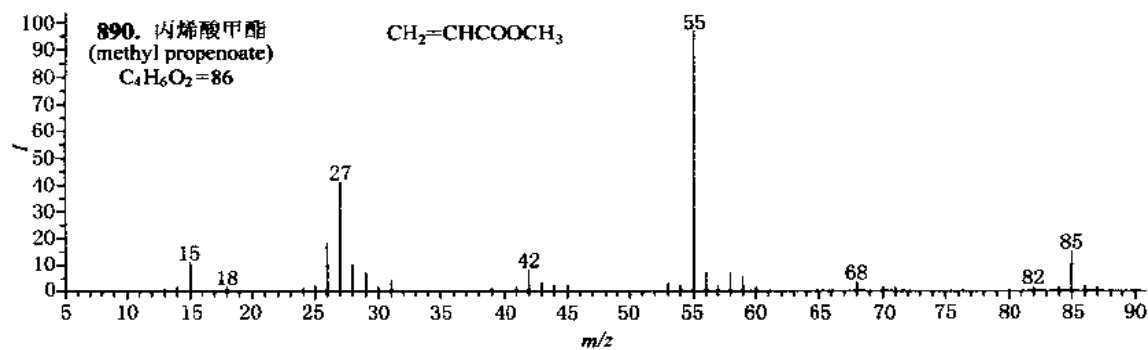
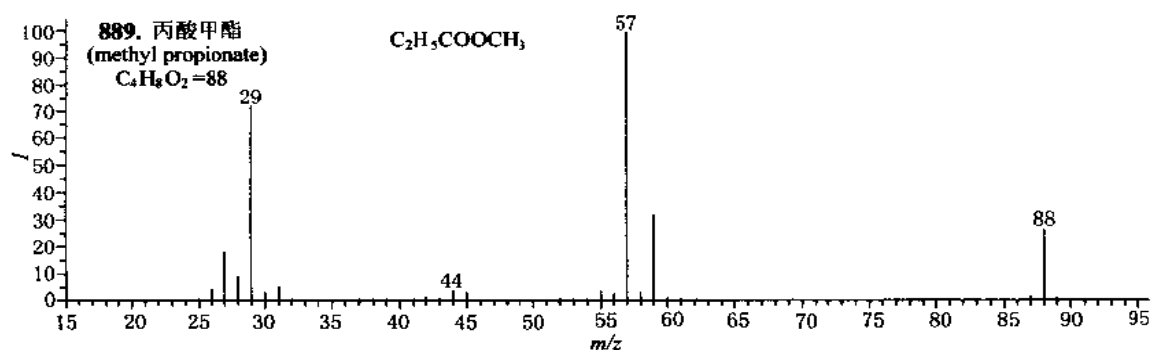
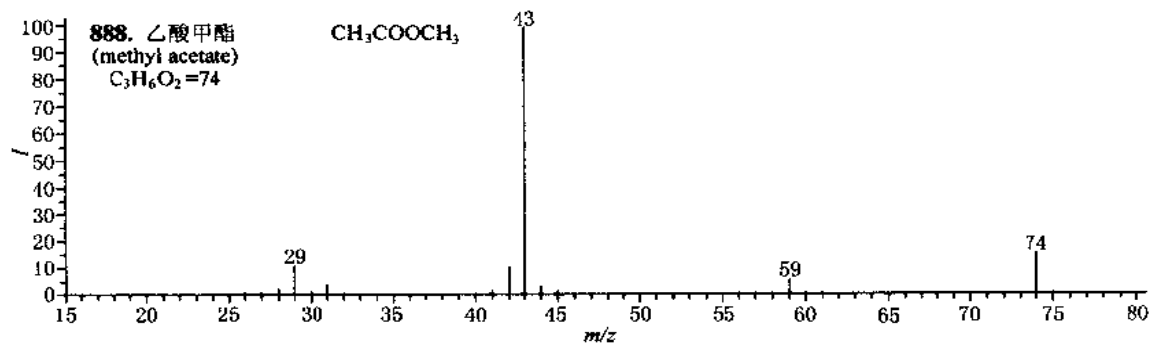
(6) 丁酯 甲酸丁酯类(939~942)仍然是失去一氧化碳和氢原子,失去一氧化碳后生成的丁醇再按丁醇的裂解方式裂解,例如失水和失  $C_3H_7$  或其他烷基。甲酸叔丁酯(942)一步失去一氧化碳和甲基,和叔丁醇一样,失一氧化碳的离子没有出现,而是直接得离子  $m/z$  59 和  $m/z$  57。

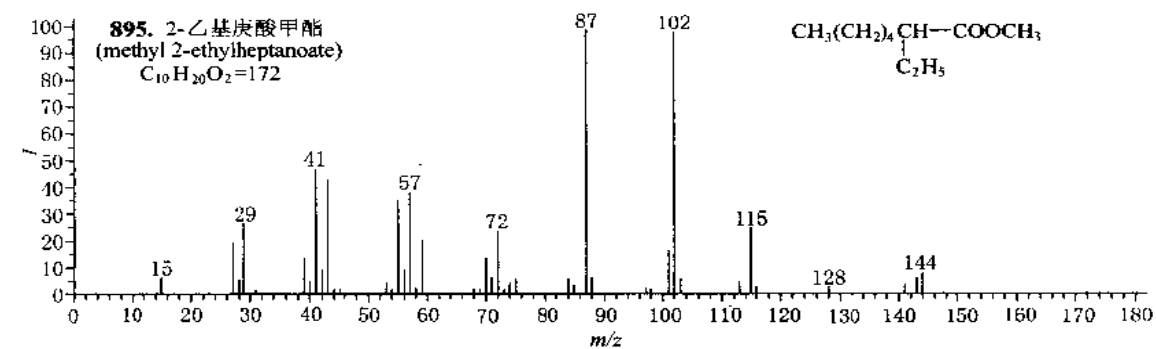
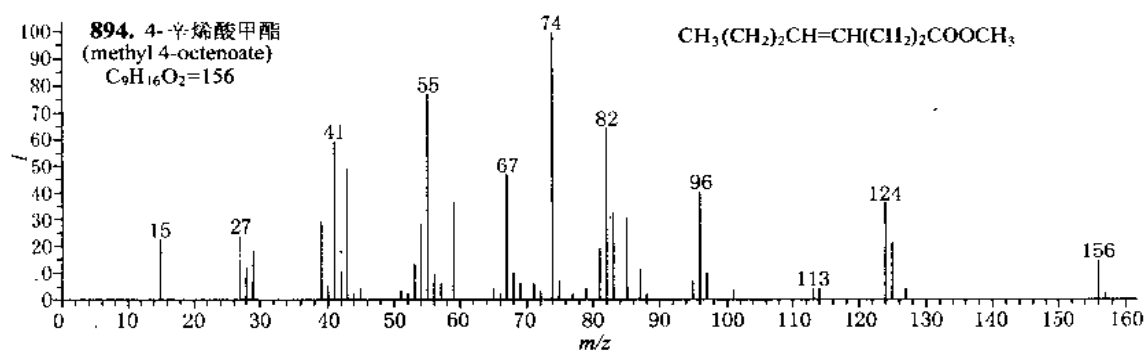
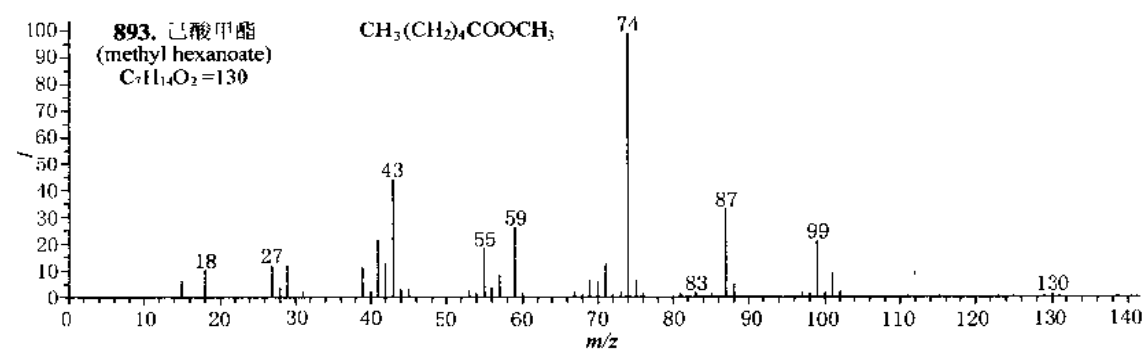
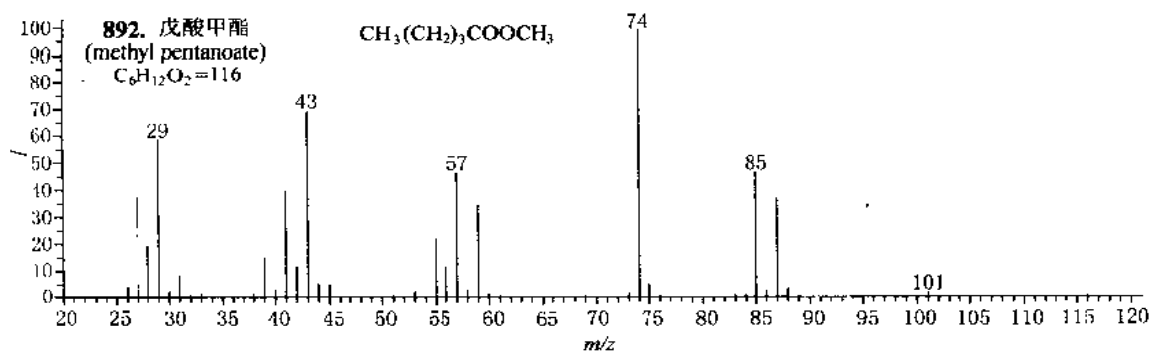
(7) 戊酯 甲酸戊酯类(943~945)有三条裂解途径:①失一氧化碳再失烷基得离子  $m/z$  31或  $m/z$  45;②失甲酸再失甲基得离子  $m/z$  70 和  $m/z$  55;③失甲酸后得到的1-戊烯能进行麦氏重排裂解失去乙烯分别得离子  $m/z$  70 和  $m/z$  42。

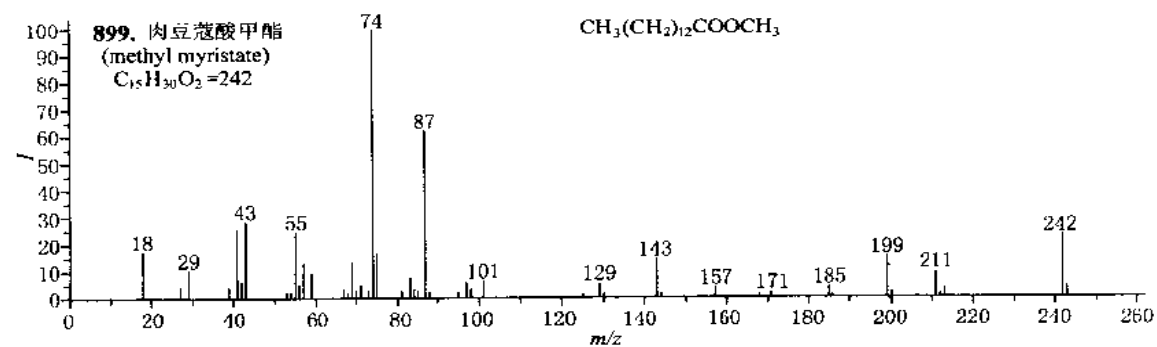
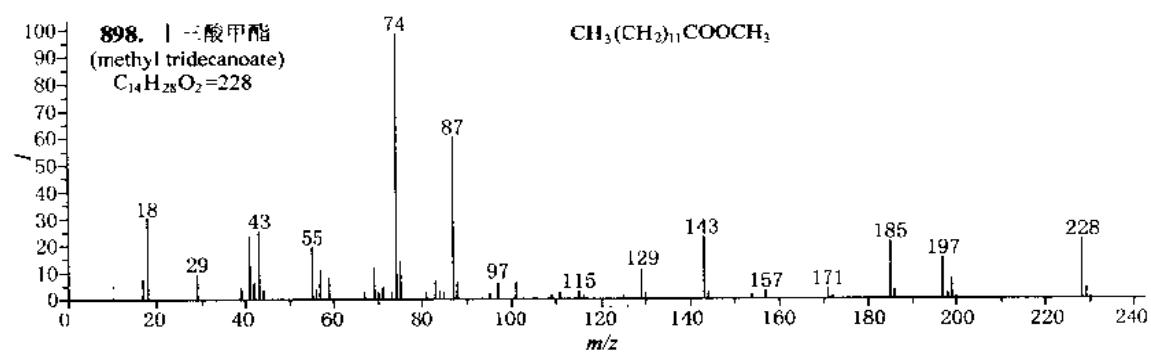
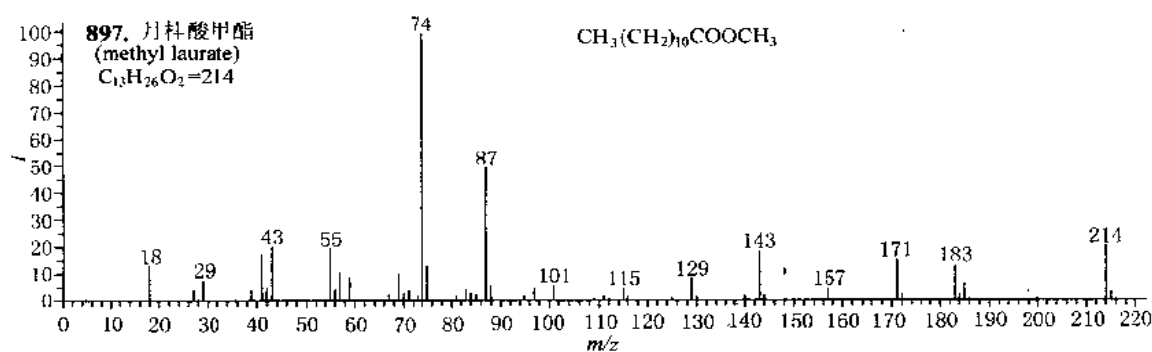
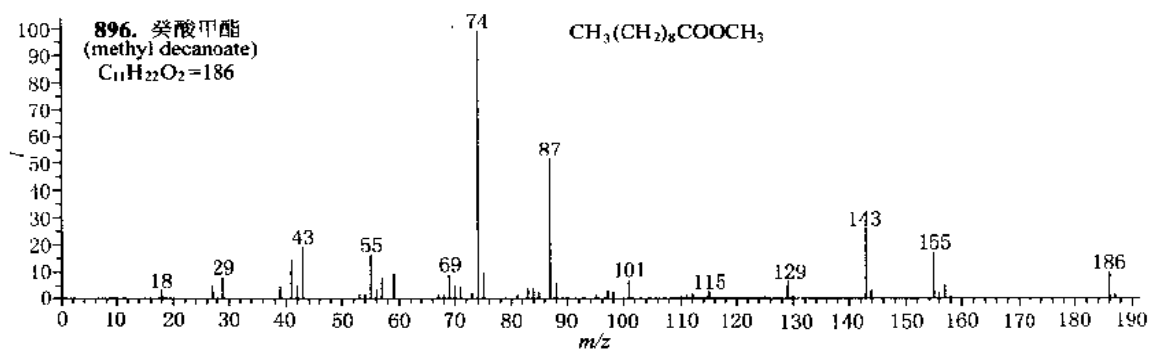


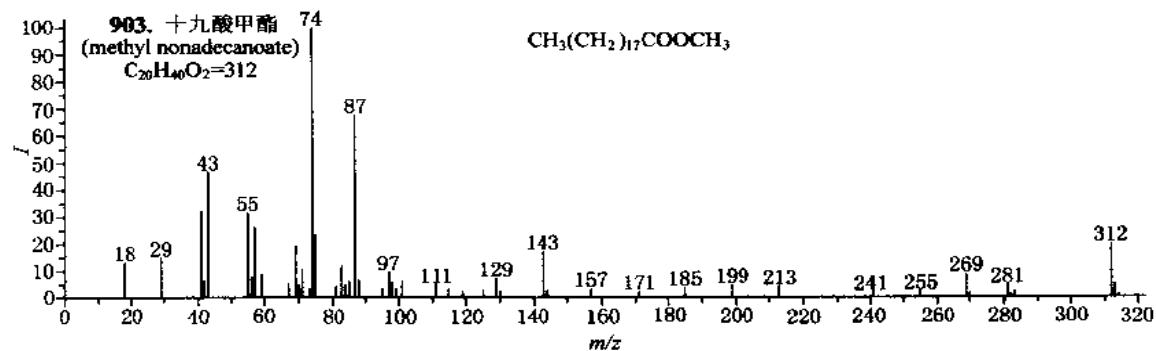
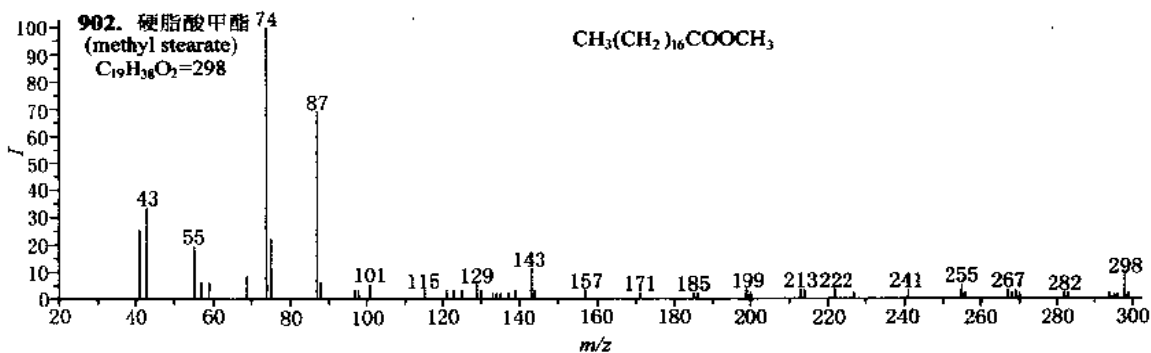
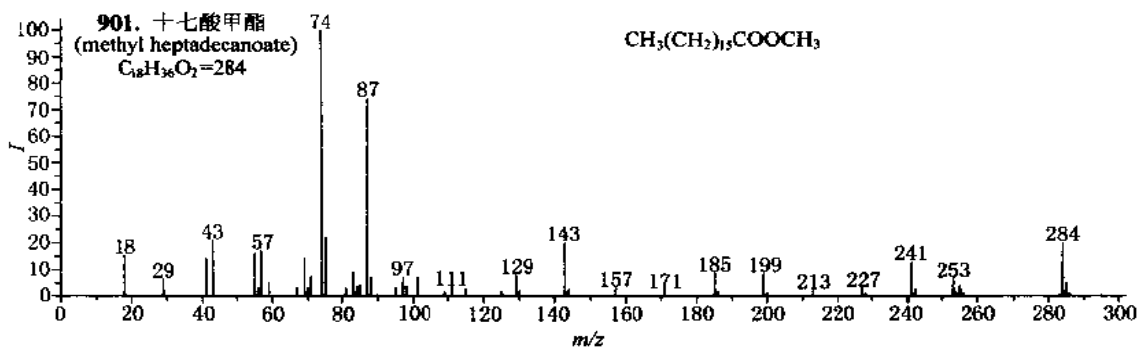
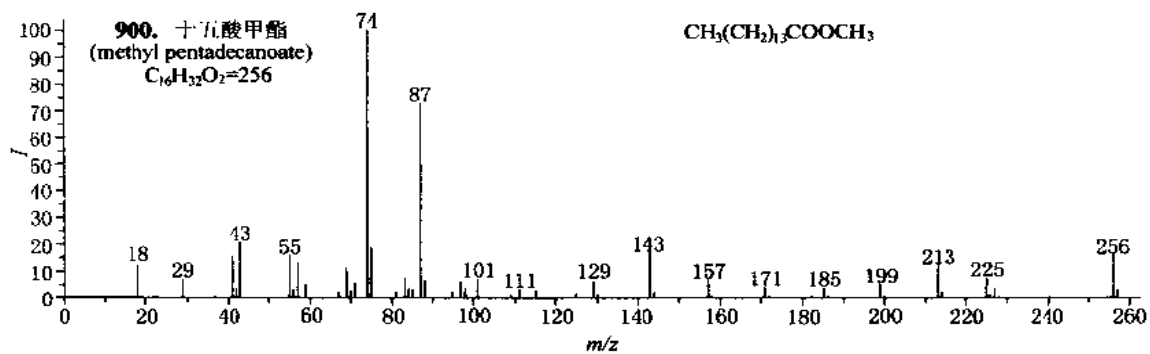


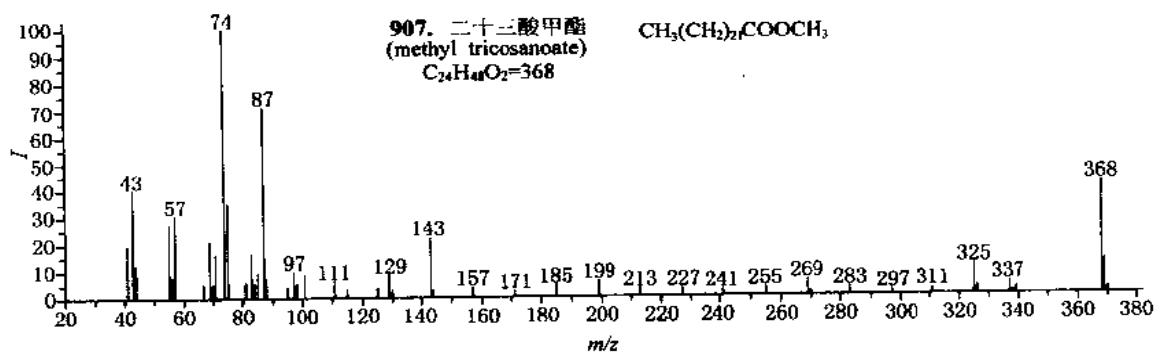
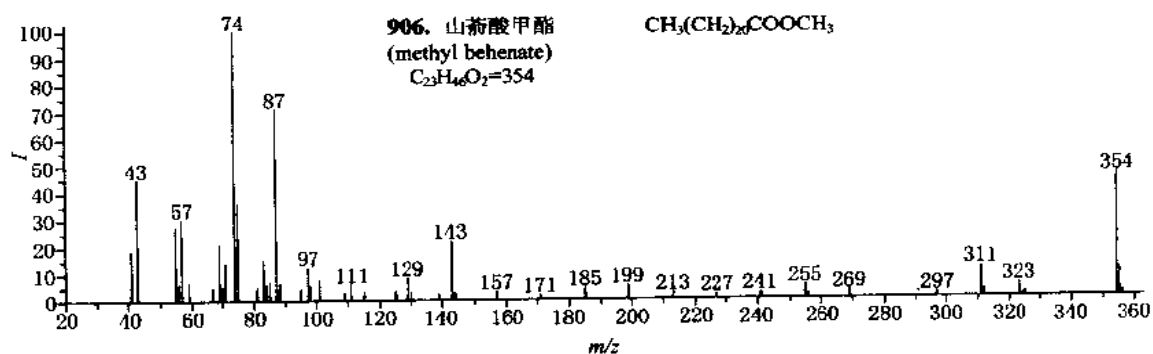
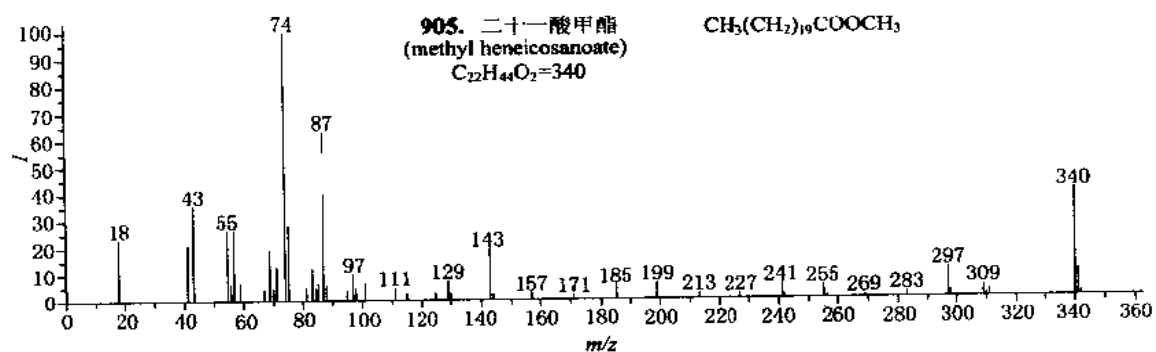
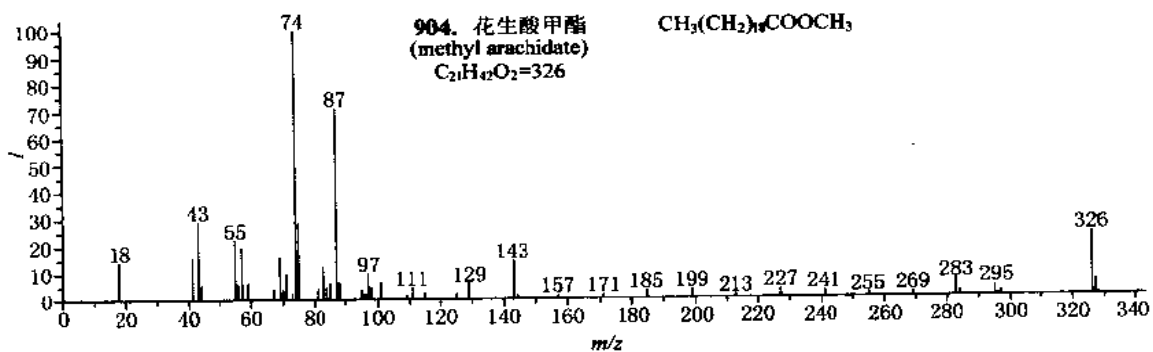
(8) 己酯 与甲酸戊酯(943)的裂解方式一样,甲酸己酯(946)也有三条裂解途径:①得离子  $m/z$  31; ②得离子  $m/z$  84 和  $m/z$  69; ③得离子  $m/z$  84 和  $m/z$  56。

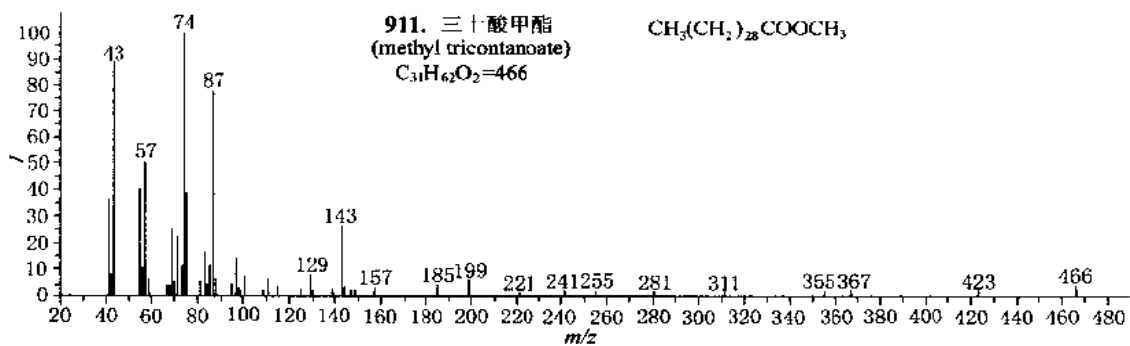
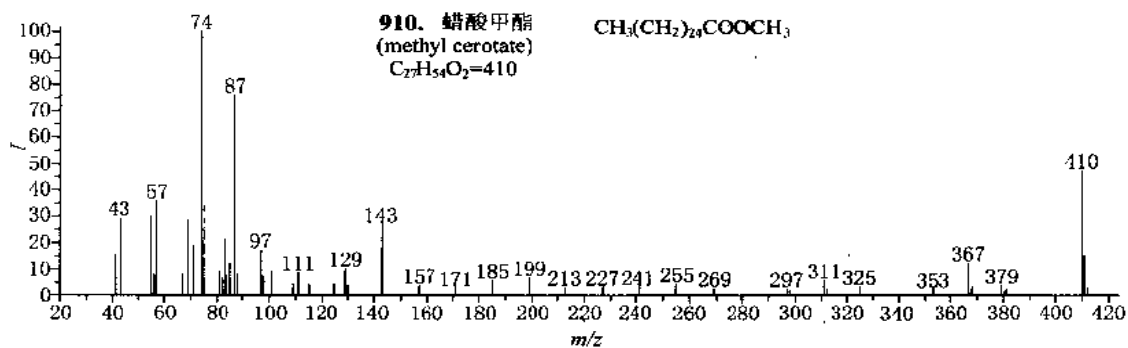
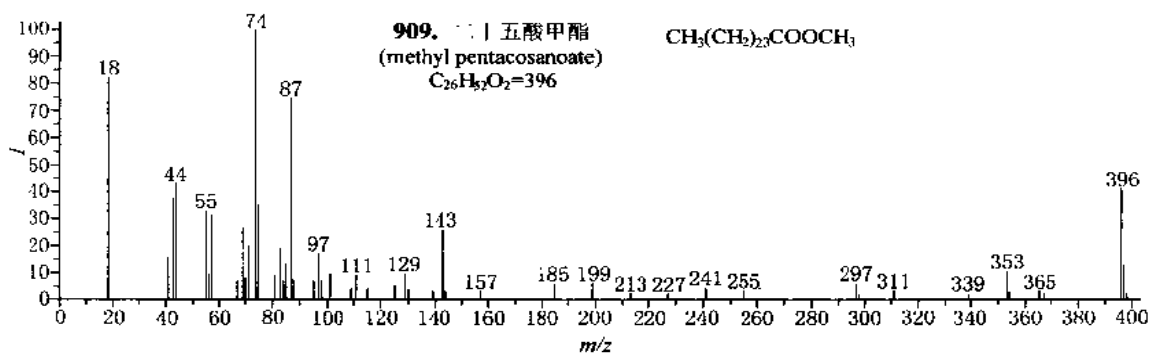
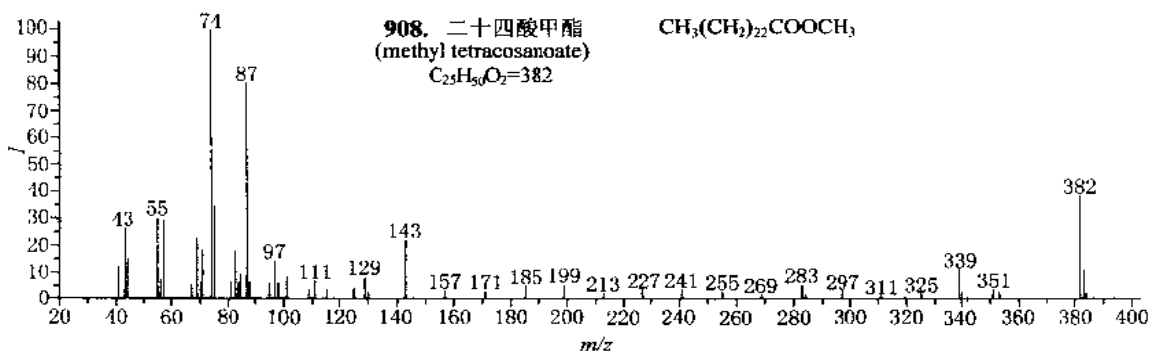


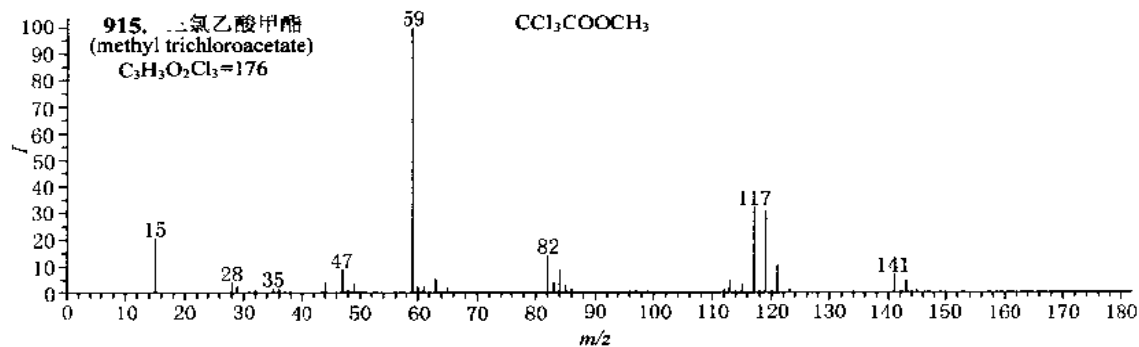
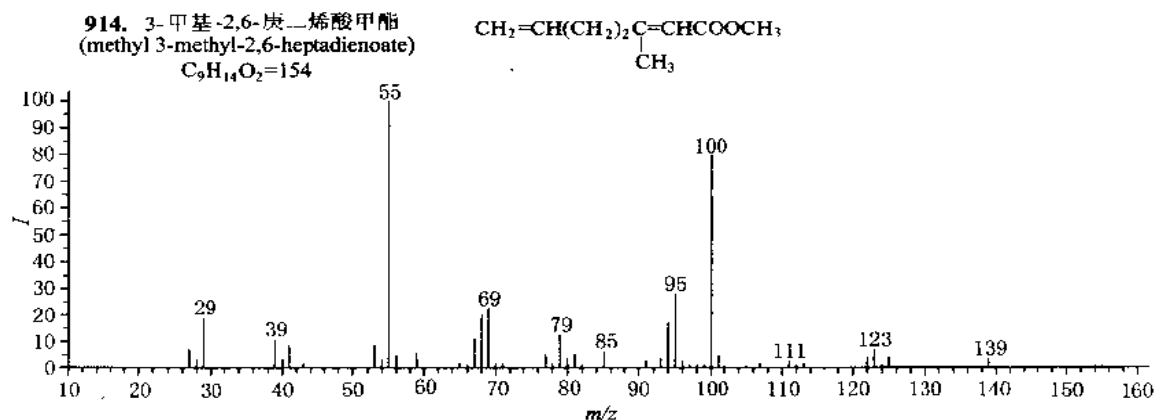
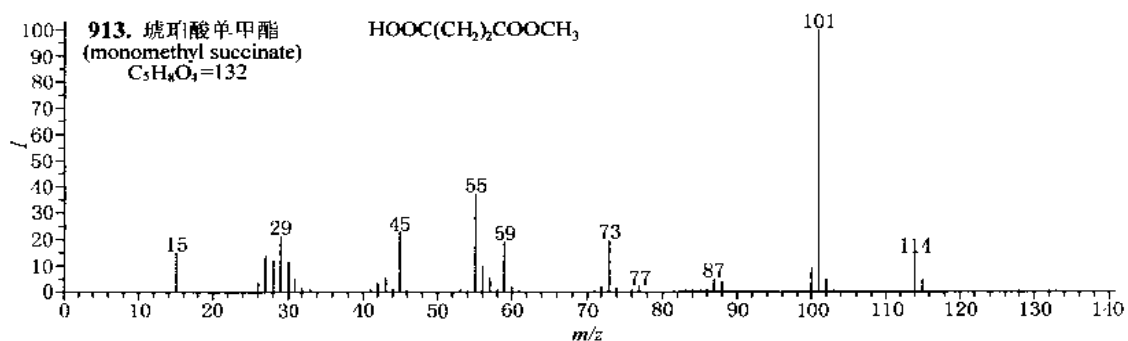
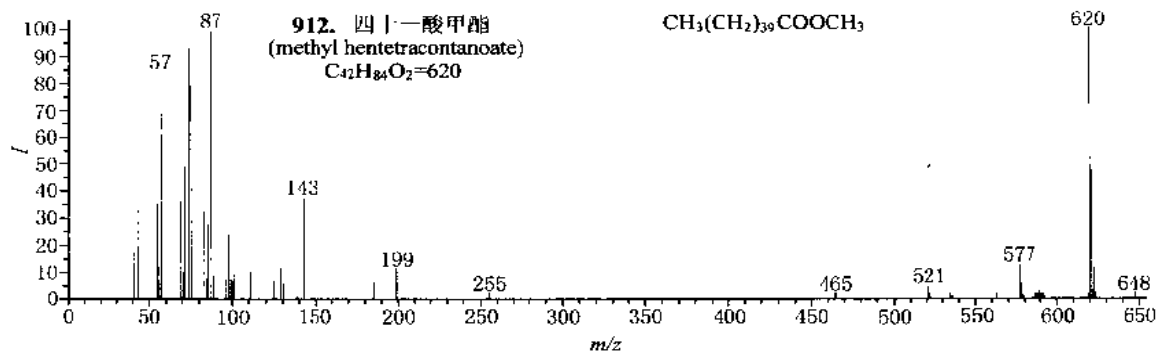


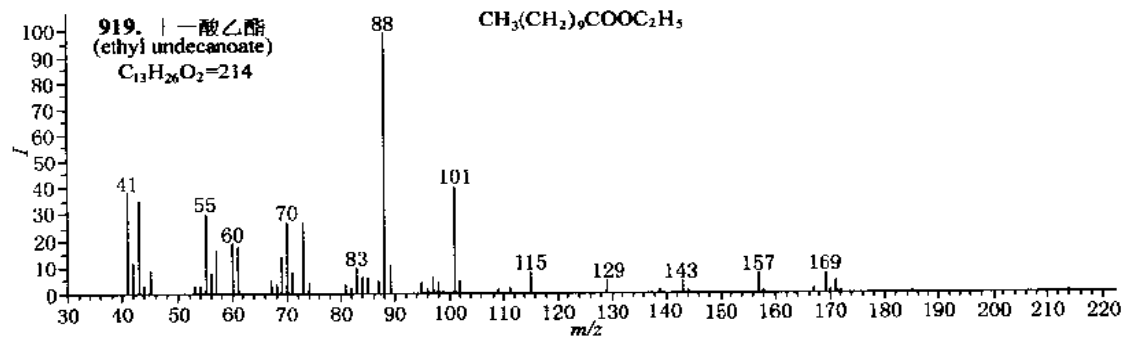
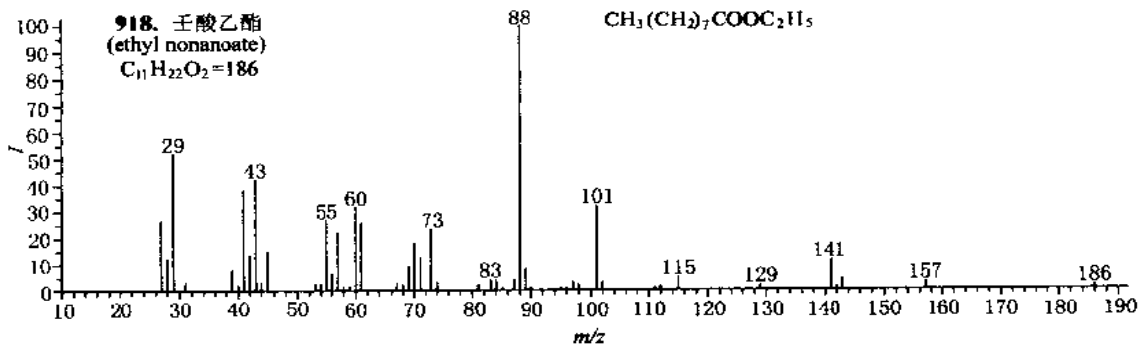
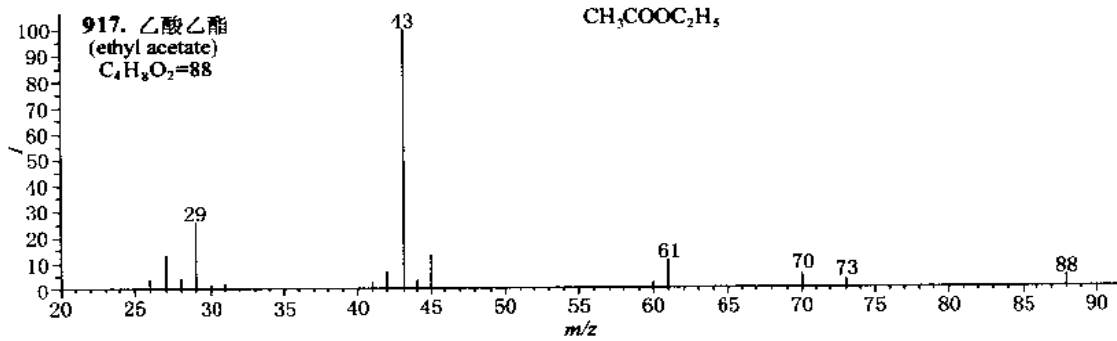
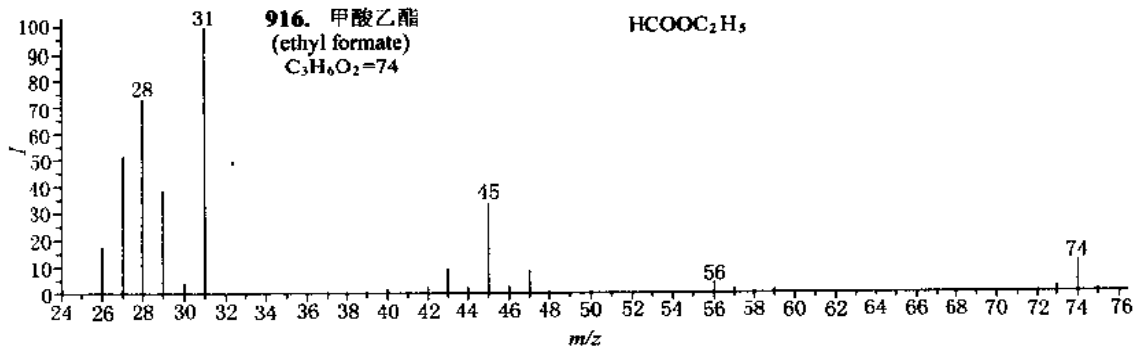




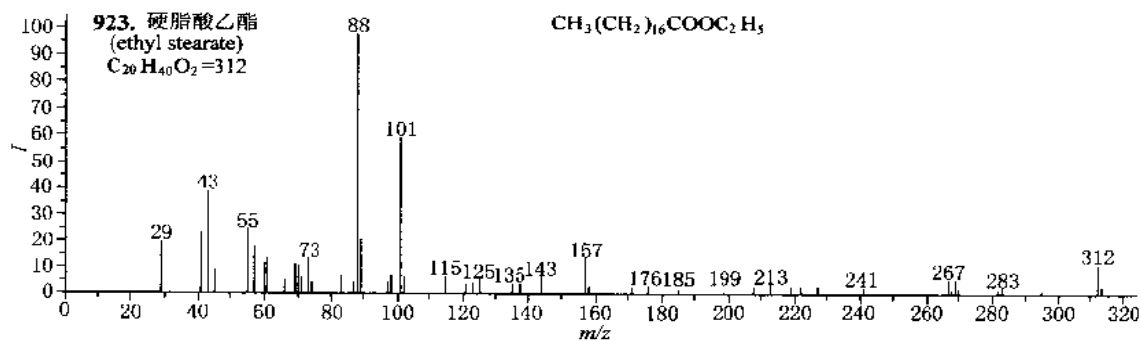
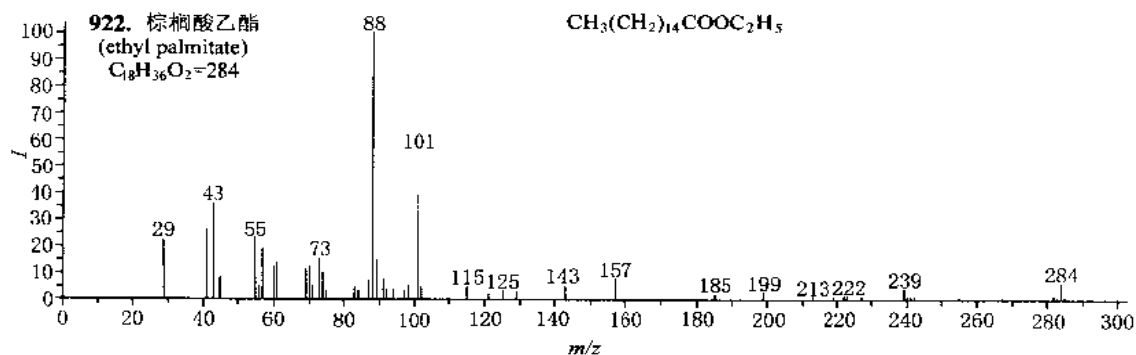
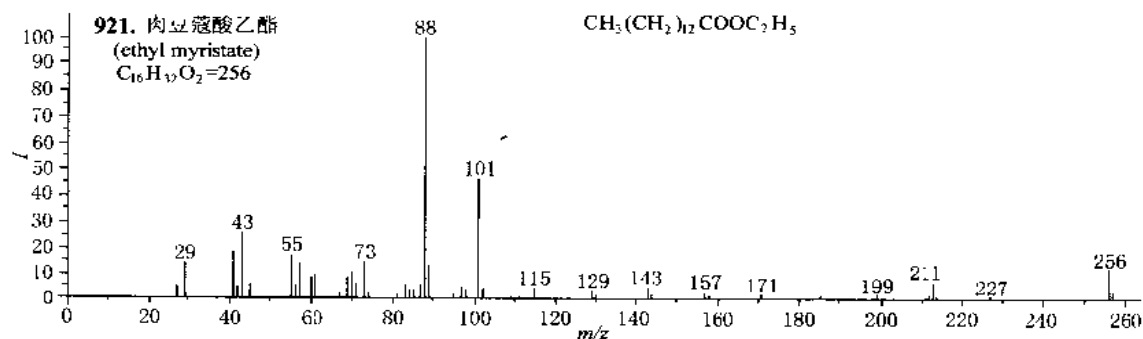
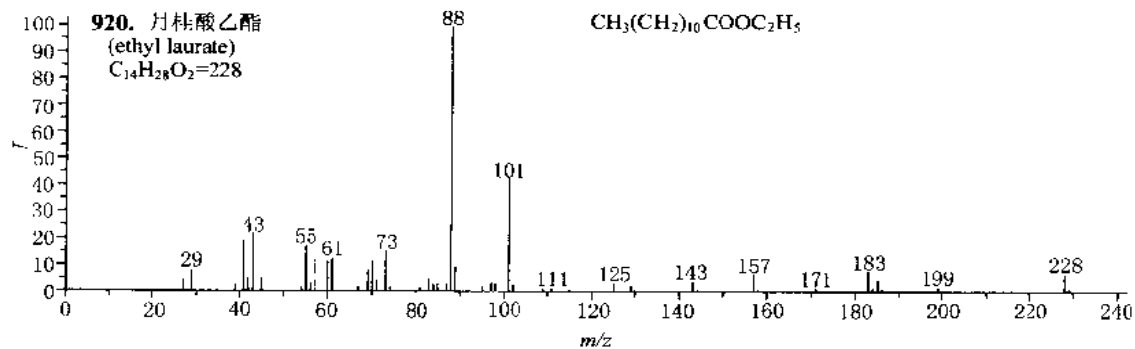


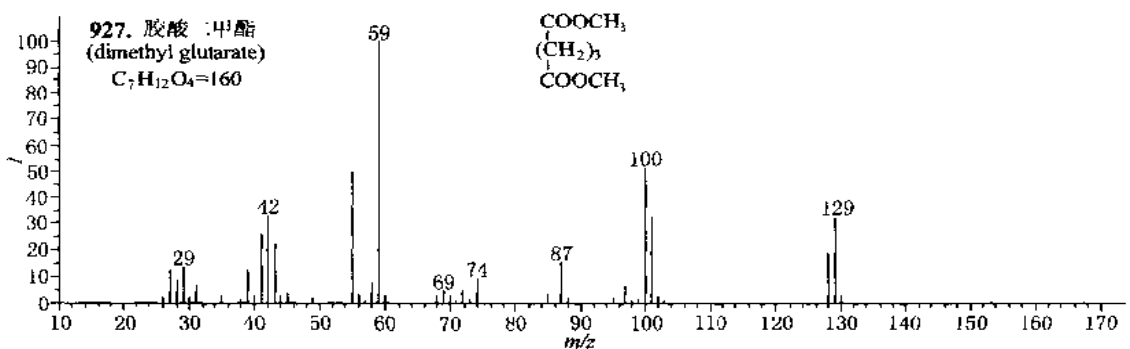
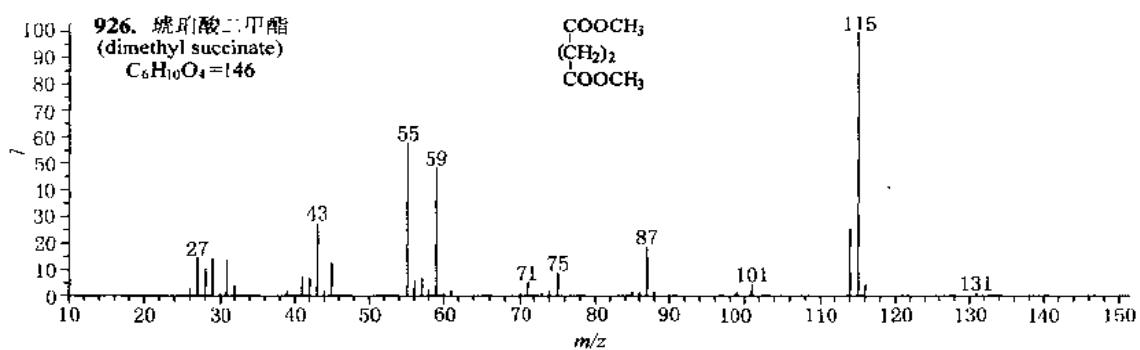
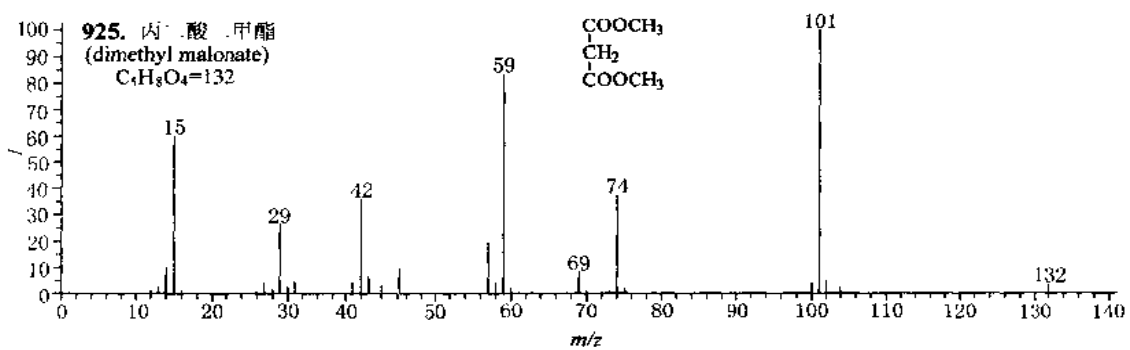
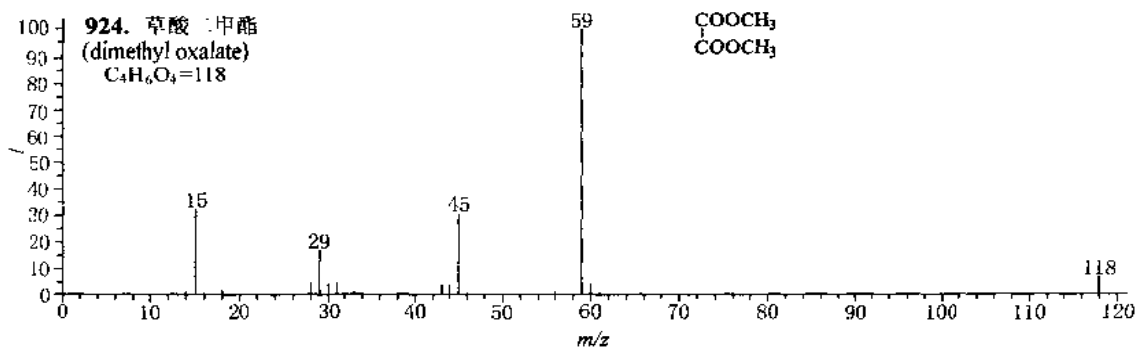


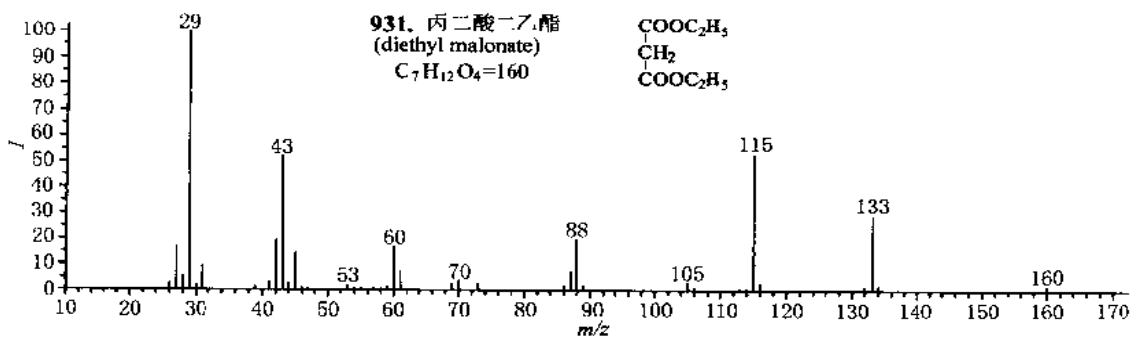
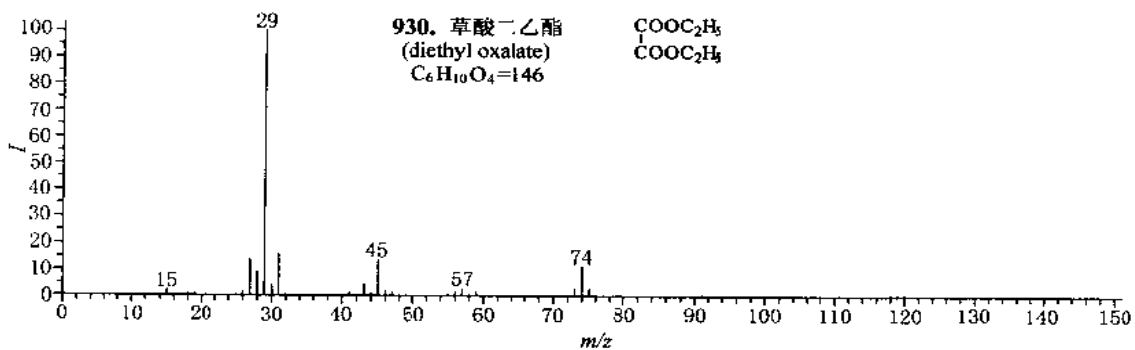
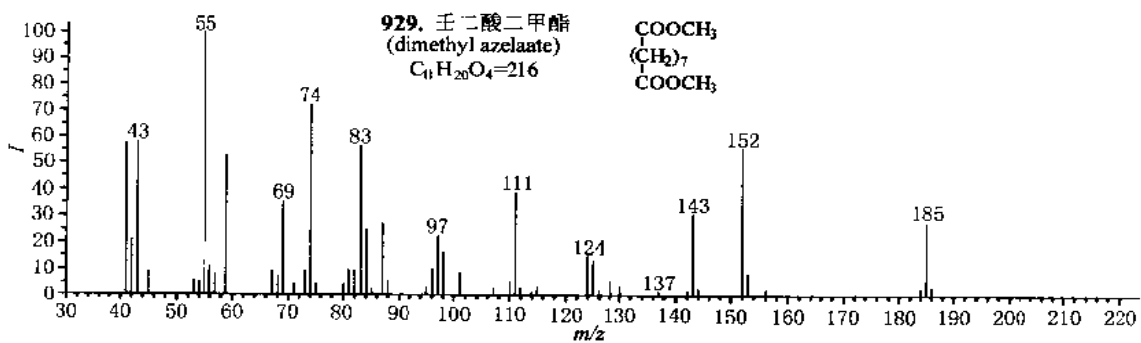
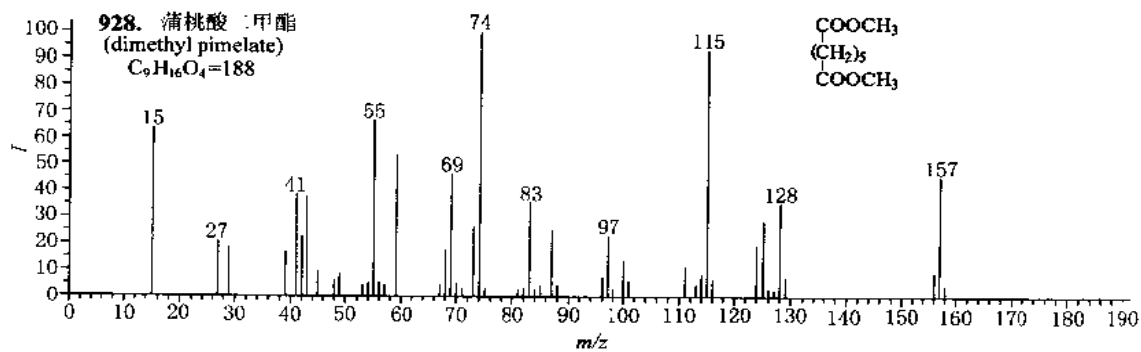


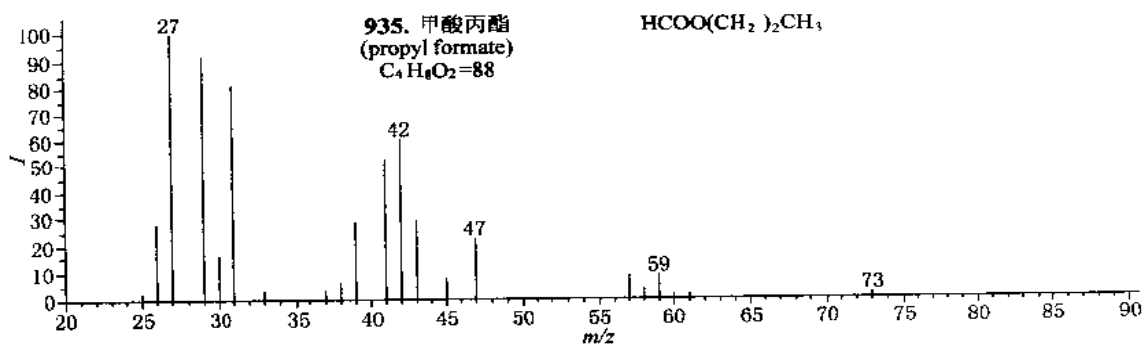
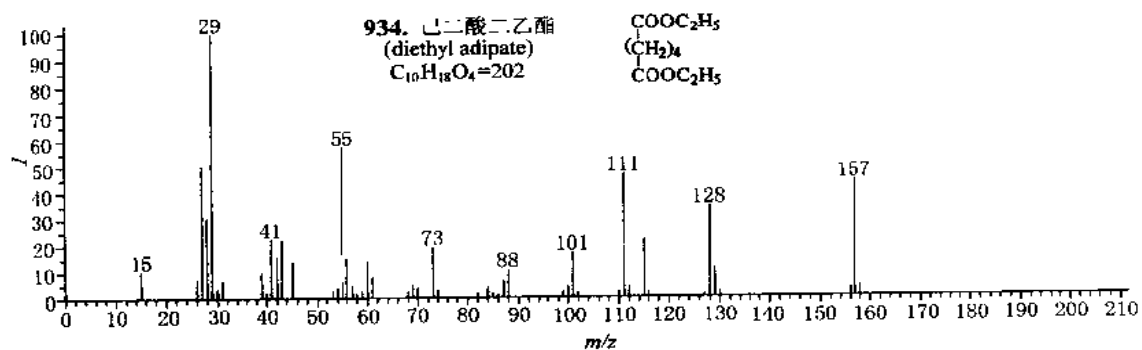
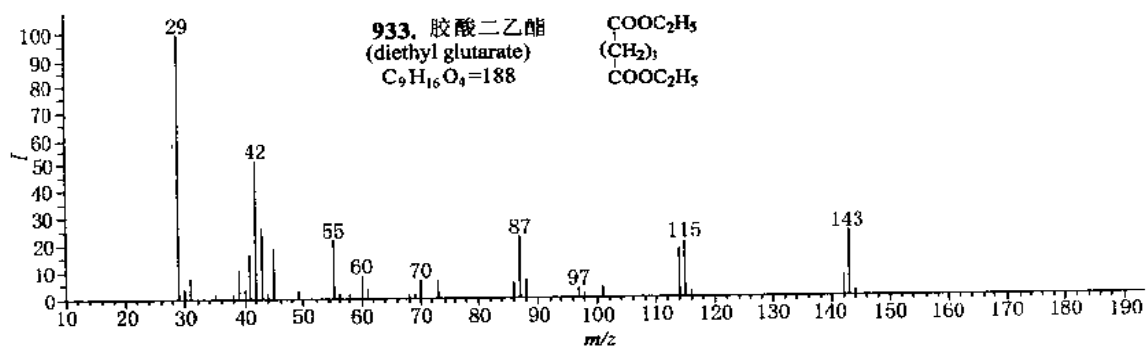
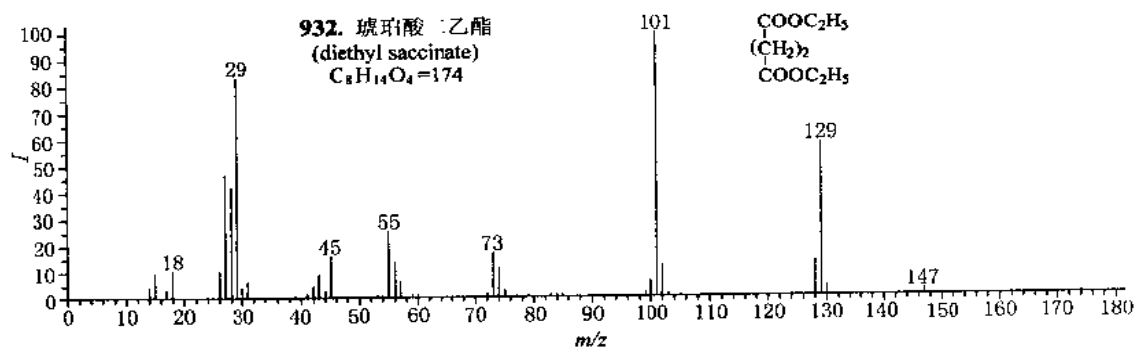


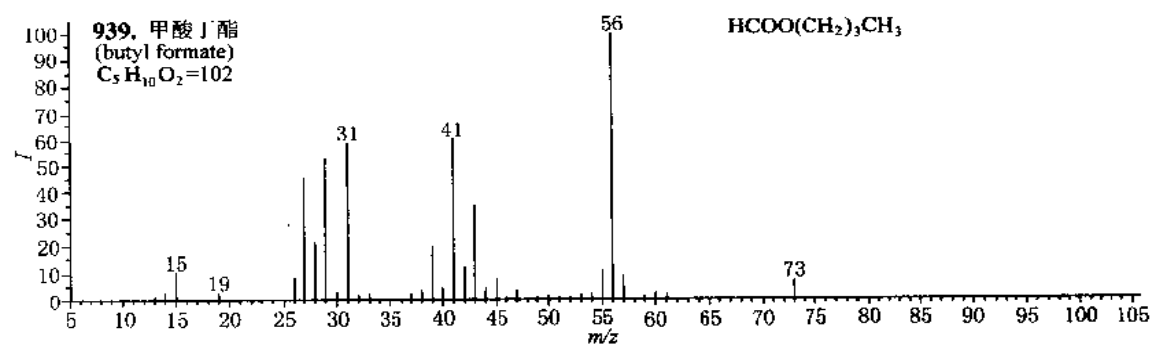
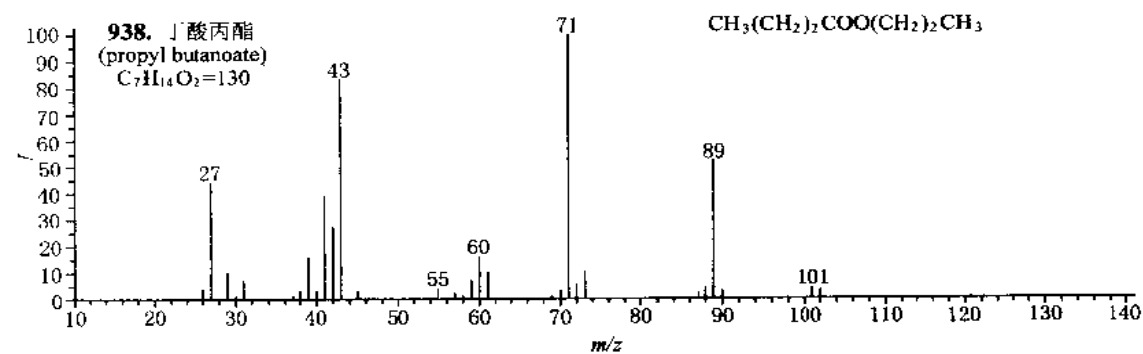
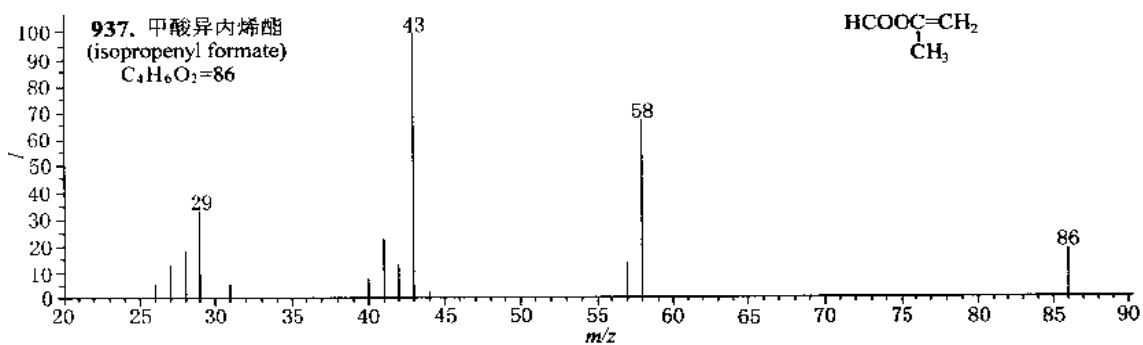
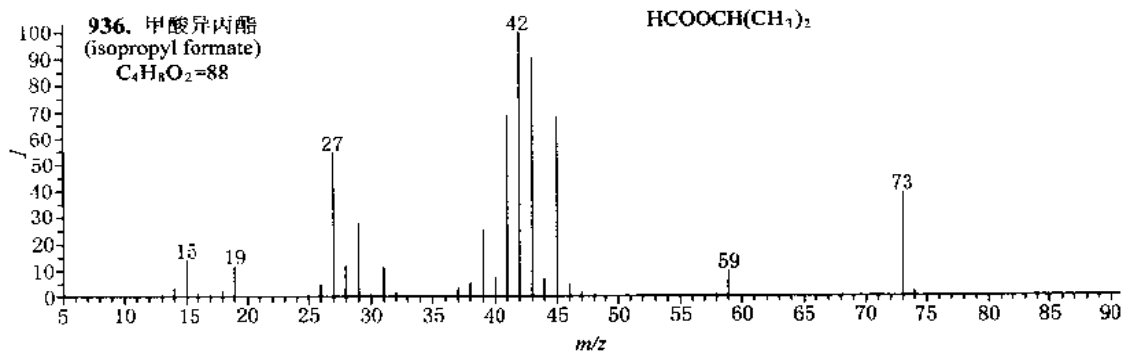


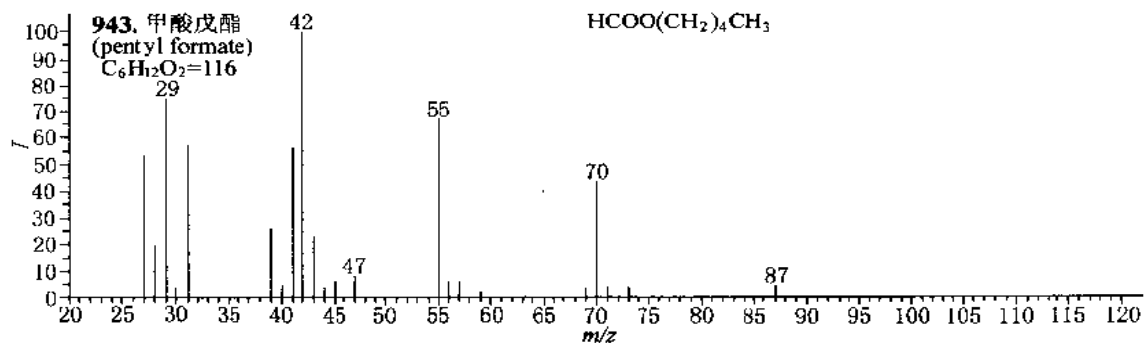
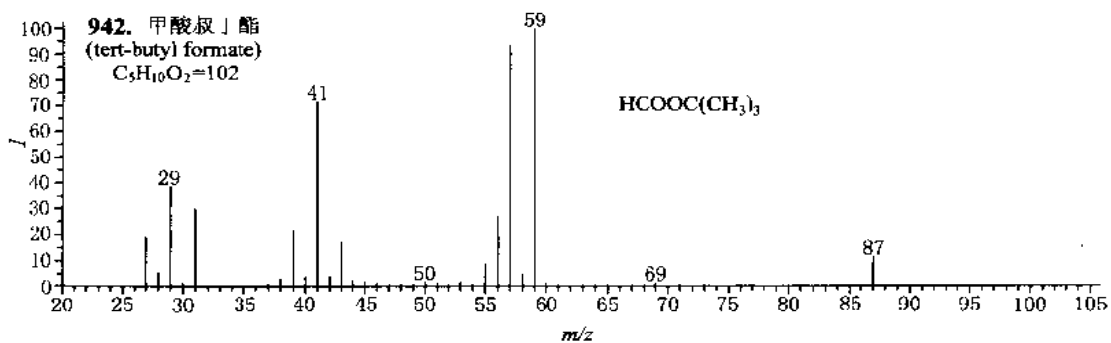
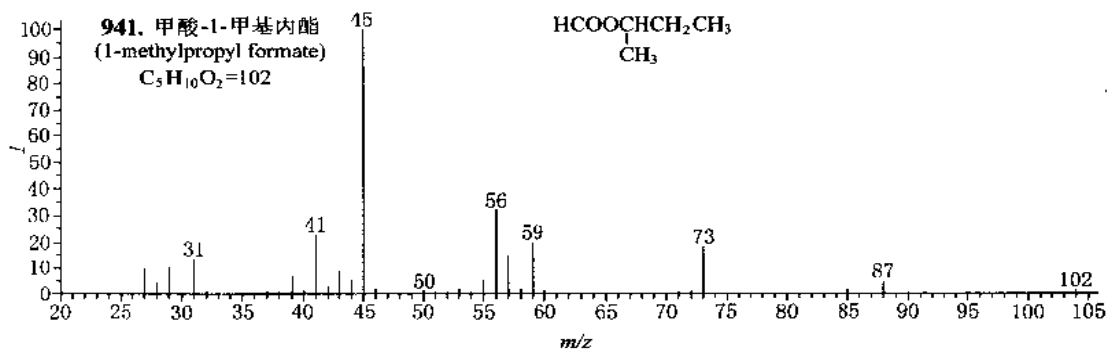
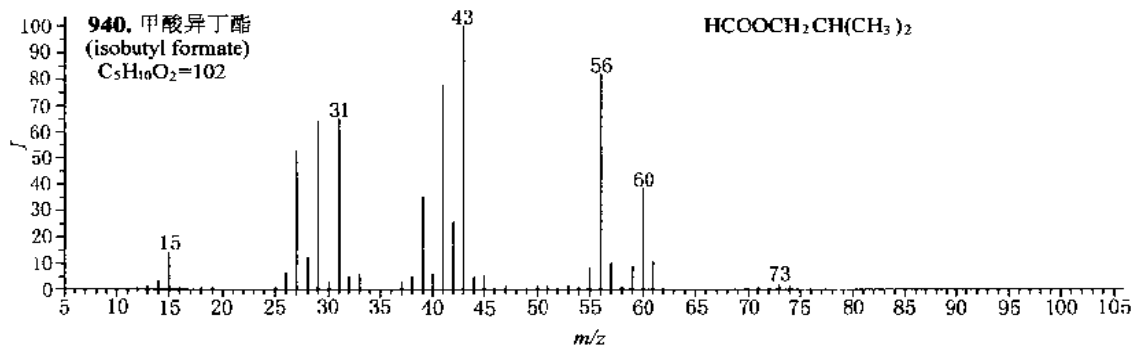


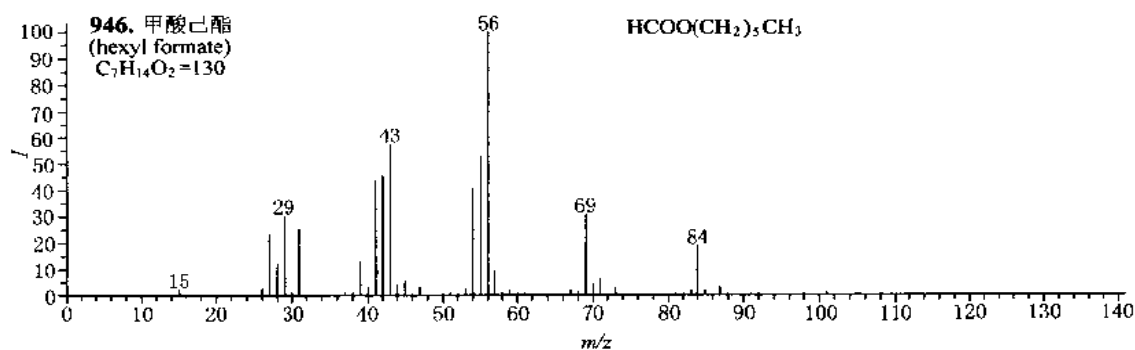
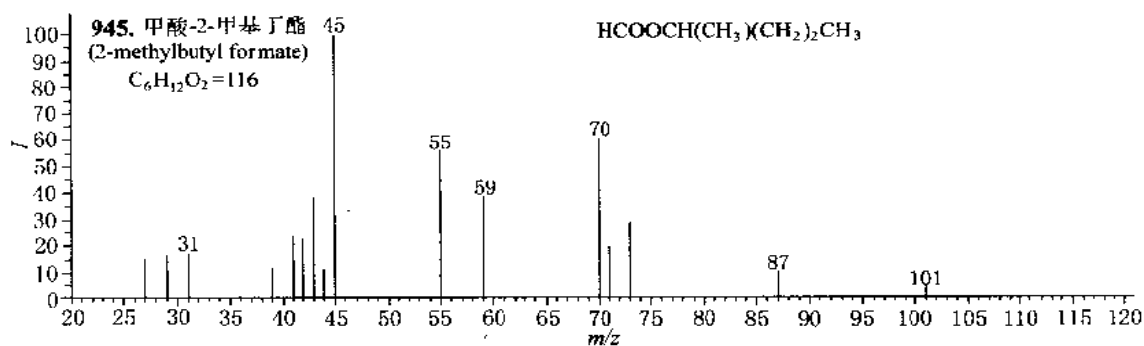
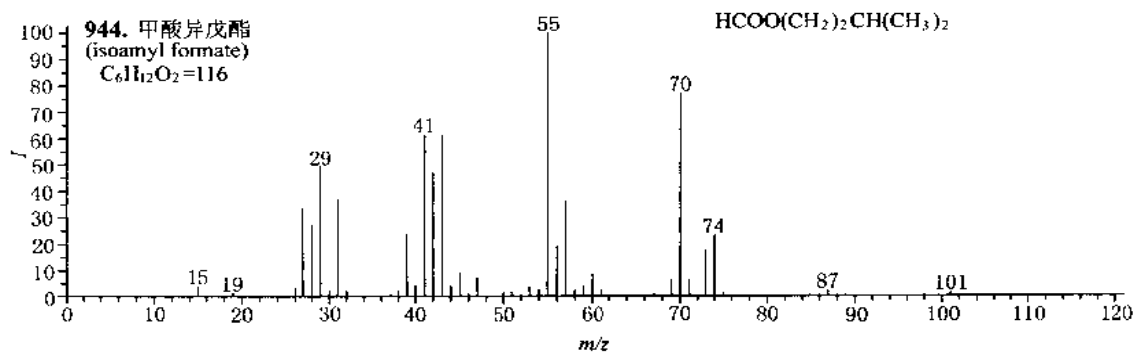






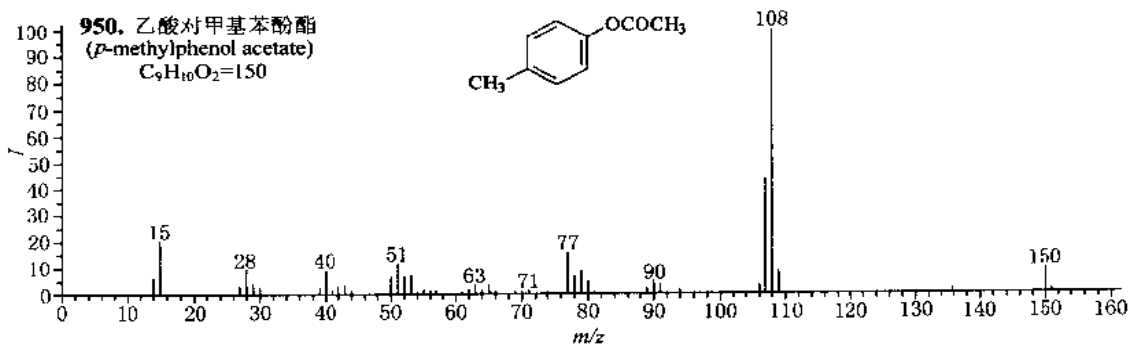
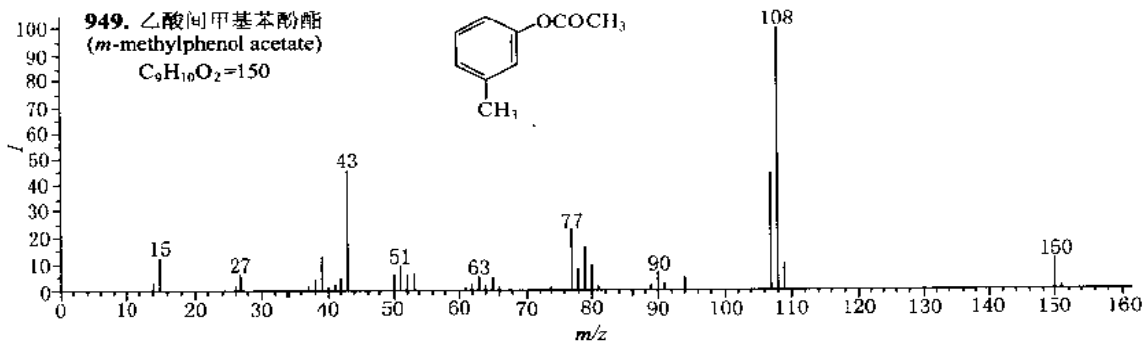
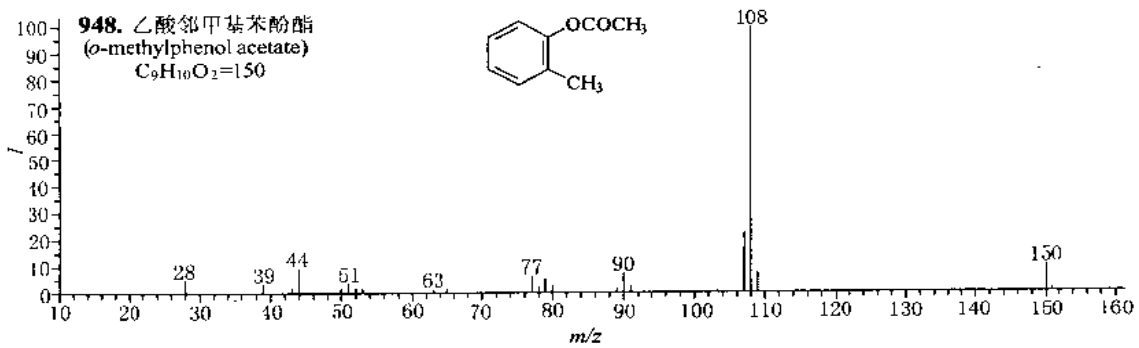
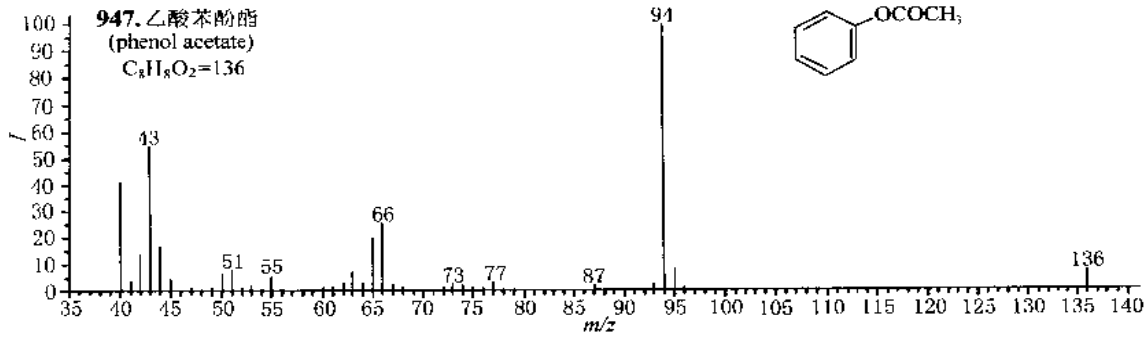




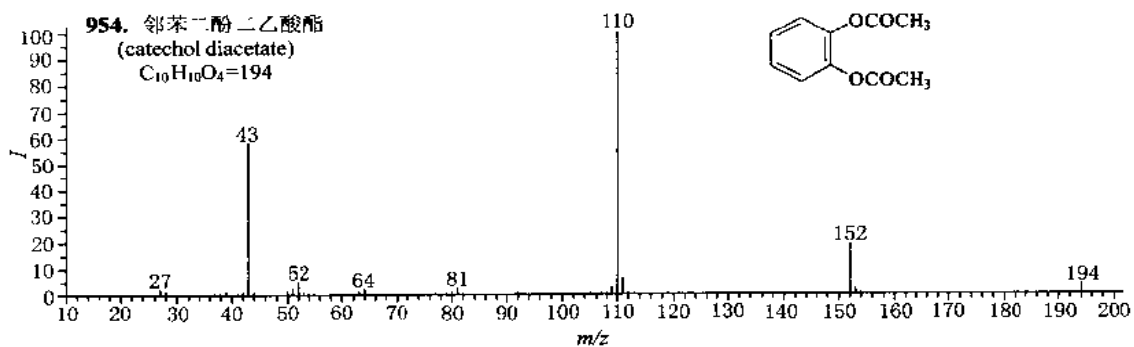
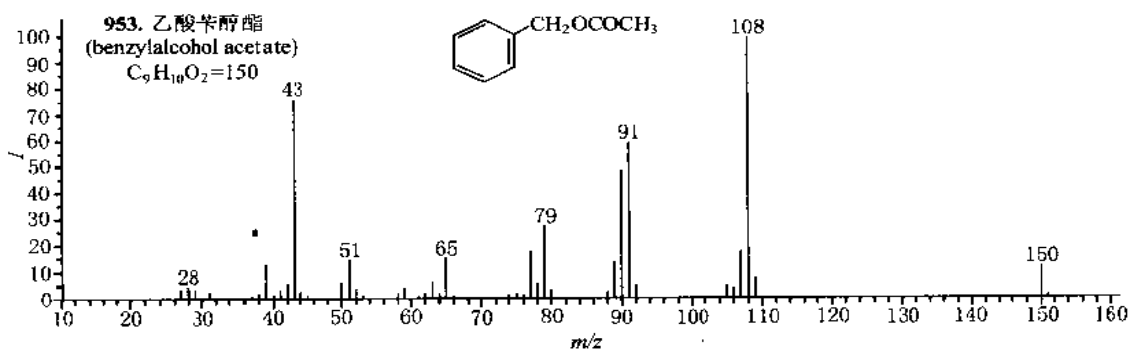
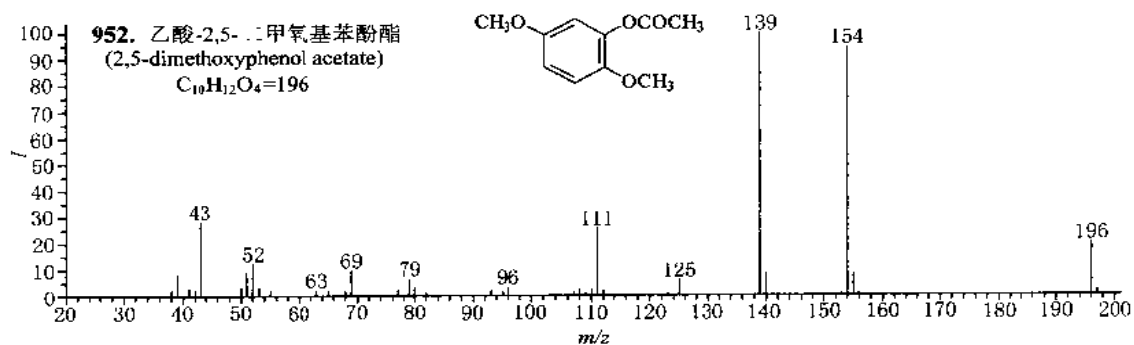
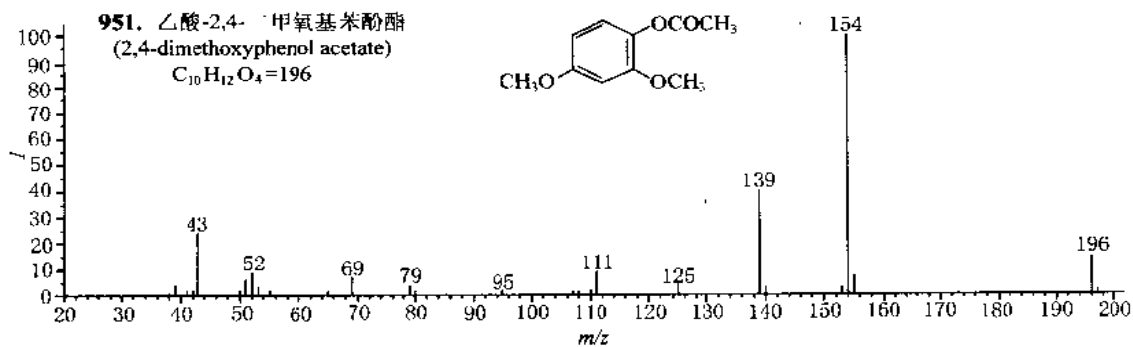


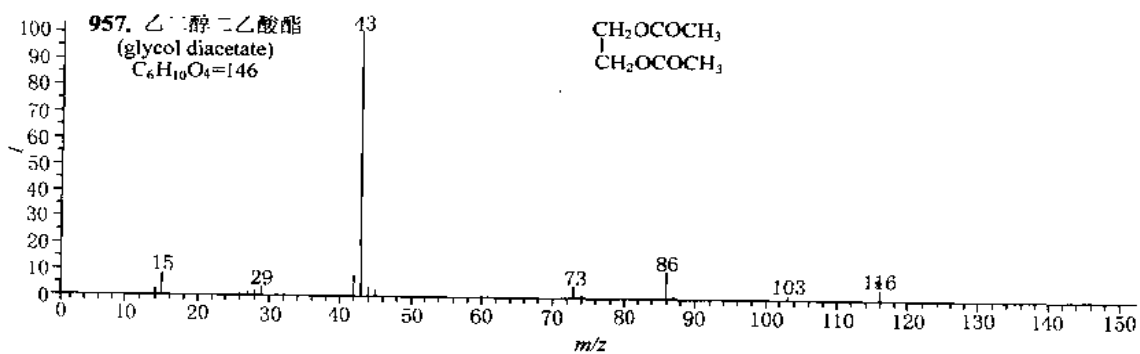
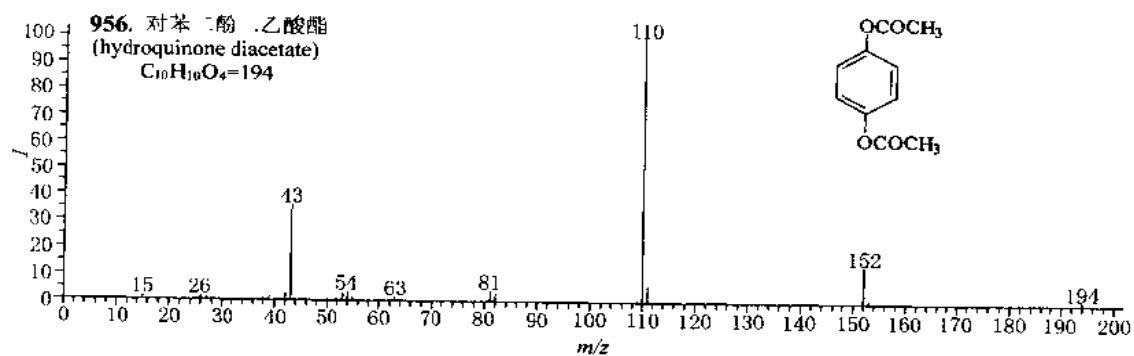
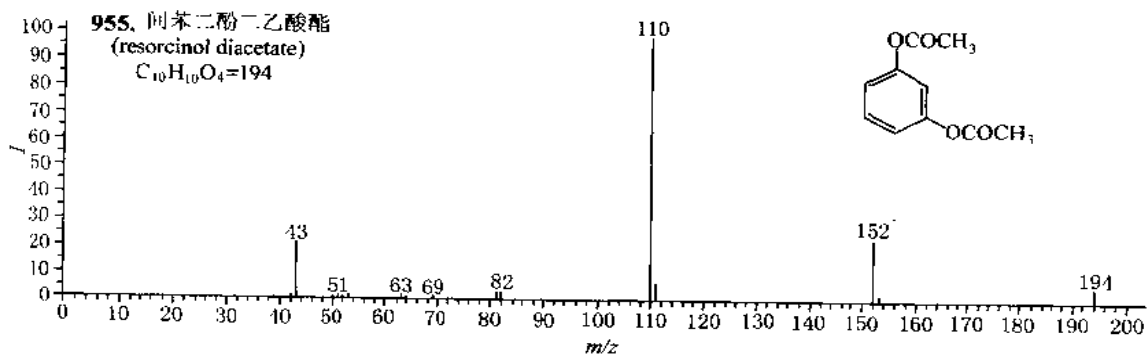
## 二、乙酸酯类

- (1) 乙酸苯酚酯 (947) 的裂解途径是  $M-CH_2CO-CO-H$ 。
- (2) 乙酸甲基苯酚酯类 (948~950) 的裂解途径是  $M-CH_2CO$ ，另有  $M-CH_3CO$  离子。
- (3) 乙酸二甲氧基苯酚酯类 (951, 952) 的裂解途径是  $M-CH_2CO-CH_3-CO$ 。
- (4) 乙酸苄醇酯 (953) 的裂解途径是  $M-CH_2CO-OH$  或  $M-CH_2CO-H_2O$ 。
- (5) 3个苯二酚二乙酸酯 (954~956) 的主要裂解都是连续失去乙烯酮。
- (6) 乙二醇二乙酸酯 (957) 似有  $M-CH_2O-CH_2O$  的裂解途径，但尚未得到证实。



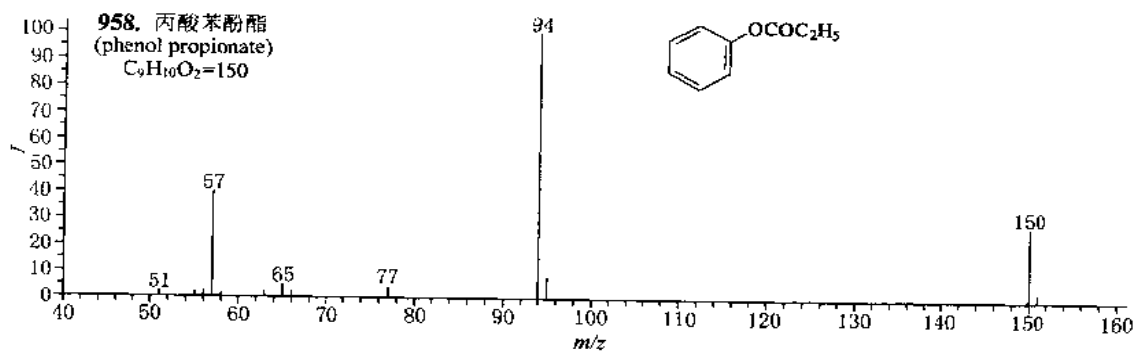






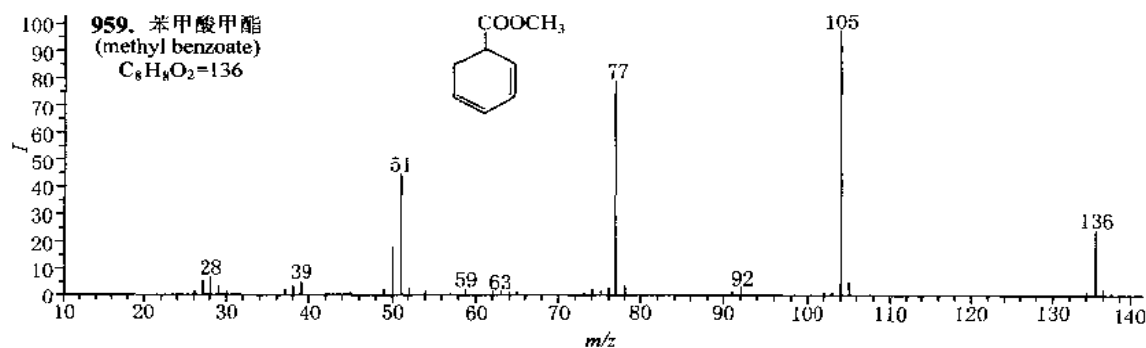
### 三、丙酸酯类

丙酸苯酚酯 (958) 的裂解途径是  $M-CH_2CHCO-CO-H$ 。

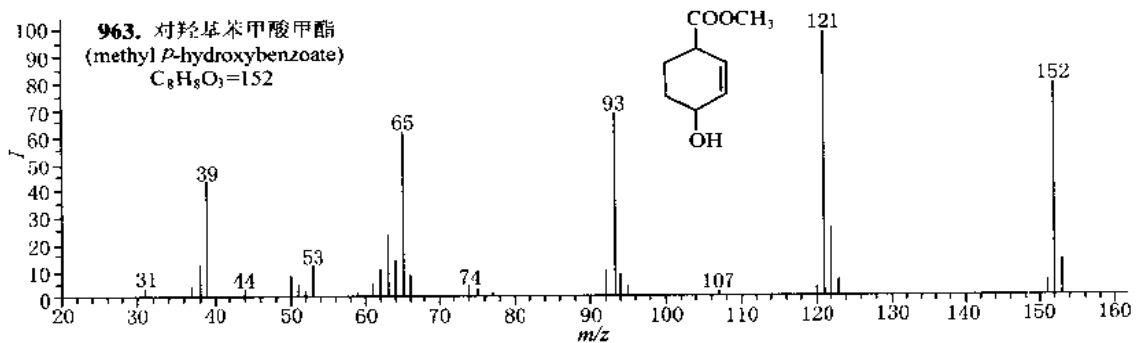
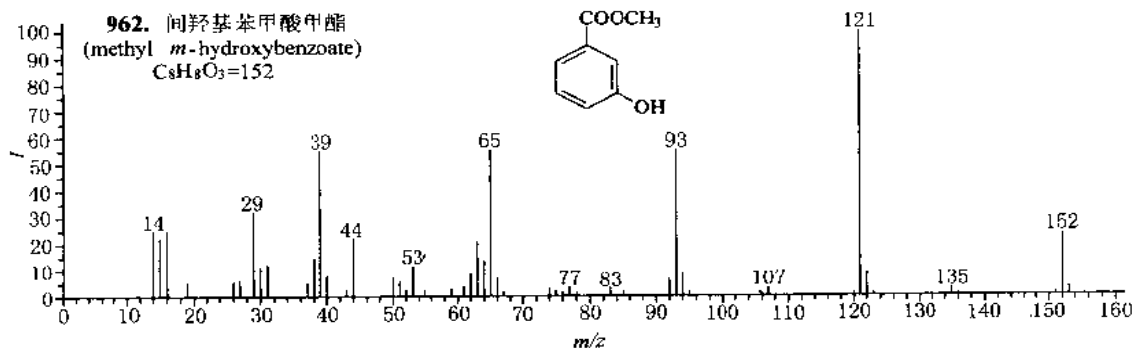
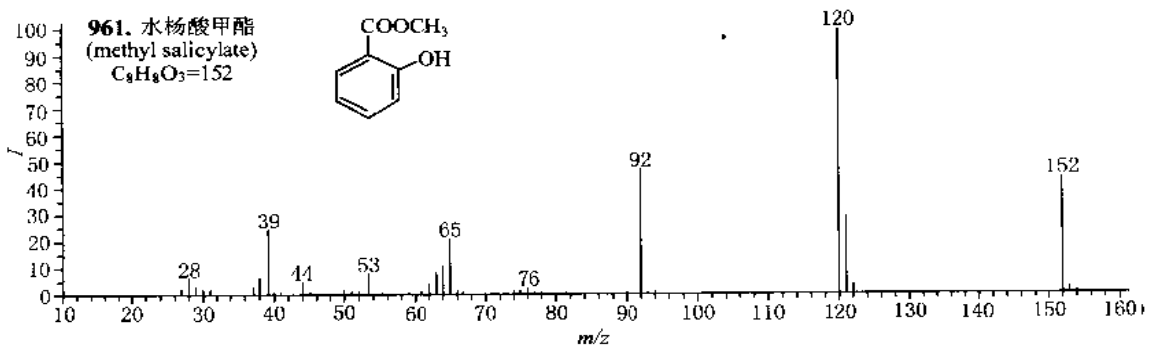
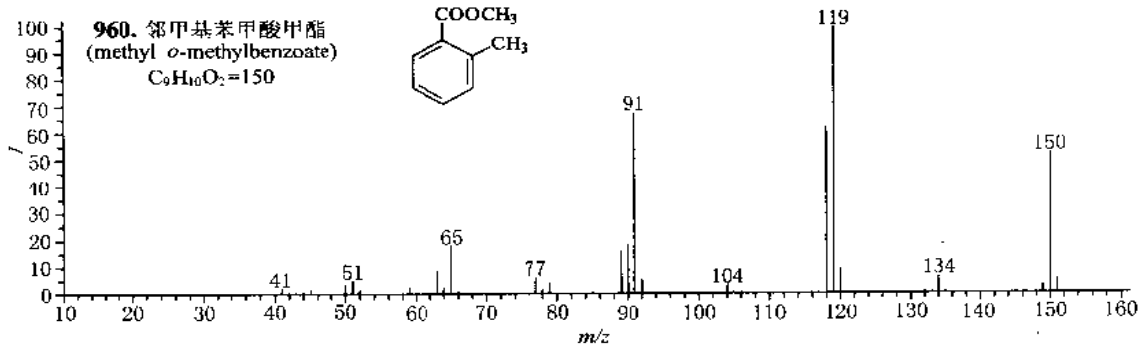


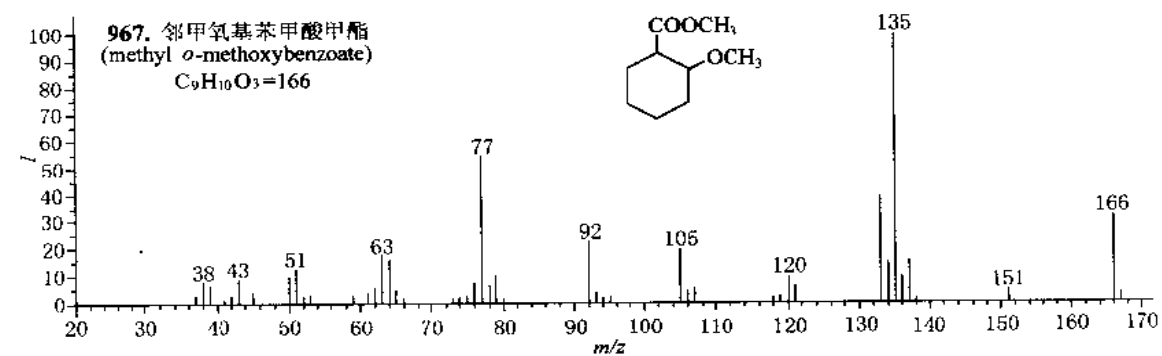
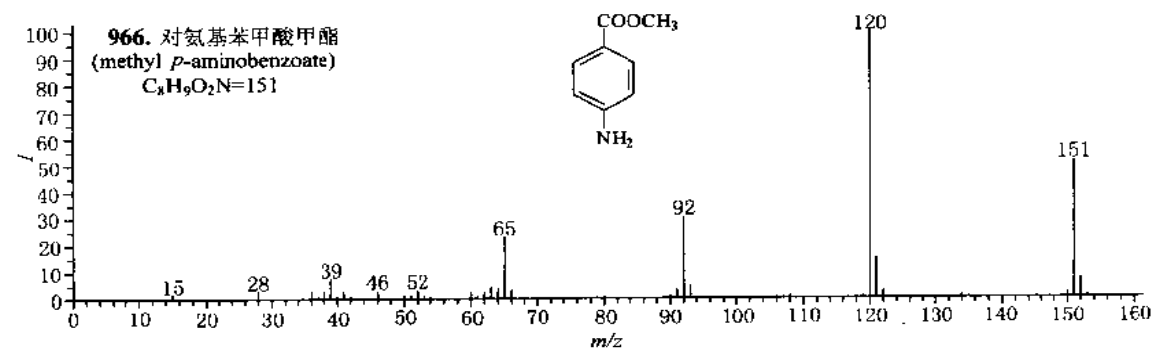
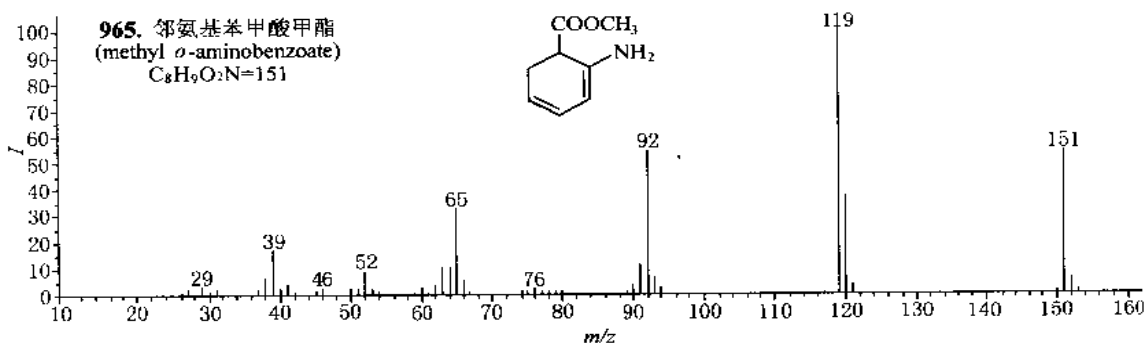
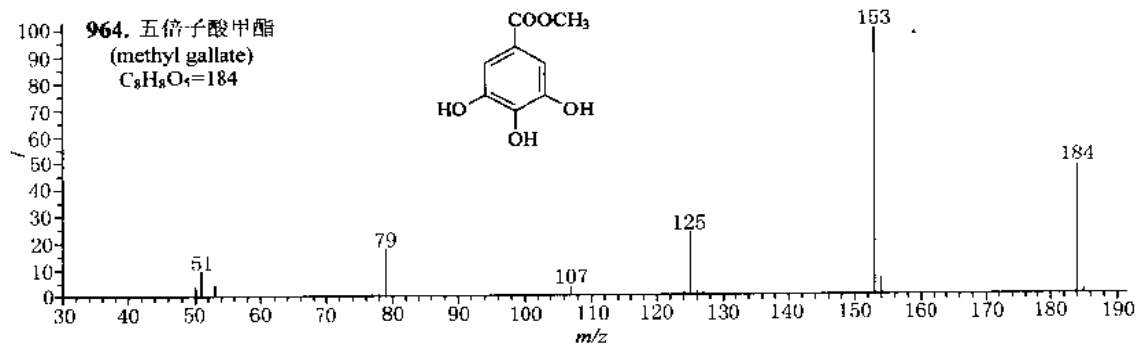
## 四、芳香酸酯类

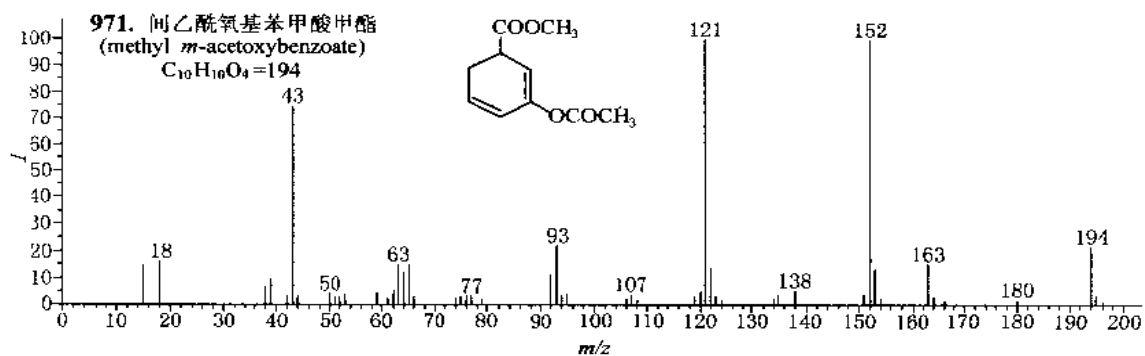
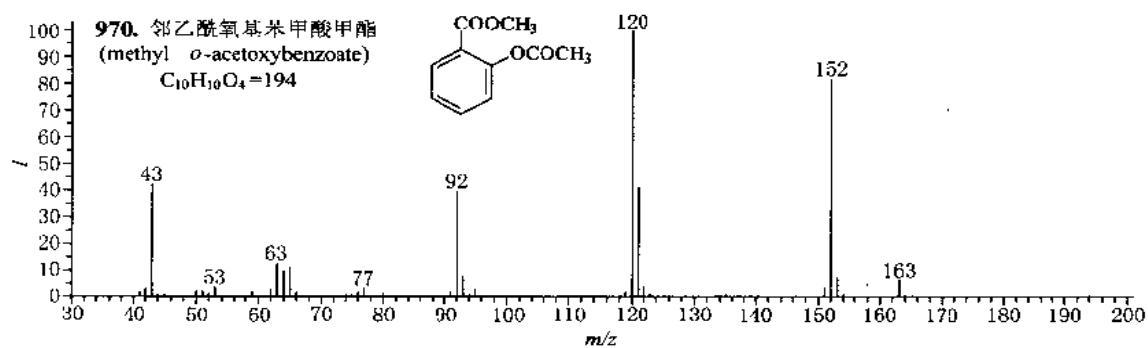
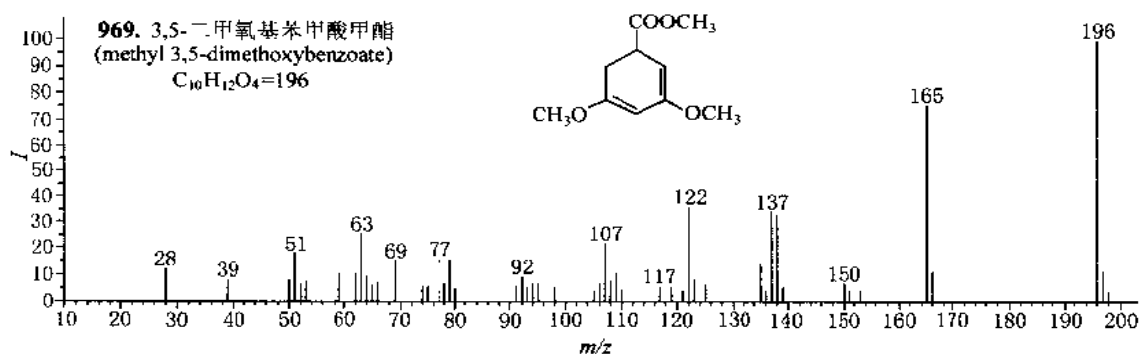
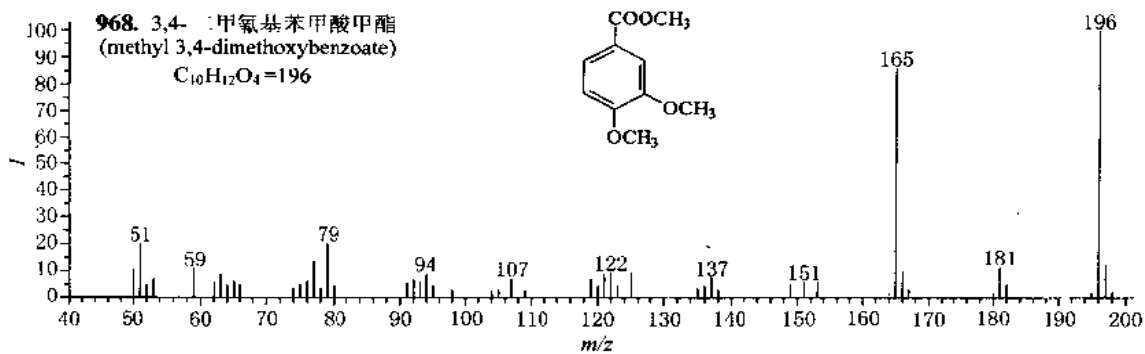
- (1) 苯甲酸甲酯 (959) 的裂解途径是  $M-OCH_3-CO-C_2H_2-H$ 。
- (2) 邻甲基苯甲酸甲酯 (960) 有两条裂解途径, 即  $M-OCH_3-CO-C_2H_2$  和  $M-CH_3OH-CO$ 。
- (3) 邻羟基苯甲酸甲酯 (961) 也有两条裂解途径, 即  $M-OCH_3-CO-CO-C_2H_2$  和  $M-CH_3OH-CO-CO$ ; 间位和对位羟基苯甲酸甲酯 (962, 963) 只有前一条裂解途径; 五倍子酸甲酯 (964) 的裂解途径是  $M-OCH_3-CO-H_2O-CO$ 。
- (4) 邻氨基苯甲酸甲酯 (965) 的两条裂解途径是  $M-OCH_3-CO-CN H-C_2H_2$  和  $M-CH_3OH-CN H$ 。对氨基苯甲酸甲酯 (966) 只有一条裂解途径, 即  $M-OCH_3-CO-CN H-C_2H_2$ 。
- (5) 邻甲氧基苯甲酸甲酯 (967) 的裂解途径是  $M-OCH_3-CH_3-CO$  和  $M-OCH_3-CH_2O-CO$ , 二甲氧基取代物 (968, 969) 的裂解基本与之相同。
- (6) 3个乙酰氧基苯甲酸甲酯中的邻位取代者 (970), 裂解途径是  $M-OCH_3-CH_2CO$  和  $M-CH_2CO-CH_3OH-CO$ , 间和对位取代者 (971, 972) 的主要裂解都是  $M-CH_2CO-OCH_3-CO-CO$ 。
- (7) 间溴苯甲酸甲酯 (973) 的裂解途径是  $M-OCH_3-CO-Br-C_2H_2$ 。
- (8) 对甲氧基苯甲酸乙酯 (974) 有两条裂解途径, 即  $M-OC_2H_5-CO-CH_2O$  和  $M-OC_2H_5-CO-CH_3-CO$ 。
- (9) 水杨酸异丙酯 (975) 的两条裂解途径是  $M-OC_3H_7-CO-CO-C_2H_2$  和  $M-C_3H_7OH-CO$ 。
- (10) 苯甲酸苄醇酯 (976) 的裂解途径是  $M-C_6H_5CH_2O-CO-C_2H_2$  和  $M-C_6H_5CO-C_2H_2-C_2H_2$ 。
- (11) 对苯二甲酸单甲酯 (977) 的裂解途径是  $M-OCH_3-CO-OH-CO$  和  $M-OCH_3-CO-CO-CO-C_2H_2$ 。
- (12) 苯二甲酸二甲酯类 (978~980) 的裂解途径都是  $M-OCH_3-CO-CH_3-CO$  和  $M-OCH_3-CO-OCH_3-CO$ 。
- (13) 苯二甲酸二乙酯类 (981, 982) 的主要裂解是  $M-OC_2H_5-CO$ 。
- (14) 邻苯二甲酸二丁酯 (983) 的主要裂解是  $M-OC_4H_9-C_4H_8$ 。
- (15) 双水杨酸内酯 (984) 的裂解途径是  $M-C_7H_4O_2-CO-CO$ 。

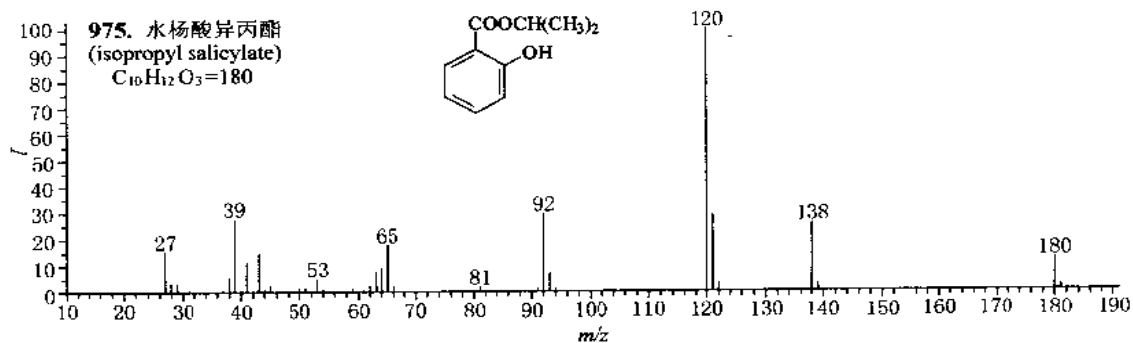
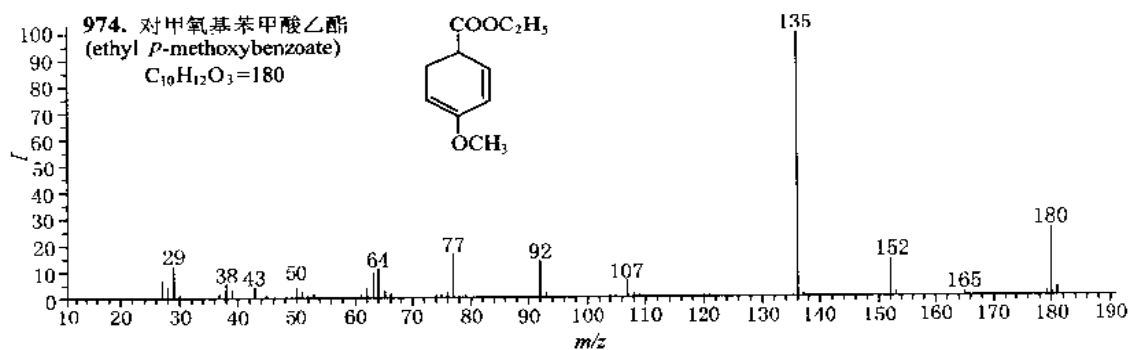
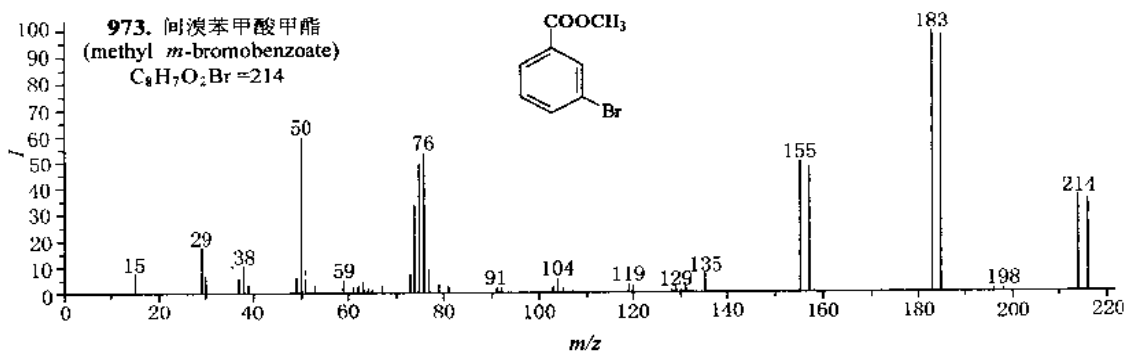
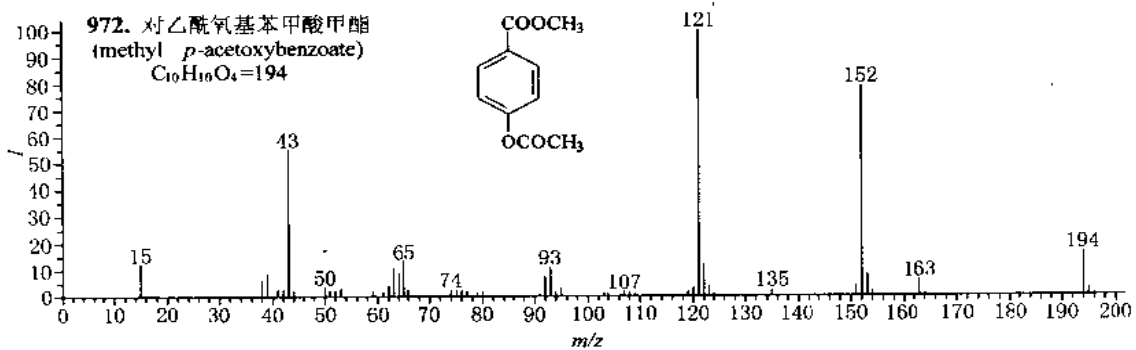


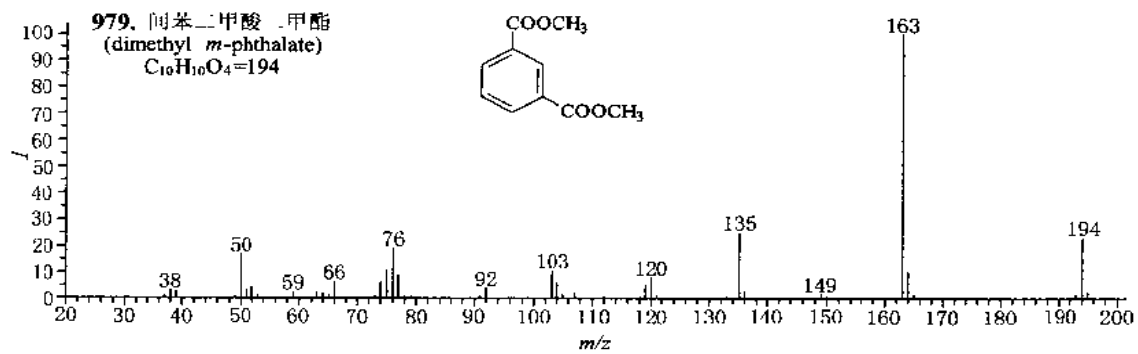
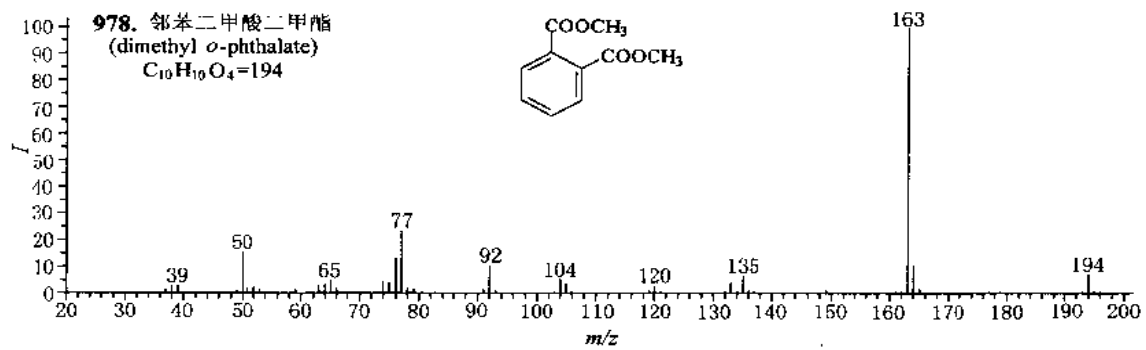
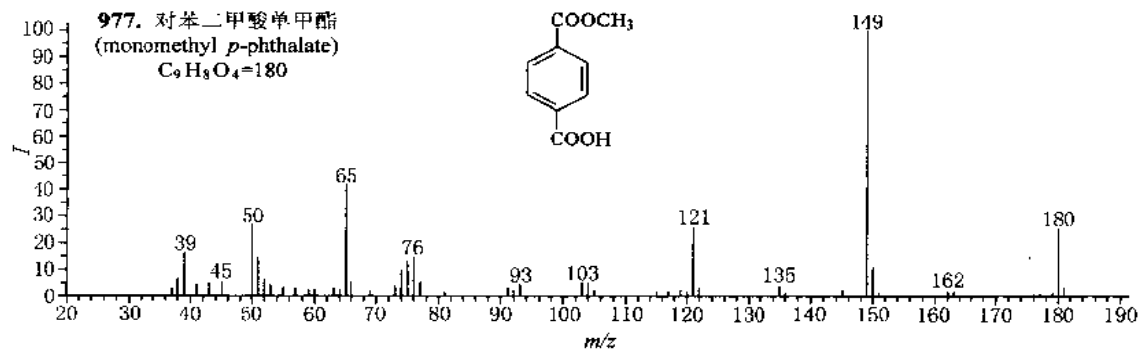
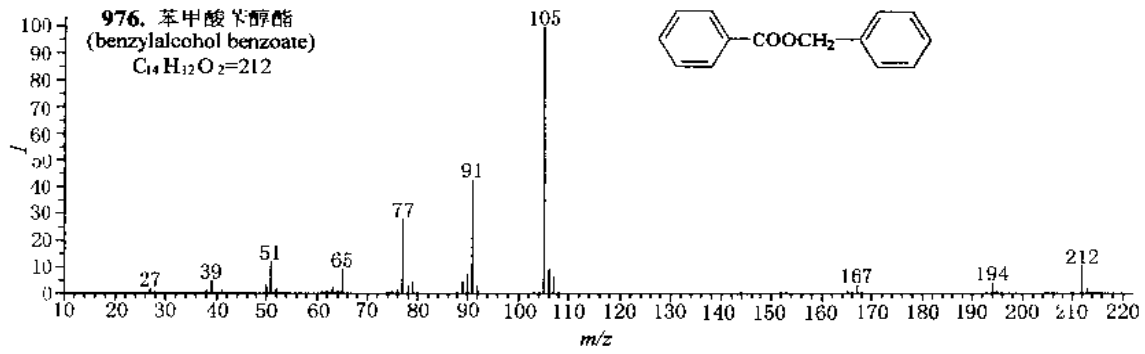
(16) 肉桂酸酯类 (985, 986) 的基本裂解途径是  $M-OR-CO-C_2H_2-C_2H_2$ , 香豆酸甲酯 (987) 再多失去一分子一氧化碳, 即  $M-OCH_3-CO-CO-C_2H_2-C_2H_2$ 。



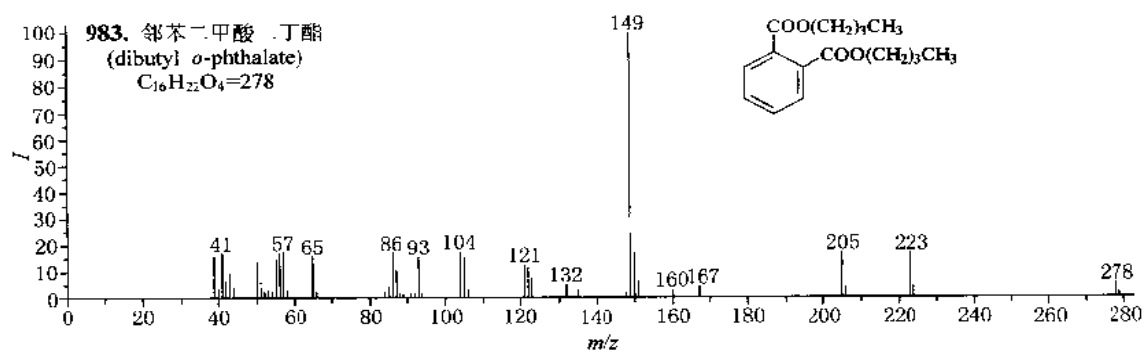
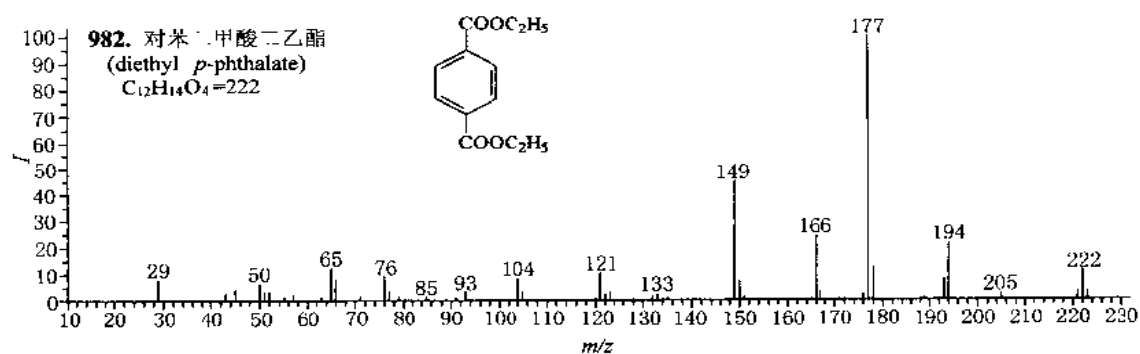
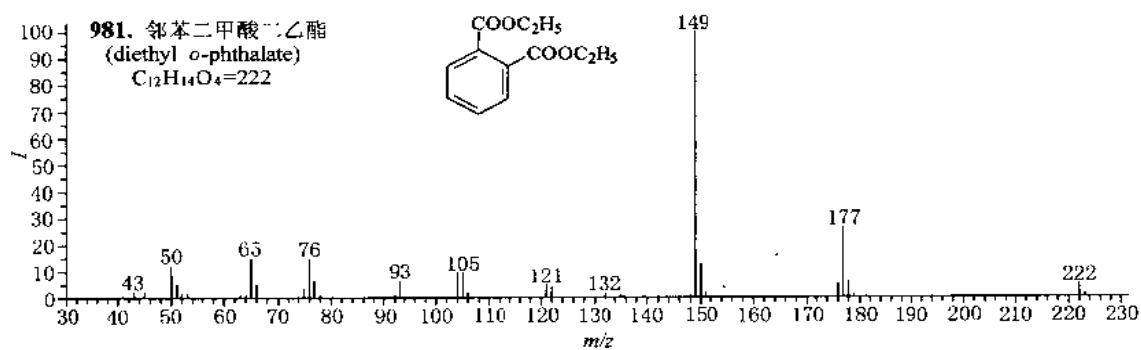
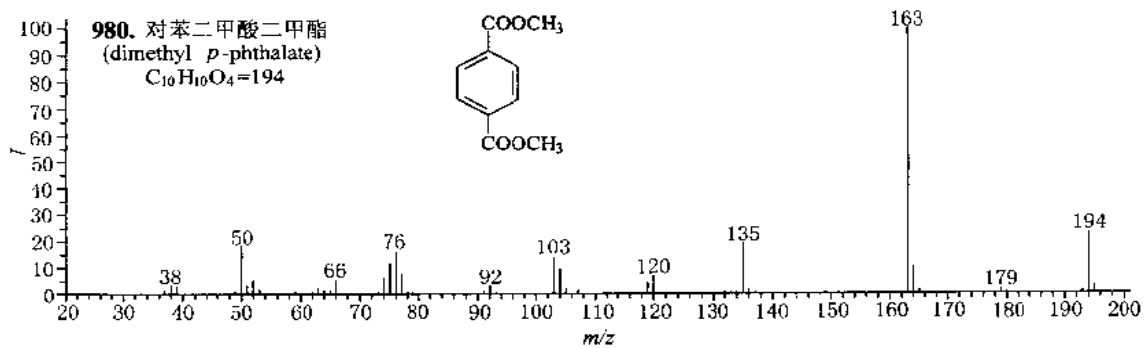


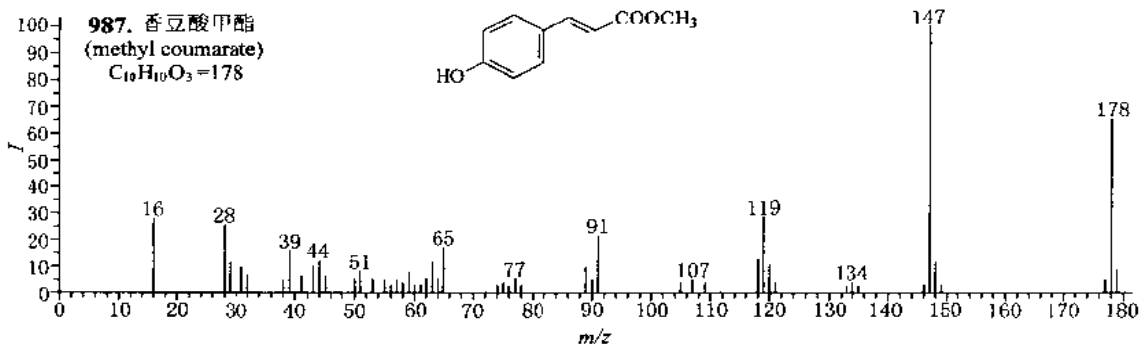
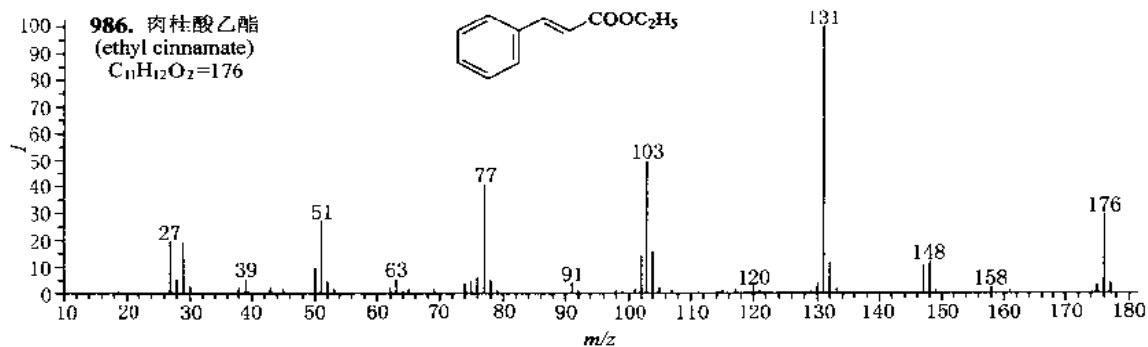
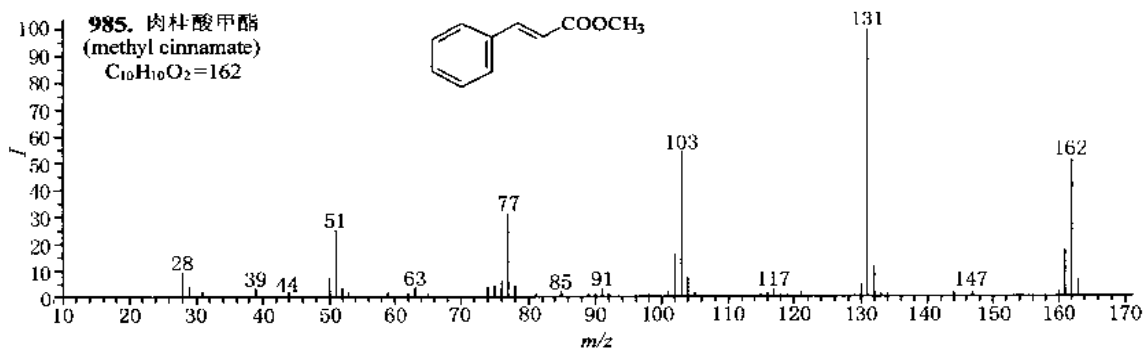
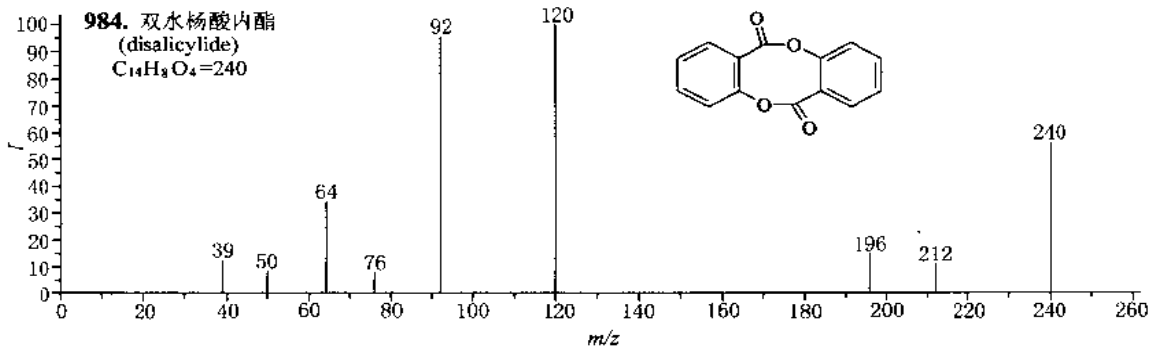






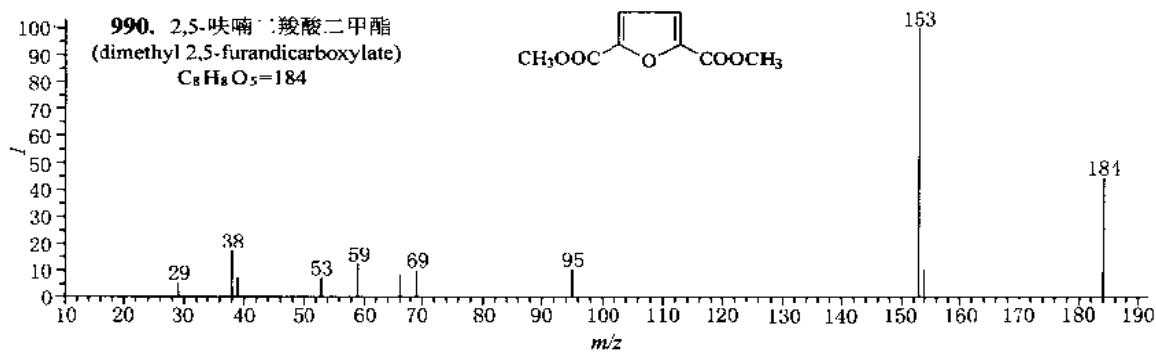
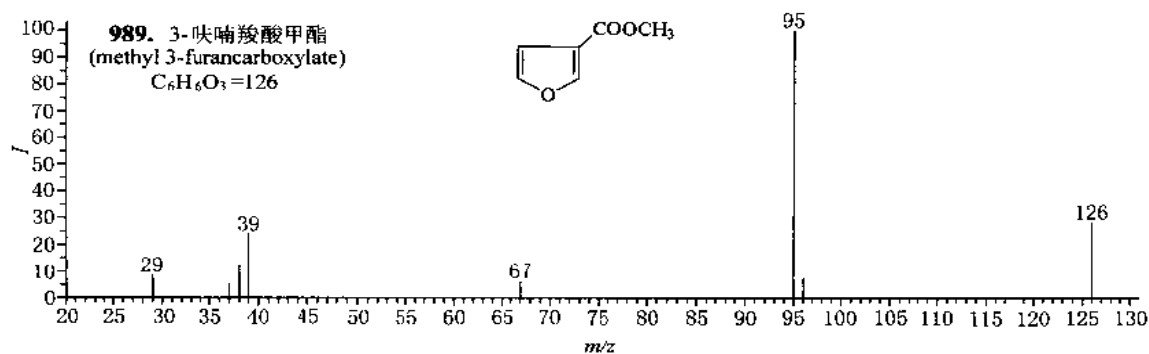
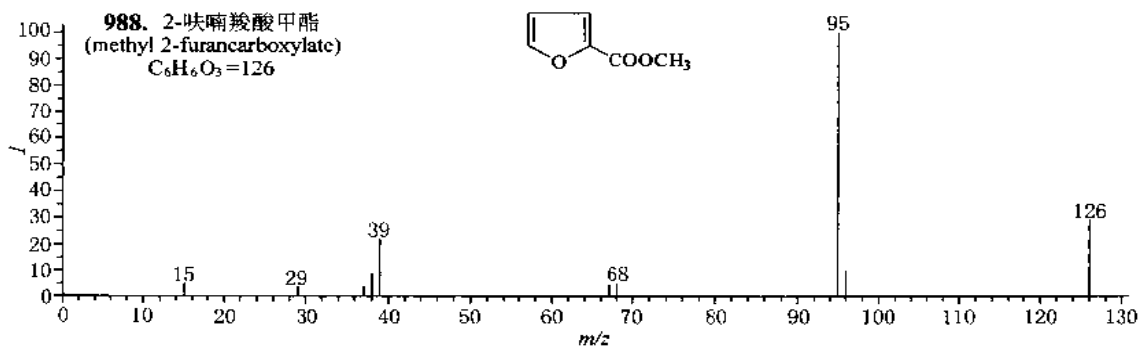






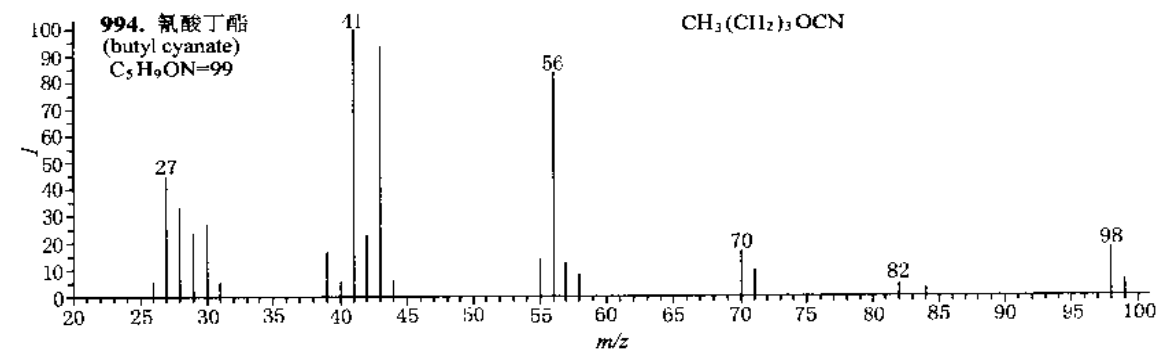
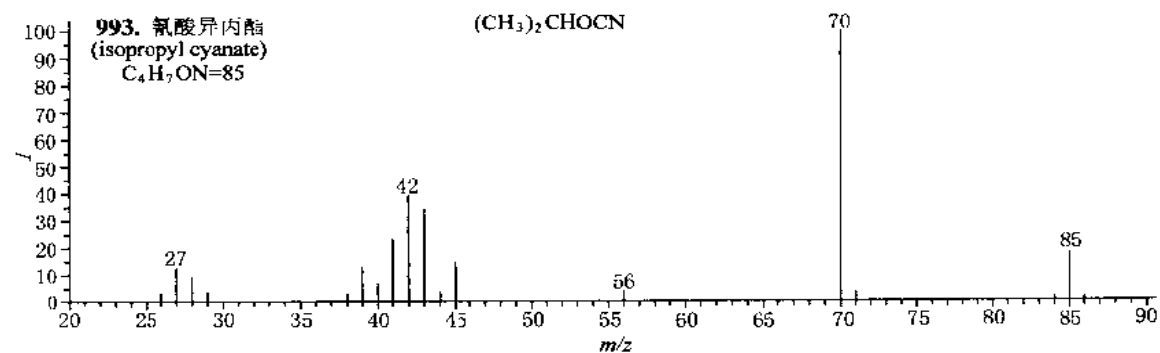
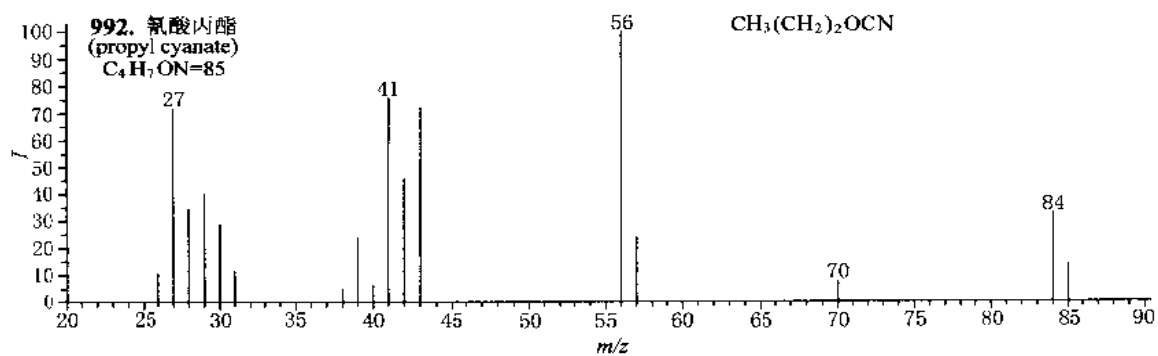
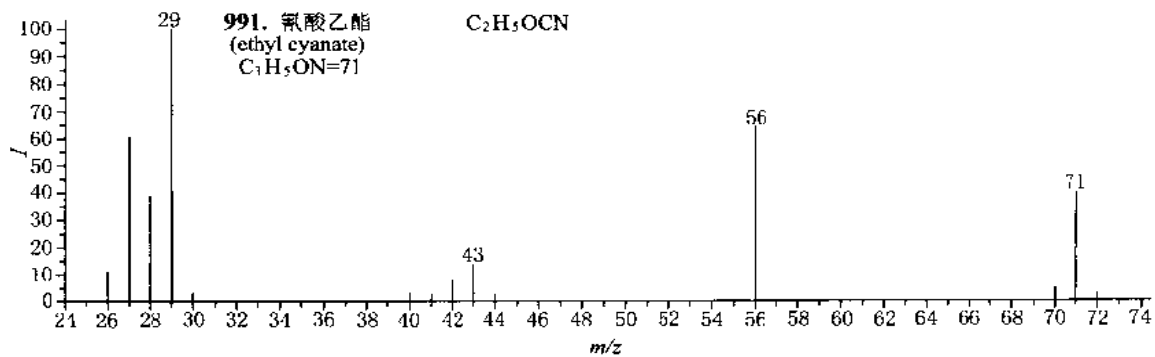
### 五、呋喃羧酸甲酯类

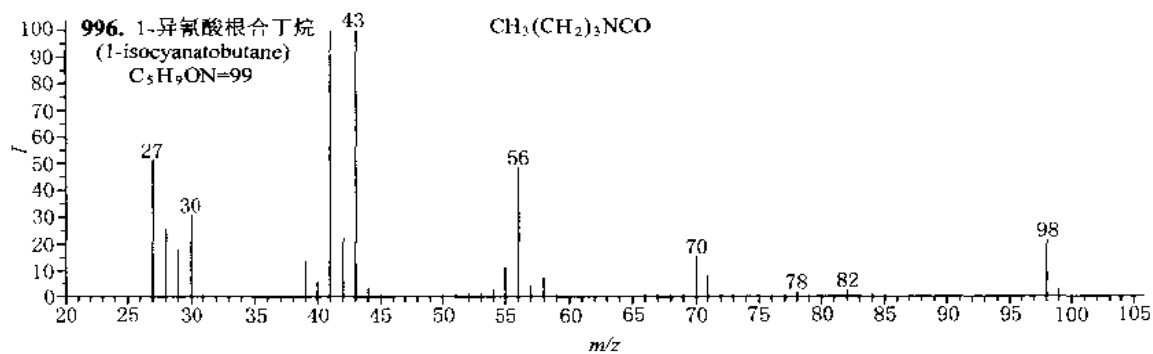
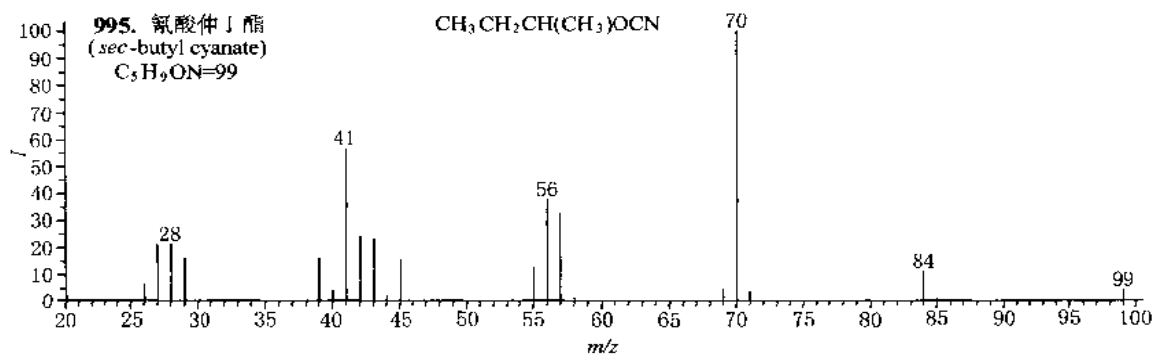
这类化合物 (988~990) 的主要裂解是  $M-OCH_3-CO$  和  $M-COOCH_3-CO$ 。



### 六、氰酸烷基酯类

这类化合物 (991~996) 的主要裂解都是失去少 1 个亚甲基的烷基, 得离子  $m/z$  56 ( $CH_2=O-CN$ )。





## 七、硫氰酸酯类

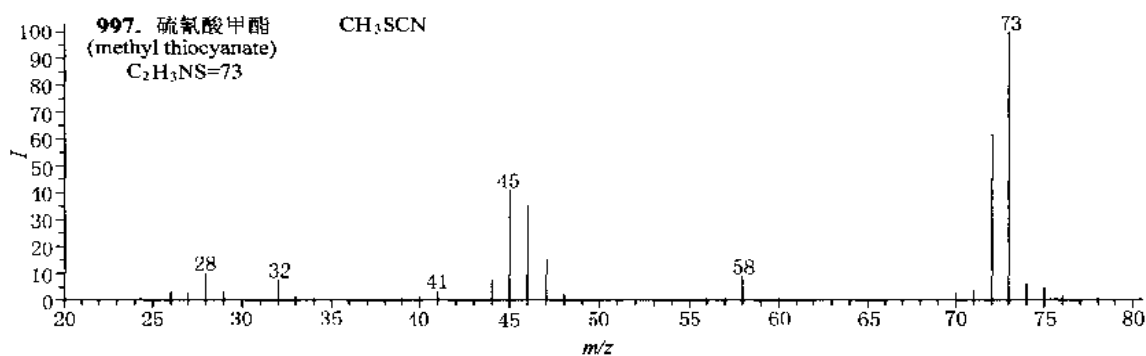
(1) 硫氰酸甲酯(997)、乙酯(998)和丙酯(999)都主要生成  $CH_2=S^{\ominus}CN$  离子  $m/z$  72, 硫氰酸离子也存在。

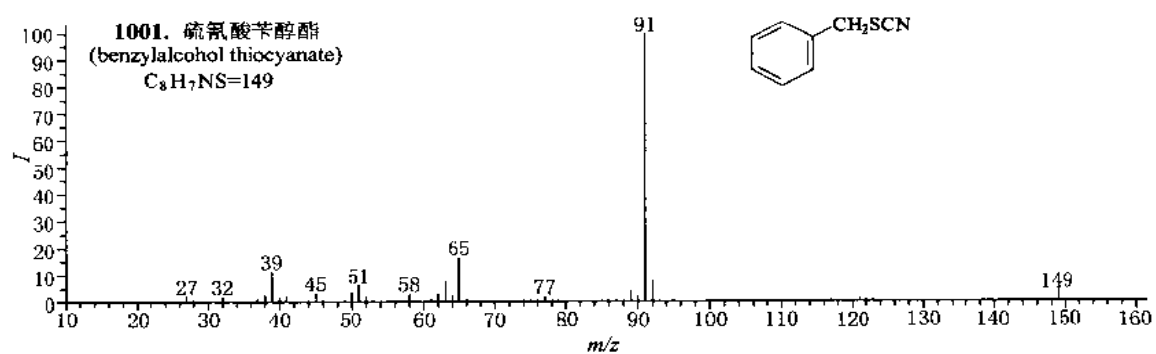
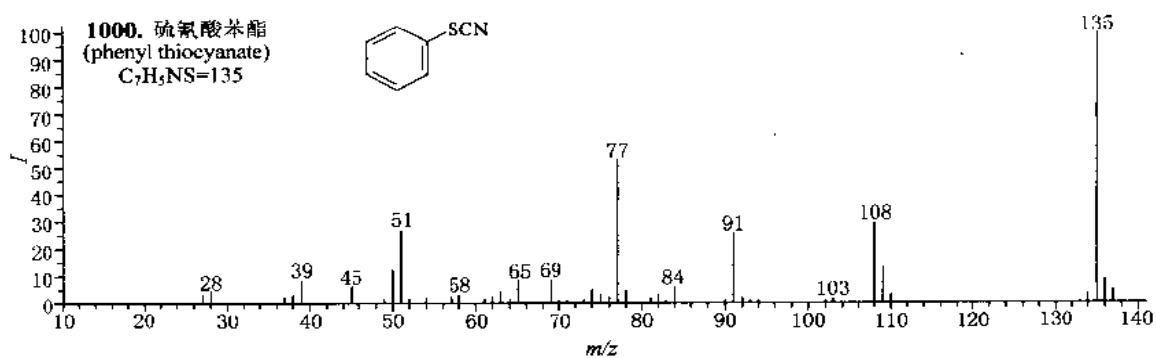
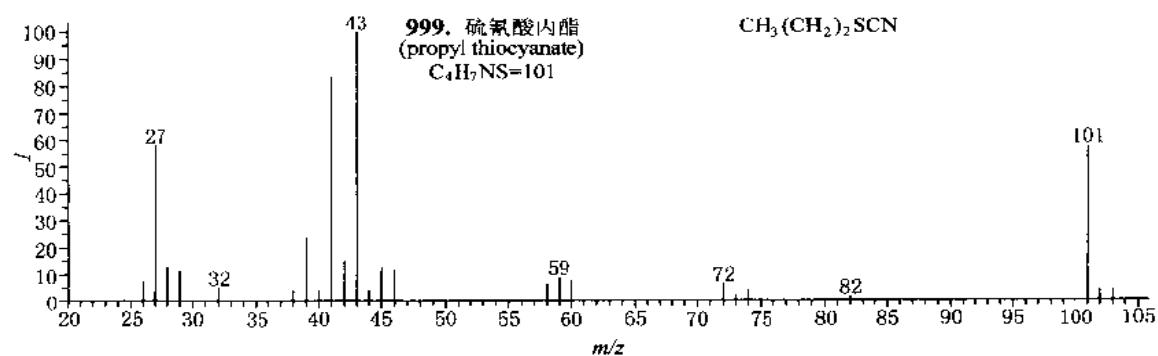
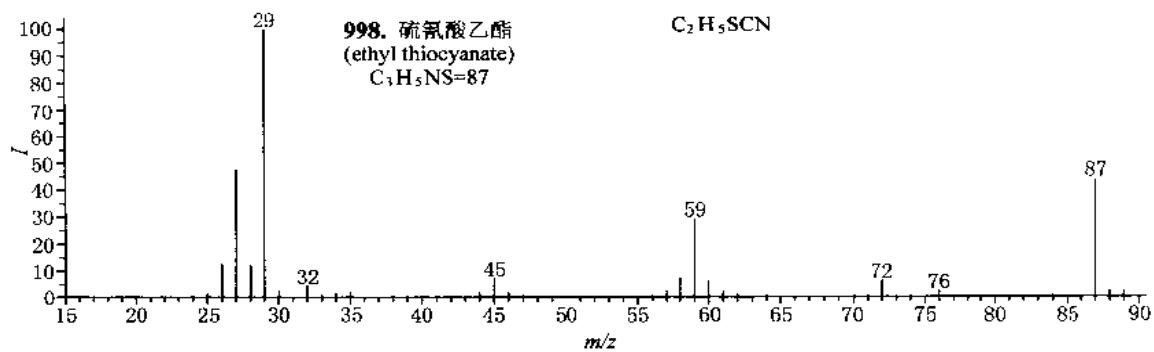
(2) 硫氰酸苯酯(1000)主要是失去氢氰酸。

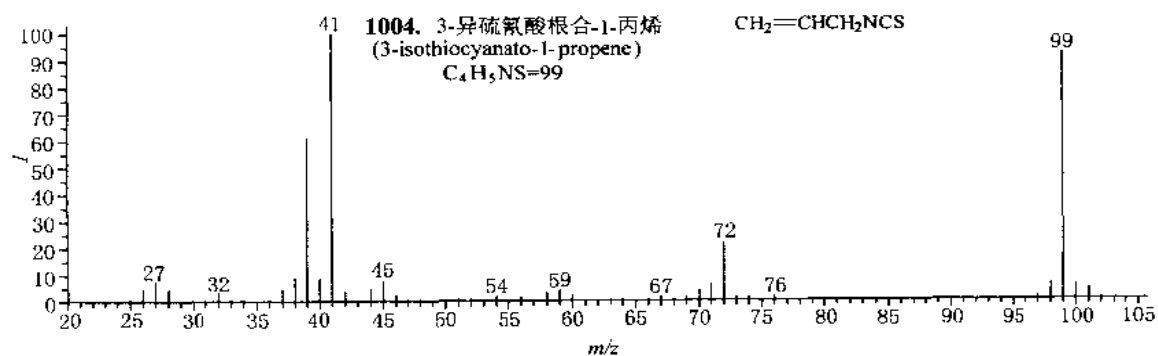
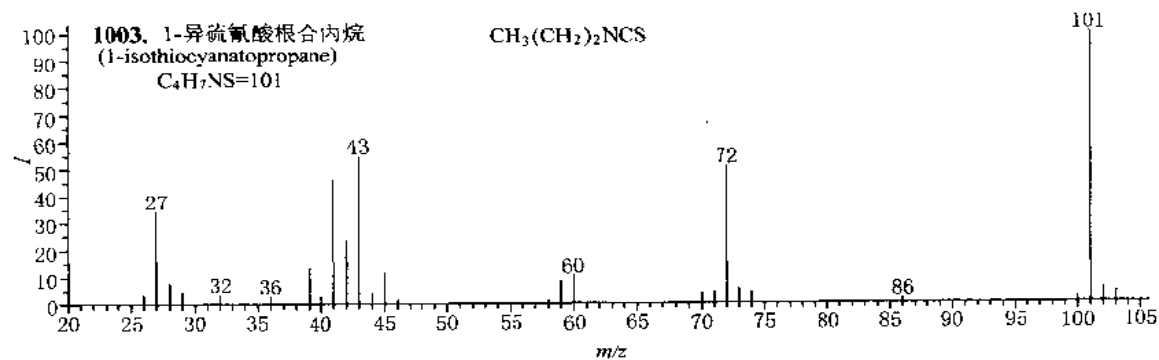
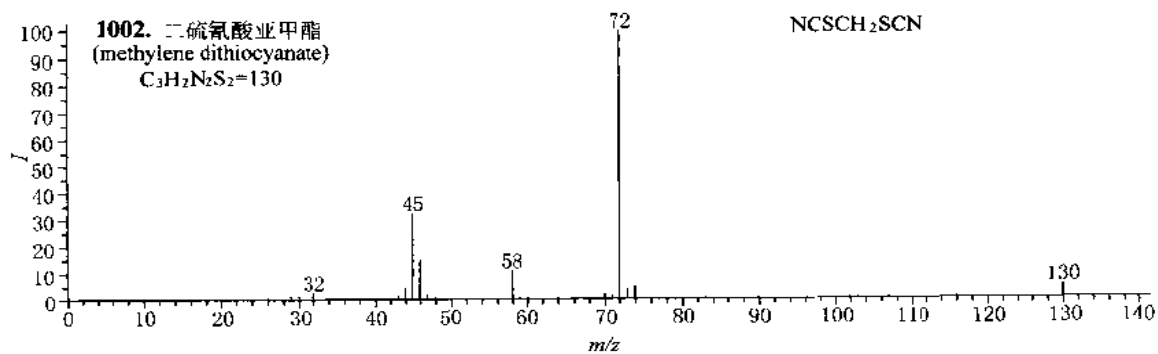
(3) 硫氰酸苄醇酯(1001)的裂解途径是  $M-SCN-C_2H_2-C_2H_2$ 。

(4) 二硫氰酸亚甲酯(1002)的主要离子是  $M-SCN$ 。

(5) 异硫氰酸根合烷基酯(1003,1004)也是生成离子  $m/z$  72, 但结构为  $CH_2=N^{\oplus}=C=S$ 。

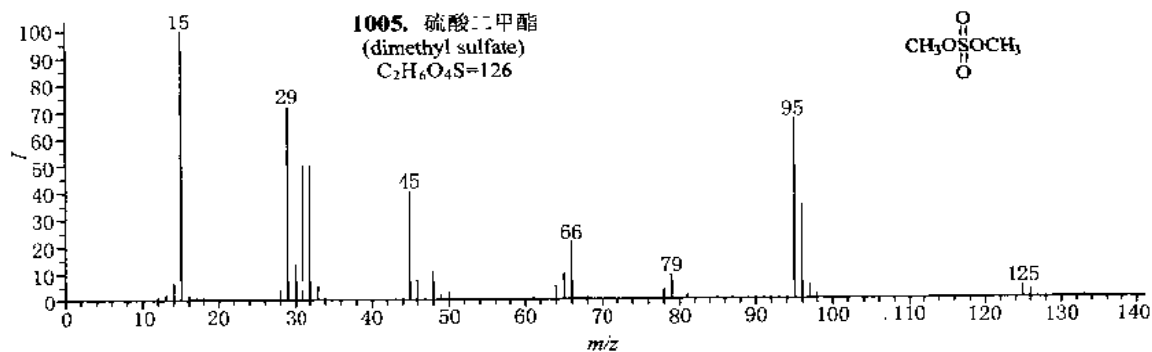






## 八、硫酸酯类

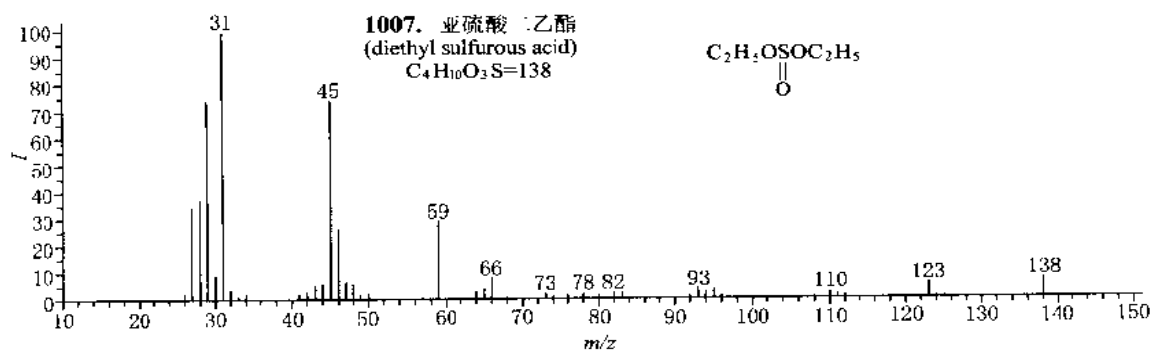
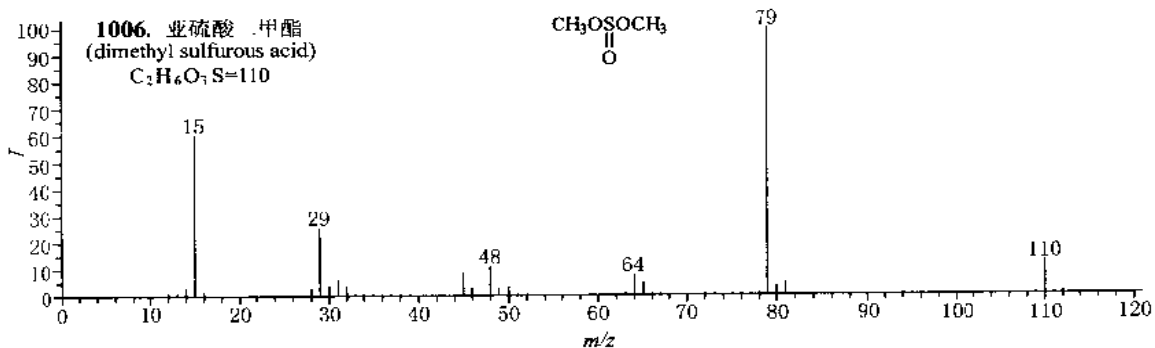
硫酸二甲酯 (1005) 的裂解途径有两条, 即  $M-CH_2O-CH_2O$  和  $M-OCH_3-CH_2O$ 。



## 九、亚硫酸酯类

(1) 亚硫酸二甲酯 (10006) 的主要裂解是  $M-OCH_3$ 。

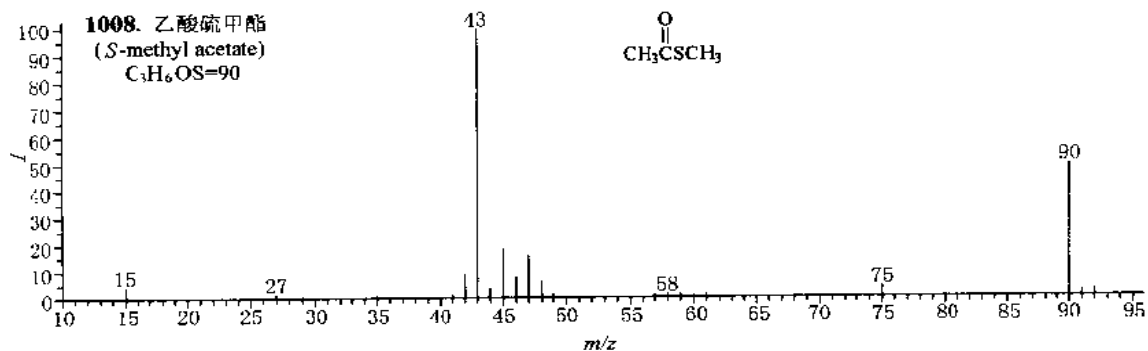
(2) 亚硫酸二乙酯 (10007) 有麦氏重排离子  $M-C_2H_4$  和  $M-OC_2H_5$ ，另有重要的乙醇离子  $m/z$  46 及其继续的  $\alpha$ -裂解离子  $m/z$  45 和 31。



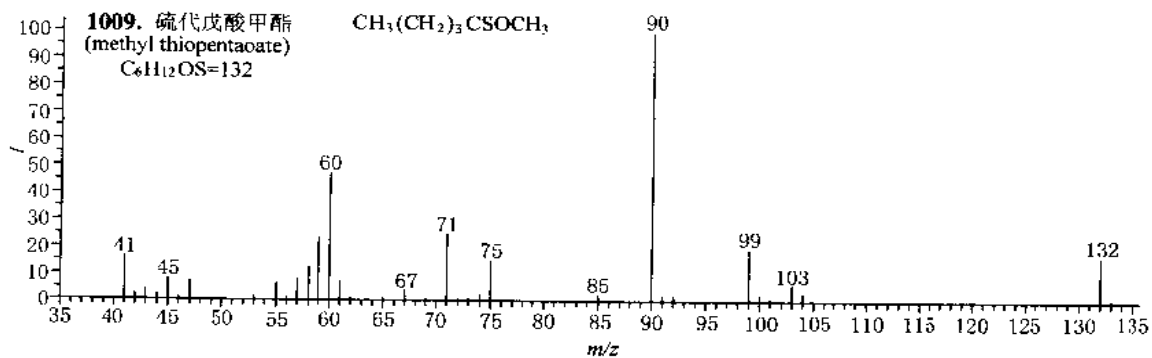
## 十、硫代羧酸酯类

(1) 乙酸硫甲酯 (1008) 的主要碎片离子有  $^+SCH_3$  和  $CH_3CO^-$ 。

(2) 硫代戊酸甲酯 (1009) 的主要碎片离子是  $M-OCH_3$  和麦氏重排失去  $C_3H_6$ 。

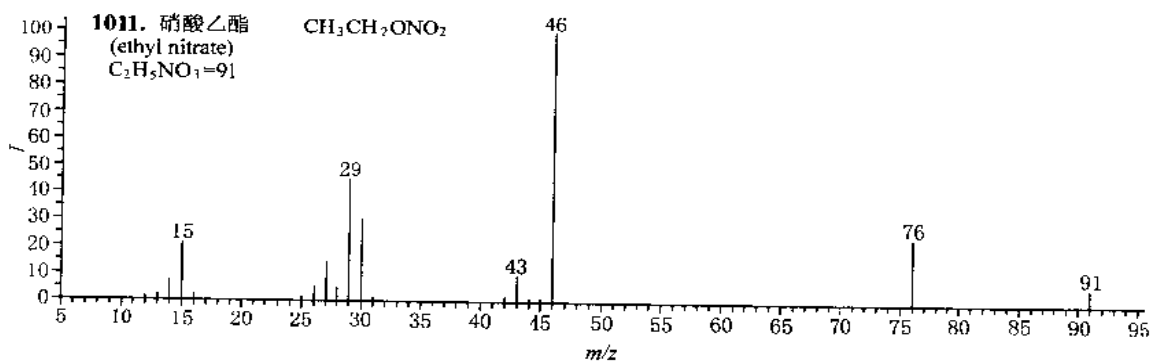
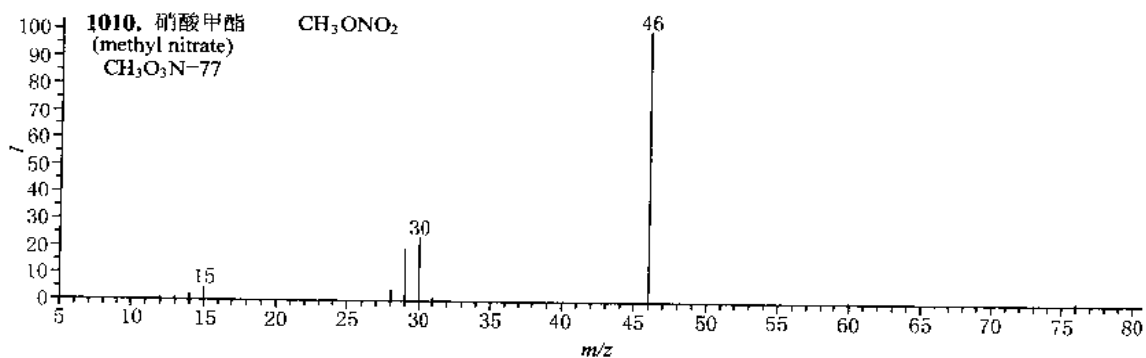


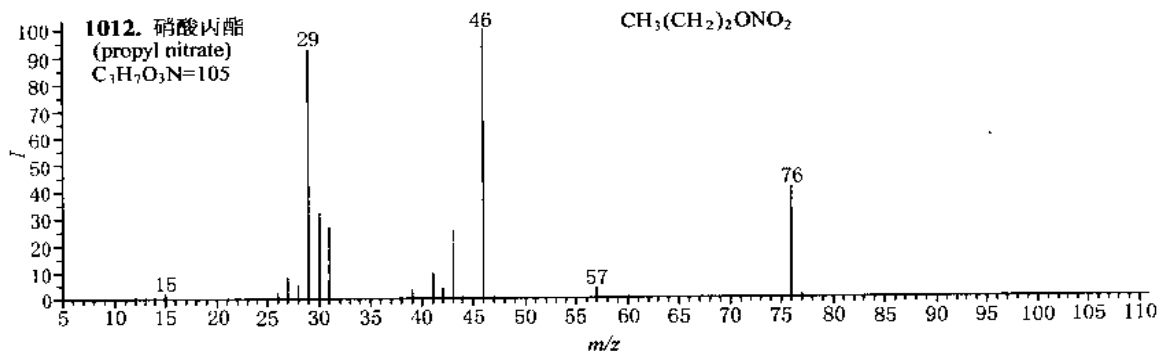




### 十一、硝酸酯类

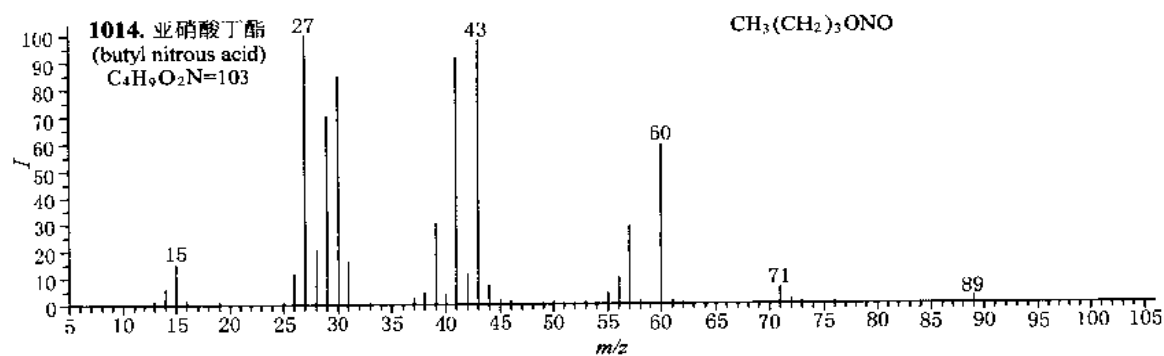
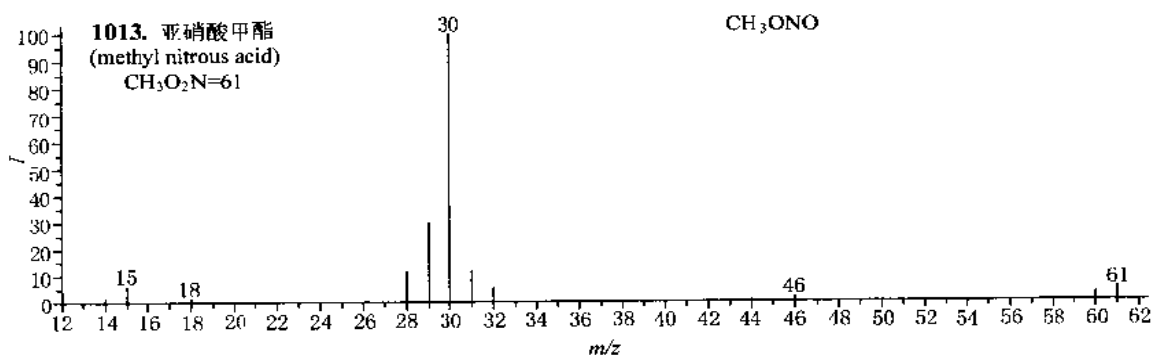
硝酸甲酯 (1010) 有  $\text{M}-\text{H}$  离子, 硝酸乙酯 (1011) 有  $\text{M}-\text{CH}_3$  离子和硝酸丙酯 (1012) 有  $\text{M}-\text{C}_2\text{H}_5$  离子, 三者都是  $\text{CH}_2=^+\text{ONO}_2$  ( $m/z$  76)。另外三者都有硝基离子  $m/z$  46 和亚硝基离子  $m/z$  30。





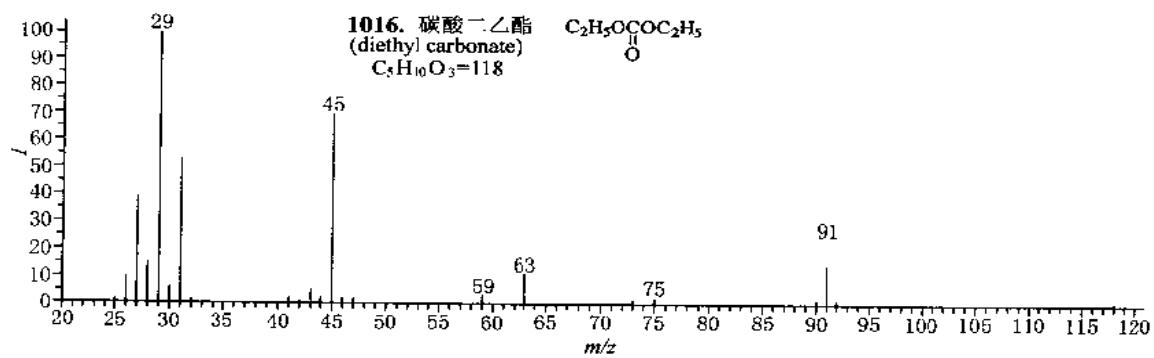
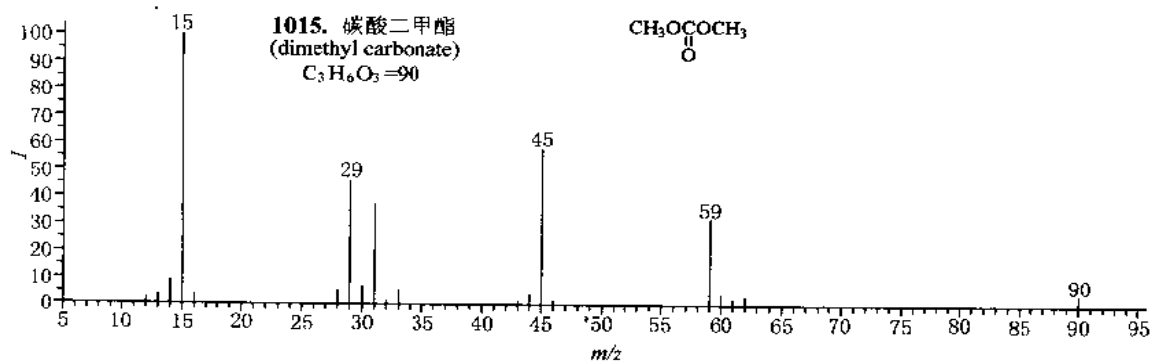
## 十二、亚硝酸酯类

亚硝酸甲酯 (1013) 和亚硝酸丁酯 (1014) 都有离子  $m/z$  30 ( ${}^1NO$ ), 后者还有  $M-C_3H_7$  离子。



## 十三、碳酸酯类

碳酸二甲酯 (1015) 和碳酸二乙酯 (1016) 都有离子  $m/z$  45, 可能是重排裂解产生的羧基离子。

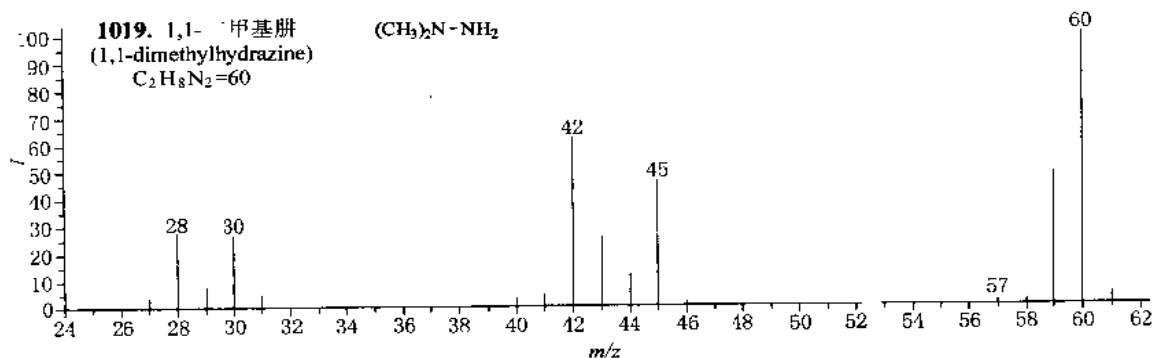
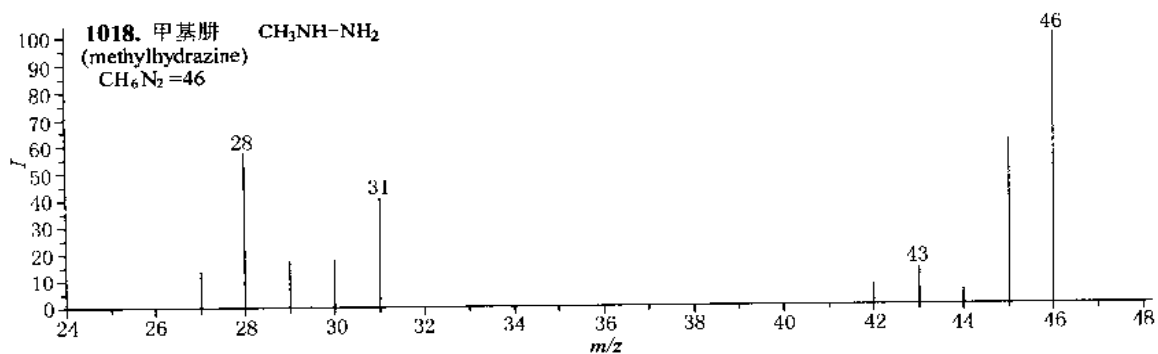
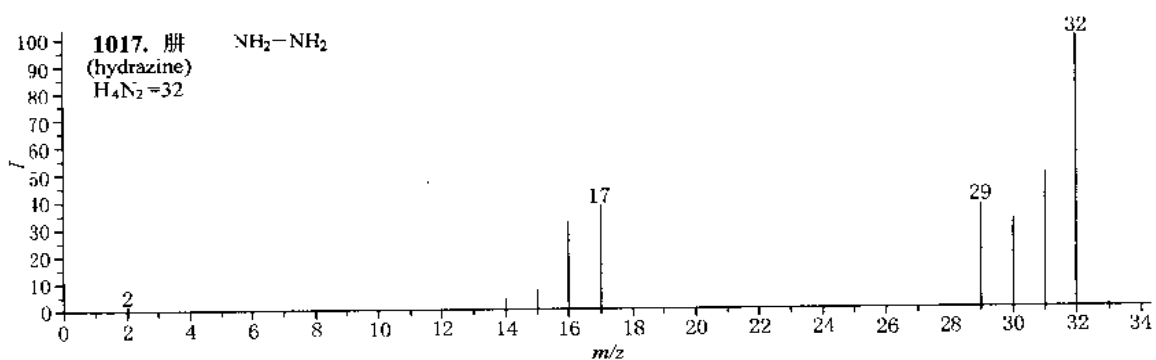


# 第八章 胍 和 脒

## 第一节 胍 类

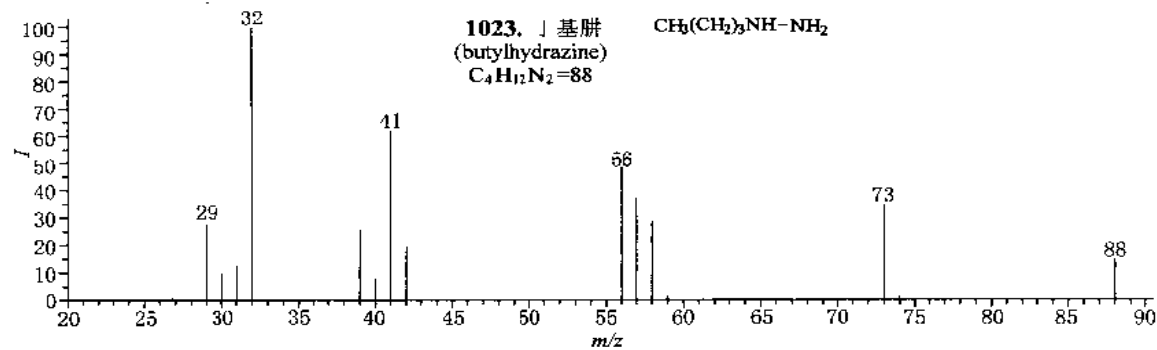
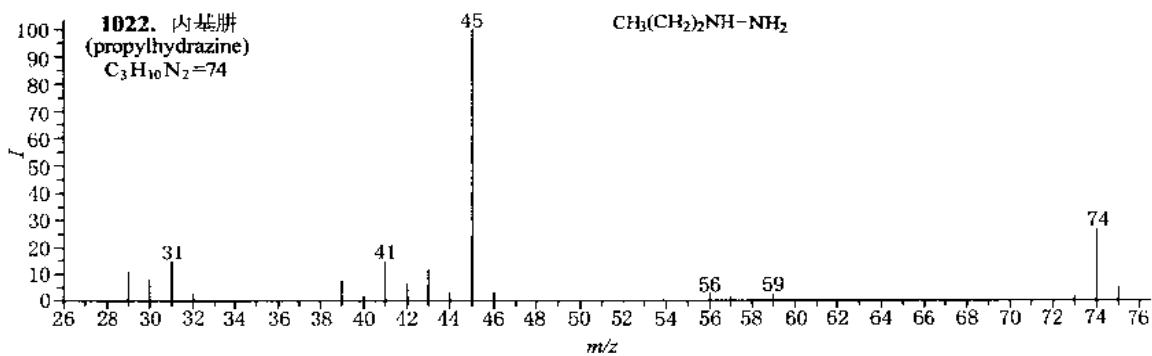
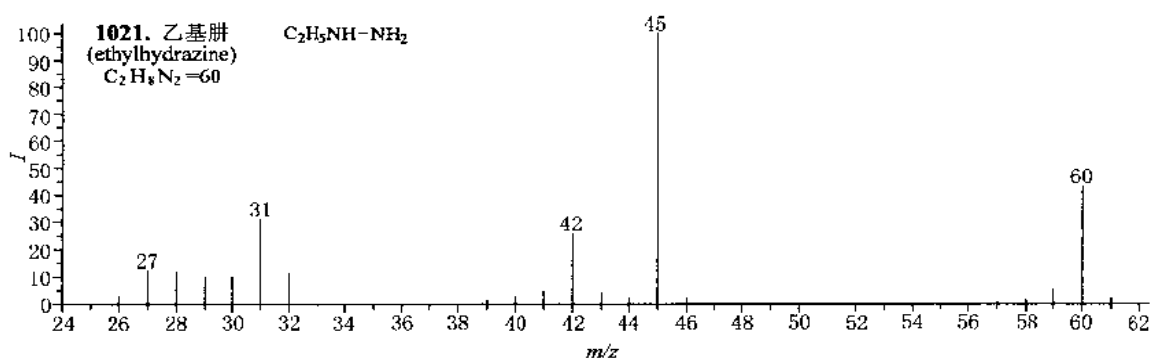
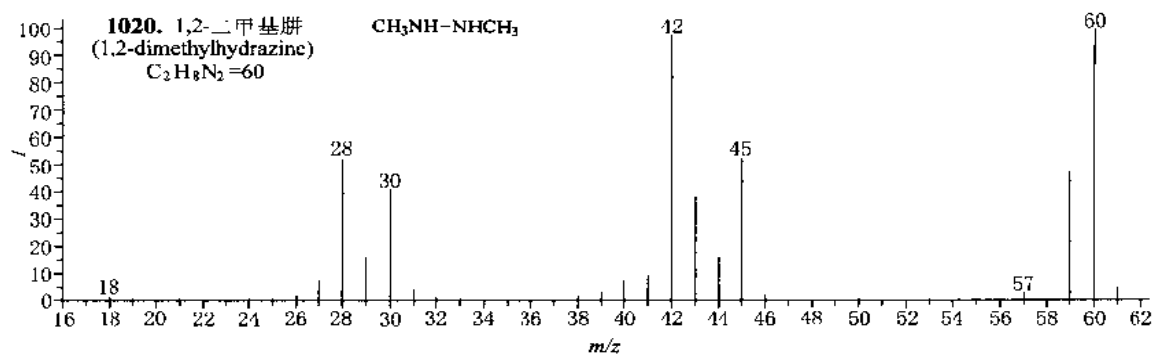
### 一、脂肪胍类

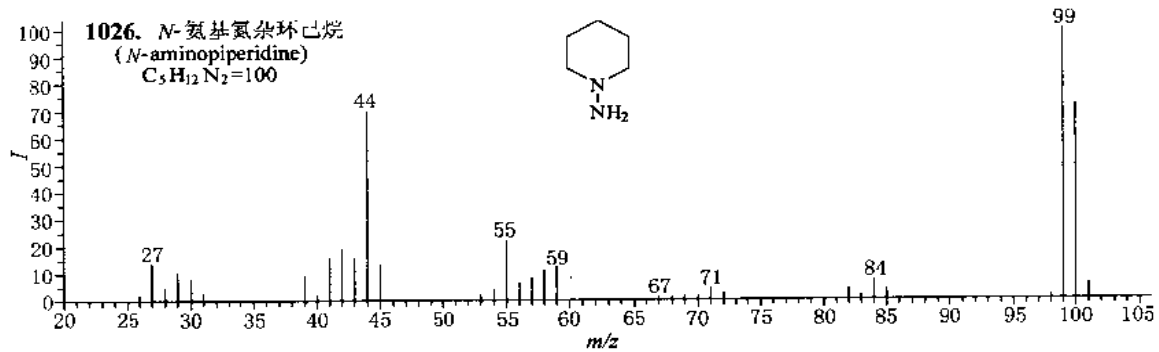
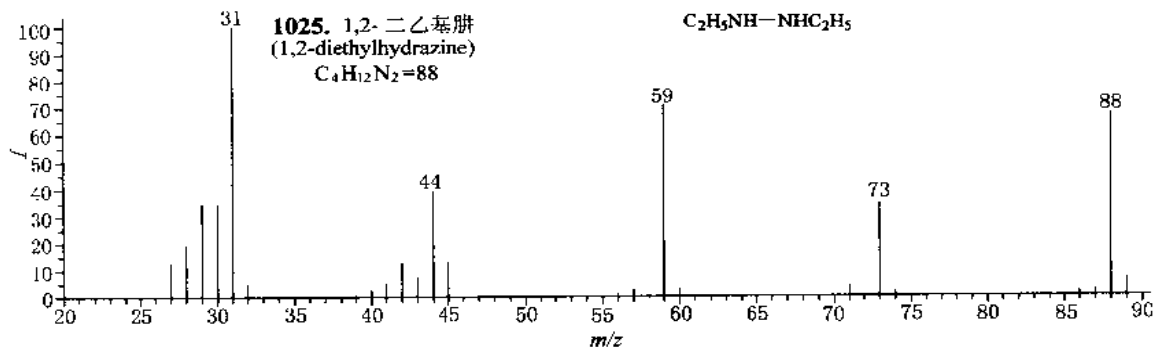
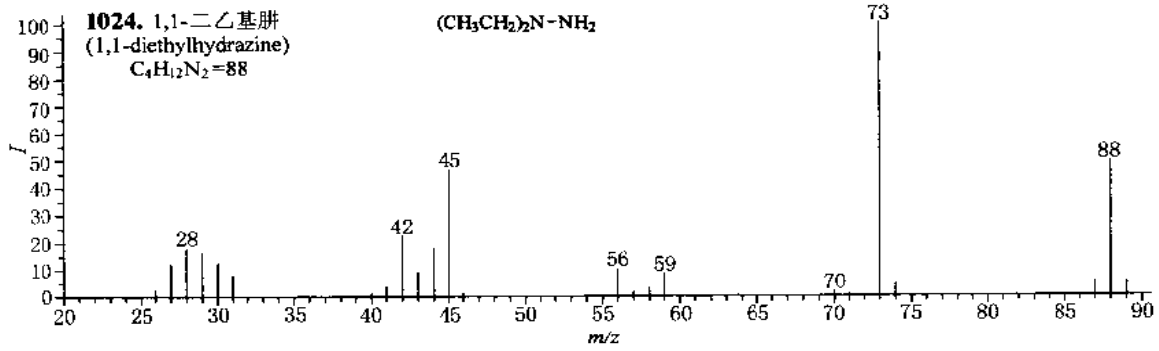
(1) 胍 (1017) 本身有  $M-1$ ,  $M-2$  和  $M-3$  离子, 另外有氨离子 ( $\text{NH}_3^+$ ) 和氨基离子 ( $^+\text{NH}_2$ )。



(2) 烷基肼类 (1018~1025) 的一般裂解是失去氢或烷基。

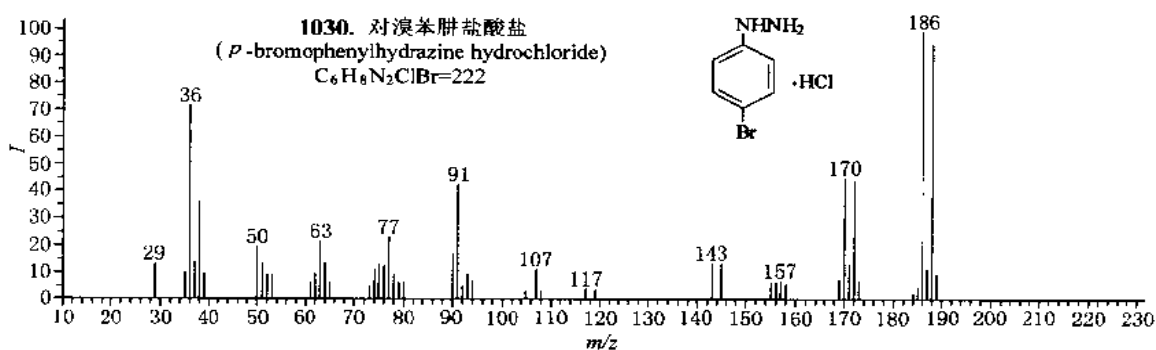
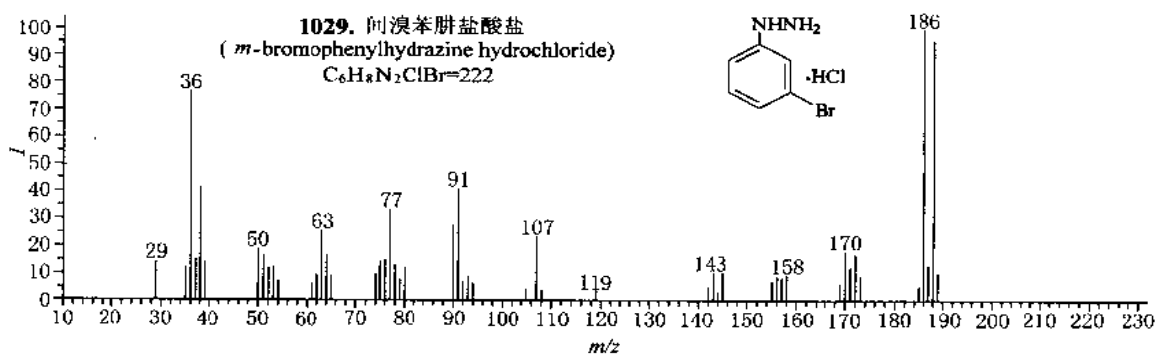
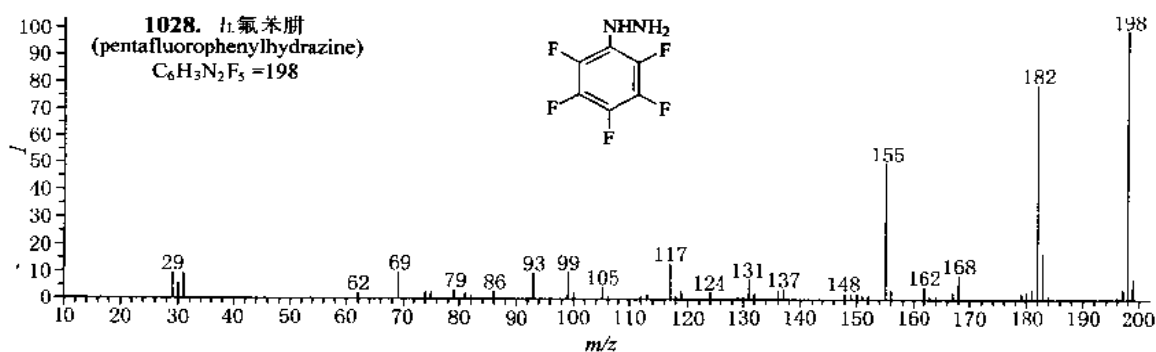
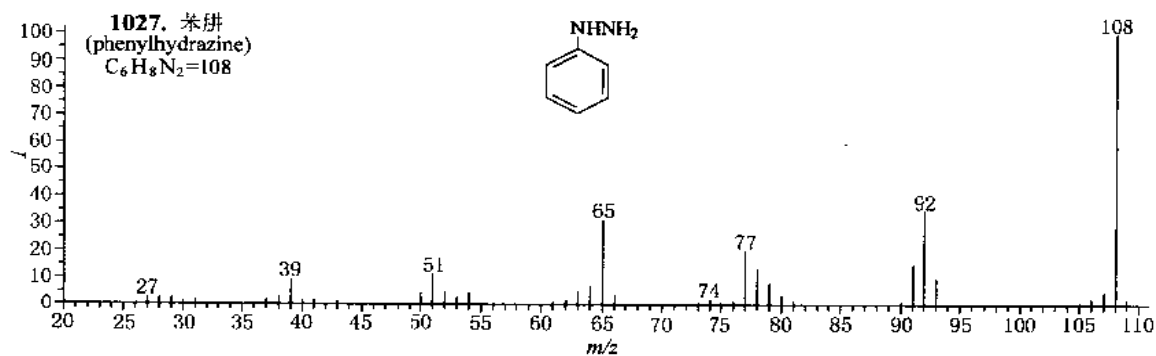
(3) 环肼类 (1026) 也有  $M-1$  离子,  $N$ -氨基氮杂环己烷 (1026) 的  $m/z$  44 离子可能是  $M-C_4H_8$ 。

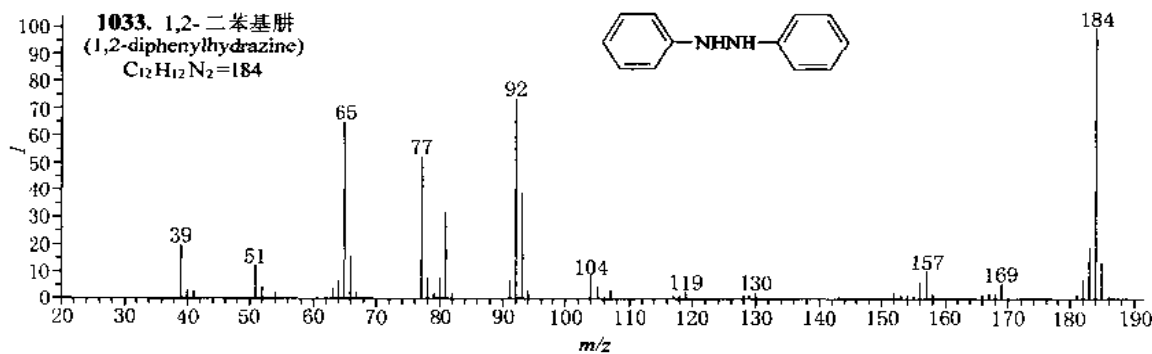
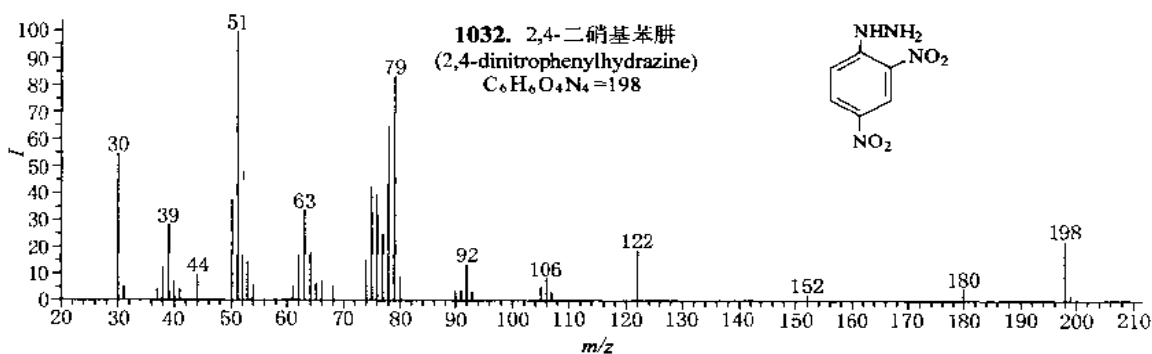
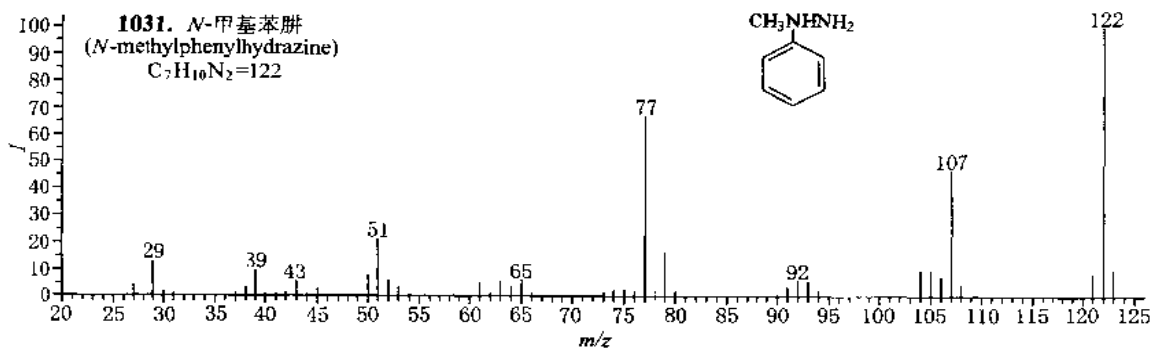




## 二、芳香肼类

- (1) 苯肼类 (1027~1031) 的裂解途径是  $M-NH_2-CN H$ 。
- (2) N-甲基苯肼 (1031) 的裂解途径是  $M-CH_3-NNH_2$ 。
- (3) 2,4-二硝基苯肼 (1032) 的裂解途径是  $M-NO_2-NO_2$  和  $M-NO_2-NO-NH_2$ 。
- (4) 1,2-二苯基肼 (1033) 的主要裂解是  $M-NC_6H_5$  和  $M-NHC_6H_5$ 。

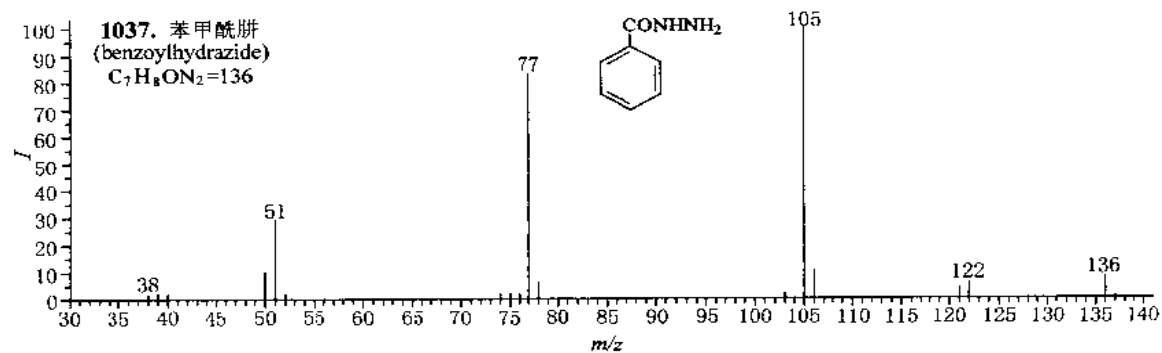
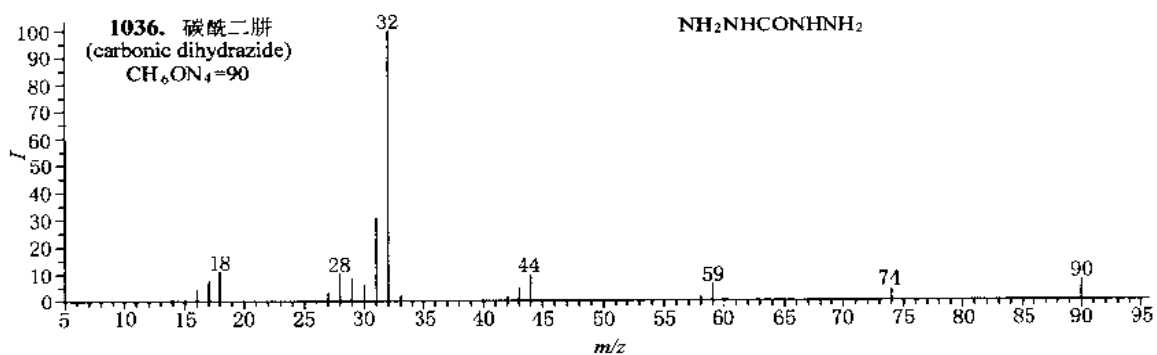
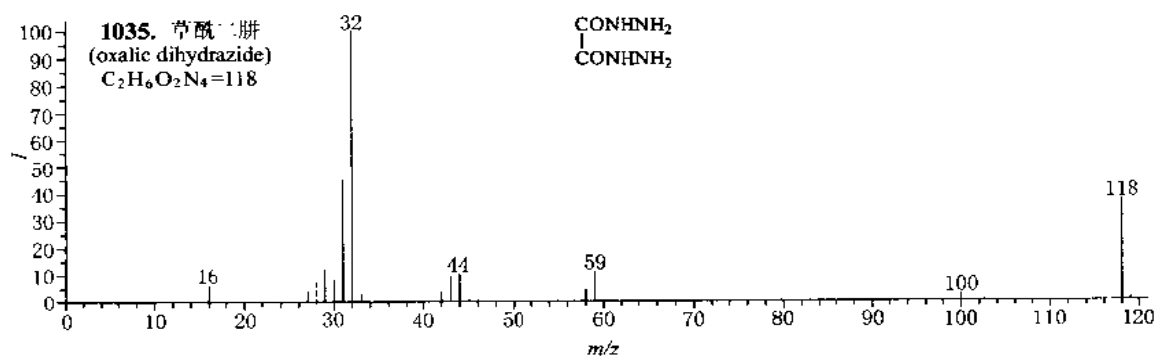
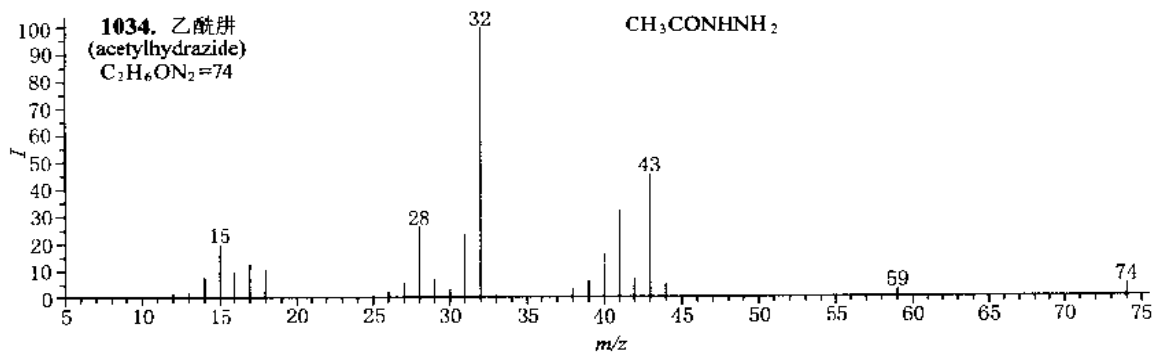


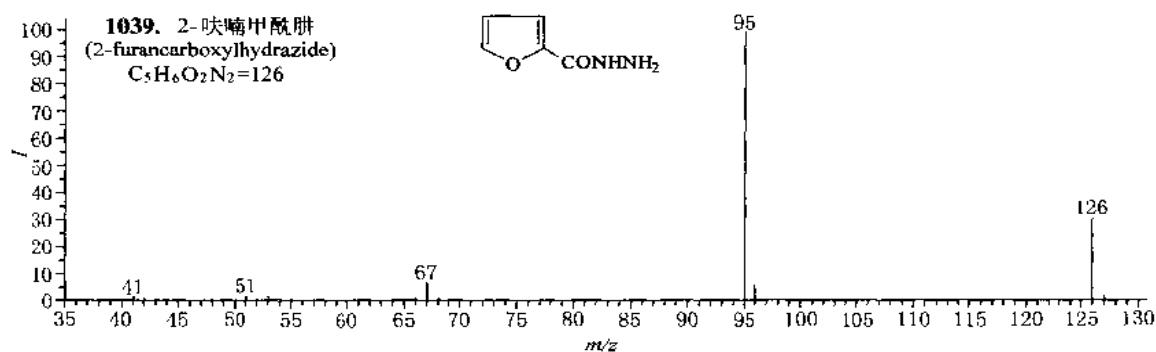
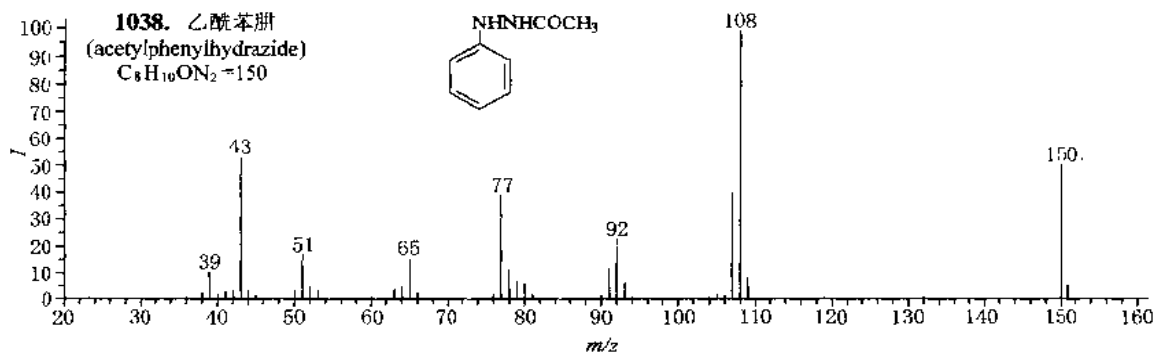


### 三、酰肼类

- (1) 乙酰肼 (1034)、草酰二肼 (1035) 和碳酰二肼 (1036) 都有  $^-CONHNH_2$  离子 ( $m/z$  59) 和  $NH_2NH_2^+$  离子 ( $m/z$  32)。
- (2) 苯甲酰肼 (1037) 的裂解途径是  $M-NHNH_2-CO-C_2H_5$ 。
- (3) 乙酰苯肼 (1038) 的主要裂解是  $M-CH_2CO$  和  $M-CH_3CO$ 。
- (4) 2-咪喃甲酰肼 (1039) 的裂解途径是  $M-NHNH_2-CO$ 。







## 第二节 脒 类

### 一、脂肪脒类

(1) 氢氰酸 (1040)、乙脒 (1041)、丙脒 (1042) 和戊脒 (1043) 的裂解有强的  $M-H$  离子。丙脒尚有  $C_2H_5^+$  离子，十二脒 (1044) 有很多偶数质量的离子，它们都是逐一失去烷基的产物。

(2) 溴化氰 (1045) 的裂解生成溴离子和氰基离子。

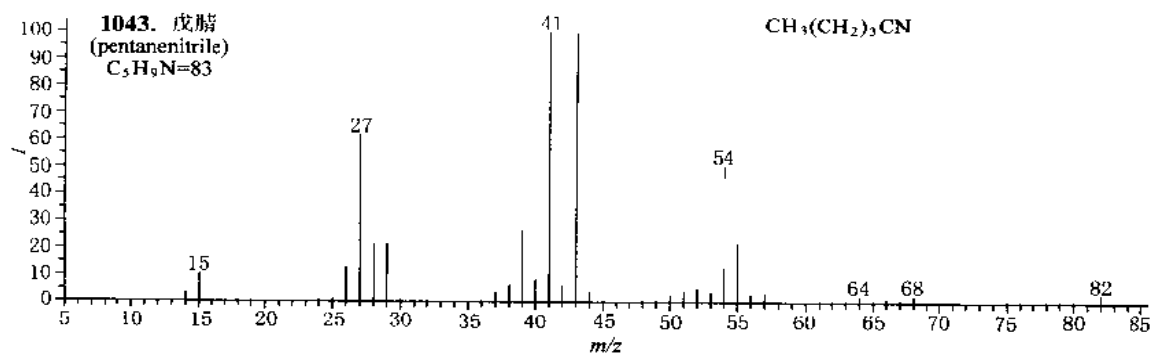
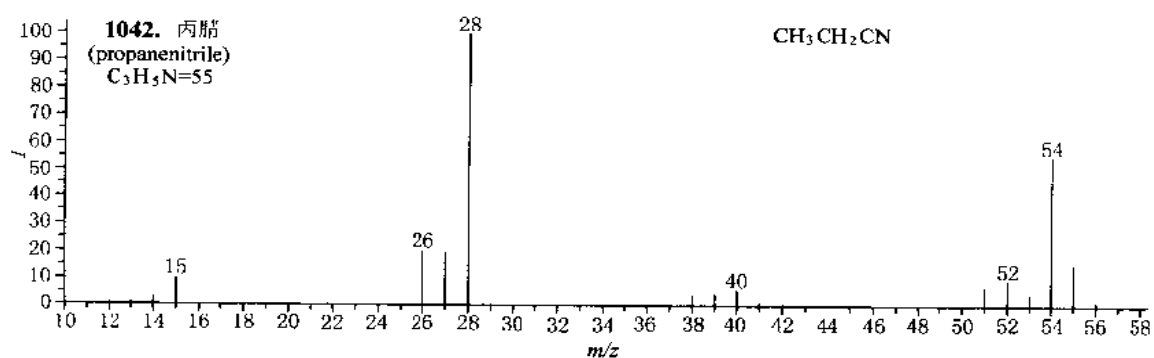
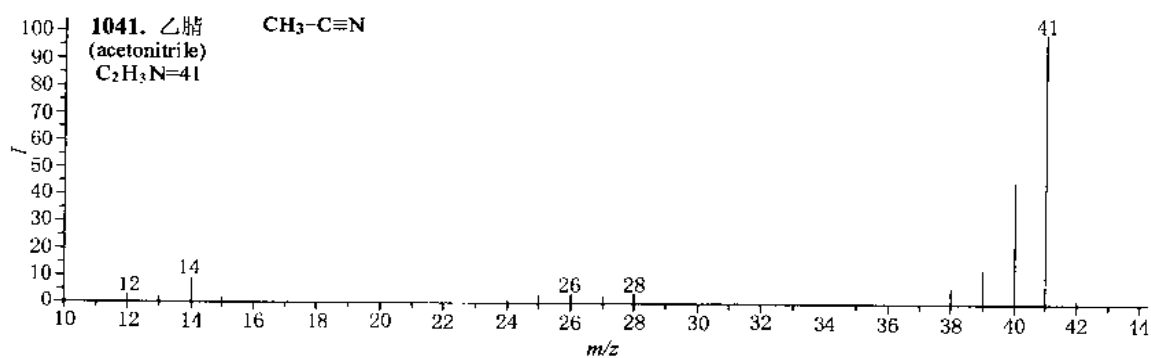
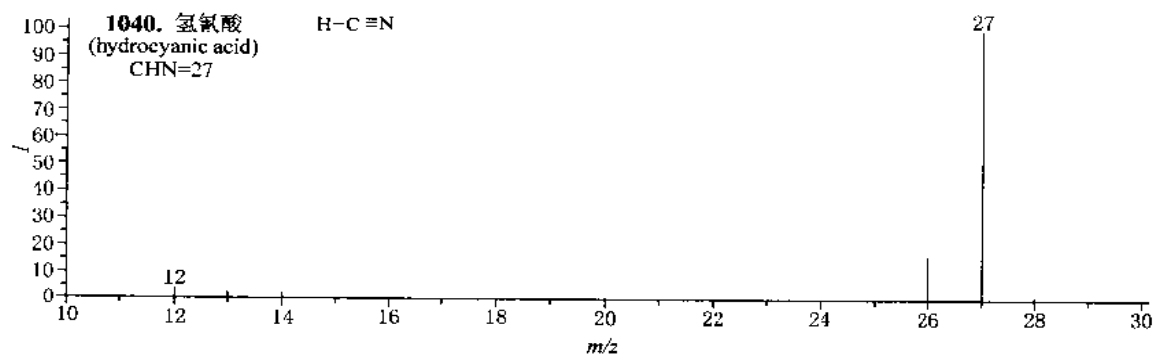
(3) 氰基乙酰胺 (1046) 主要进行两种  $\alpha$ -裂解生成  $M-NH_2$  和  $M-CH_2CN$  离子。

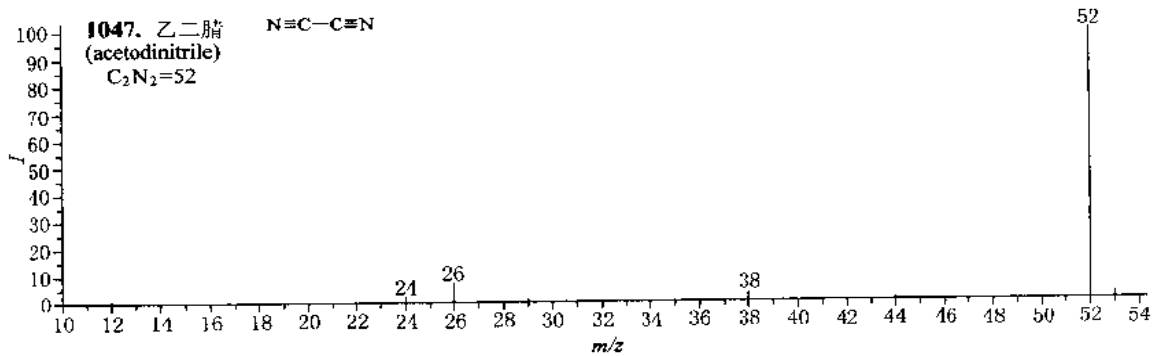
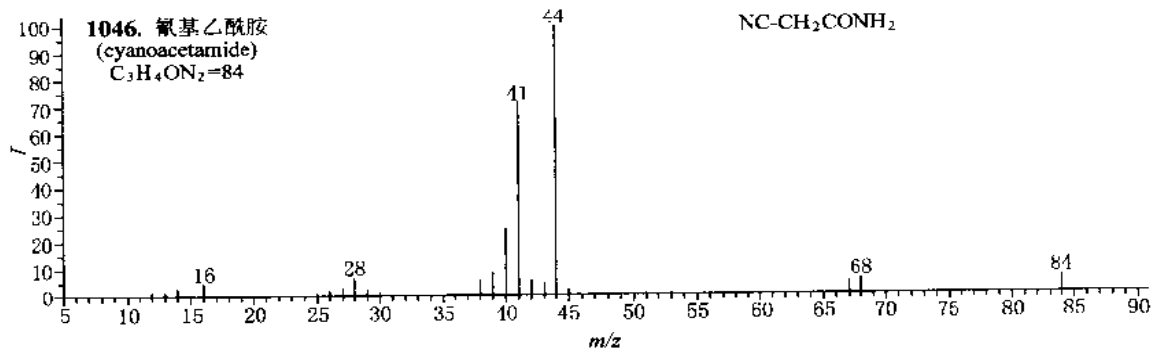
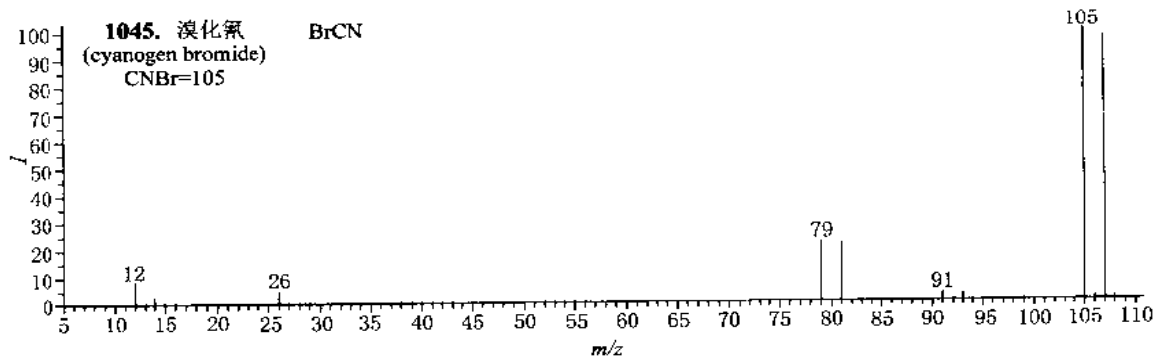
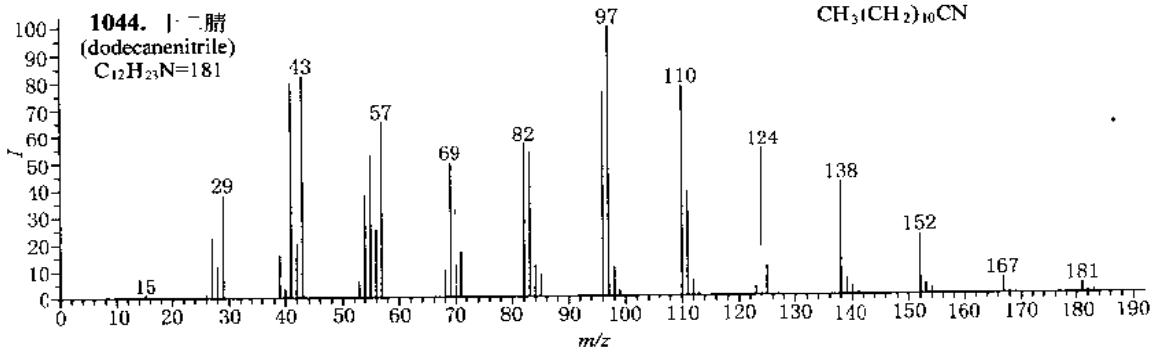
(4) 乙二脒 (1047) 的分子离子只作对半裂解，丙二脒 (1048)、丁二脒 (1049)、甲基丙二脒 (1050) 和二甲基丙二脒 (1051) 都有  $M-HCN$  离子，己二脒 (1052) 和辛二脒 (1053) 都有  $M-CH_2CN$  离子。

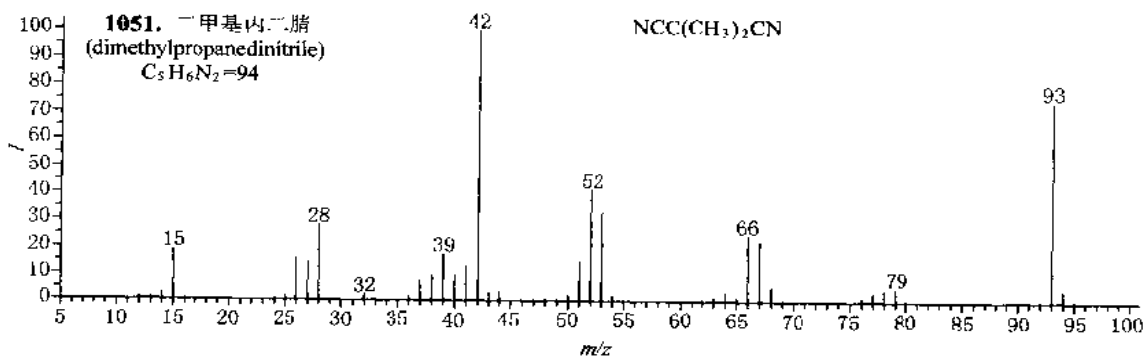
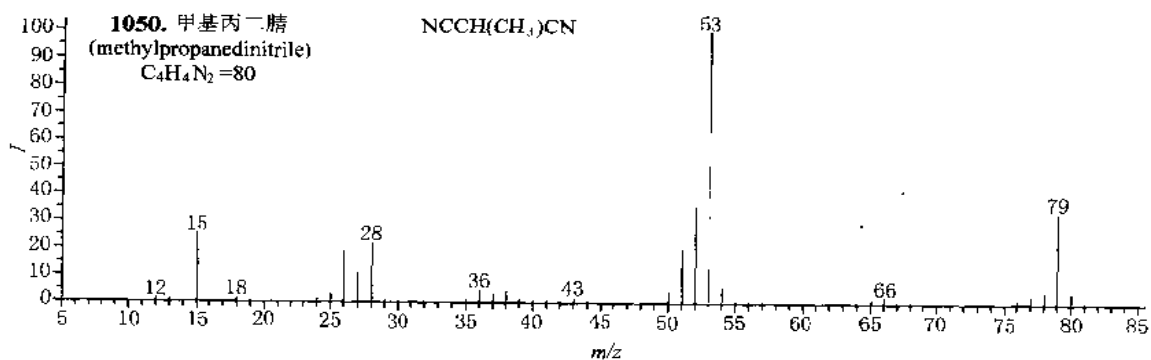
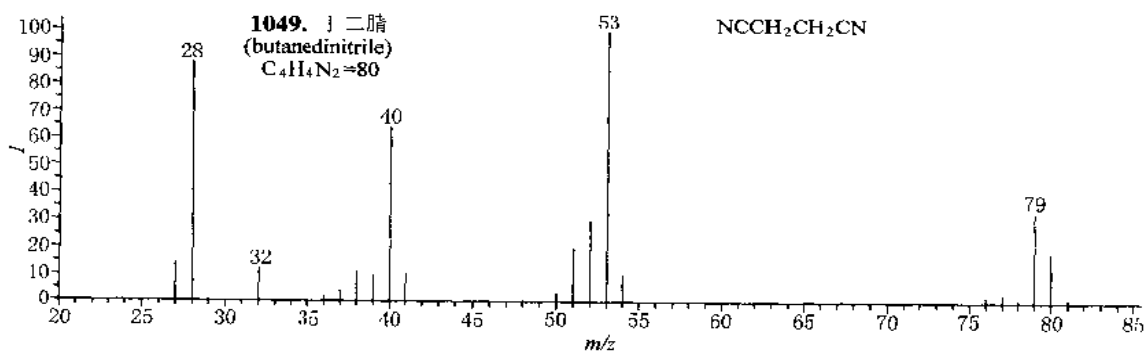
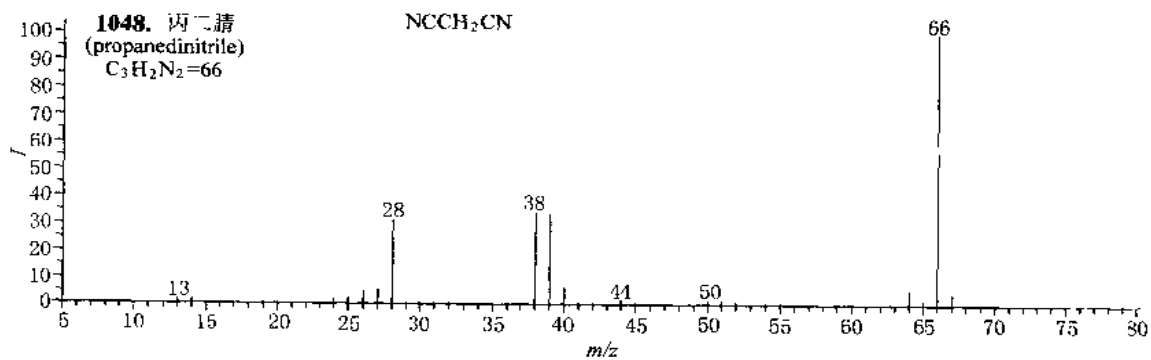
(5) 丁烯二脒 (1054) 和 3-己烯二脒 (1055) 都有  $M-HCN$  离子，后者尚有  $M-CH_2CN$  离子。

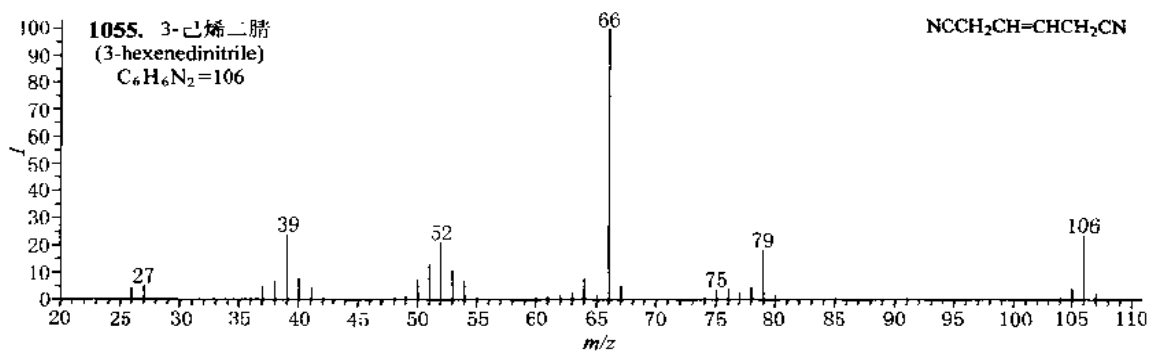
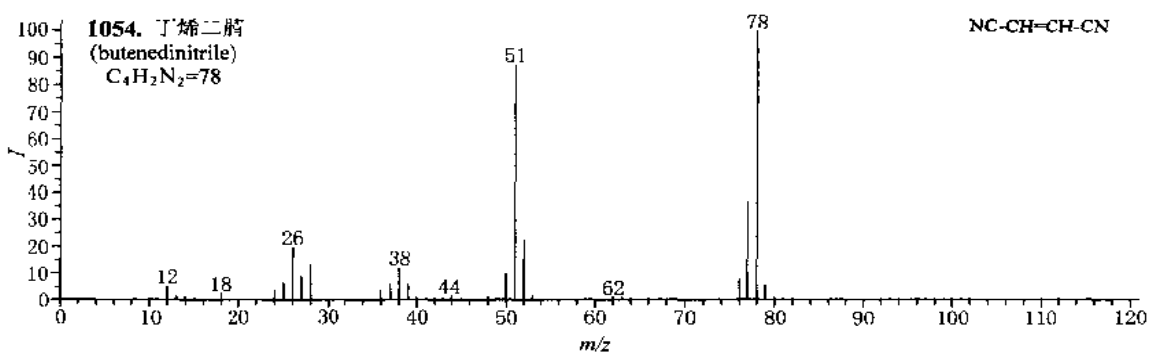
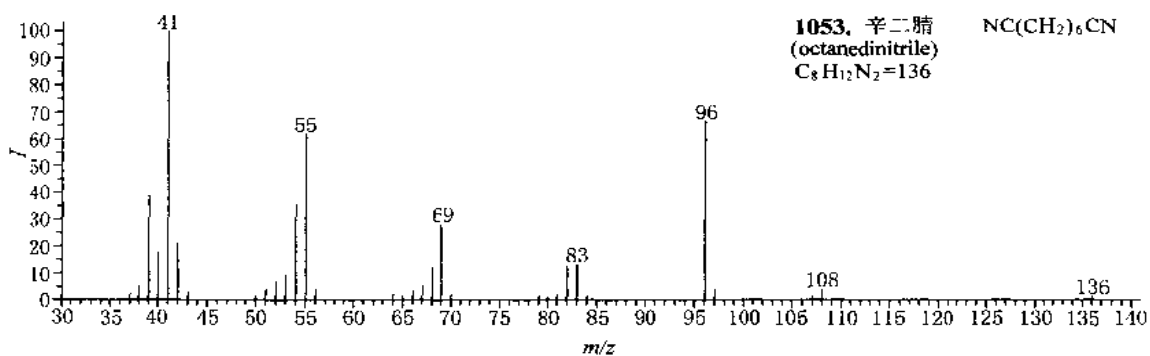
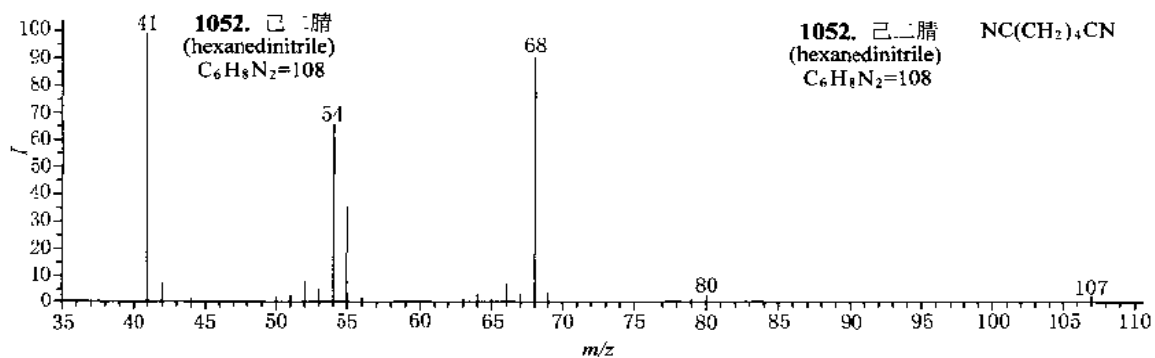
(6) 丁炔二脒 (1056) 的主要裂解是  $M-CN$ 。

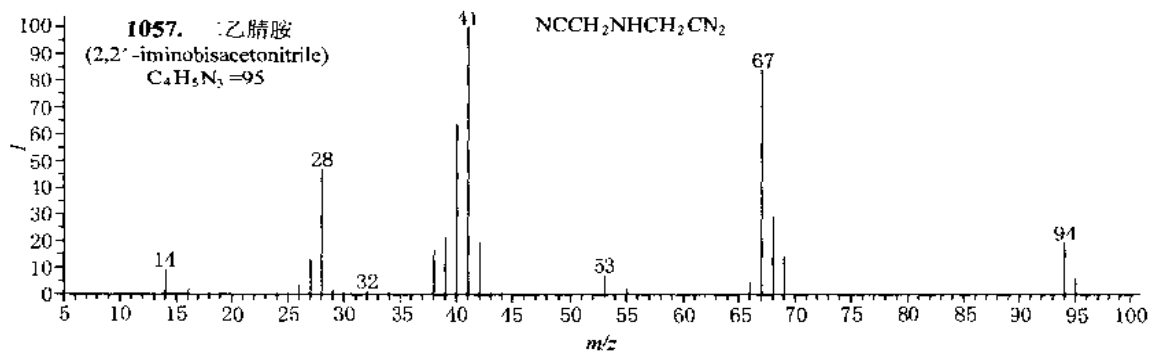
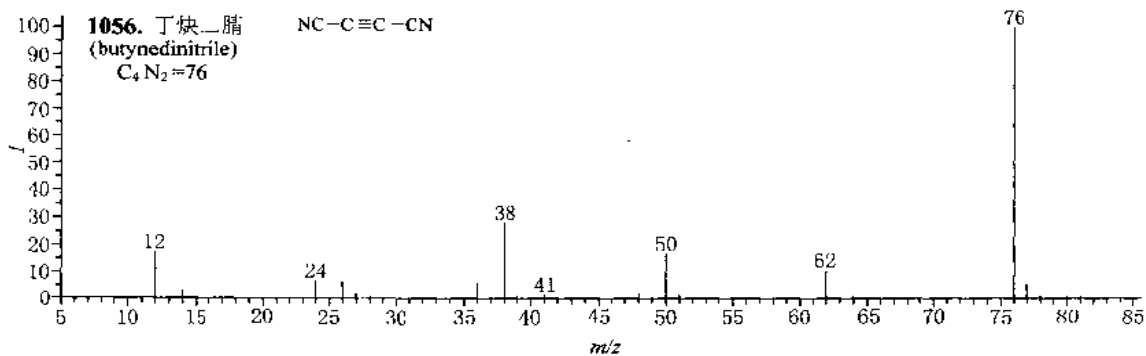
(7) 二乙脒胺 (1057) 的主要裂解是  $M-H-HCN$ 。







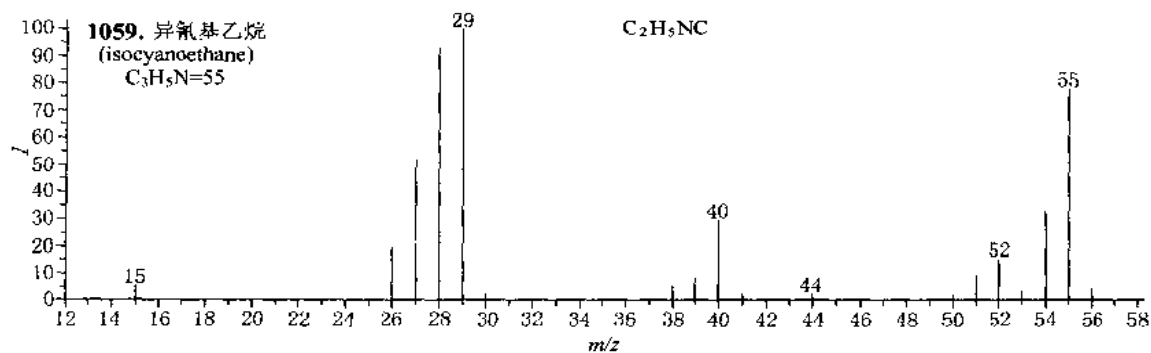
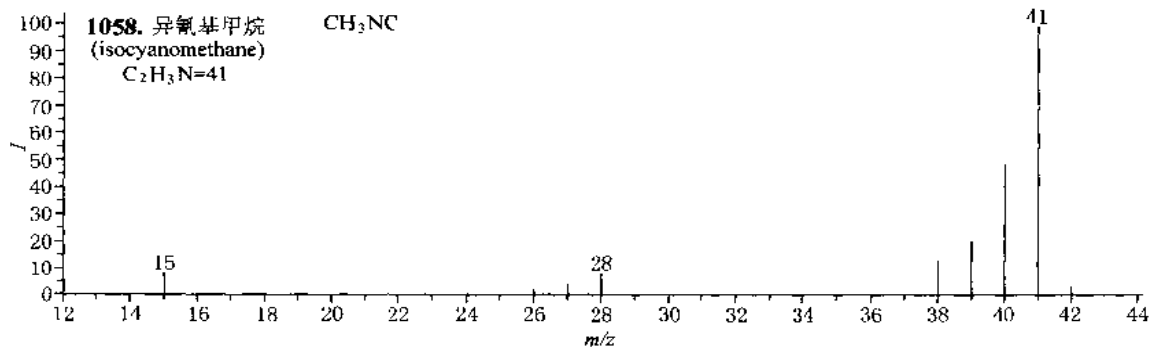




## 二、脂肪异腈类

(1) 异氰基甲烷 (1058) 和异氰基乙烷 (1059) 都有强的  $M-H$  离子。

(2) 异氰基乙烷 (1059) 尚有  $M-CH_3$  和  $M-NC$  离子。



## 三、芳香腈类

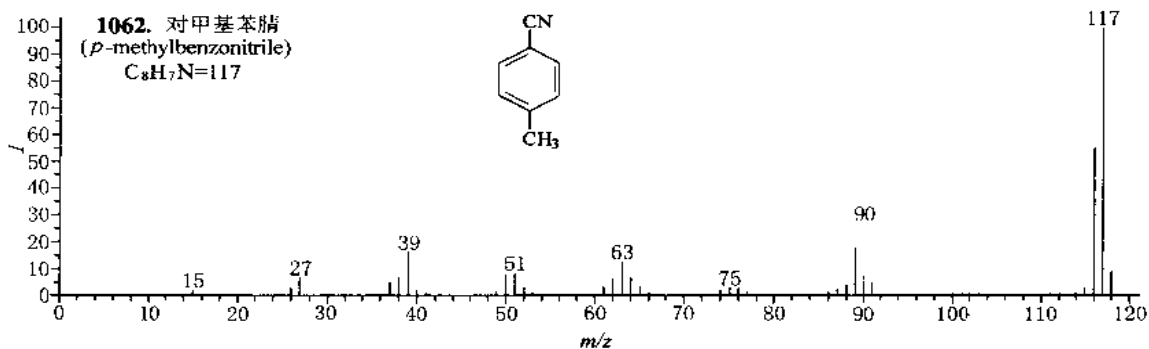
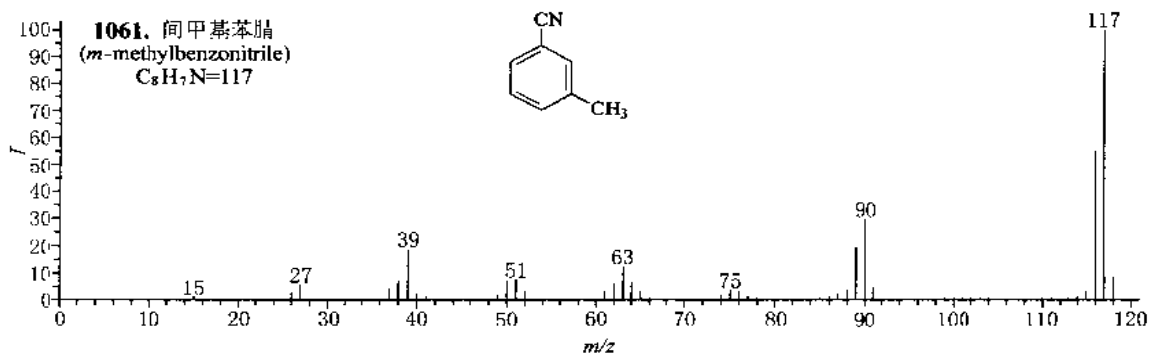
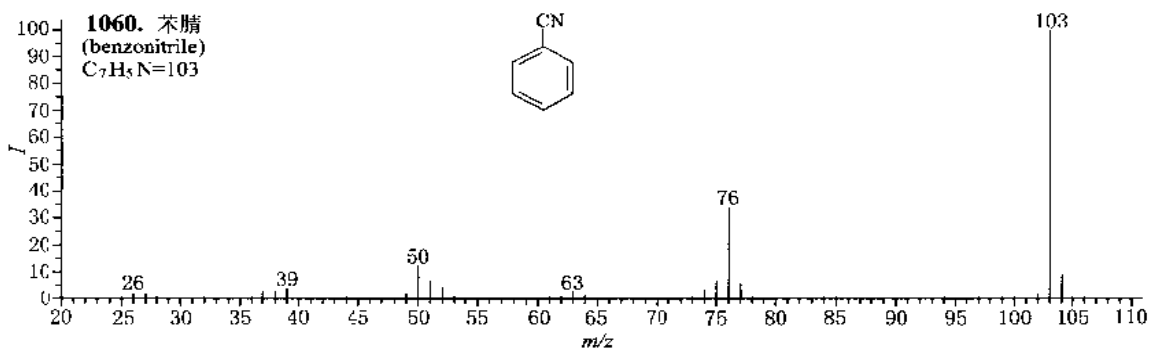
(1) 苯腈 (1060) 和甲基苯腈 (1061, 1062) 都有  $M-HCN$  离子, 然后的裂解是失去乙炔。

(2) 甲苯腈类 (1061, 1062) 尚有强的  $M-H$  离子, 然后的裂解也是失去乙炔。

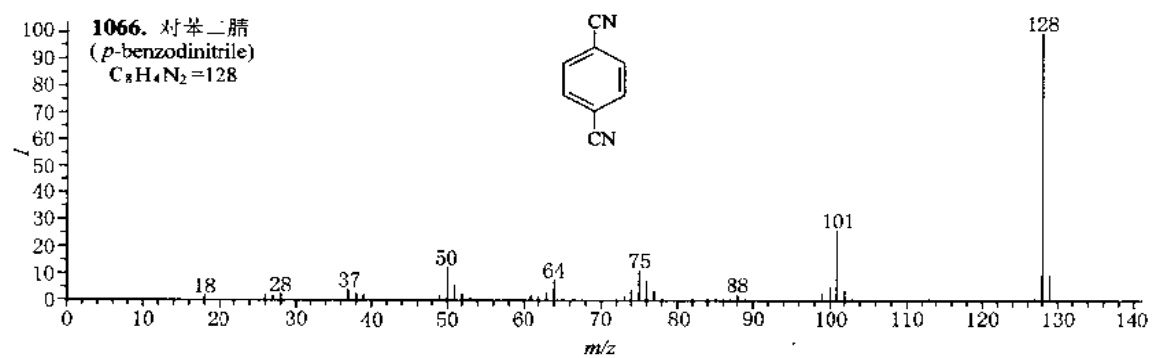
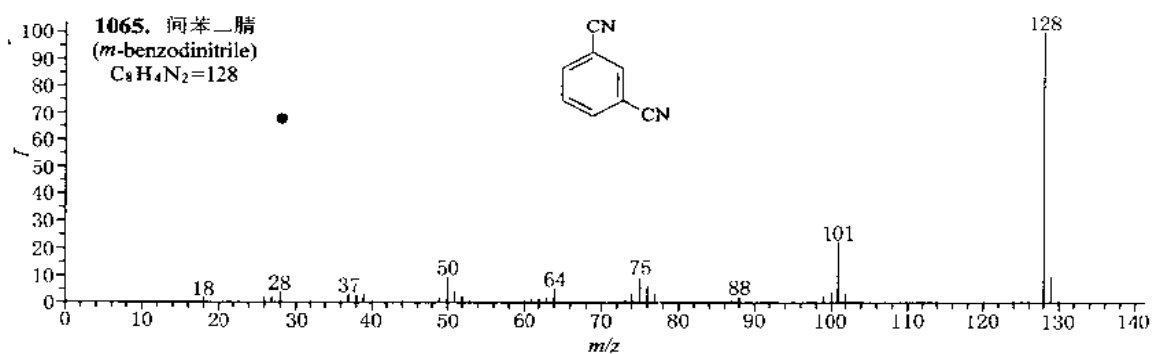
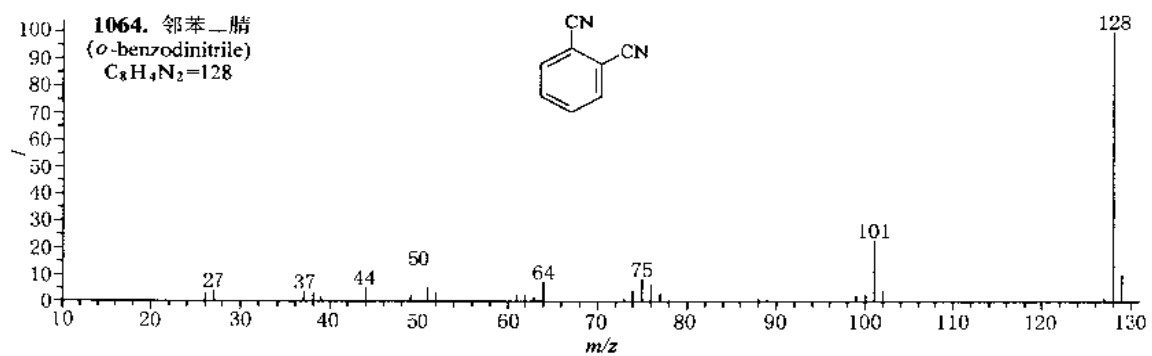
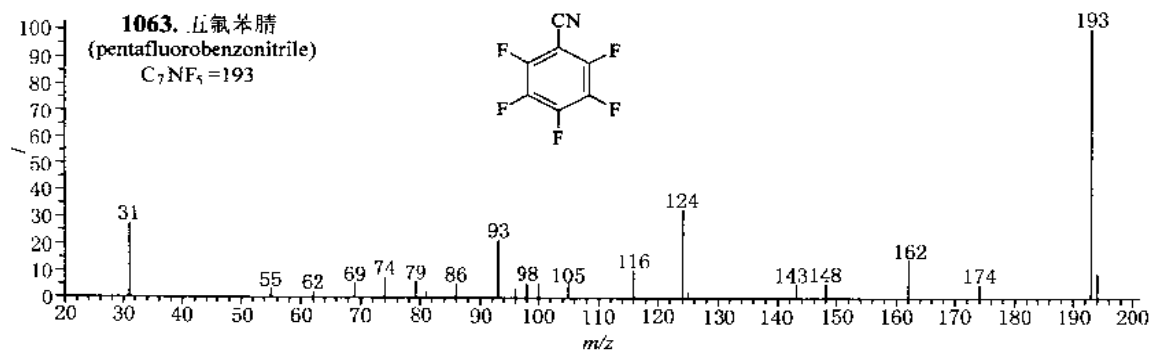
(3) 五氟苯腈 (1063) 的主要裂解途径是  $M-F$  和  $M-CF-F-F$ 。

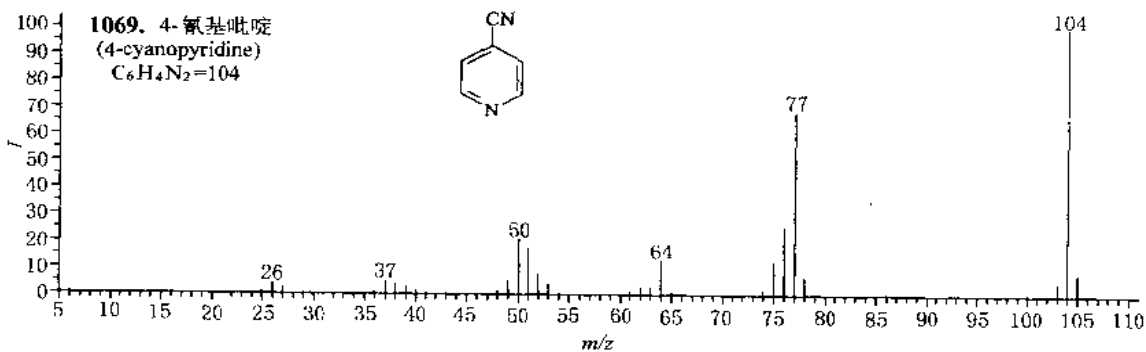
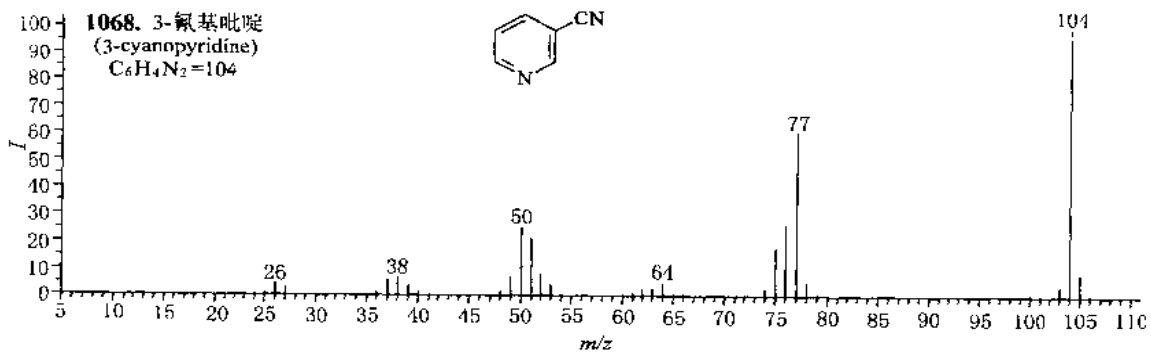
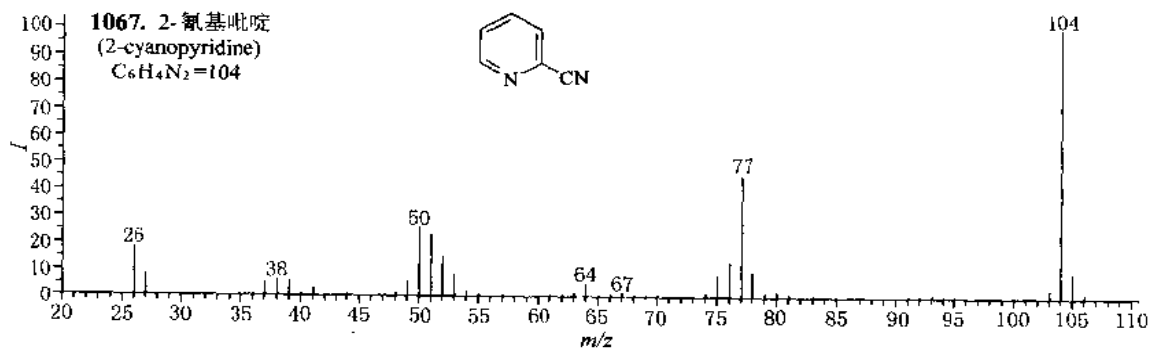
(4) 苯二腈类 (1064~1066) 的裂解途径是  $M-HCN-C_2H_2$ 。

(5) 氰基吡啶类 (1067~1069) 都是  $M-HCN-C_2H_2$ 。



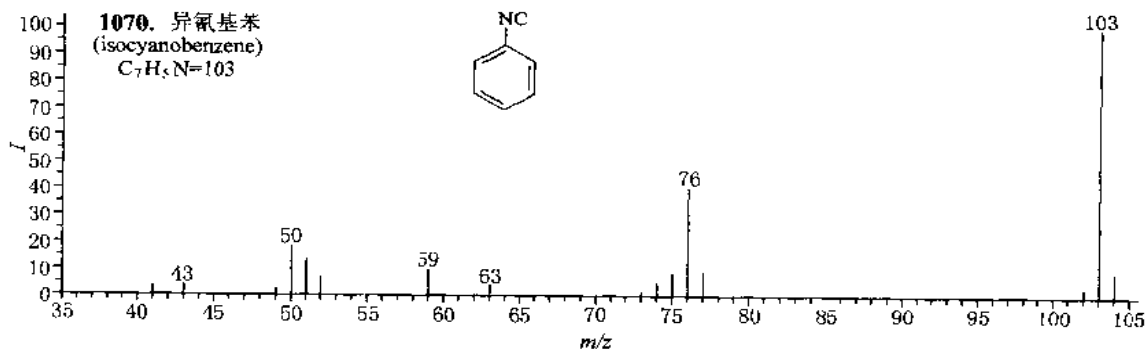


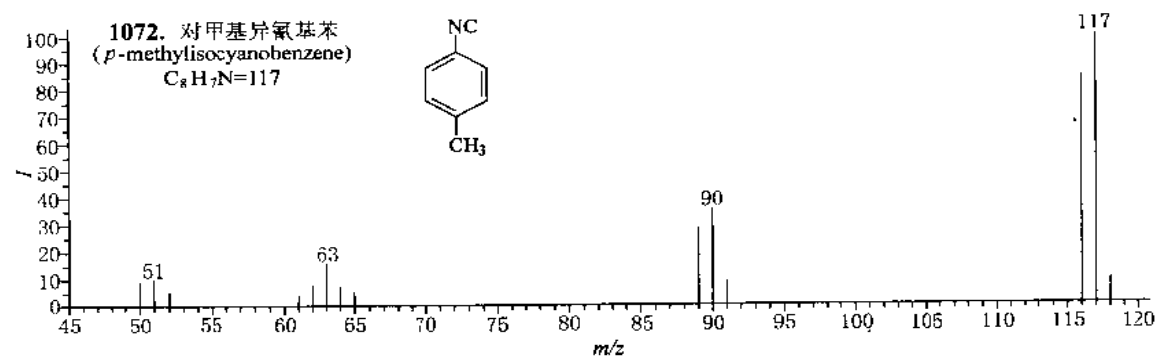
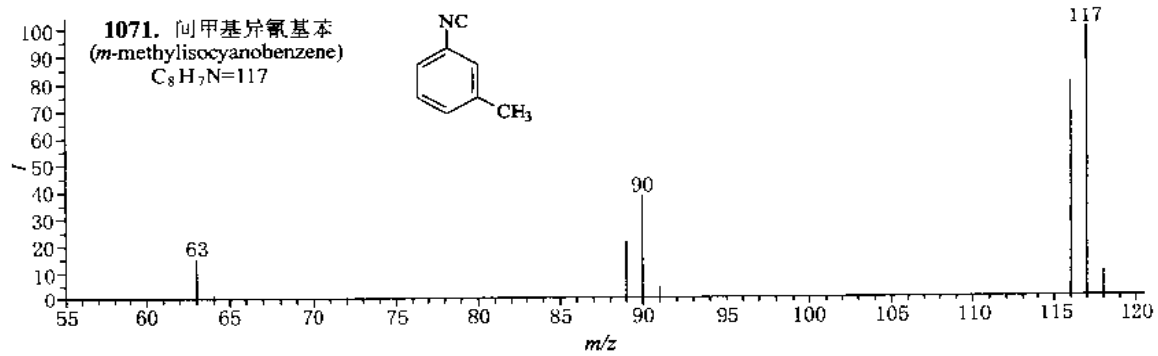




#### 四、芳香异腈类

- (1) 异氰基苯 (1070) 的裂解途径是  $M-HNC-C_2H_2$ 。
- (2) 甲基异氰基苯 (1071, 1072) 的裂解与甲苯腈类一样。





## 第九章 内酯与氧杂环类

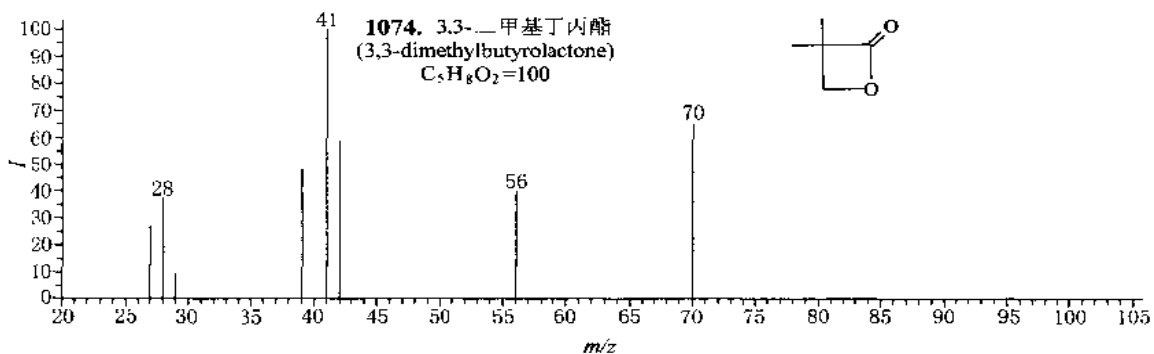
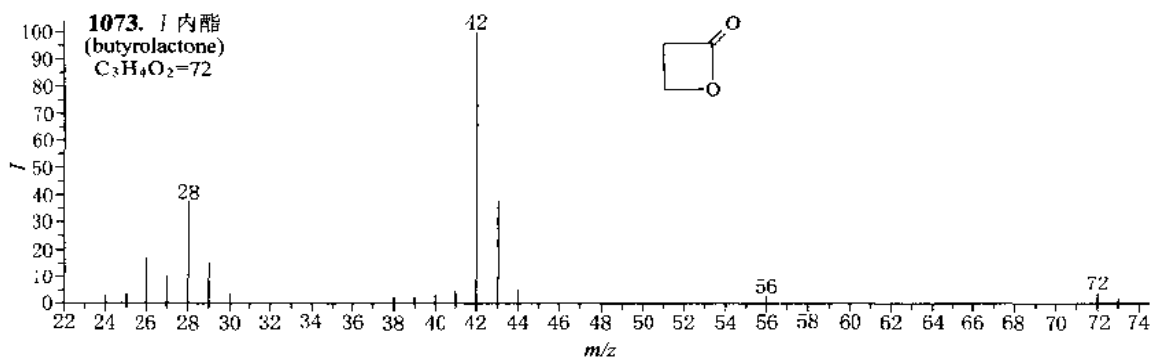
### 第一节 内酯类

#### 一、丁内酯类

(1) 丁内酯 (1073) 和 3,3-二甲基丁内酯 (1074) 都有  $M-30$  的离子, 失去的部分可能是甲醛, 另外都有  $M-44$  离子, 失去的部分应当是二氧化碳。

(2) 丁内酯 (1073) 有  $M-29$  离子, 生成的离子应当是乙酰基离子, 而失去的应是甲酰基。

(3) 3,3-二甲基丁内酯 (1074) 还有  $M-30$  离子, 再失一氧化碳的离子, 产物是  $C_3H_6^+$  离子。



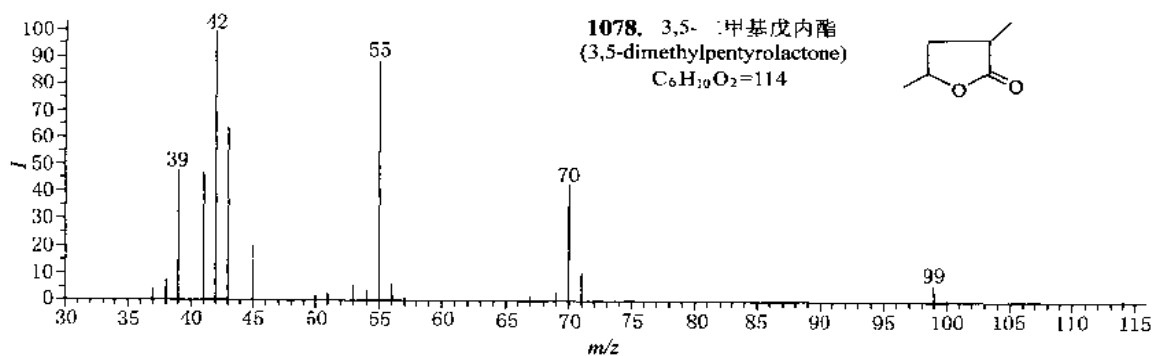
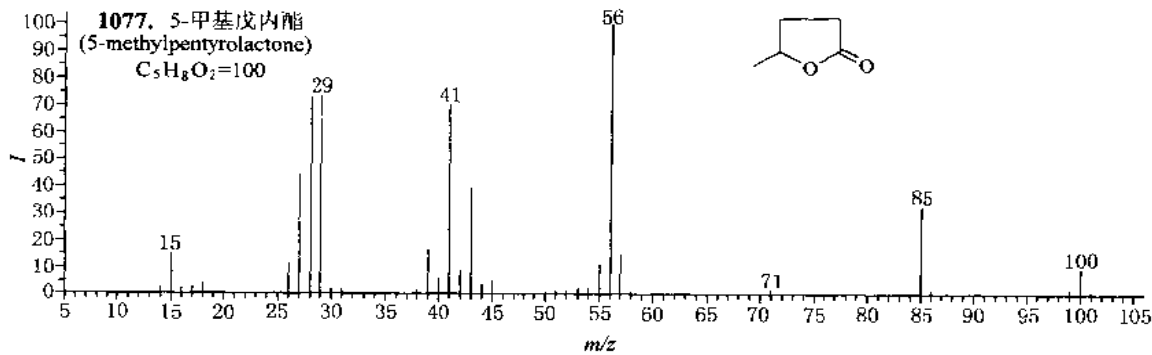
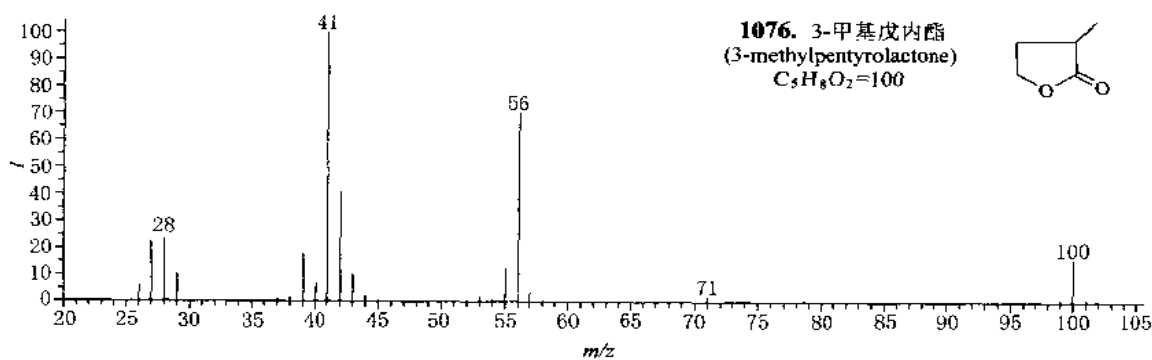
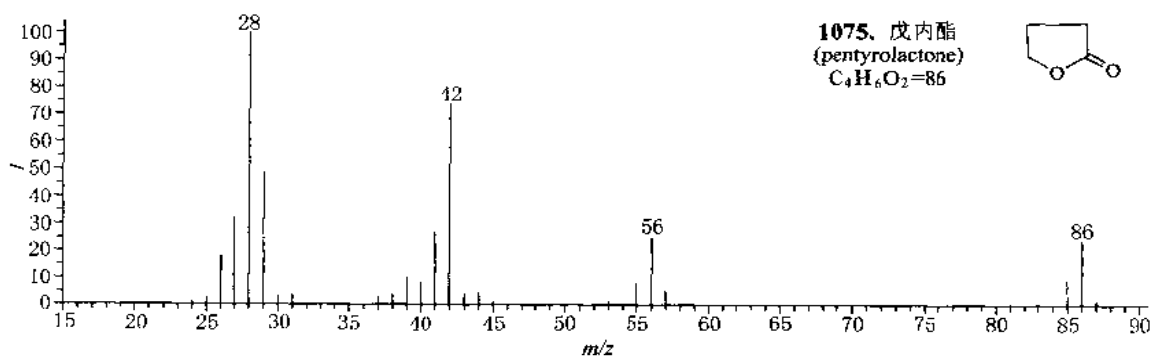
#### 二、戊内酯类

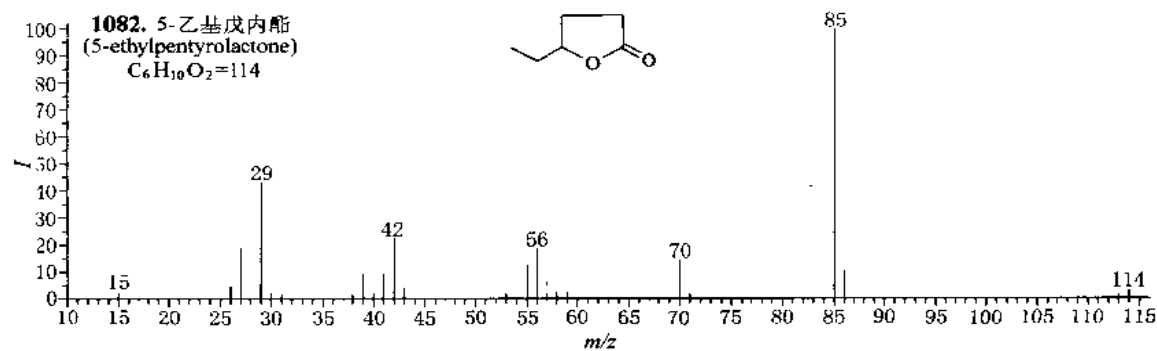
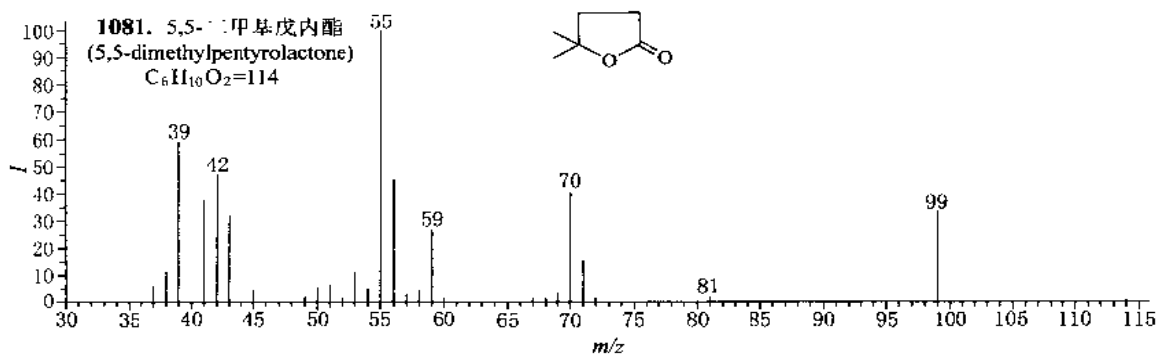
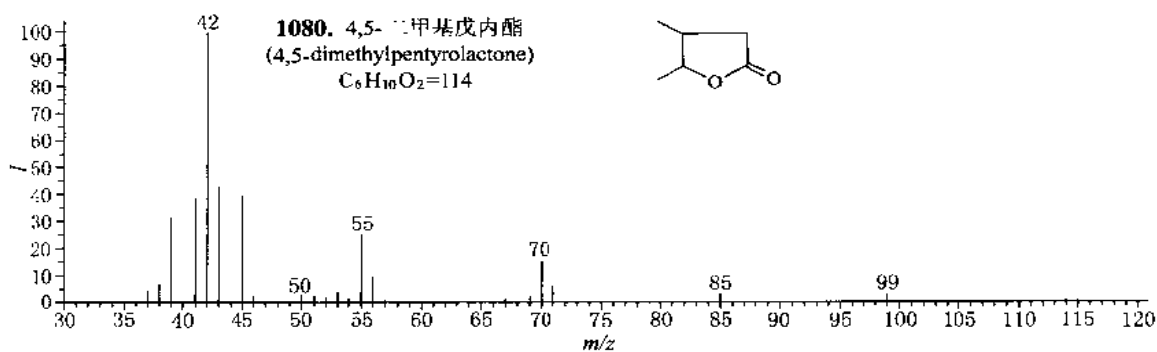
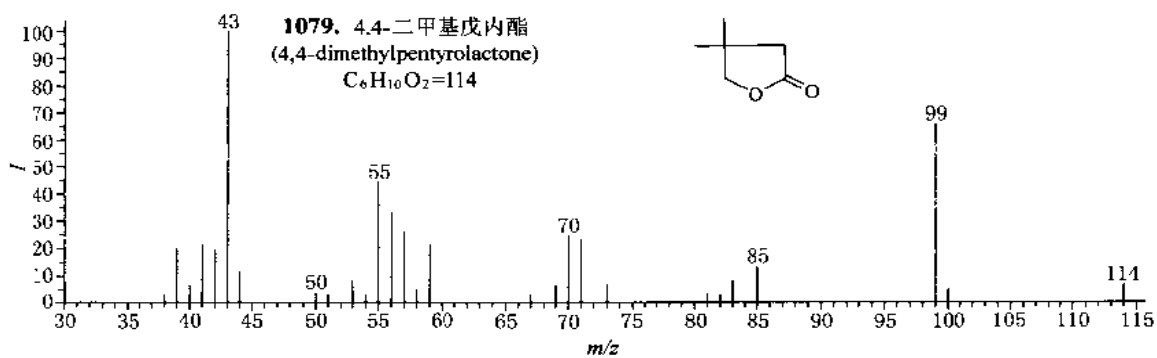
(1) 戊内酯类 (1075~1077) 的基本裂解方式是失去二氧化碳。

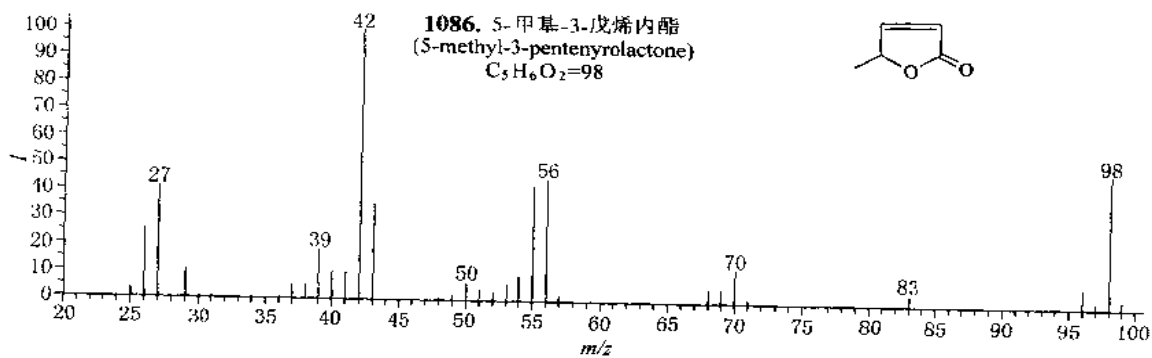
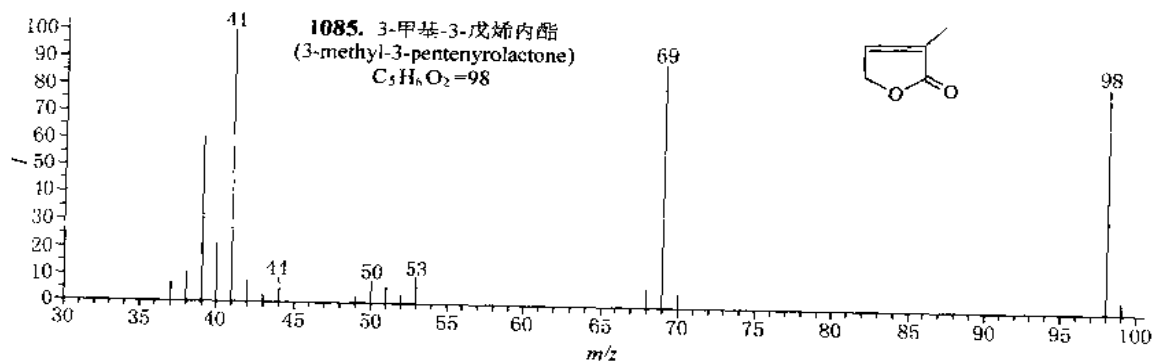
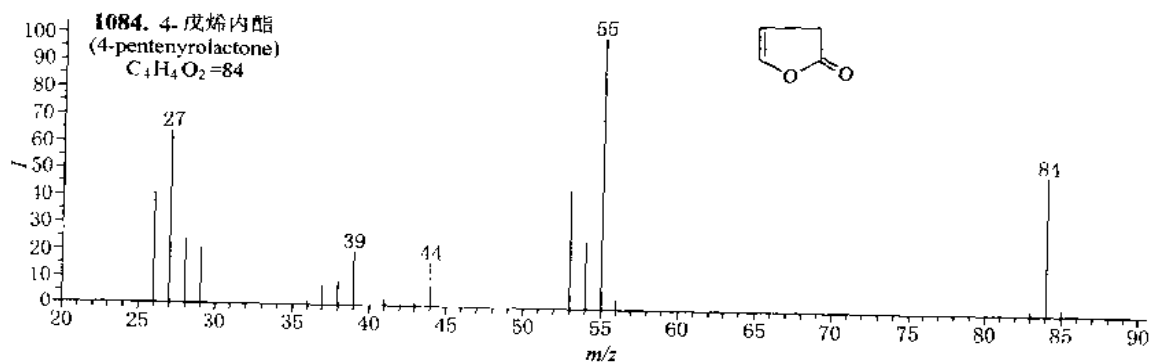
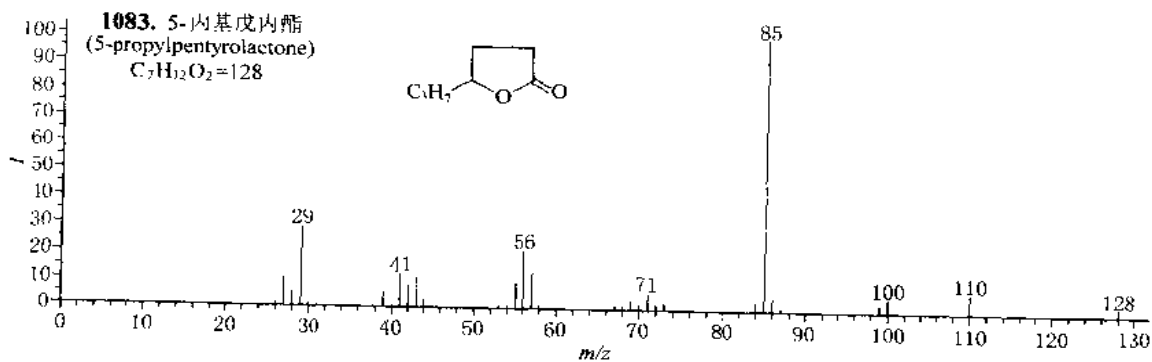
(2) 酯氧邻位有烷基取者 (1078, 1080, 1083, 1086, 1088~1091) 都易失去这个烷基。

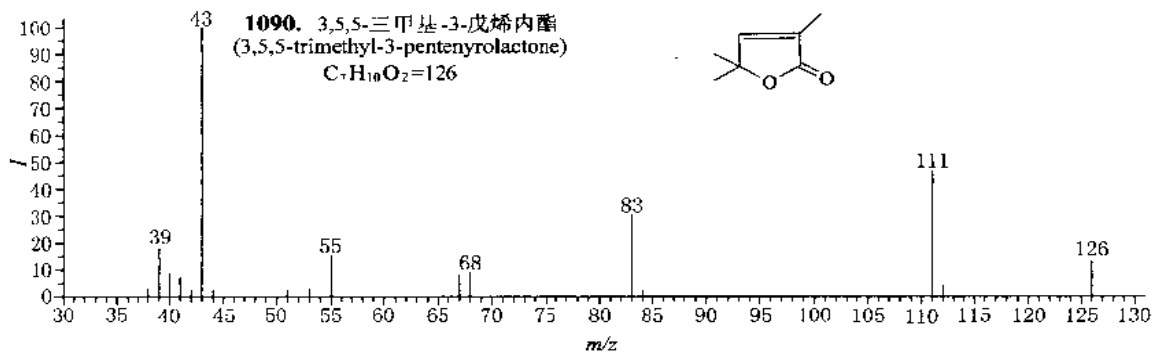
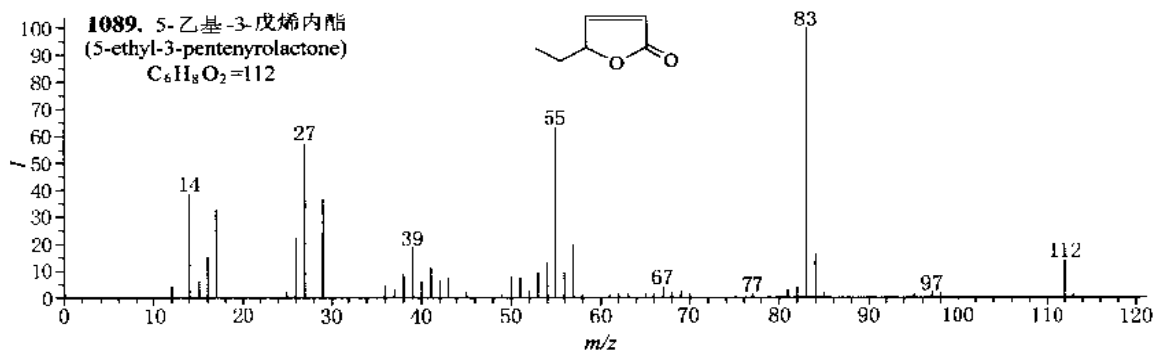
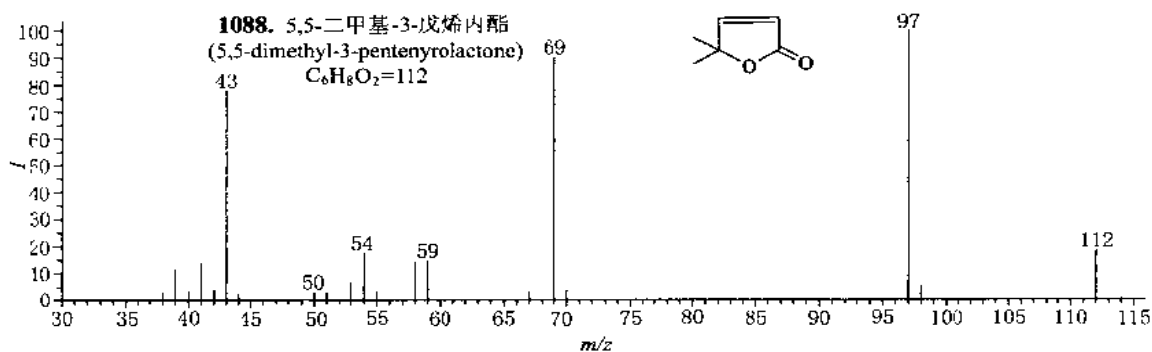
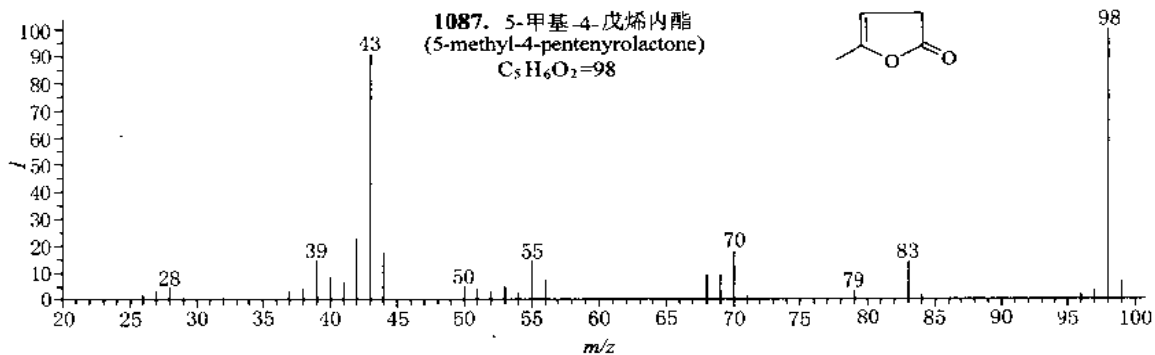
(3) 4-戊烯内酯 (1084) 和 3-甲基-3-戊烯内酯 (1085) 都有  $M-CHO$  离子, 其他不饱和内酯的主要离子都是  $M-烷基$  和  $M-烷基-CO$ , 5-戊基-3-戊烯内酯 (1091) 的裂解尚不清楚。

(4) 4-氧基戊内酯 (1092) 的裂解途径是  $M-CO-CH_2O$ 。

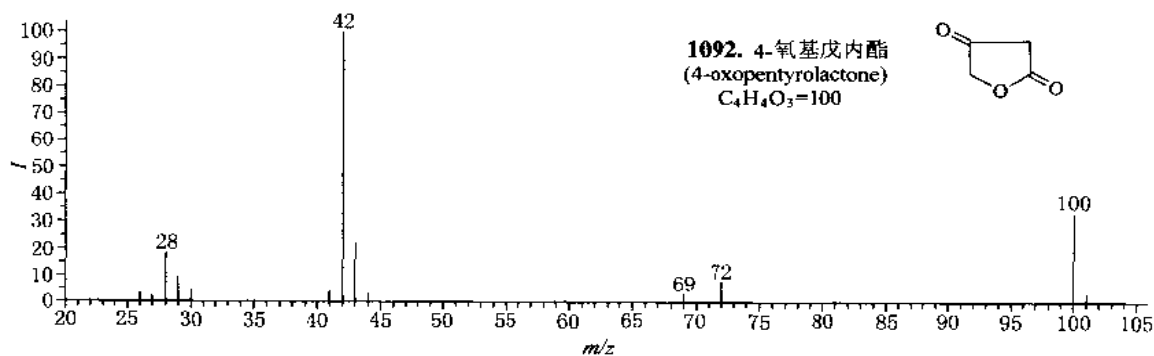
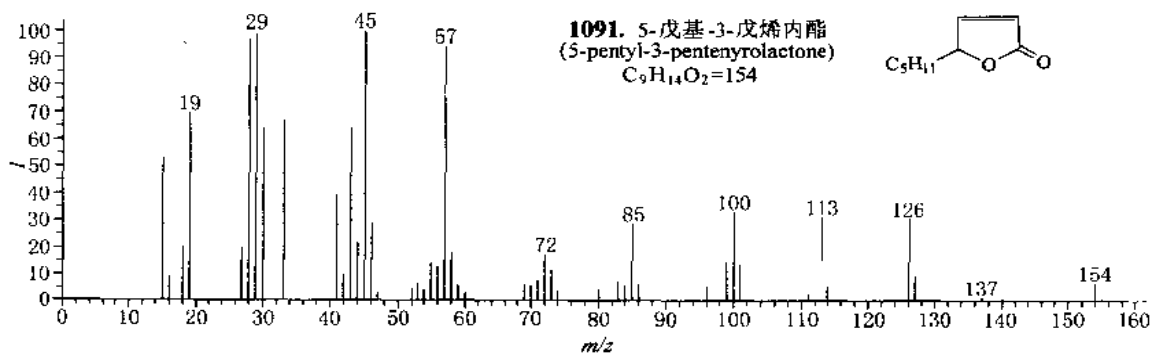






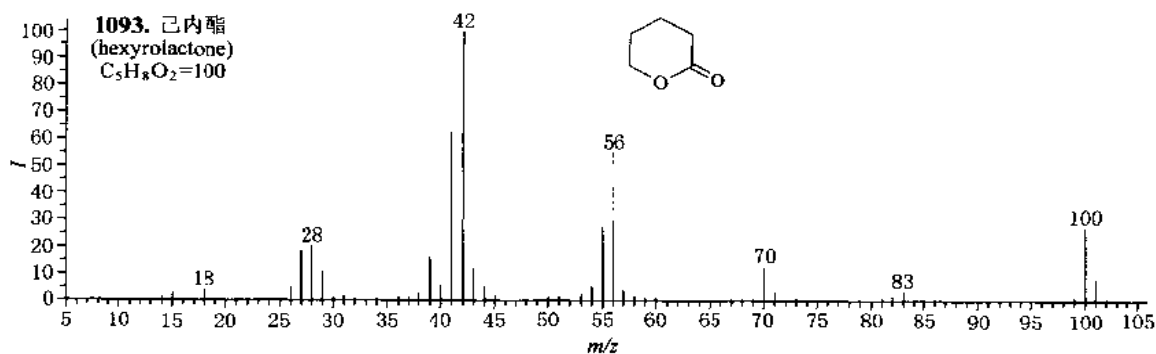


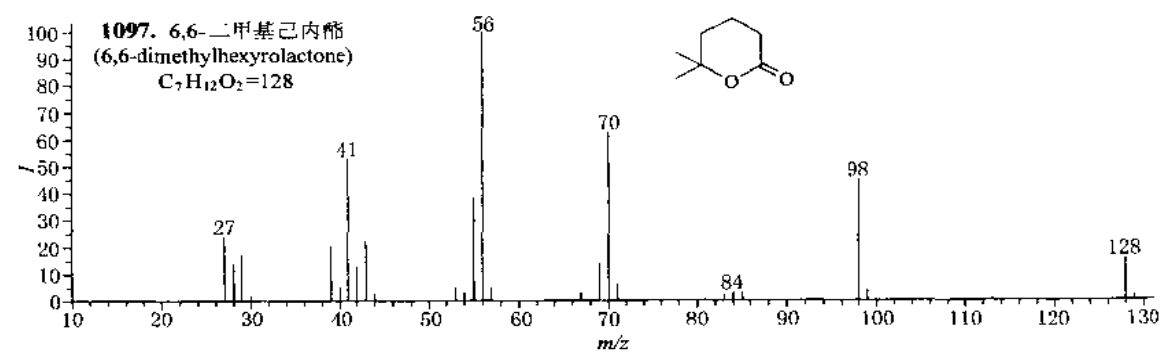
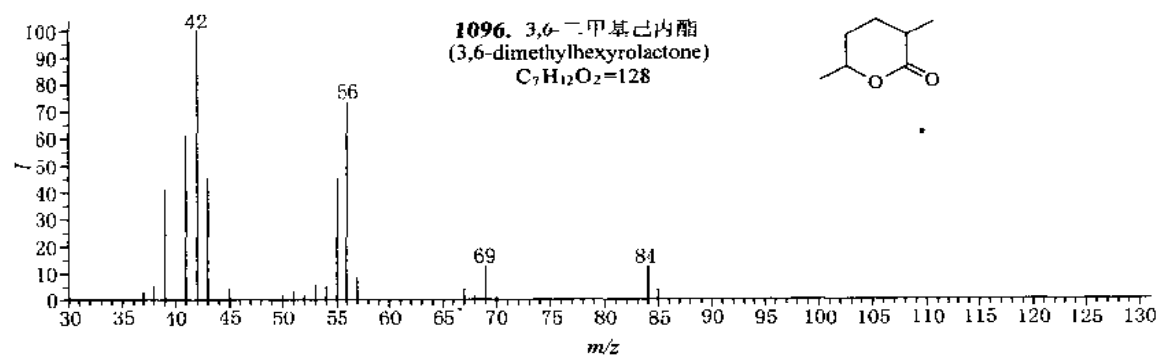
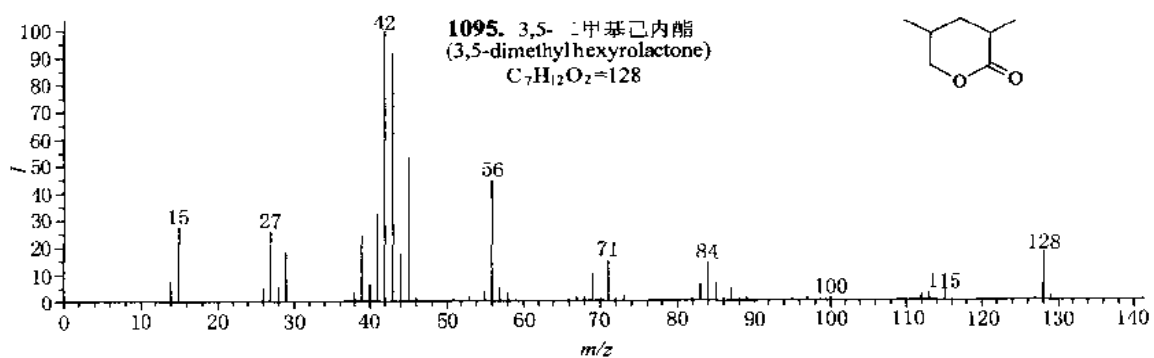
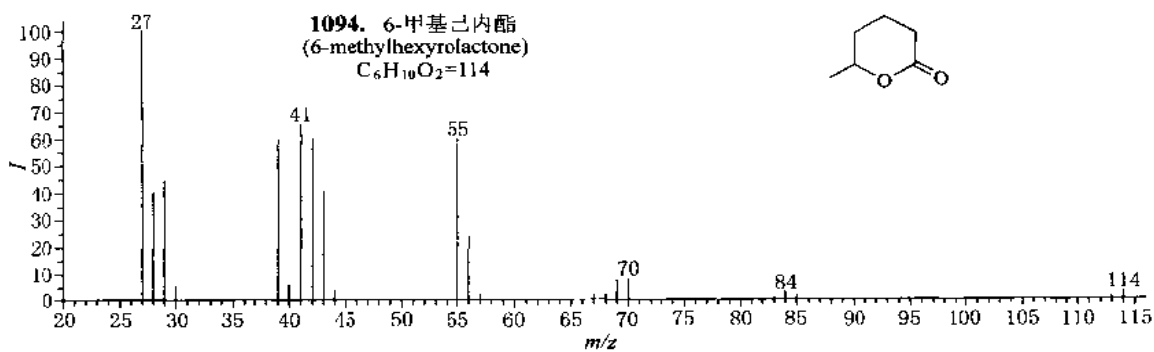


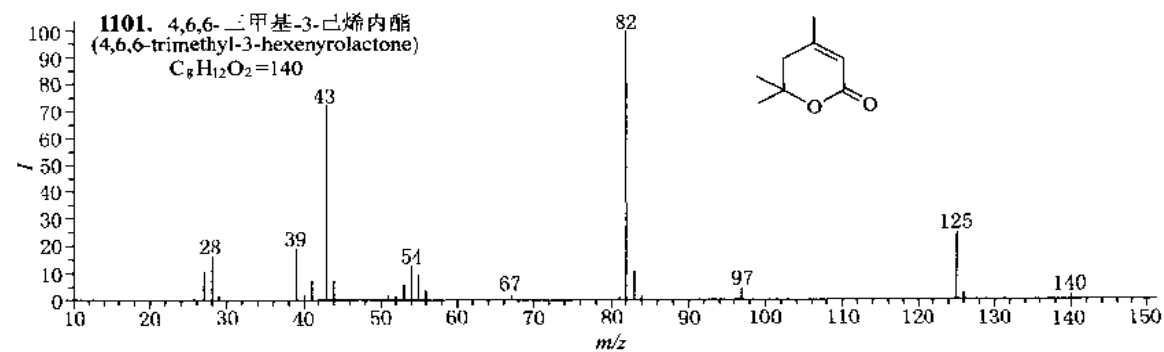
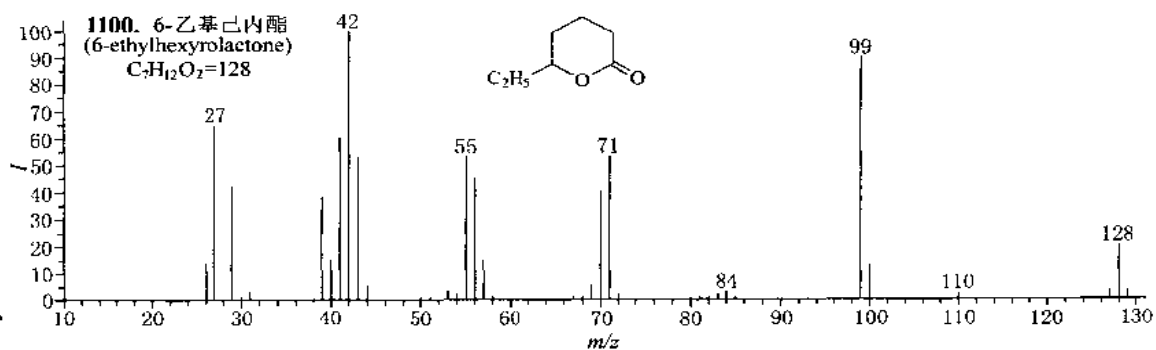
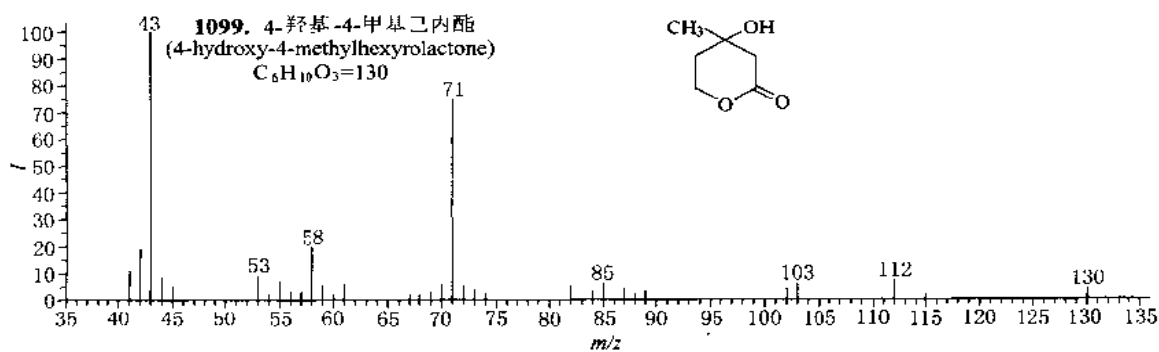
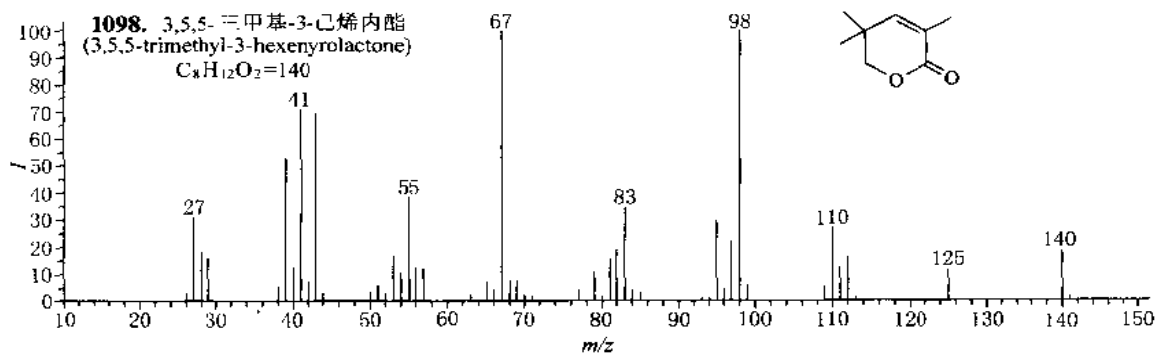


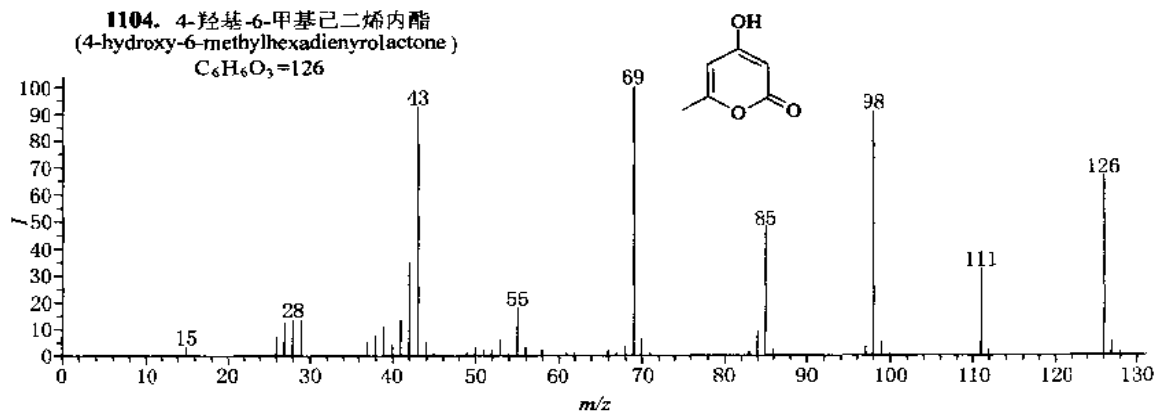
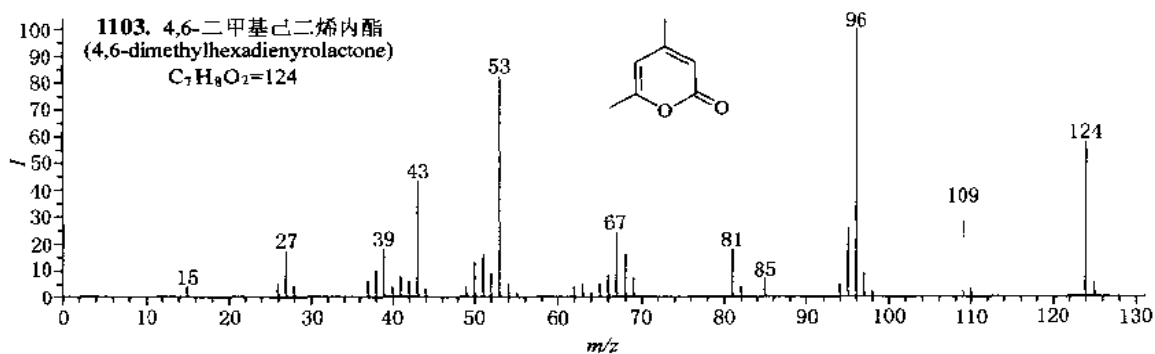
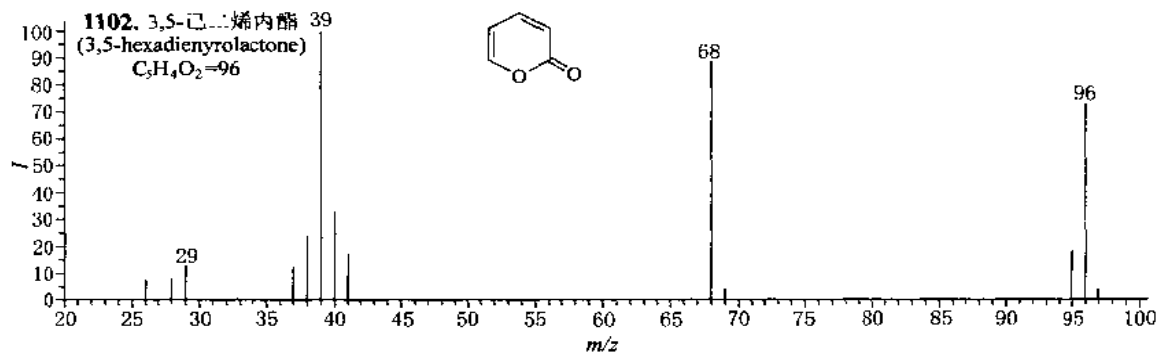
### 三、己内酯类

- (1) 己内酯 (1093) 及其烷基取代物 (1094~1098) 一般有  $M-CO_2$  离子。
- (2) 4-羟基-4-甲基己内酯 (1099) 有显著的  $HO-C(CH_3)=CH-CH_2$  离子 ( $m/z$  71)。
- (3) 6-乙基己内酯 (1100) 的裂解途径是  $M-C_2H_5-CO$  和  $M-C_2H_5-CO_2$ 。
- (4) 4,6,6-三甲基-3-己烯内酯 (1101) 的主要碎片离子来自分子离子失去丙酮。
- (5) 3,5-己二烯内酯类 (1102~1104) 都有  $M-CO$  离子。





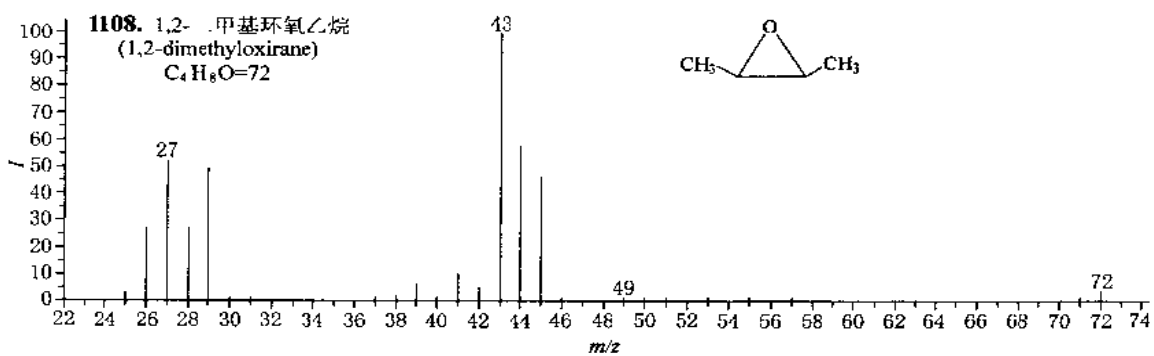
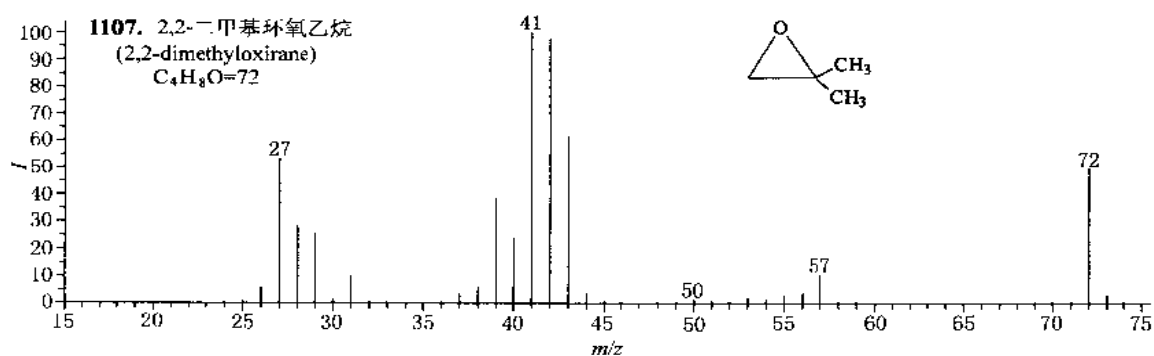
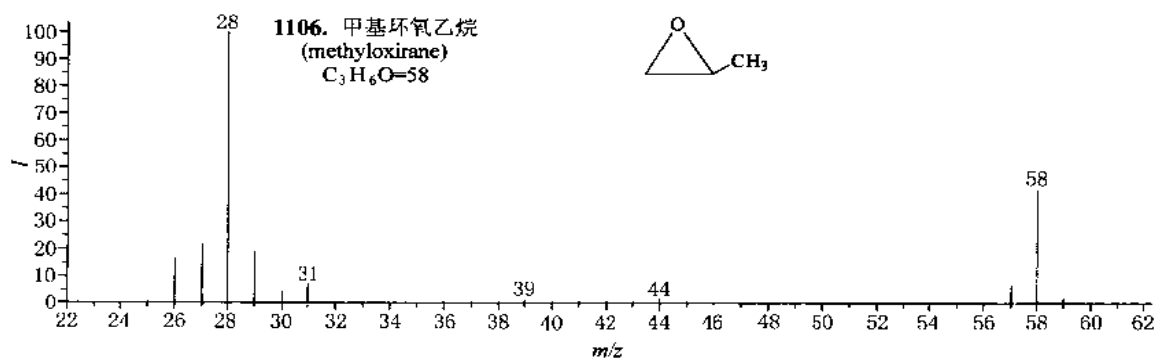
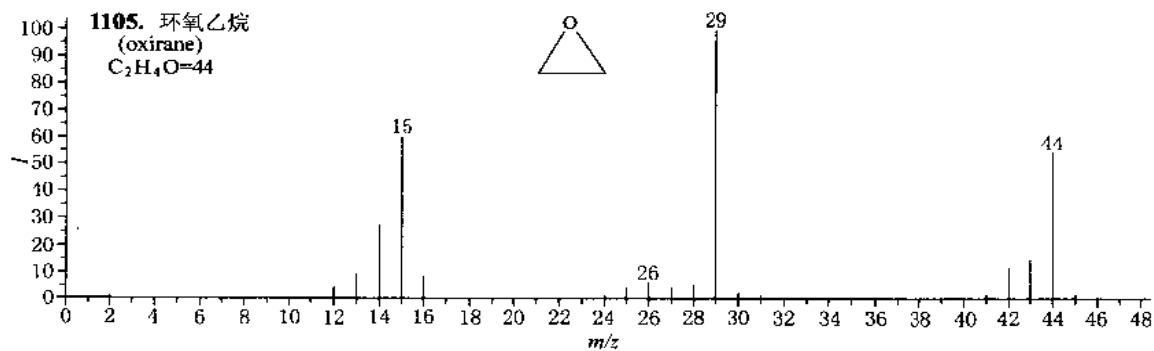


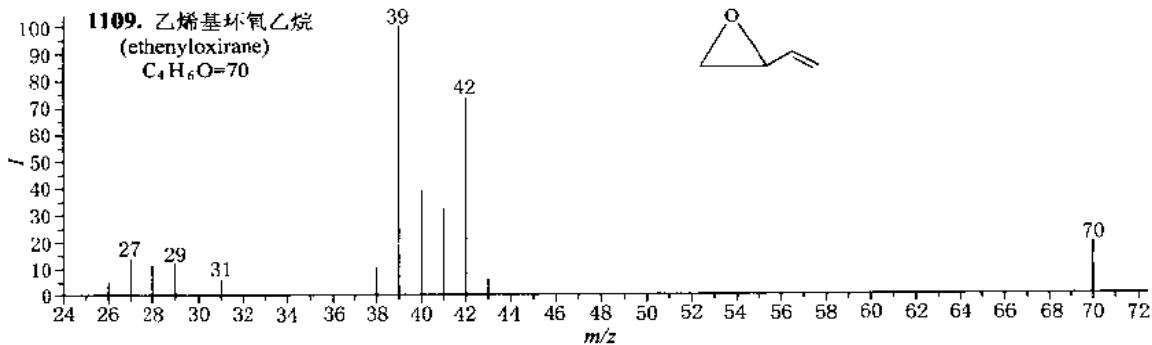


## 第二节 氧杂环类

### 一、环氧乙烷类

- (1) 环氧乙烷 (1105) 的裂解是  $M-CH_3$ 。
- (2) 甲基环氧乙烷 (1106) 和 2,2-二甲基环氧乙烷 (1107) 的裂解都是  $M-CH_2O$ , 1,2-二甲基环氧乙烷 (1108) 的主要碎片离子是  $CH_3CH=O^+$ ,  $CH_3CHO^+$  和  $CH_3CO^+$ 。
- (3) 乙烯基环氧乙烷 (1109) 也有  $M-CH_2O$  离子, 另有  $M-CH_2CH$  离子。

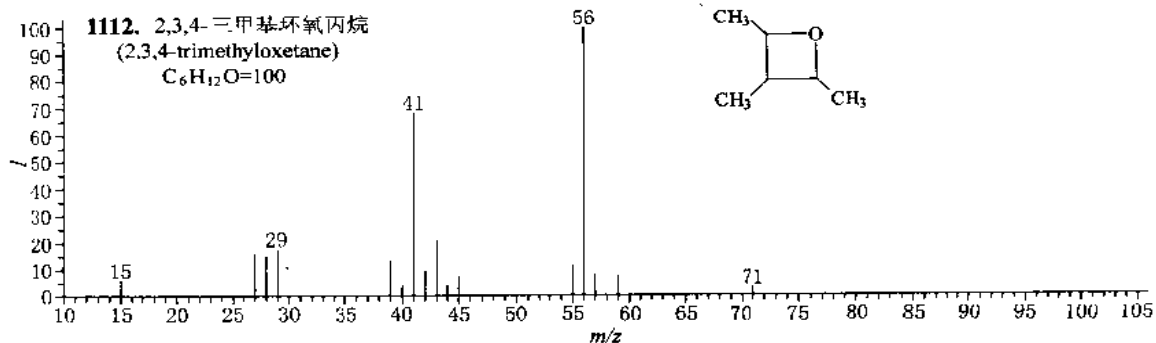
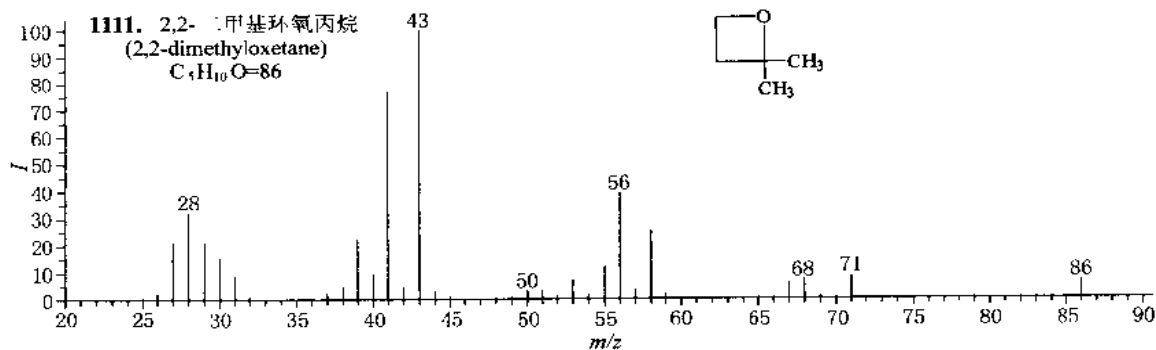
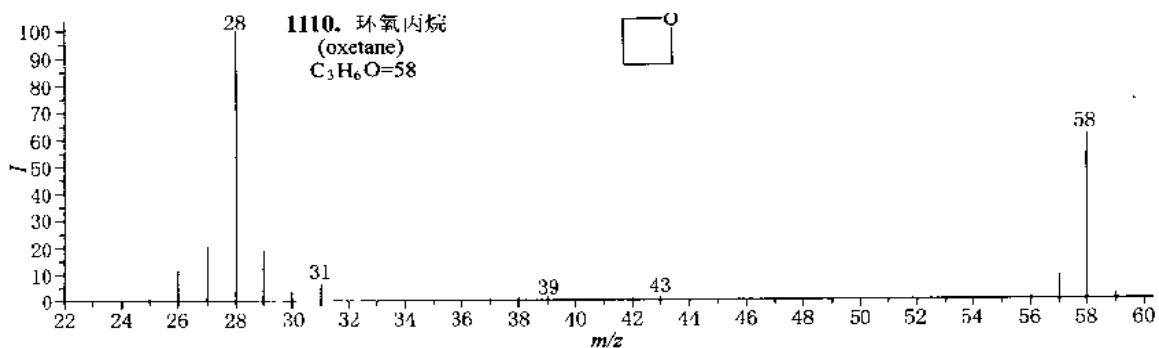




## 二、环氧丙烷类

(1) 环氧丙烷类 (1110~1112) 都有  $M-CH_2O$  或  $M-CH_3CHO$  离子。

(2) 2,2-二甲基环氧丙烷 (1111) 另有  $M-C_2H_4$  离子, 该离子实际具有丙酮结构, 由其失去甲基可得乙酰基离子  $m/z$  43。



### 三、四氢呋喃类

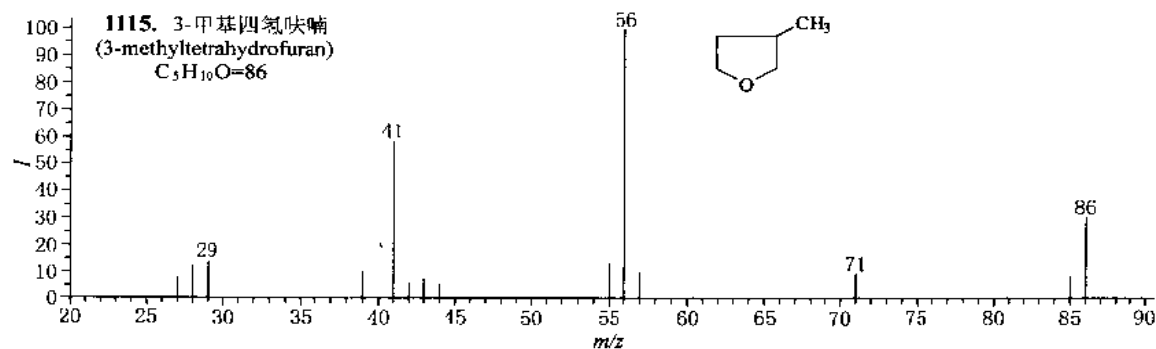
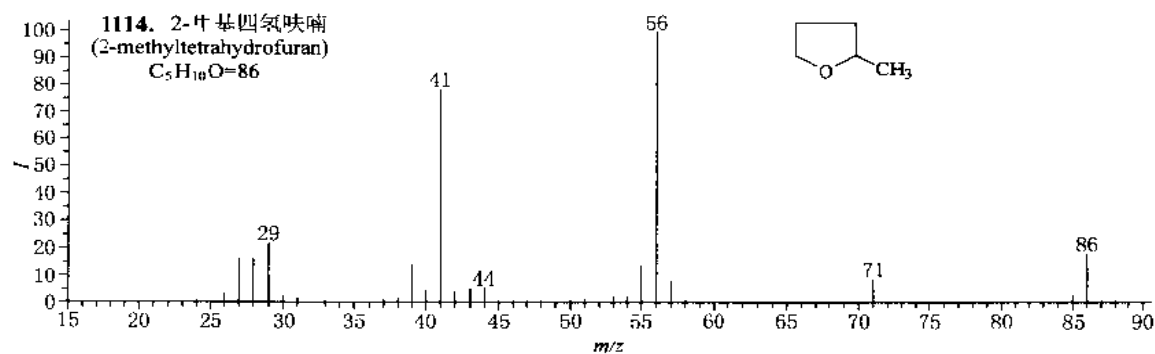
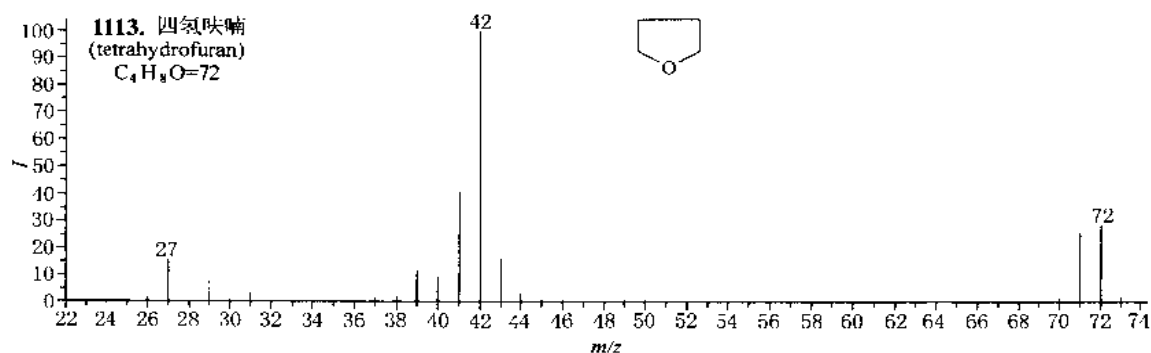
(1) 四氢呋喃 (1113) 和甲基四氢呋喃类 (1114~1120) 都有  $M-CH_2O$  或  $M-CH_3CHO$  离子, 有的也有  $M-CH_3$  再失甲醛或乙醛的离子。

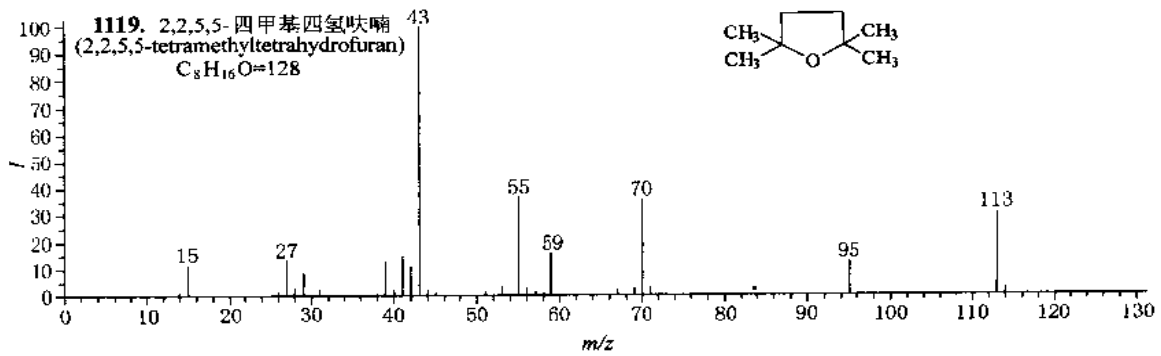
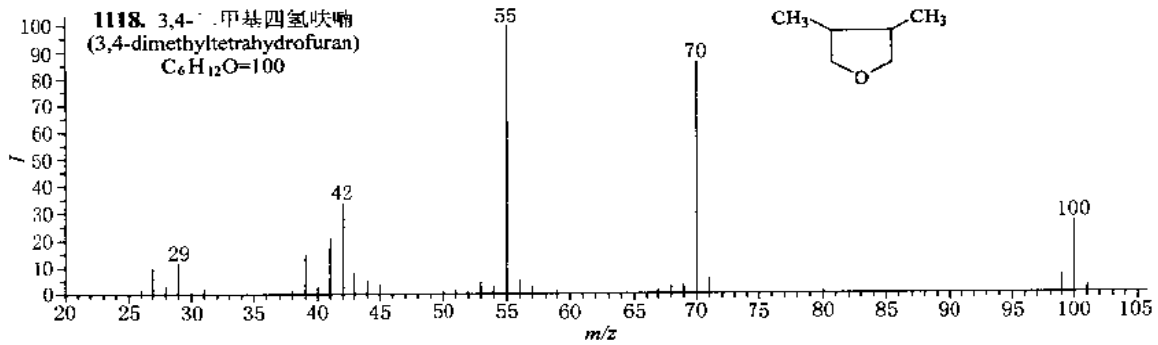
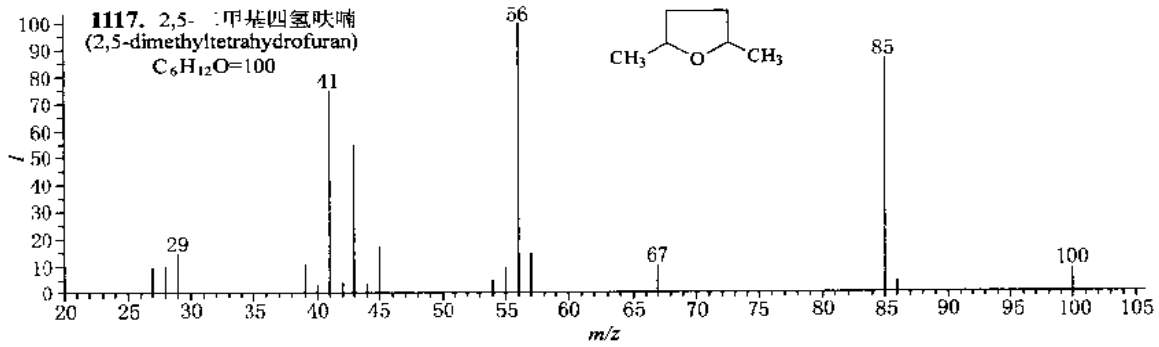
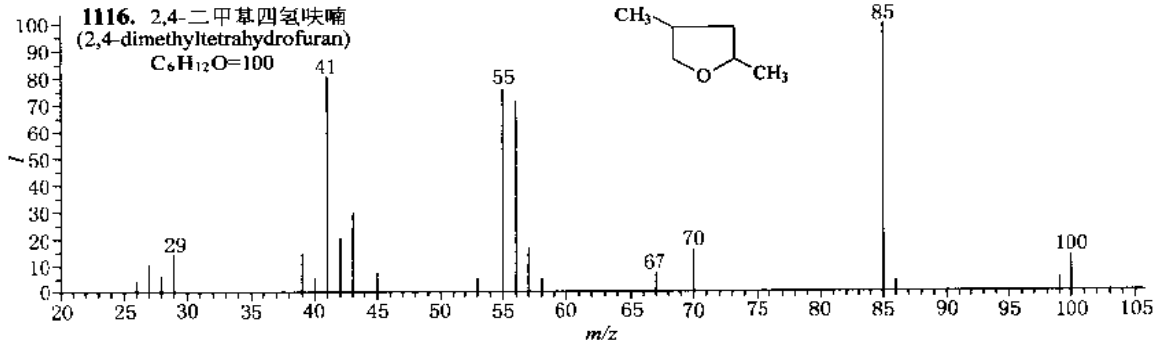
(2) 四甲基四氢呋喃类 (1119, 1120) 则是失去丙酮。

(3) 2,5-二乙基四氢呋喃 (1121) 则是  $\alpha$ -裂解失去乙基和再重排失水, 另外还有  $M-C_2H_5CHO$  离子。

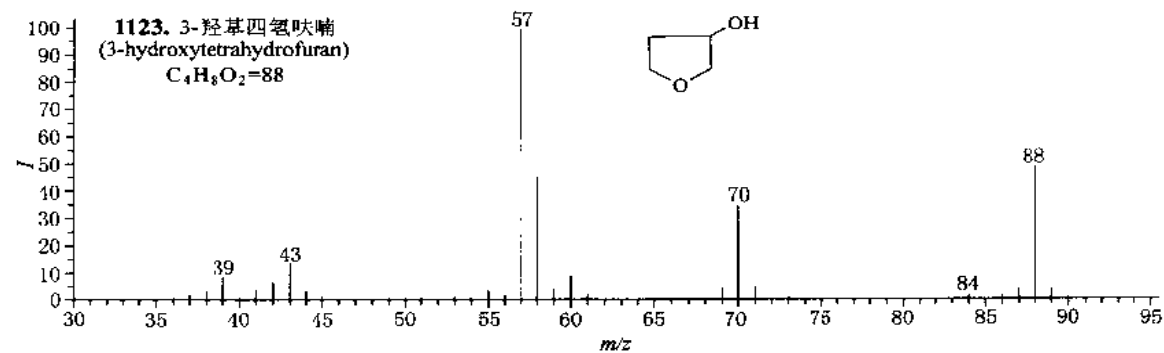
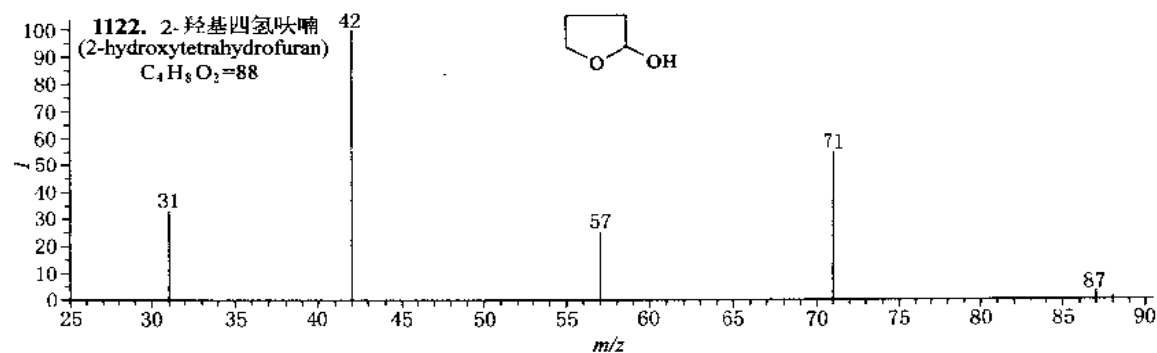
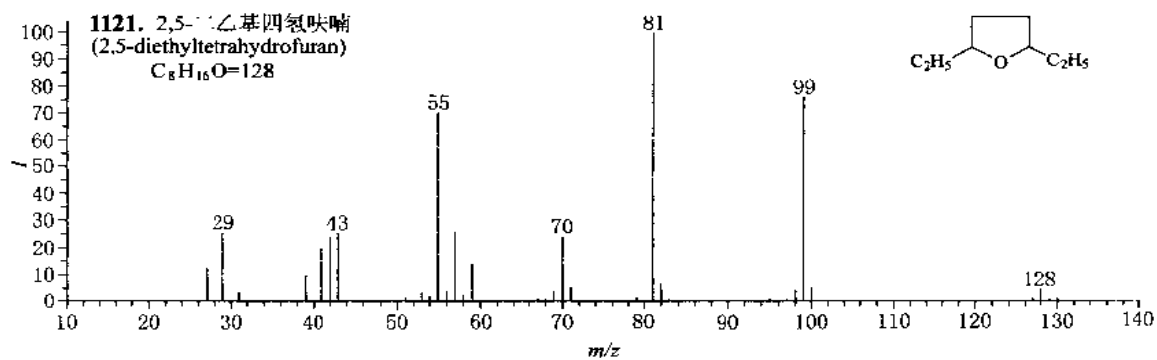
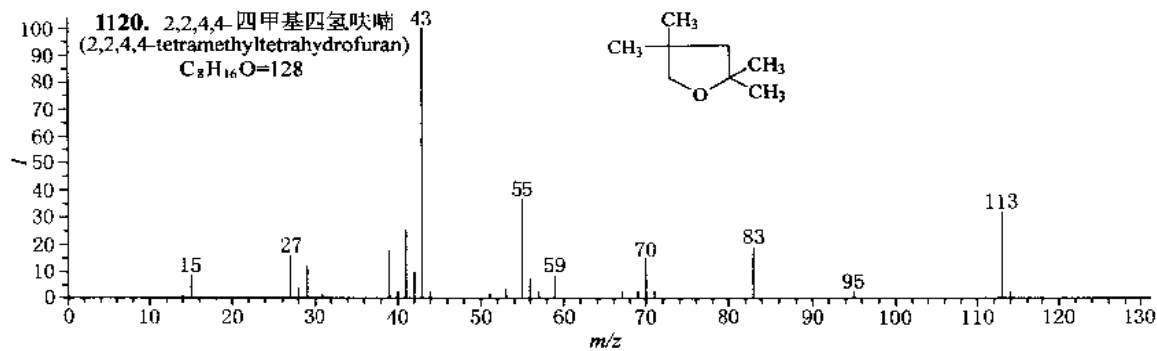
(4) 2-羟基取代的四氢呋喃 (1122) 主要碎片离子有  $M-H$ ,  $M-OH$ ,  $M-H-CH_2O$  和  $M-HOCHO$ , 3-羟基取代者 (1123) 则主要有  $M-H_2O$  和  $M-OCH_3$  离子。

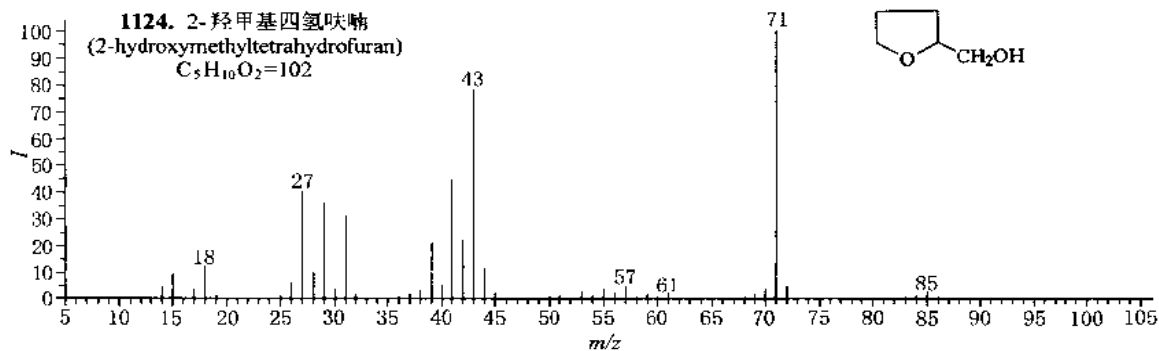
(5) 2-羟甲基四氢呋喃 (1124) 的裂解途径是  $M-CH_2OH-C_2H_4$ 。





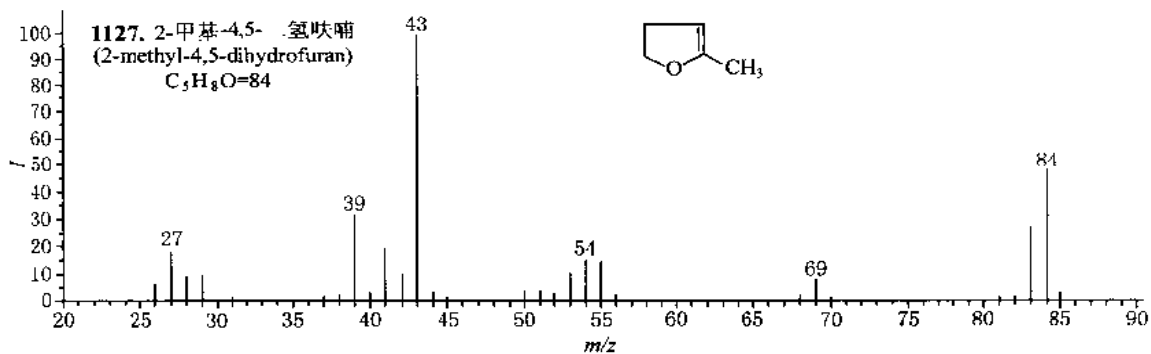
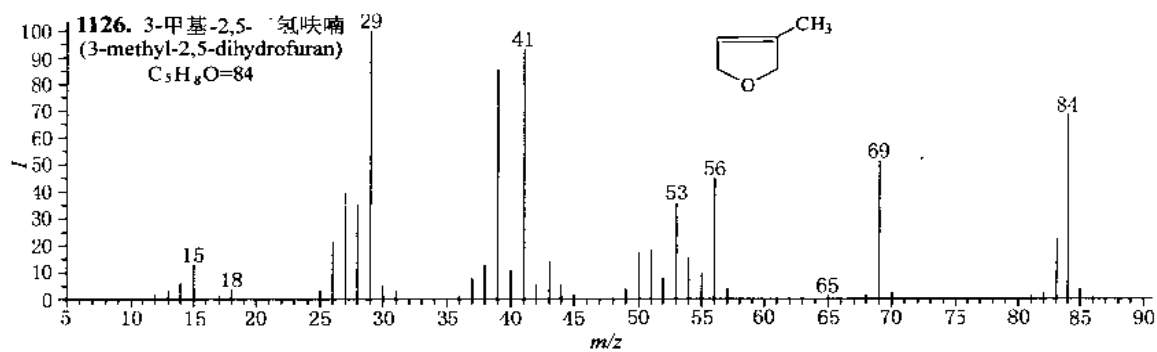
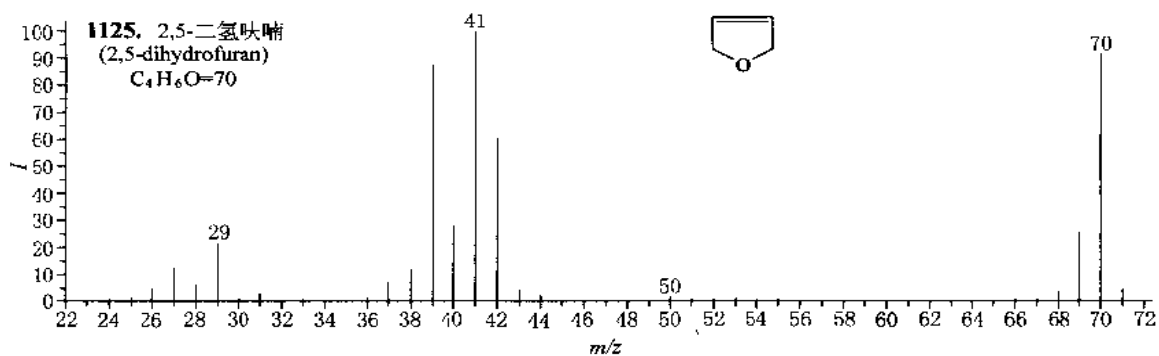


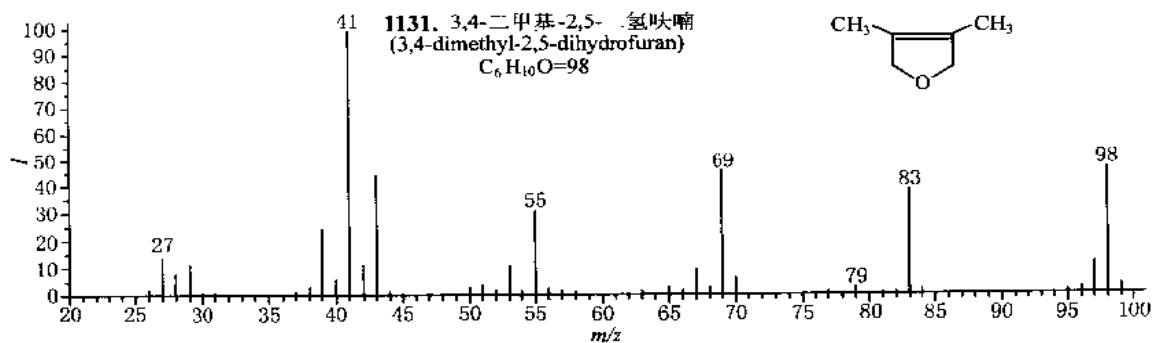
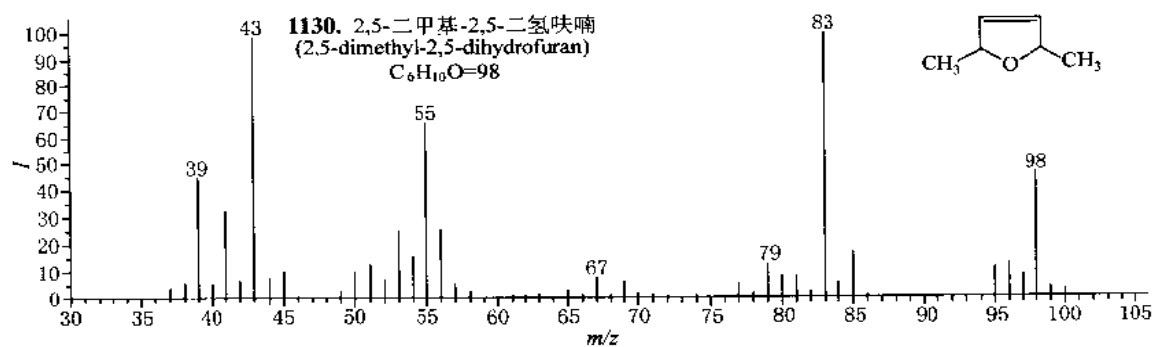
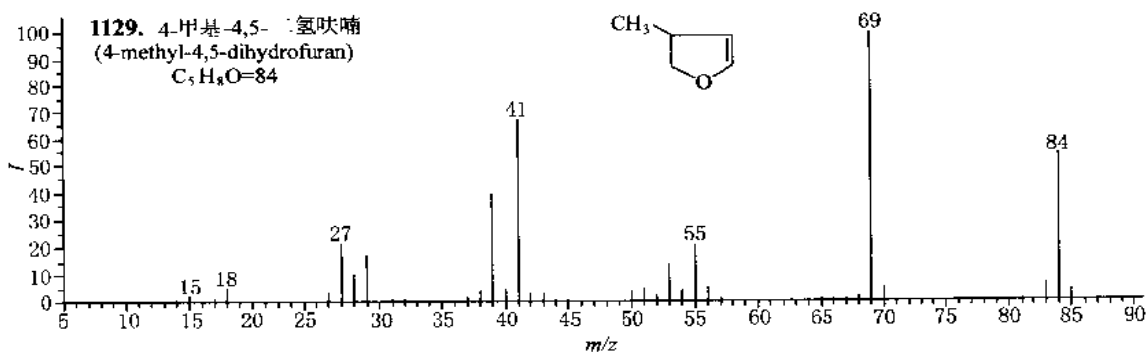
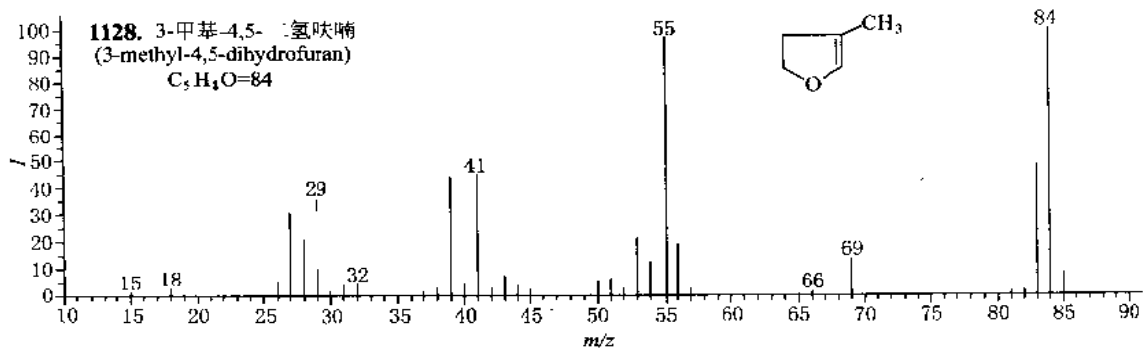




#### 四、二氢呋喃类

二氢呋喃 (1125) 和甲基二氢呋喃类 (1126~1131) 的裂解途径有两条, 即  $M-H-CO$  和  $M-CH_3-CO$ 。





## 五、呋喃类

(1) 呋喃 (1132) 本身的主要裂解是  $M-CHO$ 。

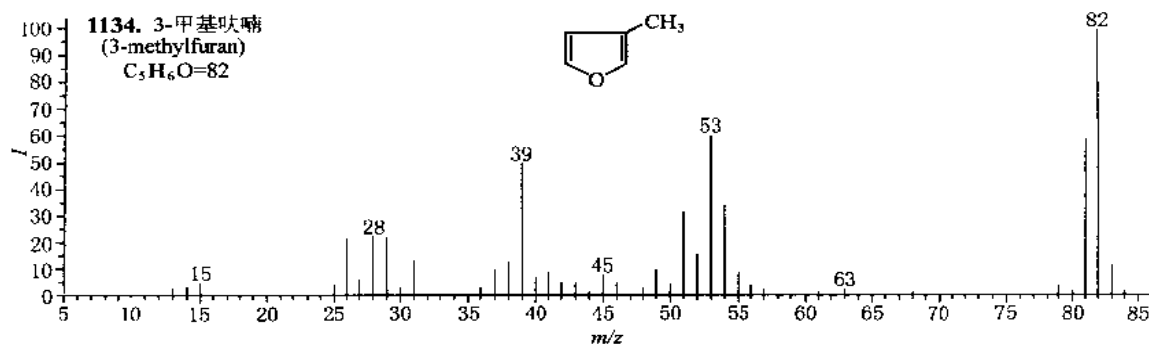
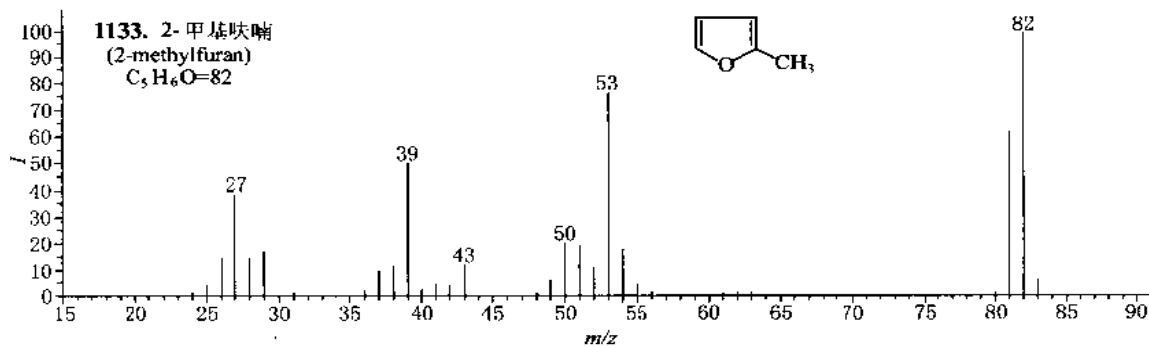
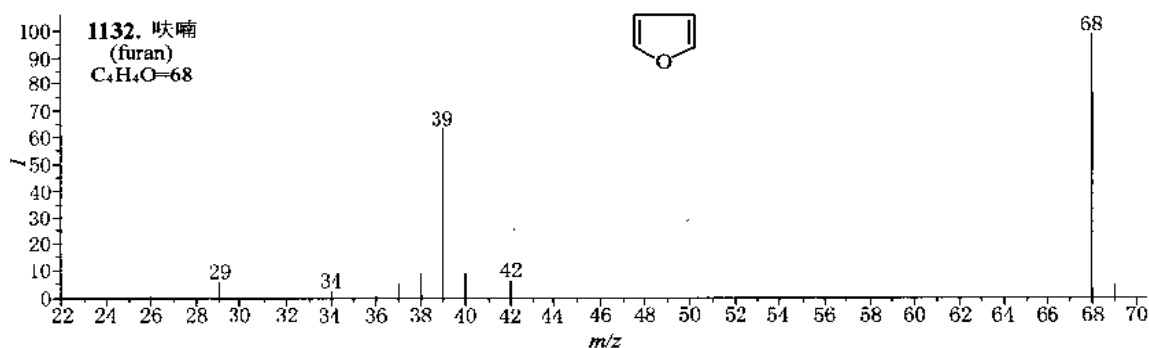
(2) 甲基呋喃类 (1133, 1134) 的重要裂解是  $M-H-CO$ 。

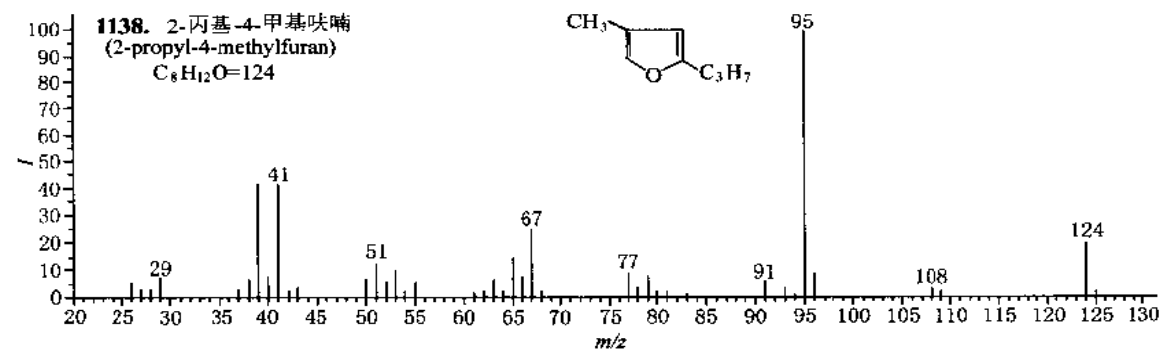
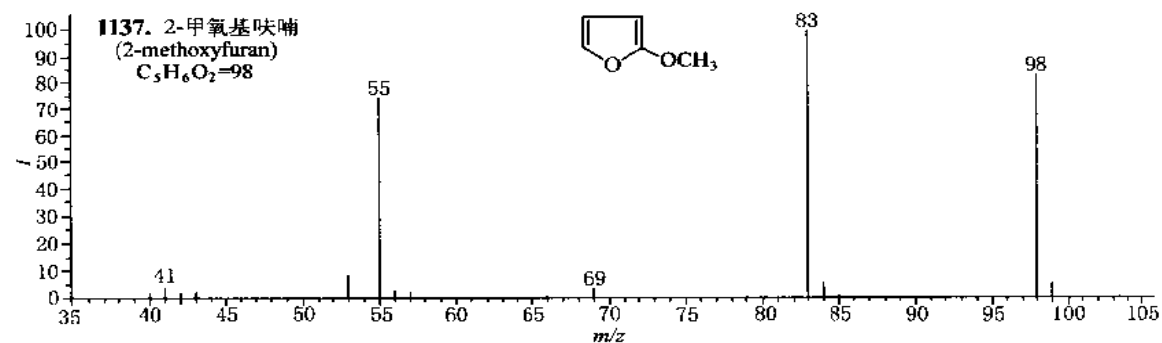
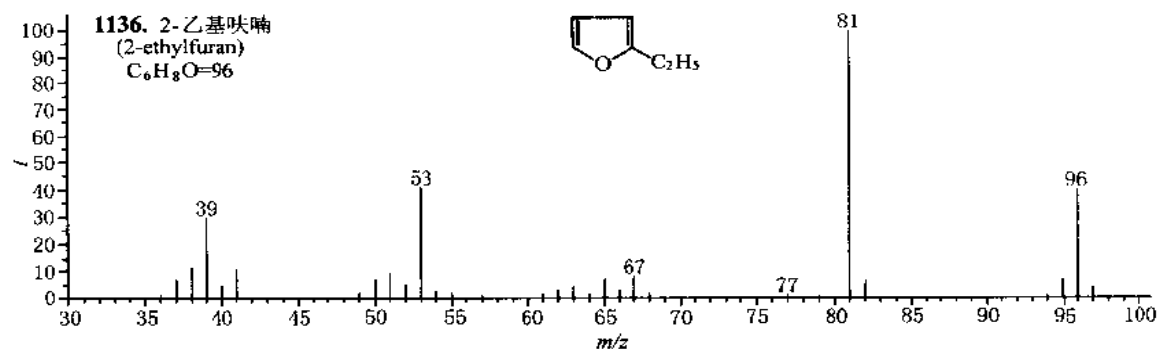
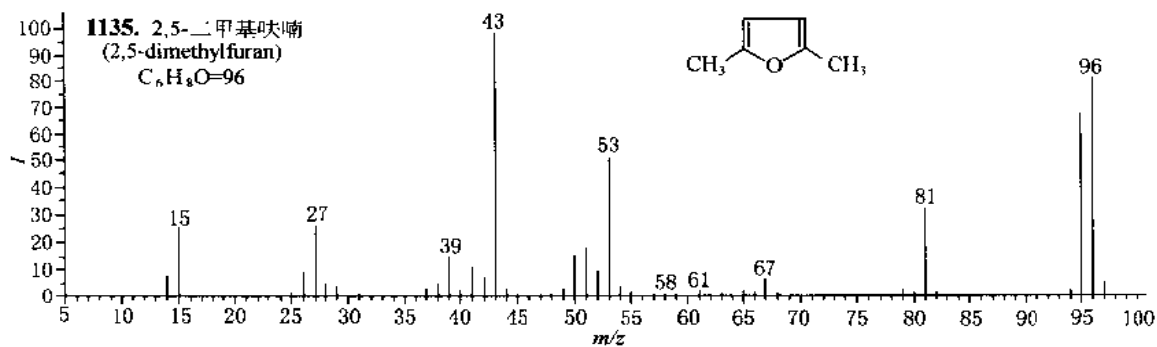
(3) 二甲基呋喃 (1135)、乙基呋喃 (1136) 和甲氧基呋喃 (1137) 的裂解都是  $M-CH_2-CO$ ，丙基呋喃 (1138) 则是  $M-C_2H_5-CO$ 。

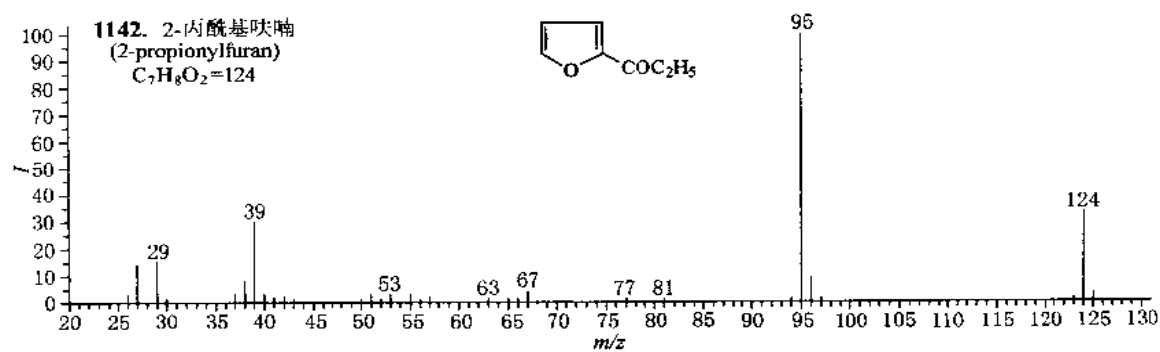
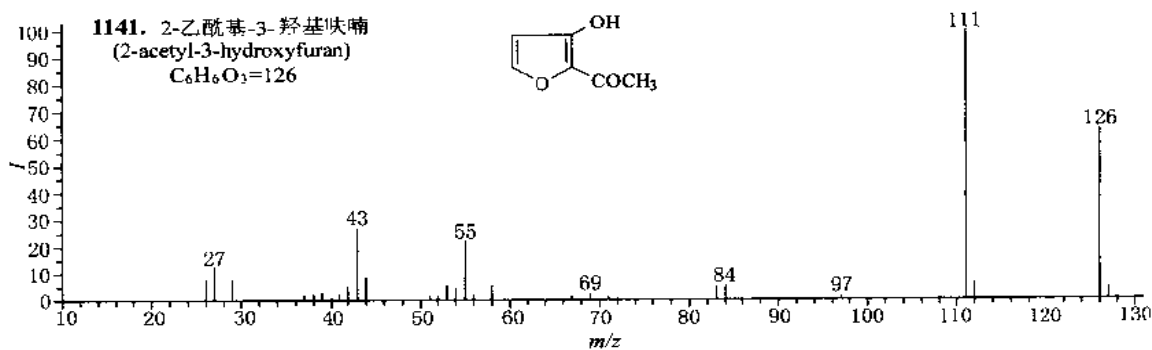
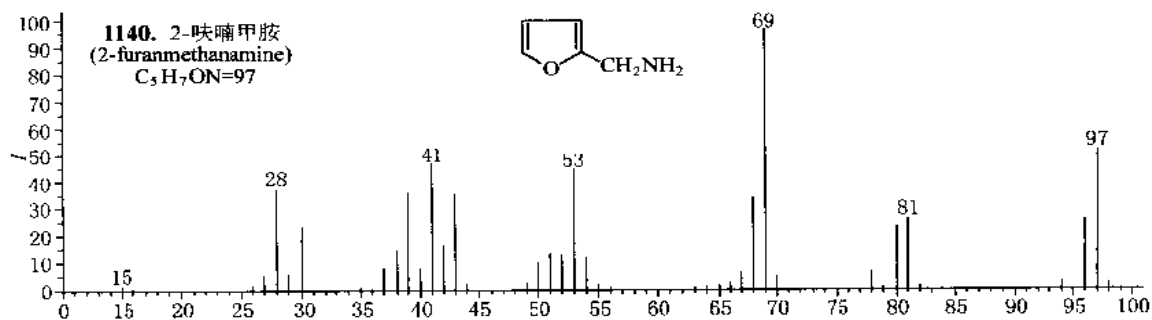
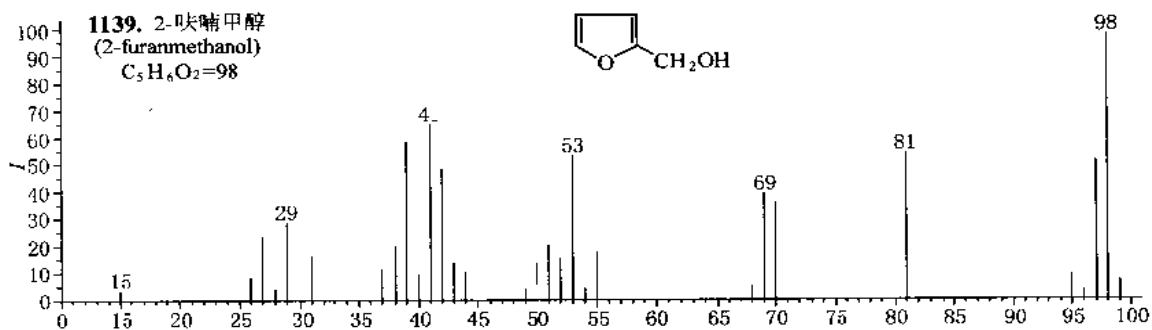
(4) 羟基呋喃 (1139) 的裂解途径有  $M-H-CO$ ， $M-OH-CO$  和  $M-CO$ ；呋喃甲胺 (1140) 的裂解是  $M-H-CO$ ， $M-NH_2-CO$  和  $M-CO$ 。

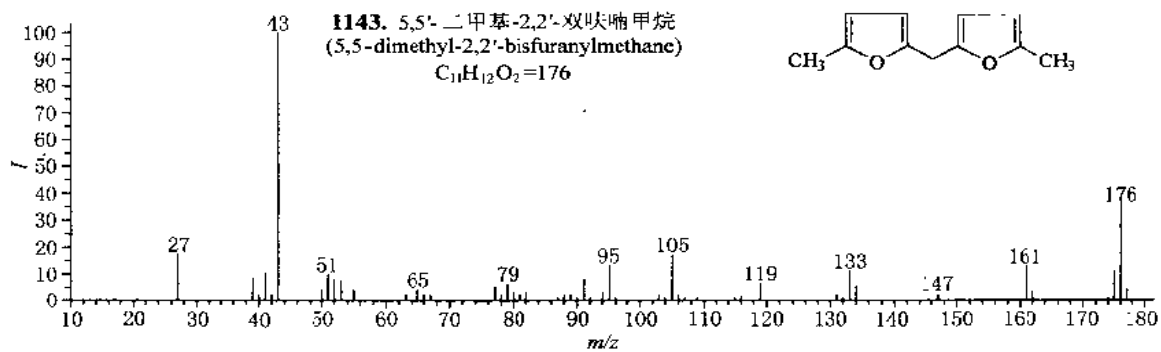
(5) 2-乙酰基-3-羟基呋喃 (1141) 的裂解是  $M-CH_3-CO-CO$  和  $M-CH_2CO$ ，2-丙酰基呋喃 (1142) 的裂解是  $M-C_2H_5-CO-CO$ 。

(6) 5,5'-二甲基-2,2'-双呋喃甲烷 (1143) 有两条裂解途径，即  $M-H-CO-CO$  和  $M-CH_3-CO-CO$ 。



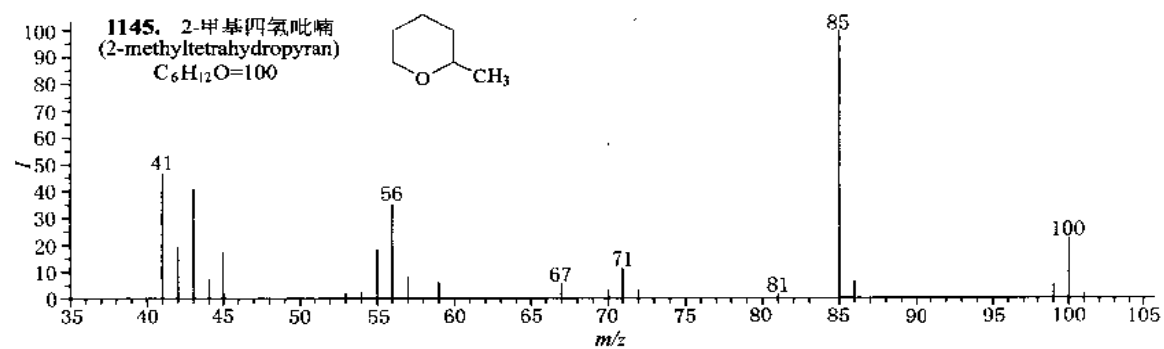
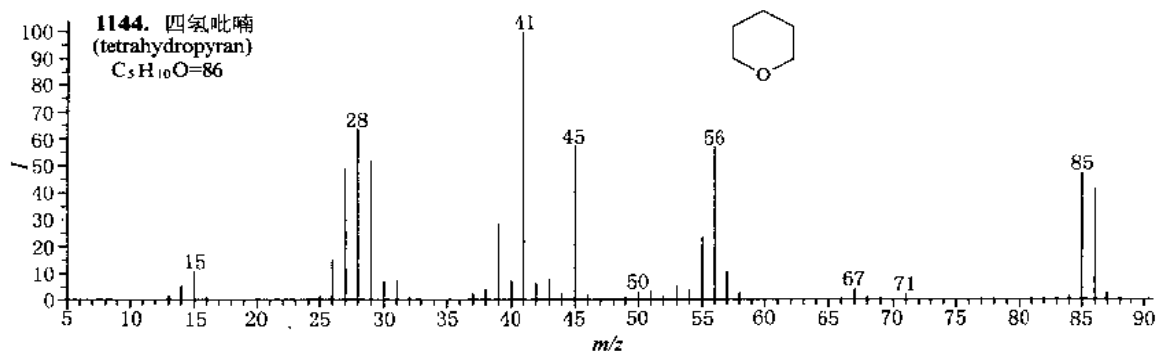


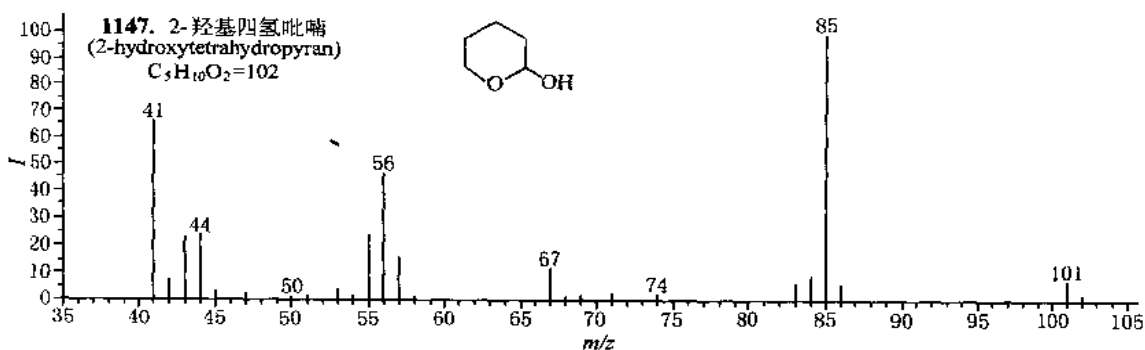
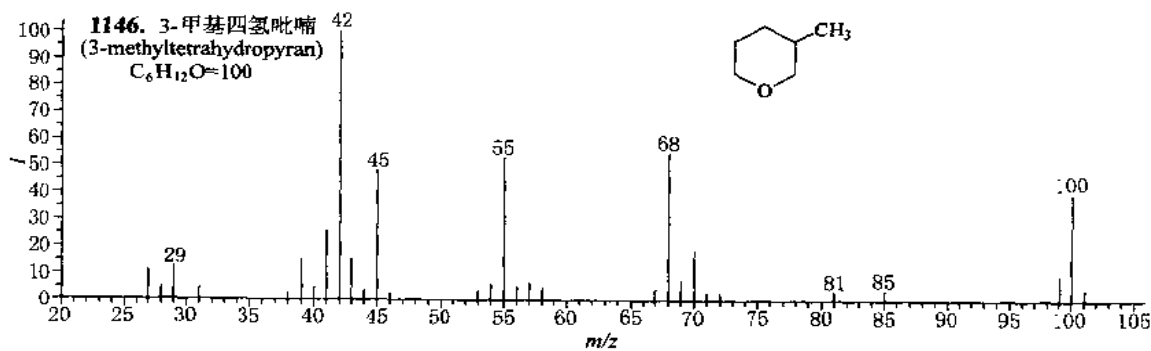




## 六、四氢吡喃类

- (1) 四氢吡喃 (1144) 的主要裂解途径有  $M-H-CH_2O$  和  $M-CH_2O-CH_3$ 。
- (2) 2-甲基四氢吡喃 (1145) 的主要裂解是失甲基, 3-甲基四氢吡喃 (1146) 的裂解仍是  $M-CH_2O-CH_3$ 。
- (3) 2-羟基四氢吡喃 (1147) 的裂解是  $M-OH-CO$ 。





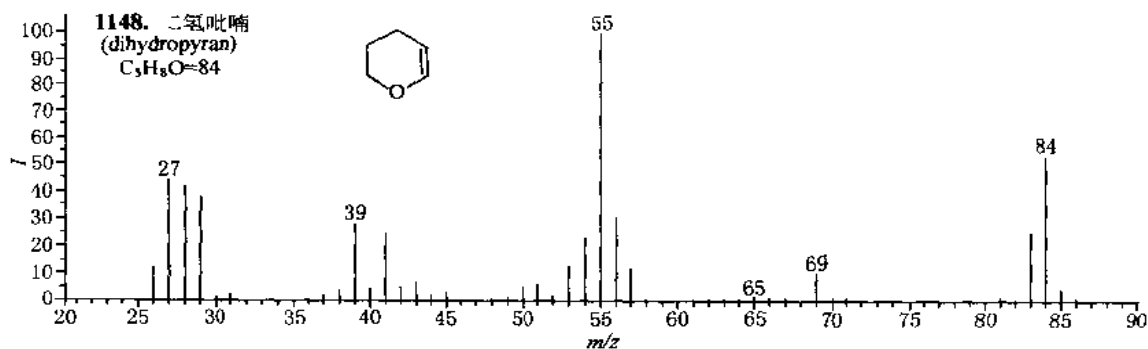
## 七、二氢吡喃类

(1) 二氢吡喃类 (1148~1151) 的  $M-1$  离子都较强, 然后的裂解是 RDA 裂解失去  $C_2H_4$  或  $CH_2O$ 。

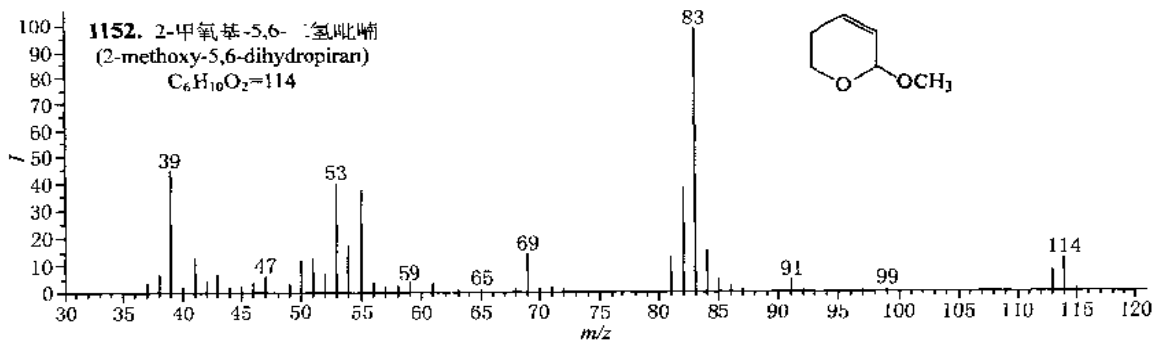
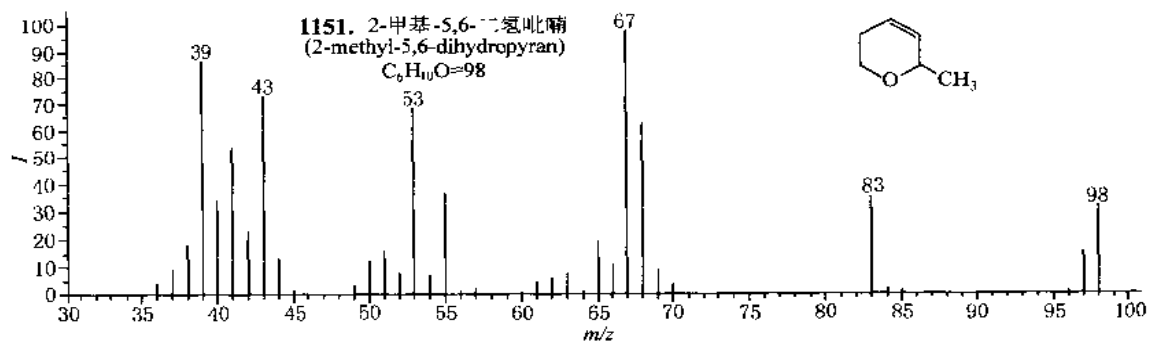
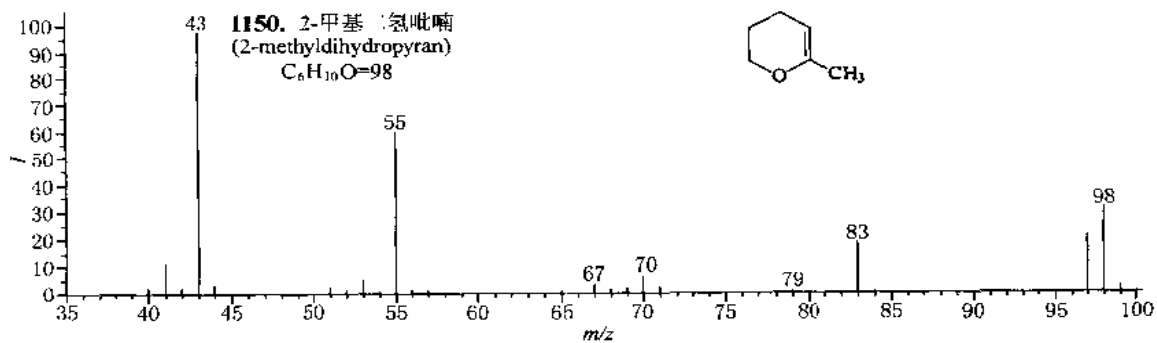
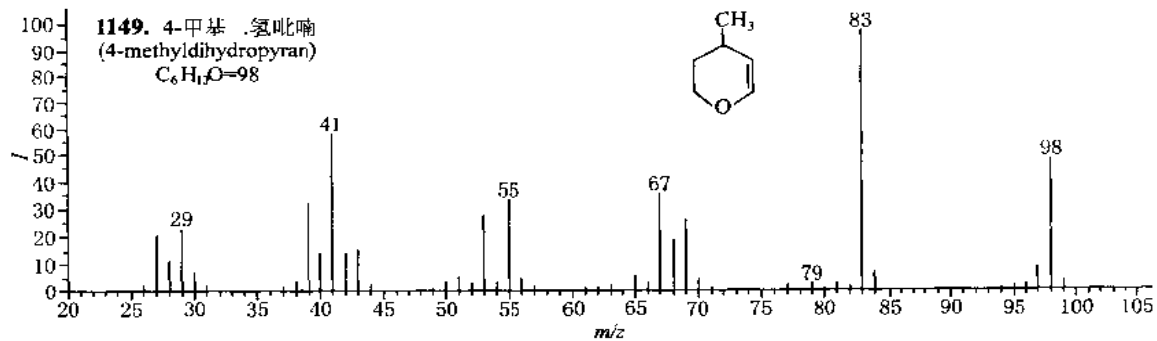
(2) 甲基二氢吡喃类 (1049~1051) 可以进行  $M-CH_3-C_2H_4$  或  $M-CH_3-CH_2O$  的裂解, 第二步反应也是 RDA 裂解。

(3) 有的化合物分子离子可以直接进行 RDA 裂解。

(4) 2-甲氧基取代物 (1152) 可以失去甲氧基, 双键位置适宜时, 也能进行 RDA 裂解失去  $CH_2O$ 。

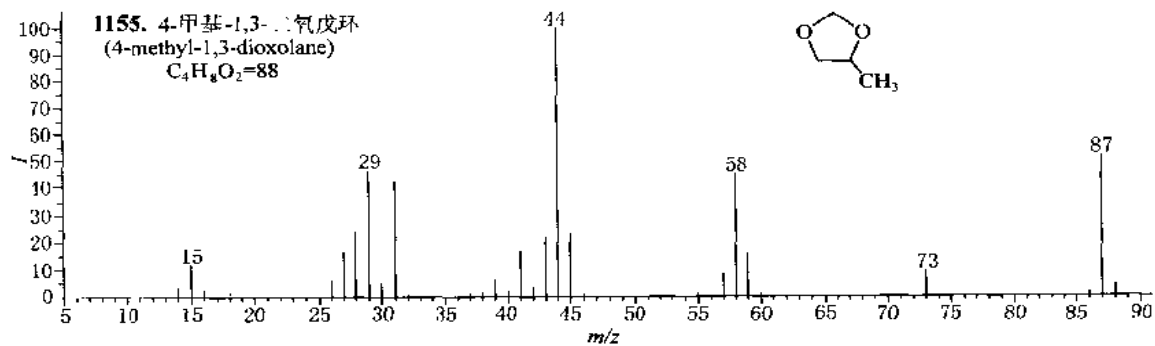
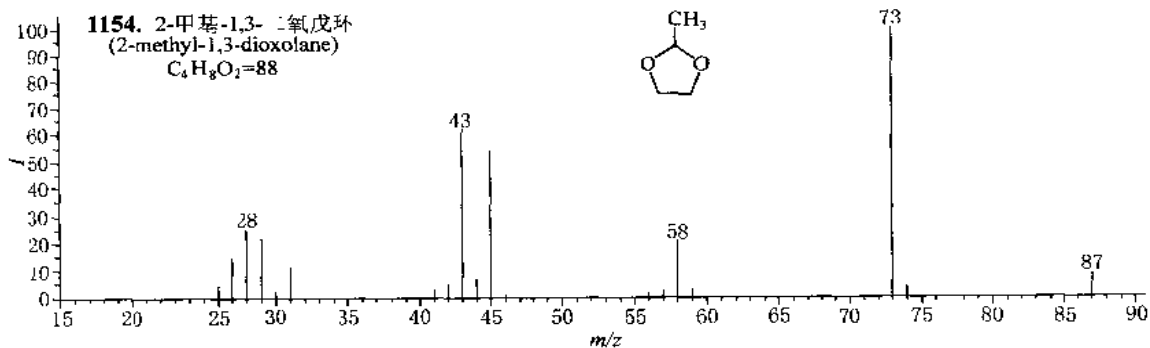
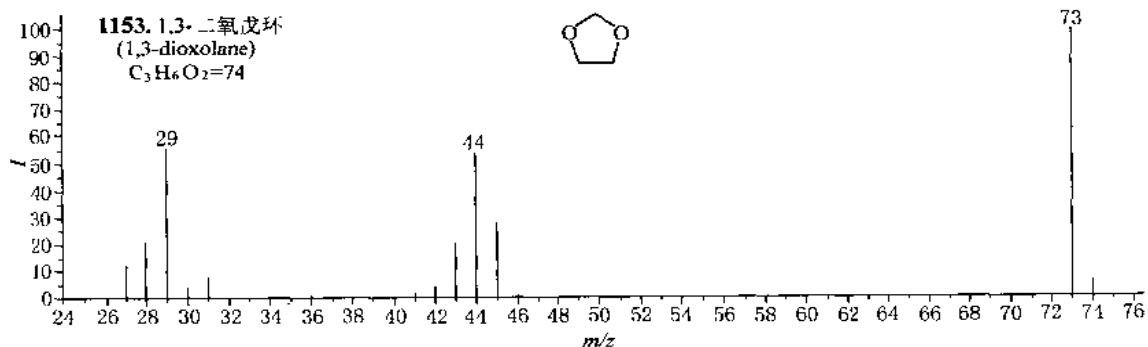


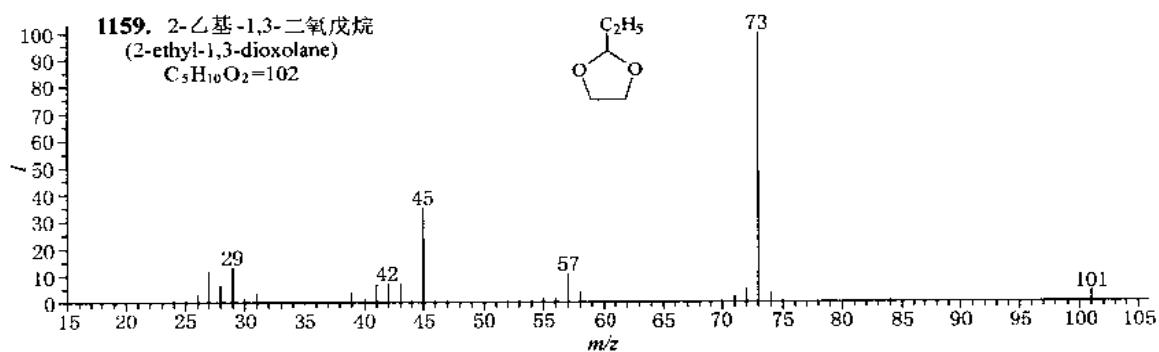
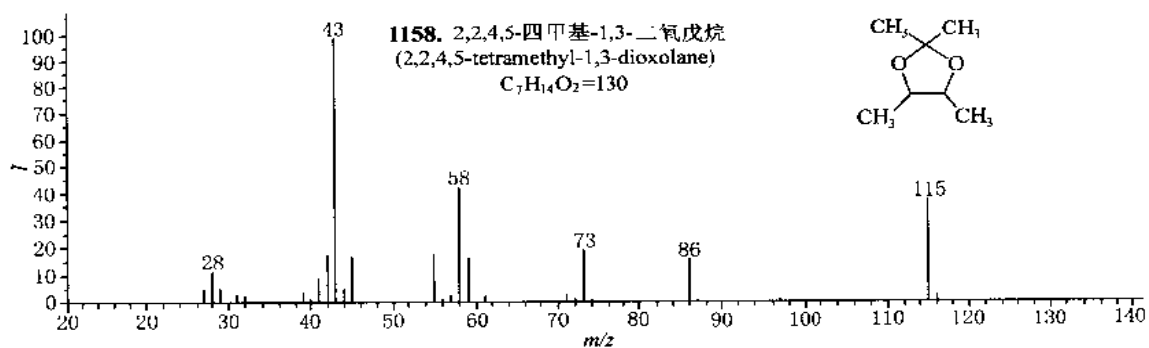
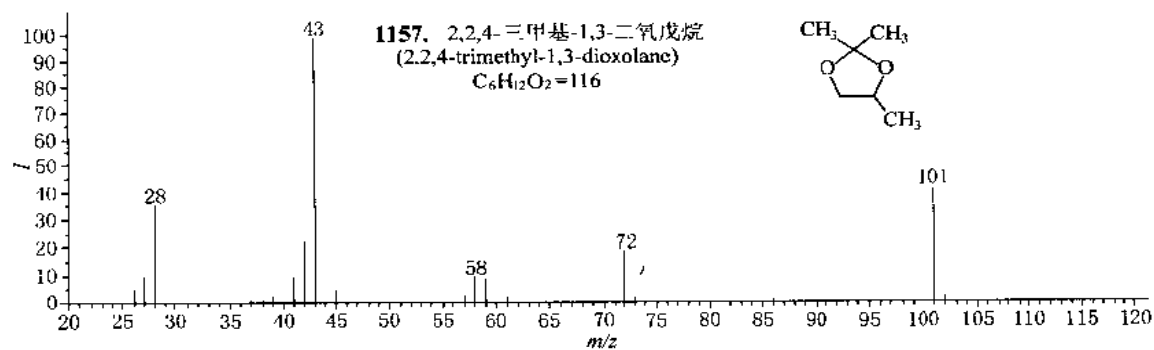
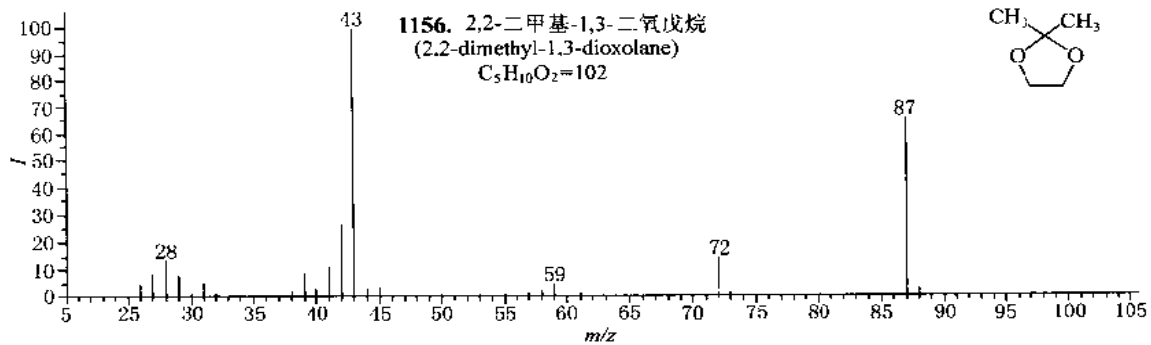


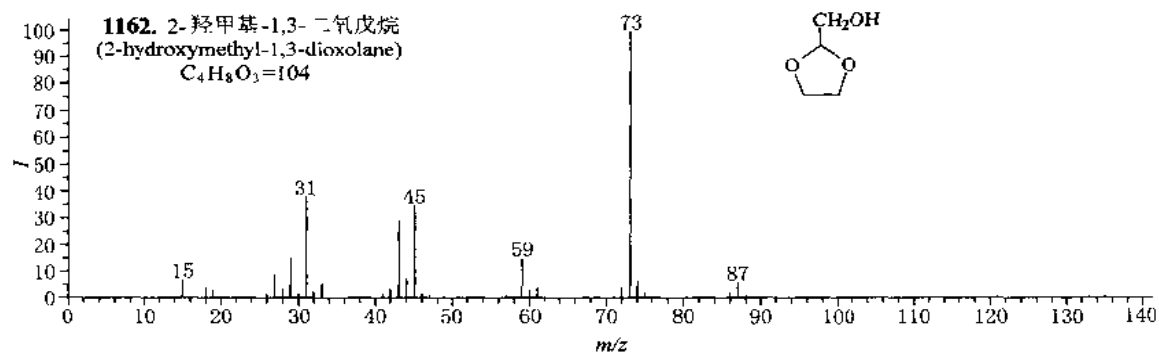
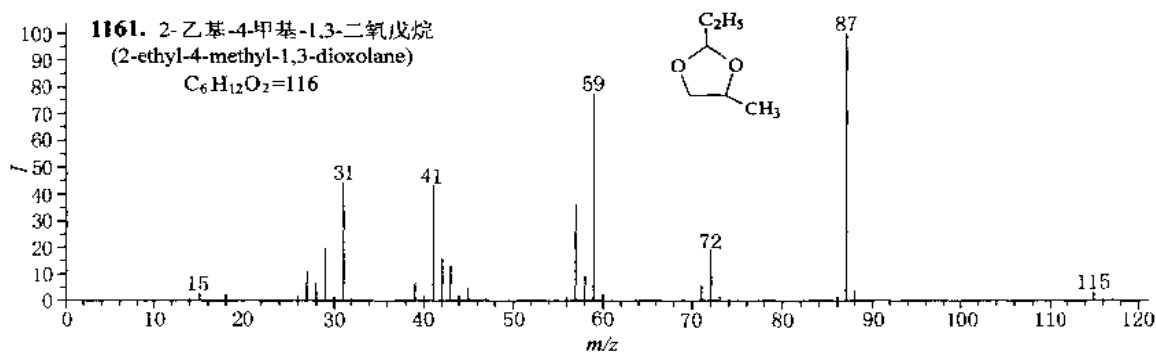
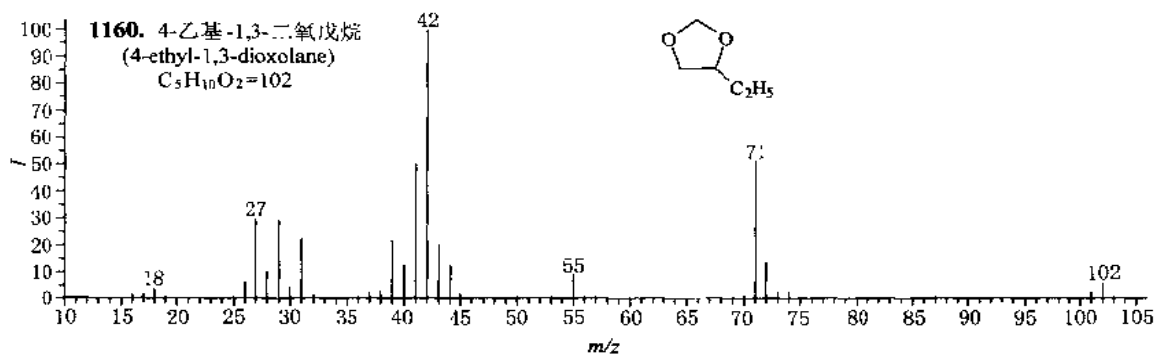


## 八、二氧戊环类

- (1) 1,3-二氧戊烷 (1153) 的主要裂片离子是  $M-H$ ,  $M-CHO$  和  $M-CH_2O$ 。
- (2) 2-甲基 1,3-二氧戊环 (1154) 有 4 个碎片离子, 即  $M-H$ ,  $M-CHO$ ,  $M-CH_2O$  和  $M-CH_3-CH_2O$ ; 4-甲基-1,3-二氧戊环 (1155) 的 4 个碎片离子是  $M-H$ ,  $M-CH_3$ ,  $M-CH_2O$  和  $M-CH_3-CHO$ ; 2,2-二甲基-1,3-二氧戊环 (1156) 的碎片离子是  $M-CH_3$ ,  $M-CH_2O$  和  $M-CH_3-CH_2-CHO$ ; 其他甲基取代物 (1157, 1158) 亦有相似的裂解。
- (3) 乙基取代的 1,3-二氧戊环类 (1159~1161) 都有  $M-C_2H_5$  离子。
- (4) 羟甲基取代的化合物 (1162) 是失去羟甲基。



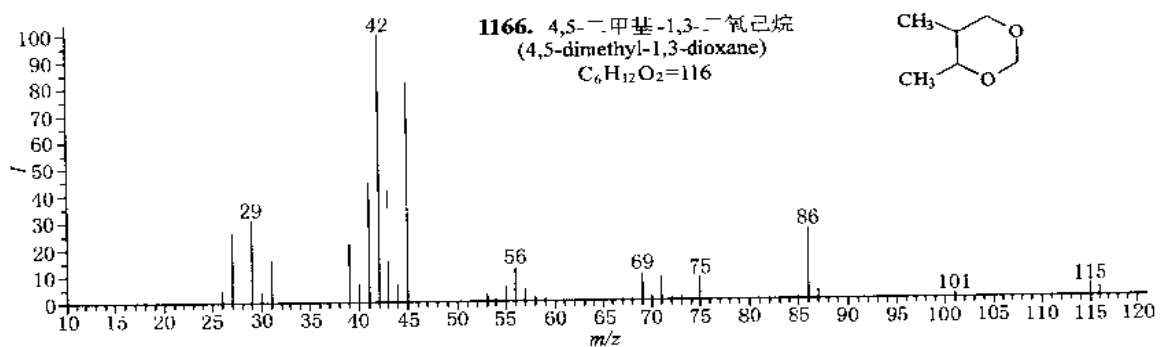
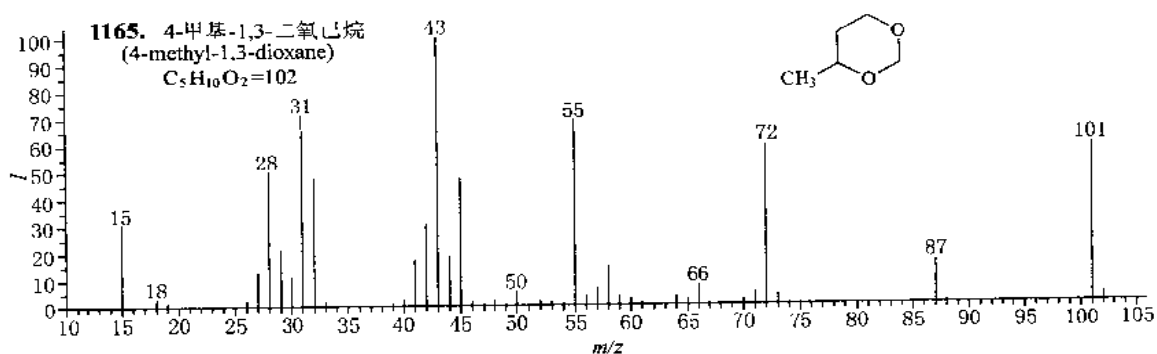
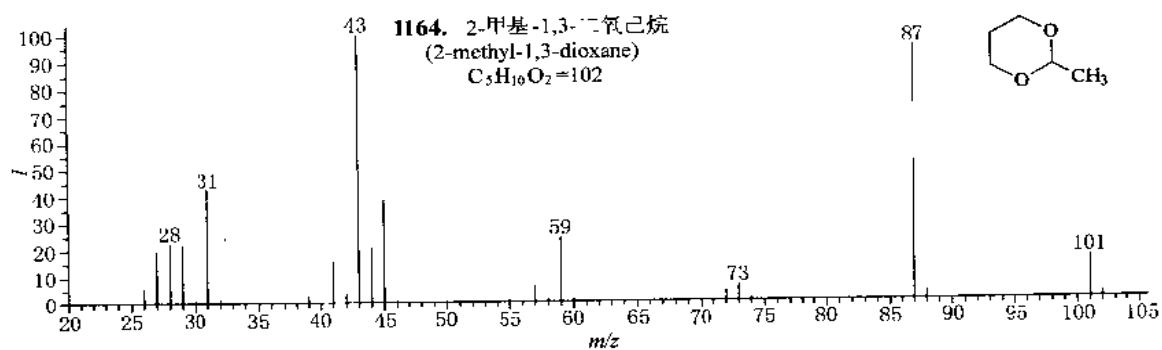
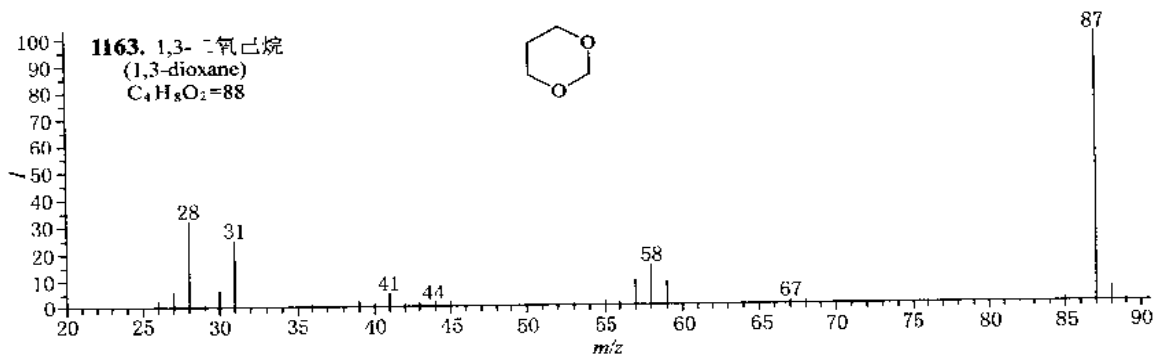


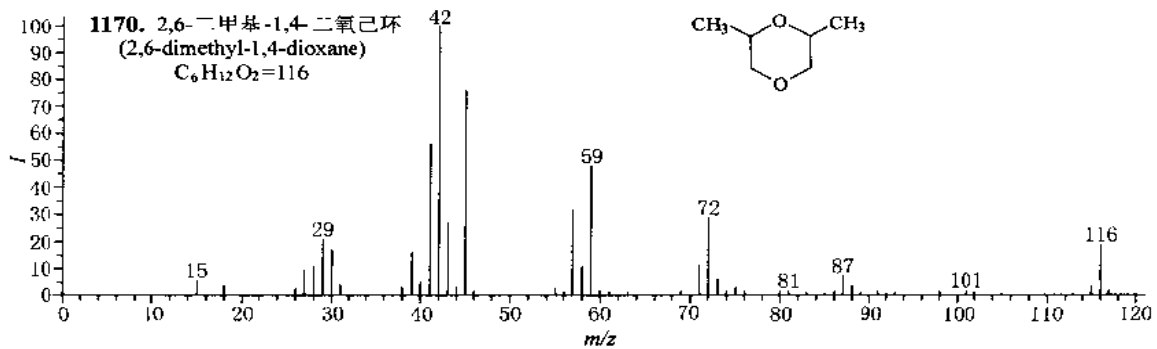
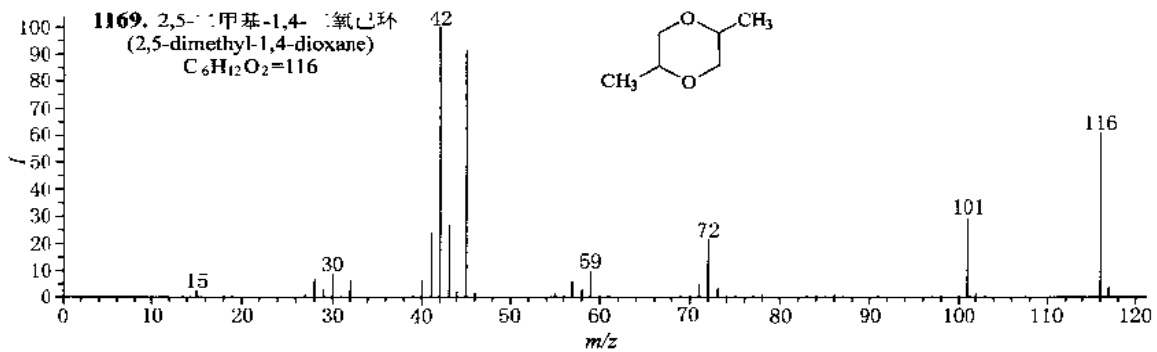
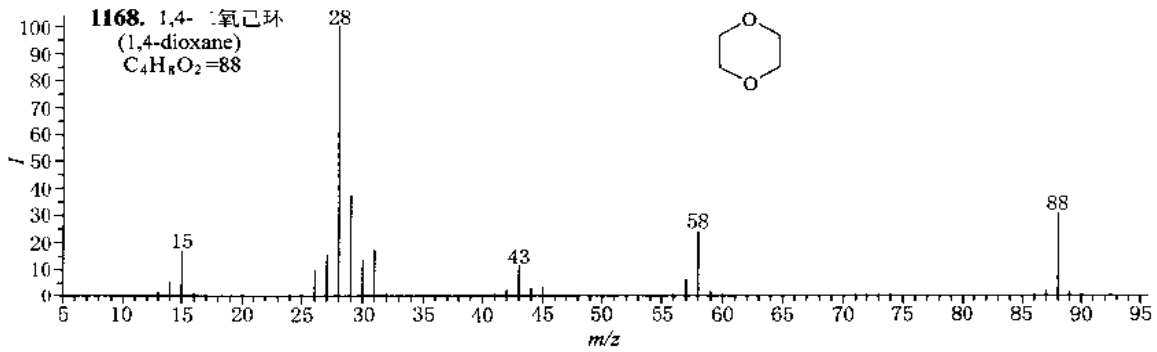
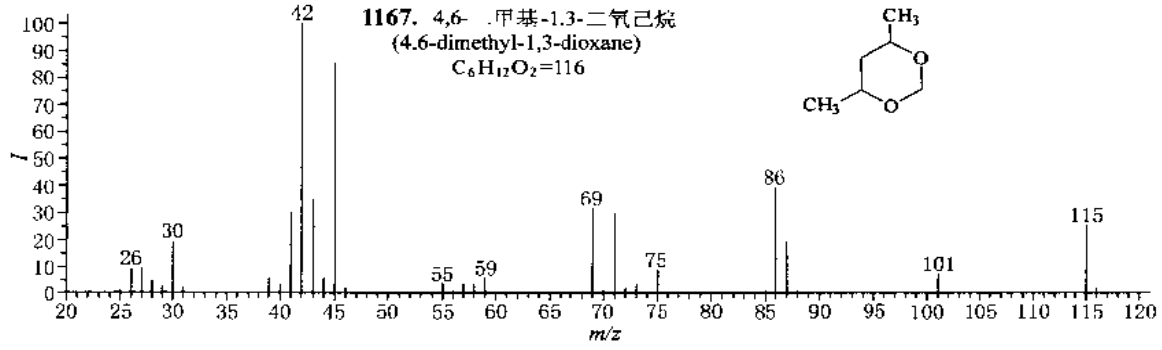


### 九、二氧己环类

(1) 1,3-二氧己环类 (1163~1167) 的  $M-H$  离子很强,  $M-CH_2O$  离子也较强, 有甲基取代者 (1164~1167) 都有较强的  $M-CH_3$  离子, 并能因 RDA 裂解继续失去  $C_2H_4$  或  $CH_2O$ 。

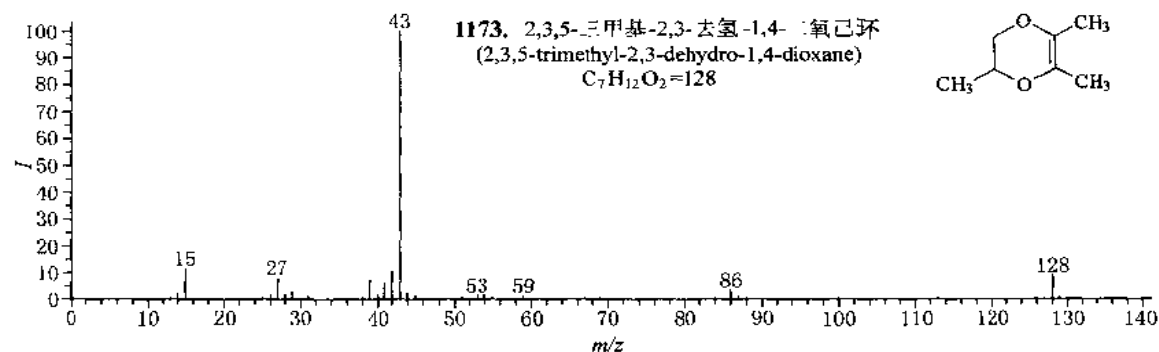
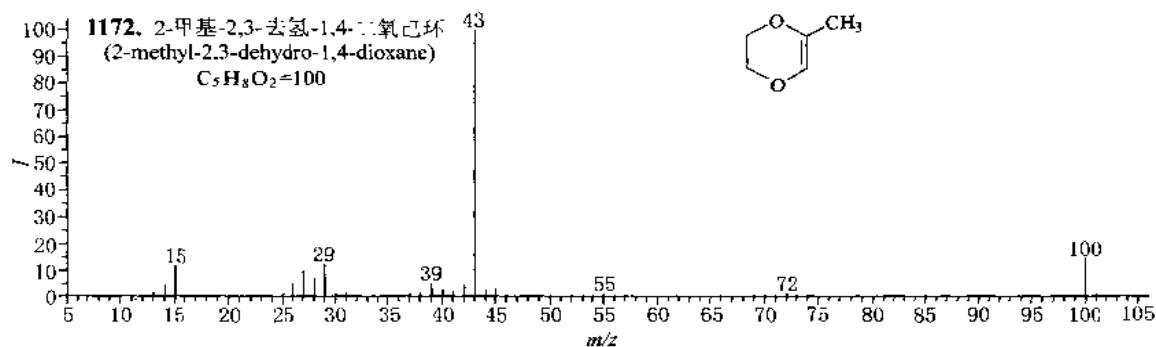
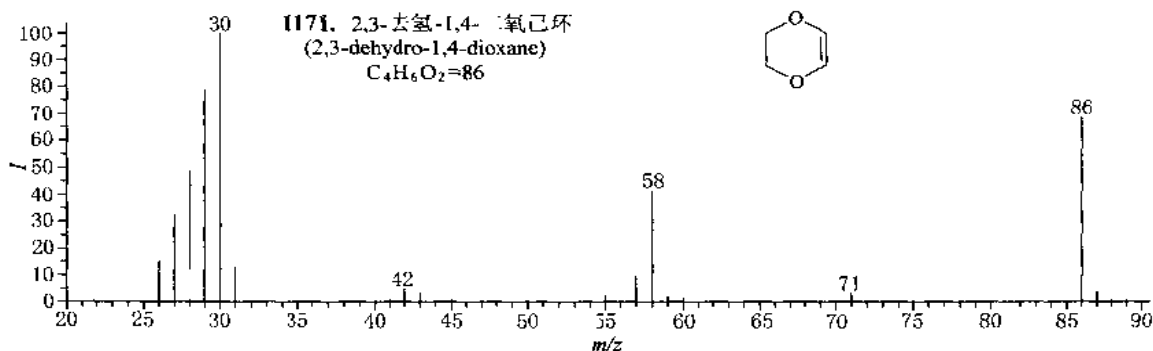
(2) 1,4-二氧己环 (1168) 的裂解是失去甲醛, 二甲基取代物 (1169, 1170) 都有  $M-CH_3$  和  $M-CH_3CHO$  离子。





### 十、2,3-去氢-1,4-二氧己环类

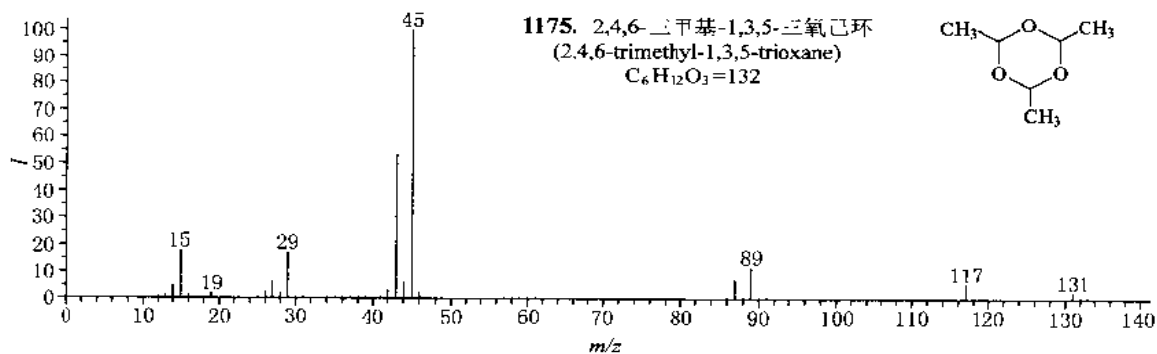
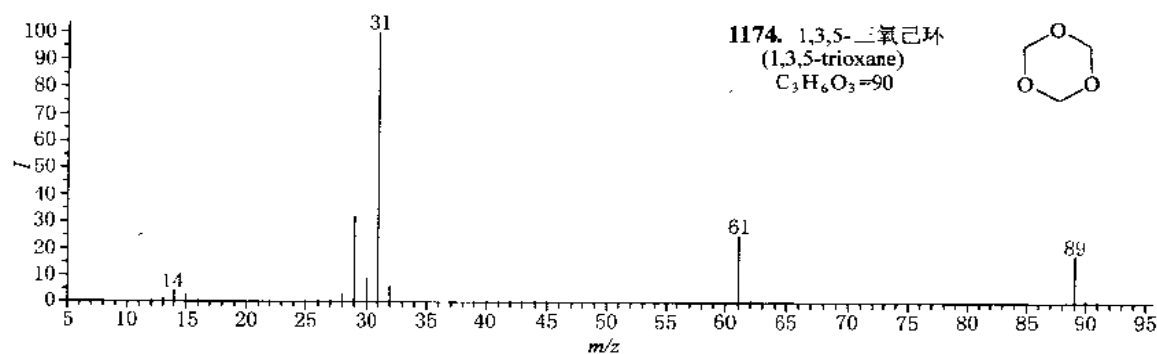
这类化合物 (1171~1173) 都能进行 RDA 裂解失去乙烯或丙烯 (有甲基取代时), 然后再失去 CHO, CH<sub>2</sub>O 或 CH<sub>3</sub>CO。



### 十一、三氧己环类

(1) 1,3,5-三氧己环 (1174) 的 2 个离子是 M-29 和 m/z 31, 结构分别为  $\text{CH}_2=\overset{\ominus}{\text{O}}-\text{CH}_2\text{OH}$  和  $\text{HO}=\overset{\oplus}{\text{C}}\text{H}_2$ 。

(2) 2,4,6-三甲基-1,3,5-三氧己环 (1175) 的碎片离子分别为 M-H, M-CH<sub>3</sub>, M-CH<sub>3</sub>-CO, M-OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>,  $\text{HO}=\overset{\oplus}{\text{C}}\text{HCH}_3$  和 CH<sub>3</sub>CO<sup>+</sup>。



## 十二、苯并呋喃类

(1) 苯并二氢呋喃 (1176) 的裂解途径是  $M-H-CO$ ; 2-甲基苯并二氢呋喃 (1177) 的裂解途径是  $M-CH_3-CO$ 。

(2) 苯并呋喃 (1178) 的两条裂解途径是  $M-CO-C_2H_2$  和  $M-CHO-C_2H_2$ 。

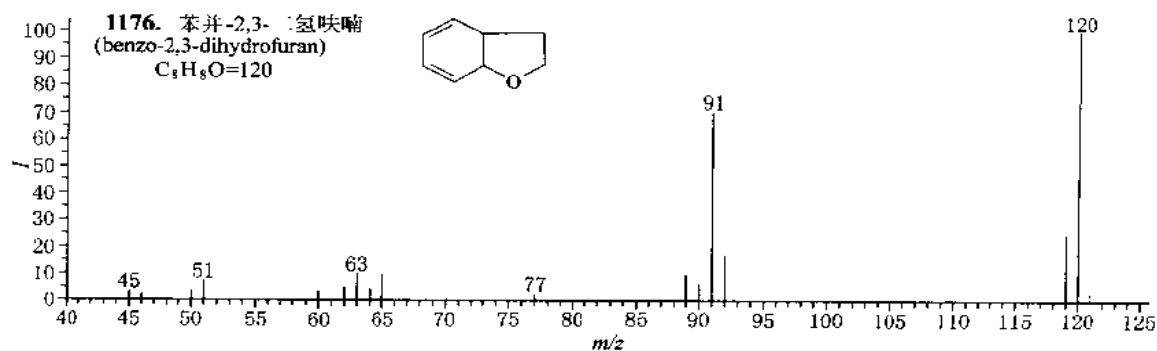
(3) 单甲基苯并呋喃类 (1179, 1180) 的裂解途径是  $M-H-CO-C_2H_2-C_2H_2$ ; 二甲基取代物 (1181) 有两条裂解途径, 即  $M-H-CO-C_2H_2-C_2H_2$  和  $M-CH_3-CO-C_2H_2-C_2H_2$ 。

(4) 甲氧基取代的苯并呋喃类 (1182, 1183) 也有两条裂解途径, 即  $M-CH_3-CO-CO-C_2H_2$  和  $M-CH_2O-CHO-C_2H_2$ 。

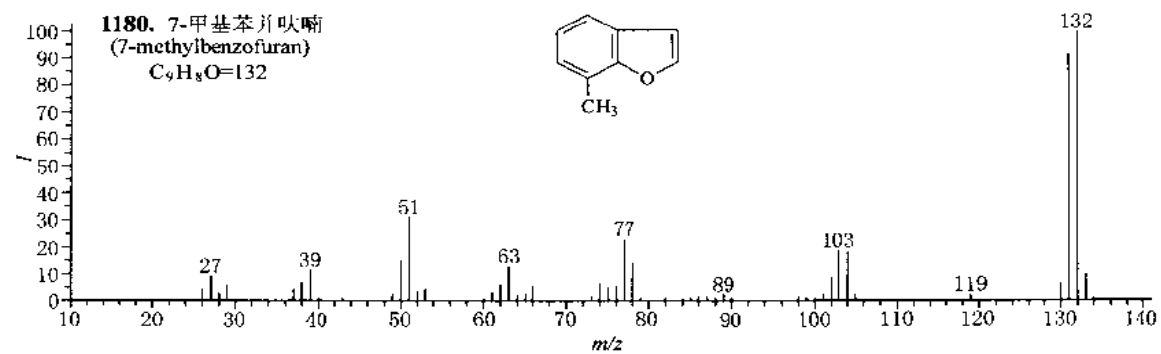
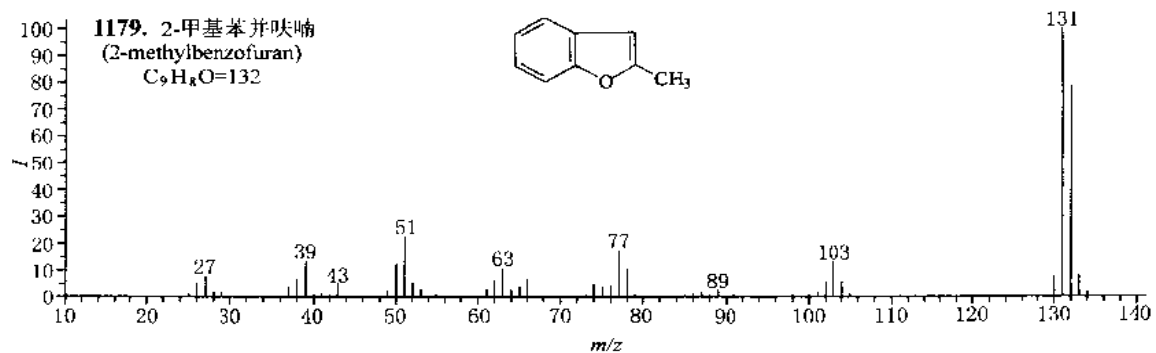
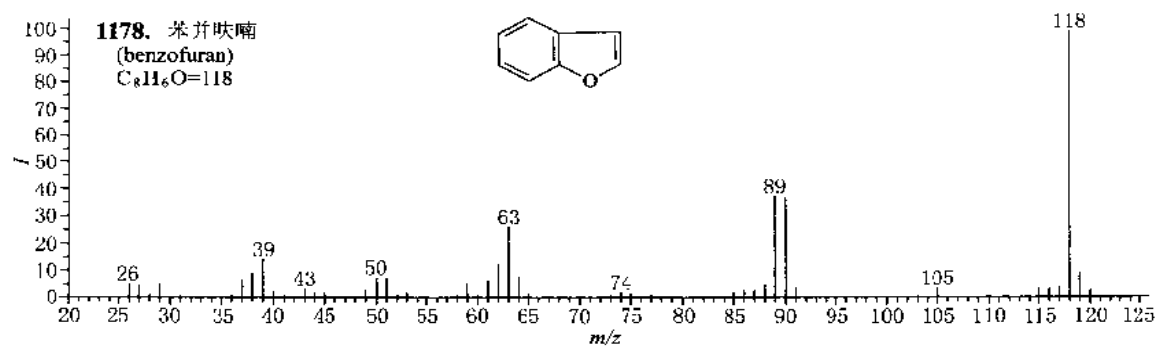
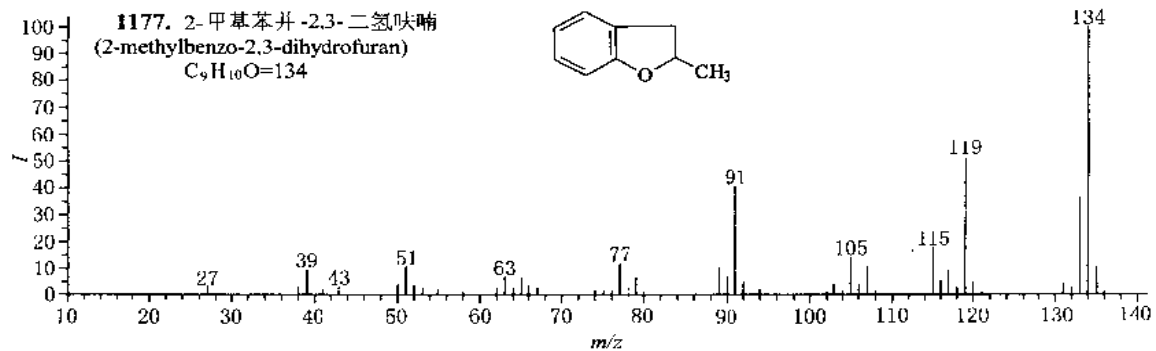
(5) 氯和溴代苯并呋喃 (1184~1186) 的主要裂解途径是  $M-X-CO-C_2H_2$ 。

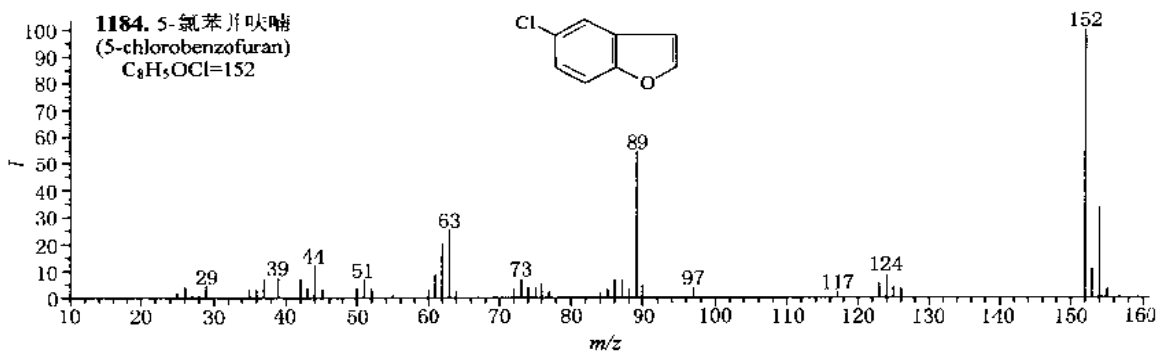
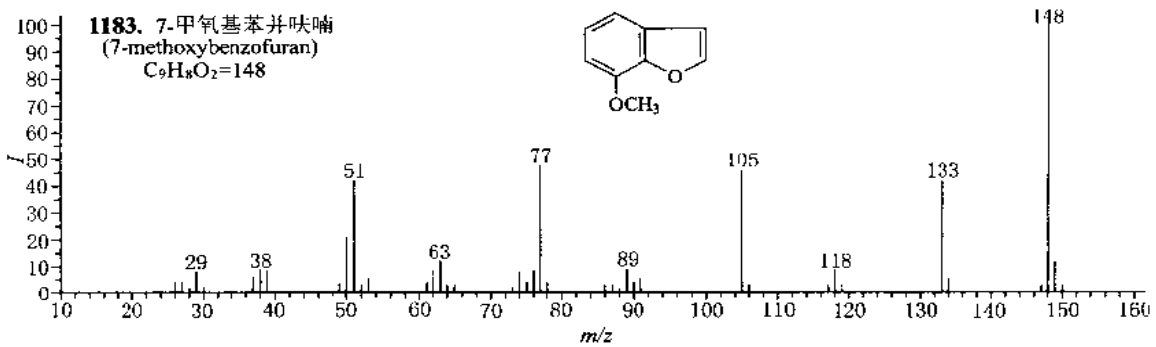
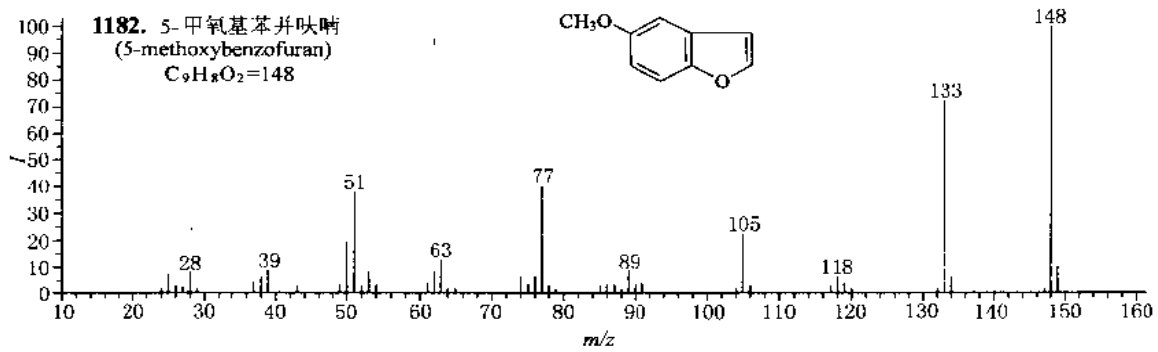
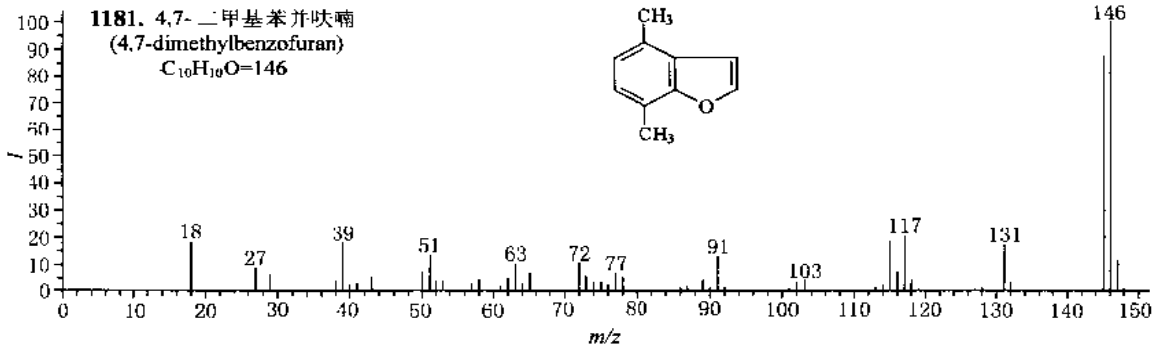
(6) 2-乙酰基苯丙呋喃 (1187) 的主要碎片离子是  $M-CH_3$ , 次要的裂解是  $M-CH_2CO-CHO-C_2H_2$ 。

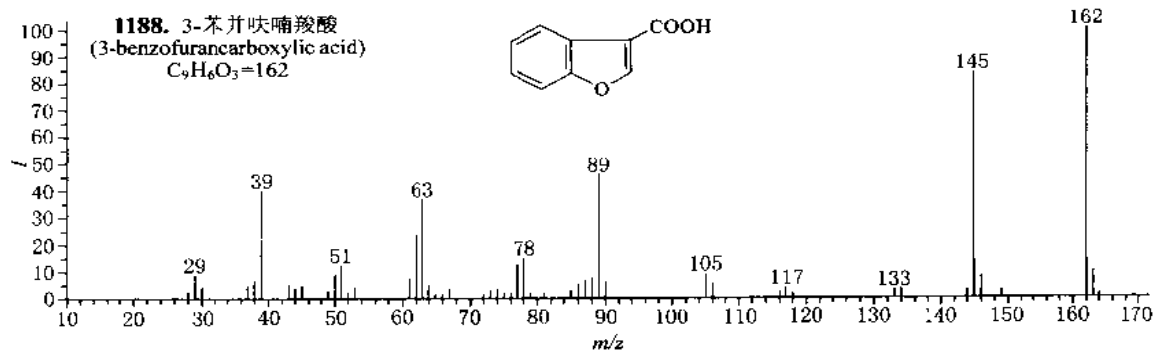
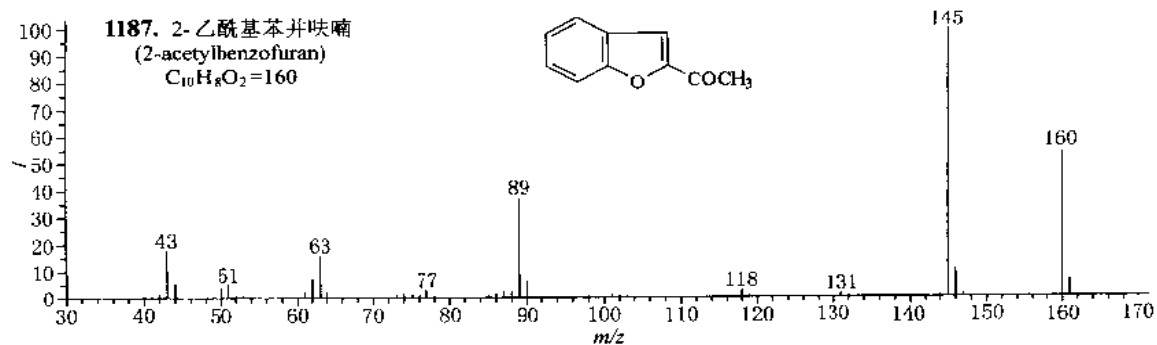
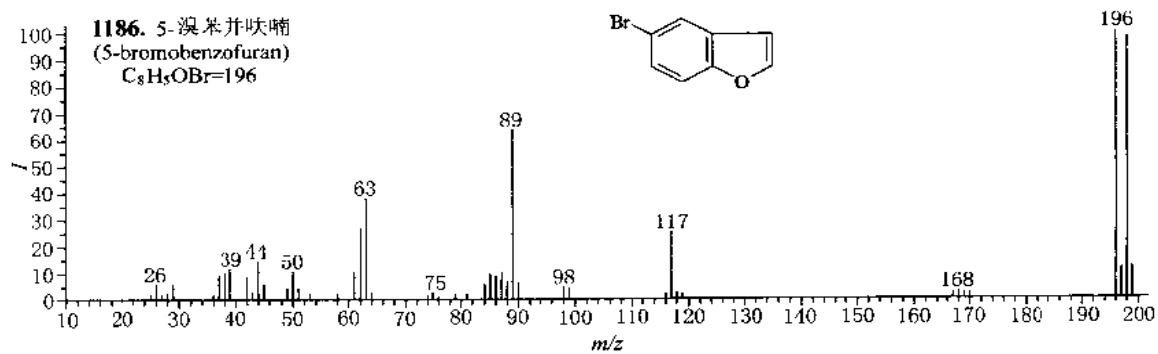
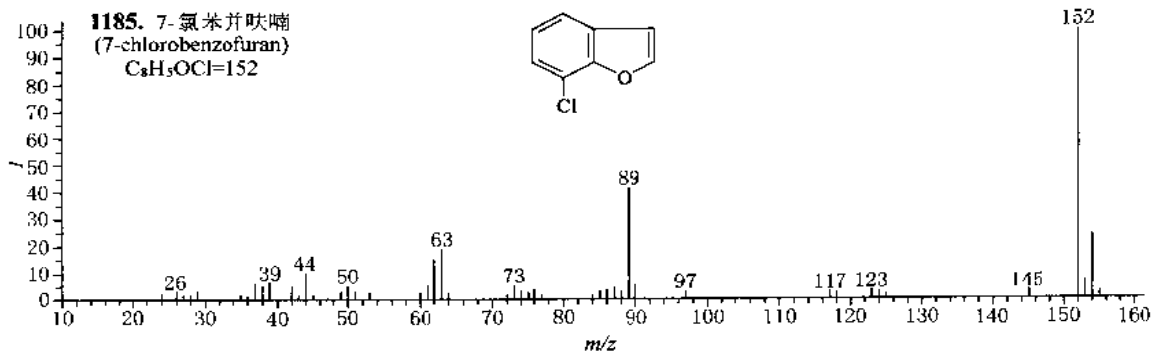
(7) 3-苯并呋喃羧酸 (1188) 的裂解途径是  $M-OH-CO-CO-C_2H_2$ 。





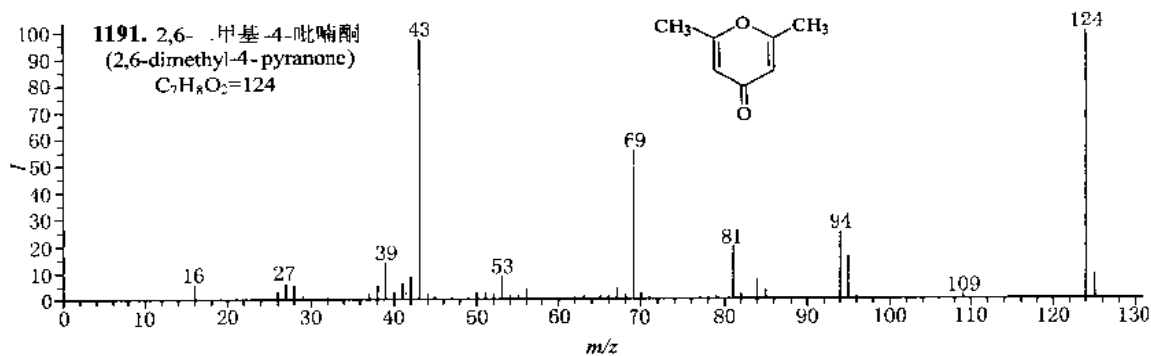
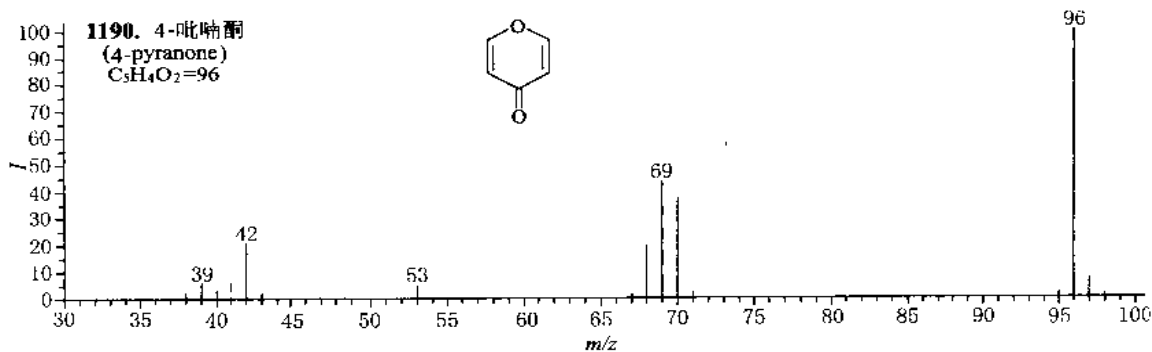
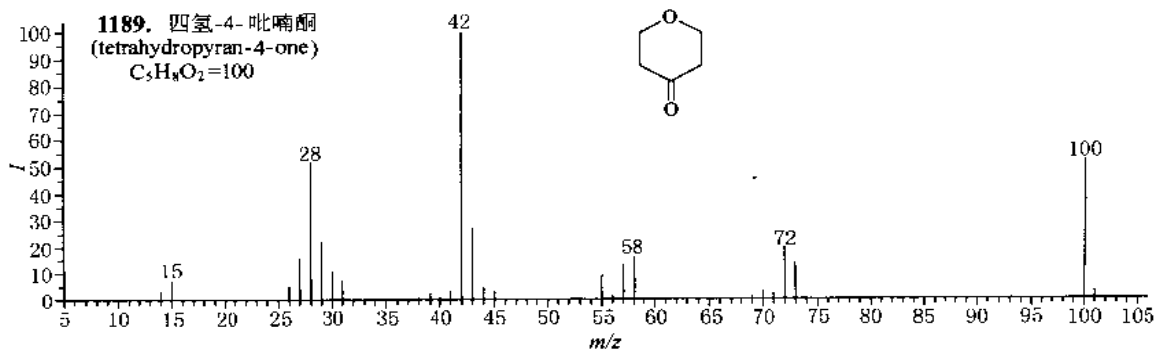


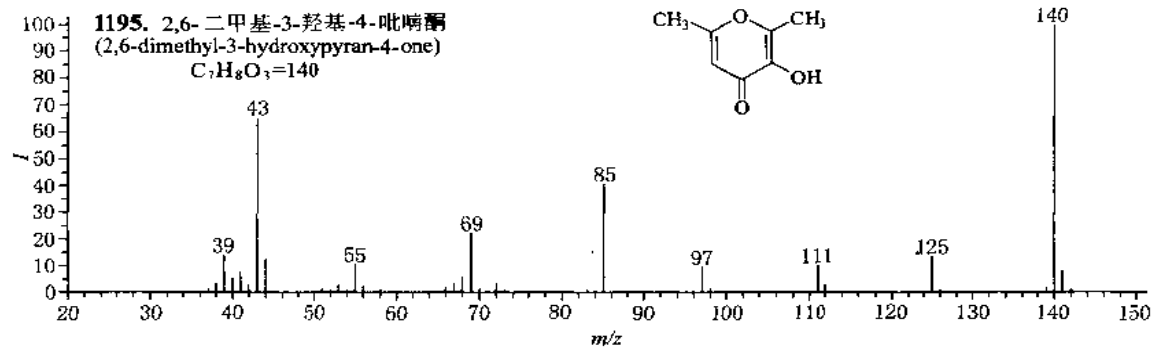
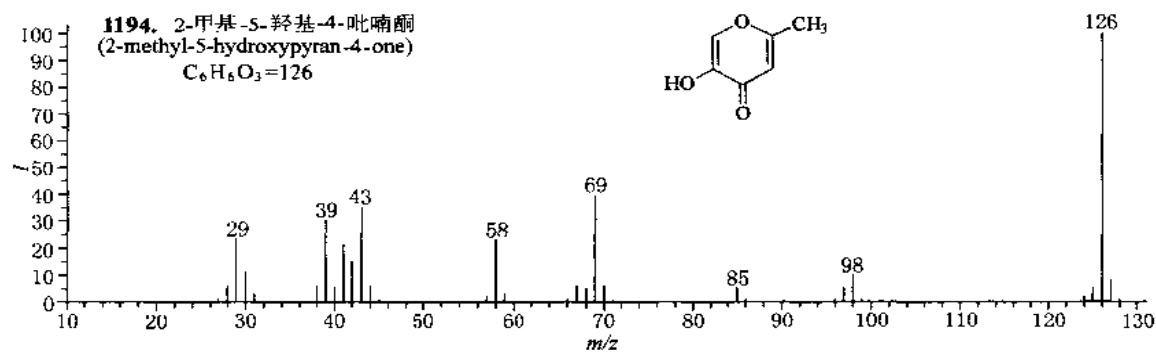
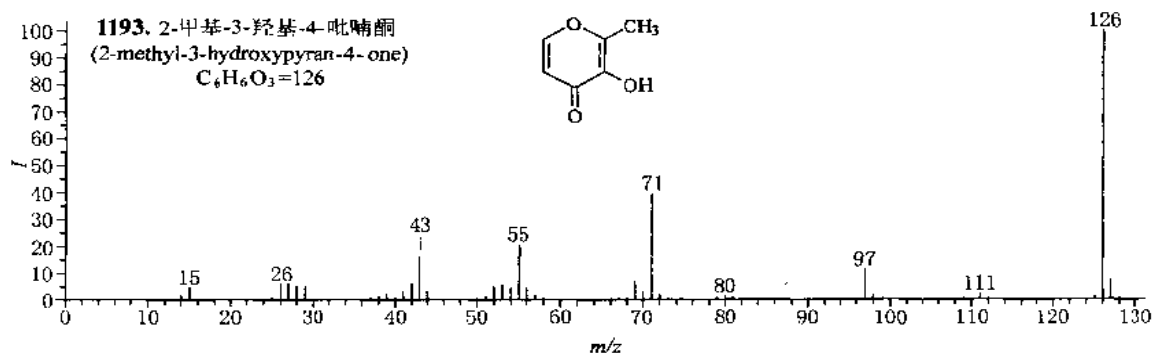
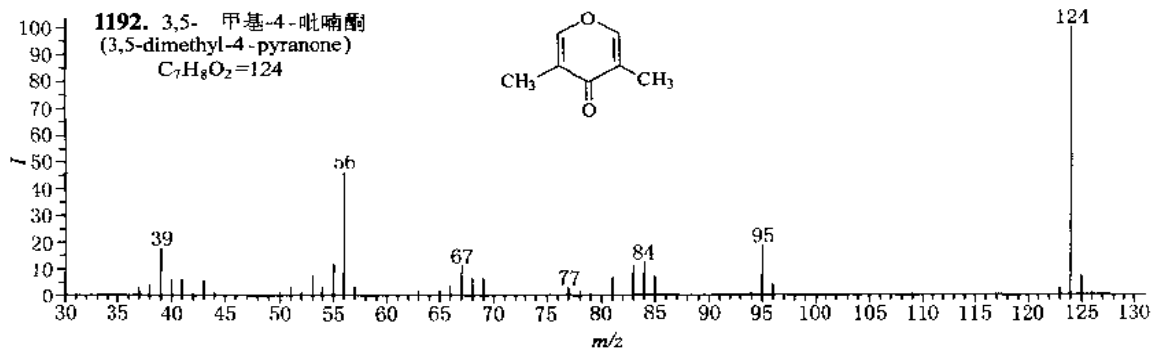


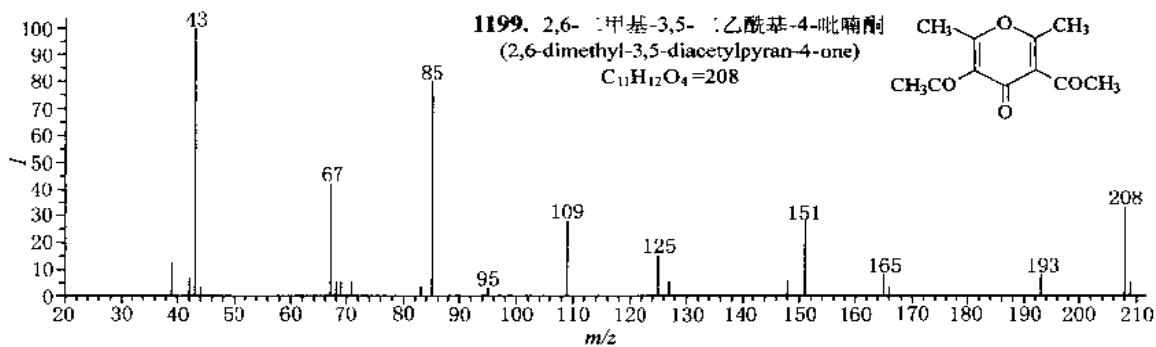
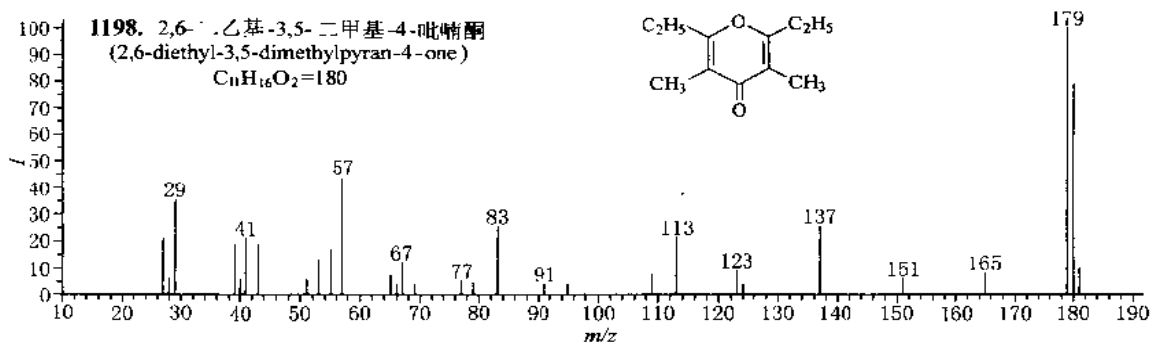
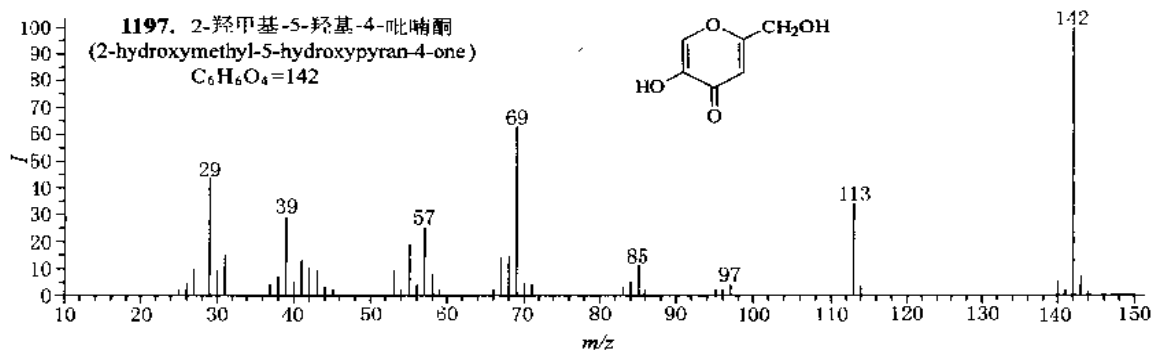
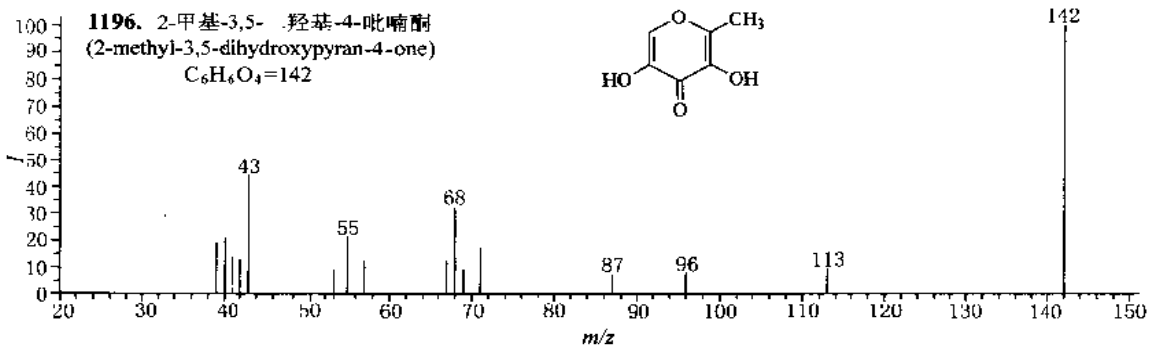


## 十三、4-吡喃酮类

- (1) 四氢-4-吡喃酮 (1189) 的主要碎片离子有  $M-CO$  和  $CH_2CO^{+}$  离子。
- (2) 4-吡喃酮 (1190) 的主要碎片离子来自 RDA 裂解产生的  $M-C_2H_2$  以及再失一氢原子的离子。
- (3) 各种取代的 4-吡喃酮 (1191~1199) 都有  $M-CHO$  离子, 裂解方式尚不清楚。







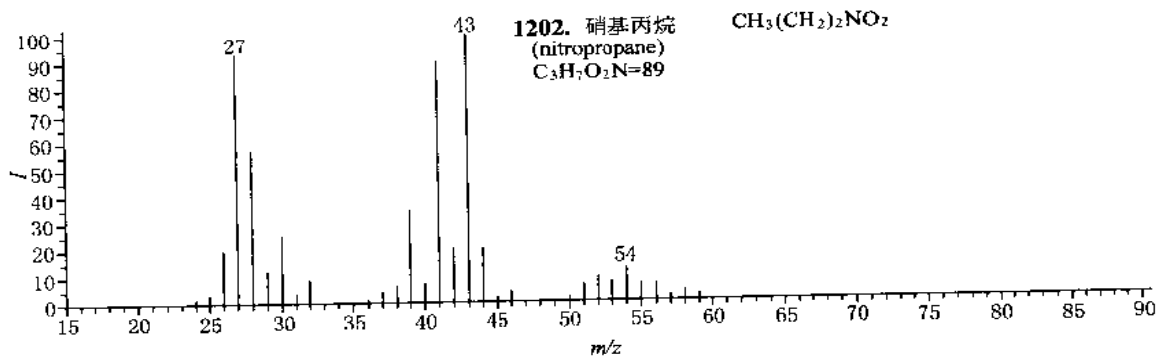
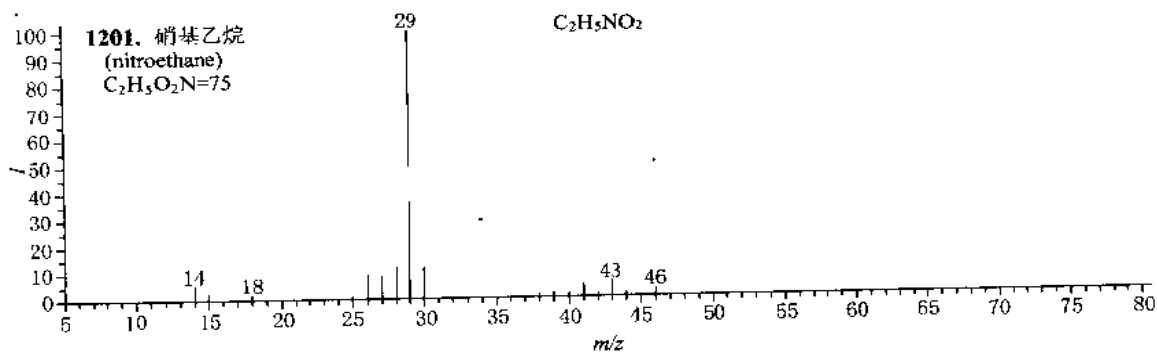
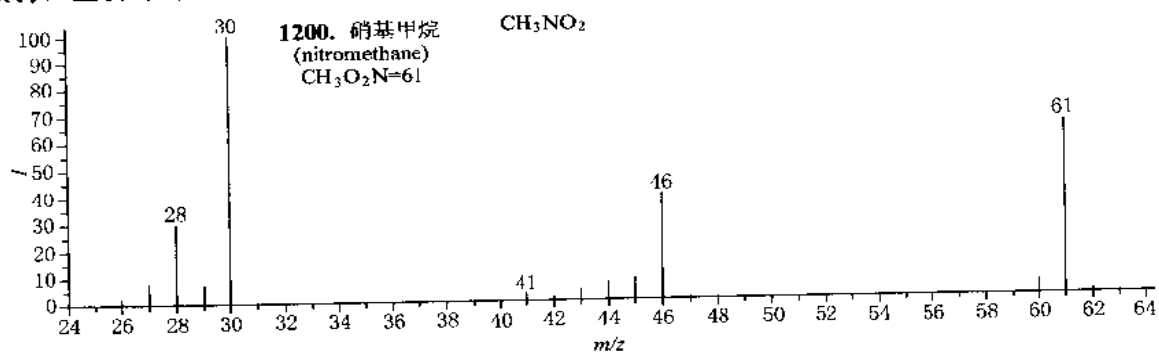
# 第十章 硝基化合物、亚硝酸胺类和胺类

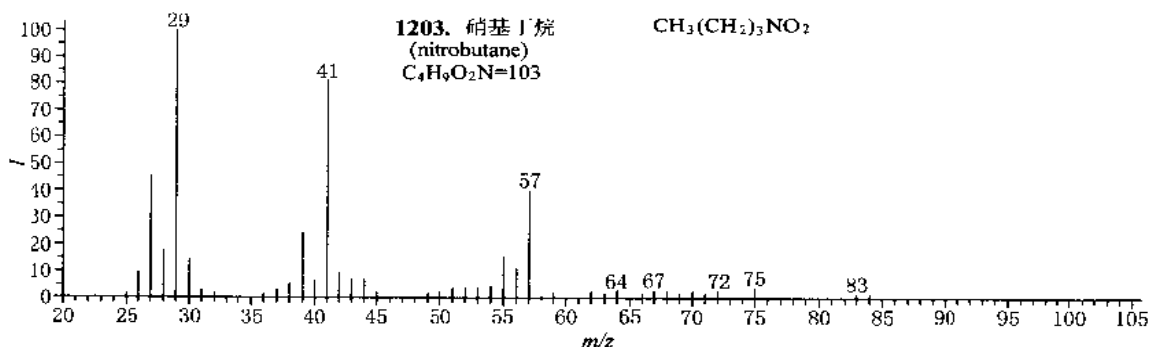
## 第一节 硝基化合物

### 一、硝基烷类

(1) 硝基甲烷 (1200) 的分子离子 ( $m/z$  61) 较强, 另有硝基和·氧化氮离子 ( $m/z$  46 和  $m/z$  30)。

(2) 硝基乙烷 (1201) 以上的化合物分子离子都不出现, 离子  $m/z$  46 和  $m/z$  30 也逐渐减弱, 主要碎片离子是烷基离子 ( $M-NO_2$ )。





## 二、硝基苯类

(1) 硝基苯 (1204)、间甲基硝基苯 (1206) 和对甲基硝基苯 (1207) 的主要裂解途径是  $M-NO-CO$  和  $M-NO_2-C_2H_2$ 。凡有邻甲基取代的硝基苯类 (1205, 1209), 都有  $M-OH-CO$  的裂解途径。对异丙基硝基苯 (1208) 的主要裂解途径是  $M-CH_3-NO-CO$  和  $M-CH_3-NO_2$ 。

(2) 硝基苯甲醚类 (1210~1212) 的主要裂解途径是  $M-NO-OCH_3-CO$  和  $M-NO_2-CH_2O$ 。

(3) 氟代硝基苯类 (1213~1215) 的两条裂解途径是  $M-NO-CO$  和  $M-NO_2-HF$ 。

(4) 硝基苯醇类中的邻位取代者 (1216), 有两条裂解途径, 即  $M-H_2O-NO-C_2H_2$  和  $M-H_2O-NO-CO$ ; 间位和对位取代者 (1217, 1218) 有三条裂解途径, 即  $M-OH$ ,  $M-NO_2-H_2O$  和  $M-NO_2-CH_2O$ 。

(5) 硝基苯甲醛类中的邻位取代者 (1219) 有两条裂解途径, 即  $M-OH-NO-CO-C_2H_2$  和  $M-NO-CO-CO$ ; 间位和对位取代者 (1220, 1221), 只有一条裂解途径, 即  $M-NO_2-CO-C_2H_2$ 。

(6) 硝基苯乙酮类 (1222~1224) 的主要裂解途径是  $M-CH_3-NO_2-CO-C_2H_2$ , 也有  $M-CH_2CO$  离子。

(7) 硝基苯甲酸类中的邻位取代者 (1225) 有两条裂解途径, 即  $M-CO_2-NO-CO$  和  $M-NO_2-CO_2-C_2H_2$ ; 间位和对位取代者 (1226, 1227) 的裂解途径是  $M-NO_2-CO-CO$ , 其中要进行羟基重排。

(8) 硝基苯甲酰胺类中的邻位取代者 (1229), 主要裂解途径是  $M-H_2O-NO-NH_2$ , 另有强峰  $M-NH_2$ 。间位和对位取代者 (1230, 1231) 的主要裂解途径是  $M-NH_2-NO_2-CO-C_2H_2$ , 对位取代者还有一条裂解途径是  $M-H_2O-NO_2$ , 但尚不能肯定。

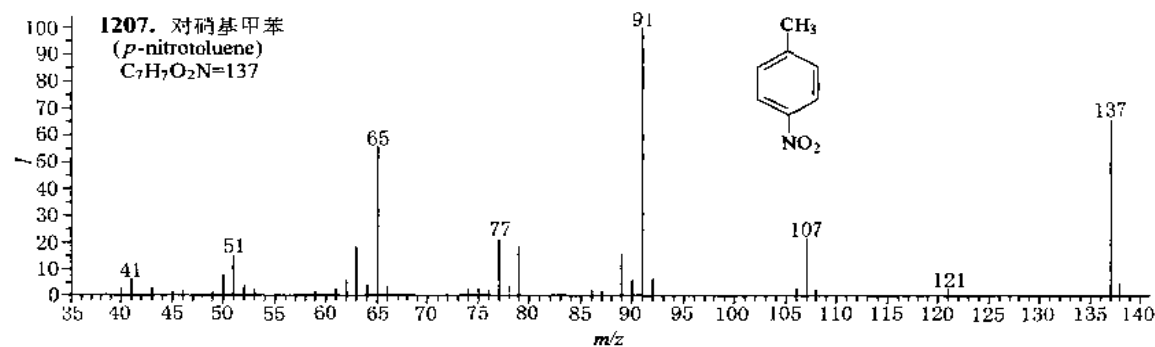
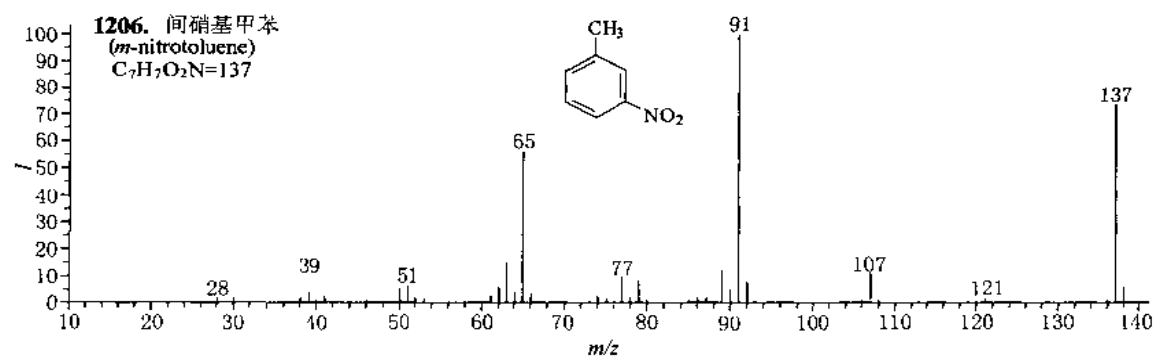
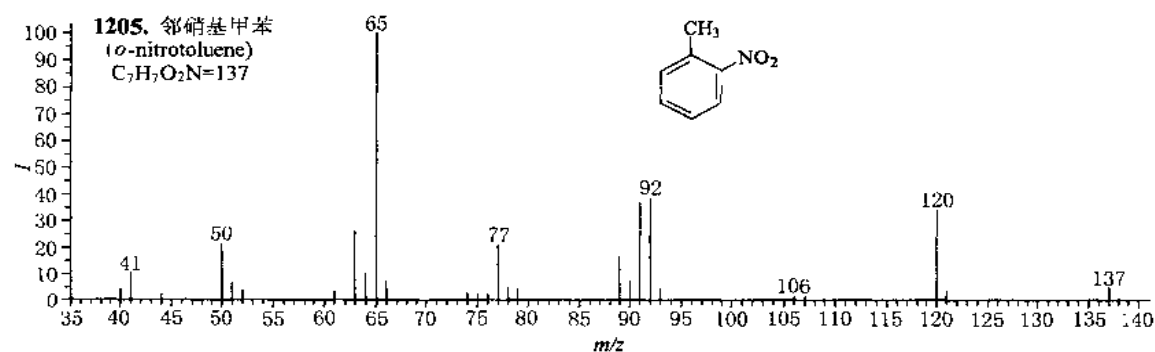
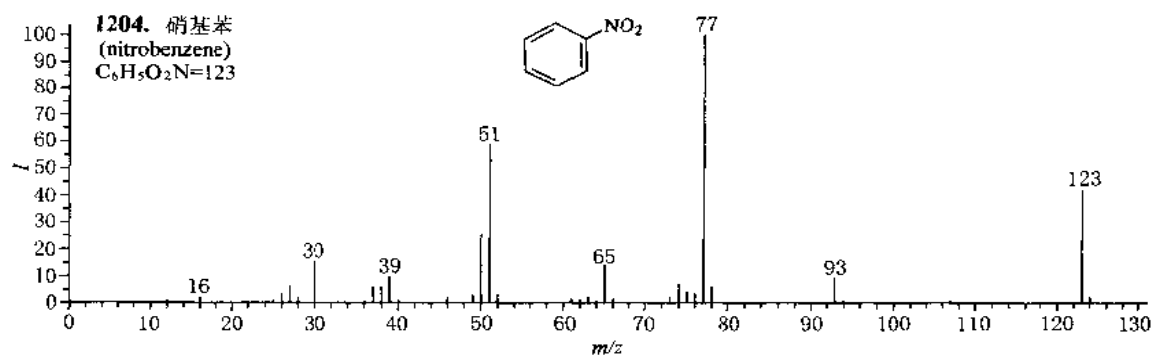
(9) 3个硝基苯胺异构体 (1232~1234) 的主要裂解途径都是  $M-NO_2-CN$ , 次要裂解是  $M-NO-CO$ 。

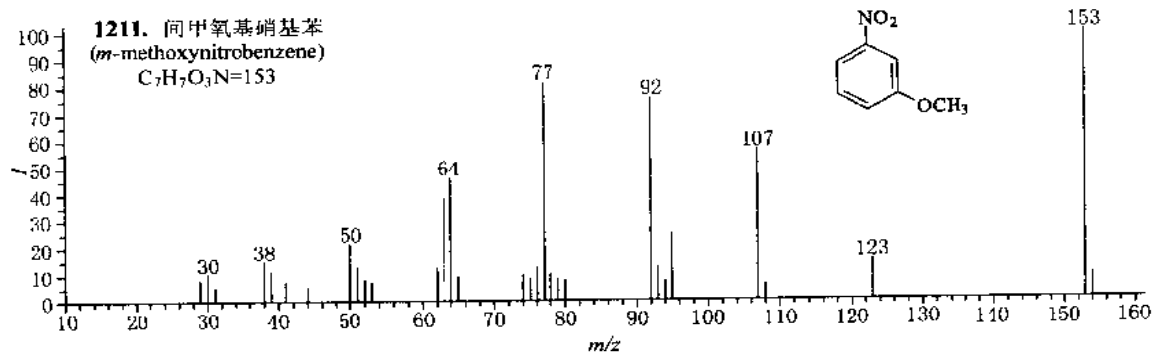
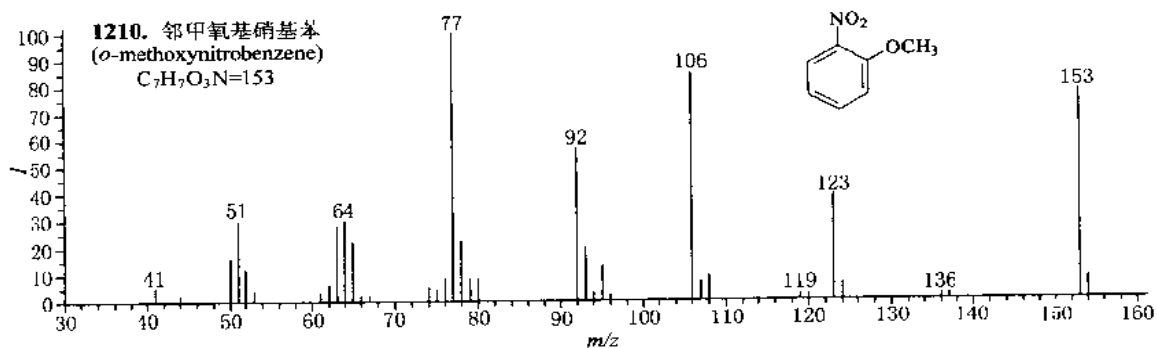
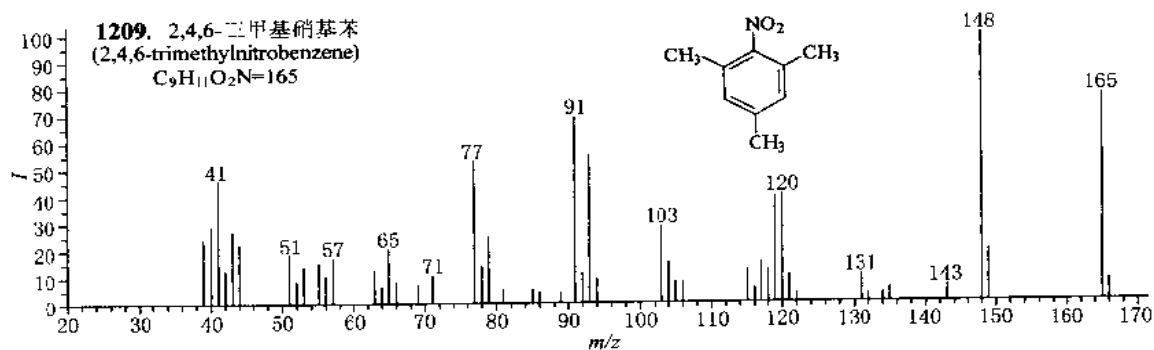
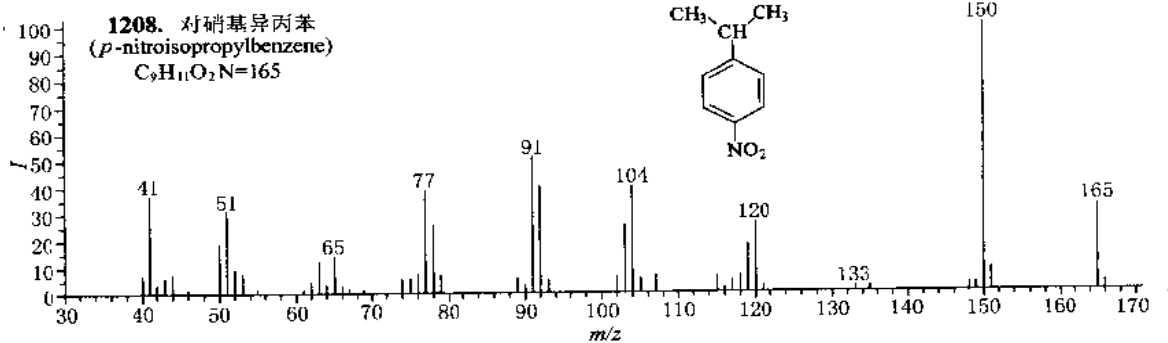
(10) 硝基苯肼类中的邻位取代者 (1239), 主要离子是苯基离子及其再失乙炔的离子; 间位和对位取代者 (1240, 1241) 的主要离子是  $M-NH_3$ ,  $M-NH_3-NO_2$  和  $M-NO_2$ 。

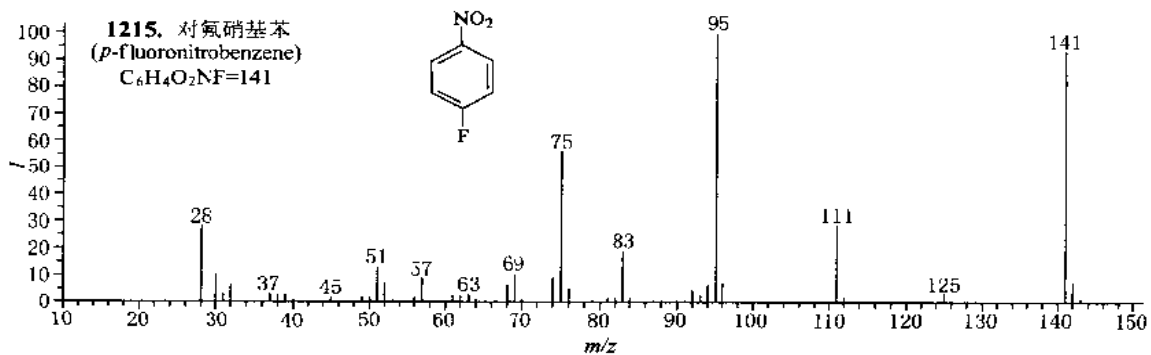
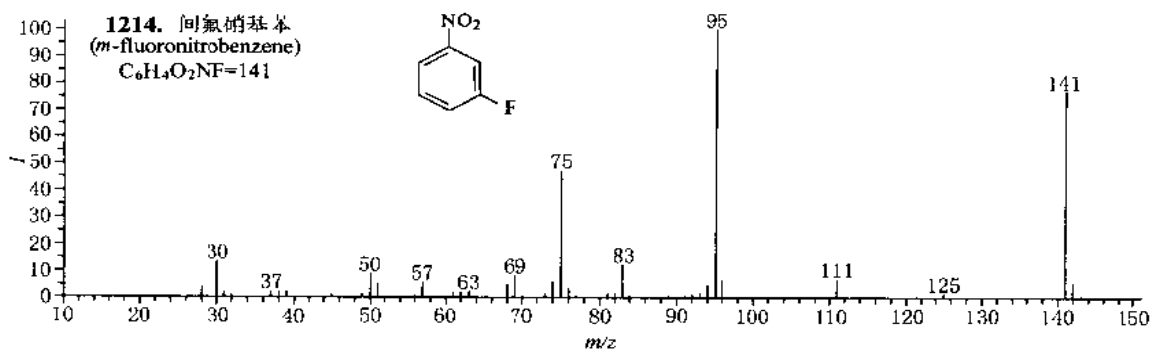
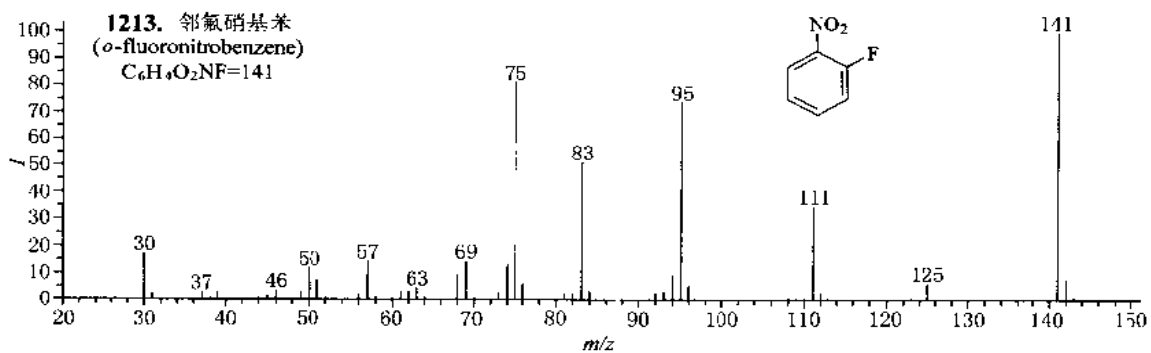
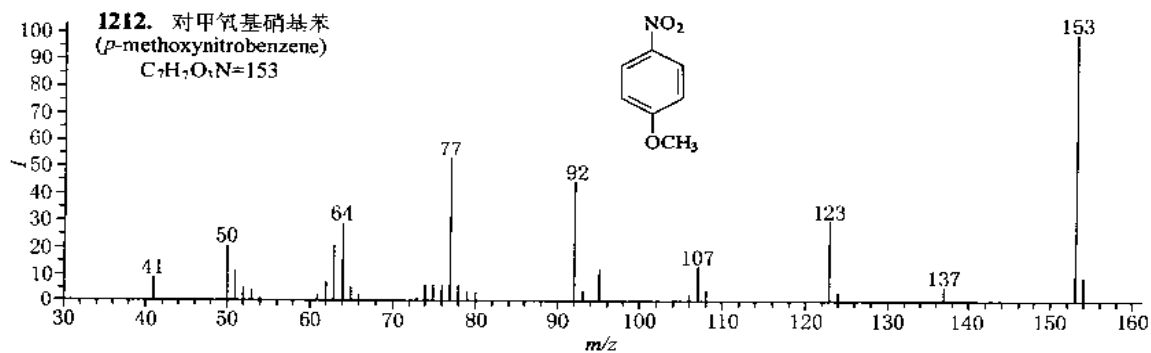
(11) 邻二硝基苯 (1242) 的主要裂解是  $M-NO-H_2O$ , 间和对二硝基苯有 (1243, 1244) 两条裂解途径, 即  $M-NO_2-NO_2-C_2H_2$  和  $M-NO_2-NO-CO$ 。二硝基甲苯类 (1245~1250) 中的甲基和硝基相邻时 (1245~1249), 都有强峰  $M-OH$ , 不相邻时 (1250), 特征裂解不明显。二硝基苯甲酸中的硝基和羧基相邻时 (1251, 1254, 1255) 易失二氧化碳, 不相

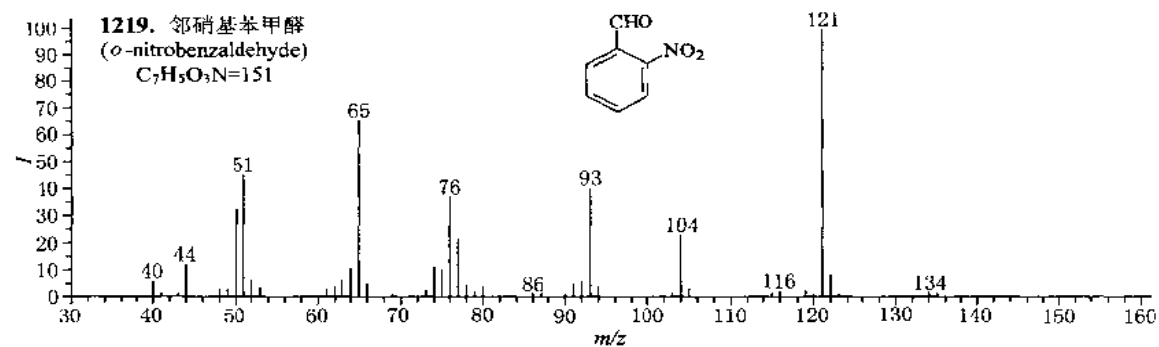
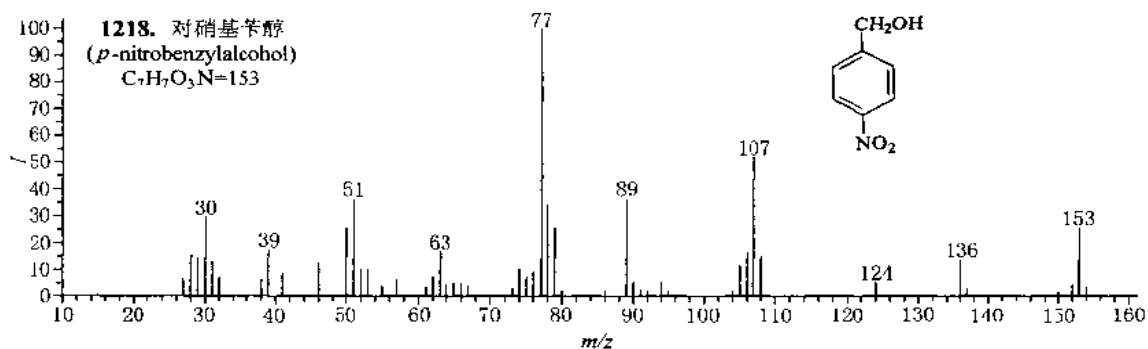
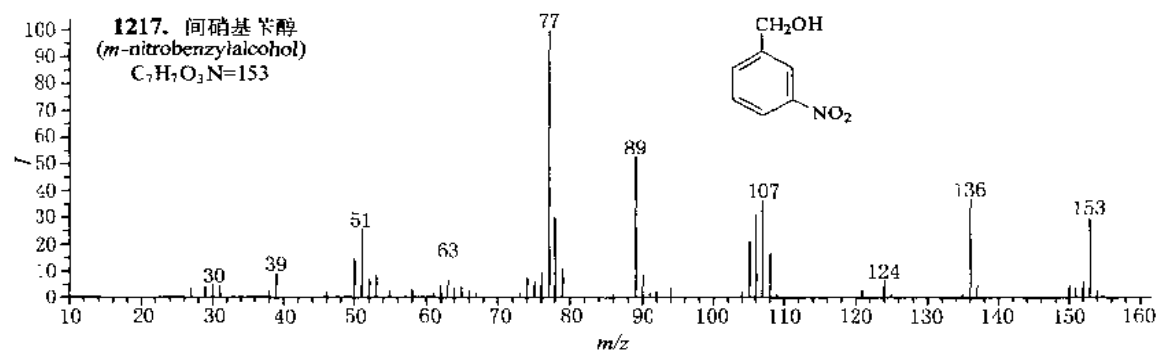
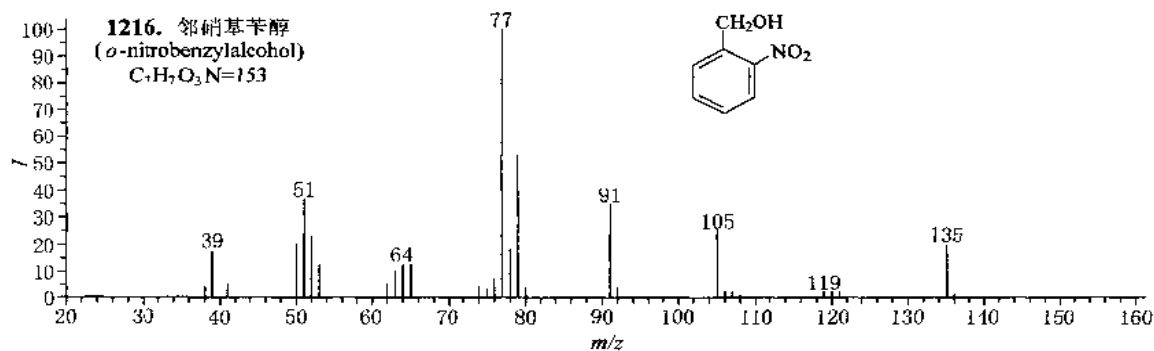


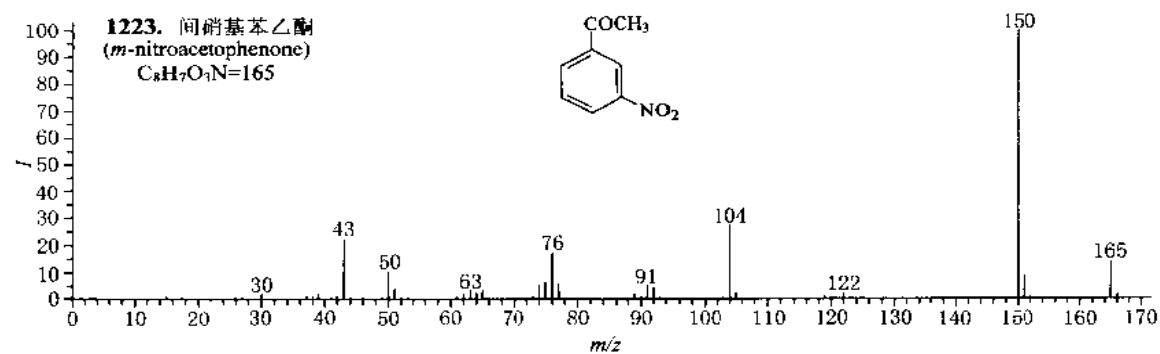
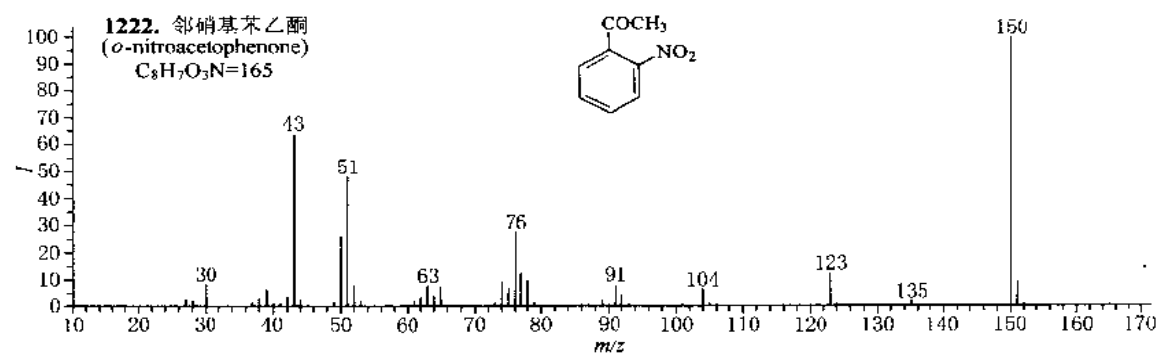
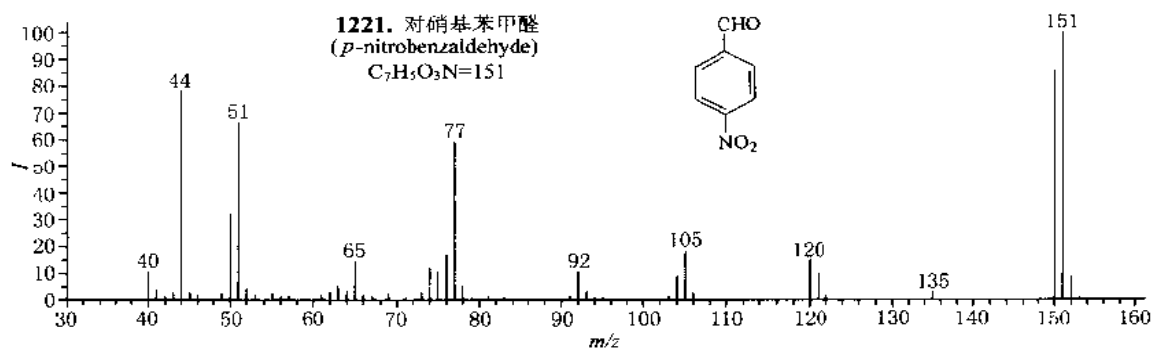
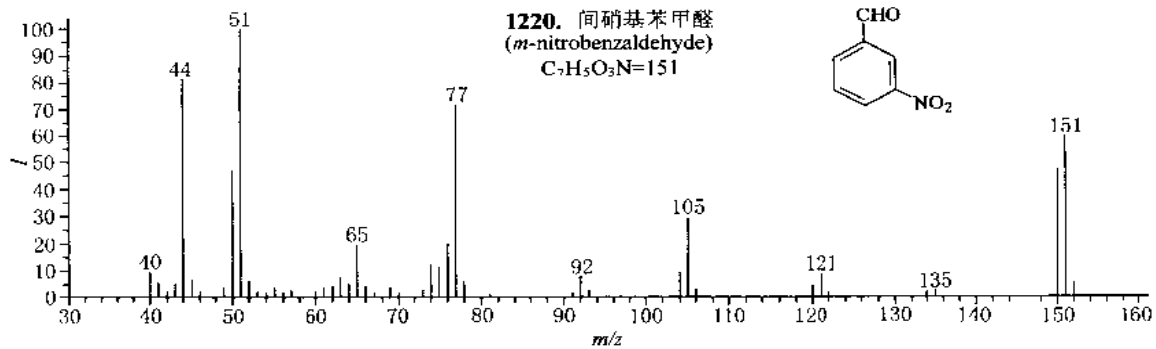
邻时 (1252, 1253) 特征裂解不明显。二硝基苯胺 (1256) 的主要裂解是失  $\text{NO}_2$  或失  $\text{NO}$ , 最后是失去  $\text{CNH}$ 。二硝基萘类 (1257~1262) 有两条裂解途径, 即  $\text{M}-\text{NO}-\text{NO}_2-\text{CO}$  和  $\text{M}-\text{NO}_2-\text{NO}_2$ 。三硝基甲苯类 (1263, 1264) 中的甲基与硝基相邻时, 有明显的  $\text{M}-\text{OH}$  离子。三硝基苯甲醛 (1265) 的主要裂解途径是  $\text{M}-\text{H}-\text{NO}-\text{NO}$ , 三硝基苯胺 (1266) 的主要裂解途径是  $\text{M}-\text{NH}_2-\text{NO}_2-\text{NO}-\text{NO}_2$ 。

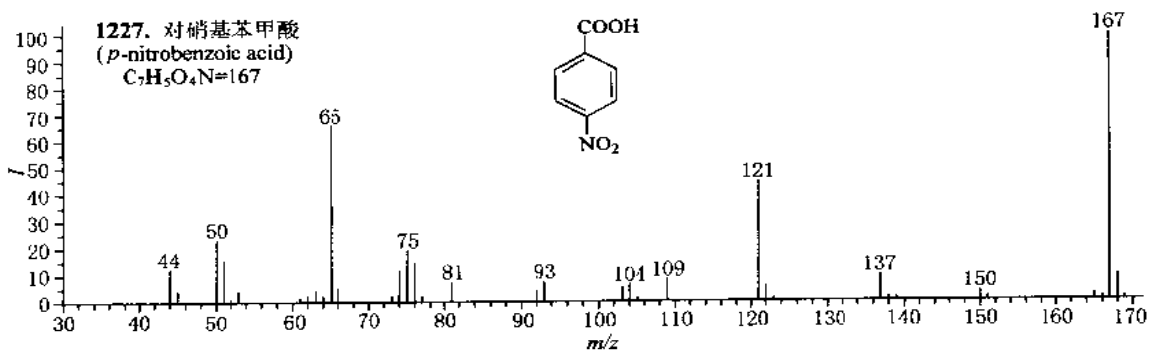
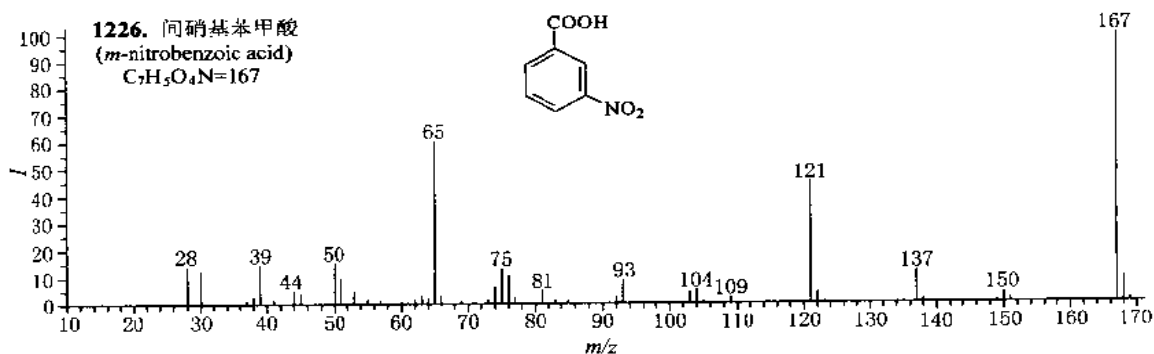
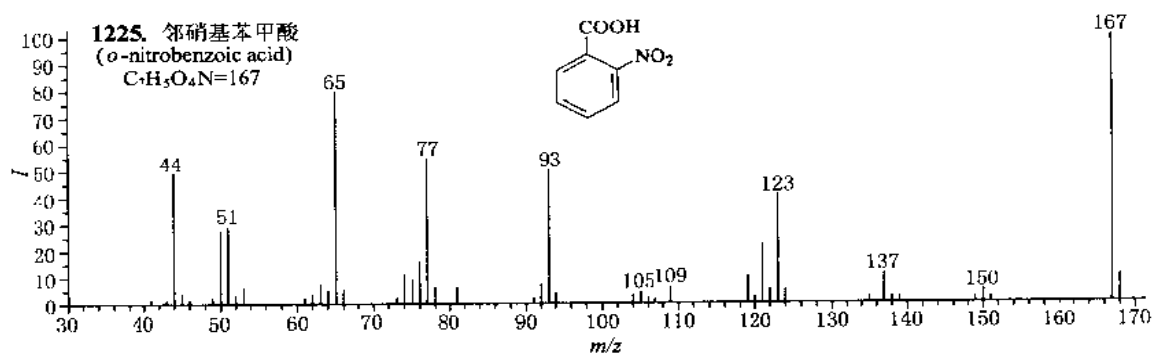
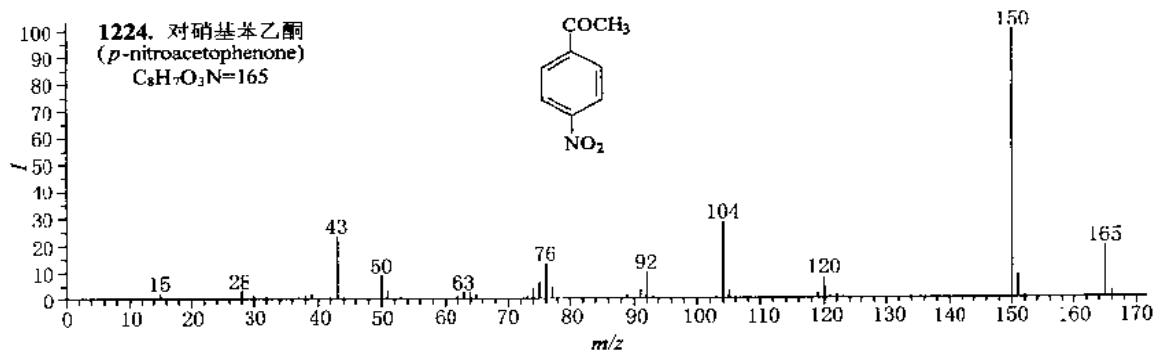


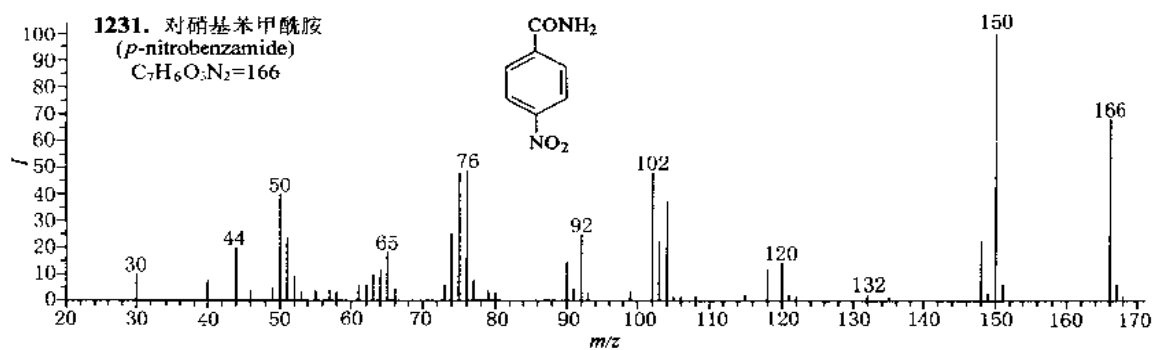
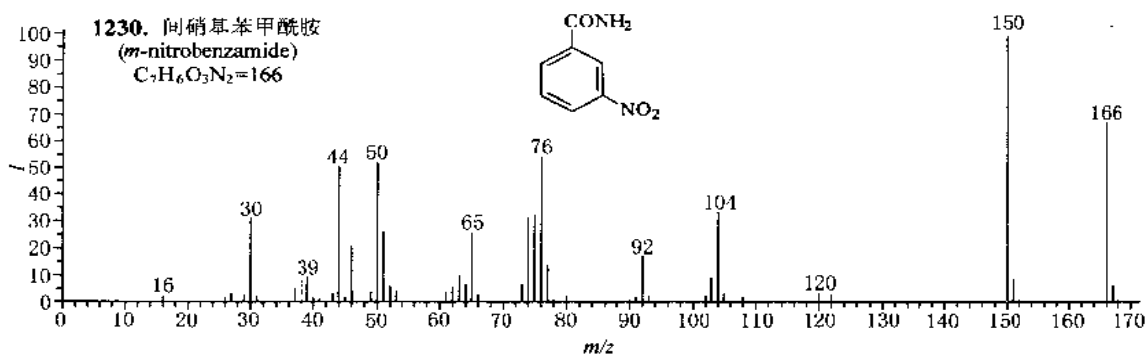
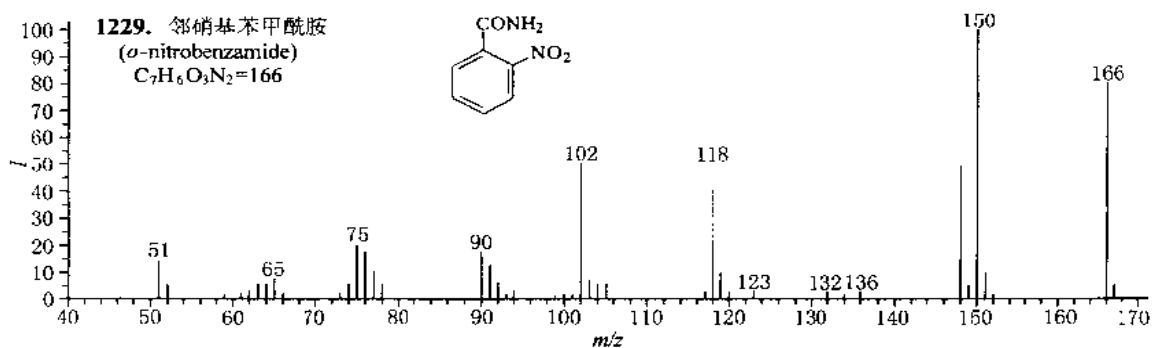
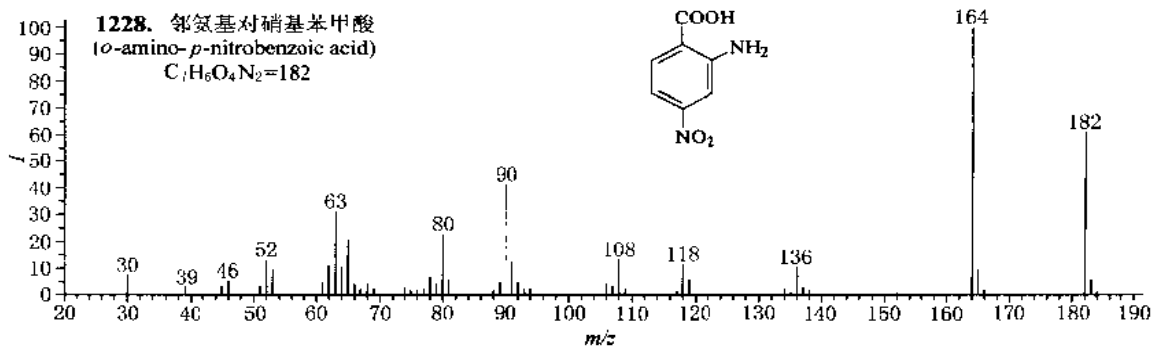


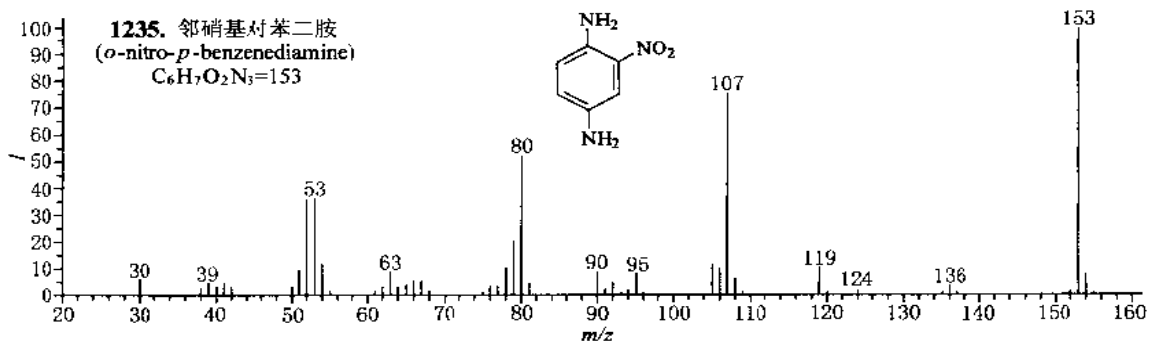
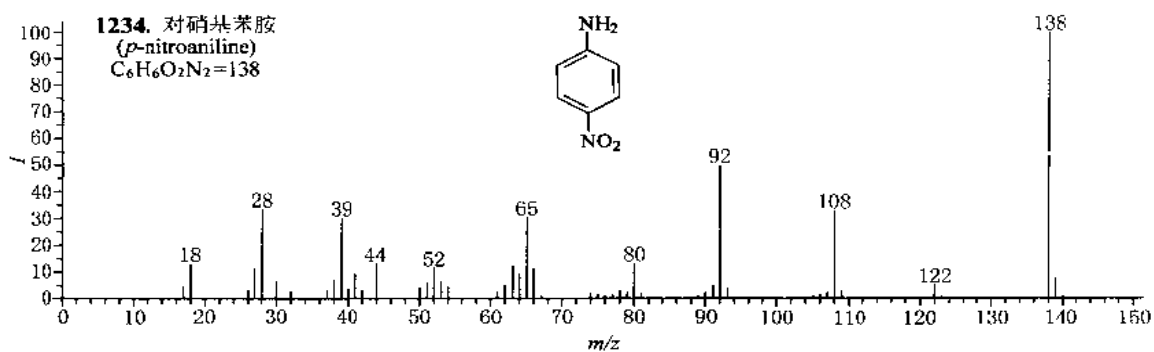
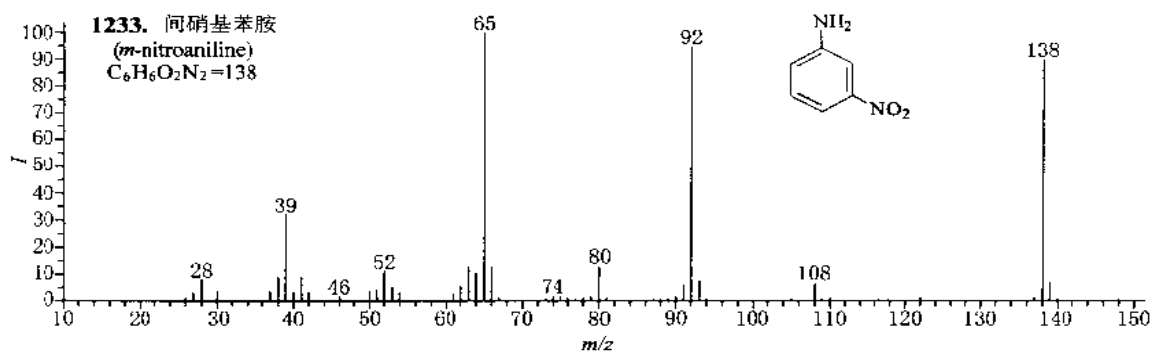
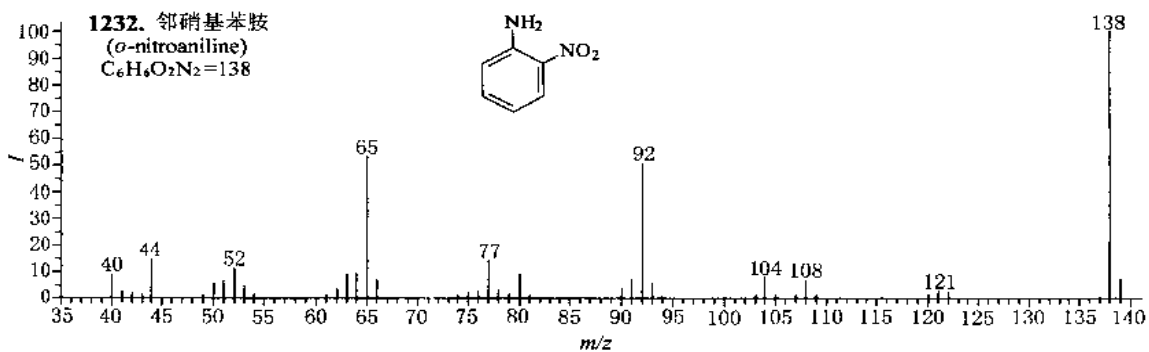




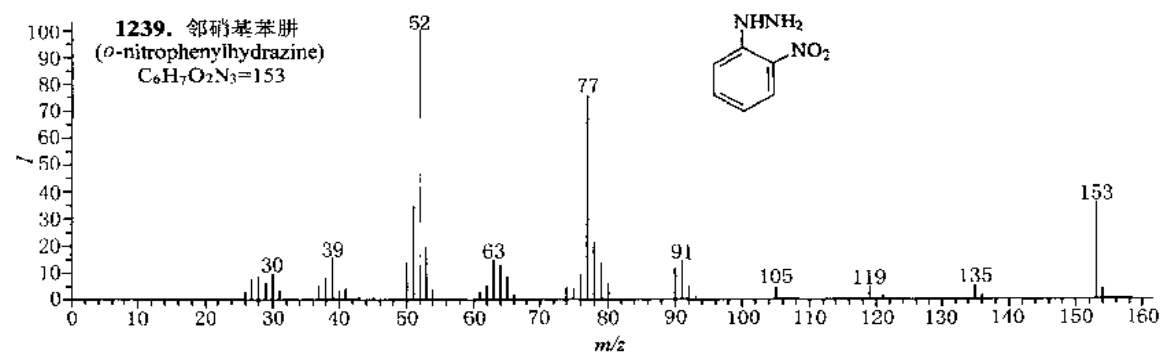
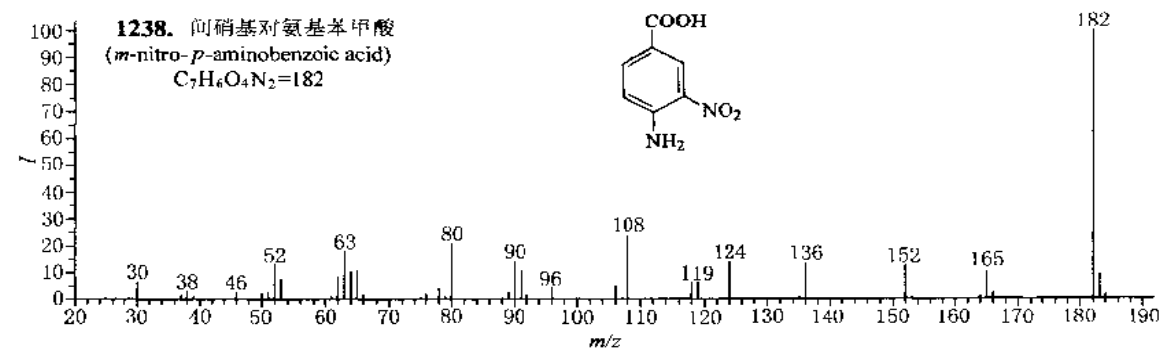
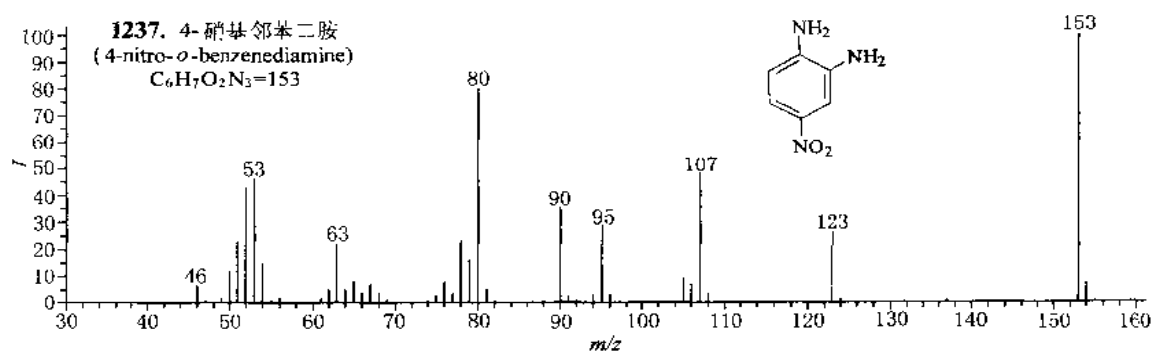
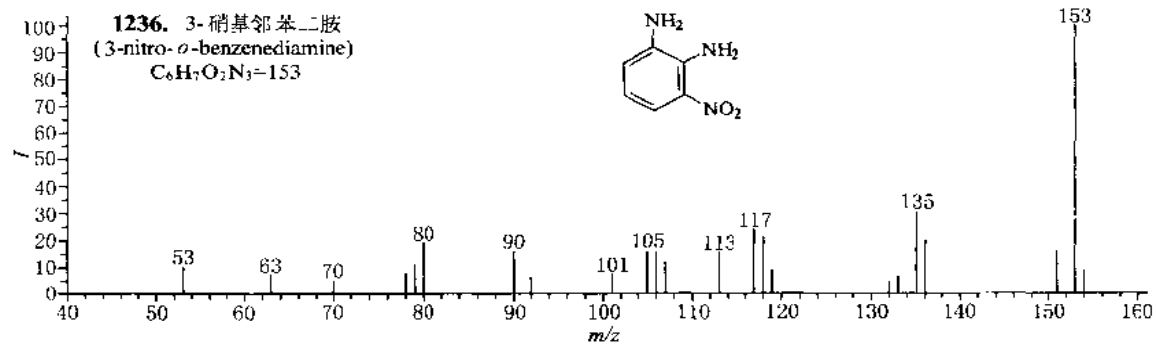


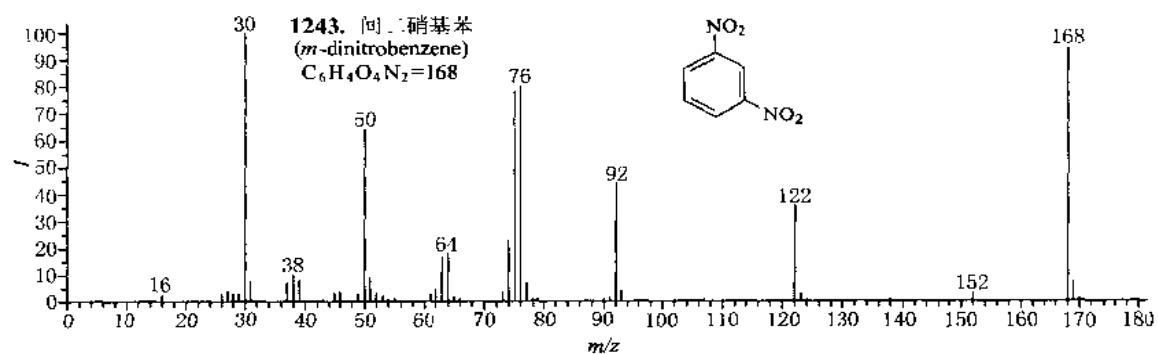
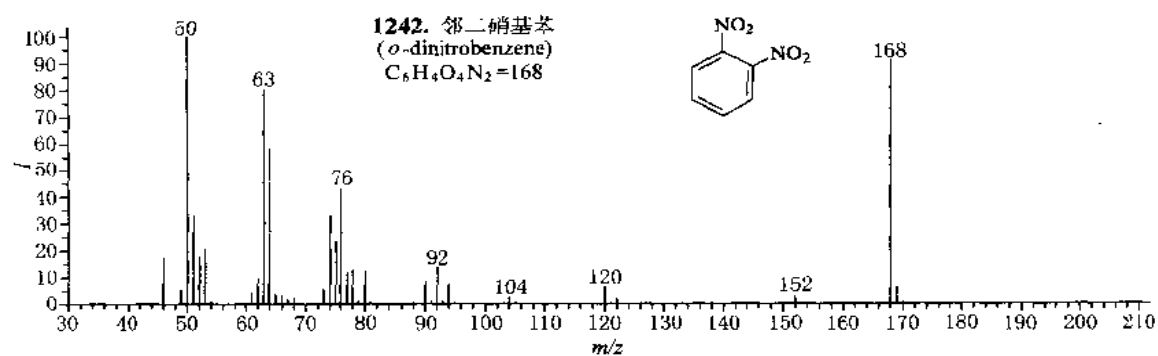
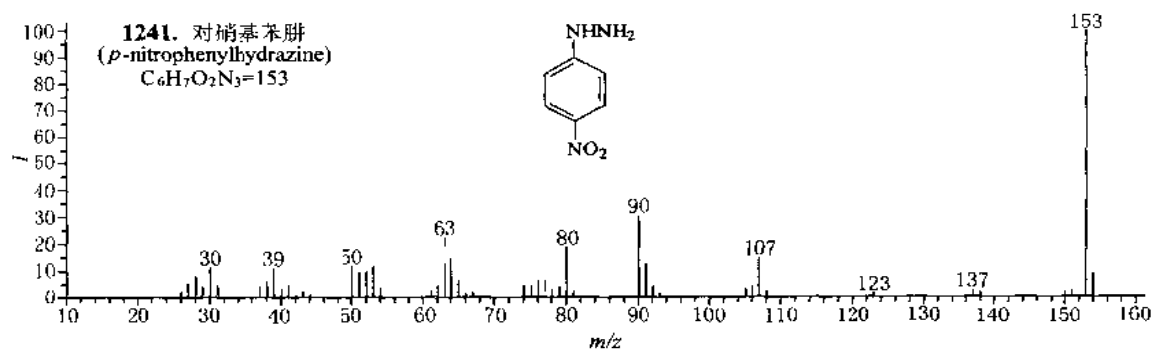
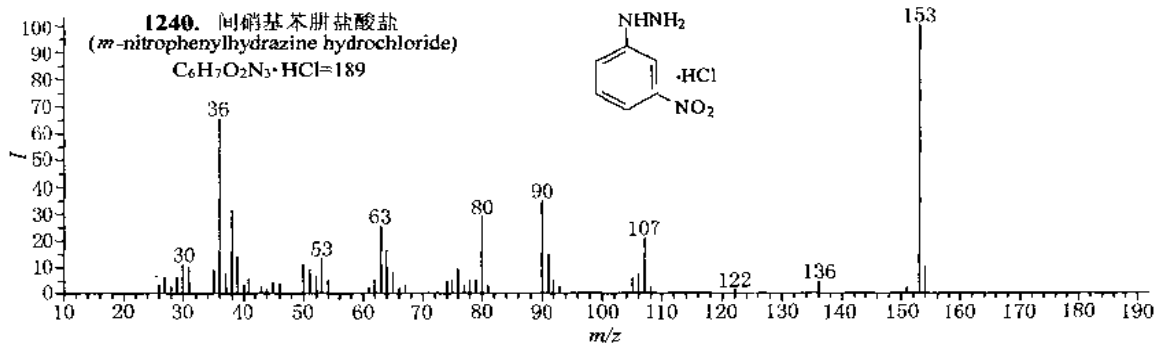


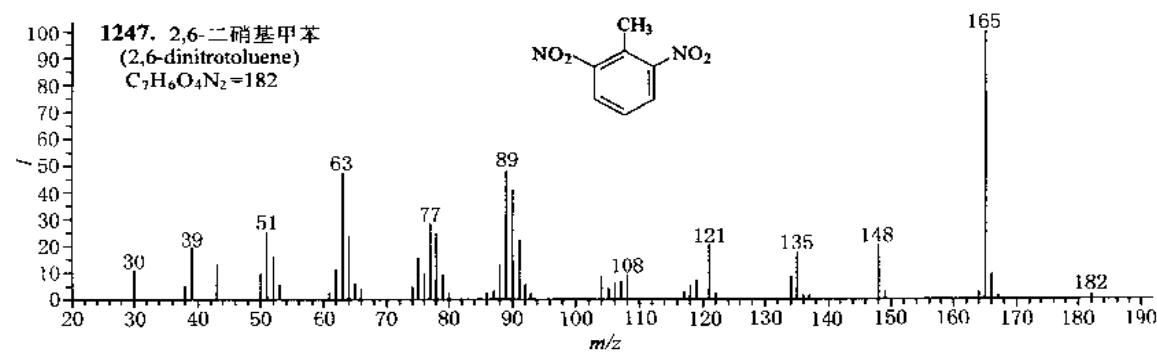
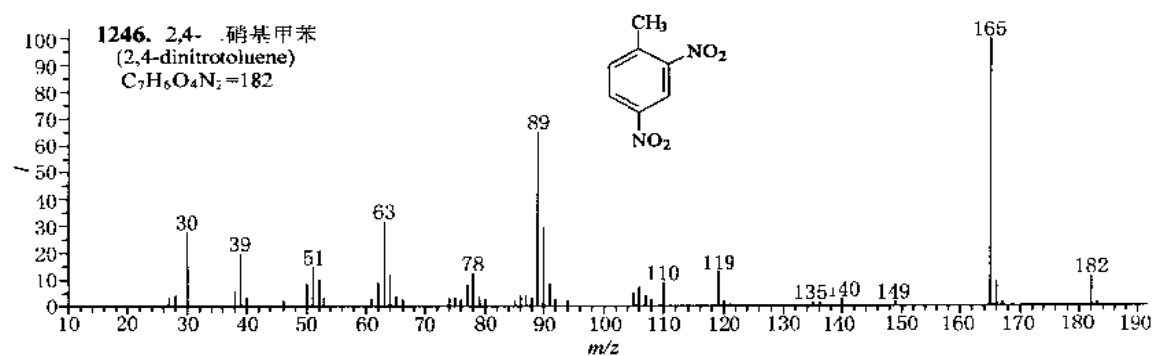
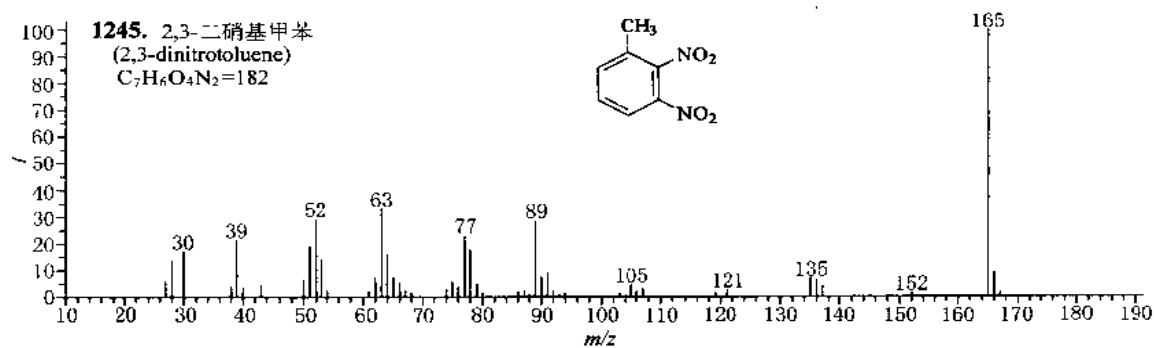
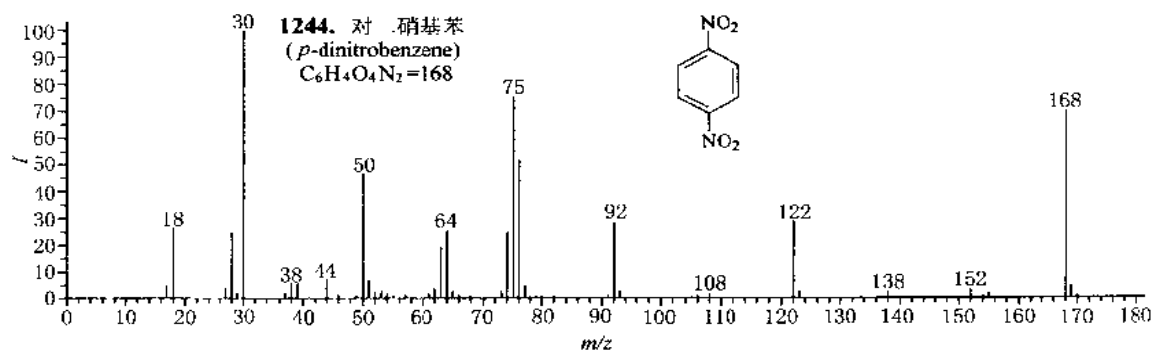


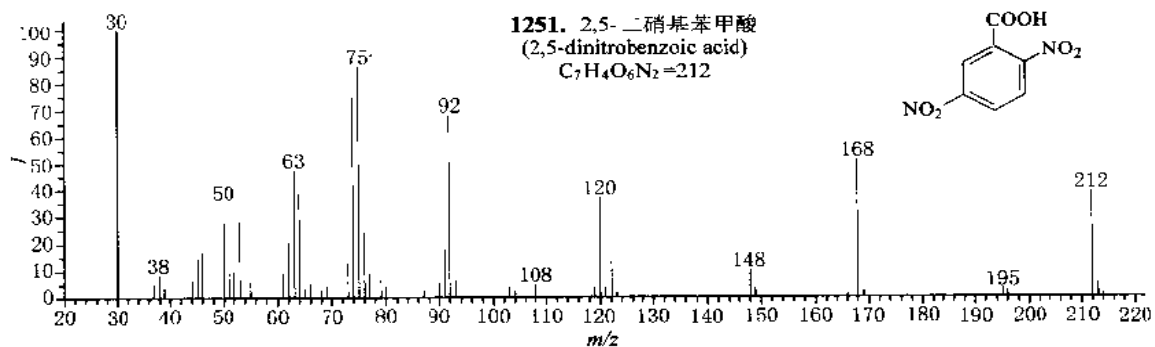
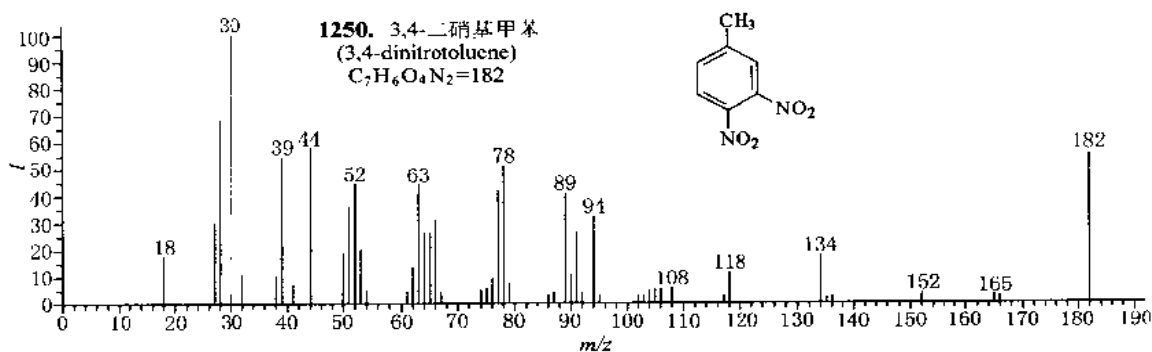
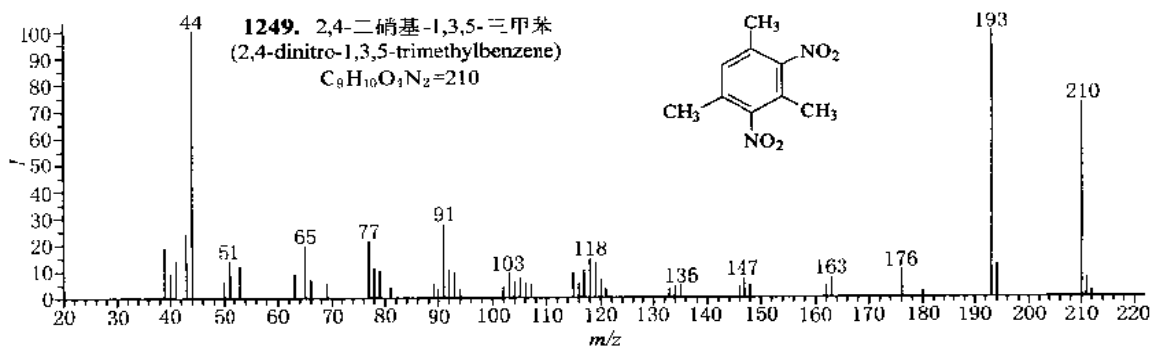
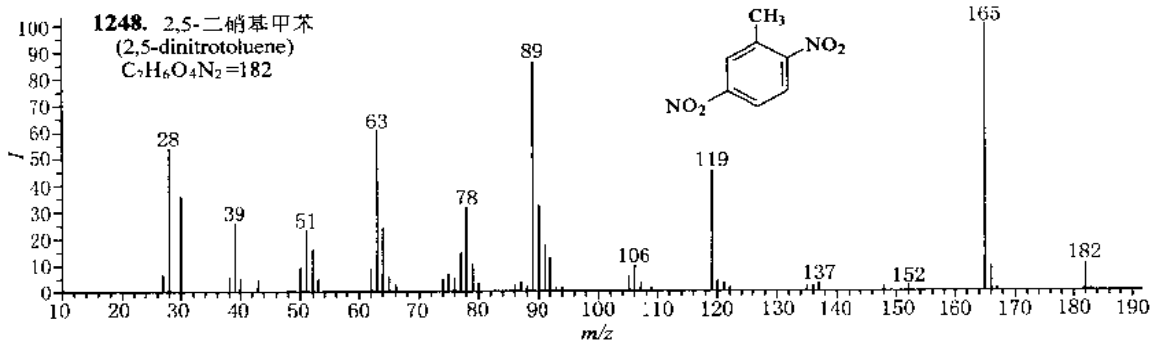


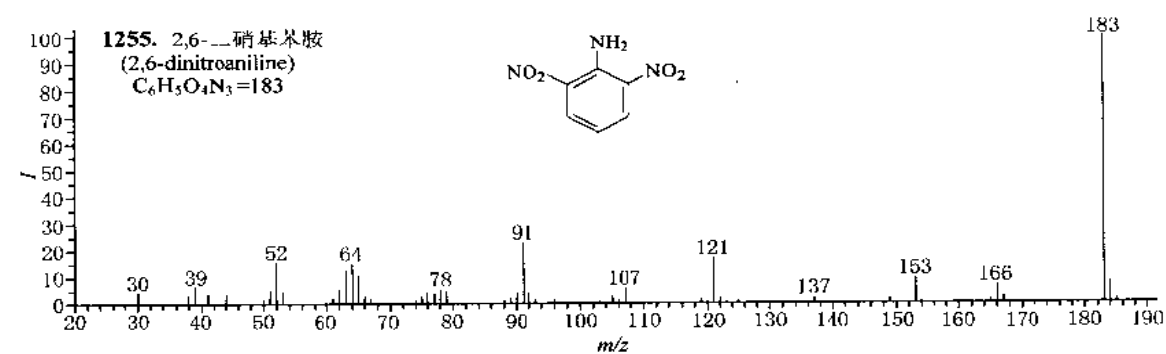
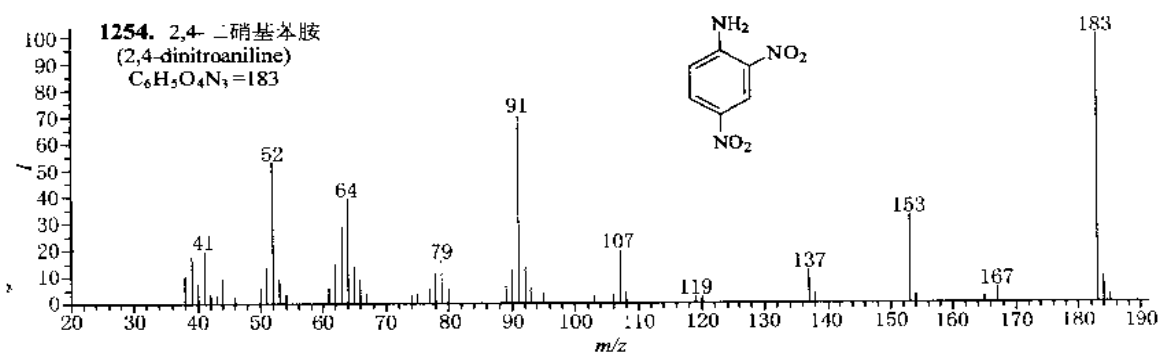
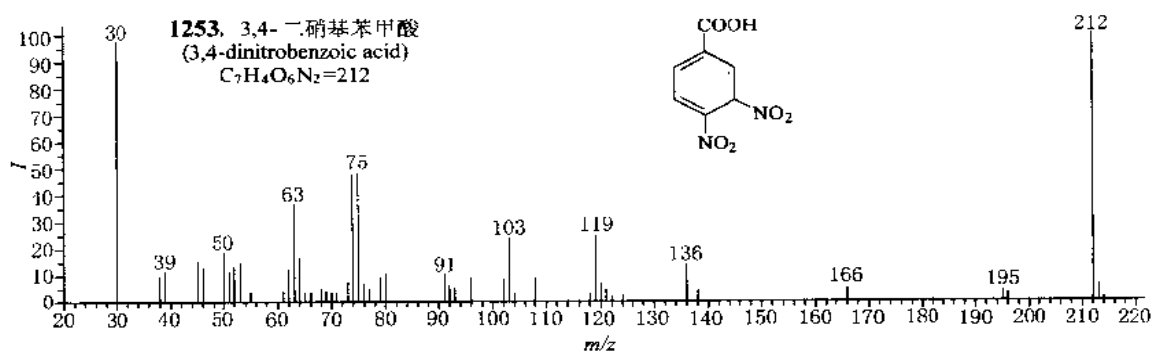
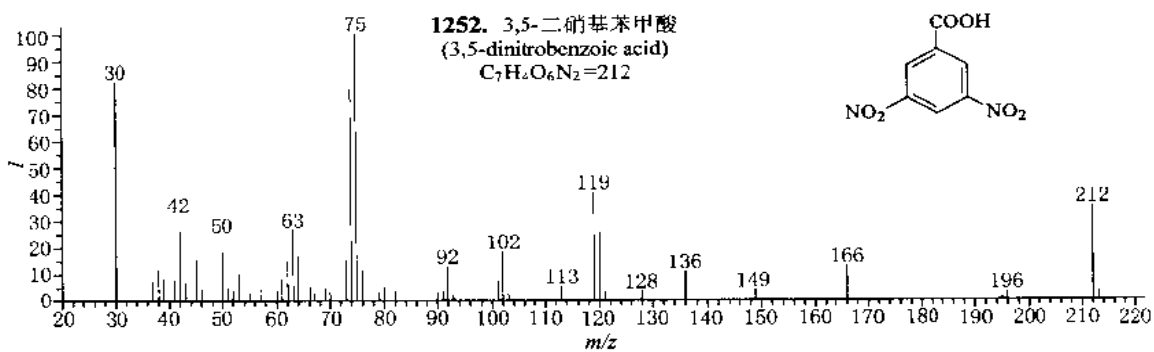


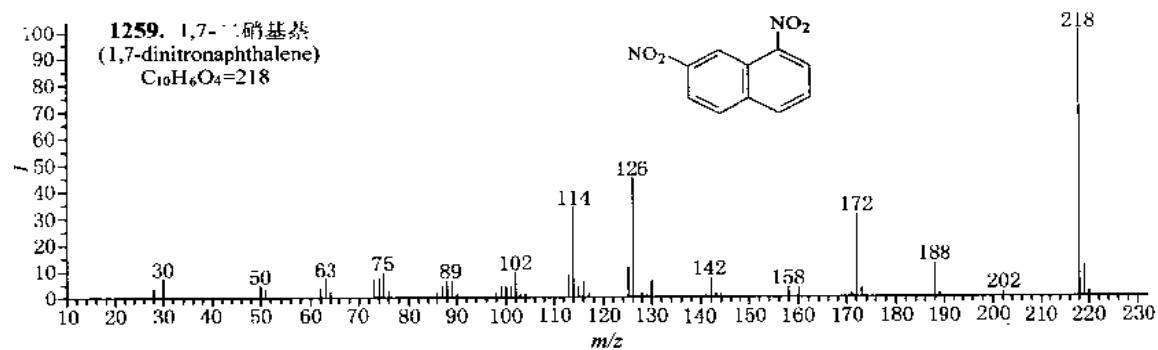
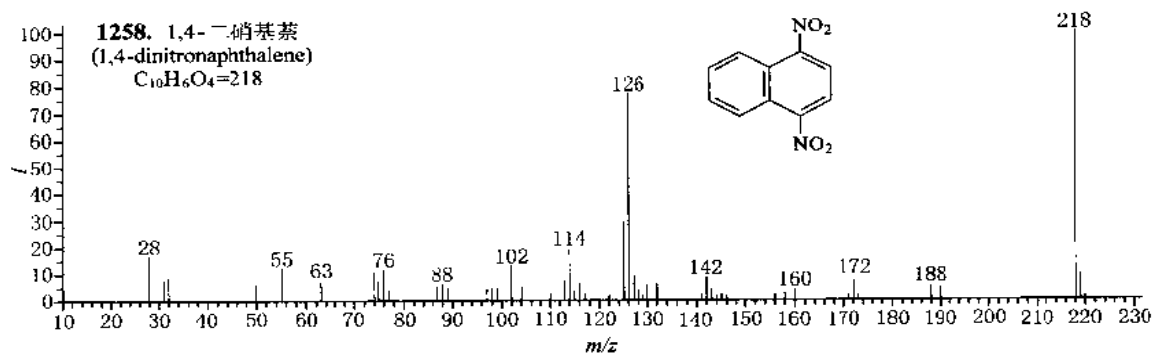
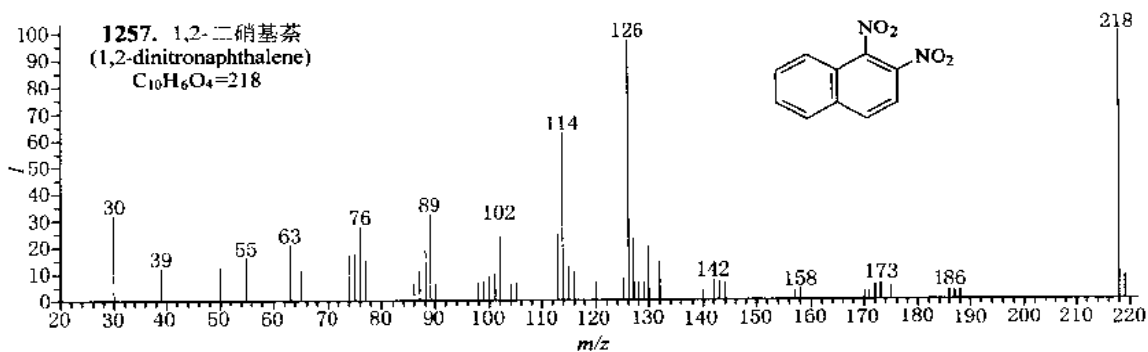
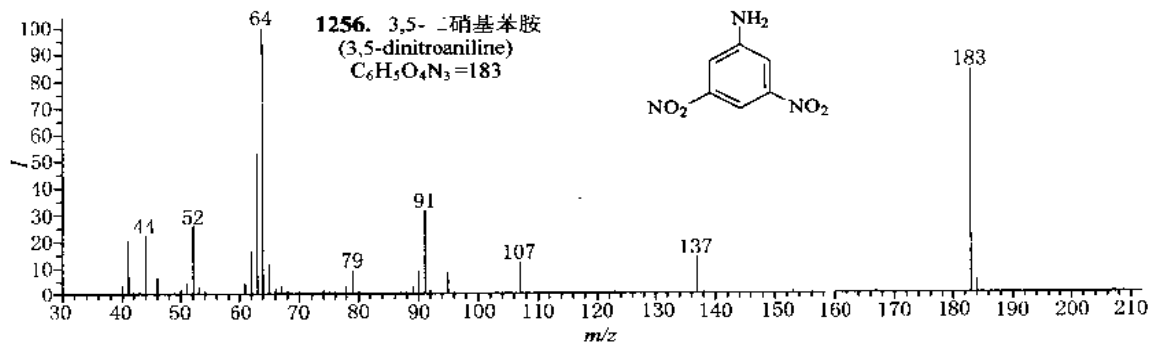


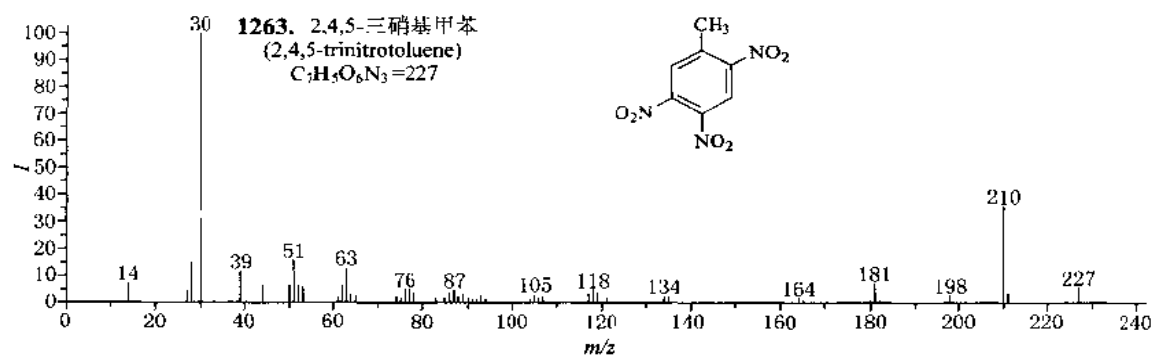
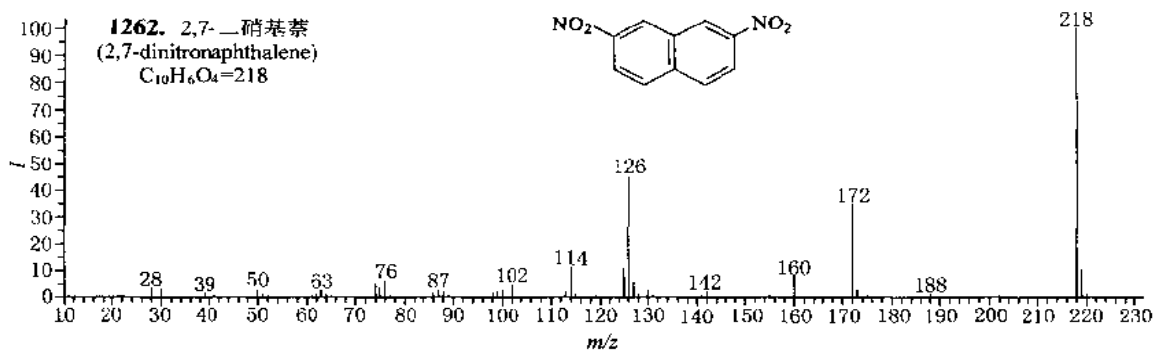
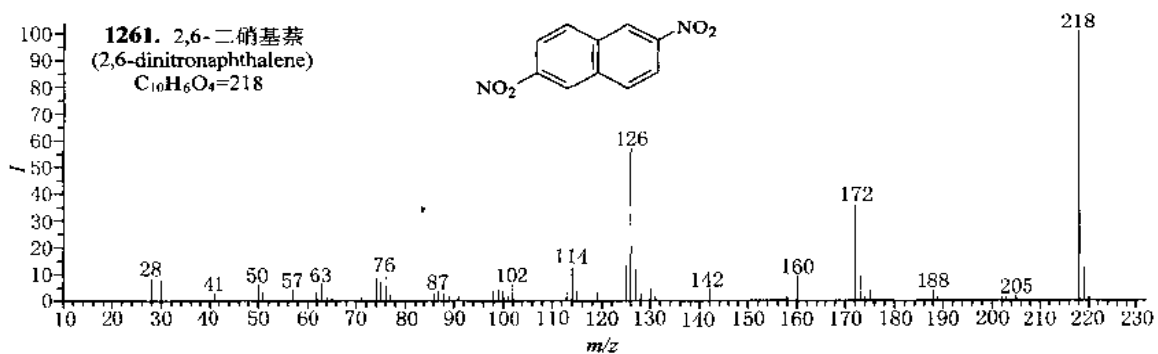
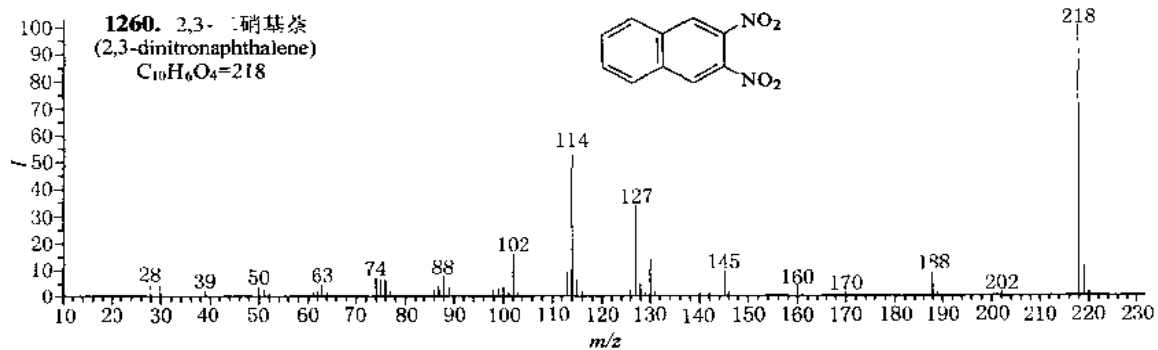


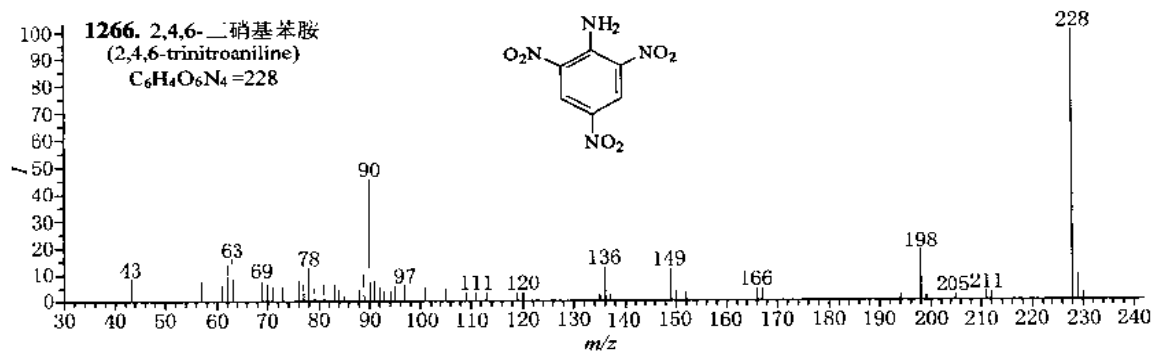
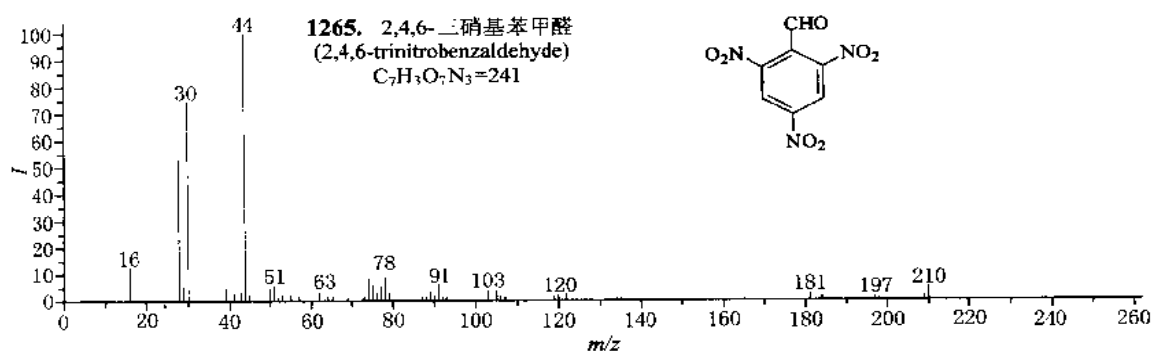
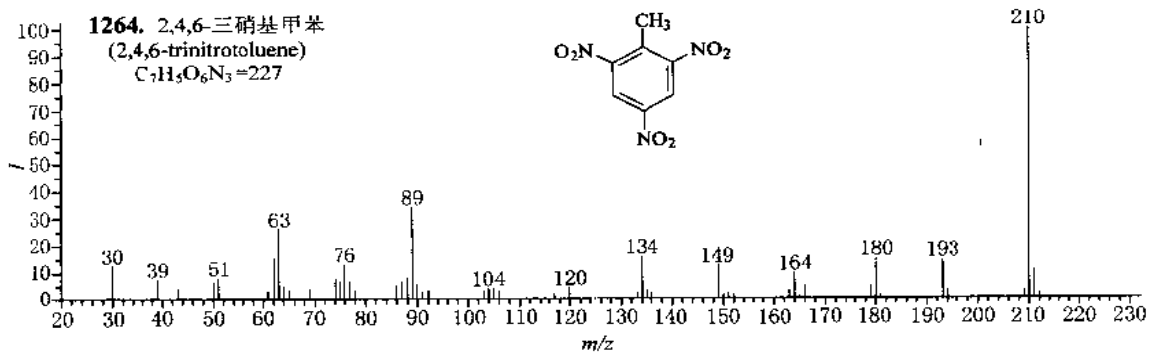










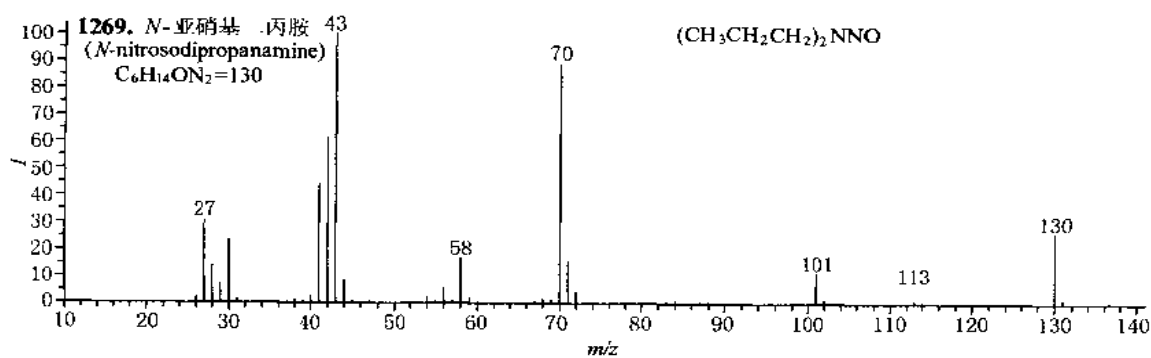
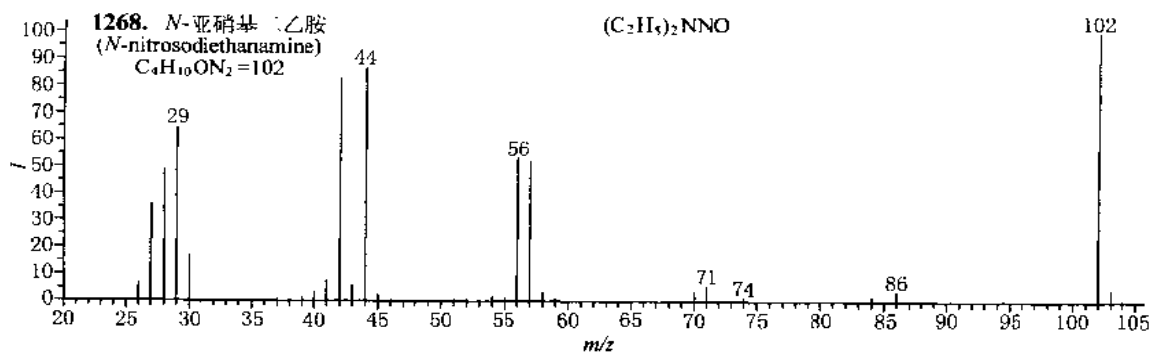
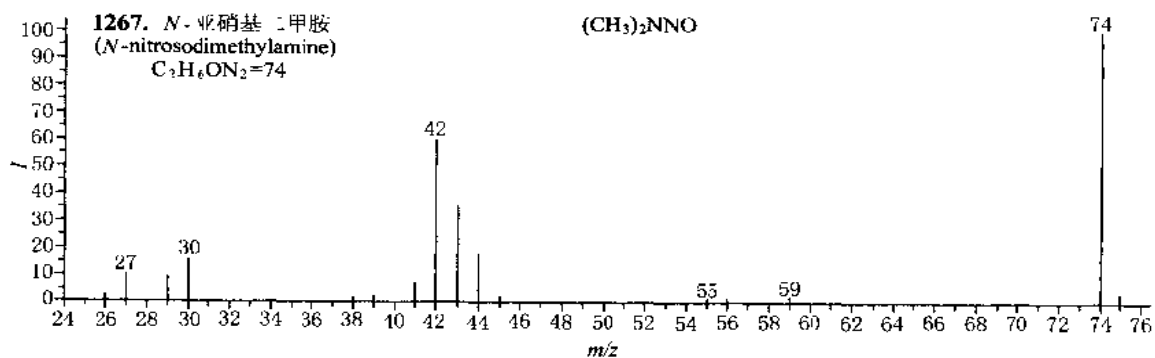


## 第二节 亚硝酸胺类

### 一、直链亚硝酸胺类

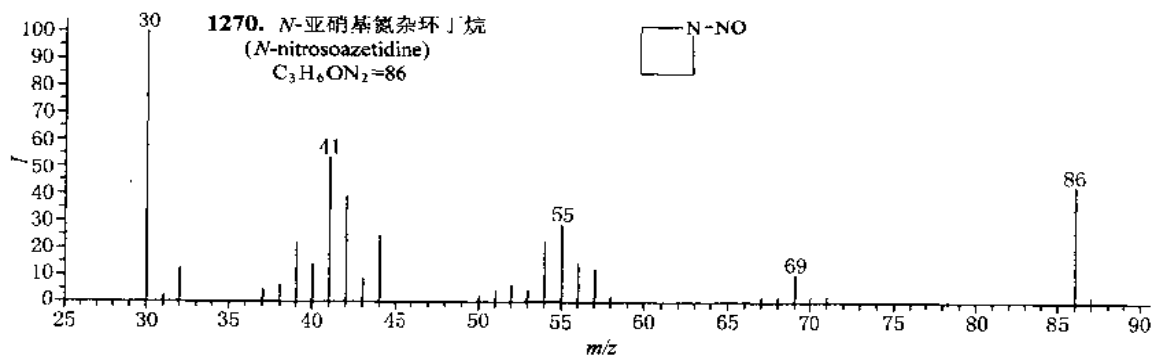
这类化合物 (1267~1269) 都有  $NO^+$  离子和  $R-\bar{N}\equiv CH$  ( $R$ -烷基) 离子, 长链亚硝酸胺类有  $\alpha$ -裂解失去烷基的离子。

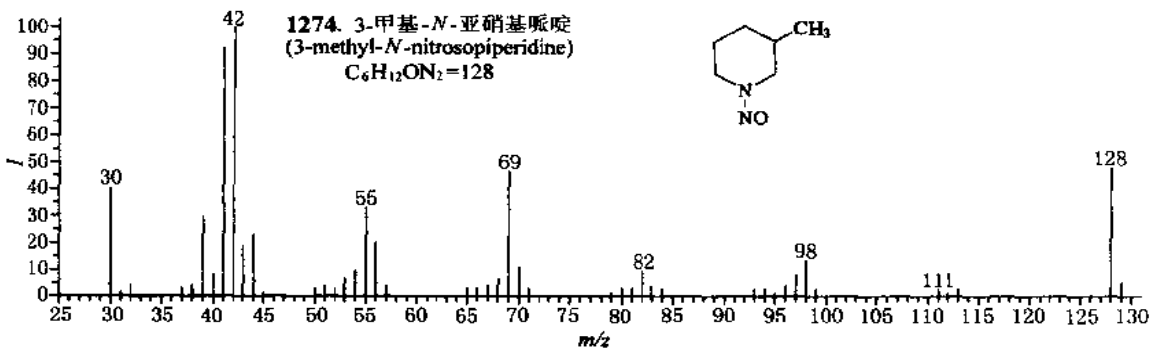
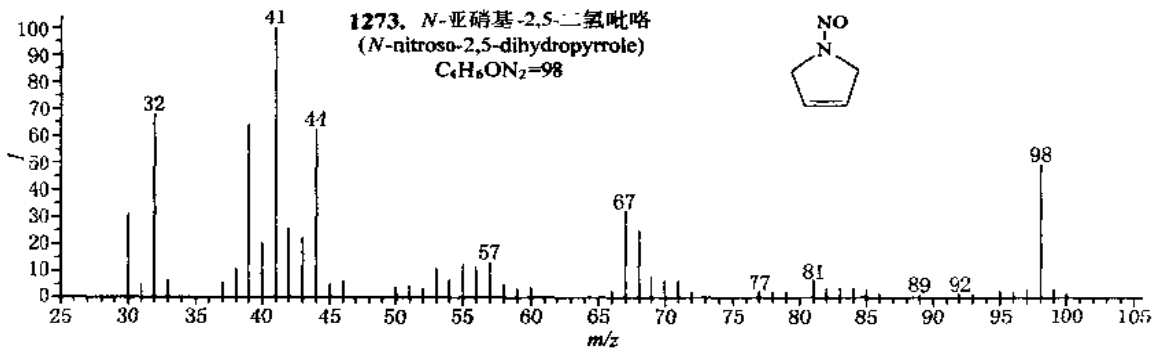
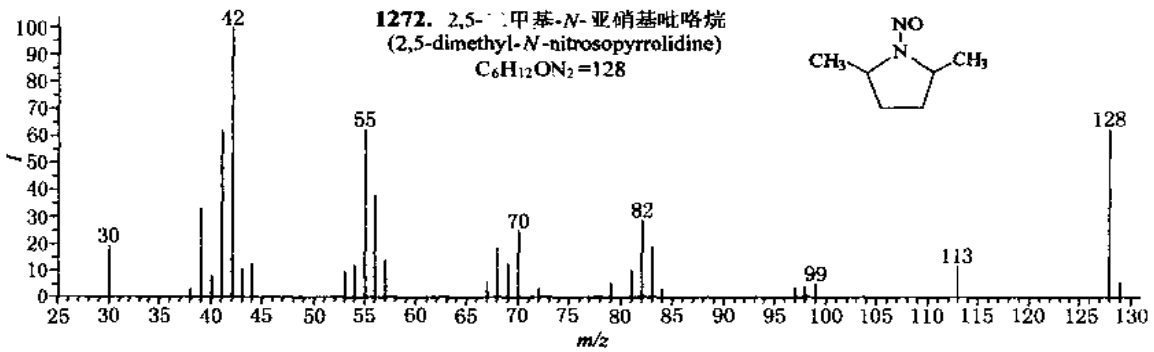
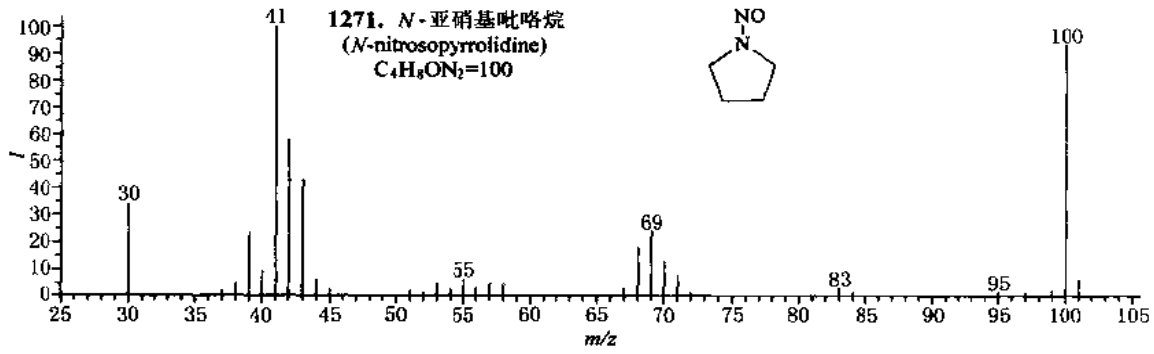


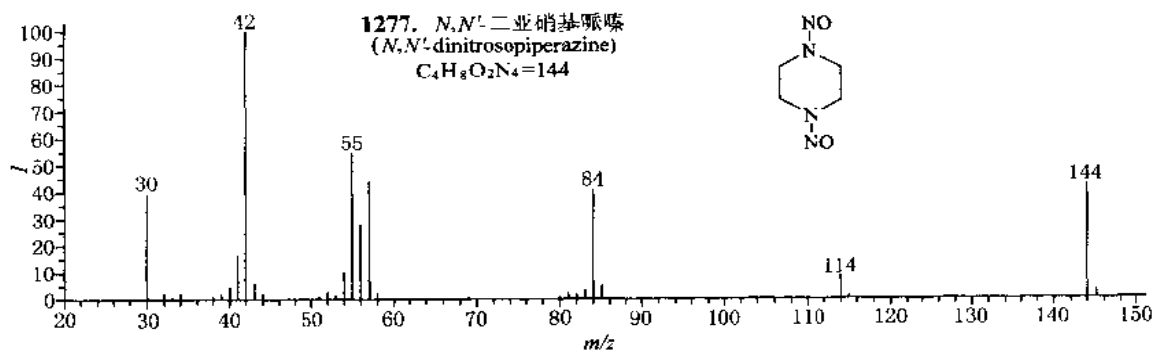
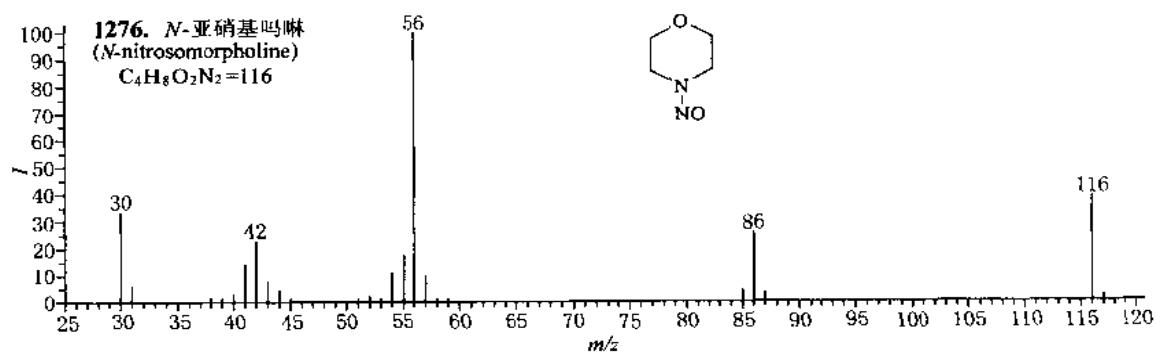
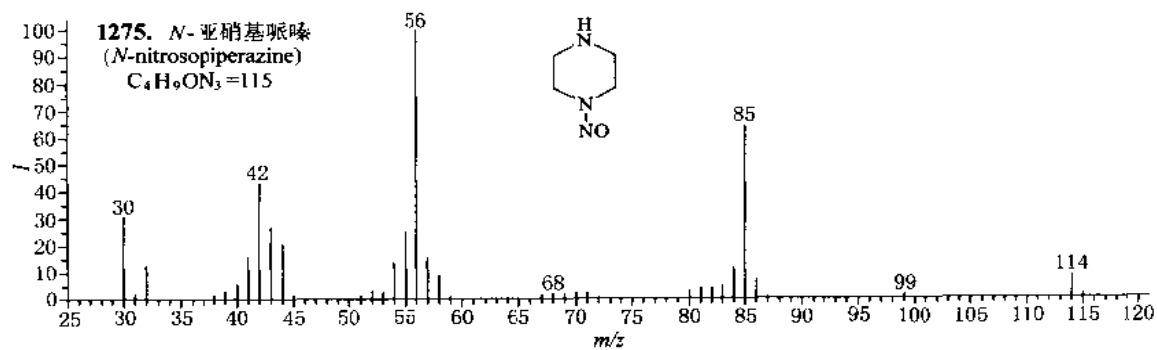


## 二、环状亚硝胺类

这类化合物 (1270~1277) 都有  $NO^+$  离子,  $M-HNO$  和  $M-NO$  离子。



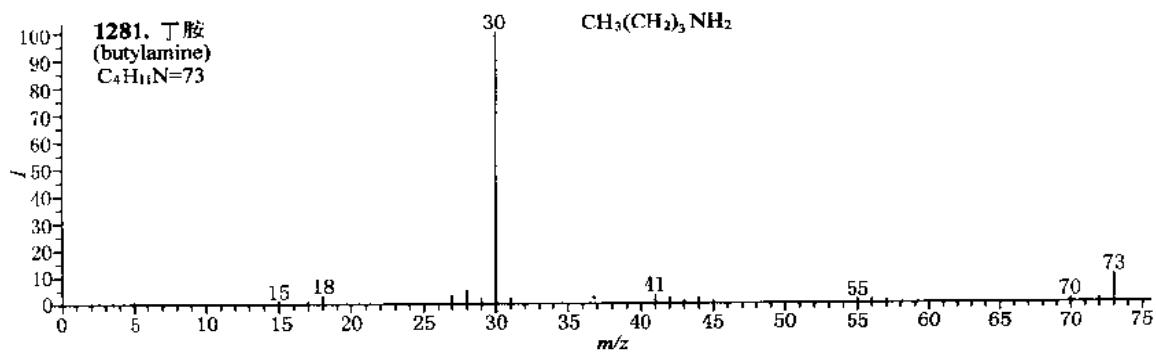
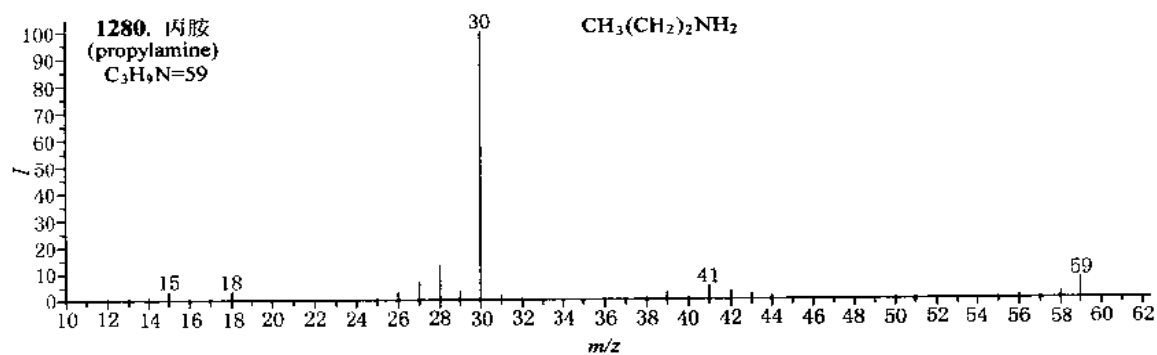
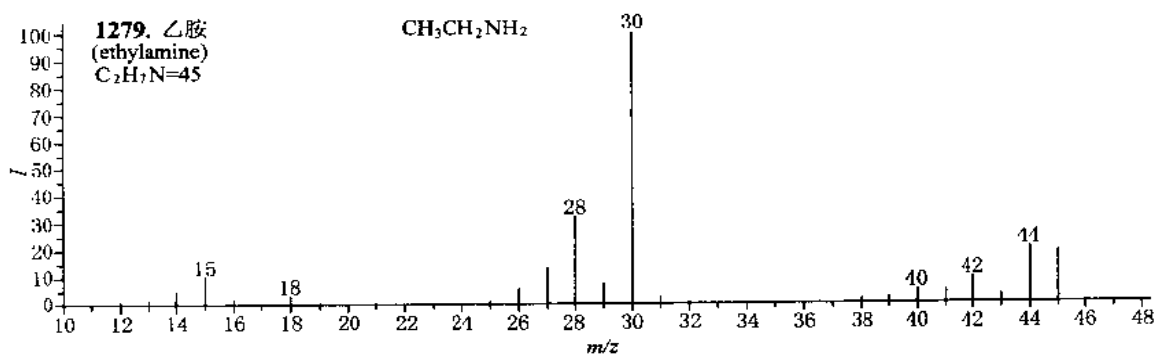
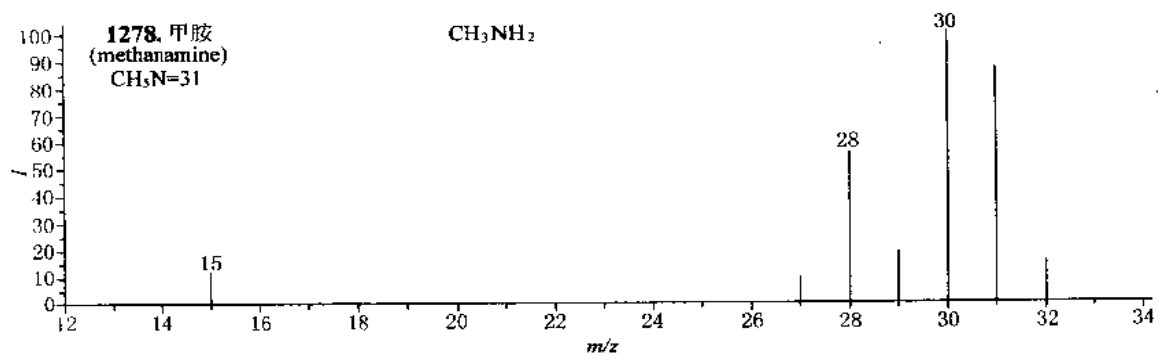


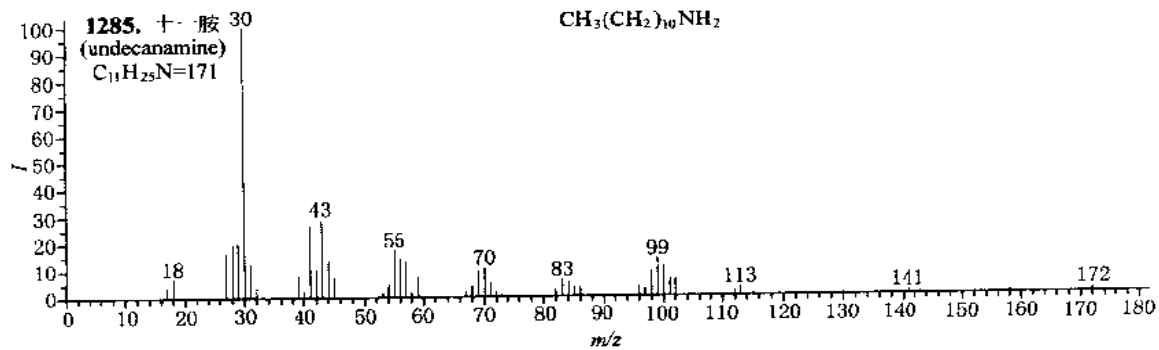
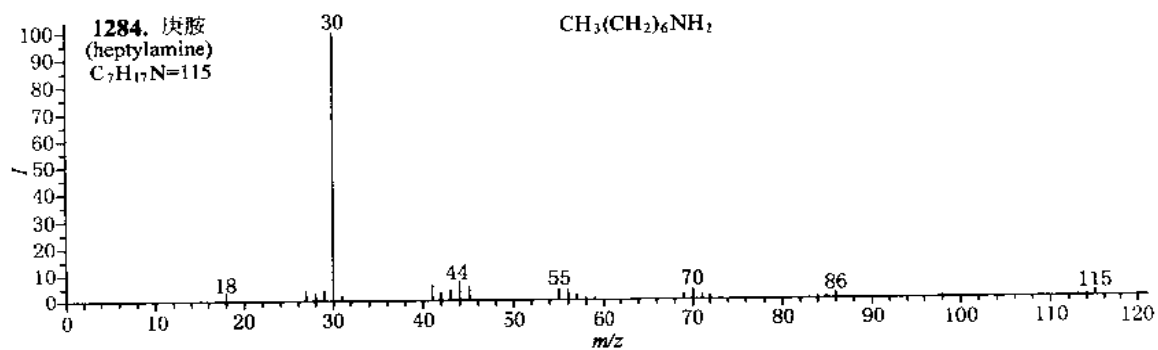
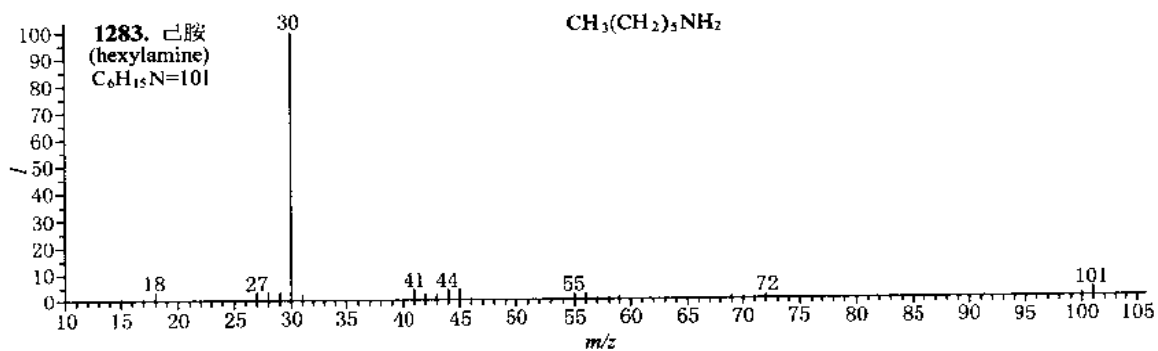
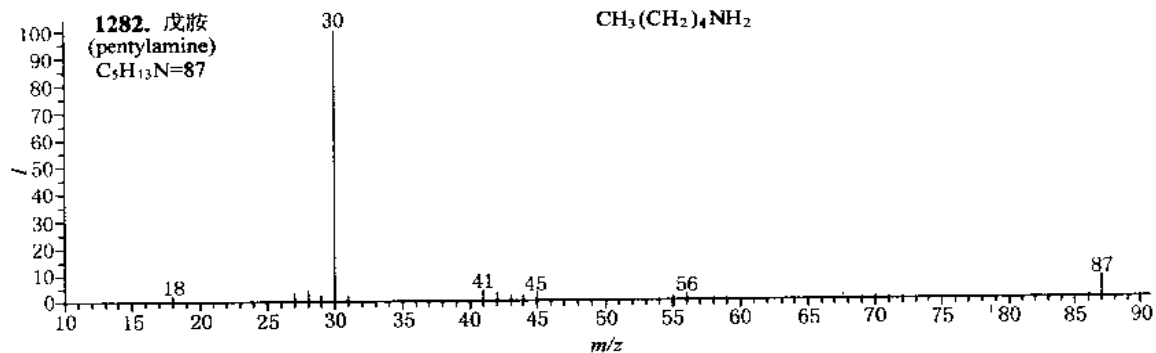


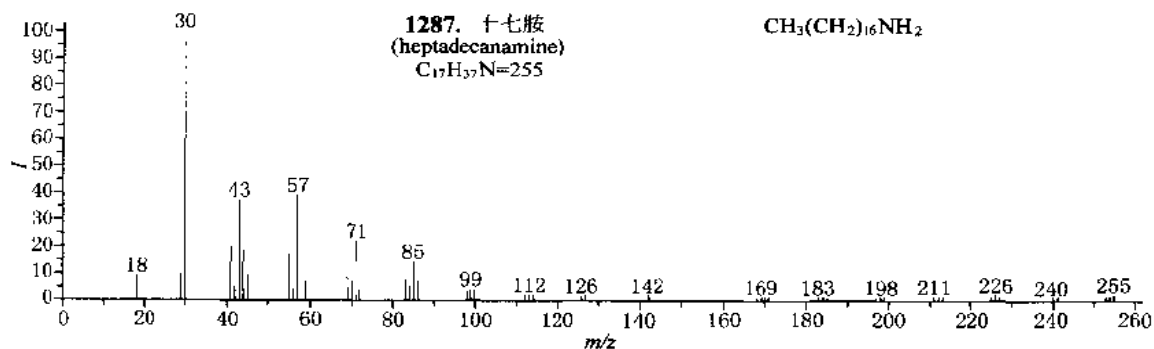
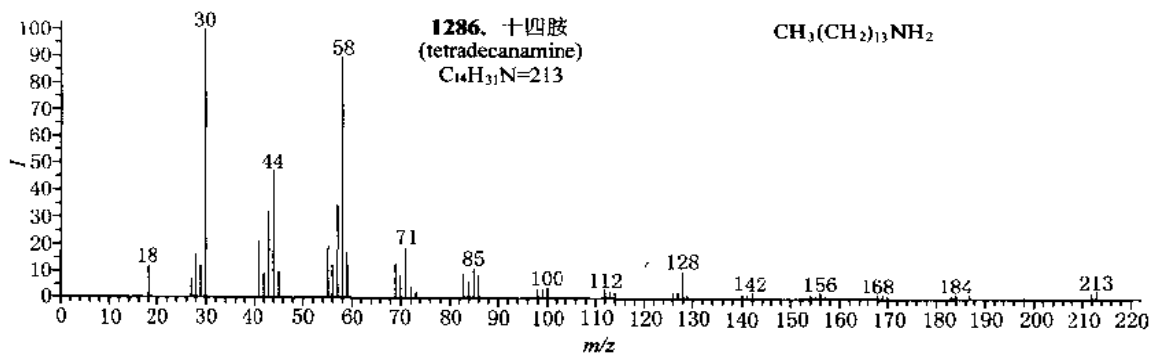
### 第三节 胺 类

#### 一、直链脂肪伯胺类

所有直链脂肪伯胺类(1278~1287)都有明显的  $M-H$  离子和  $m/z$  30 离子,这都是 C-N 系统的  $\alpha$ -裂解产物。长链脂肪伯胺类(1285~1287)还有各种烷基离子和各种  $M$ -烷基的离子。

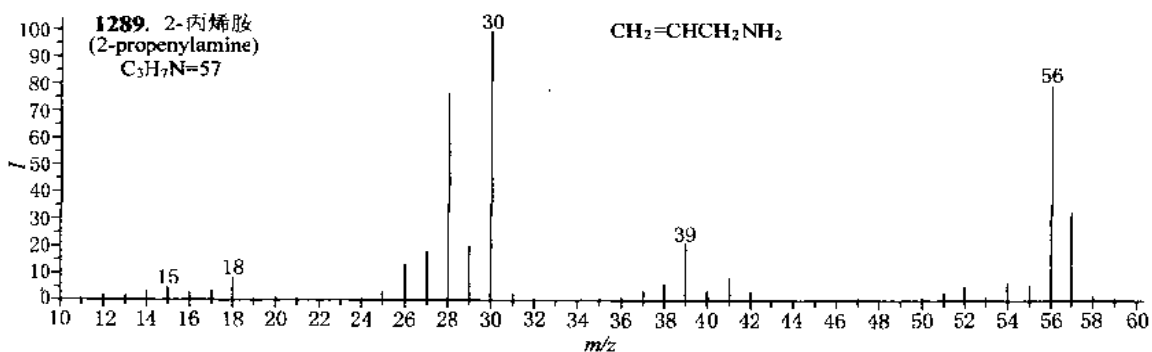
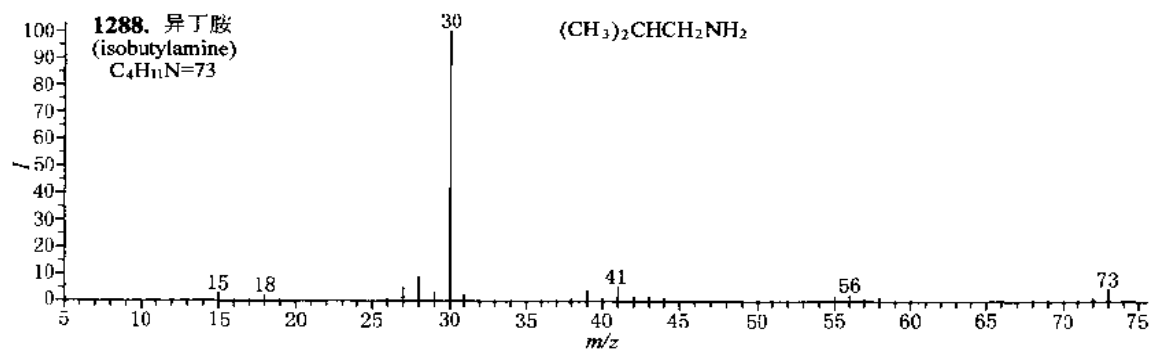


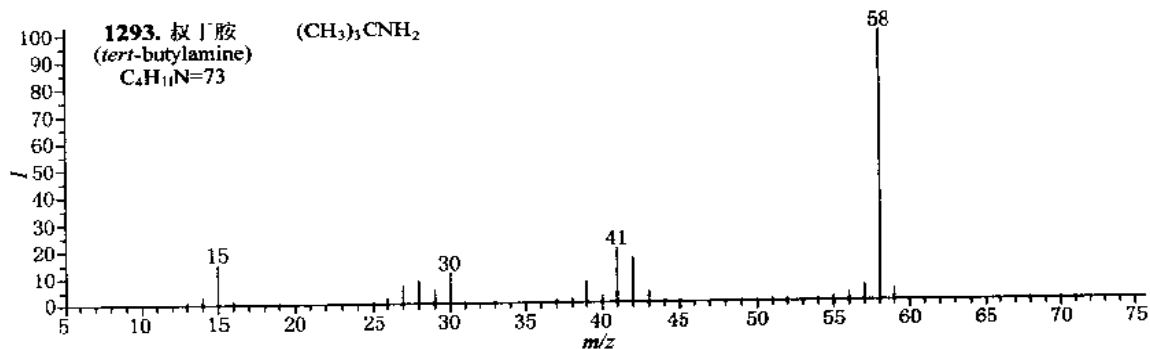
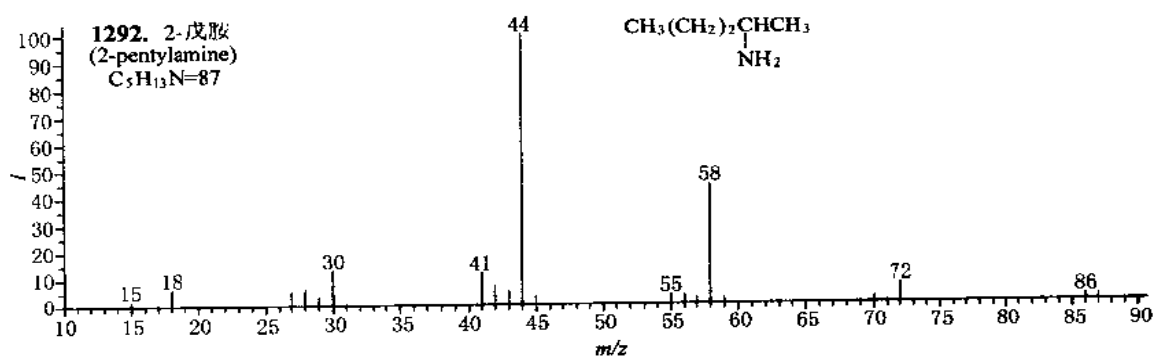
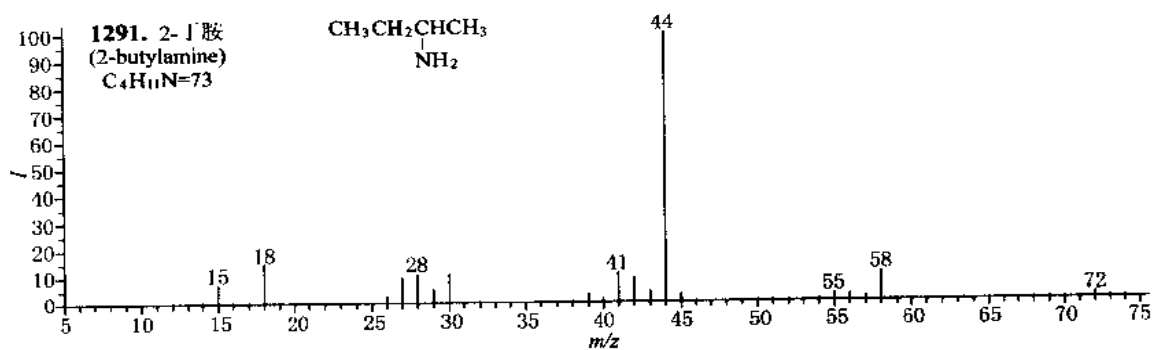
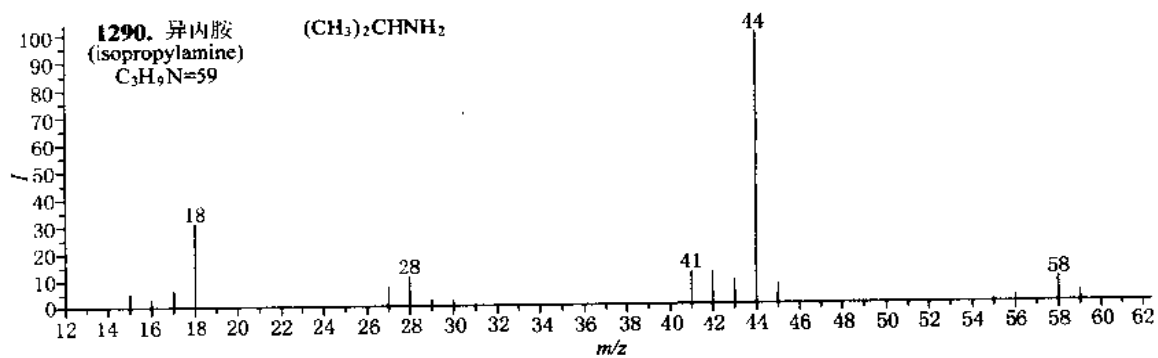




## 二、支链脂肪伯胺类

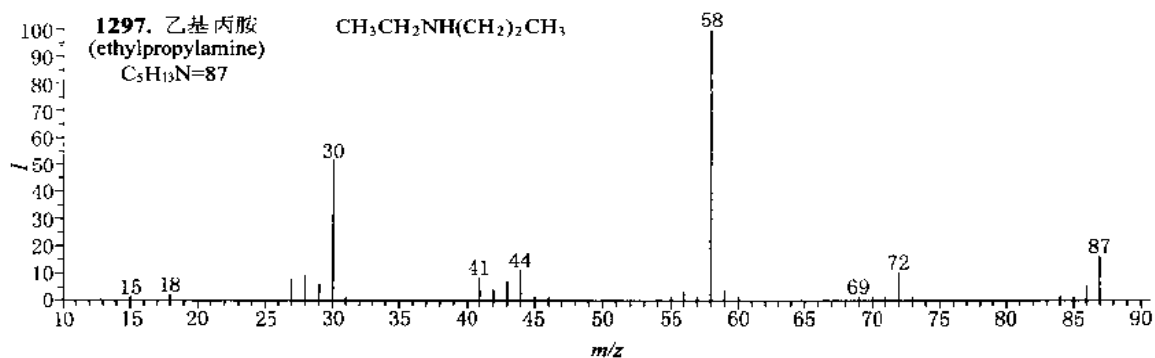
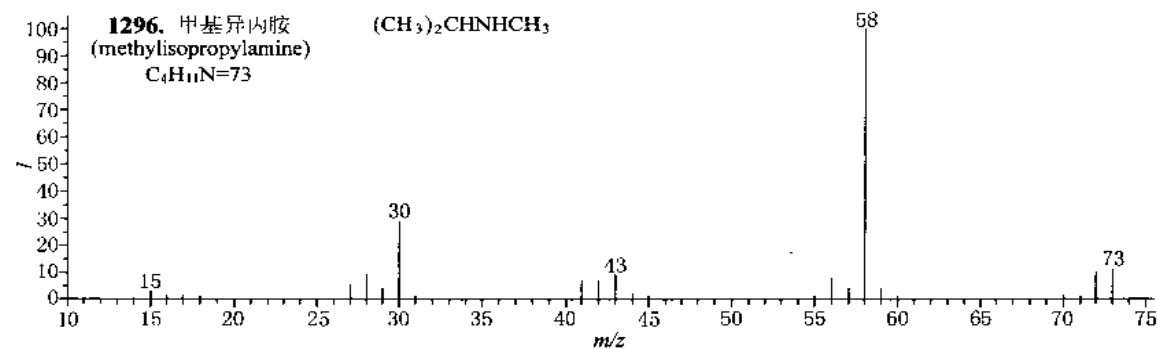
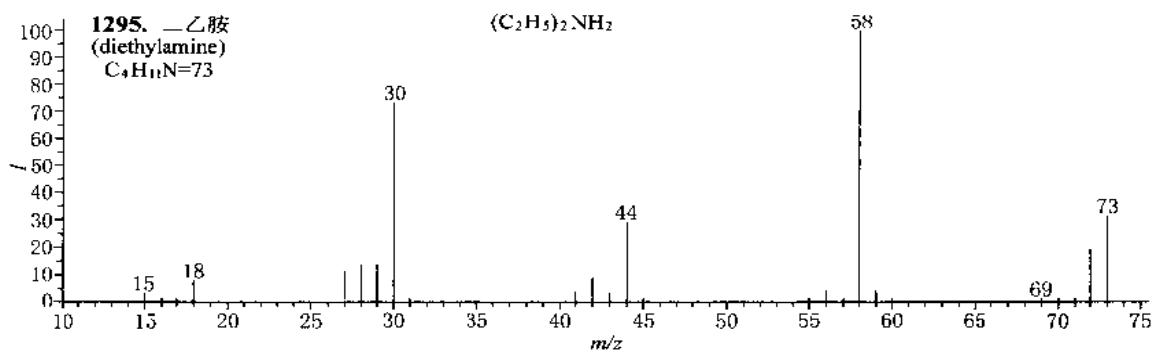
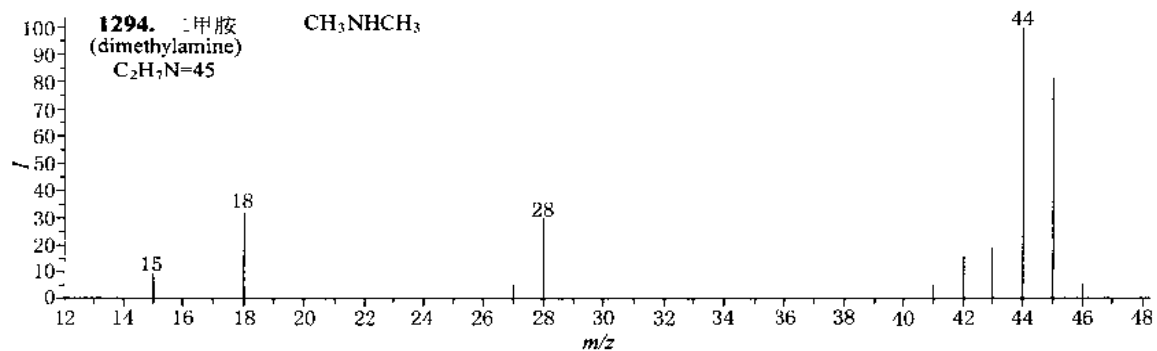
这类化合物 (1288, 1290~1293) 仍然是进行  $\alpha$ -裂解为主, 而以失去大的基团为重要裂解。由于支链的位置不同, 裂解的结果得到不同质量的离子, 例如可以得到  $m/z$  30, 44 和 58 等离子, 后两者都是离子  $m/z$  30 的同系离子。



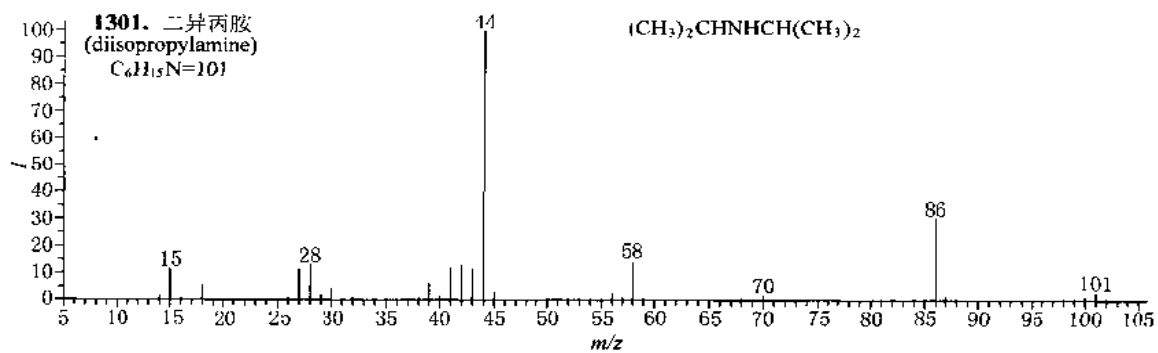
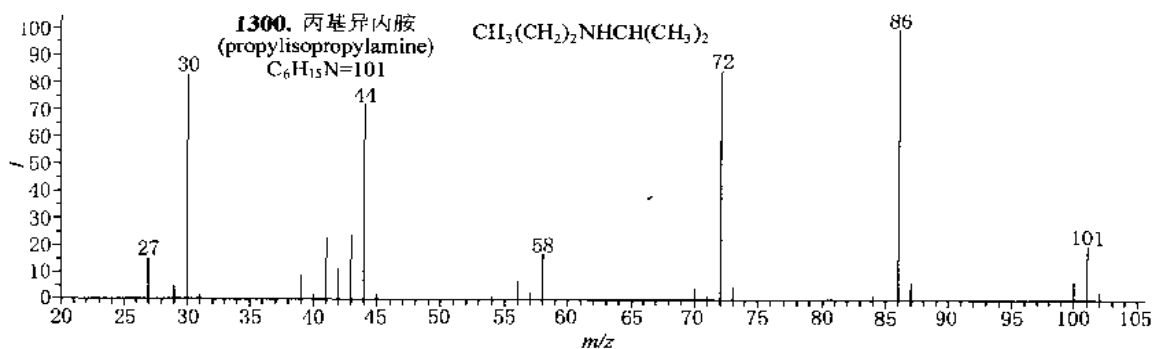
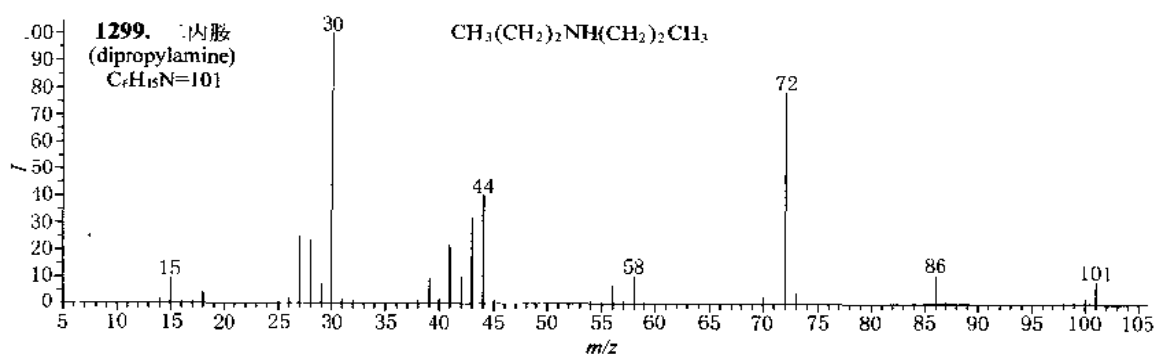
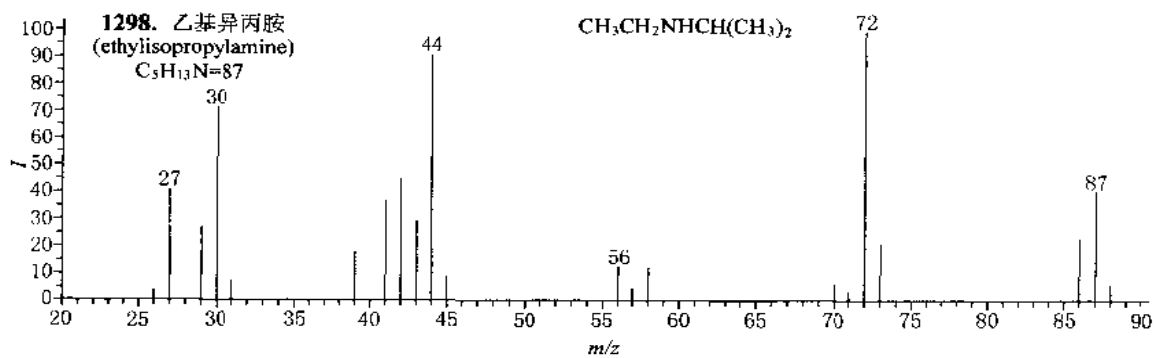


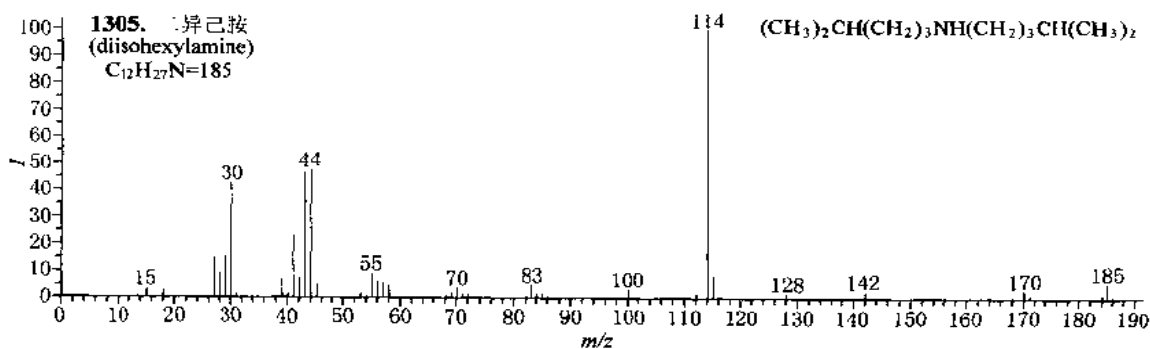
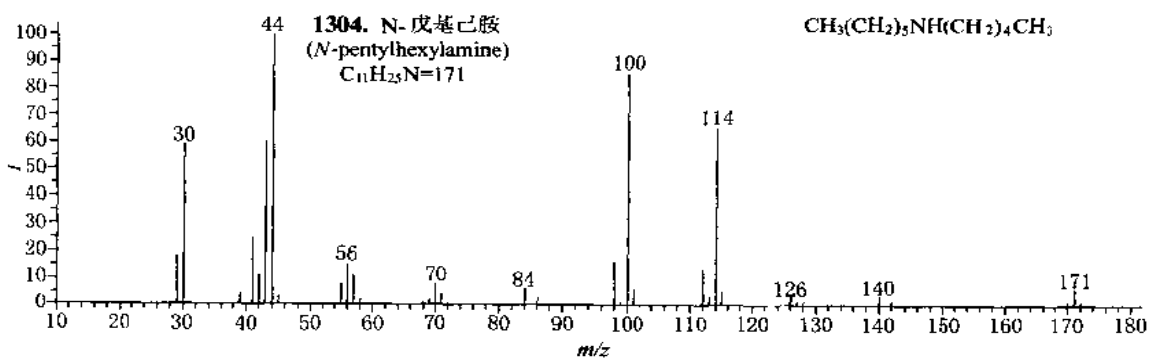
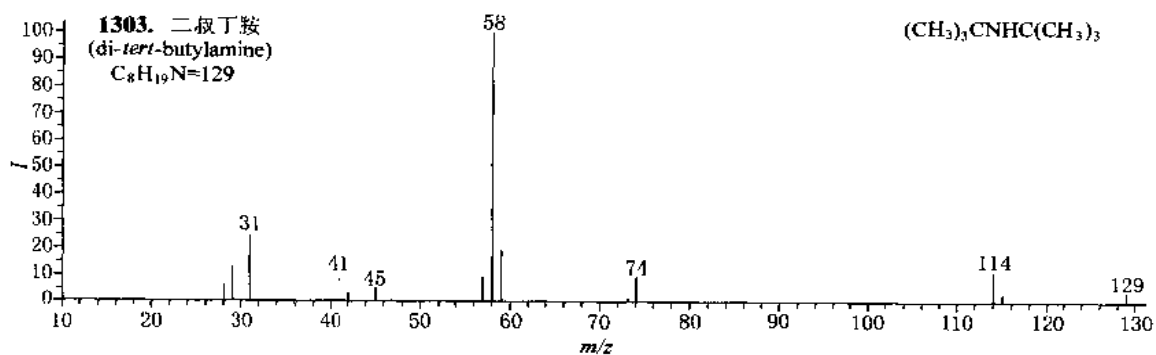
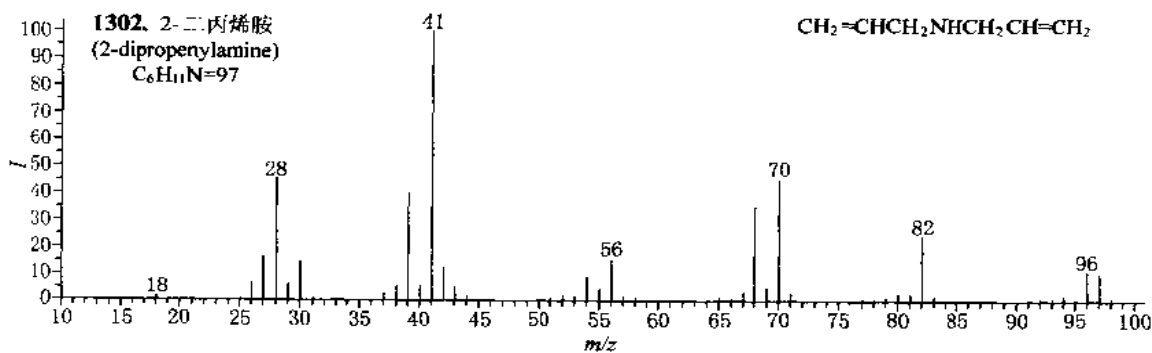
## 三、链状脂肪仲胺类

这类化合物(1294~1305)也是以 $\alpha$ -裂解为主,或失氢或失烷基,以失大基团为有利,条件适宜时 $\alpha$ -裂解后再进行另一侧的四元环过渡态氢重排,失去一分子烯。



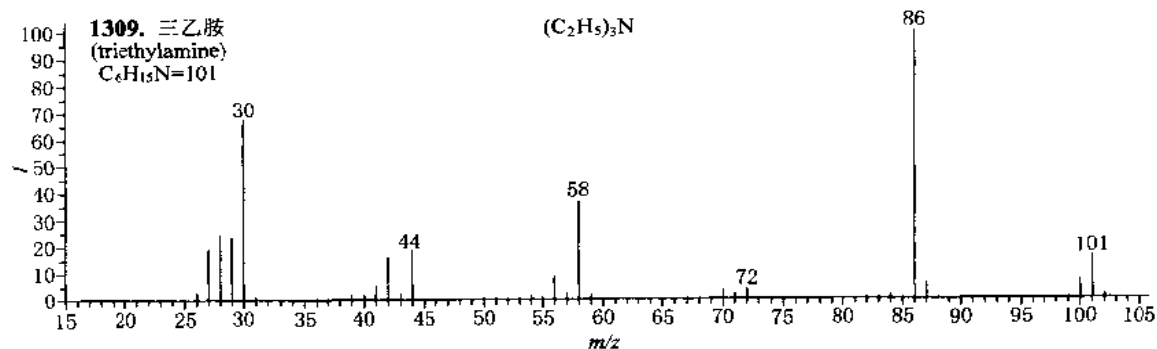
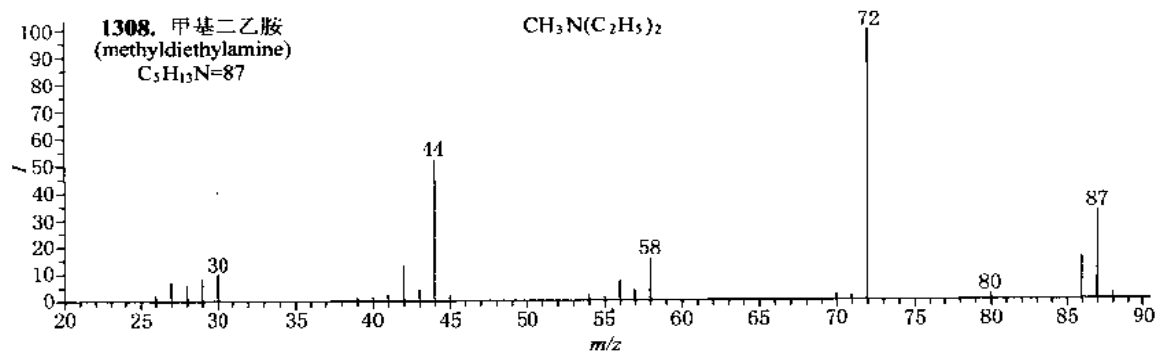
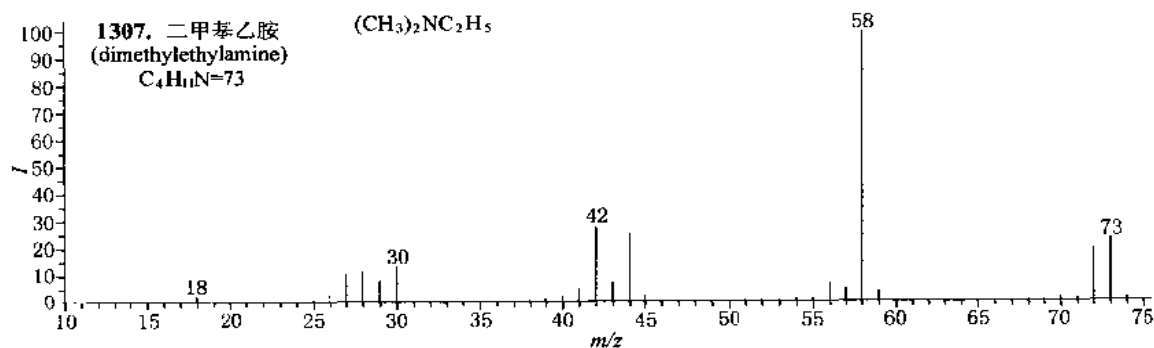
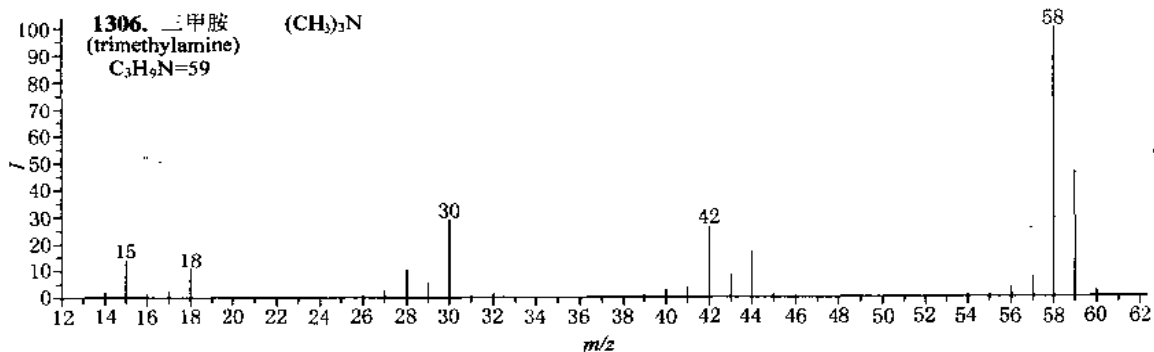


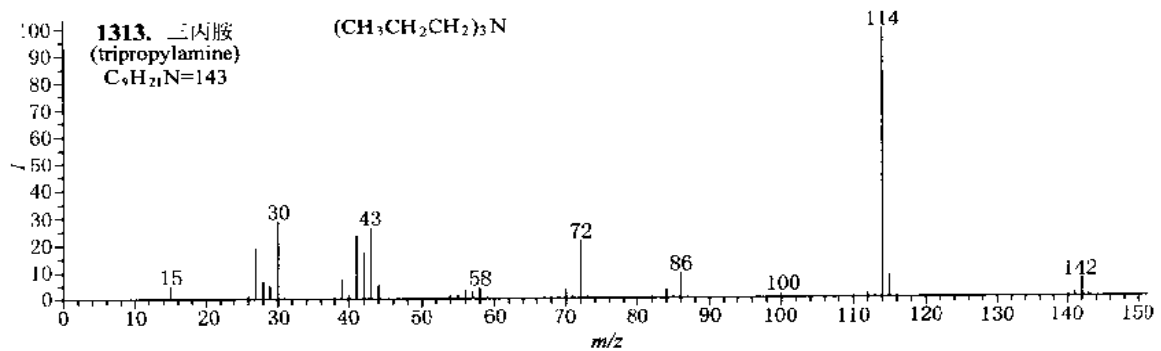
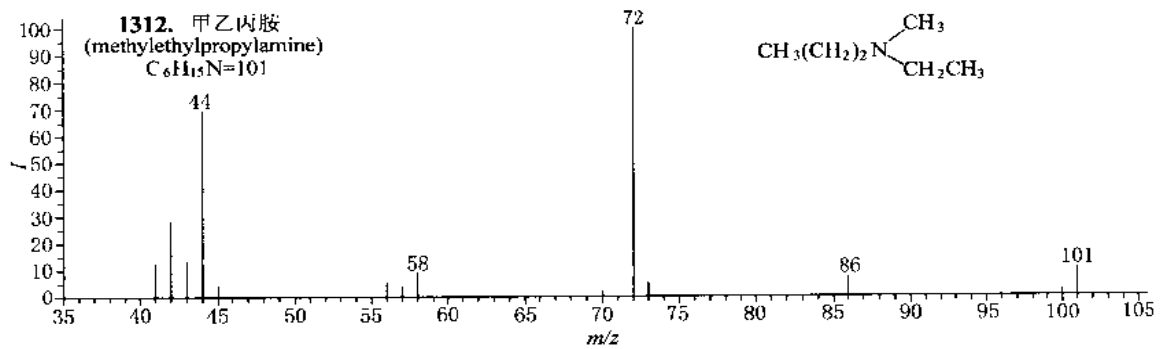
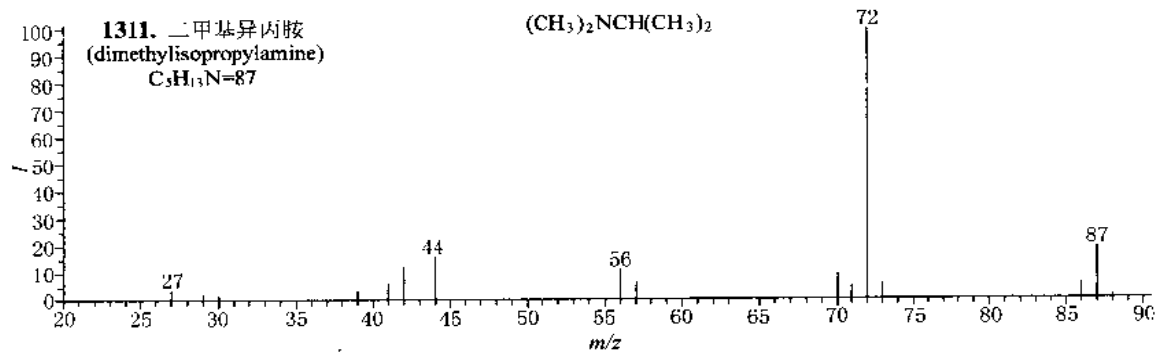
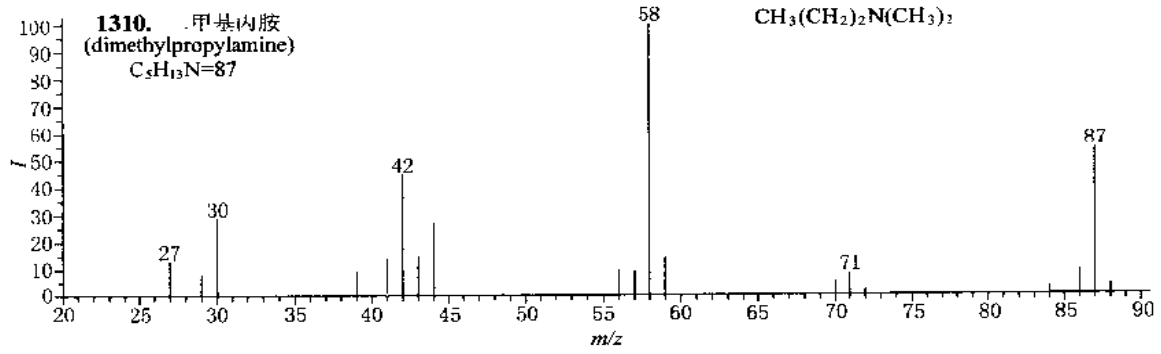


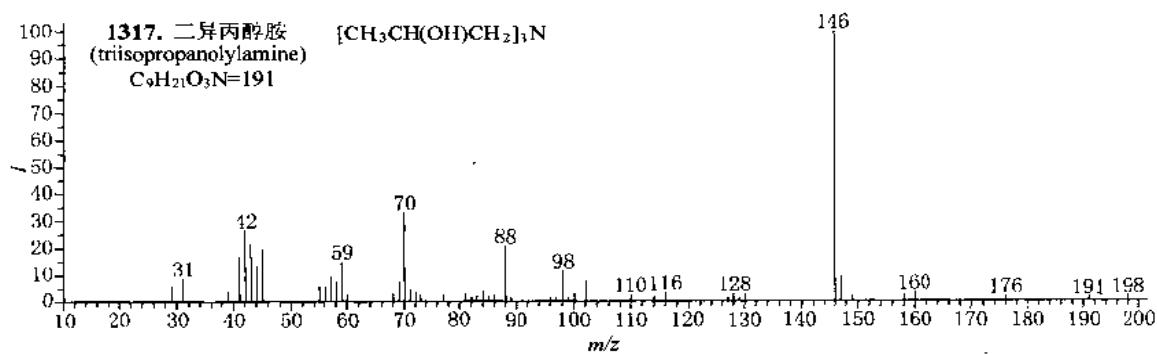
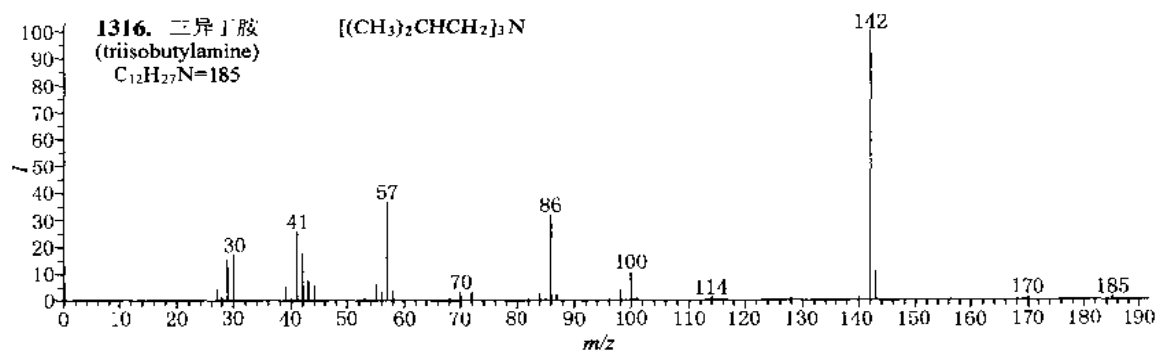
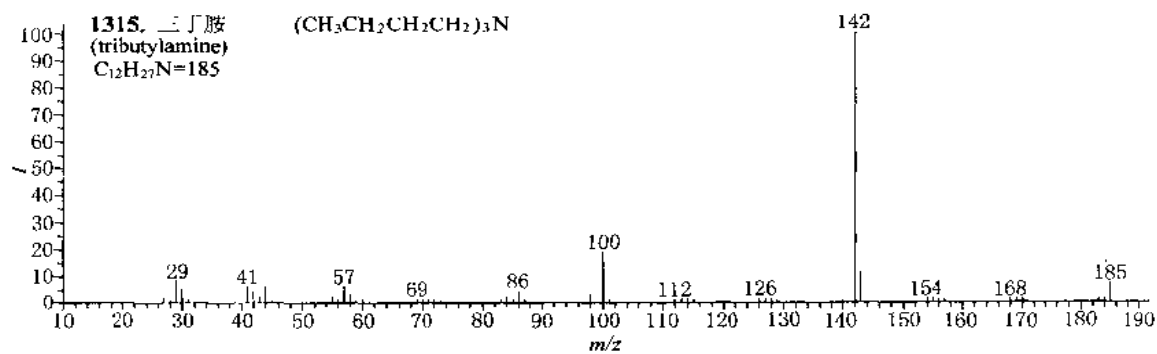
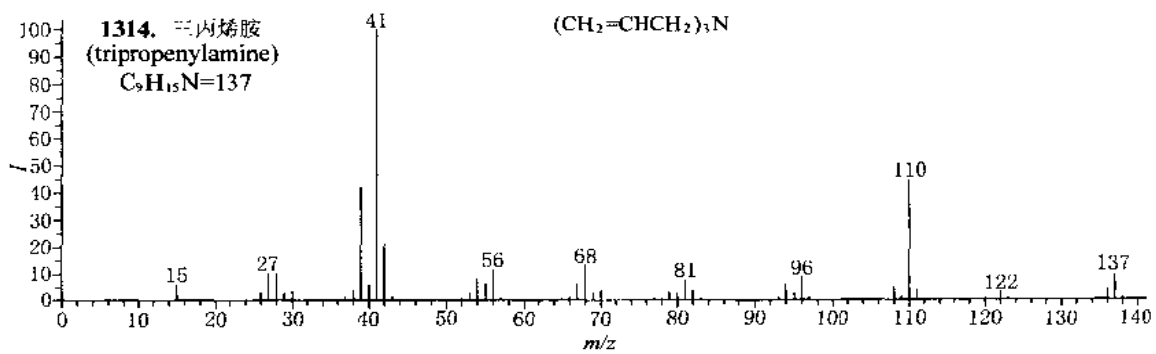


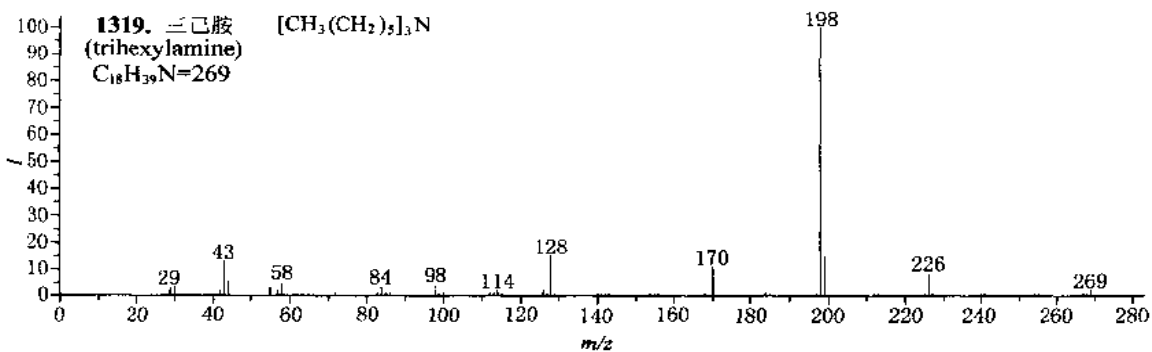
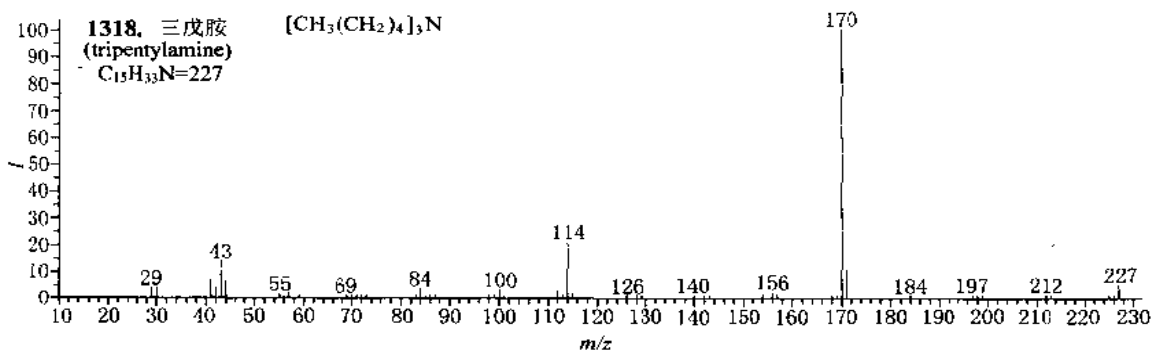
## 四、链状脂肪叔胺类

叔胺(1306~1319)的 $\alpha$ -裂解仍然以失去大的烷基为主,条件适宜时 $\alpha$ -裂解后的离子可氢重排失去一分子或两分子烯。



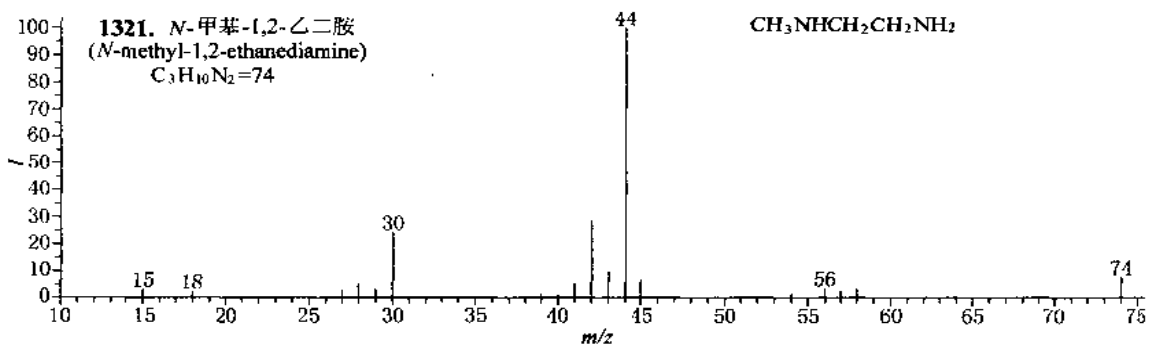
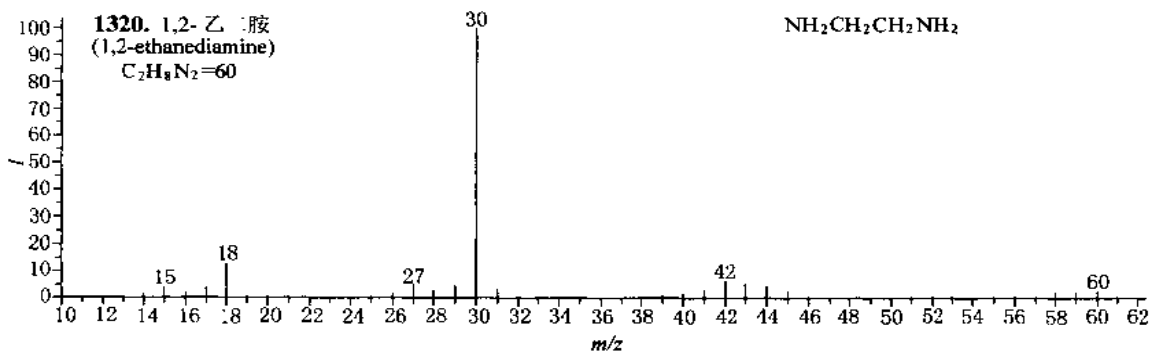


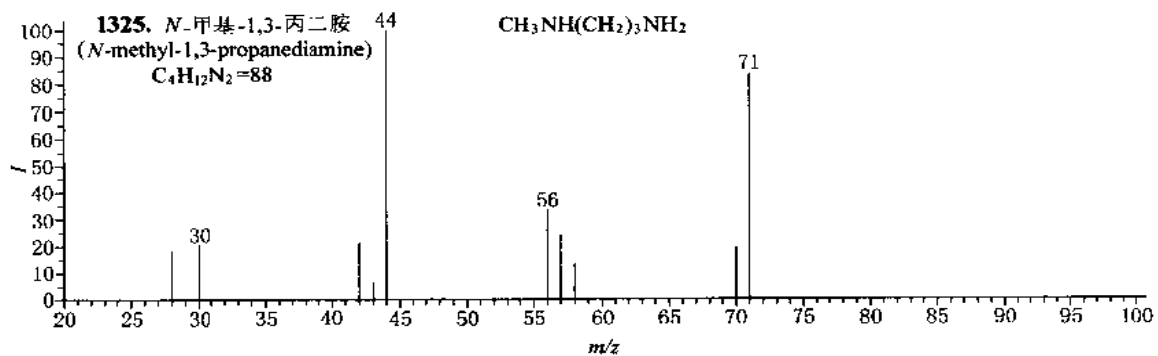
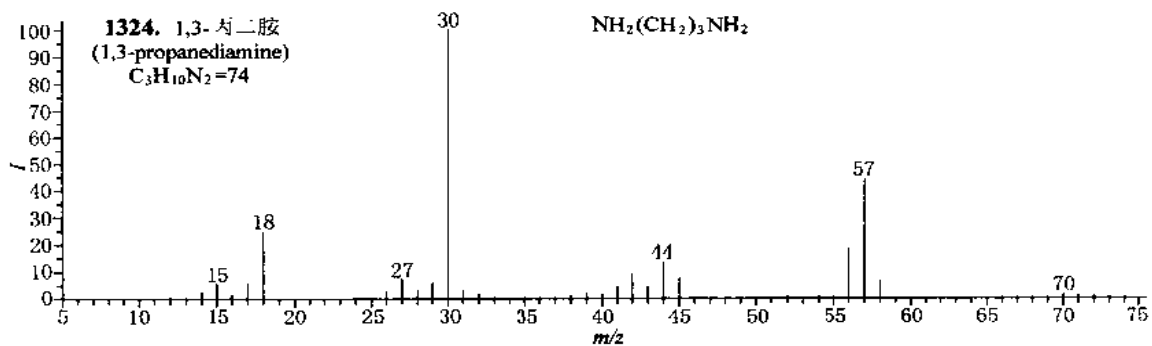
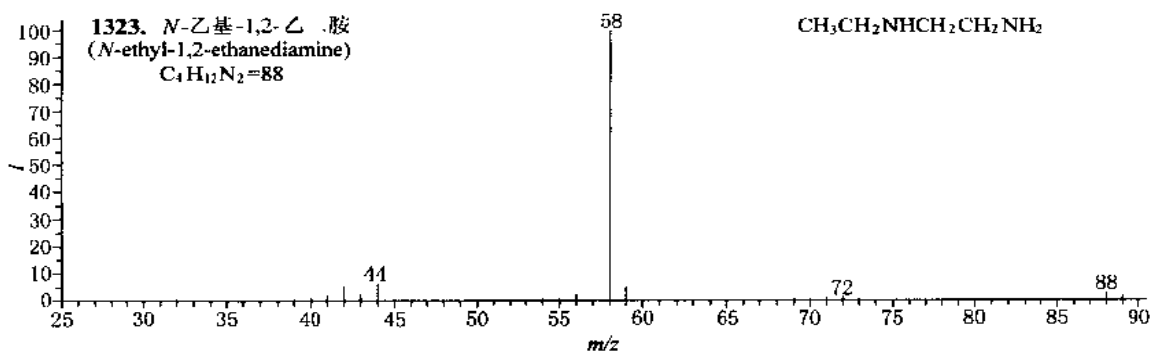
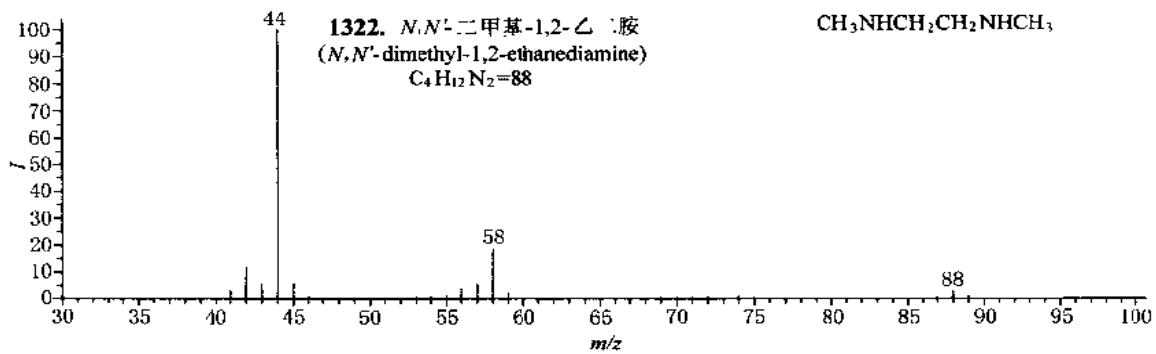


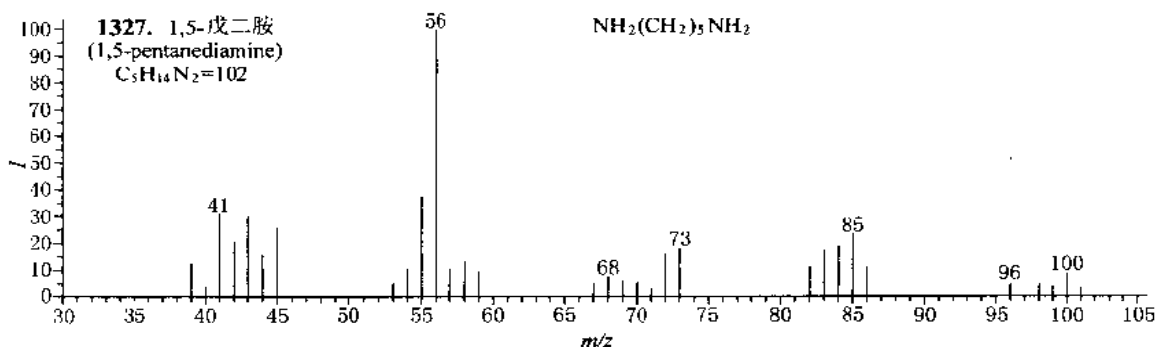
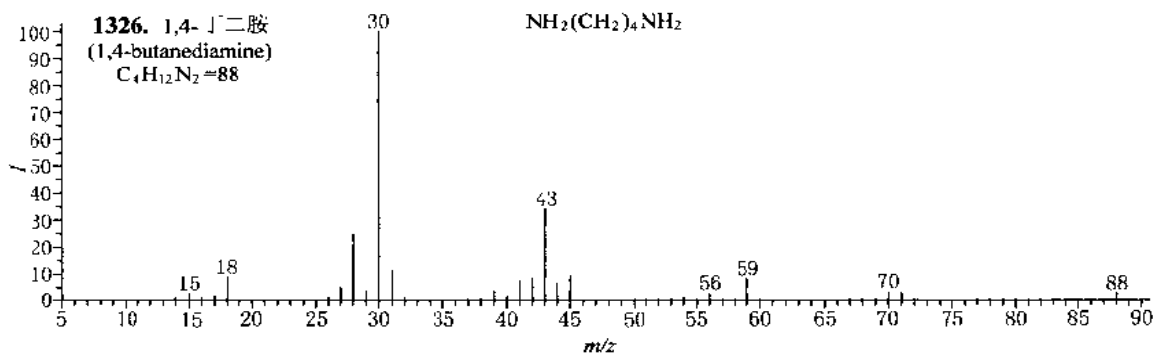


### 五、链状脂肪二胺类

这类化合物 (1320~1327) 也是以  $\alpha$ -裂解为主, 产生的离子以含烷基多者相对丰度较大。







## 六、脂肪环胺类

(1) 环戊胺 (1328) 的裂解是 1,2-键裂解, 转移 5 位氢到 2 位, 然后失去  $C_2$ 、 $C_3$ , 即得  $M-C_2H_5$  离子  $m/z$  56, 这个离子具有共轭双键结构。

(2) 1-甲基环戊胺 (1329) 的裂解与上相同, 所得离子因多 1 个甲基, 所以移到  $m/z$  70。

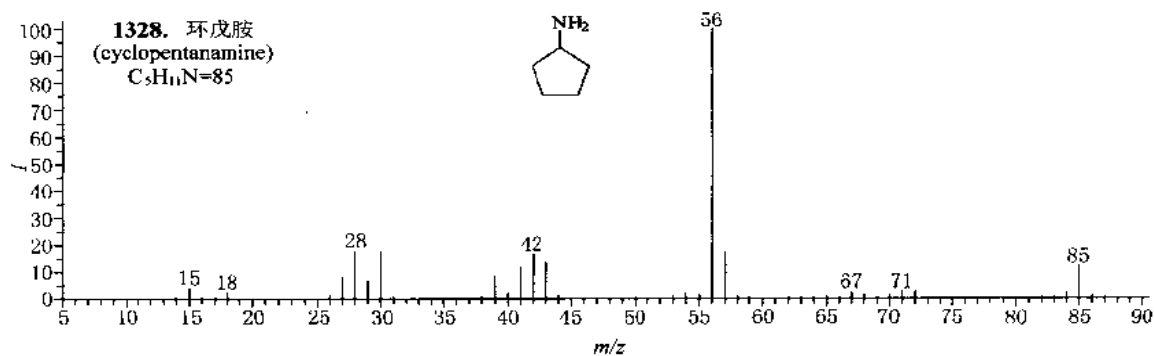
(3) 环己胺 (1330) 的裂解基本同上, 不过失去的是  $C_3H_7$ 。

(4)  $N,N$ -二甲基环己胺 (1331) 的同样裂解, 所得离子比  $m/z$  56 多 28u, 移到  $m/z$  84。

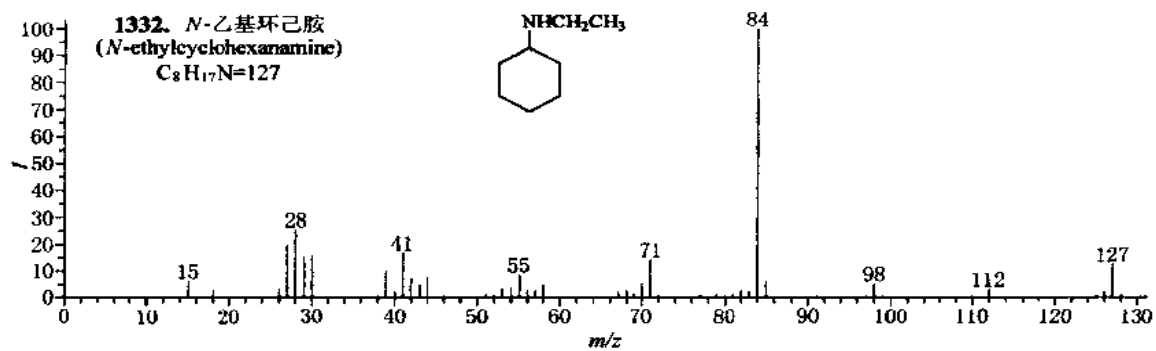
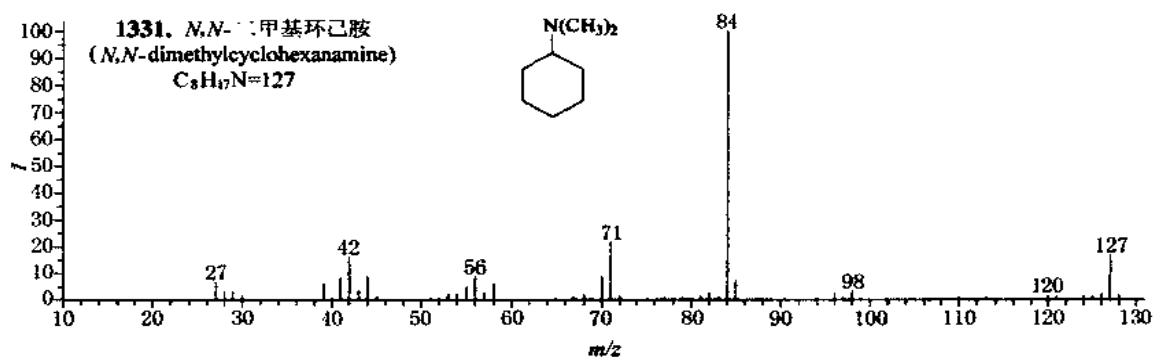
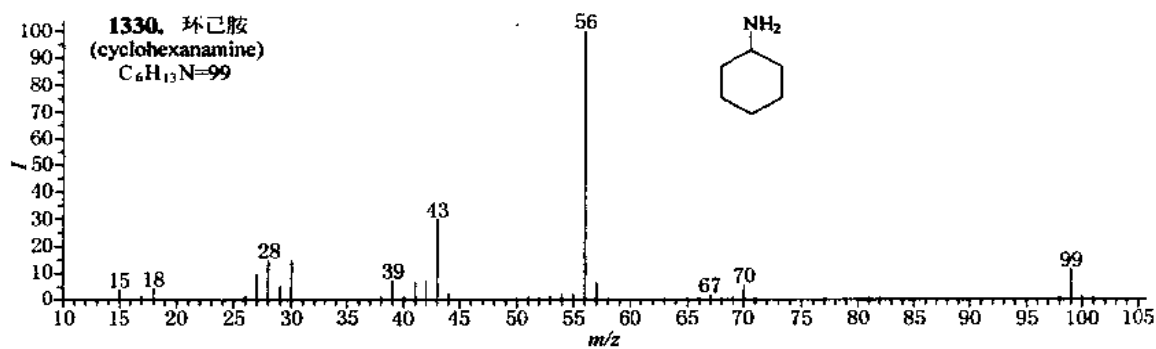
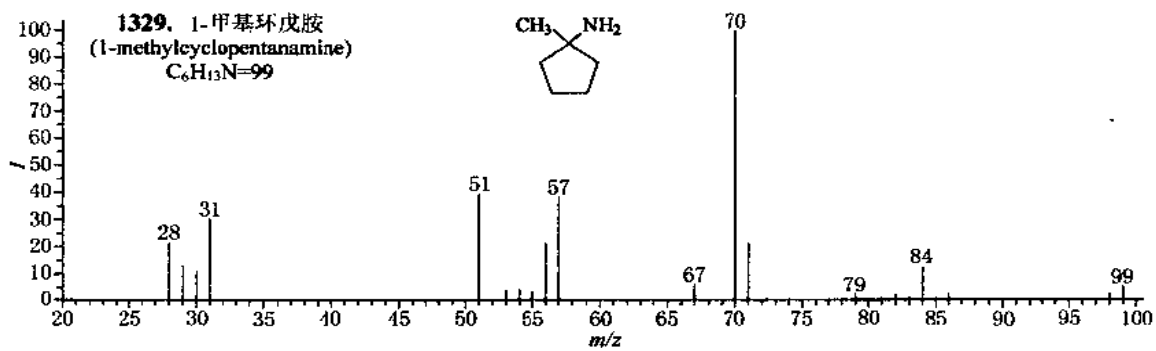
(5)  $N$ -乙基环己胺 (1332) 的裂解亦如此。

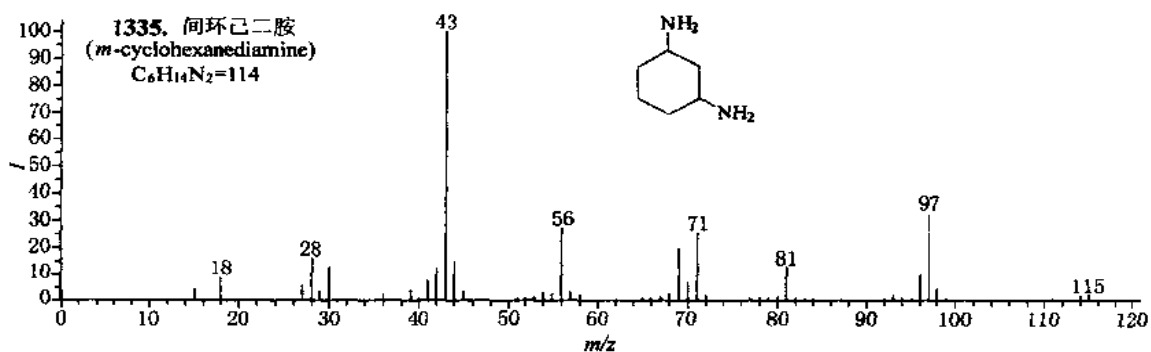
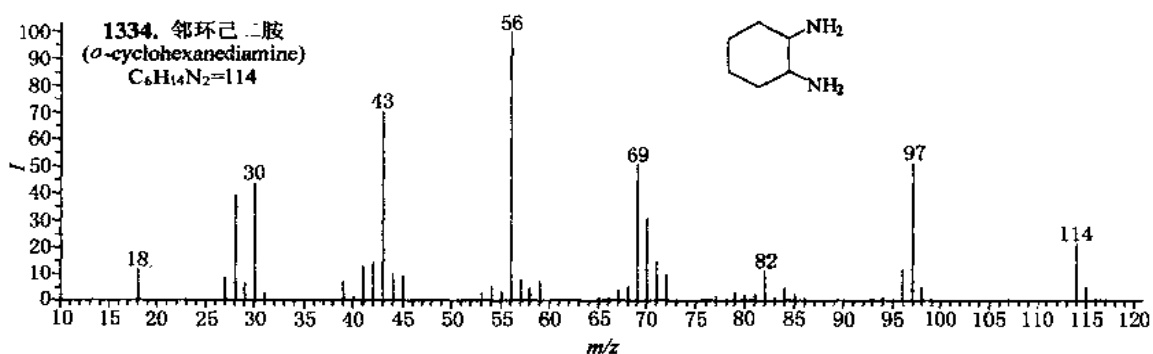
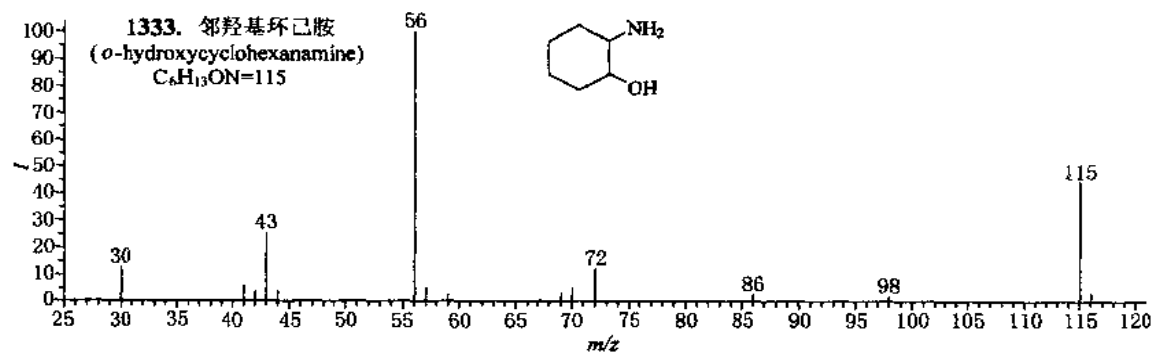
(6) 邻羟基环己胺 (1333) 的裂解同环己胺, 但可得到离子  $m/z$  56 和再加 16u 的离子  $m/z$  72。

(7) 邻氨基环己胺 (1334) 的基本裂解仍然同上, 但增加了  $M-NH_3$  离子及该离子再进行 RDA 裂解失去乙烯的离子。间环己二胺 (1335) 的裂解基本如此, 但离子  $m/z$  43 增强, 这个离子可来自失氨后进行 RDA 裂解生成了  $CH_2=CHN^+H_2$  结构。









## 七、芳香胺类

- (1) 苯胺 (1336) 的裂解途径是  $M-CN-H-C_2H_2$ 。
- (2) 单甲基苯胺类 (1337~1339) 的  $M-H$  离子很强,  $M-H$  离子也能失去  $CNH$ 。
- (3) 二甲基 (1340~1345) 和多甲基 (1346~1348) 苯胺类的  $M-H$  离子也很强, 而  $M-CH_3$  离子更强。
- (4) 乙基苯胺类 (1349~1351) 的  $M-CH_3$  离子更强, 分子离子比甲基苯胺类的要弱得多。
- (5) 羟基苯胺类 (1352~1354) 的主要裂解途径是  $M-CO-H-C_2H_2$ 。

(6) 邻、对位单甲氧基苯胺类 (1355, 1357) 的裂解途径是  $M-CH_3-CO$ , 间位取代者 (1356) 的主要裂解是  $M-CHO$  和  $M-CH_2O$ 。二甲氧基苯胺类 (1358, 1359) 的裂解途径是  $M-CH_3-CO-CH_3-CO$ 。三甲氧基取代物 (1360) 的裂解途径是  $M-CH_3-CO-CH_3$  和  $M-CH_3-CO-CH_2O$ 。

(7) 甲基和羟基二取代的苯胺类 (1361~1366), 裂解途径都是  $M-H-CO$  和  $M-NH_2-CO-H$ 。

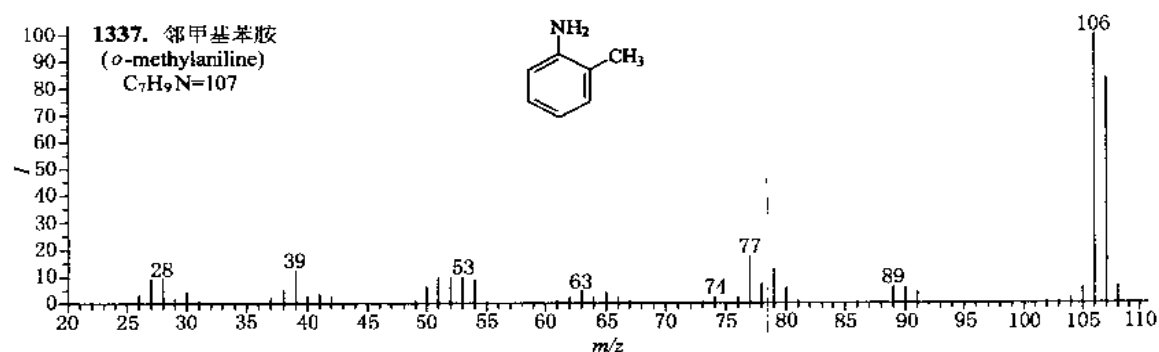
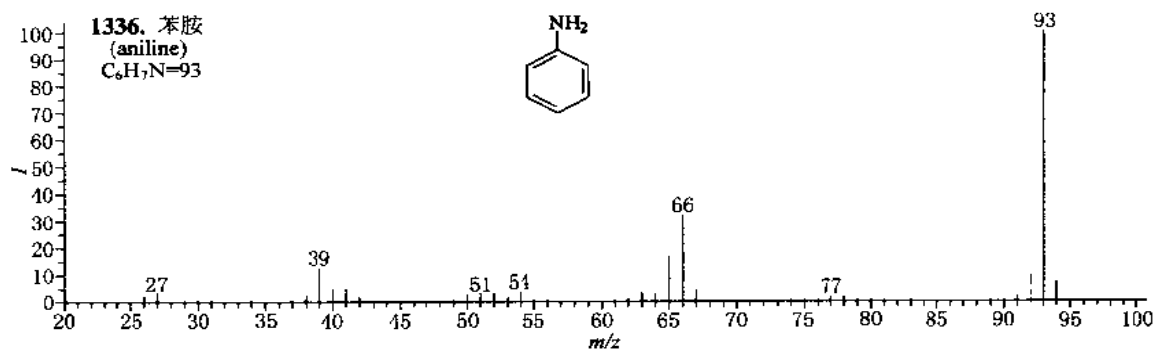
(8) 乙酰基苯胺类 (1367~1369) 的裂解途径都是  $M-CH_3-CO-CN H$ 。

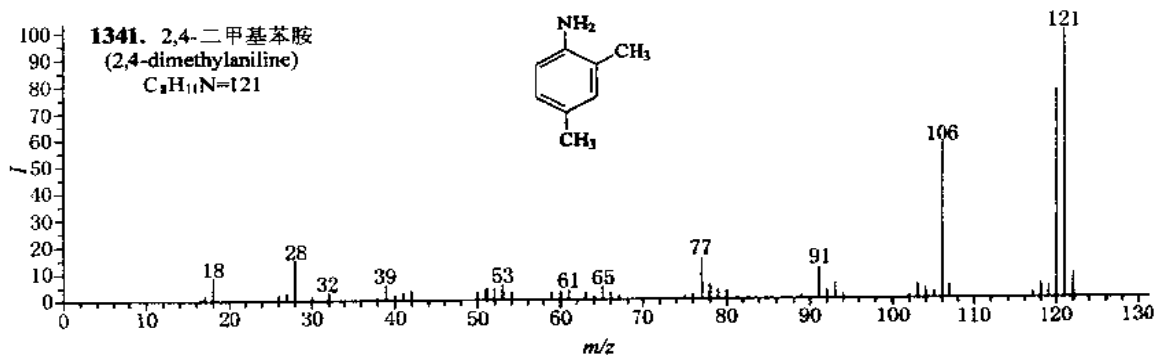
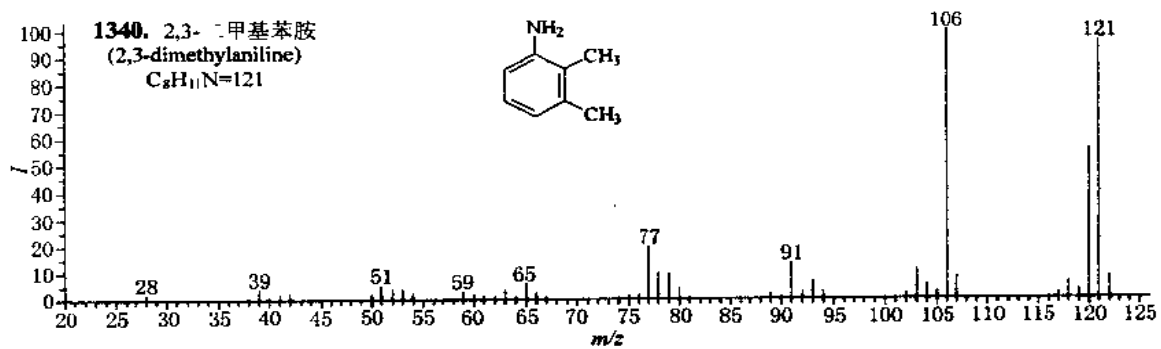
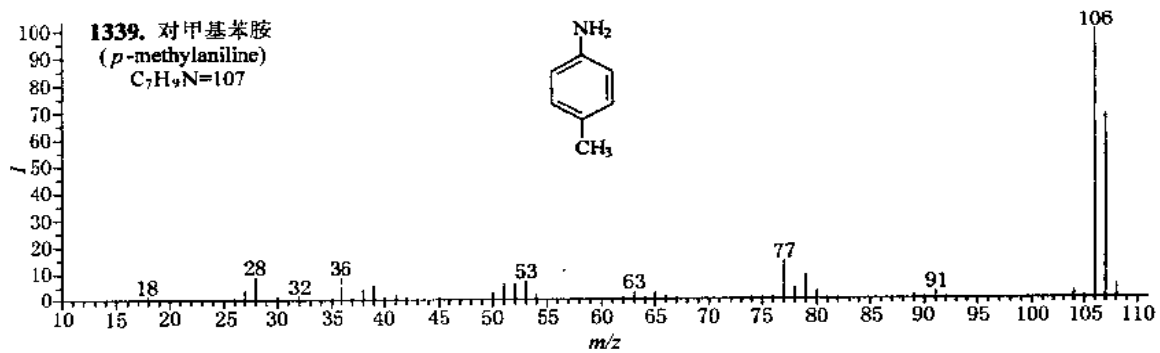
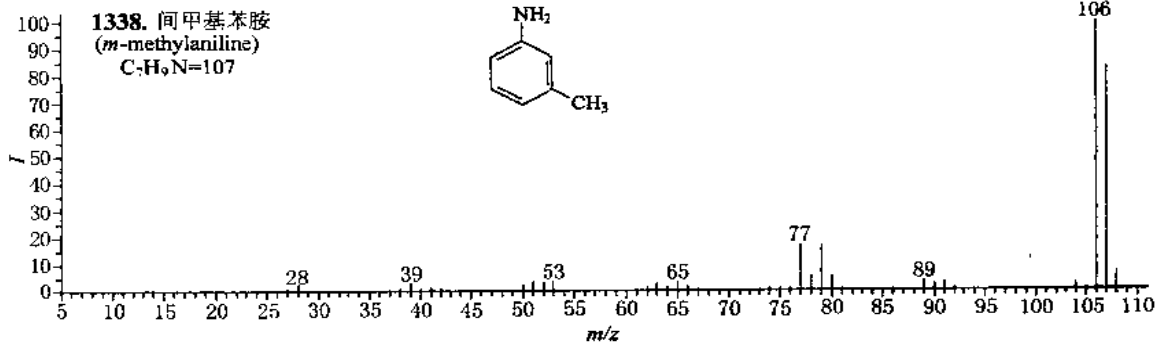
(9) 亚甲二氧基苯胺 (1370) 的裂解途径是  $M-CHO-CO-H-CN H$ 。

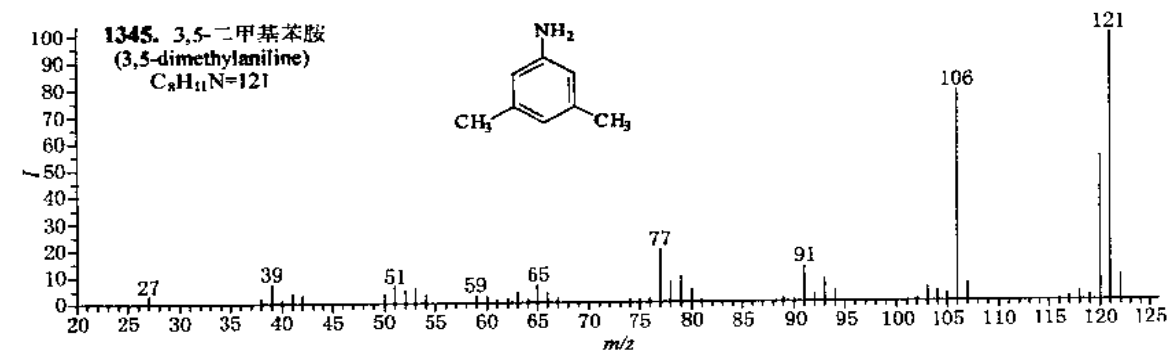
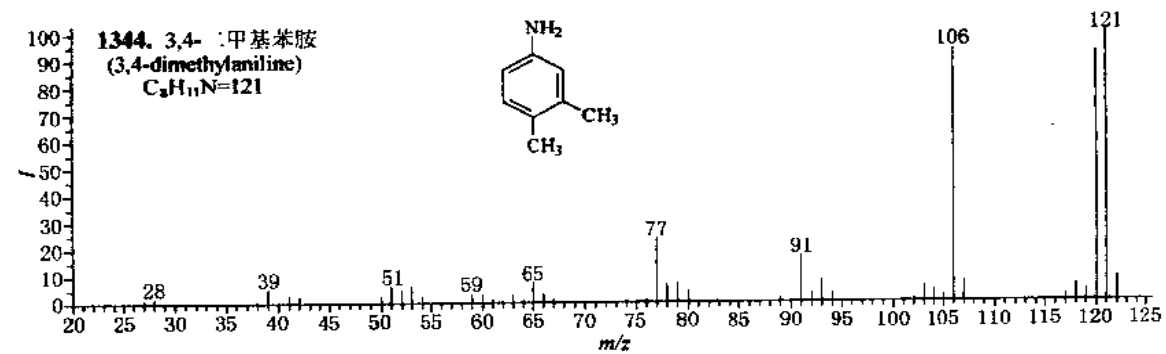
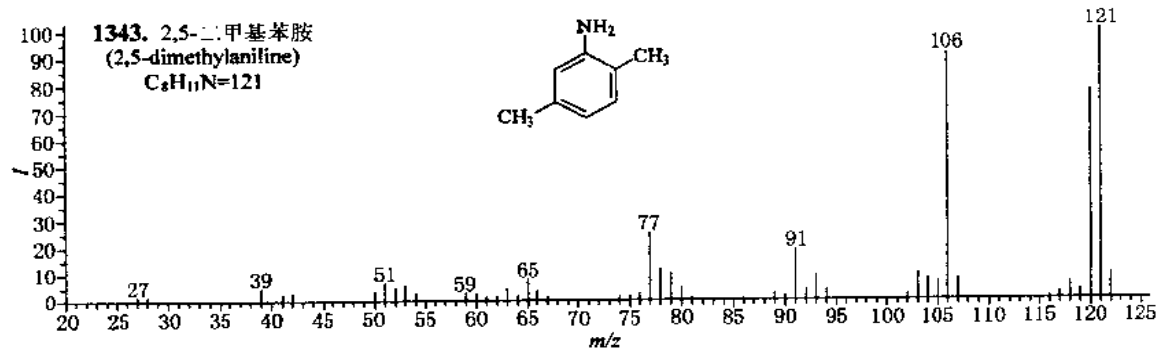
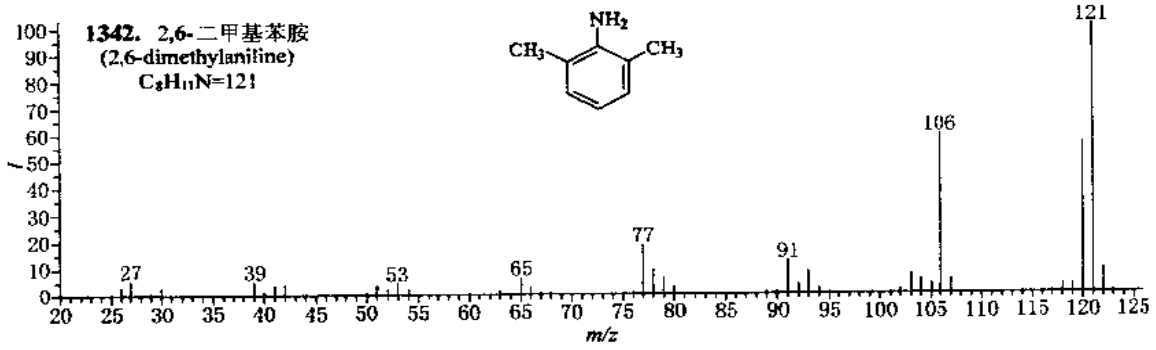
(10) 氟代苯胺类 (1371~1373) 的主裂解是  $M-CN H-H$ 。氯和碘代苯胺类 (1374~1379) 的裂解途径是  $M-X-CN H$ 。二卤代苯胺类 (1380~1388) 的裂解途径是  $M-X-HX$  和  $M-X-CN H$ 。三氯苯胺类 (1389, 1390) 的裂解也是这样的, 三溴苯胺 (1391) 则只有  $M-Br-HBr$  裂解。四氯苯胺类 (1392, 1393) 的裂解途径是  $M-Cl-CN H$  和  $M-Cl-HCl-CN H$ 。五氟苯胺 (1394) 的主要裂解途径是  $M-CN H-H-F-F$ 。

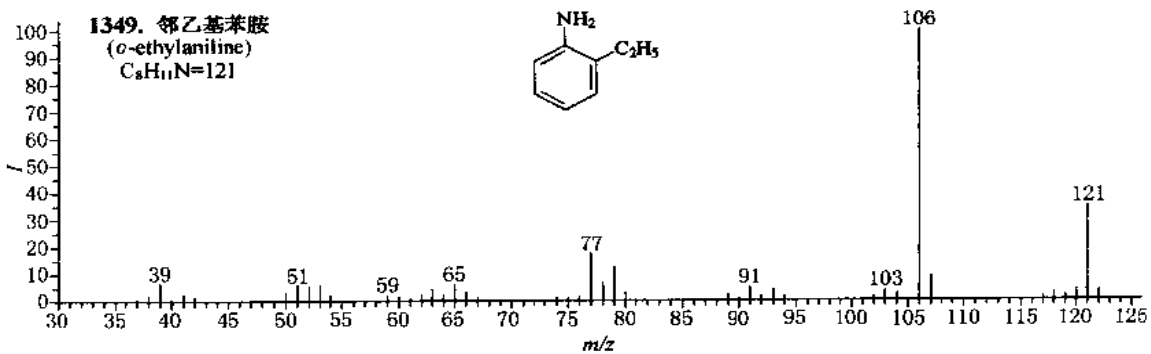
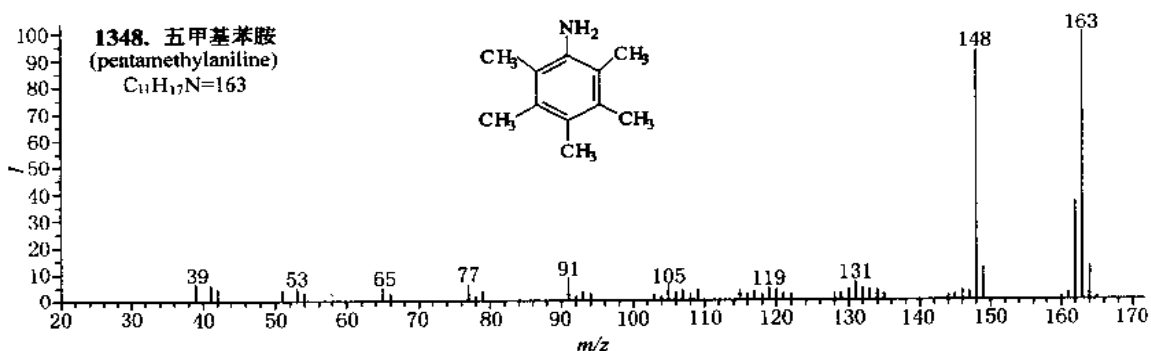
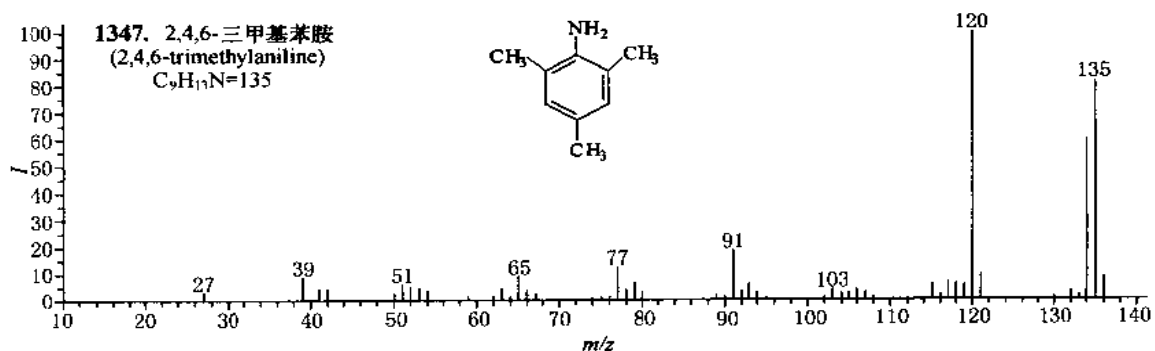
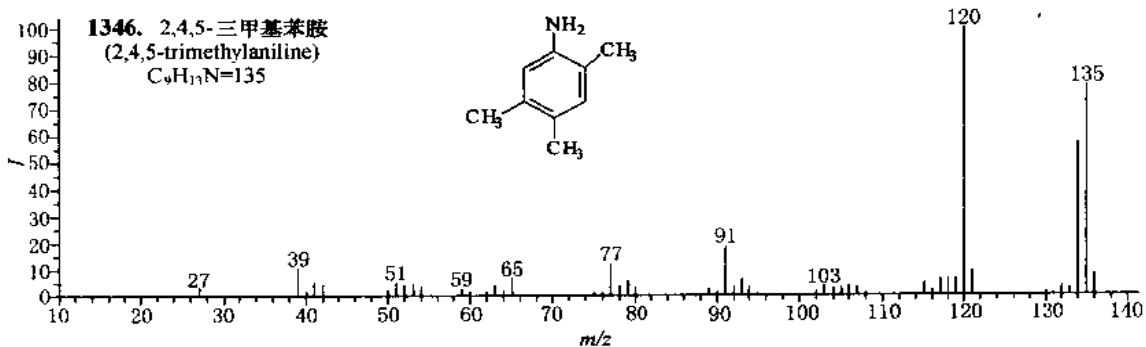
(11) 氨基苯醇类 (1395~1397) 的主要裂解是失羟基和失甲酰基。

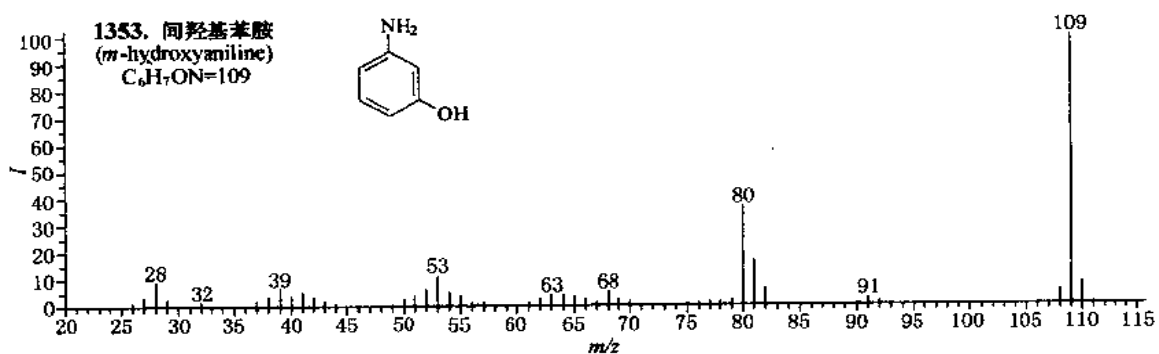
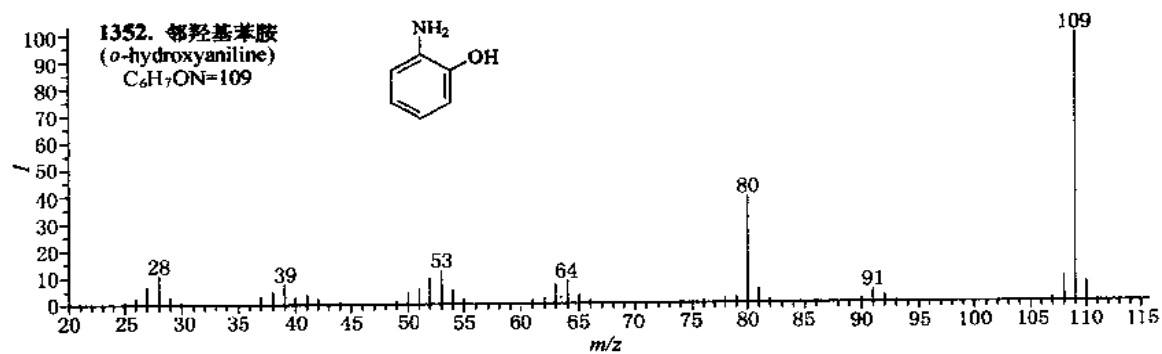
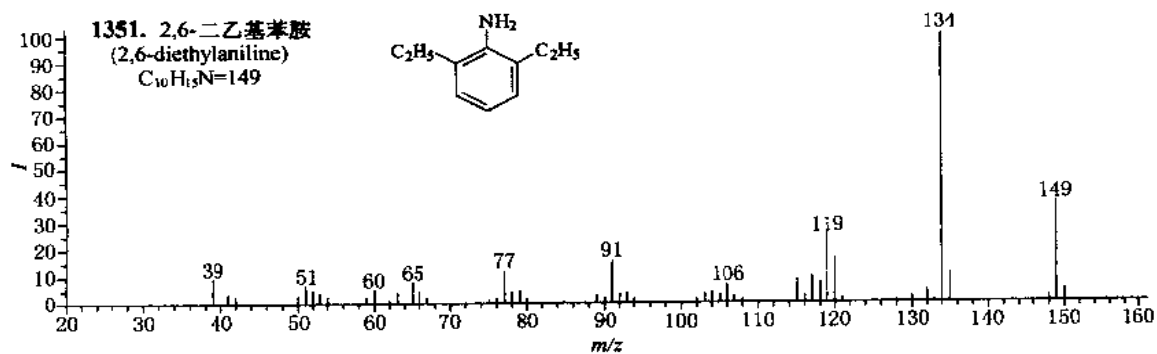
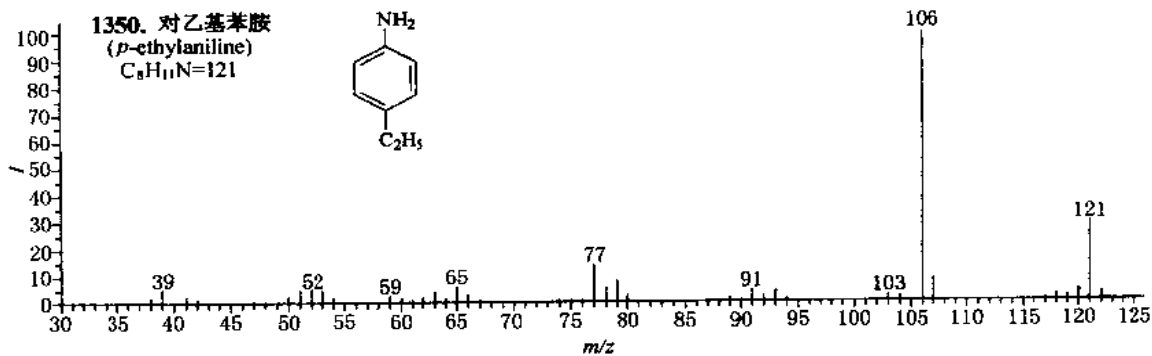
(12) *N*-甲基 (1398, 1399) 和 *N*-甲基及另一甲基取代的苯胺类 (1400~1402), 都有很强的  $M-H$  离子, 而 *N*-乙基 (1403, 1404) 或更大的 *N*-烷基取代物 (1405), 则是失去少 1 个亚甲基的烷基。  $M-H$  和  $M$ -烷基都是  $\alpha$ -裂解的产物。这些化合物的另一重要裂解是直接失去氨基得到苯基离子。

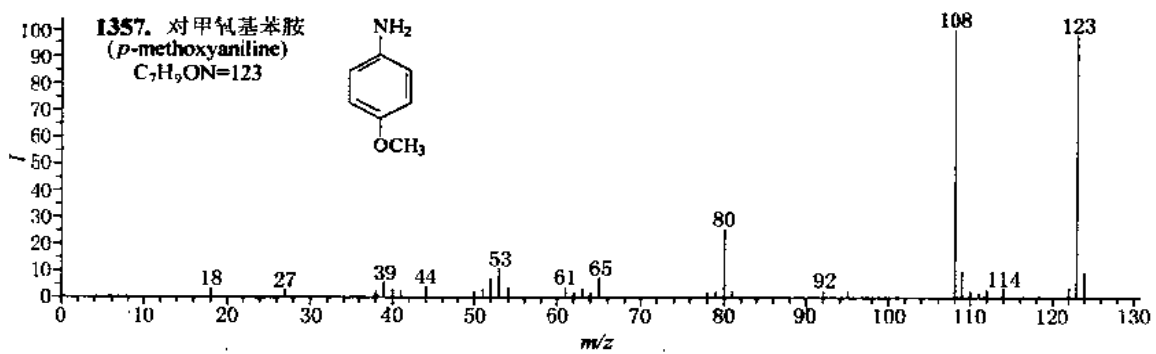
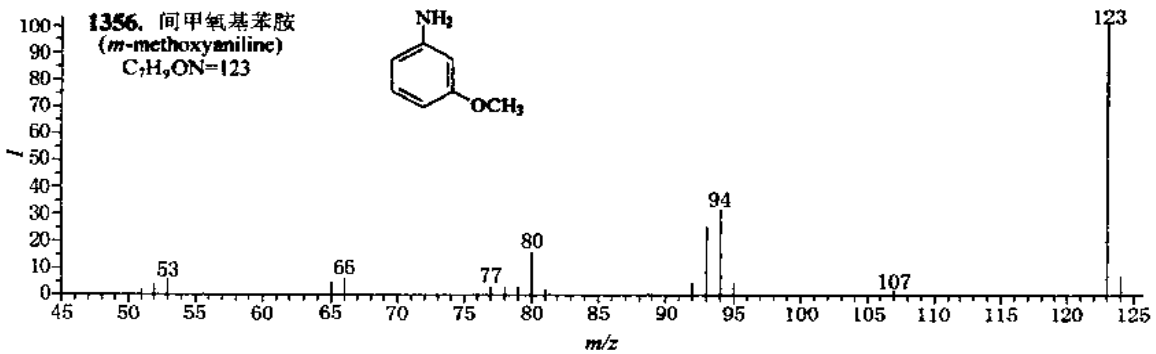
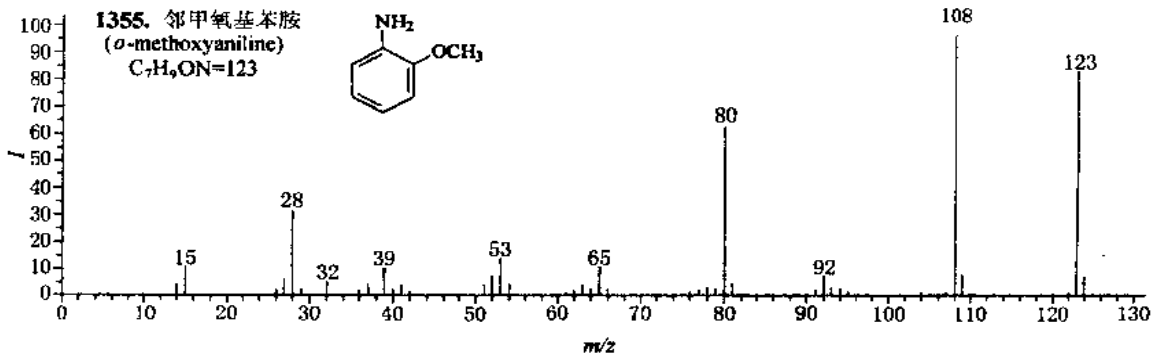
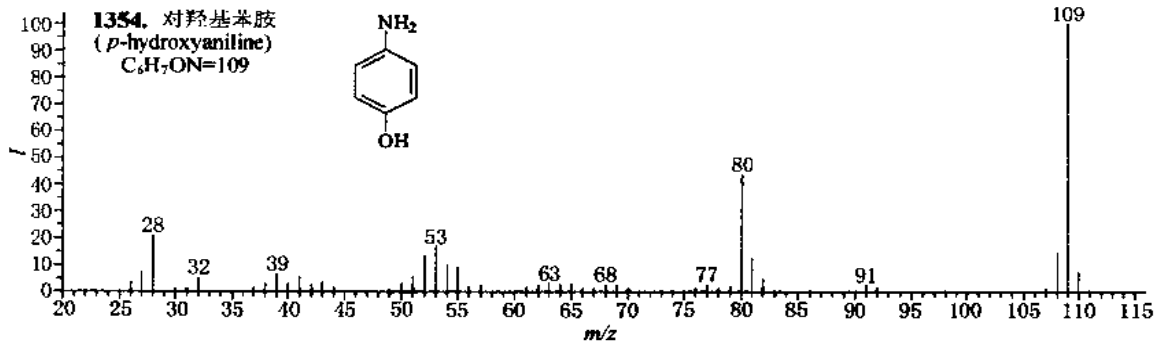




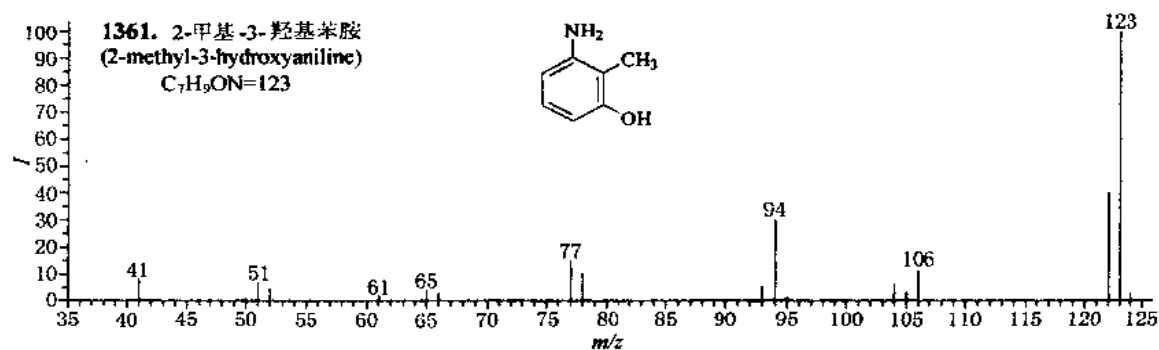
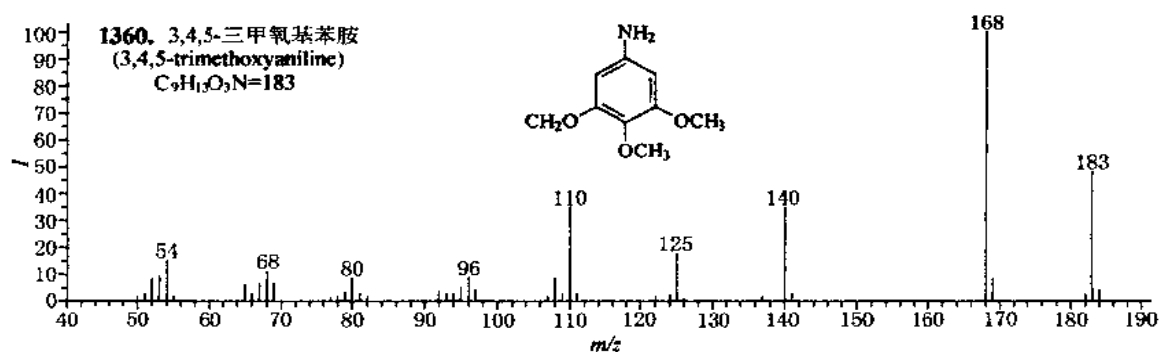
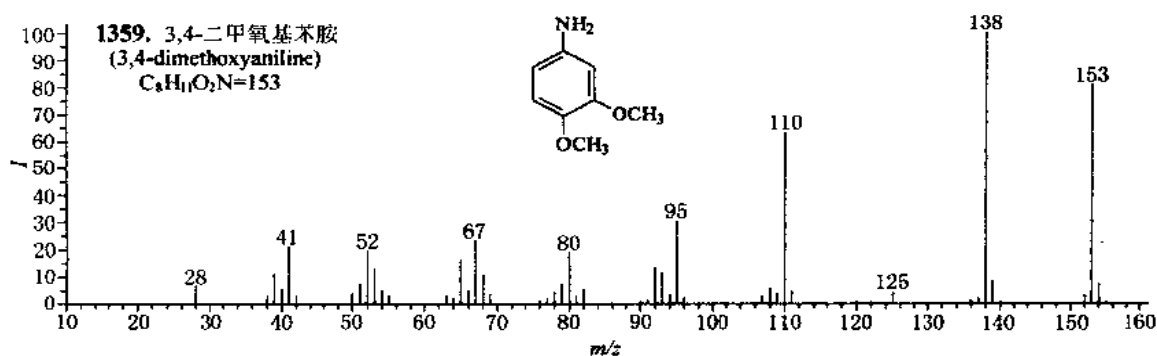
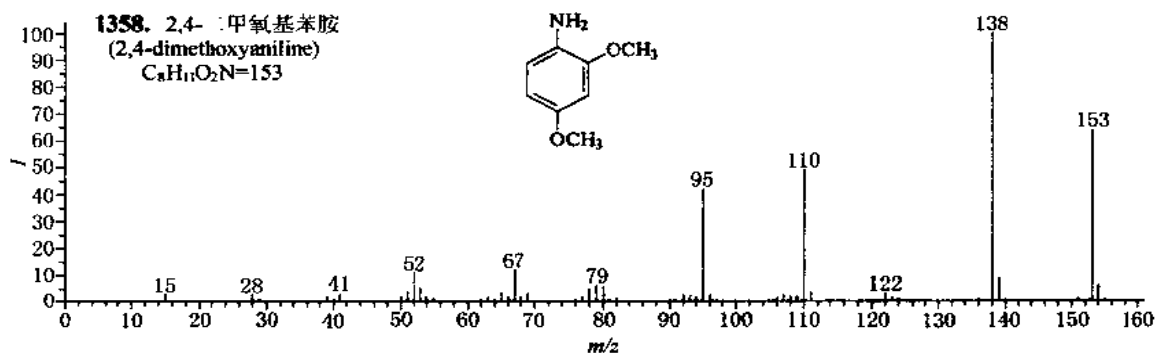


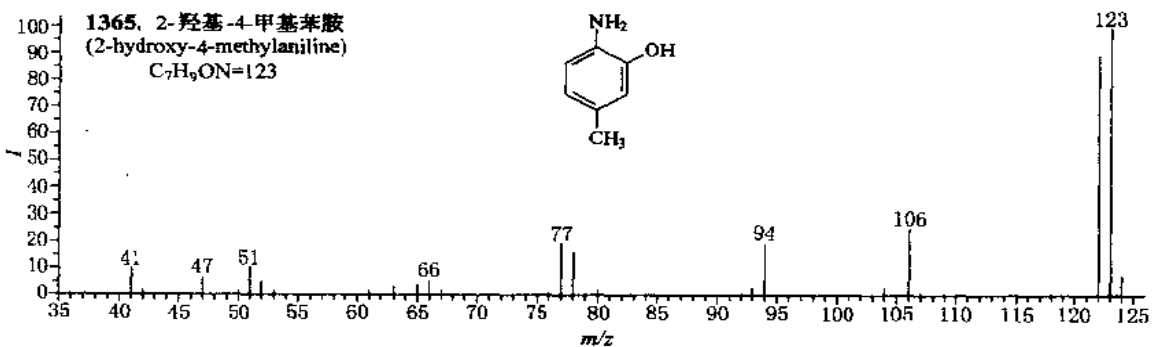
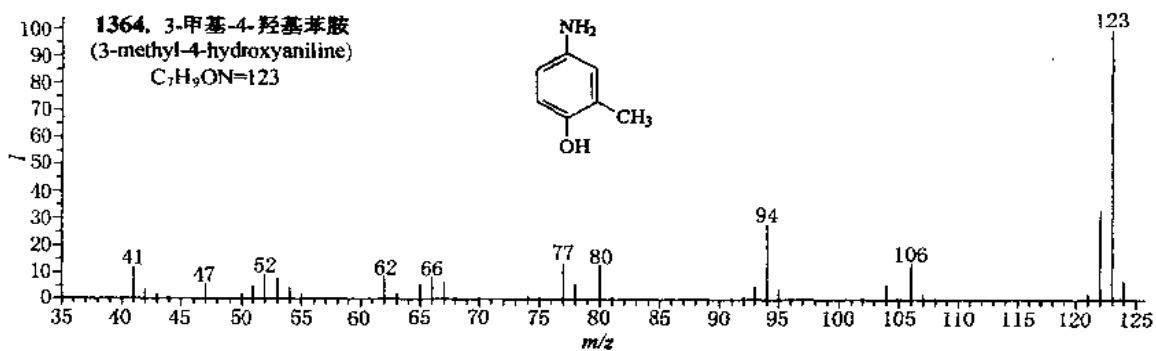
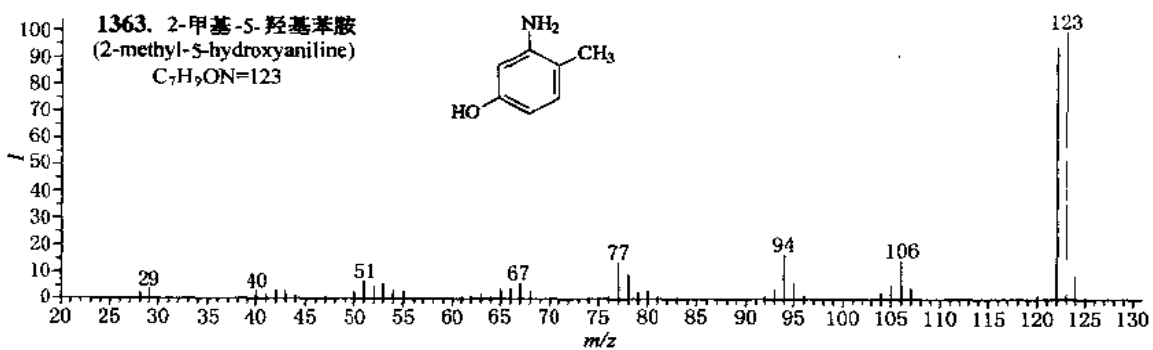
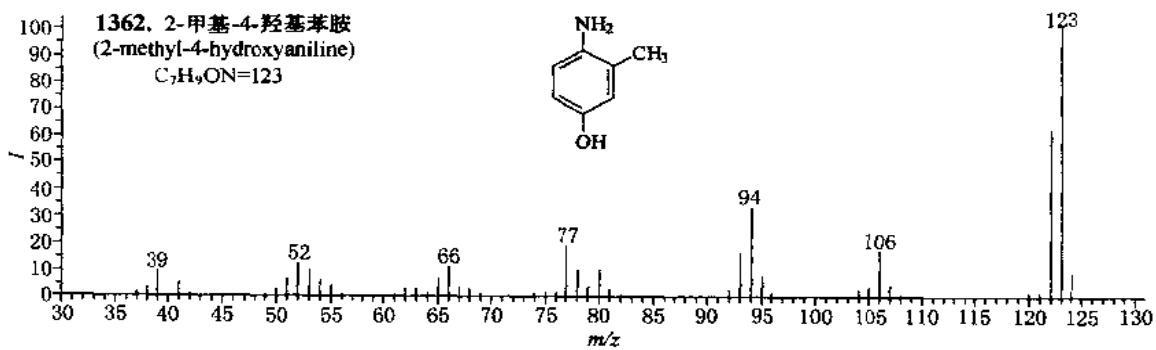


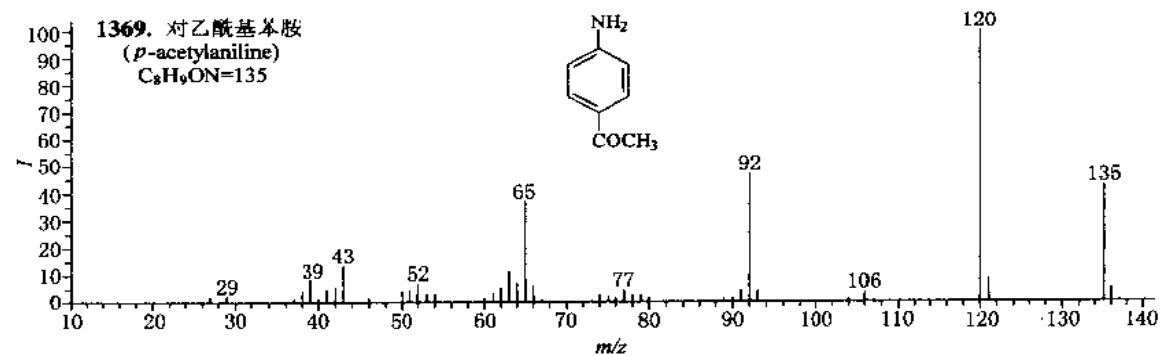
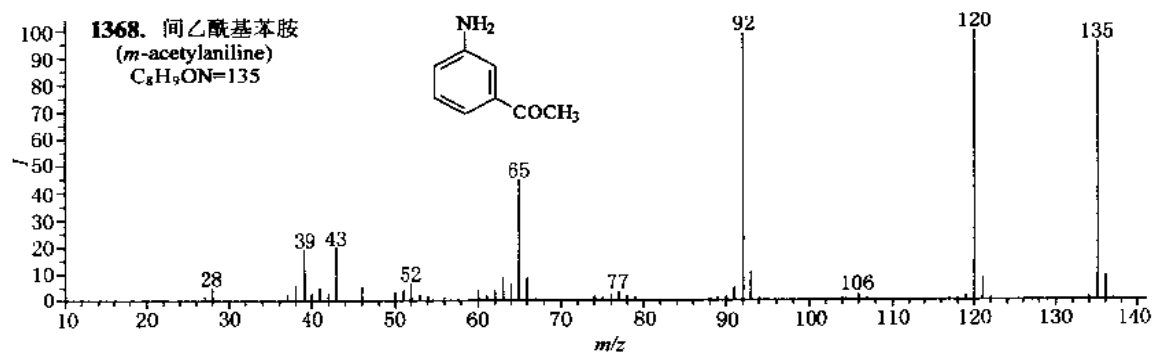
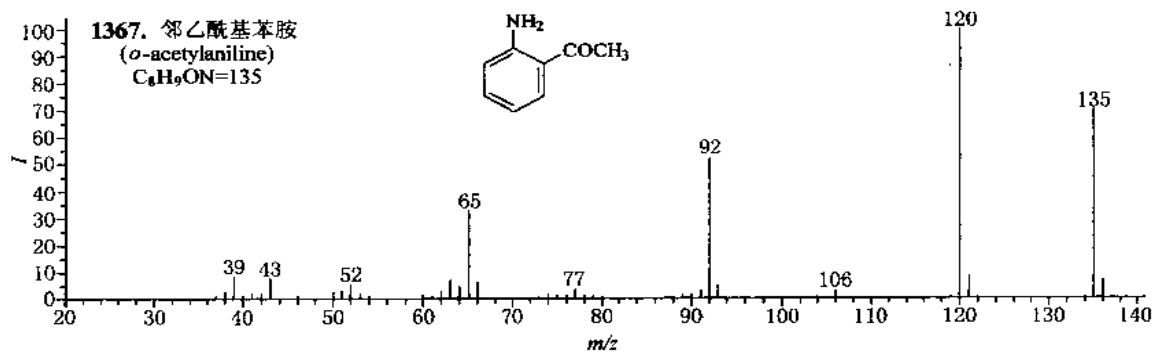
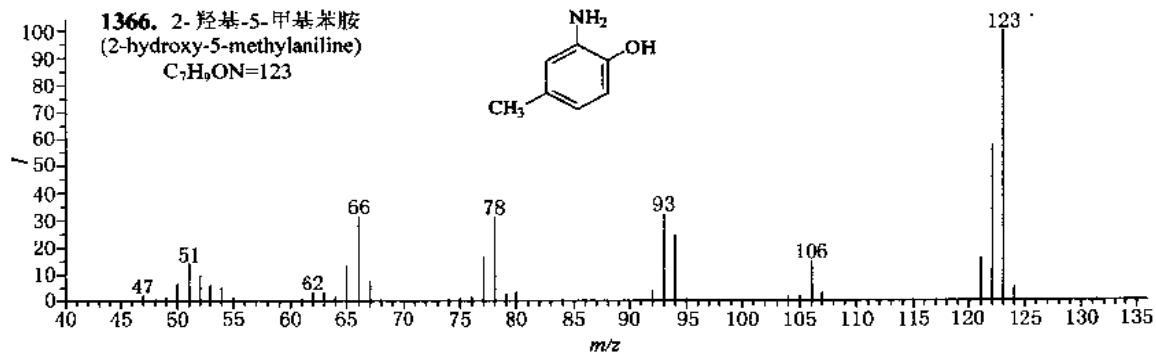


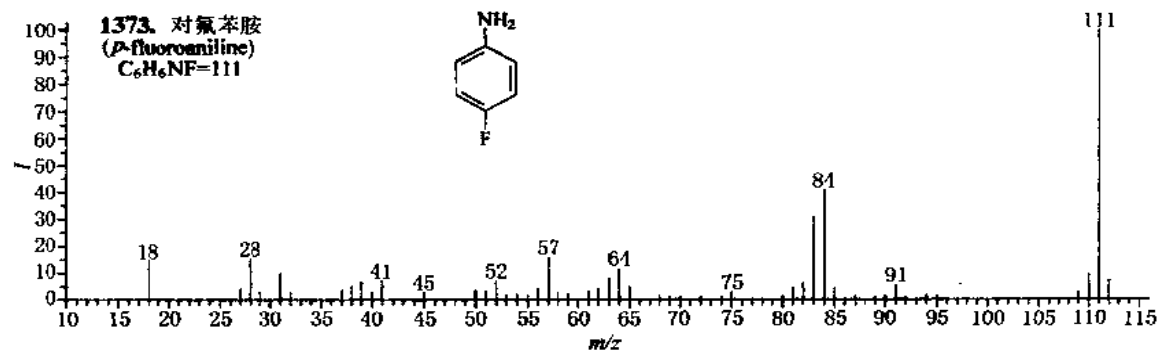
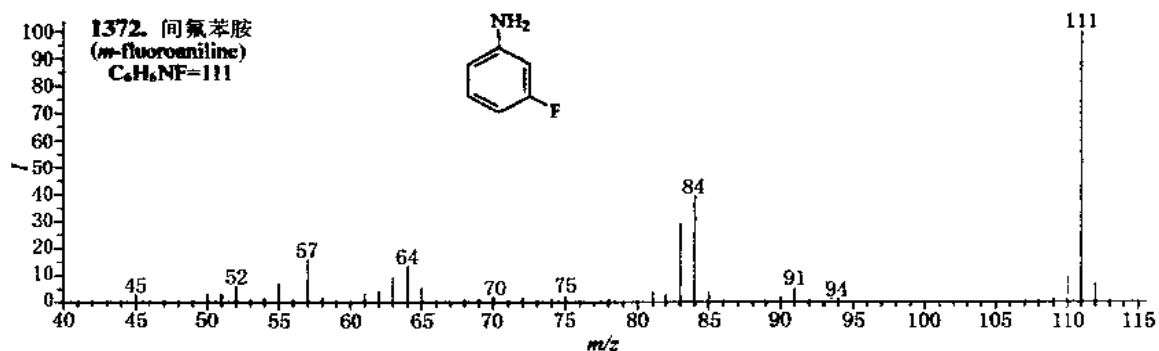
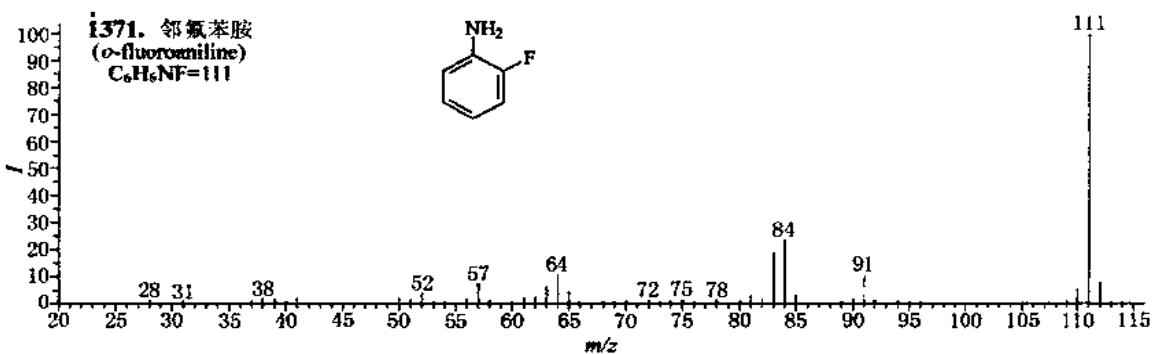
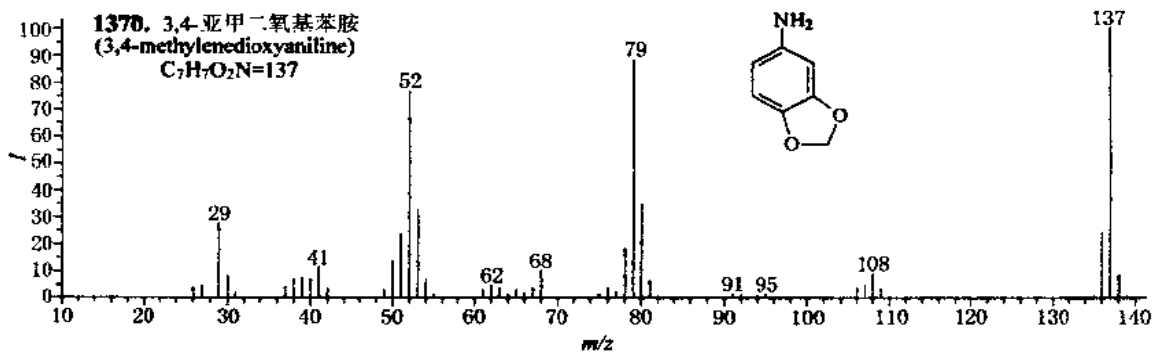


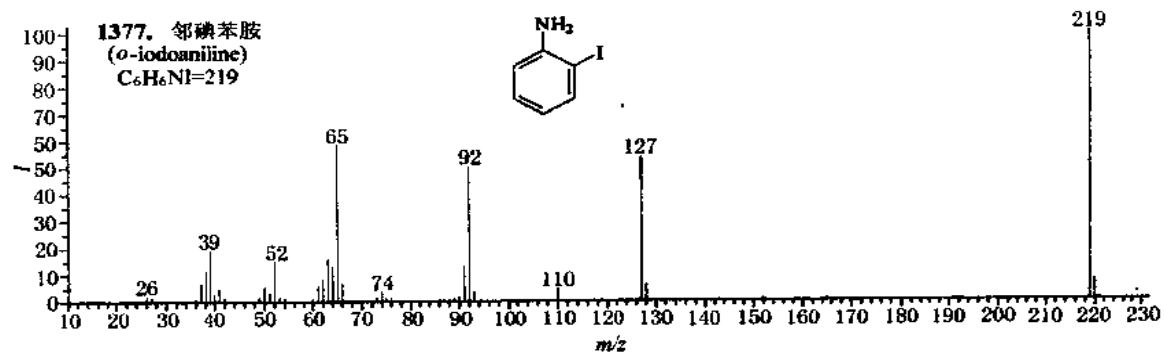
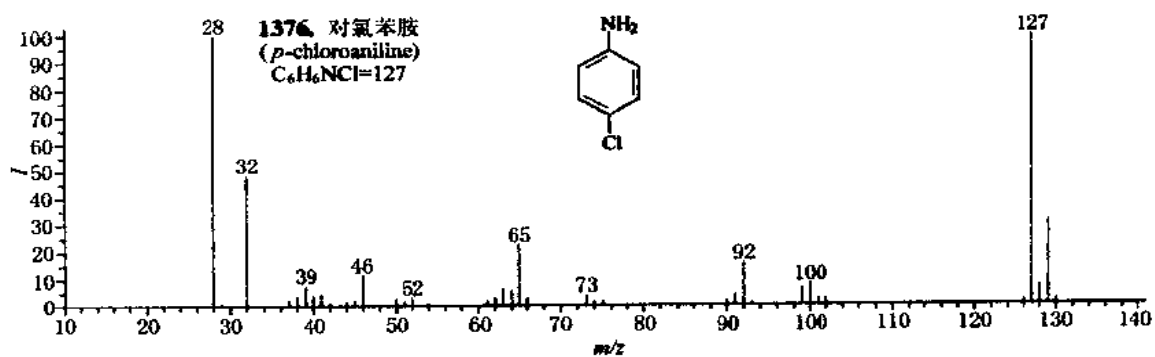
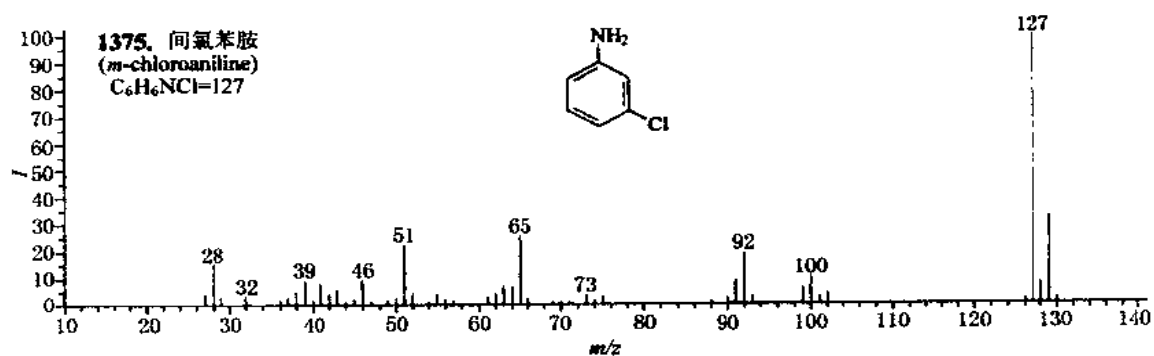
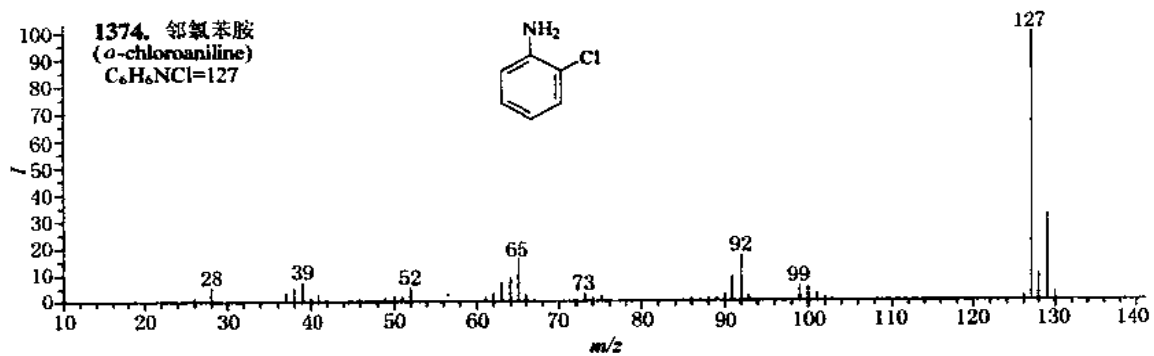


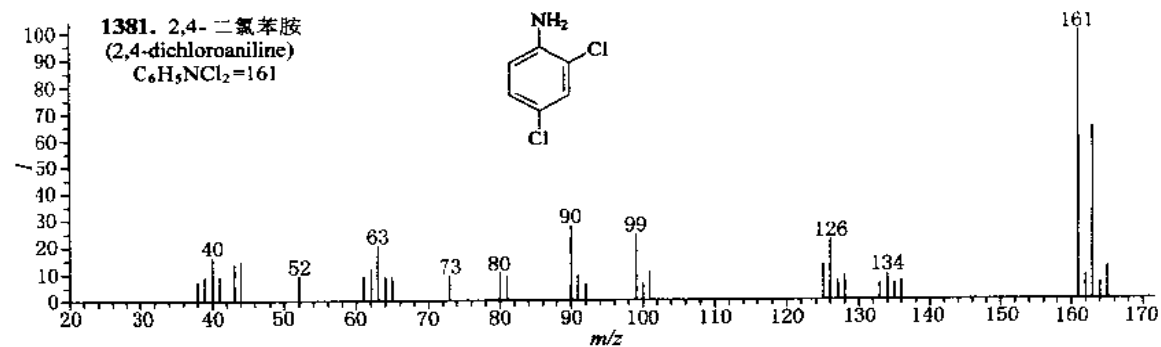
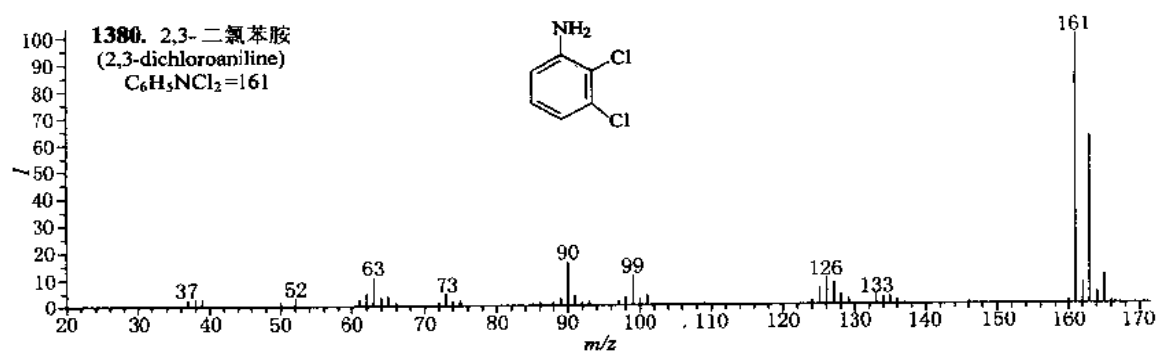
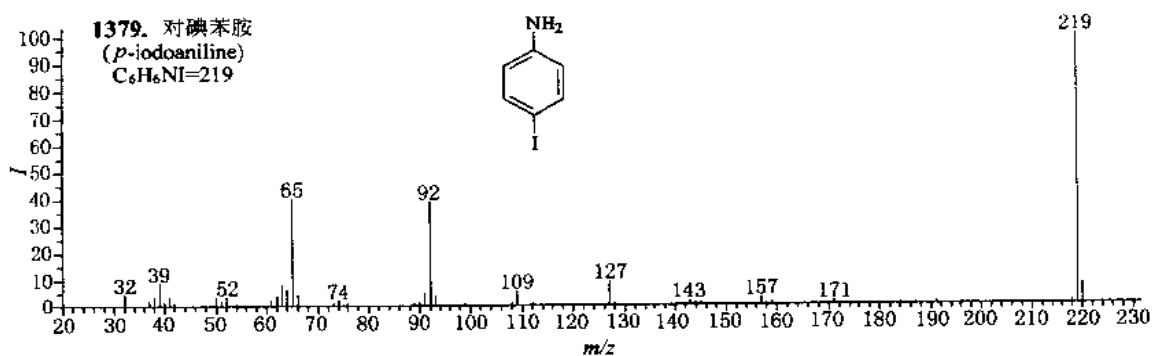
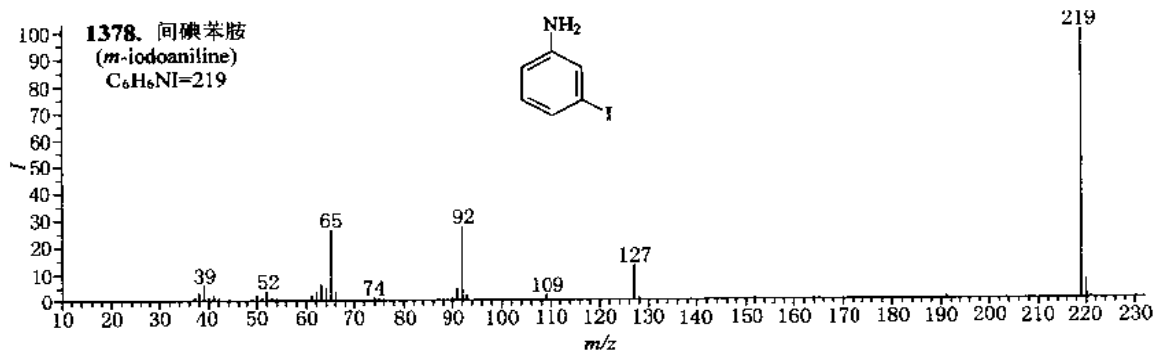


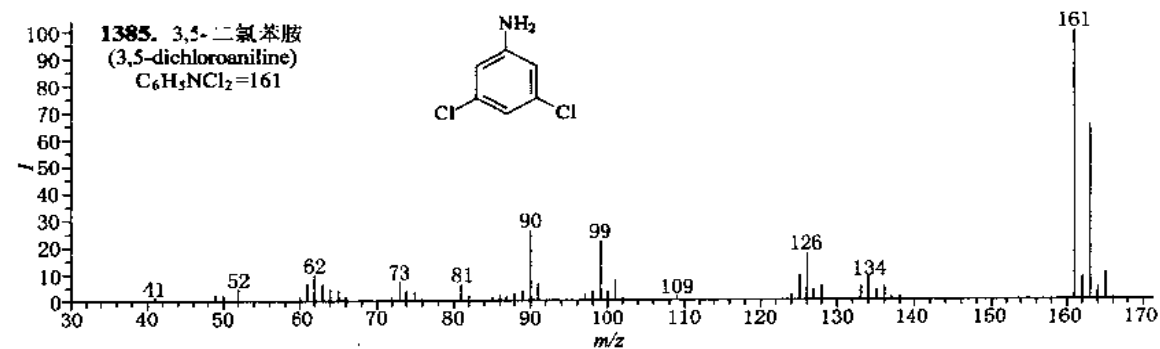
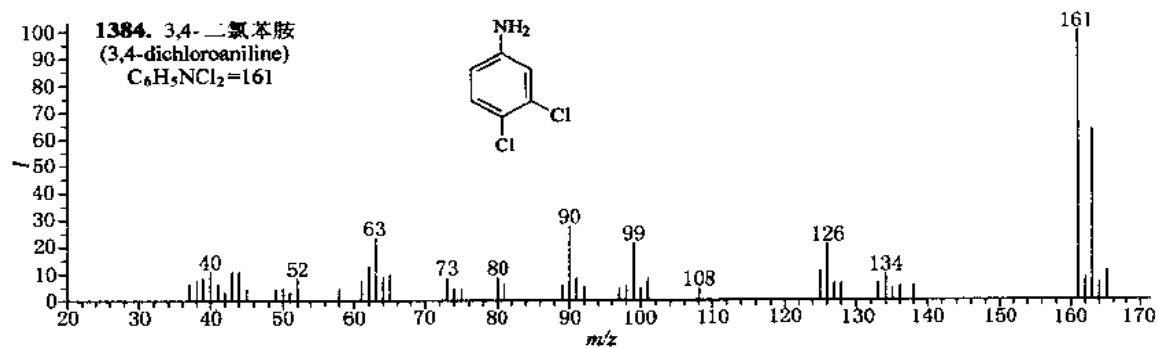
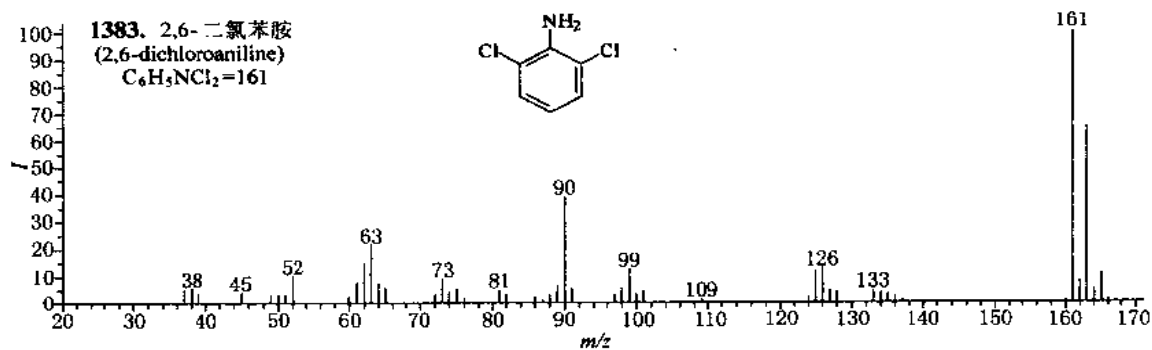
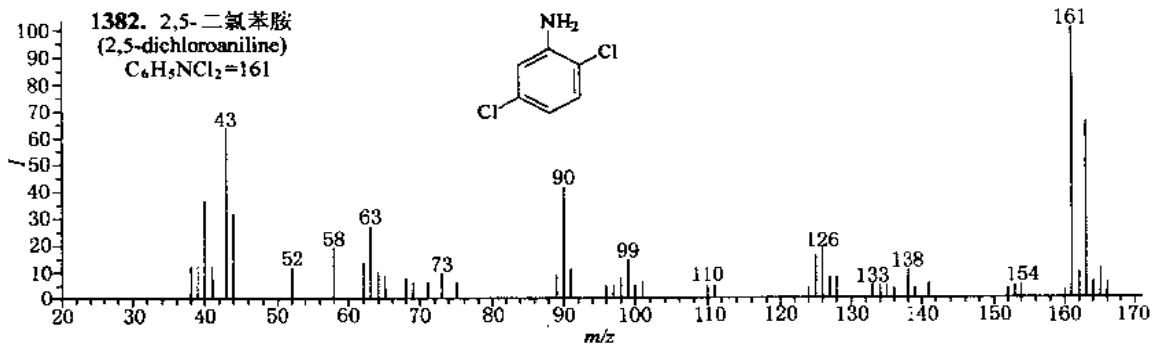


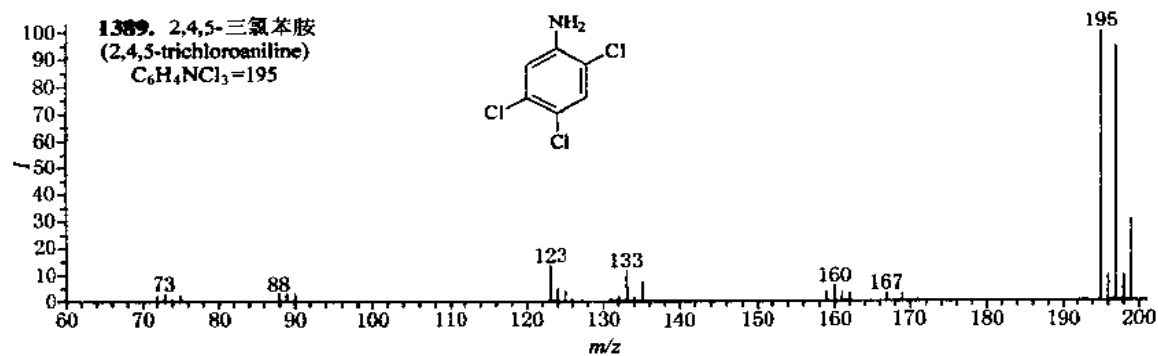
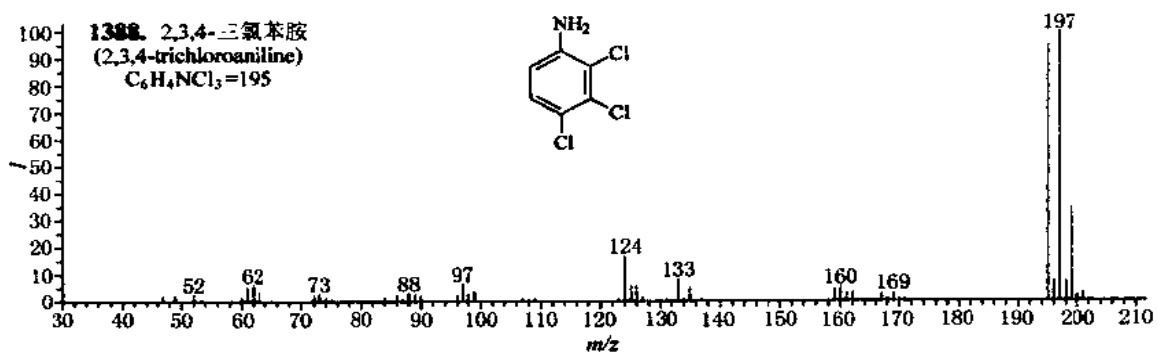
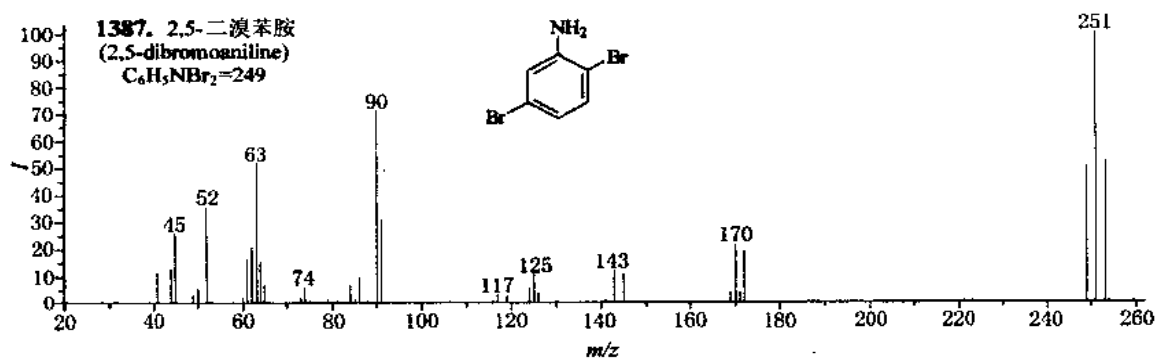
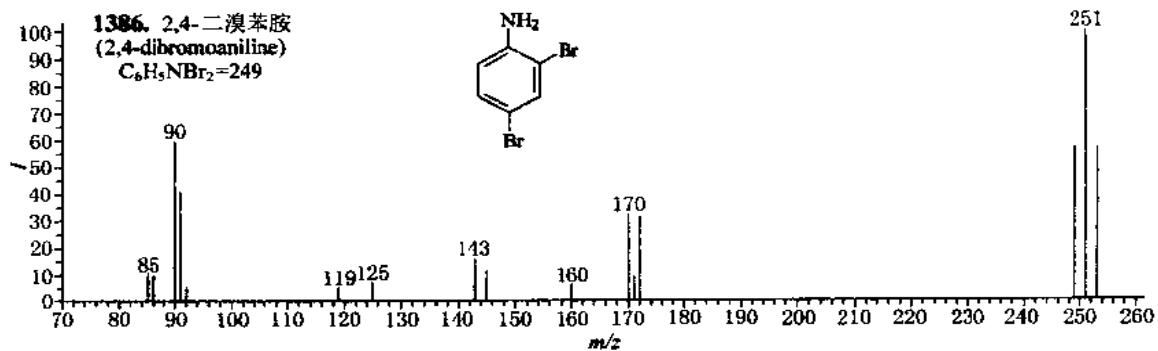




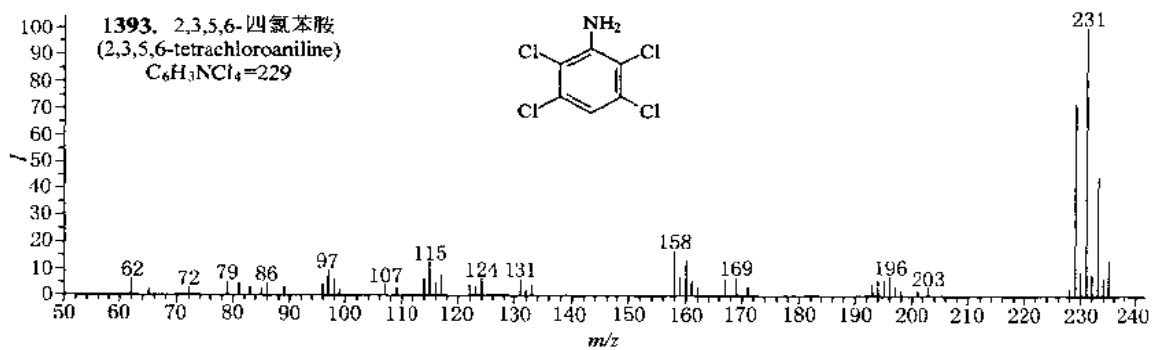
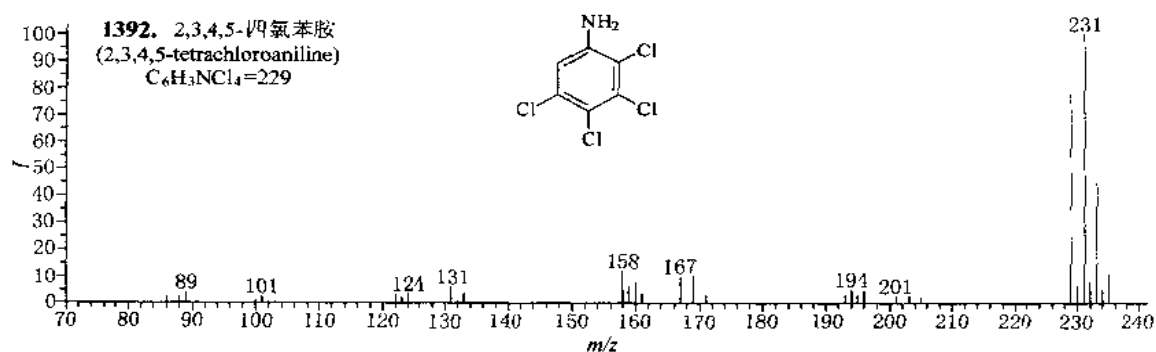
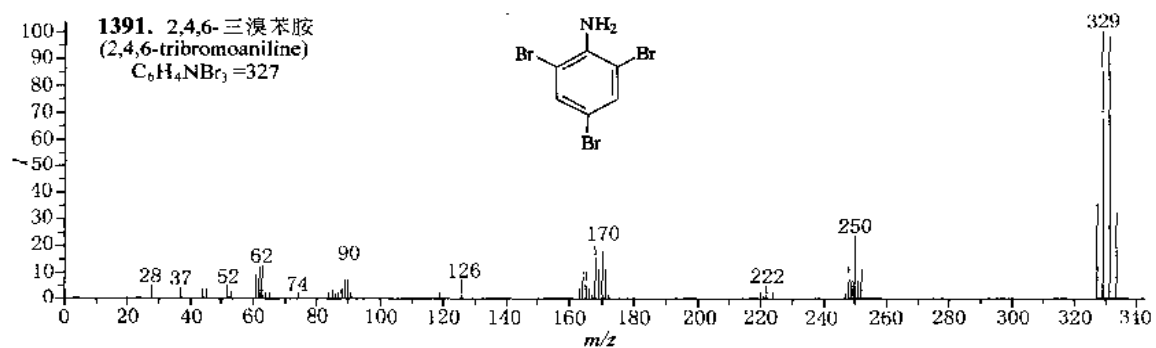
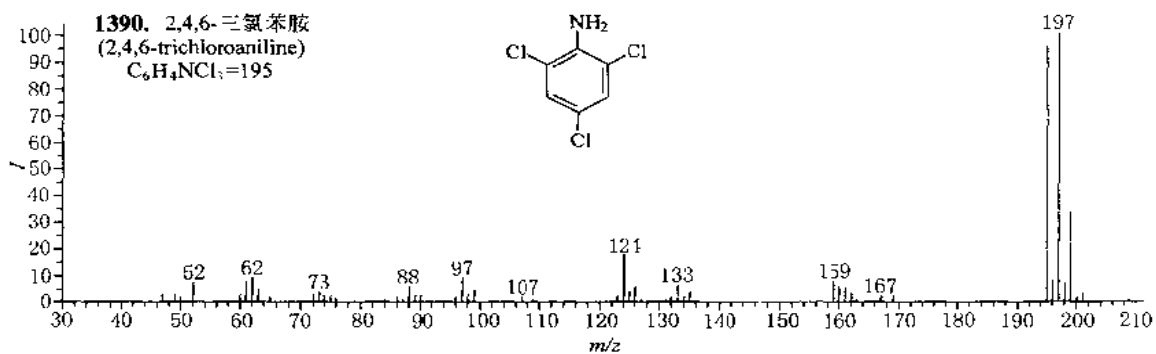


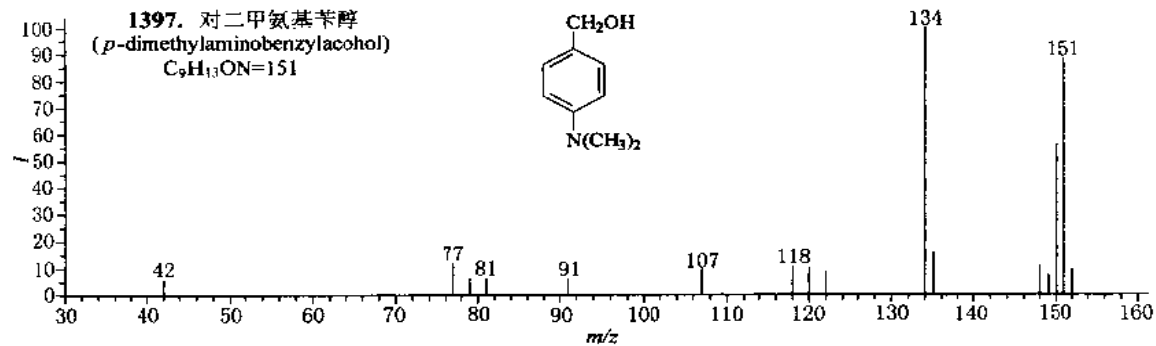
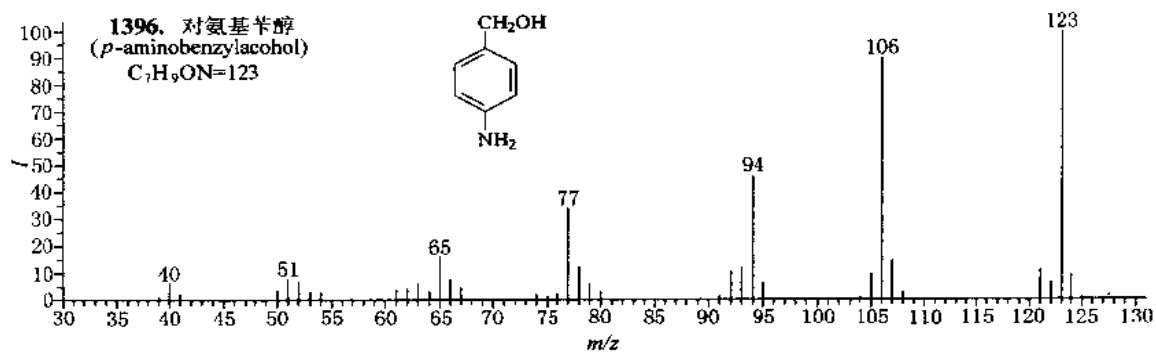
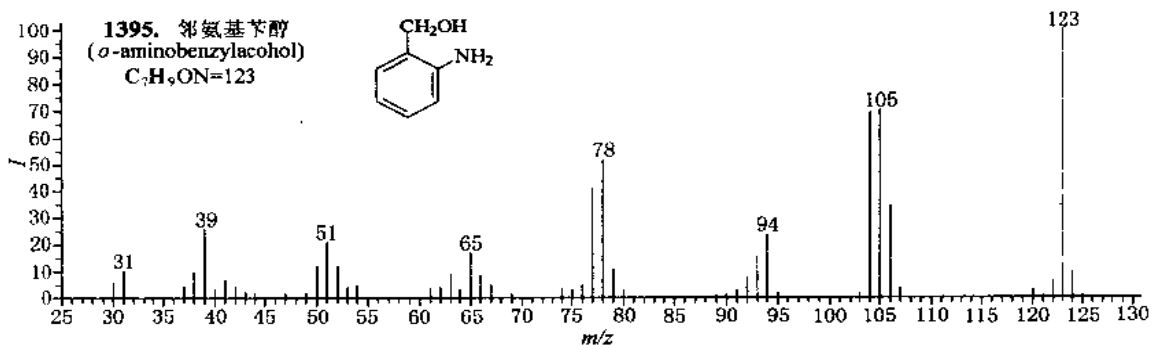
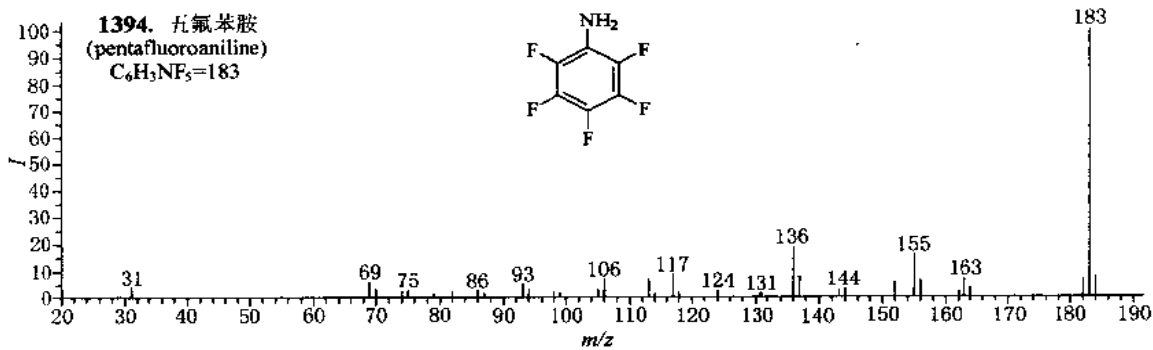


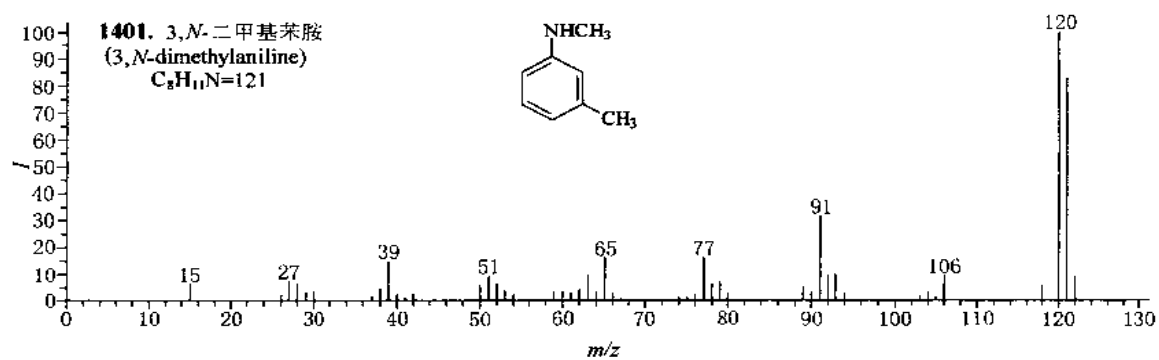
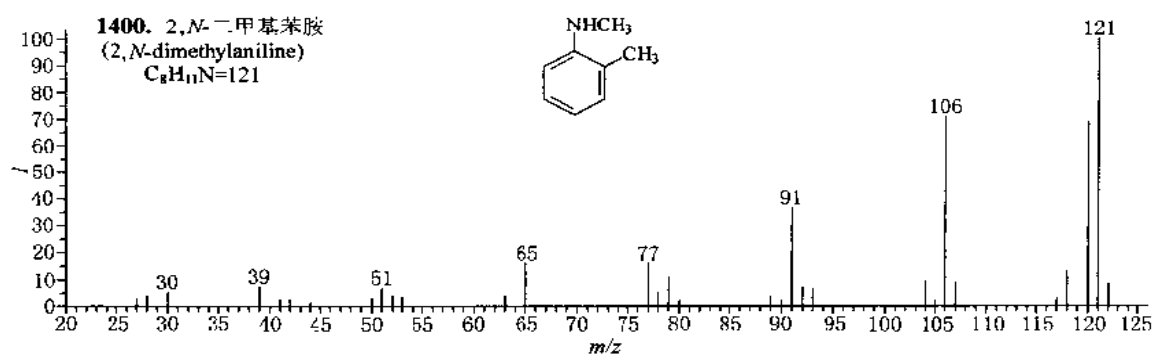
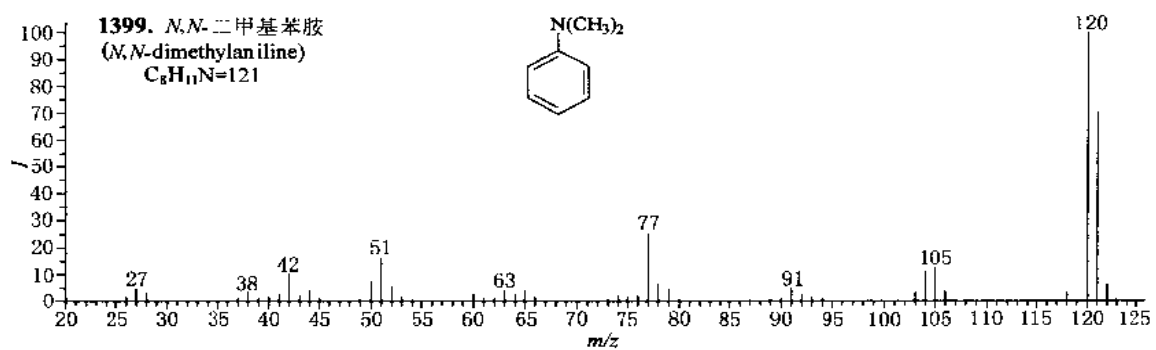
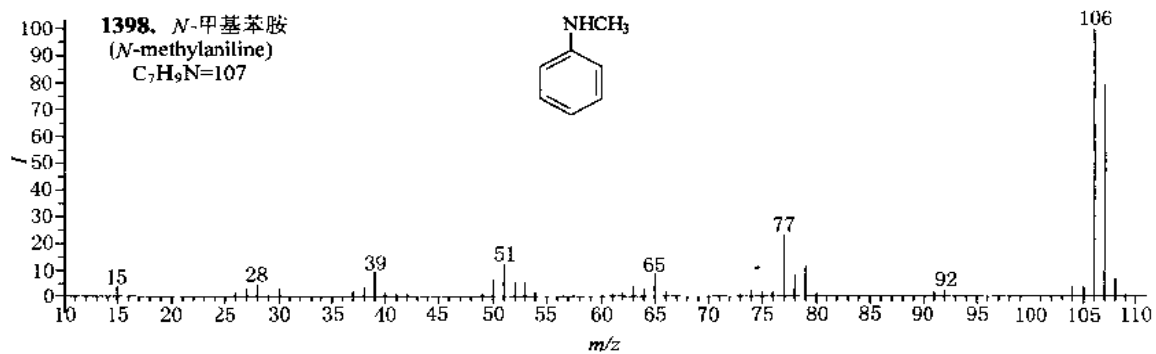


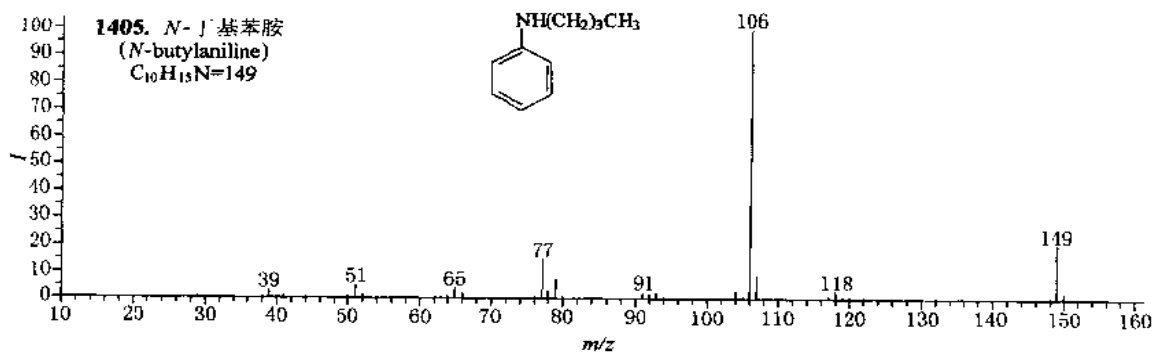
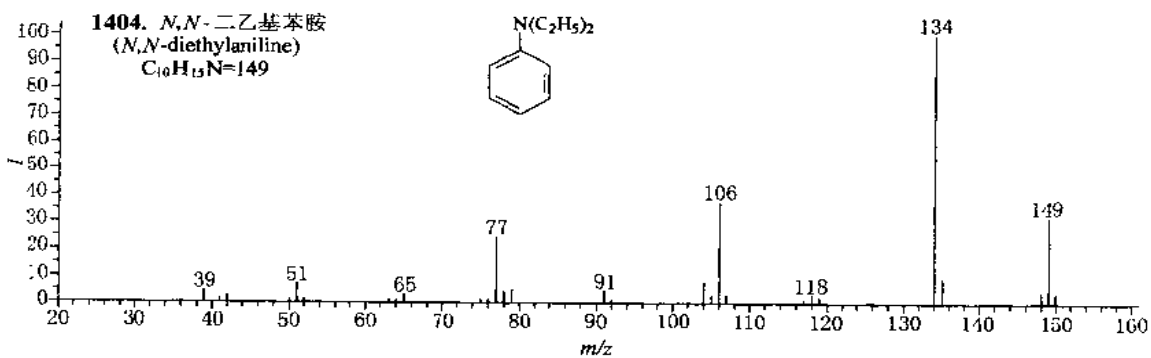
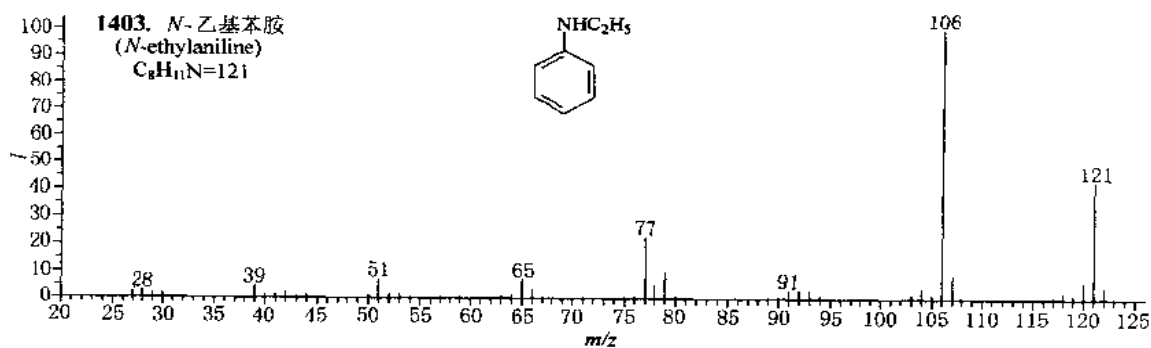
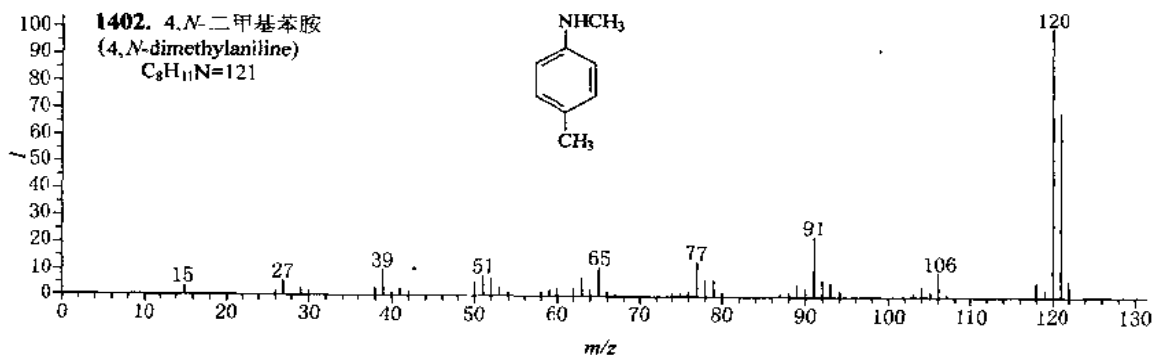








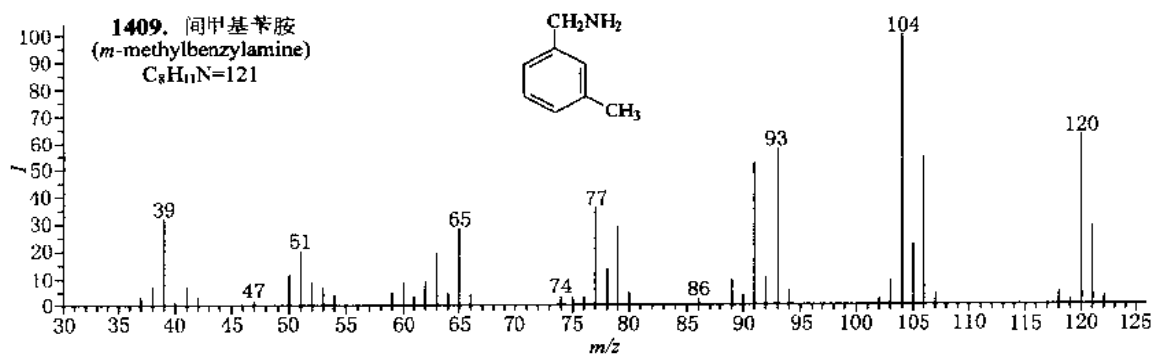
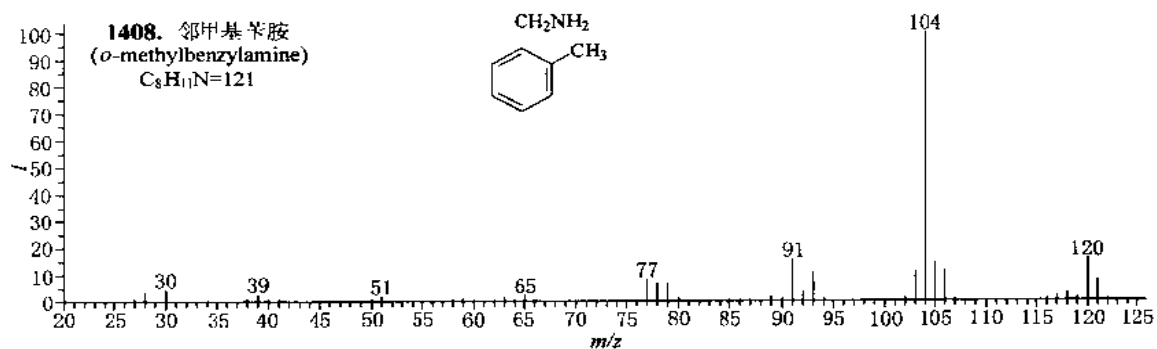
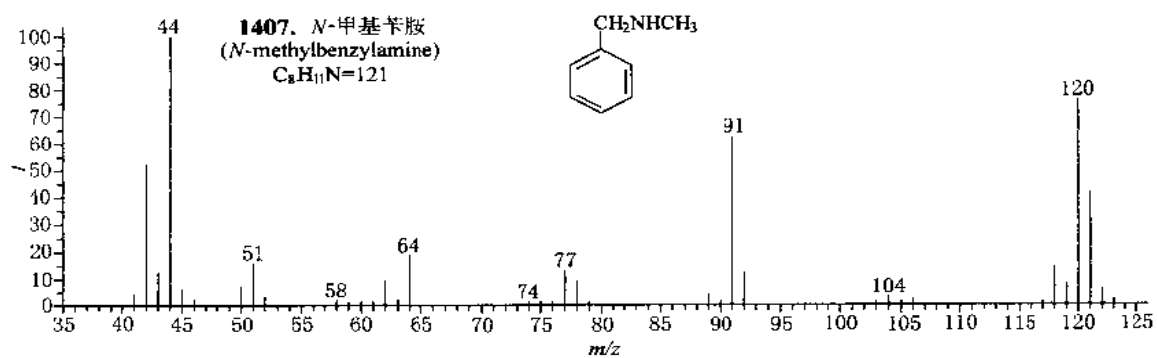
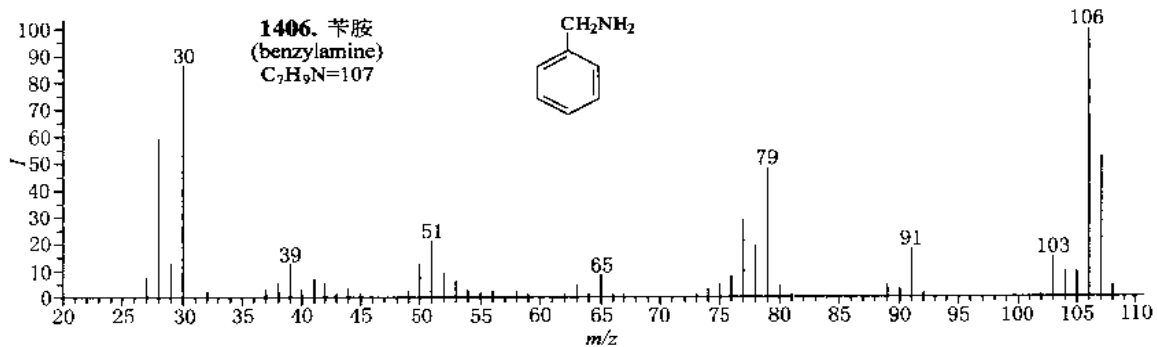


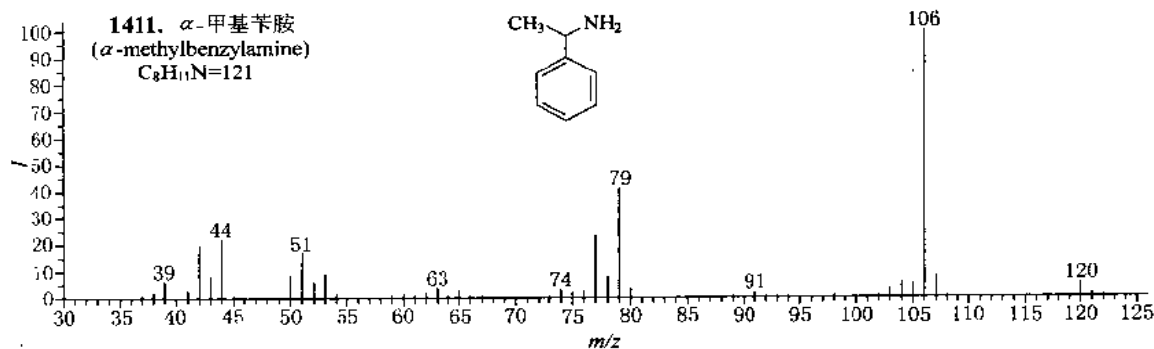
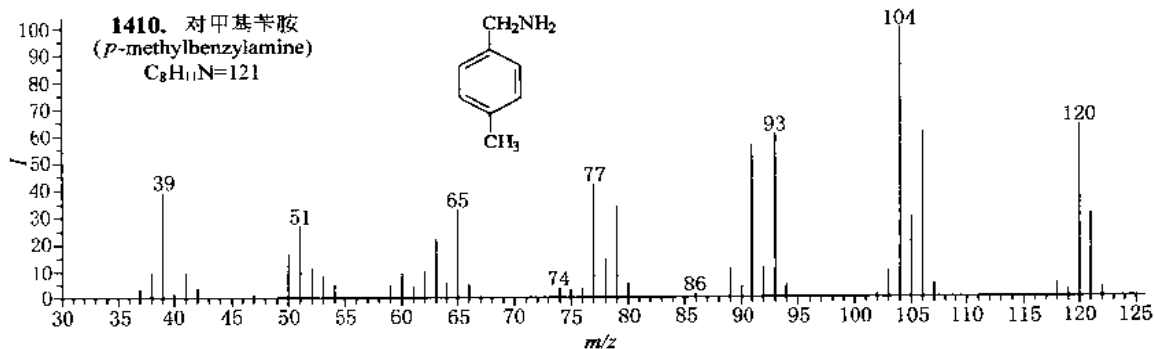


## 八、苄胺类

(1) 这类化合物 (1406~1411) 的  $M-H$  离子均较强, 其他离子是  $M-CH_3$  和  $M-H-NH_2$ 。

(2) 1,2-二苯基-1,2-二乙胺 (1413) 的裂解是分子离子的对半裂解。

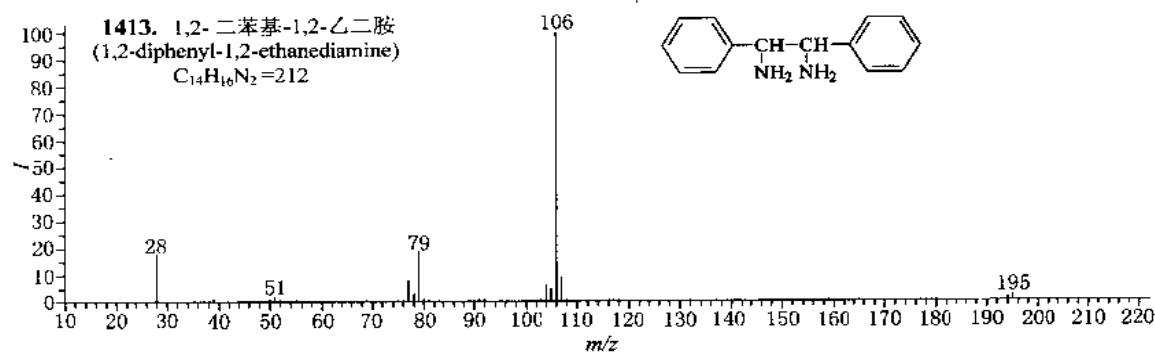
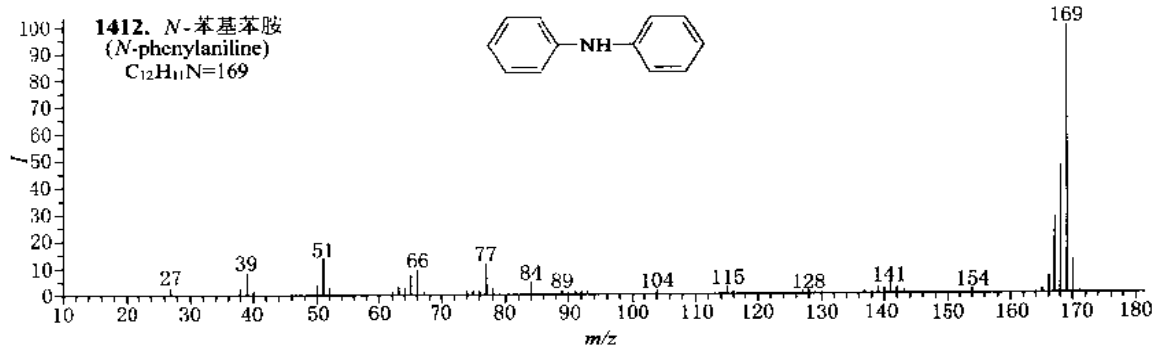


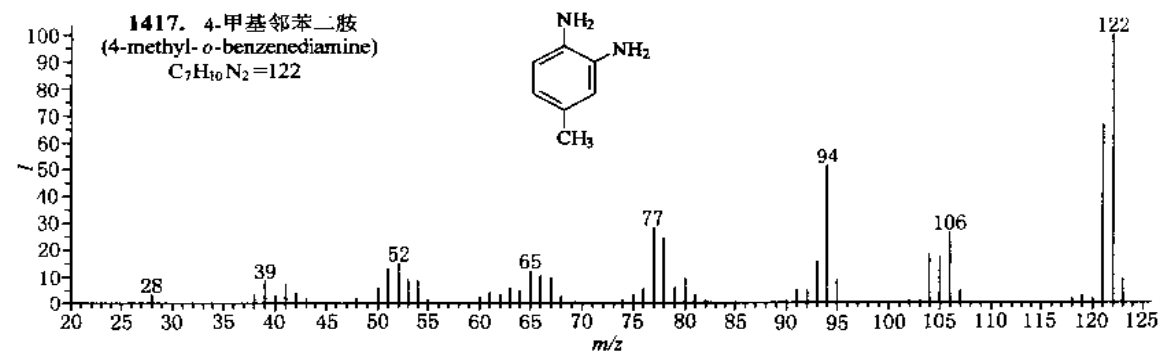
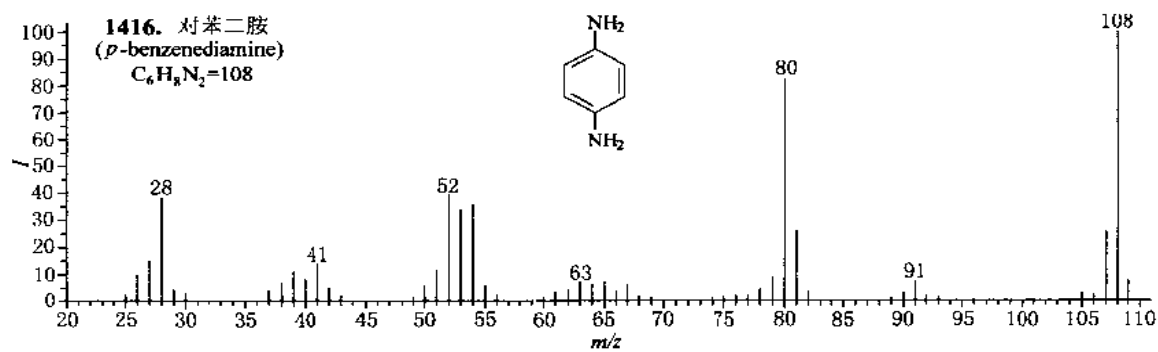
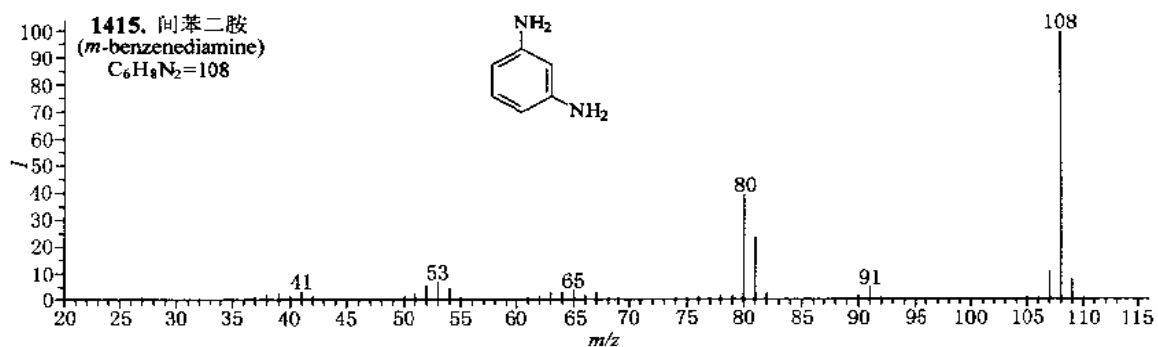
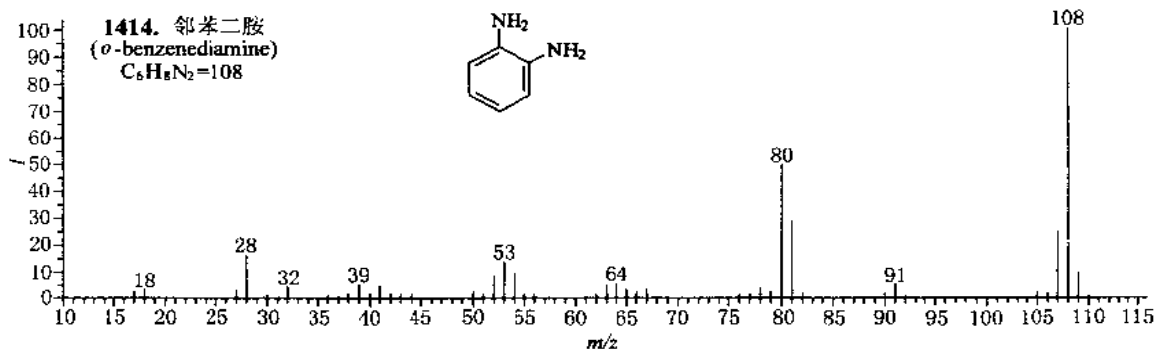


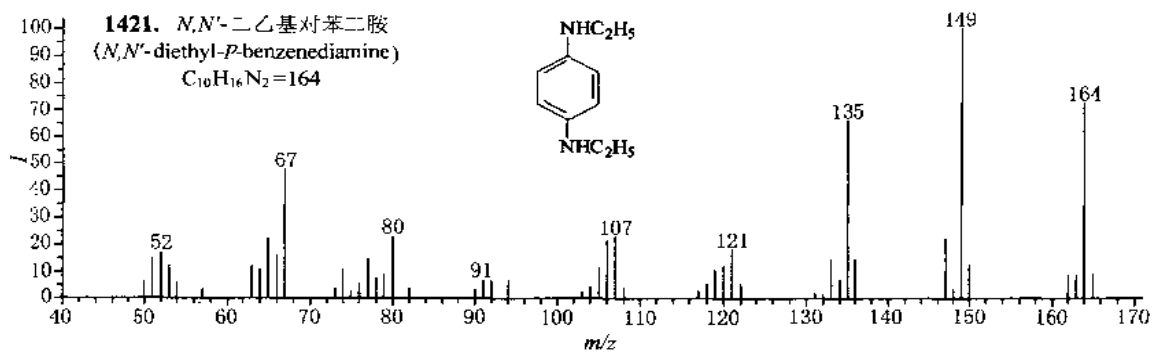
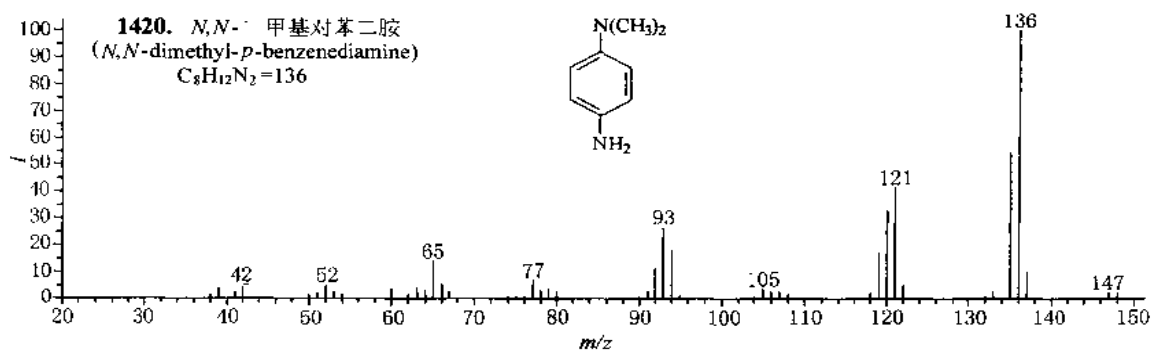
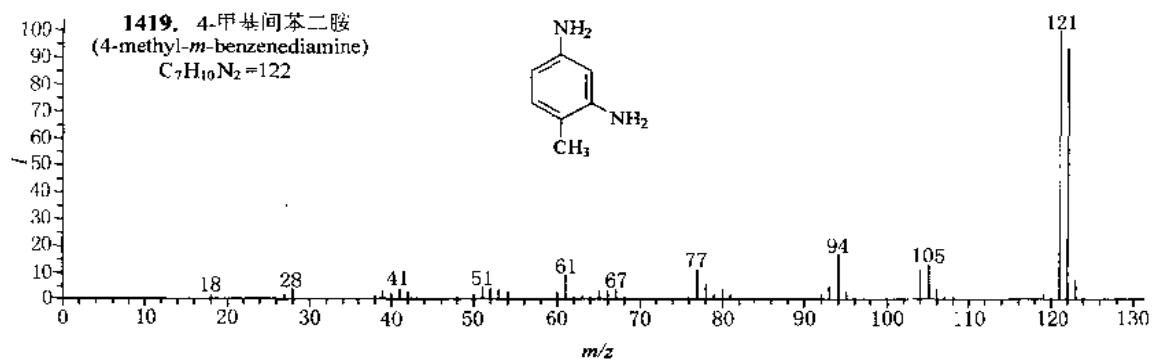
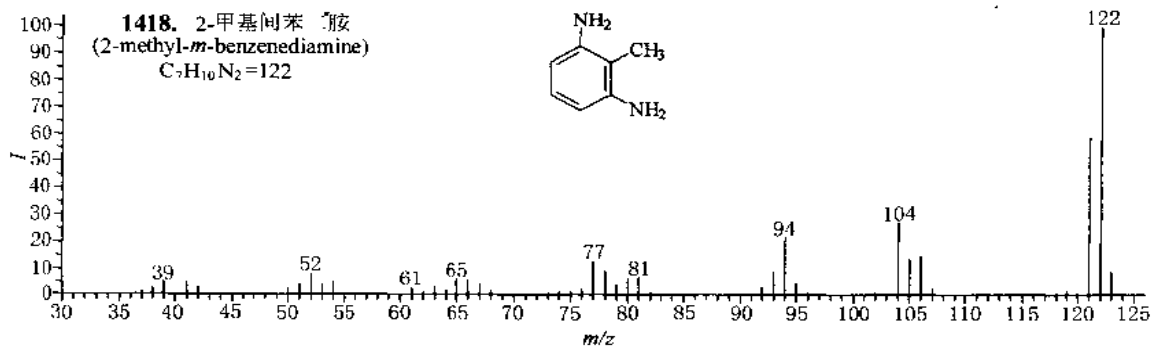
### 九、芳二胺类

(1) 苯二胺类 (1413~1415) 和甲基苯二胺类 (1416~1421) 的裂解途径是  $M-CN H-H$ , 后一类有更强的  $M-H$  离子。

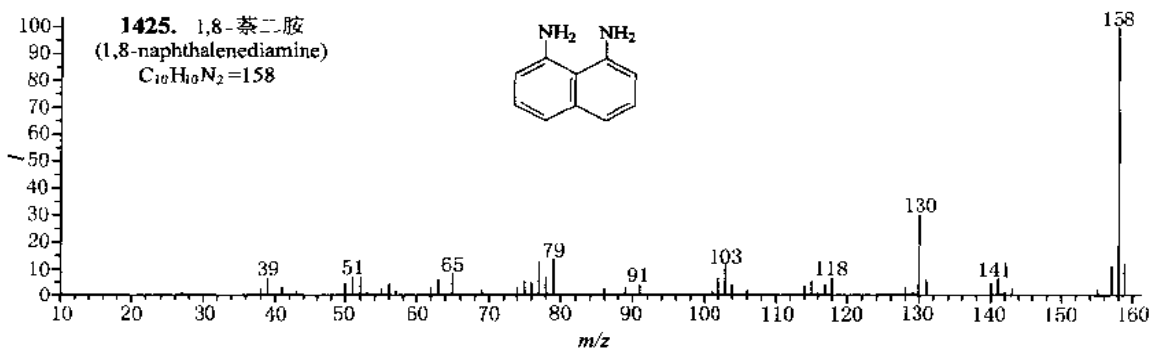
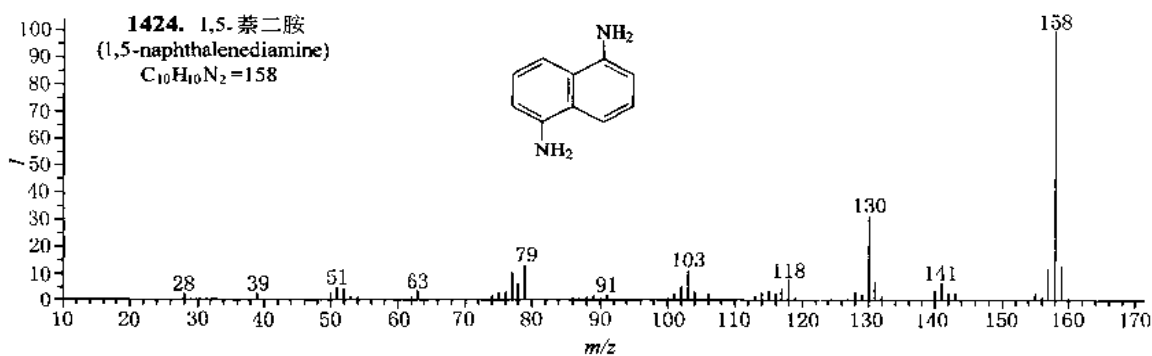
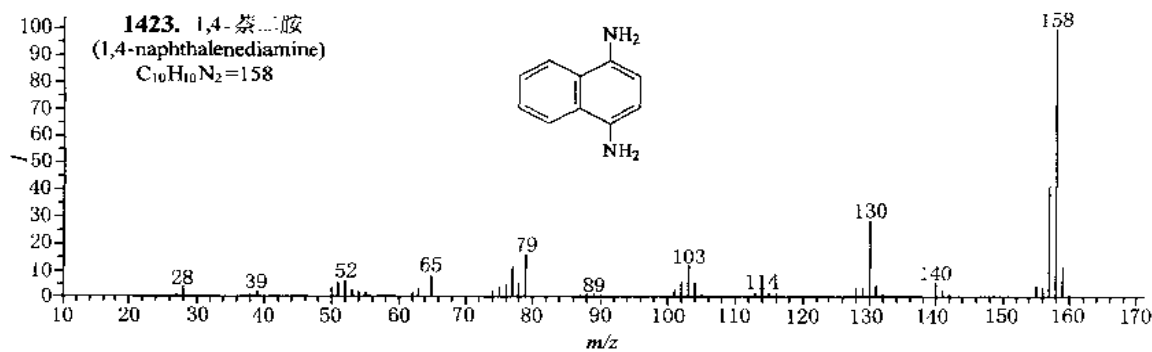
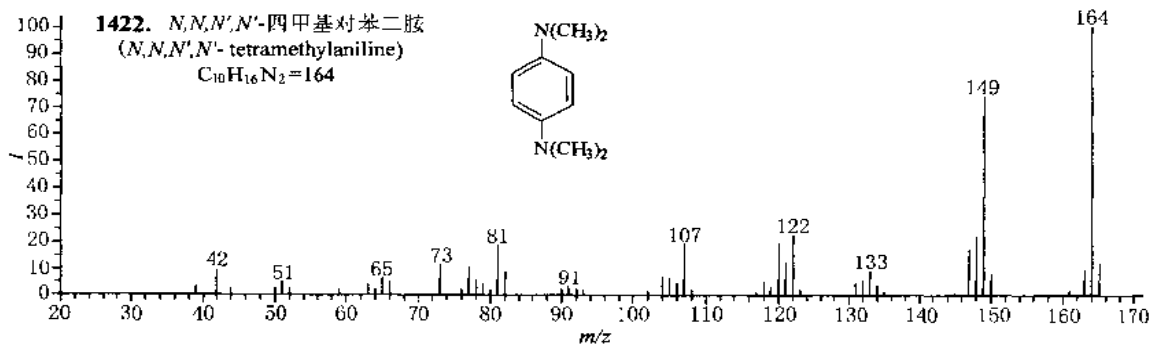
(2) 萘二胺类 (1422~1425) 的主要碎片离子都是  $M-28$ , 失去的部分可能是  $CNH_2$ 。





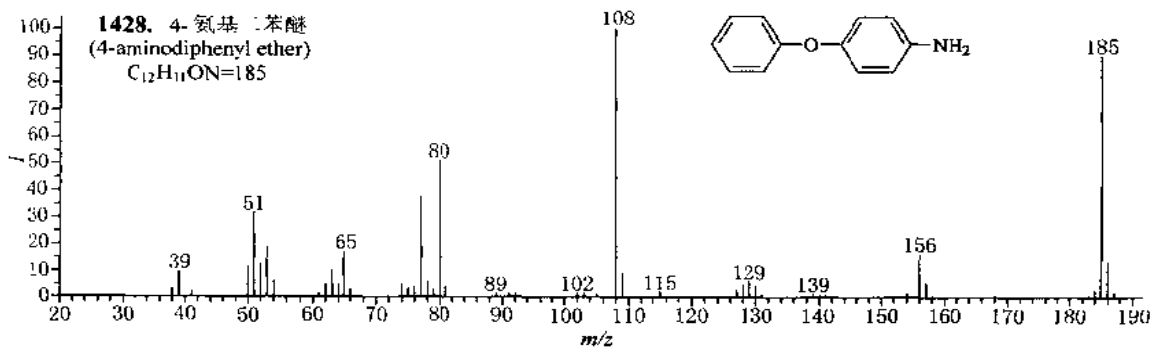
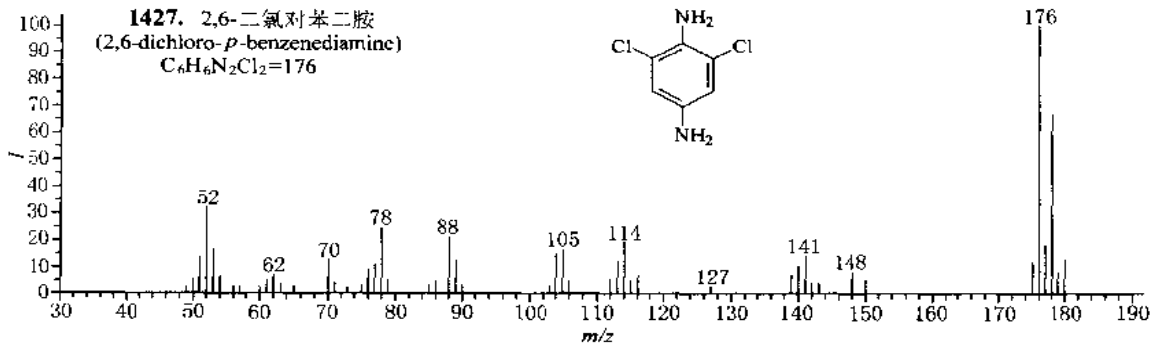
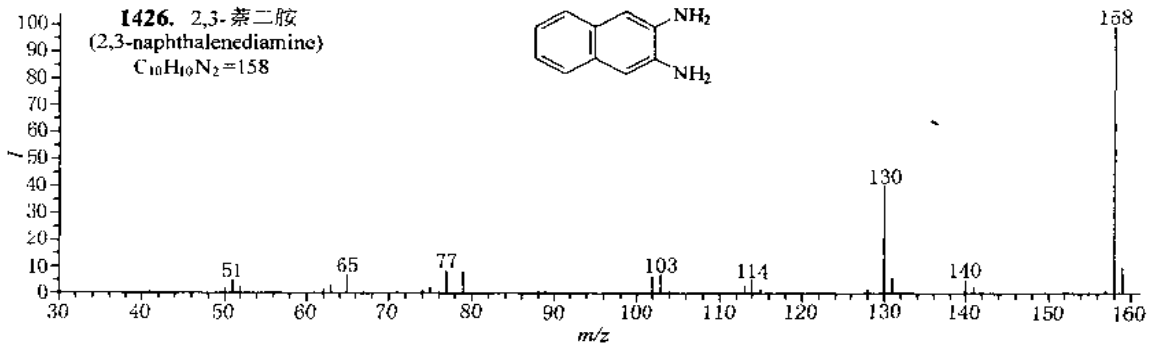


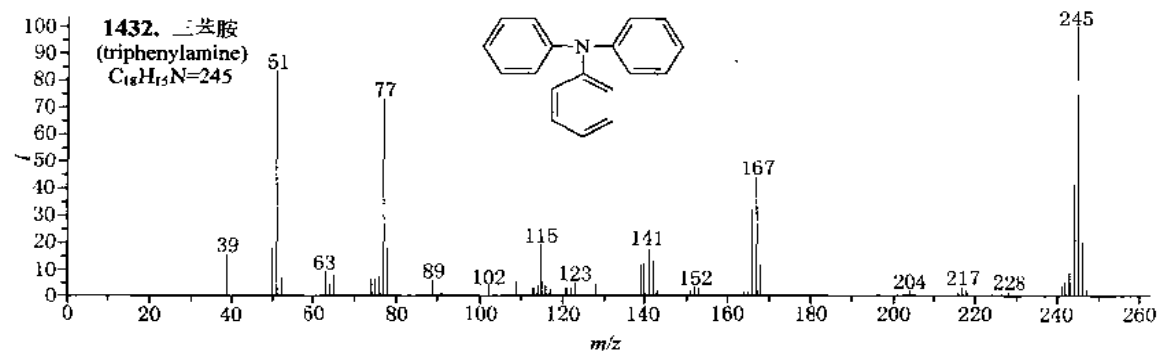
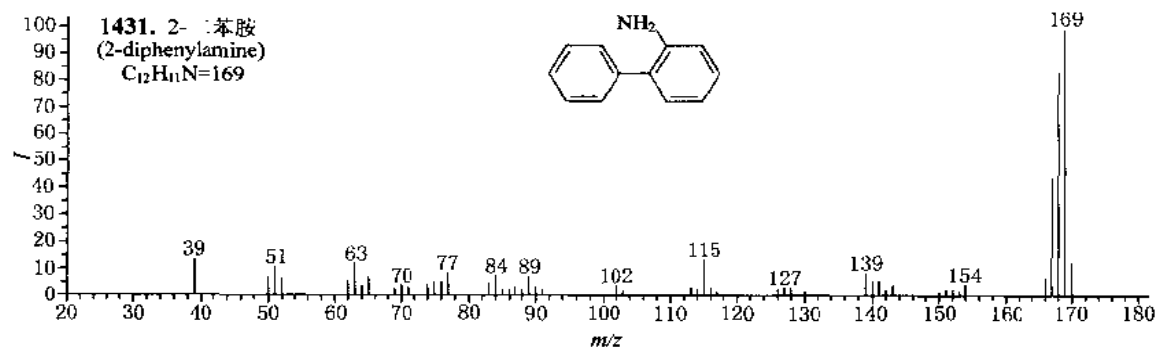
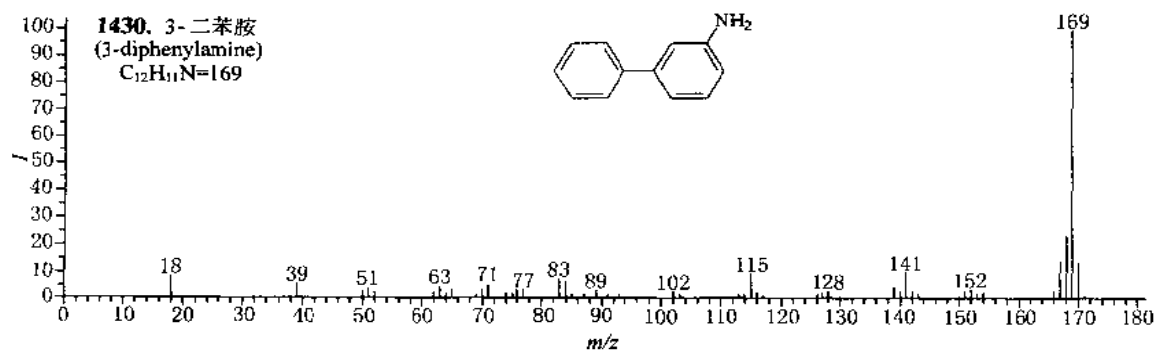
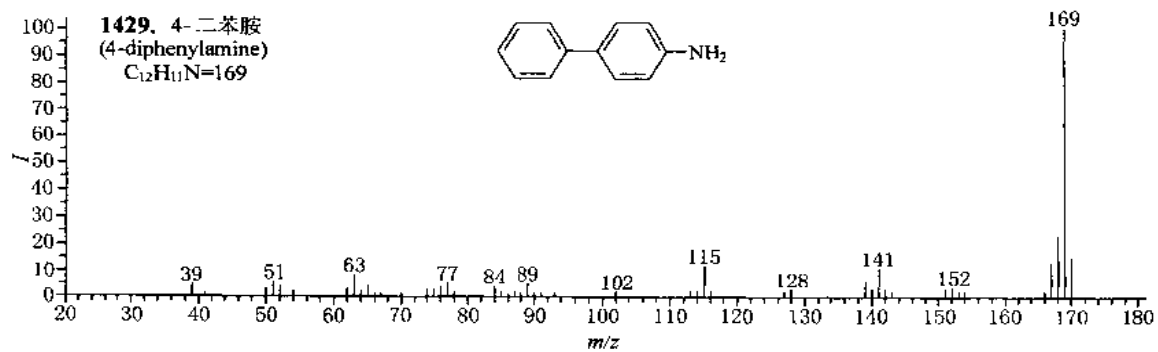




## 十、其 他

- (1) 二氯苯二胺 (1426) 的主要离子是  $M-Cl$  和  $M-Cl-HCl$ 。  
 (2) 4-氨基二苯醚 (1428) 的主要离子是  $M-C_6H_5$  和再失一氧化氮。  
 (3) 二苯胺类 (1429~1431) 的主要裂解是  $M-CN H_2$ 。  
 (4) 三苯胺 (1432) 的主要裂解是失去苯分子。





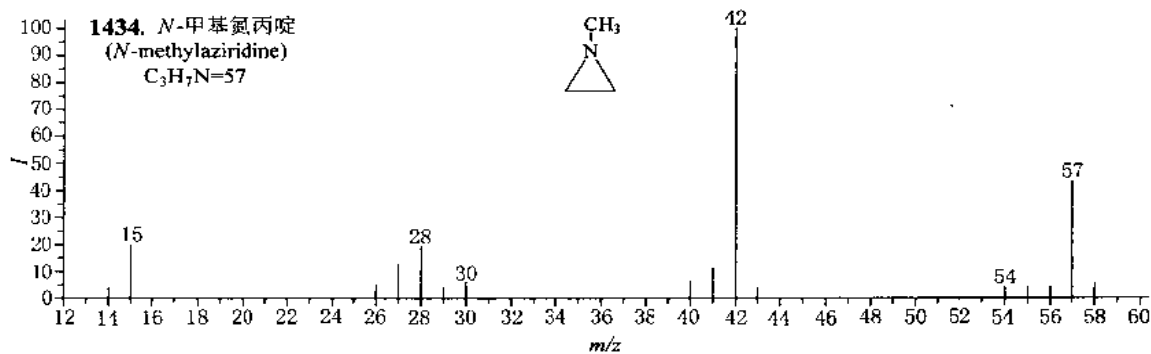
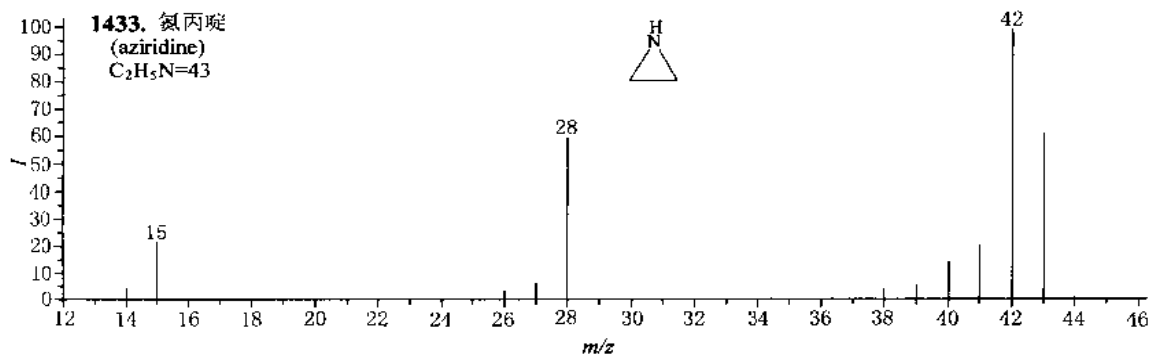
# 第十一章 氮杂环类

## 第一节 氮杂环烷类

### 一、氮丙啶类

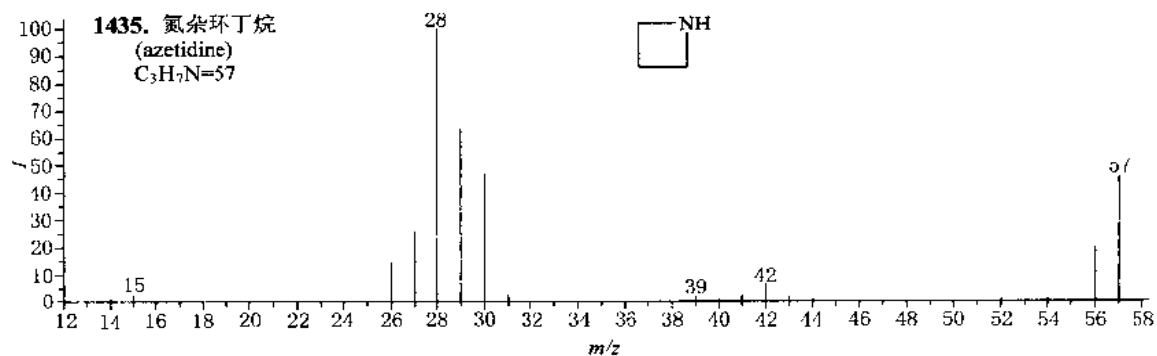
(1) 氮丙啶 (1433) 的主要裂解是  $\alpha$ -裂解失氢, 离子  $m/z$  28 的结构可能是  $\text{HC}\equiv\overset{+}{\text{N}}\text{H}$ 。

(2) *N*-甲基氮丙啶 (1434) 的主要离子是  $\text{M}-\text{CH}_3$ , 它的结构是  $\text{HC}\equiv\overset{+}{\text{N}}-\text{CH}_3$ , 实际是上述离子  $\text{HC}\equiv\overset{+}{\text{N}}\text{H}$  的同系离子。



### 二、氮杂环丁烷类

氮杂环丁烷 (1435) 的  $\text{M}-\text{H}$  离子也很强, 离子  $m/z$  30 是失去乙烯的产物,  $m/z$  28 可能也是  $\text{HC}\equiv\overset{+}{\text{N}}\text{H}$ , 但又可能是乙烯的分子离子。



### 三、吡咯烷类

(1) 吡咯烷 (1436) 的  $M-H$  离子比分子离子的强度还大, 这仍然  $\alpha$ -裂解的产物, 基峰  $m/z$  43 可能是失去  $C_2H_4$  产生的  $CH_2=N^+HCH_2\cdot$  离子。

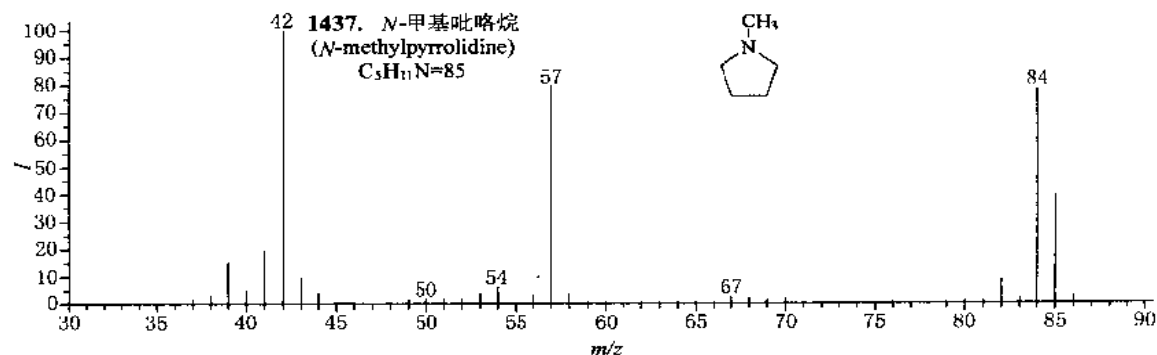
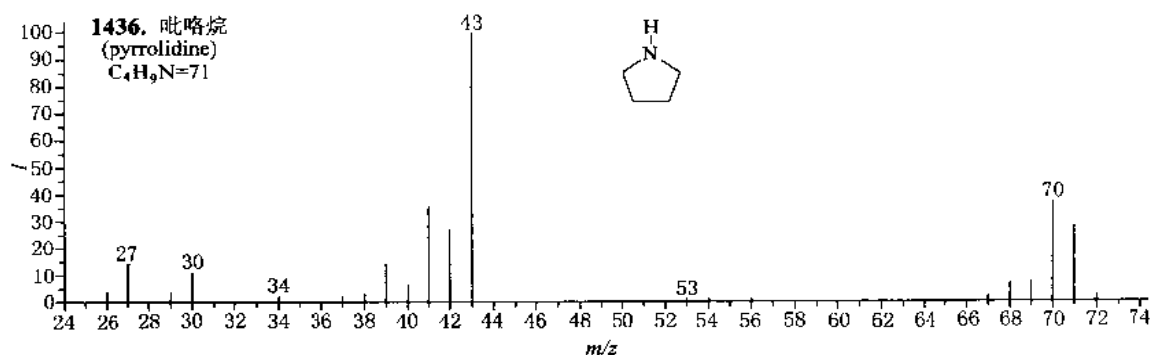
(2) *N*-甲基吡咯烷 (1437) 的主要碎片离子是  $m/z$  84, 57 和 42, 分别为  $M-H$ ,  $M-C_2H_4$  和  $M-C_3H_7$ 。

(3) 3-甲基吡咯烷 (1438) 的基峰也是  $m/z$  43, 它的结构仍然是  $CH_2=N^+HCH_2\cdot$ , 但失去的部分是丙烯。

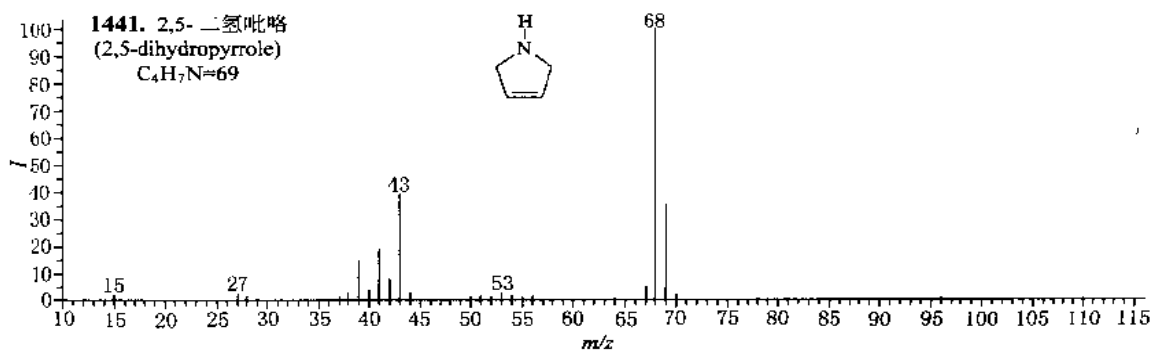
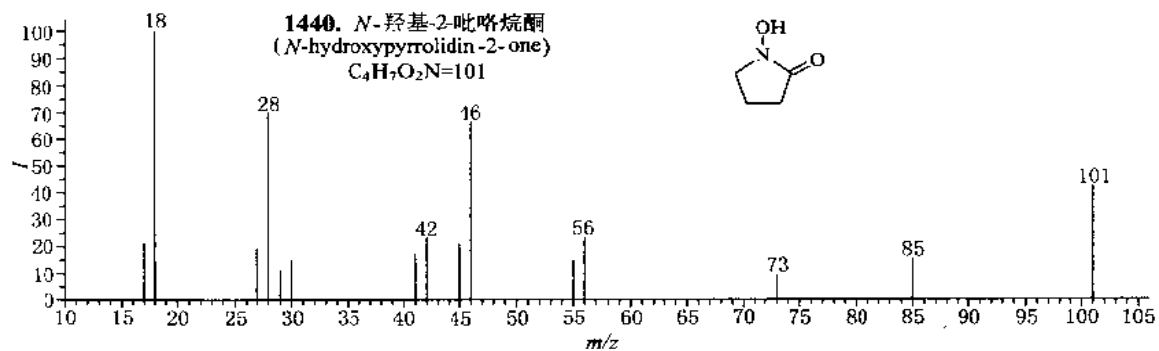
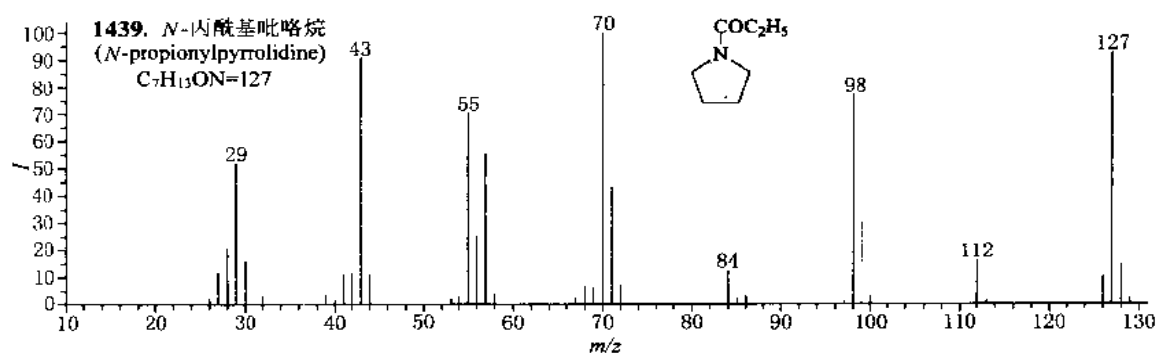
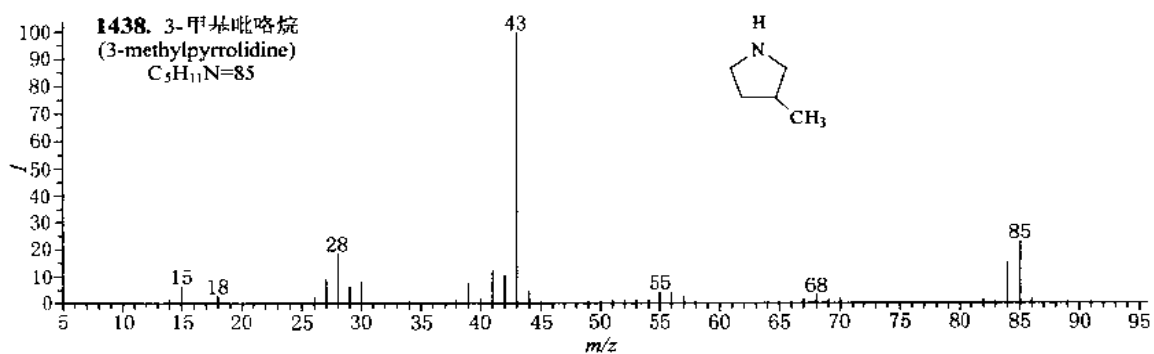
(4) *N*-丙酰基吡咯烷 (1439) 的主要裂解途径是  $M-C_2H_5-CO$ , 失去乙烯的离子  $m/z$  99 仍然存在。

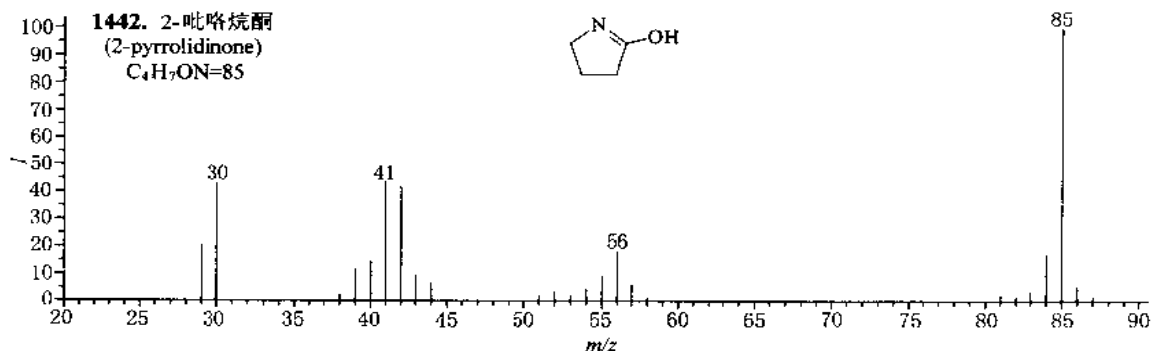
(5) *N*-羟基-2-吡咯烷酮 (1440) 有  $M-O$  和  $M-CO$  离子, 离子  $m/z$  56 可能是  $M-O-CHO$ , 离子  $m/z$  46 可能具有  $CH_3N=O^+H$  结构。

(6) 2,5-二氢吡咯 (1441) 的裂解是  $M-H$  和  $M-C_2H_2$ 。



(7) 2-吡咯烷酮(1442)的裂解是M-CHO, 离子  $m/z$  42 可能来自 M-H 离子再失去乙  
烯酮。





#### 四、哌啶类

(1) 哌啶 (1443) 自身的  $M-H$  离子是基峰, 其次是  $M-C_2H_4$ ,  $M-C_2H_5$ ,  $M-C_3H_6$  和  $M-C_3H_7$ 。

(2) *N*-甲基哌啶 (1444) 的裂解与哌啶的类似, 2-甲基哌啶 (1445) 的  $M-CH_3$  离子最强, 3-和 4-甲基哌啶 (1446, 1447) 的裂解仍然类似于哌啶的。2,6-二甲基哌啶 (1448) 的  $M-CH_3$  离子也最强, 3,5-二甲基哌啶 (1449) 则又如哌啶的裂解, 但这个化合物的离子  $m/z$  44 为基峰, 它的结构可能是  $CH_3-\overset{+}{N}H-CH_2$ 。2,6,*N*-三甲基哌啶 (1450) 仍然是因有 2-或 6-甲基的存在, 所以  $M-CH_3$  离子极强, 2-甲基-5-乙基哌啶 (1451) 亦如此。4-丙基哌啶 (1452) 分别有  $M-CH_3$ ,  $M-C_2H_5$ ,  $M-C_3H_7$ ,  $M-C_4H_9$ ,  $M-C_5H_{11}$  和  $M-C_6H_{13}$  离子。

(3) *N*-乙酰基哌啶 (1453) 的主要离子是  $M-CH_3CO$ , 4-氨基甲酰基哌啶 (1454) 有很强的  $\overset{+}{N}H$  和  $O=C-\overset{-}{N}H_2$  离子。

(4) 2-氨基甲基哌啶 (1455) 的主要离子来自  $\alpha$ -裂解失去  $CH_2NH_2$  和再失 1 个氢的裂解。

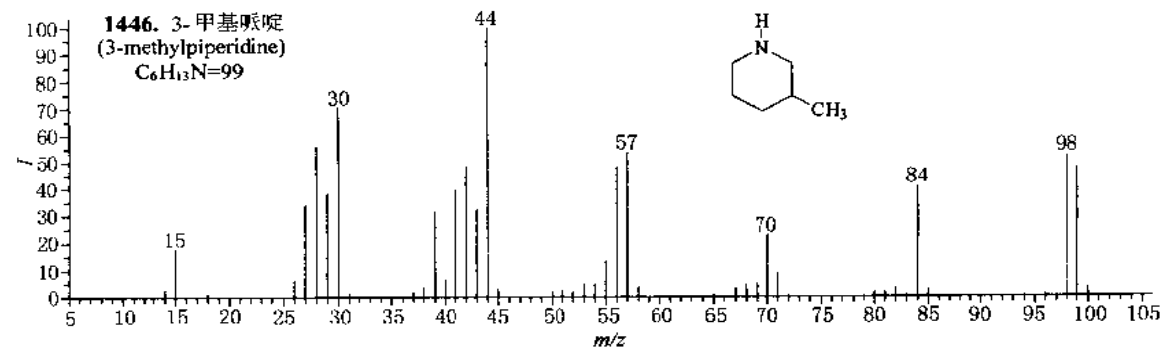
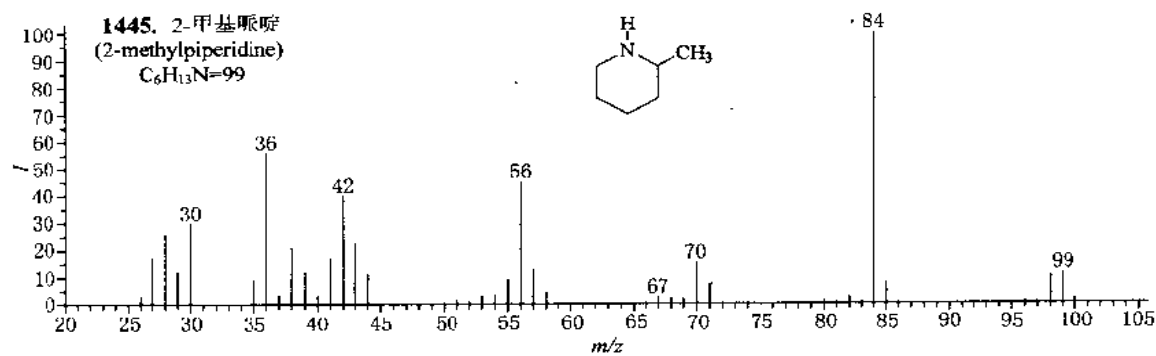
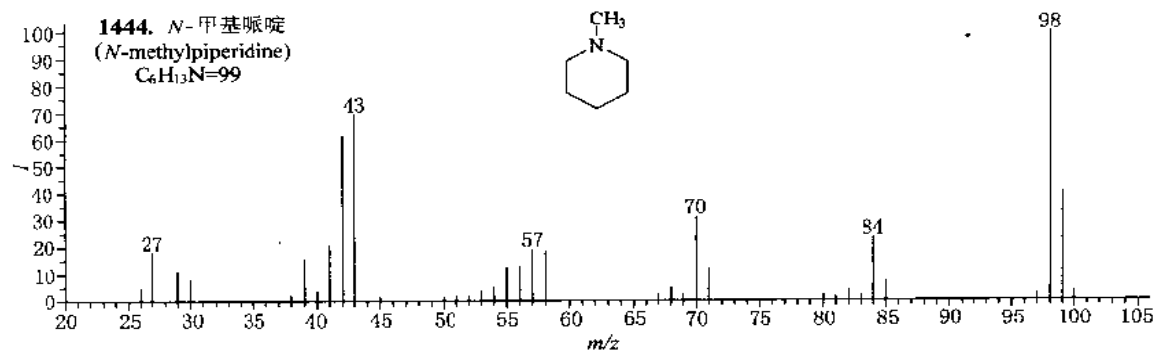
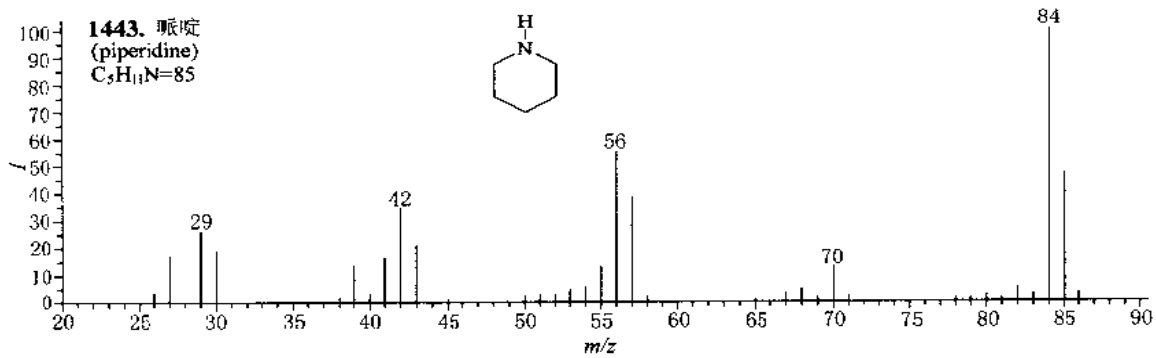
(5) *N*-羟基哌啶 (1456) 的主要离子是  $M-H$  和  $M-OH$ , 3-羟基哌啶 (1457) 的主要离子是  $M-H$ ,  $M-CH_2N$ ,  $M-CH_2CHOH$  和  $m/z$  44, 最后 1 个离子可能有  $CH_2CHOH^{+}$  和  $CH_3\overset{+}{N}HCH_2$  两种结构。

(6) 甲基和羟基二取代的哌啶类 (1458, 1459) 中, 有 2-甲基者, 仍然是  $M-CH_3$  离子很强, 再失水得  $M-CH_3-H_2O$  离子。4,*N*-二甲基-3-羟基哌啶 (1460) 的离子  $m/z$  58 很强, 它也可能有两种结构, 即  $CH_3CH=\overset{+}{C}HOH$  和  $CH_3\overset{+}{N}(CH_3)CH_2$ 。

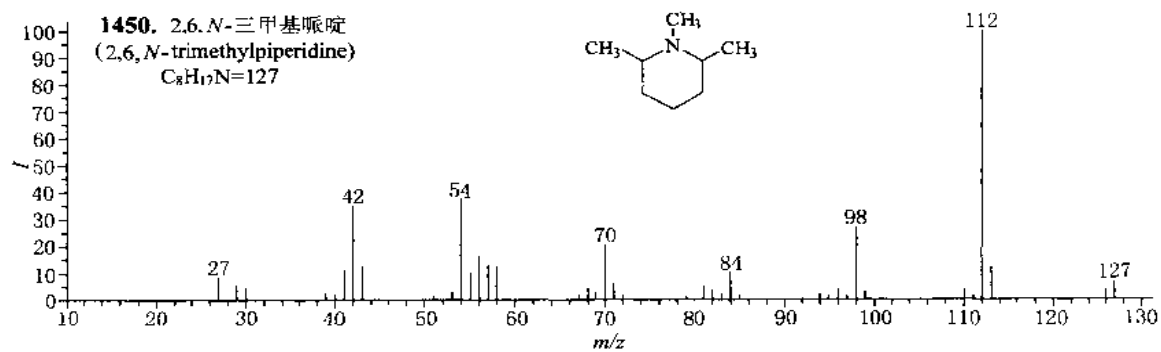
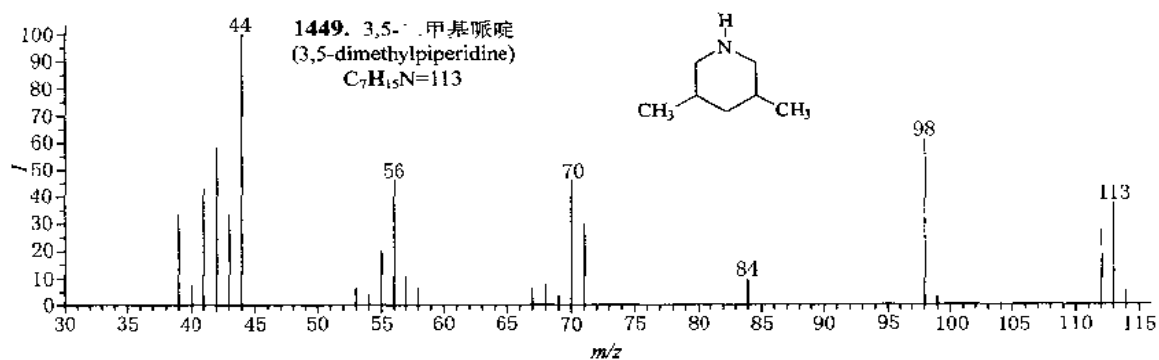
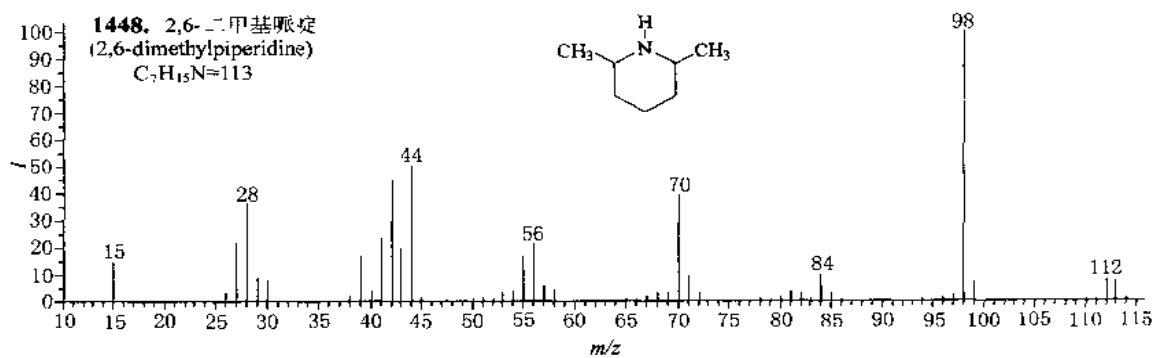
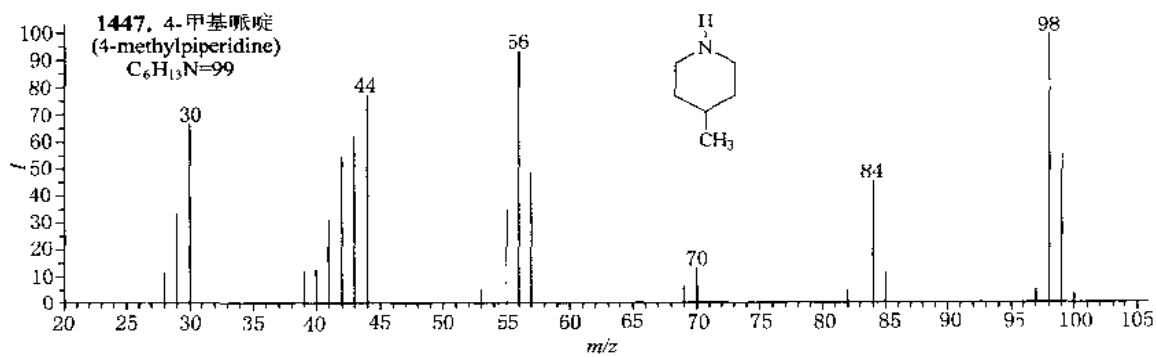
(7) *N*-甲基-4-哌啶酮 (1461) 的离子  $m/z$  71 和  $m/z$  70 可能是分别失去乙烯酮和乙酰基的产物, 而离子  $m/z$  43 和  $m/z$  42 可能的结构是  $CH_2=\overset{+}{N}CH_3$  和  $CH\equiv\overset{+}{N}CH_3$ 。

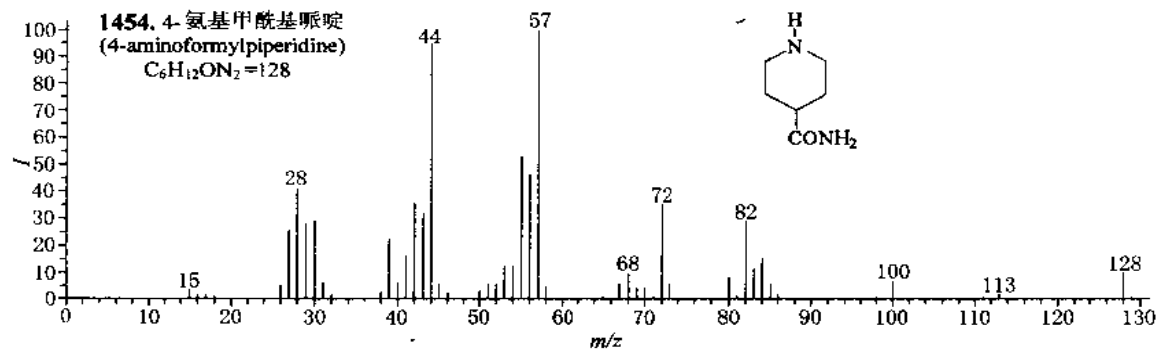
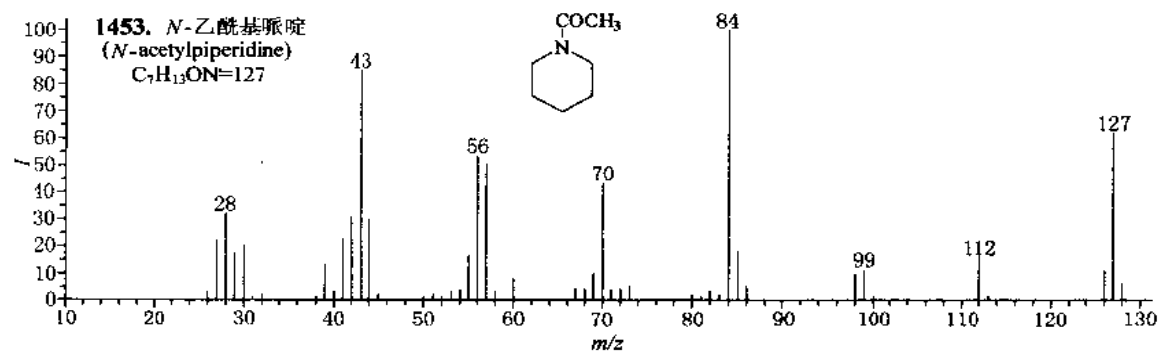
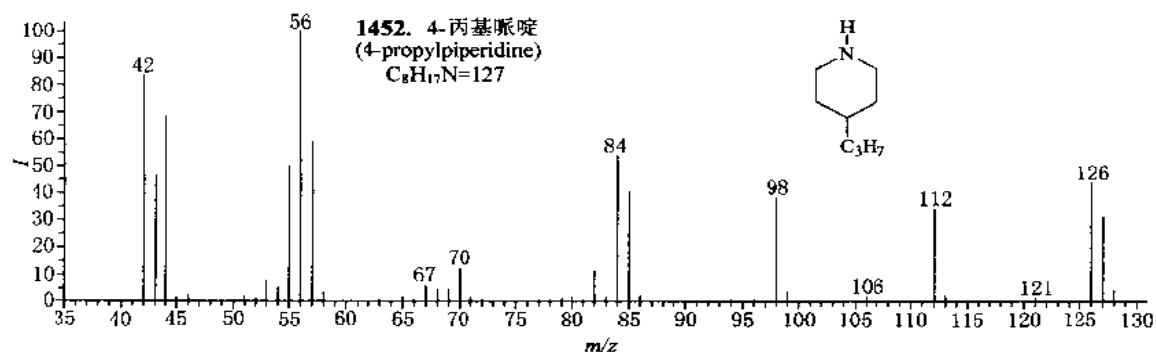
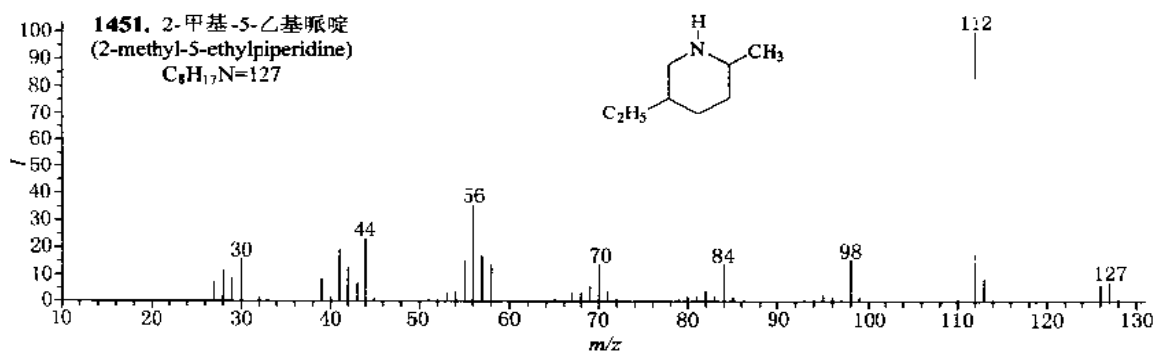
(8) 环内具有 1 个双键的哌啶类 (1462~1465), 都能进行 RDA 裂解失去  $C_2H_4$ ,  $CH_2NCH_3$  和  $CH_2NC_2H_5$  等, 具有 2-甲基者仍然易失甲基得强峰  $M-CH_3$ , *N*-乙基化合物也易失甲基, 它们的离子  $m/z$  42 都具有  $CH\equiv\overset{+}{N}CH_3$  结构。*N*-甲基-2,3-去氢-4-哌啶酮 (1466) 的 RDA 裂解产物  $m/z$  83 能再失一氧化碳得离子  $m/z$  55。

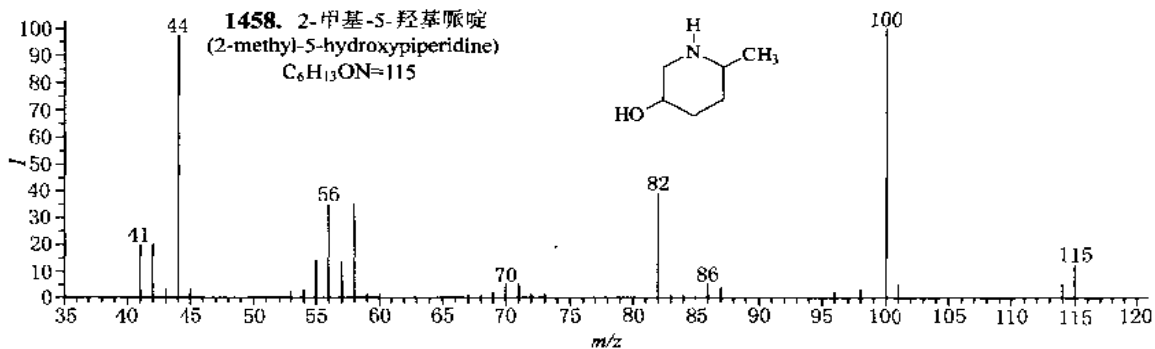
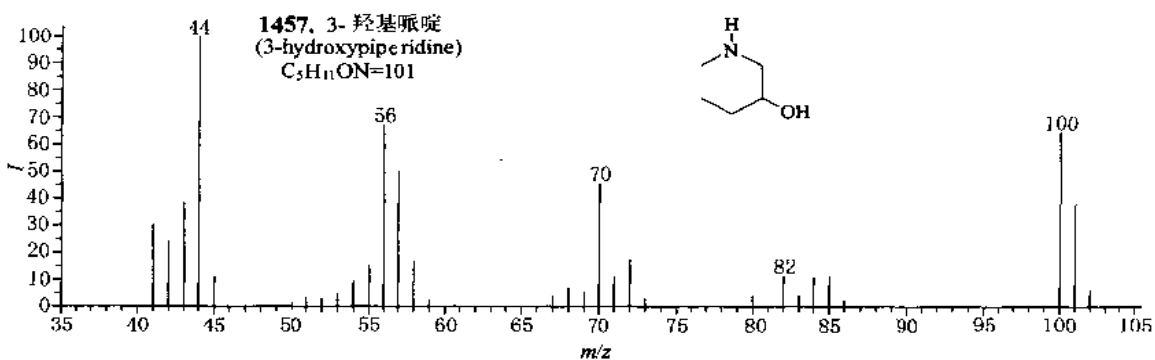
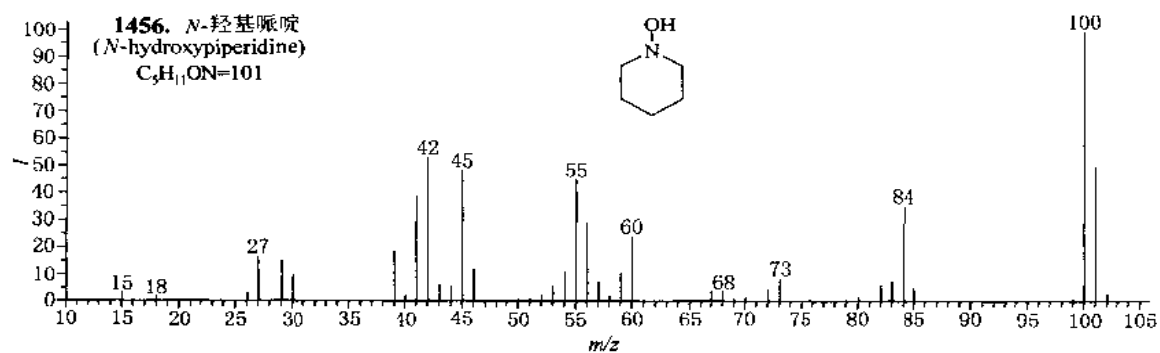
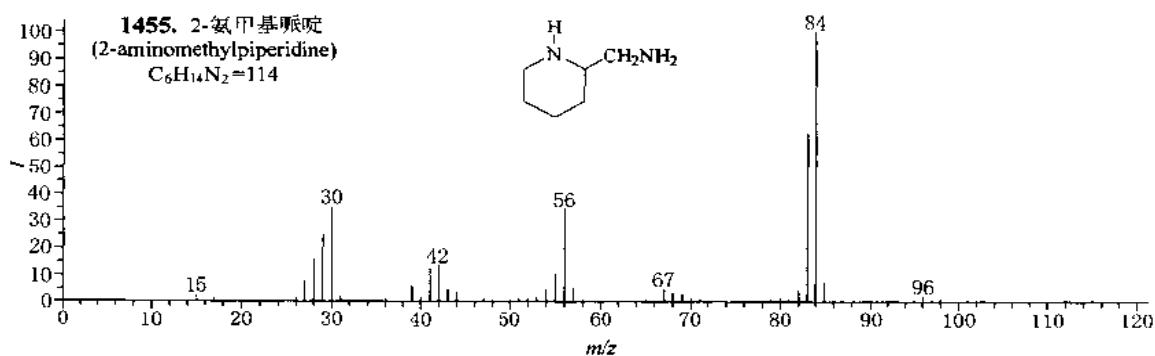
(9) 环内具有两个双键的 4-吡啶酮 (1467) 只有  $M-CO$  离子。

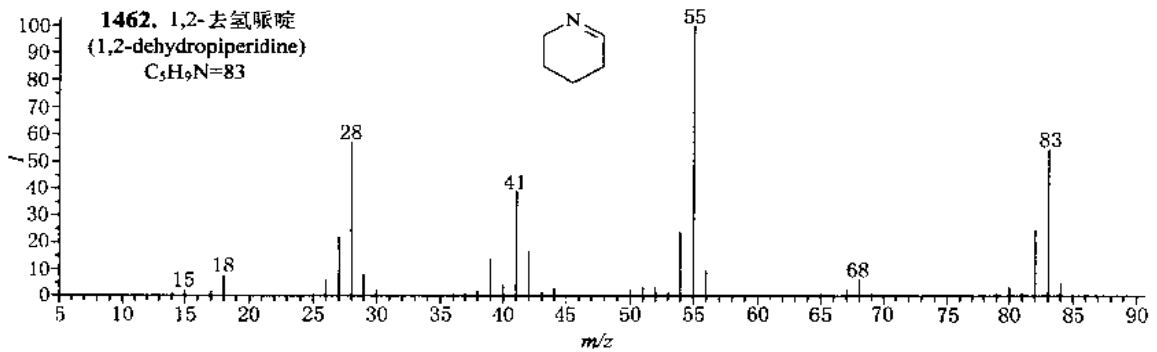
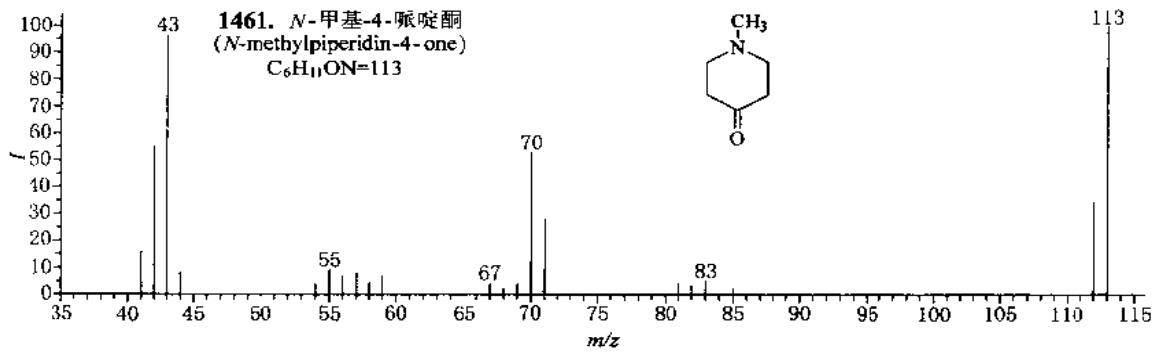
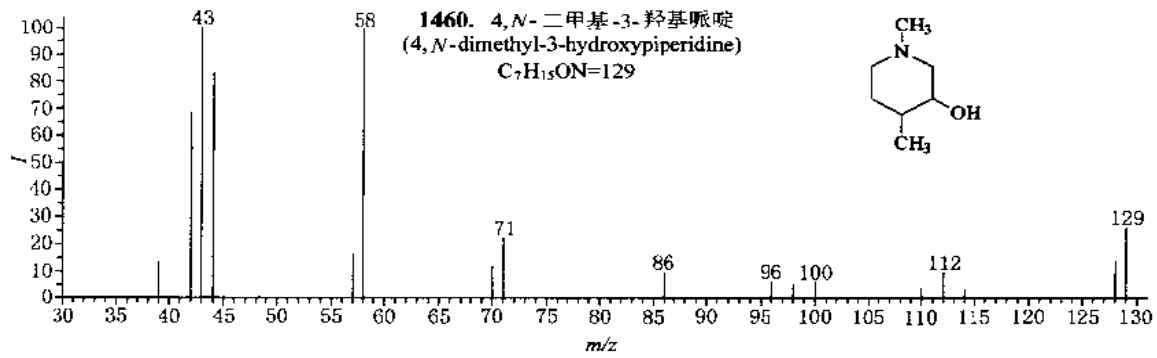
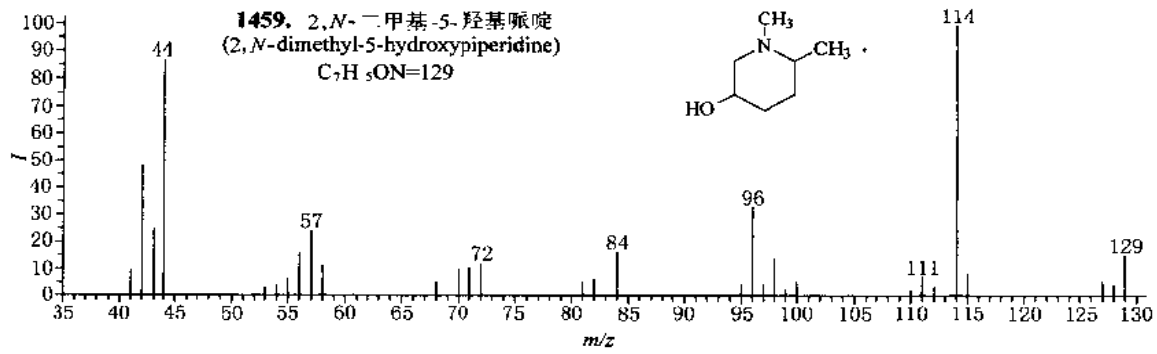


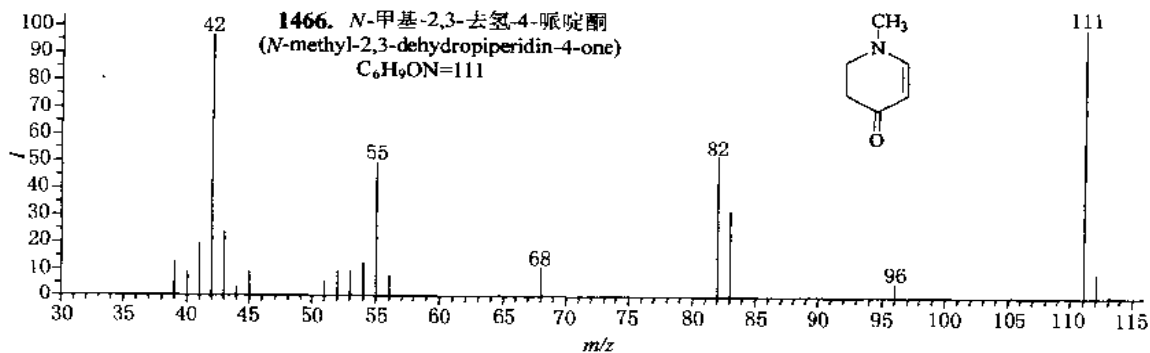
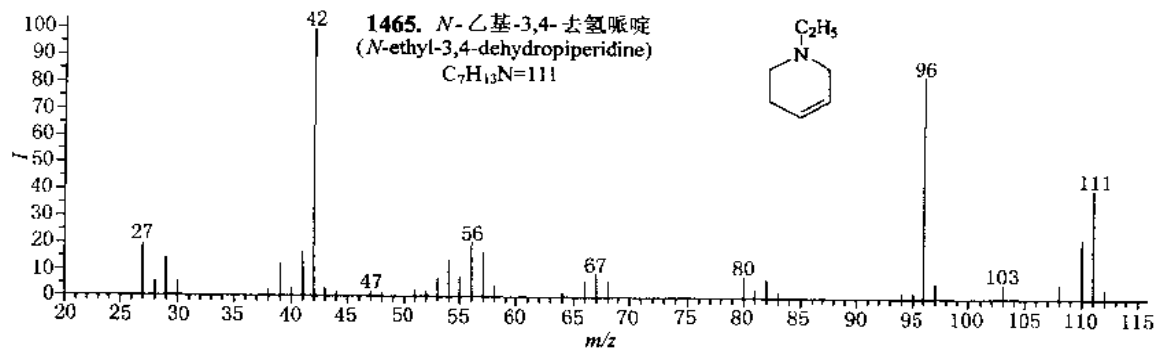
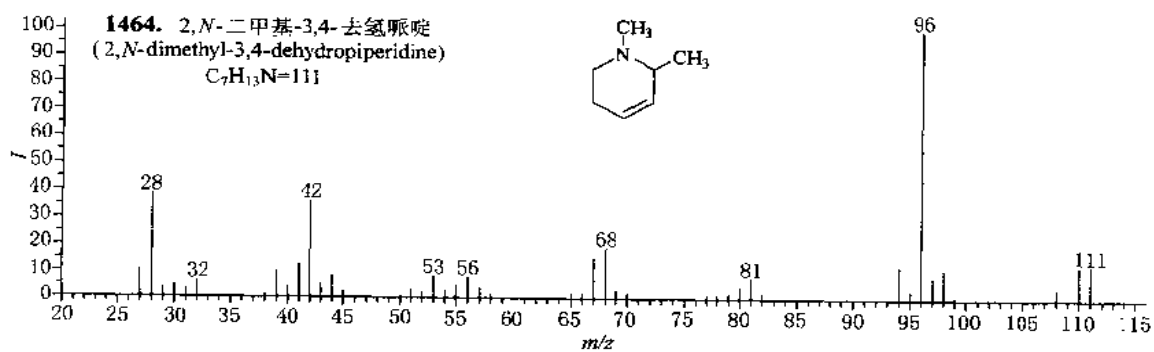
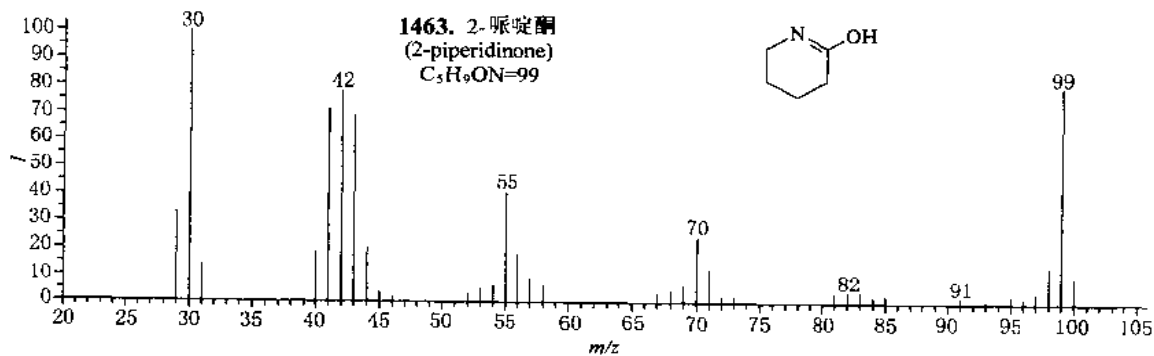


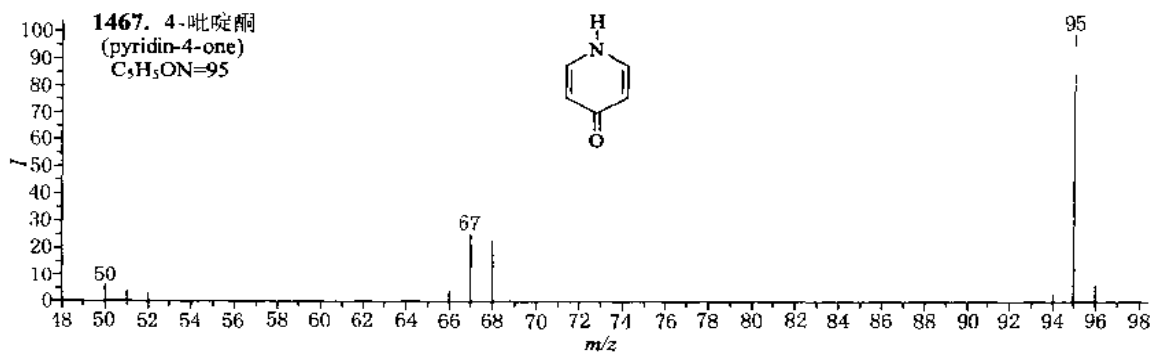












## 第二节 氮杂环烯和氮杂芳环类

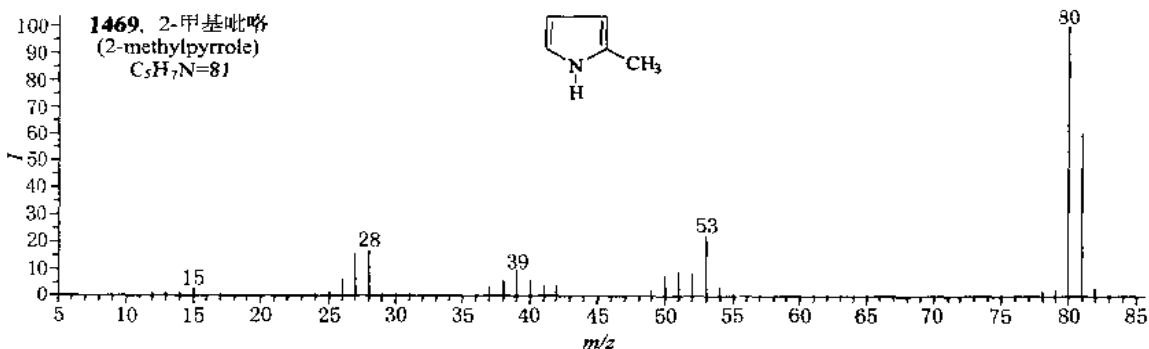
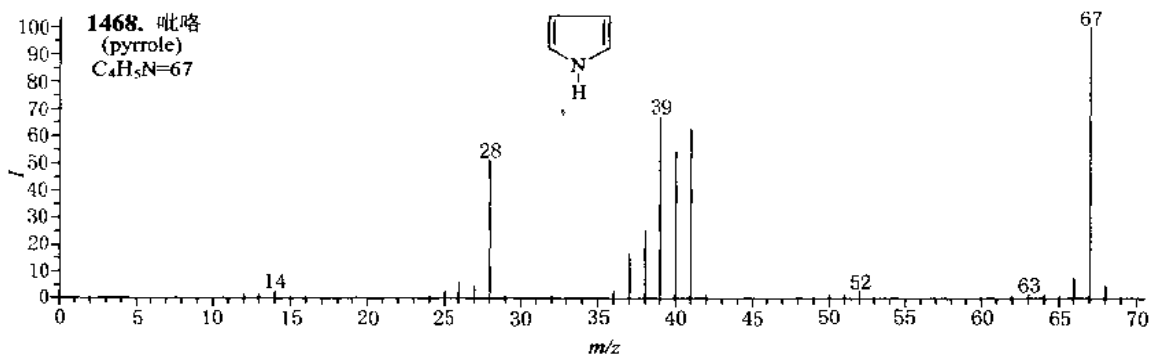
### 一、吡咯类

(1) 吡咯 (1468) 自身的主要裂解是  $M-C_2H_2$ ,  $M-CN$  和  $M-CN_2$ 。

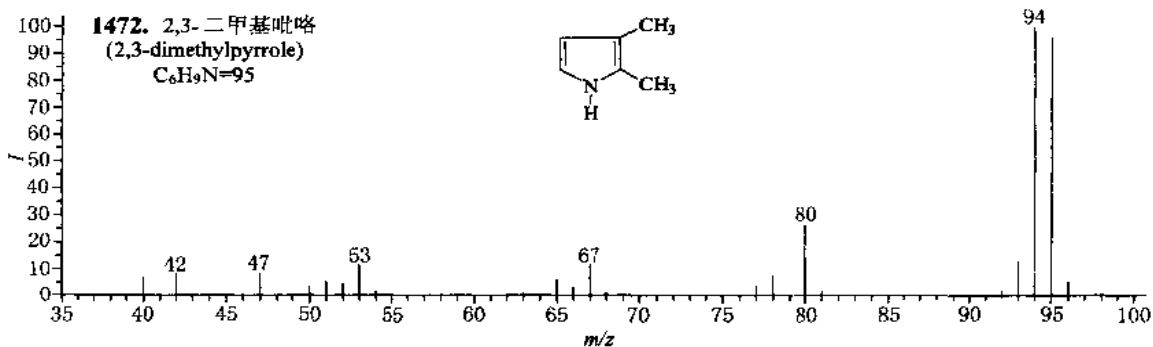
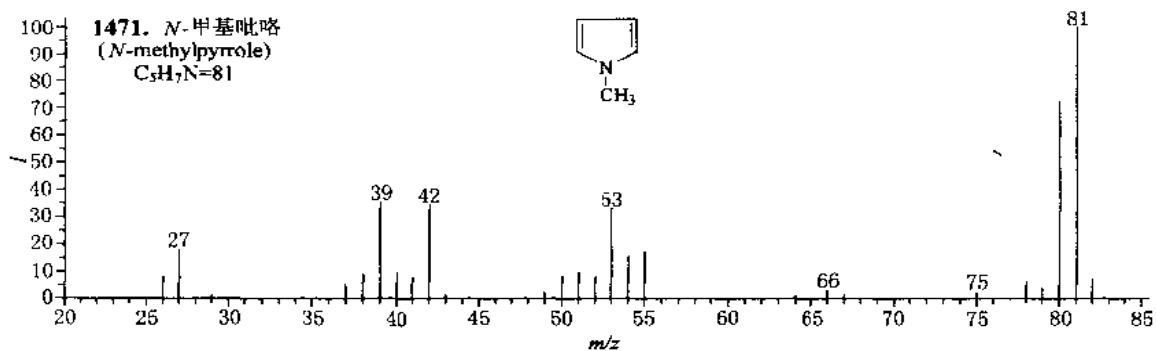
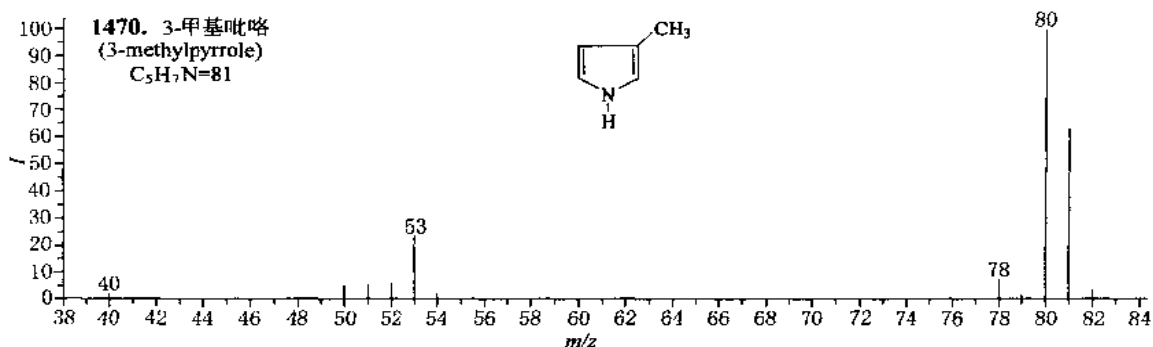
(2) 甲基吡咯类 (1469, 1470) 的  $M-H$  离子很强, 其次是  $M-H-CN$ ,  $N$ -甲基化合物 (1471) 有  $CH\equiv NCH_3$  离子。

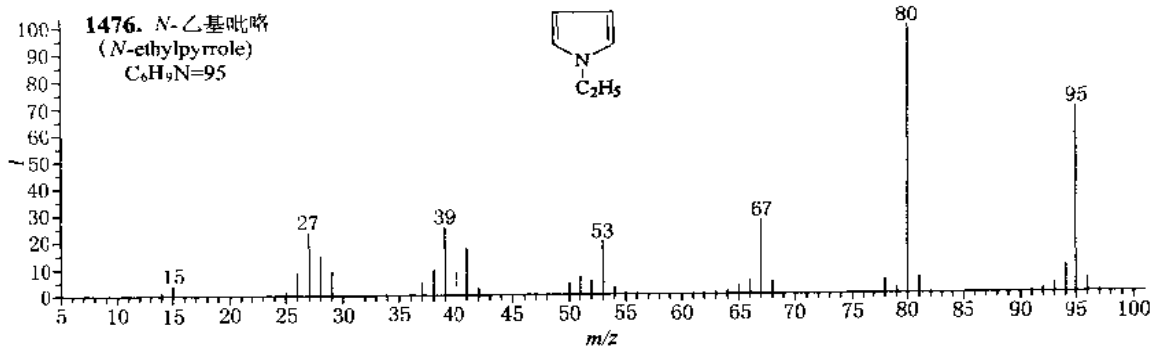
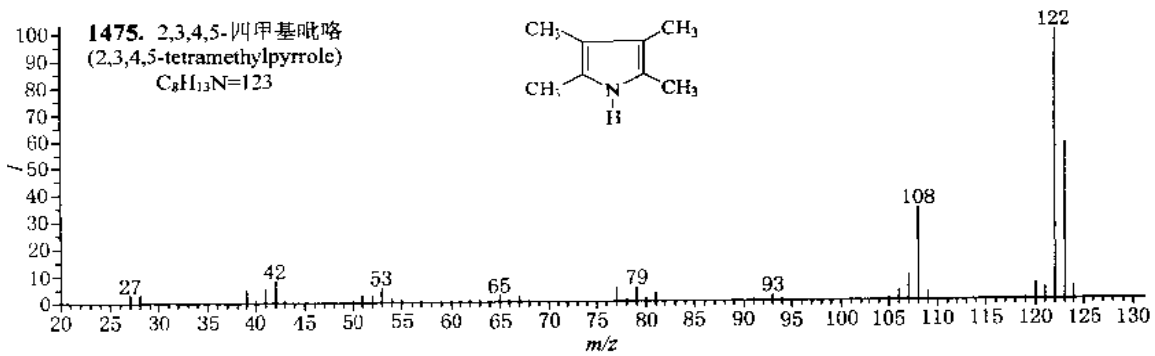
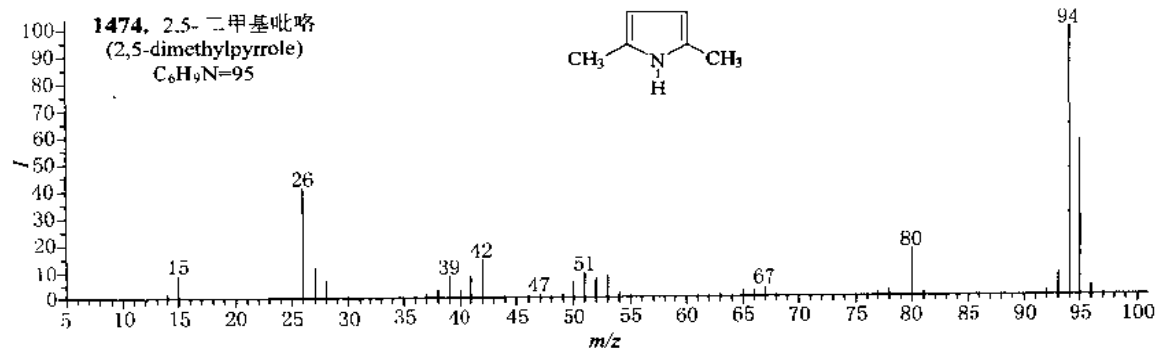
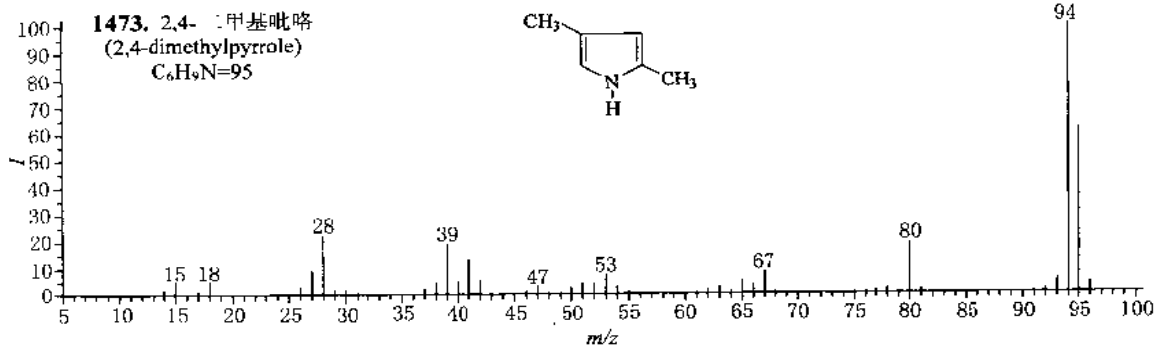
(3) 二甲基吡咯类 (1472~1474) 有  $M-H$ ,  $M-CH_3$ ,  $M-H-CN$  和  $M-CH_3-CN$  离子, 四甲基吡咯 (1475) 的主要离子是  $M-H$ ,  $M-CH_3$ ,  $M-CH_3CN$  和  $M-CH_3-CH_3CN$ 。

(4) 3 个乙基吡咯化合物 (1476~1478) 的主要离子是  $M-CH_3$ ,  $M-C_2H_5$  和  $M-CH_3-CN$ 。

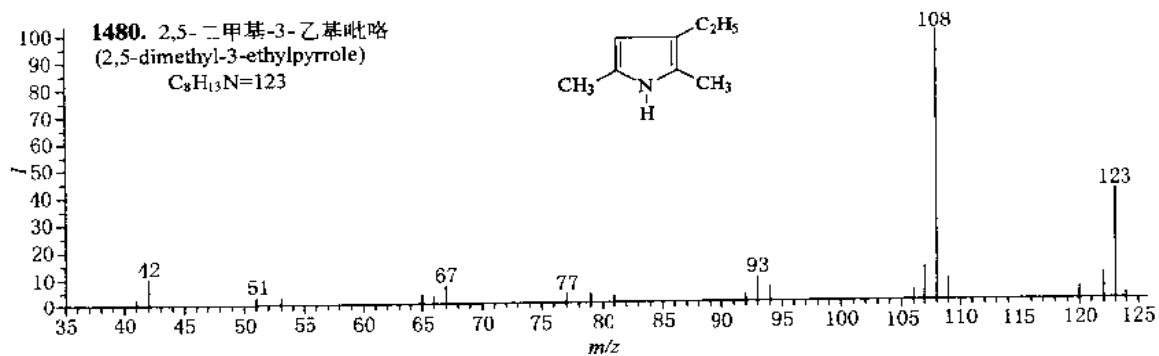
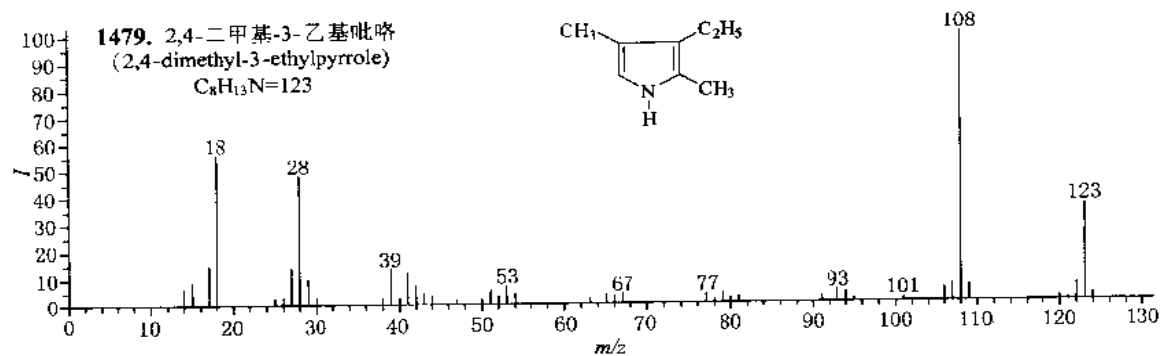
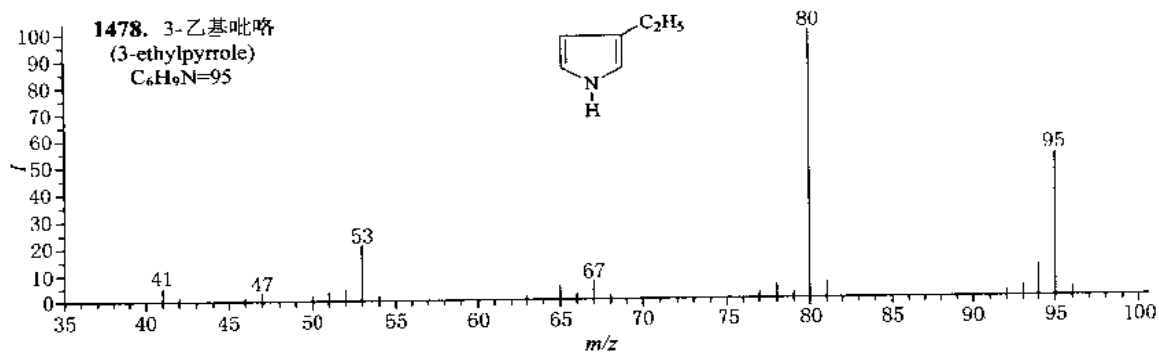
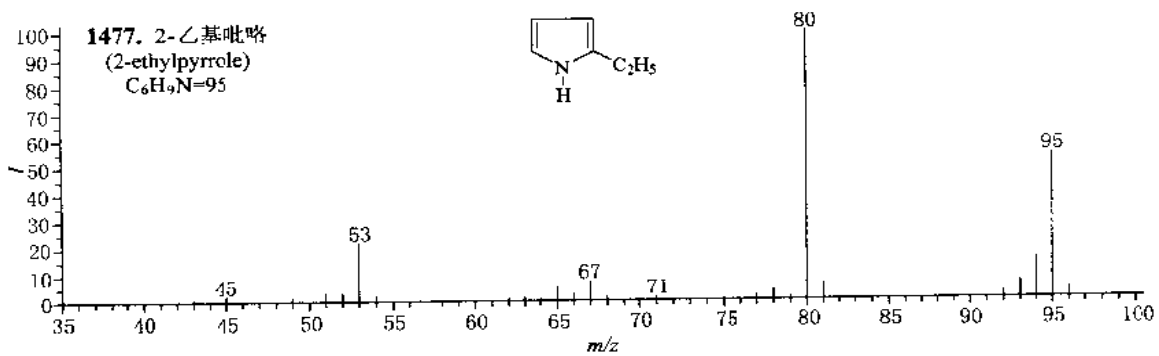


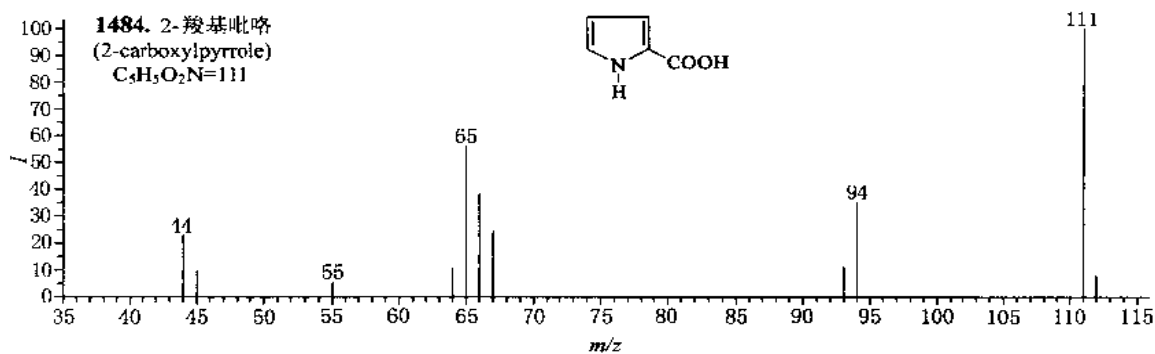
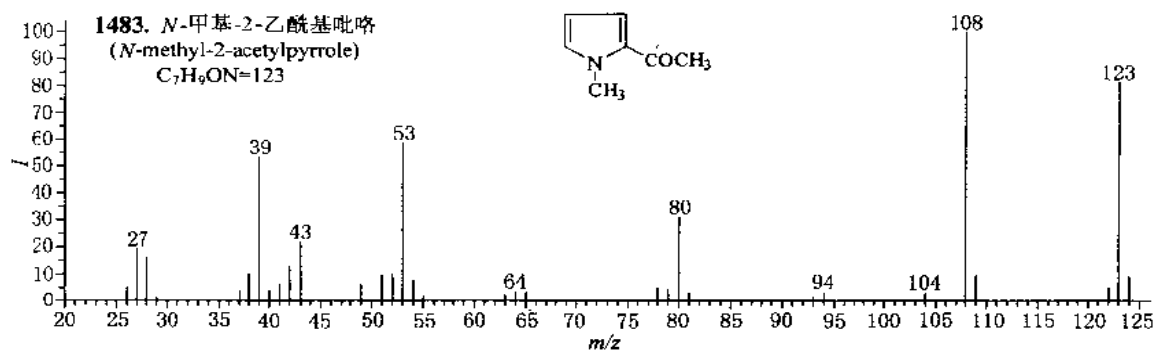
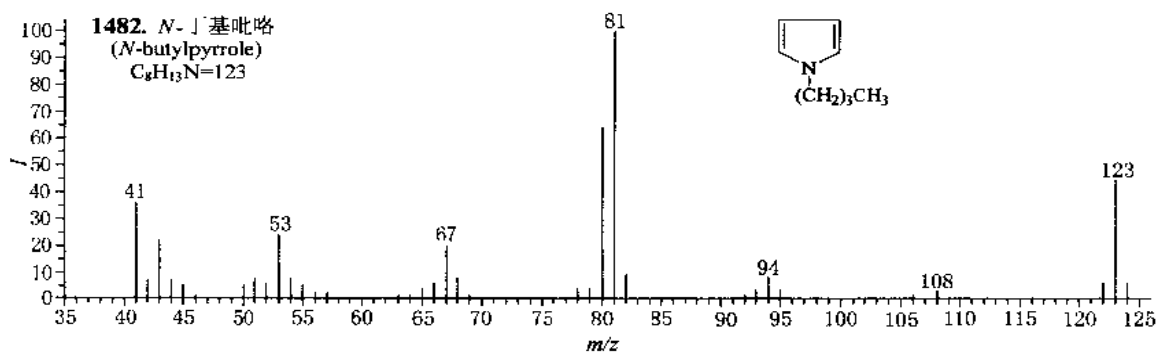
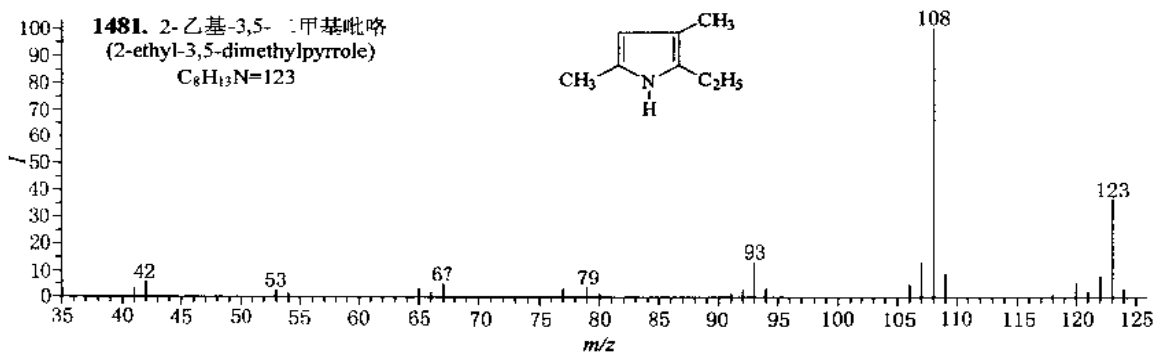
- (5) 乙基二甲基吡咯类 (1479~1481) 的主要离子是  $M-CH_3$ , 其他离子均很弱。
- (6) *N*-丁基吡咯 (1482) 的主要离子是  $M-C_3H_6$  和  $M-C_3H_7$ 。
- (7) *N*-甲基-2-乙酰基吡咯 (1483) 的裂解途径是  $M-CH_3-CO-CN$  或  $M-CH_3-CO-CNCH_3$ 。
- (8) 2-羧基吡咯 (1484) 的裂解途径是  $M-OH-CO-H$ 。
- (9) 二吡咯甲烷 (1485) 的裂解是失去吡咯基。

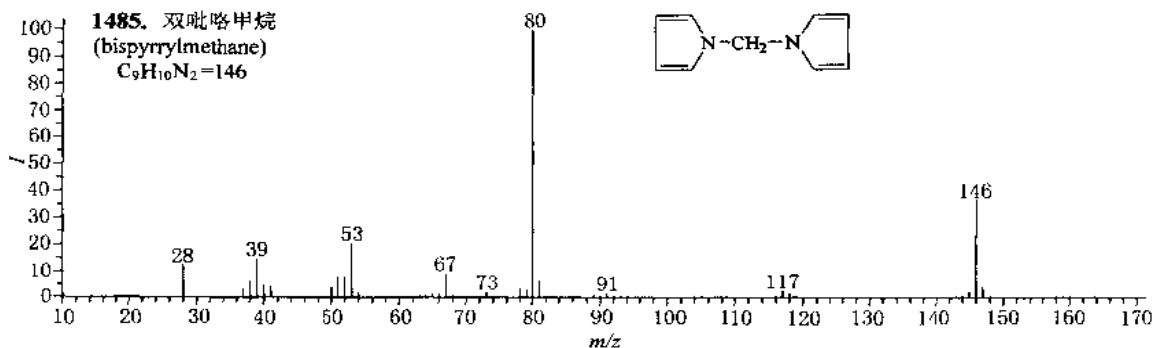










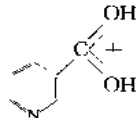


## 二、吡 啶 类

- (1) 吡啶 (1486) 本身的裂解只有  $M-CHN$  和  $M-CHN-H$ 。
- (2) 甲基 (1487~1489)、二甲基 (1490~1495) 和三甲基 (1496~1498) 吡啶的裂解途径是  $M-H-CHN-C_2H_5$  和  $M-CH_3-CHN-C_2H_5$ 。
- (3) 乙基吡啶类 (1500, 1501) 的两条裂解途径是  $M-CH_3-CHN-C_2H_5$  和  $M-C_2H_5-CHN$ 。2-甲基-6-乙基吡啶 (1502) 的裂解途径是  $M-H-CHN-C_2H_5-C_2H_5$ , 甲基必须重排到别的位置上。无 2, 6 位取代的化合物 (1503~1505) 的裂解途径是  $M-CH_3-CHN-CH_3C\equiv CH$ 。
- (4) 丙基吡啶类 (1506, 1507) 的主要裂解是麦氏重排失去乙烯, 然后失去  $CHN$ , 4-丙基吡啶的  $M-C_2H_5$  离子也较强, 并能再失去  $CHN$ 。
- (5) 氨基吡啶类 (1508~1510) 的裂解途径是  $M-CN H-C_2H_5$ , 甲基氨基二取代吡啶类 (1511~1514) 的裂解都是  $M-CN H-H$ 。
- (6) 4-二甲氨基吡啶 (1516) 的两条裂解途径是  $M-H-CHN$  和  $M-CH_3NCH_3-CHN$ 。
- (7) 氨基乙基吡啶 (1517) 的裂解途径是  $M-CH_3-CHN$ , 离子  $m/z$  44 ( $CH_3CH=N^+H_2$ ) 亦很强。
- (8) 羟基吡啶类 (1518, 1519) 既能失去  $CHN$ , 也能失去一氧化碳, 甲基羟基二取代物 (1520~1523) 的主要裂解都是失去甲酰基并再失去  $CHN$ , 甲基二羟基取代物 (1524) 尚有  $M-NCCH_3$  离子。羟基吡啶乙酸酯 (1525) 的 3 个碎片离子是  $M-CH_2CO$ ,  $M-CH_2CO-CO$  和  $CH_3CO^+$ 。
- (9) 甲氧基吡啶类 (1526, 1527) 的裂解是  $M-CH_3-CO$  和  $M-CH_2O$ , 乙氧基取代物 (1528) 的裂解是  $M-CH_3$ , 麦氏重排裂解得  $M-C_2H_5$ , 并能失去一氧化碳, 离子  $M-CH_2CH_2O$  和  $M-C_2H_5O$  也较强。
- (10) 乙烯基吡啶类 (1529~1531) 的裂解是  $M-C_2H_2-CHN$  和  $M-C_2H_3-CHN$ 。
- (11) 吡啶甲醛类 (1532, 1533) 的裂解途径是  $M-H-CO-CHN$  和  $M-H-CO-C_2H_5$ 。
- (12) 二氨基吡啶类 (1534~1536) 都是连续失去 2 分子  $CNH$ , 二羟基吡啶 (1537) 则是失去 2 分子一氧化碳。
- (13) 2-乙酰基吡啶 (1538) 的裂解途径是  $M-CH_2CO-CHN$  和  $M-CH_3CO-CHN$ , 其他位置的取代者 (1539, 1540) 的裂解途径是  $M-CH_3-CO-CHN$ 。3-丙酰基取代者 (1541) 的裂解途径是  $M-C_2H_5-CO-CHN$ 。

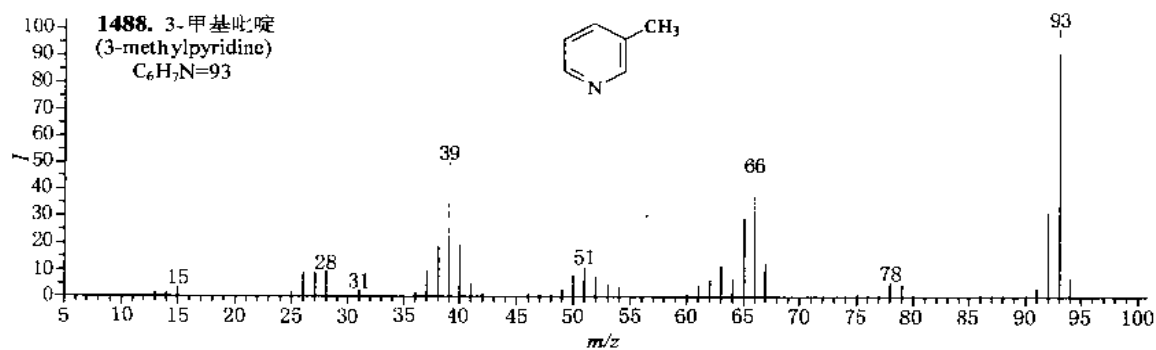
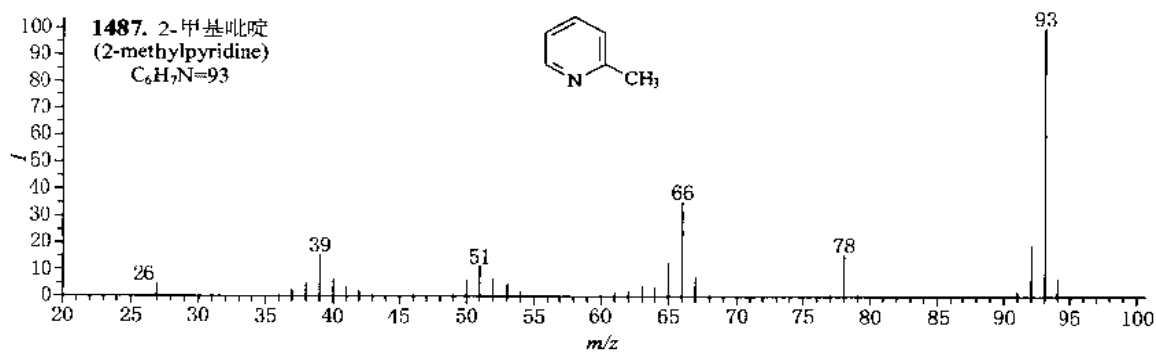
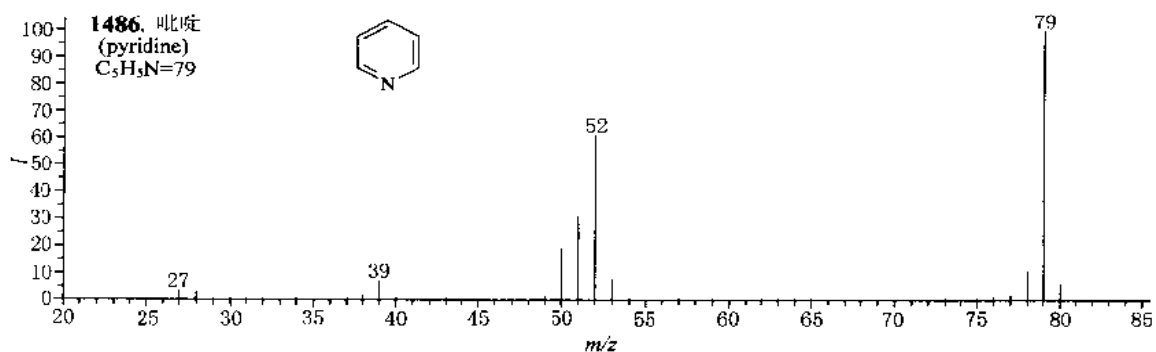
(14) 多氟取代的吡啶类 (1542, 1543) 都有  $M-F$ ,  $M-CHN$ ,  $M-FCN$  和  $M-CF_3$  离子, 最后离子的产生机制尚不清楚。氯和溴取代的吡啶类 (1544~1557) 一般失卤原子, 再失  $CHN$ , 或连续失卤、失卤化氢和失乙炔。

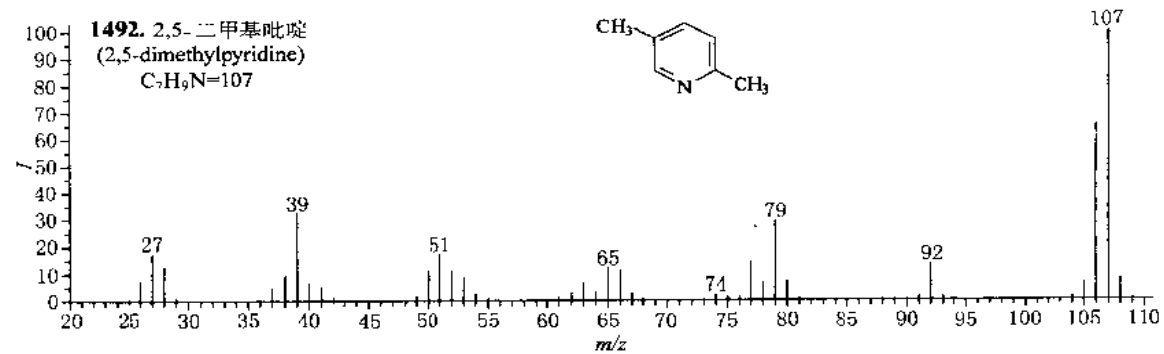
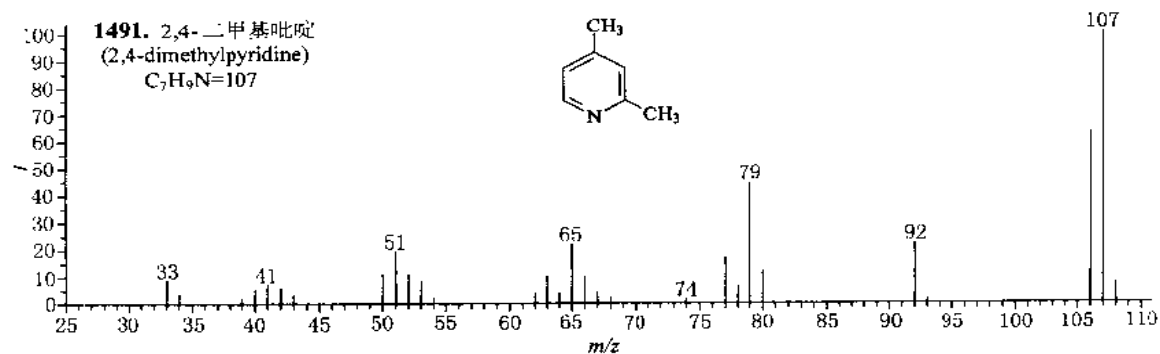
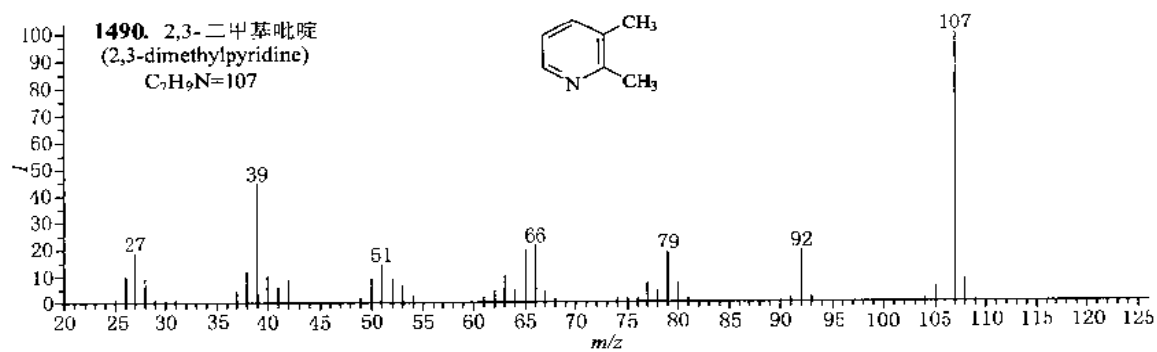
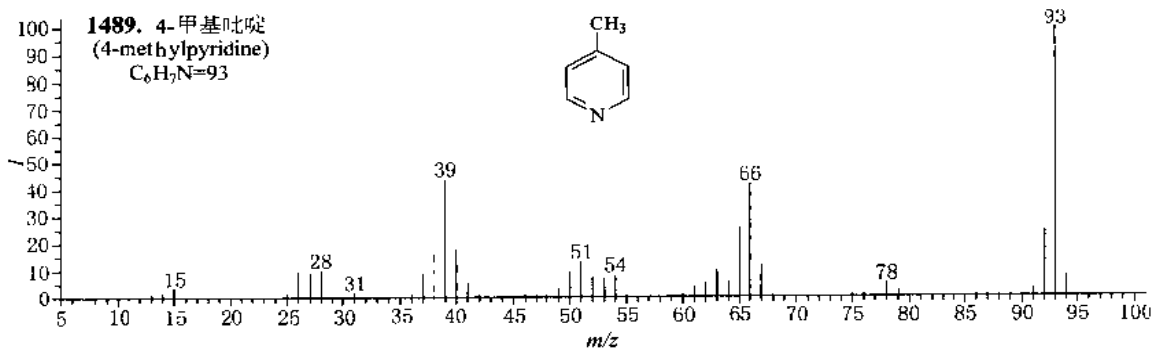
(15) 2-吡啶羧酸 (1558) 的主要裂解是失一氧化碳和羧基, 然后再失去  $CHN$ 。其他位置的取代者 (1559, 1560) 的裂解途径是  $M-OH-CO-CHN$ 。6-甲基-2-吡啶羧酸 (1561) 的裂解与 2-吡啶羧酸 (1558) 的相同。吡啶羧酸甲酯 (1562) 的裂解途径是  $M-OCH_3-CO-CHN$ , 吡啶羧酸乙酯 (1563) 的裂解也是这样, 即  $M-OC_2H_5-CO-CHN$ , 但另有麦氏重排

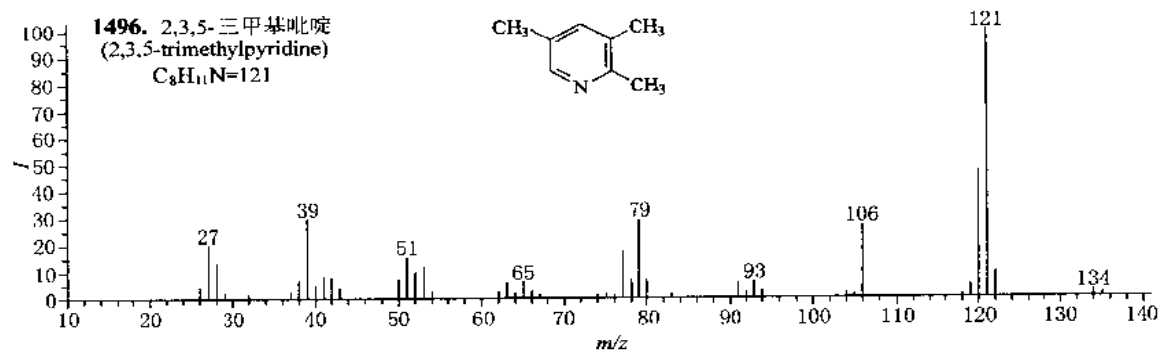
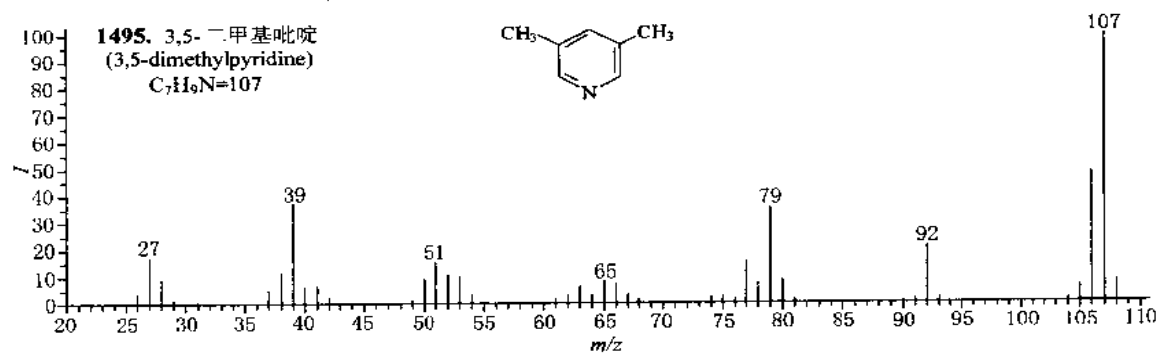
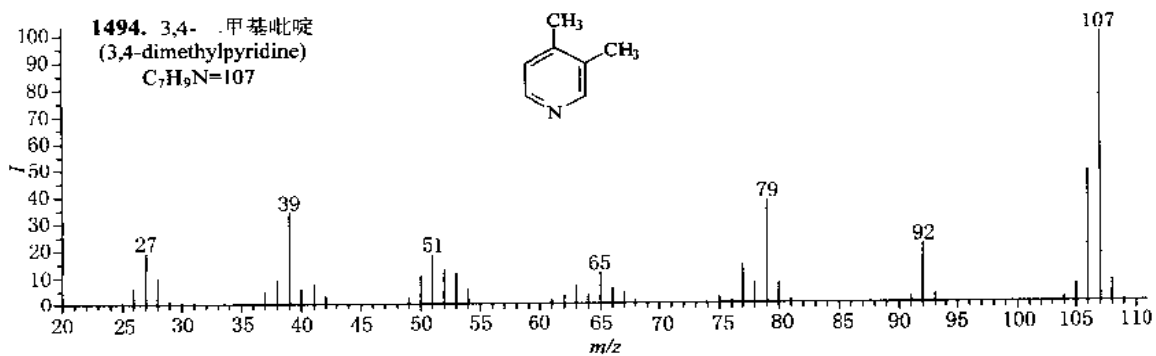
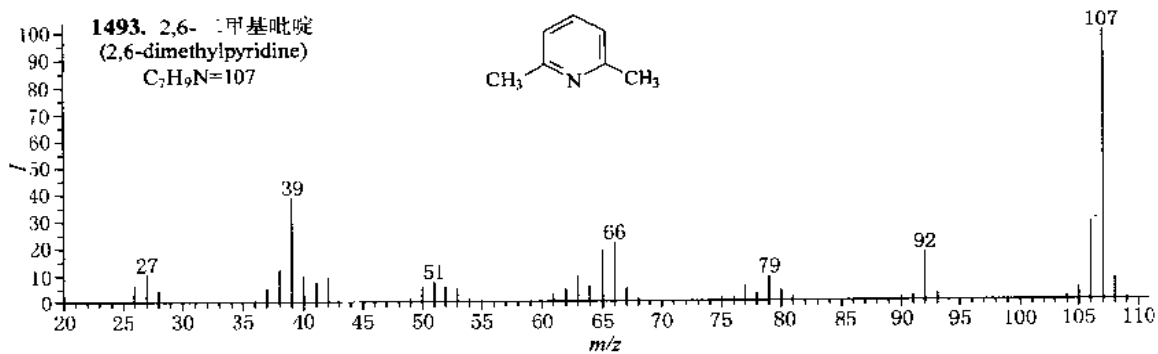
离子  $M-C_2H_4$ 。菸酸异戊酯 (1564) 则多了一个离子  $m/z$  124, 它可能具有  结构。

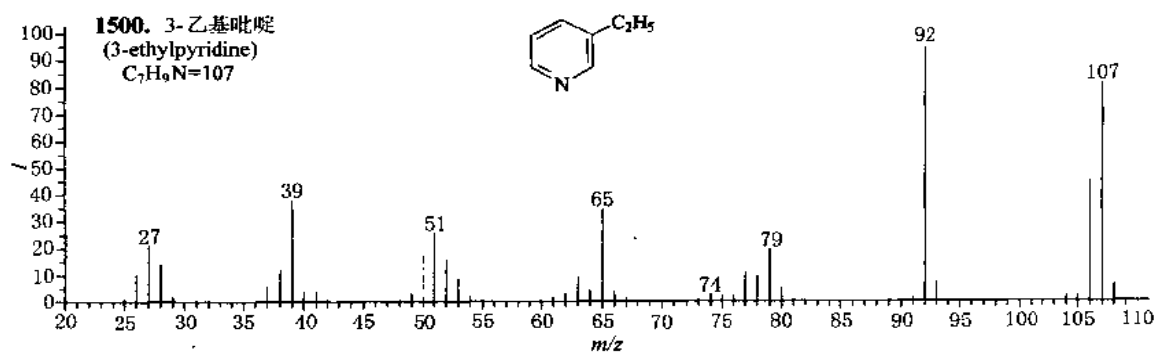
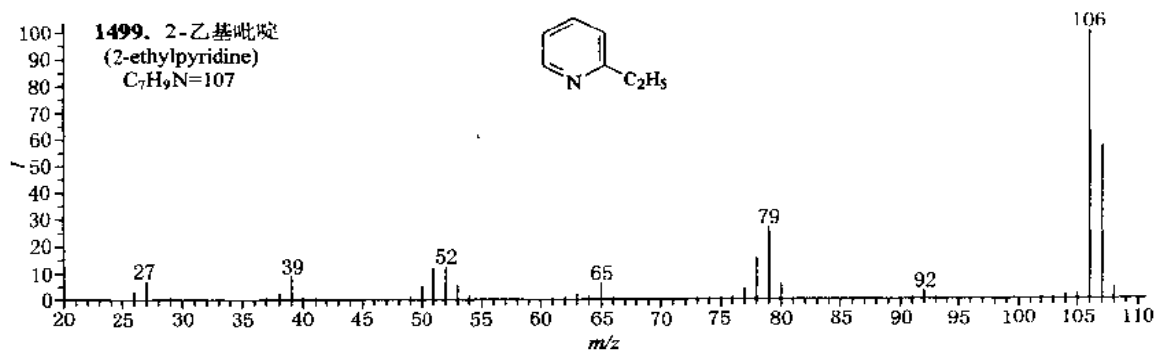
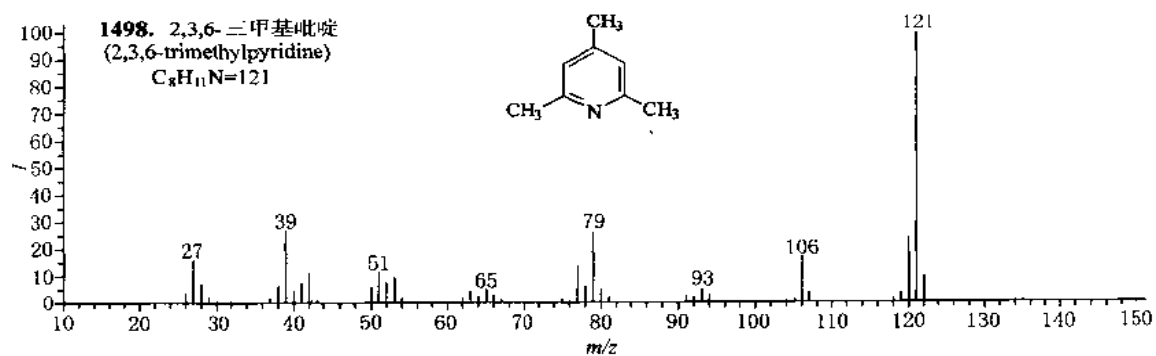
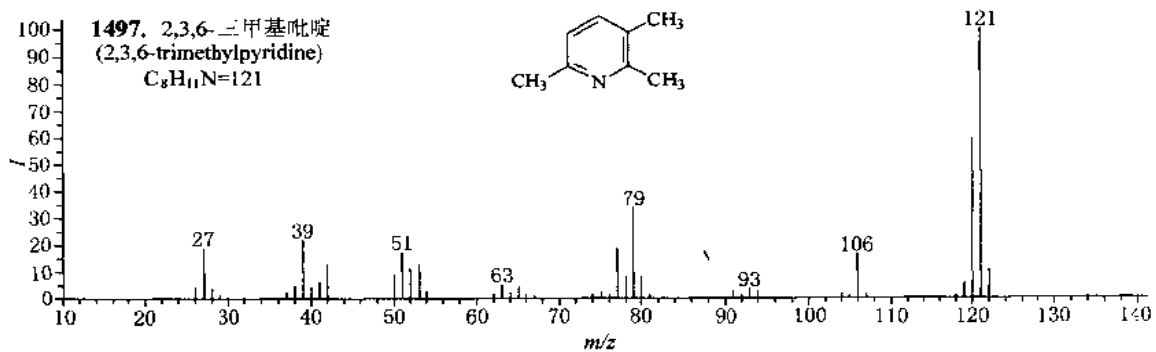
菸酰胺 (1565) 和 4-吡啶甲酰胺 (1566) 的裂解与吡啶甲酸类的相同, 即  $M-NH_2-CO-CHN$ , 另有离子  $NH_2-C\equiv\bar{O}$ 。

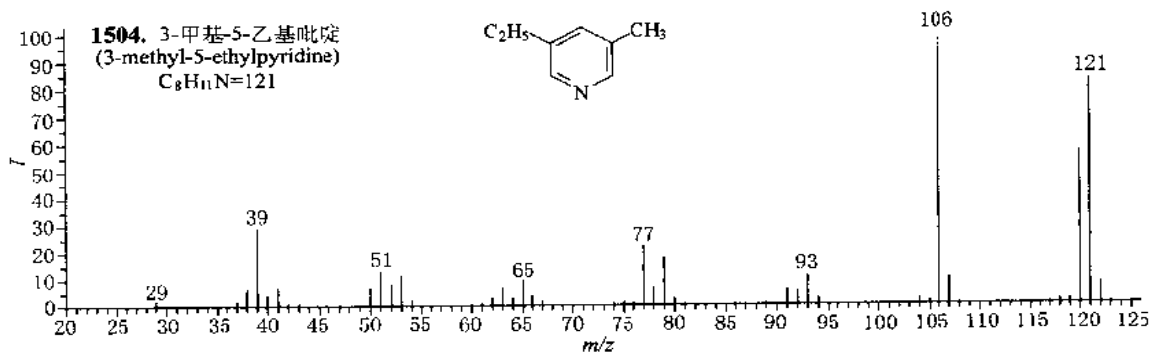
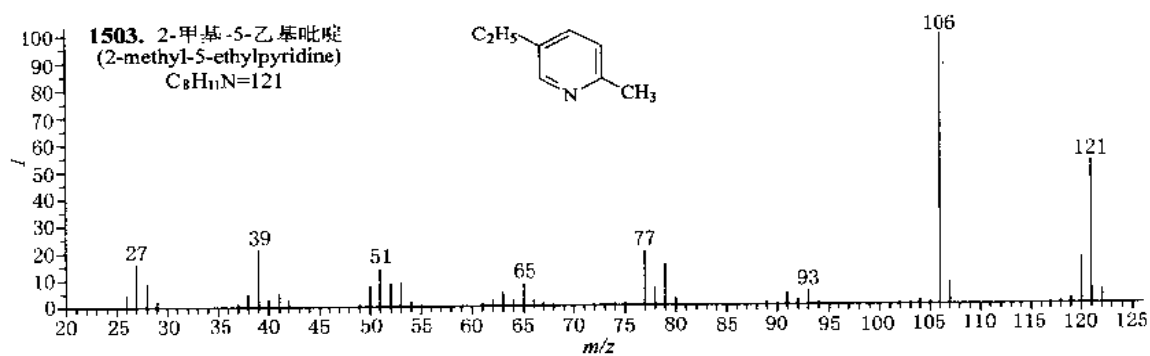
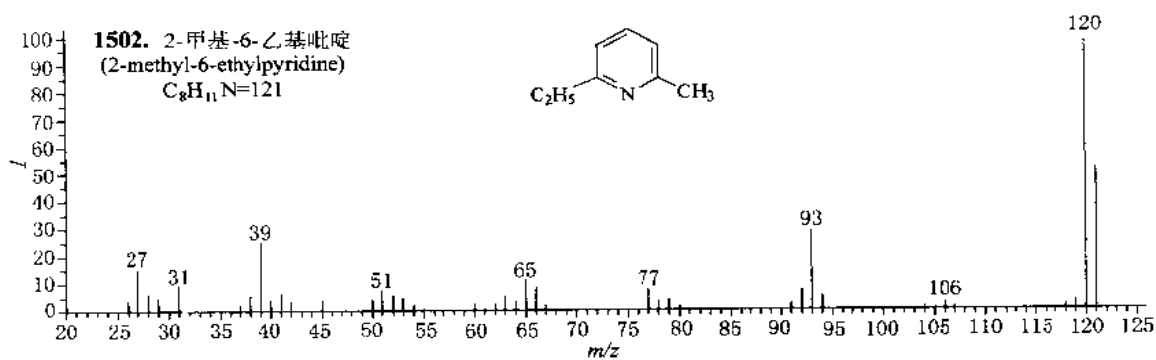
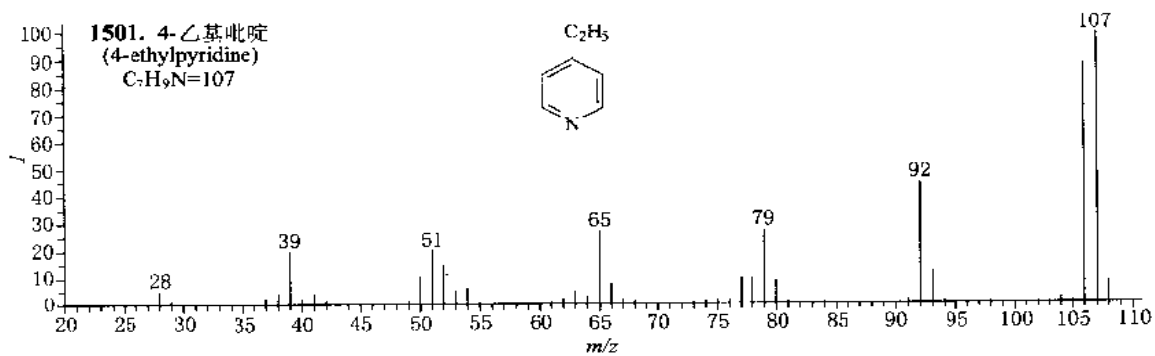
(16) 硝基吡啶 (1567) 有  $M-NO-CO-CHN$  和  $M-NO_2-CHN$  的裂解途径。



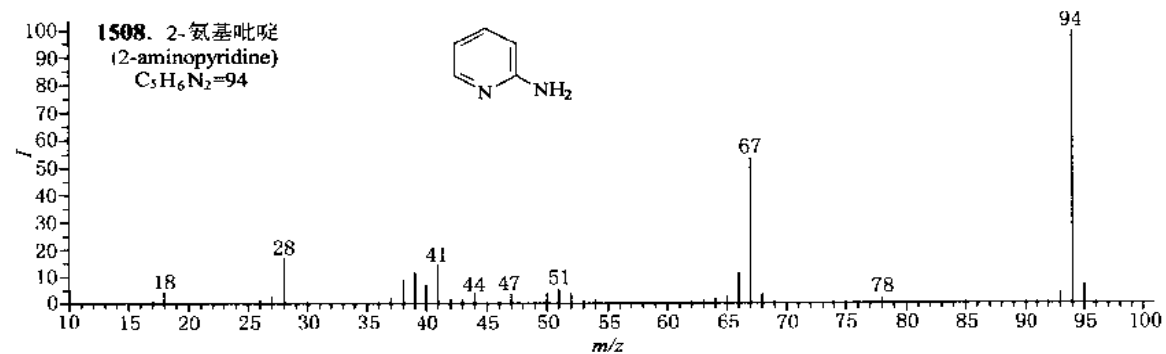
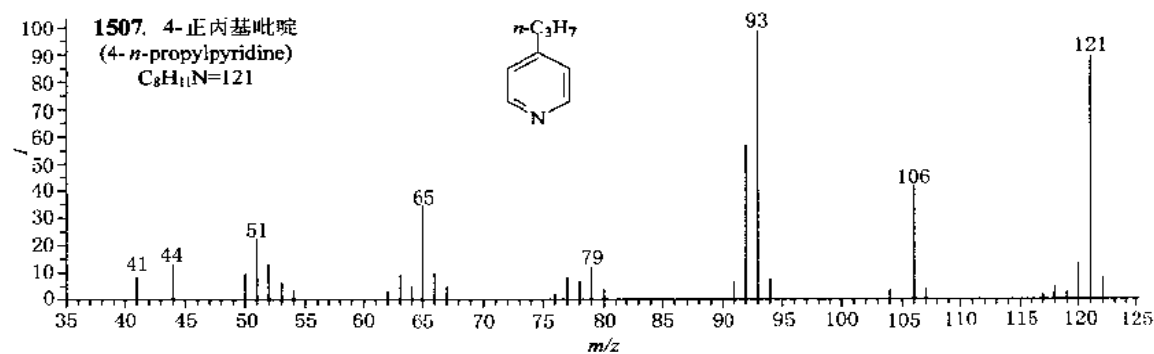
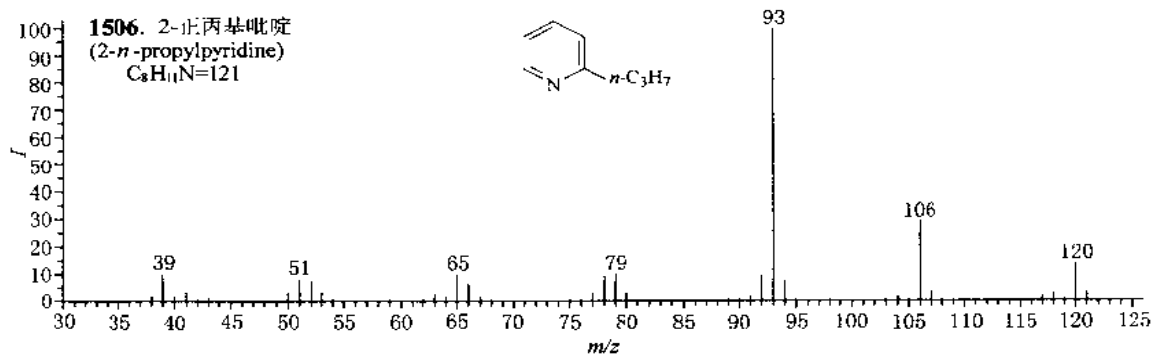
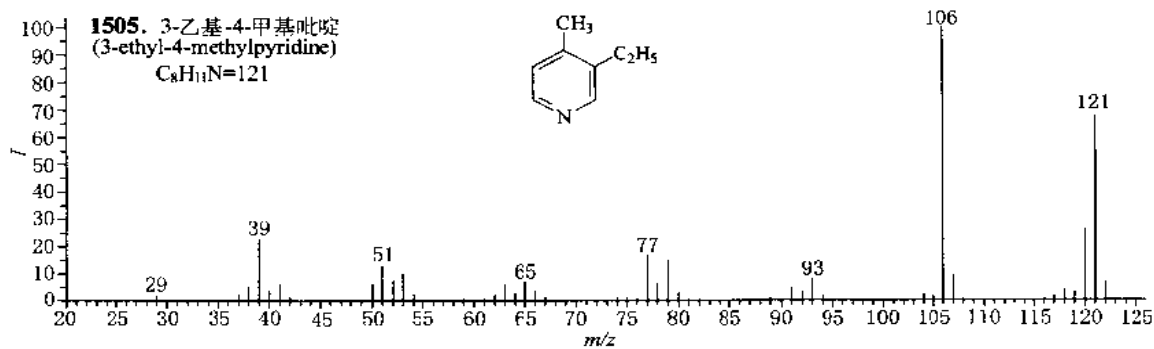


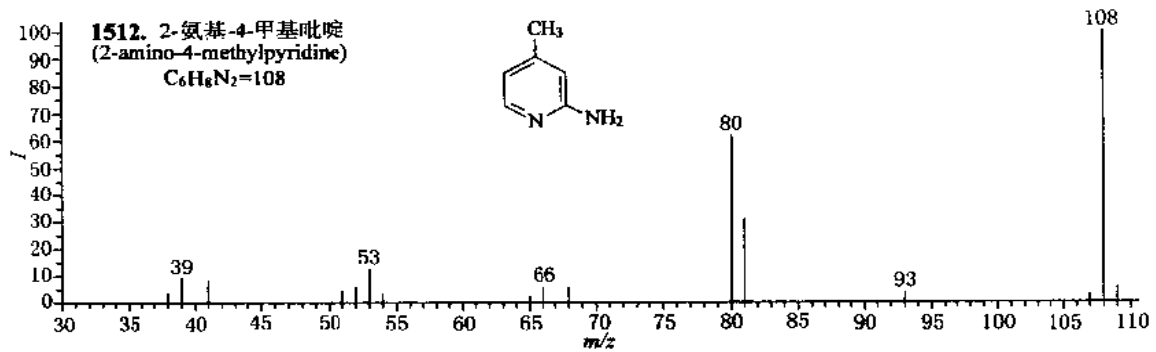
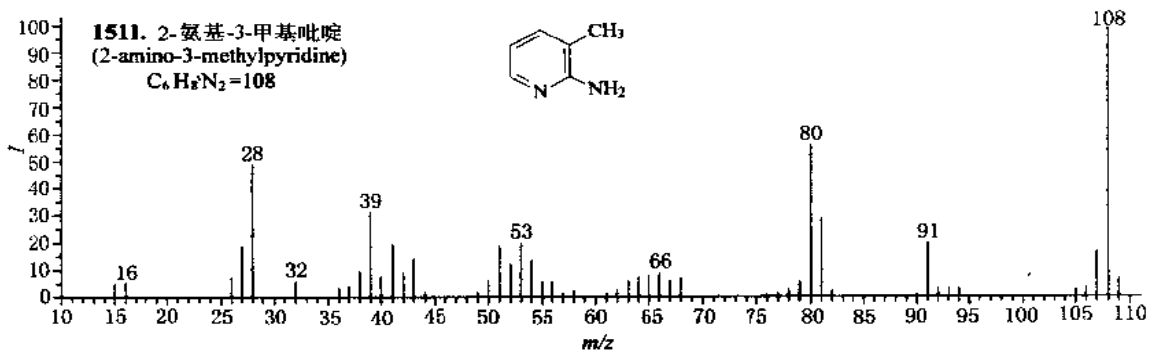
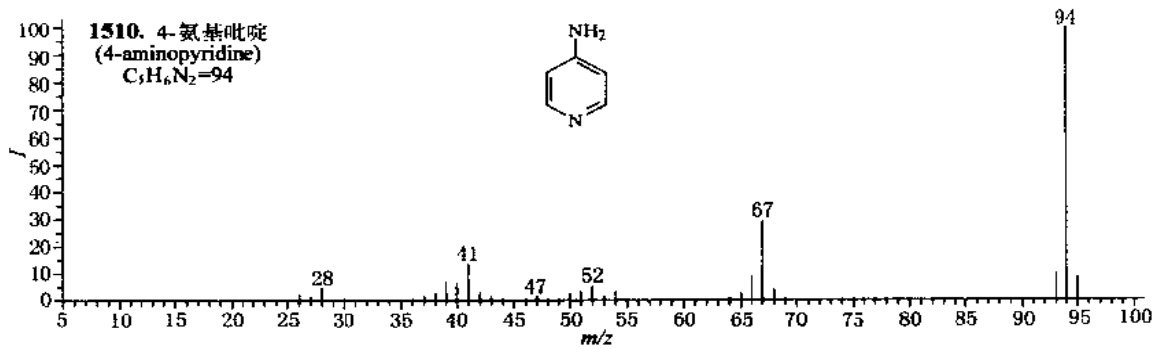
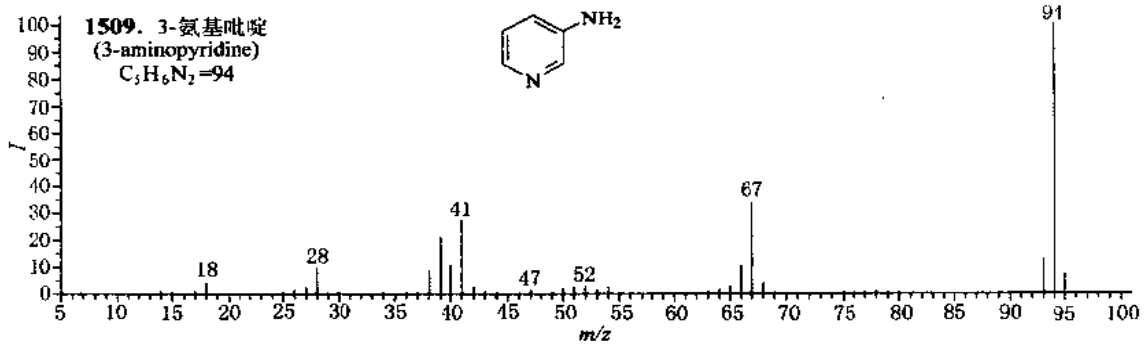


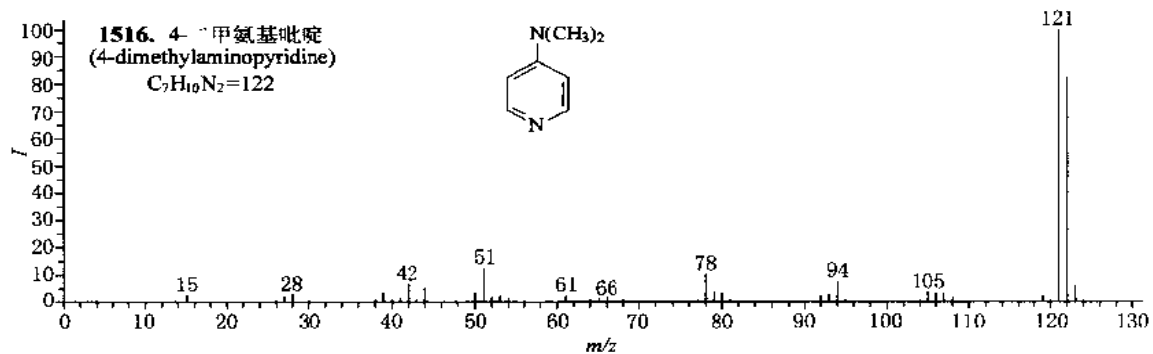
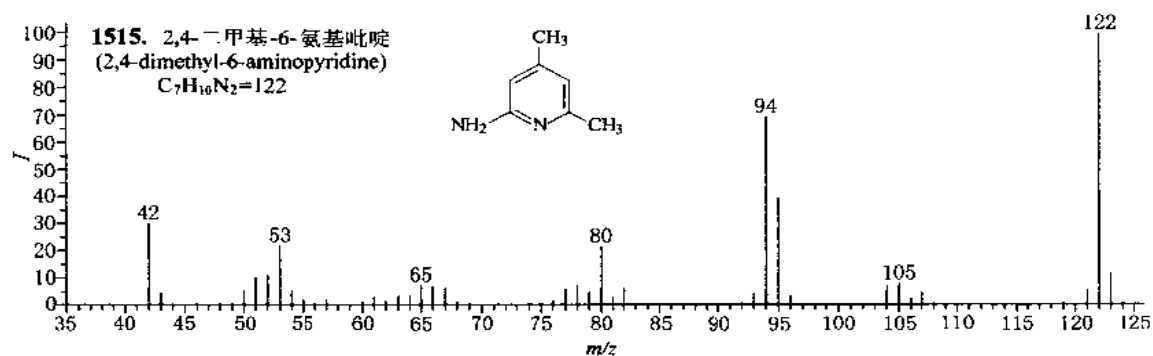
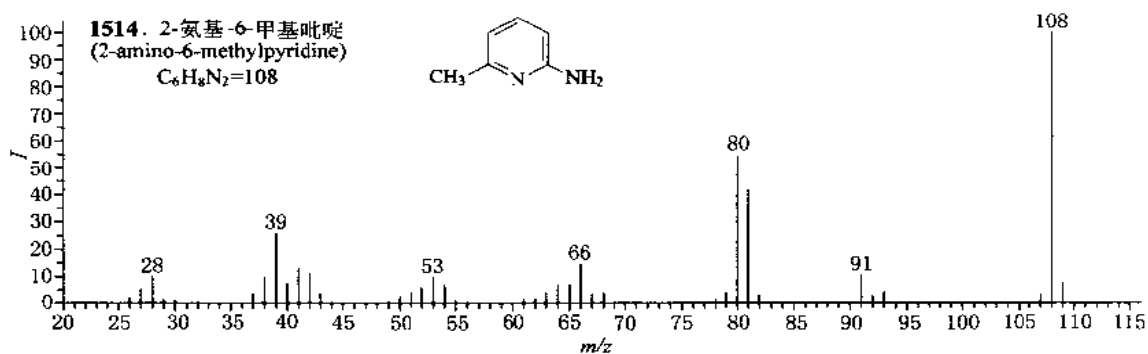
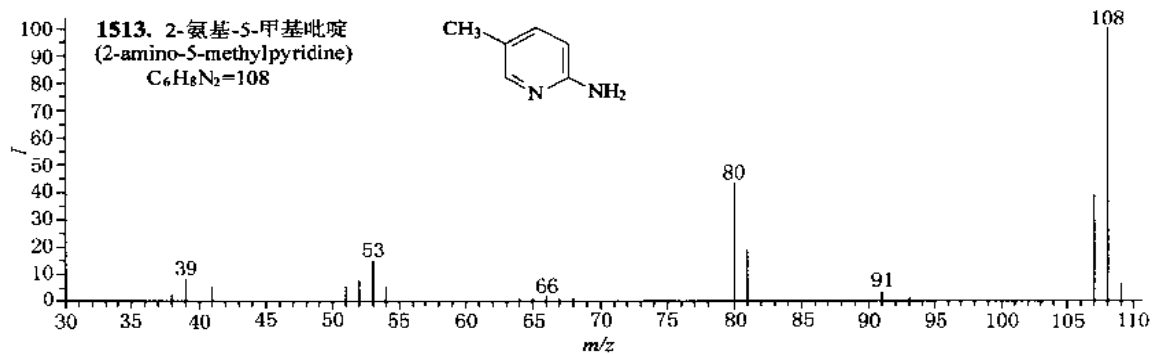


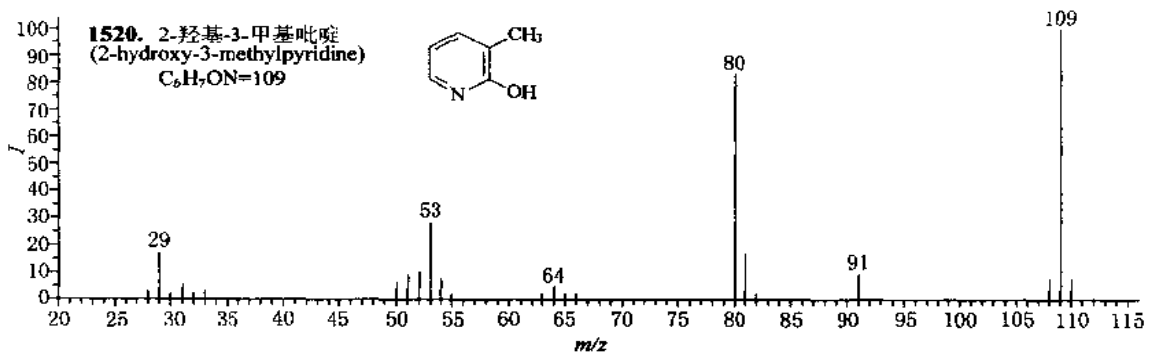
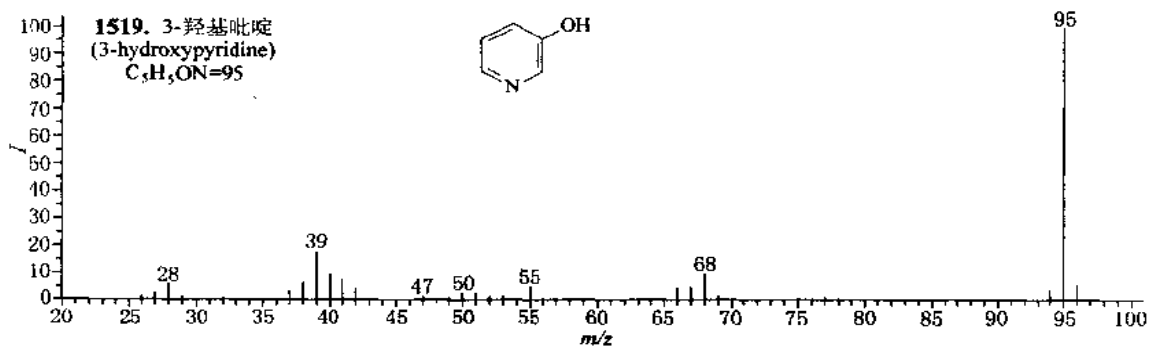
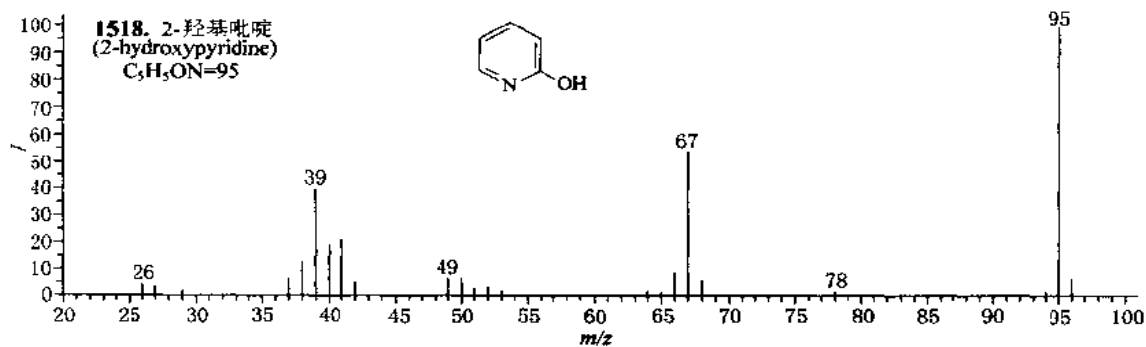
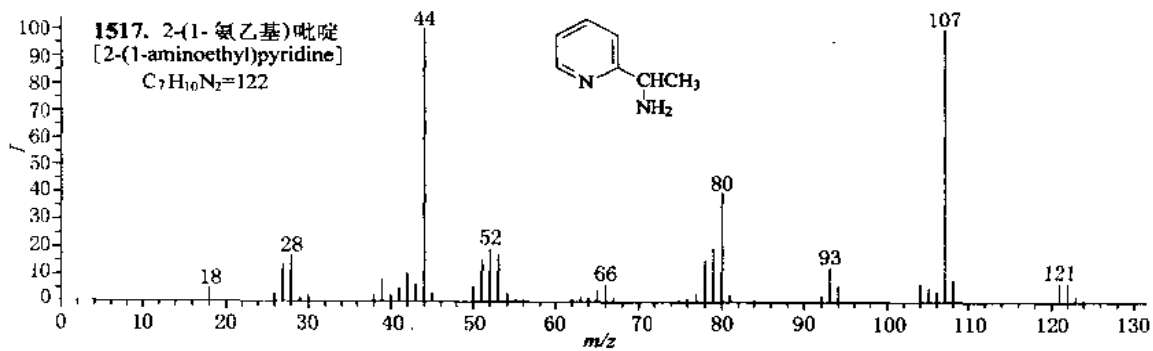


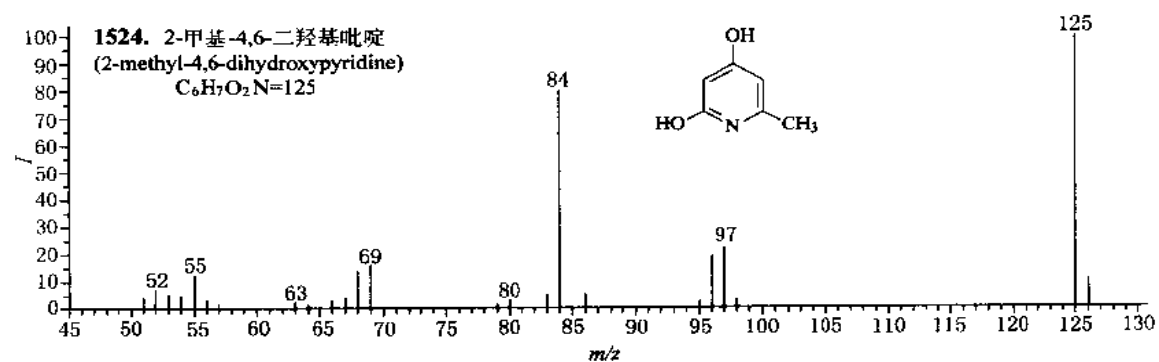
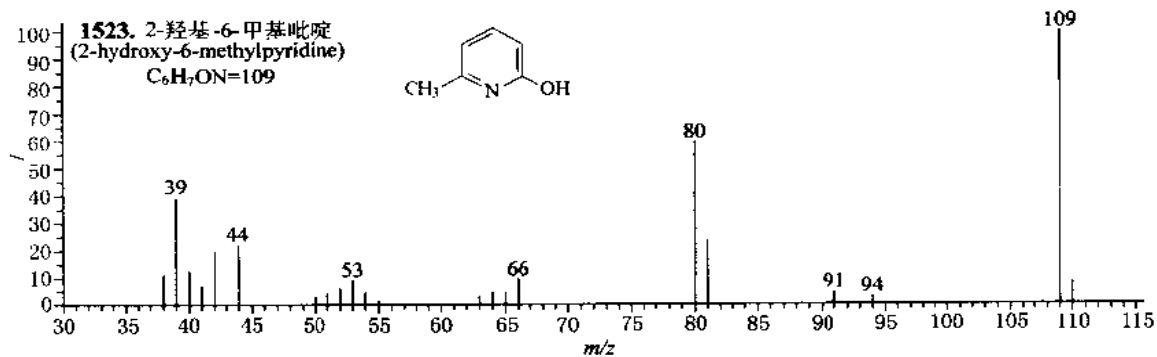
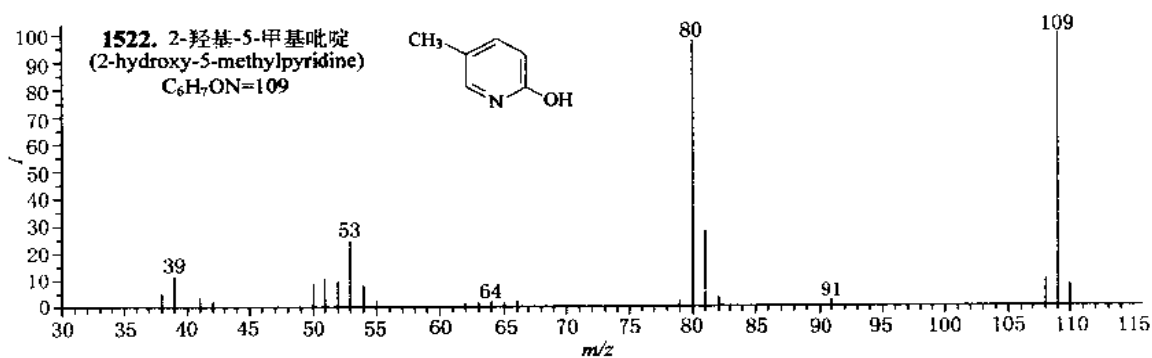
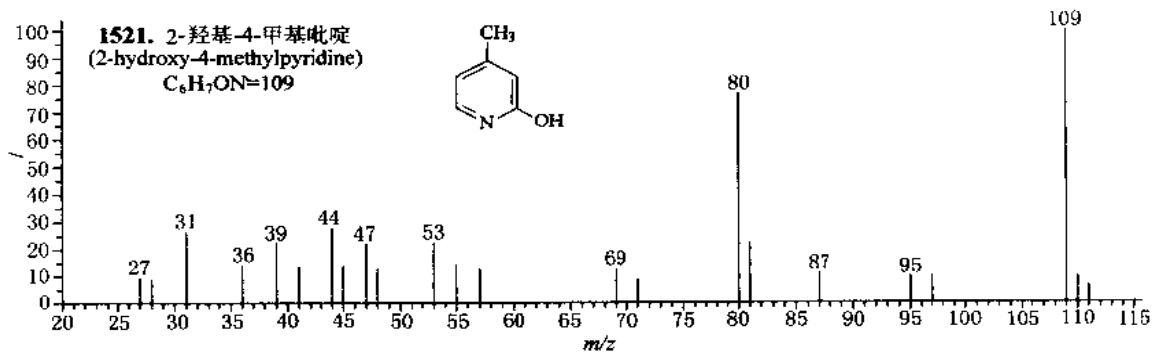


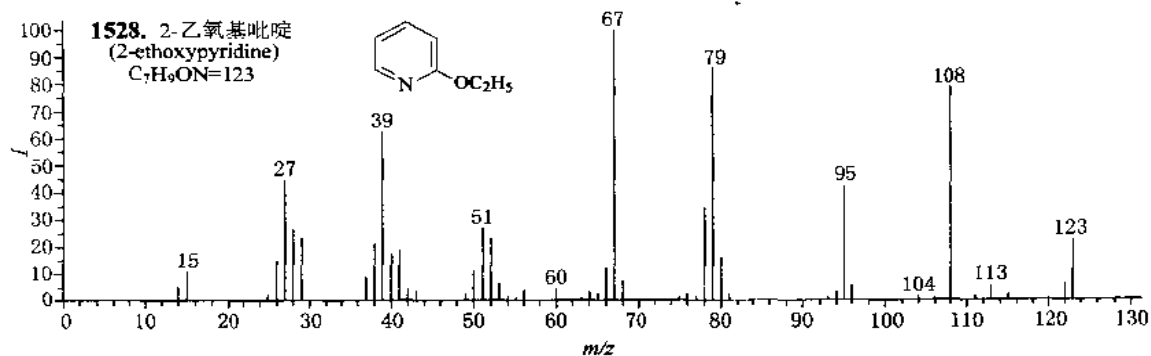
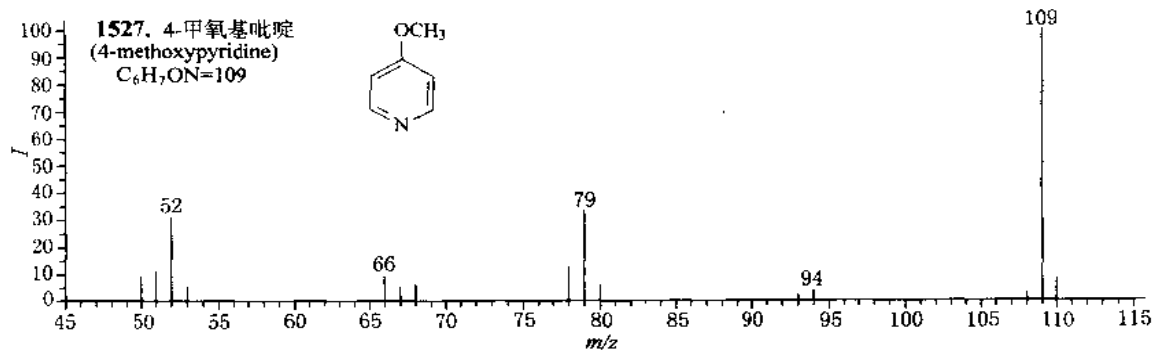
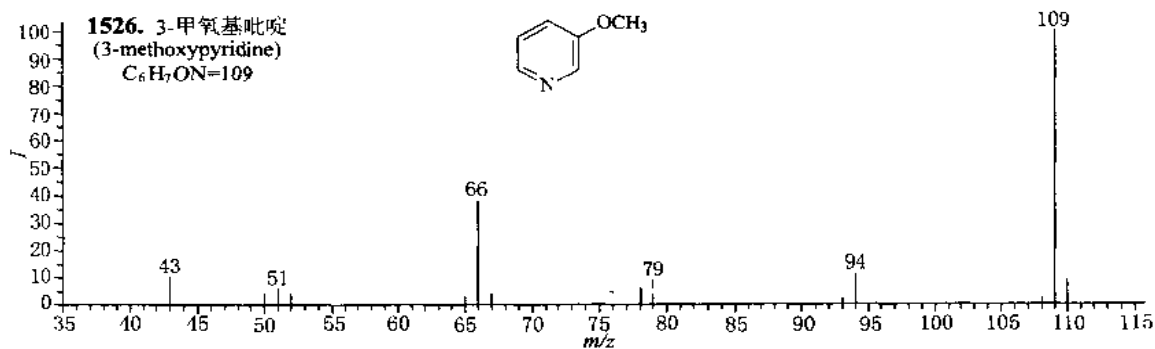
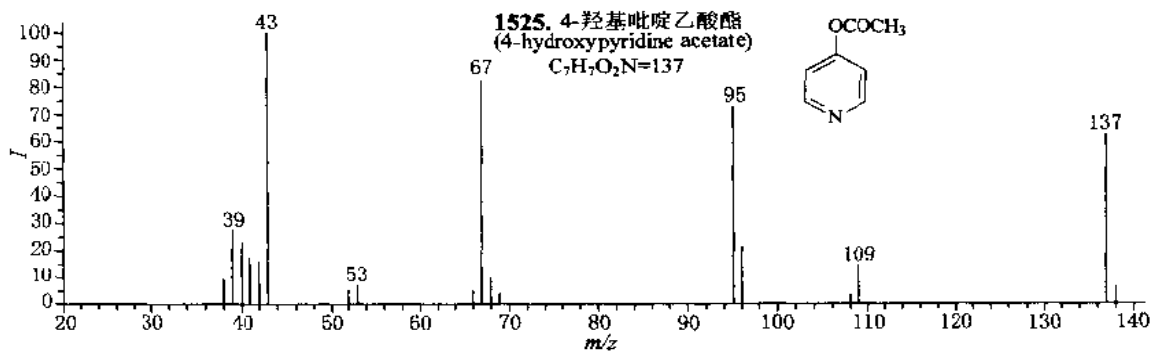


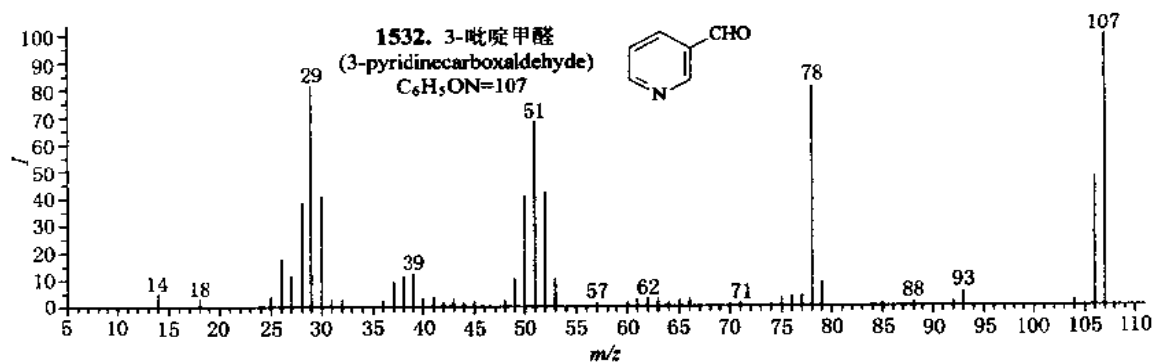
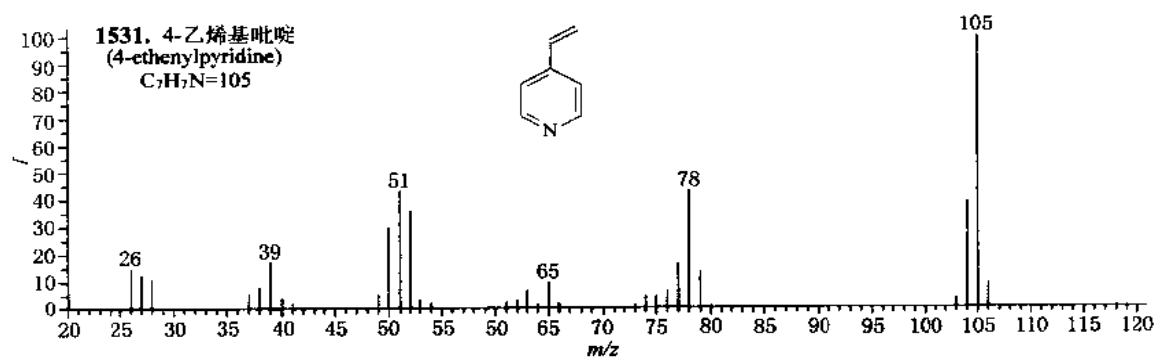
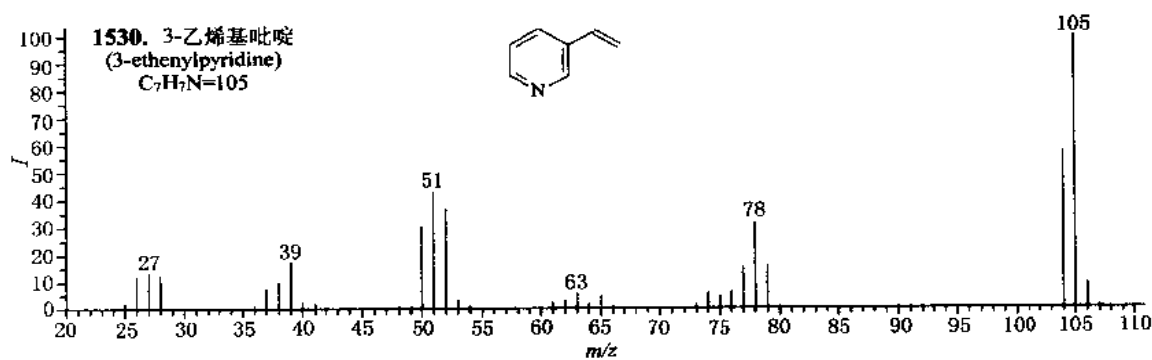
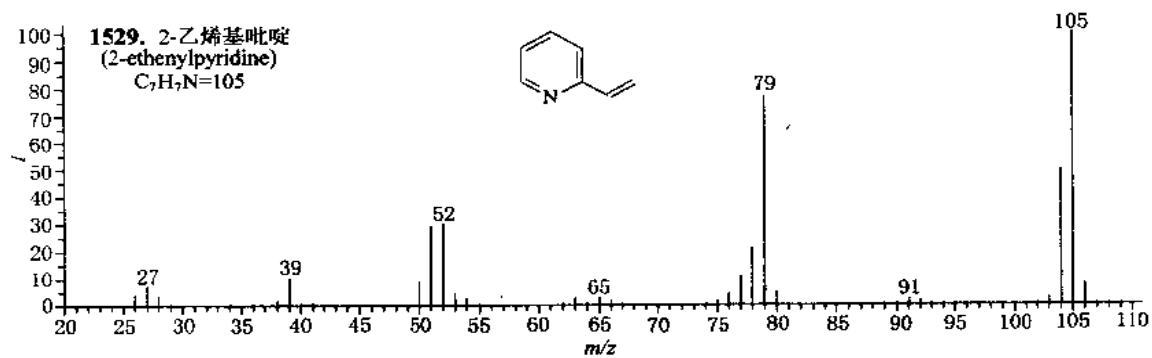


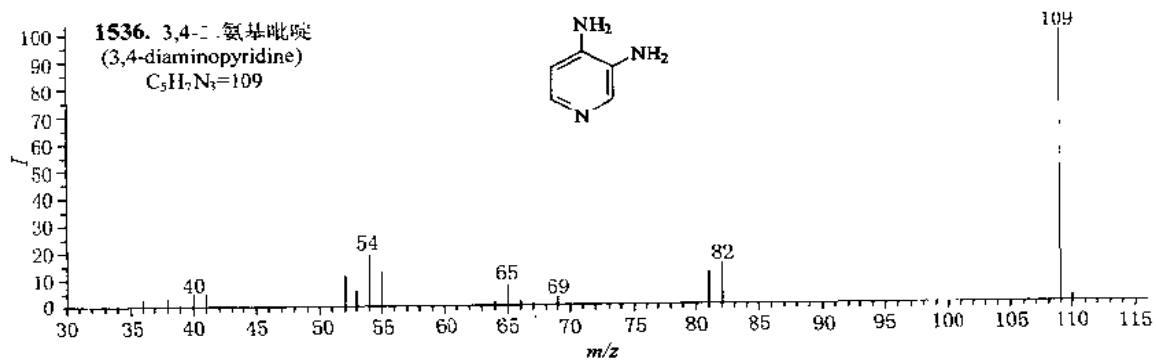
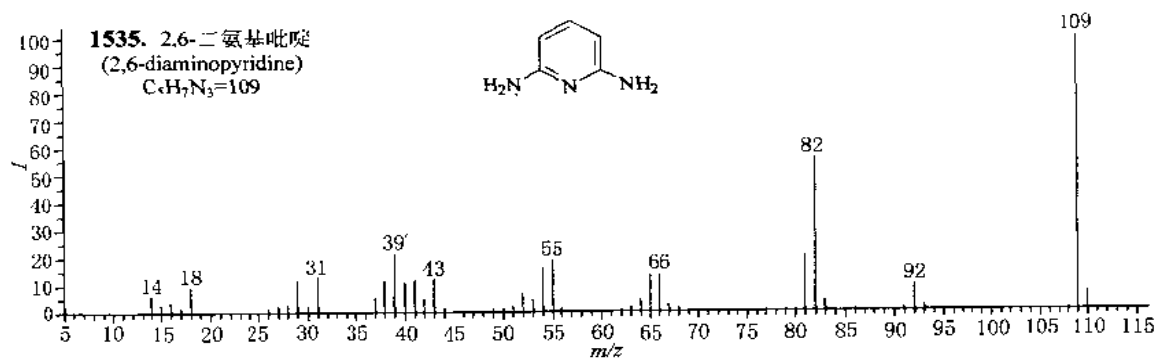
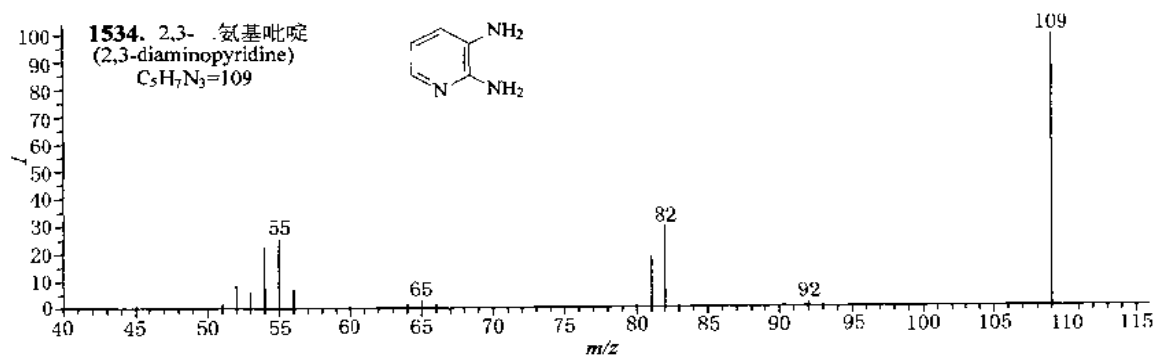
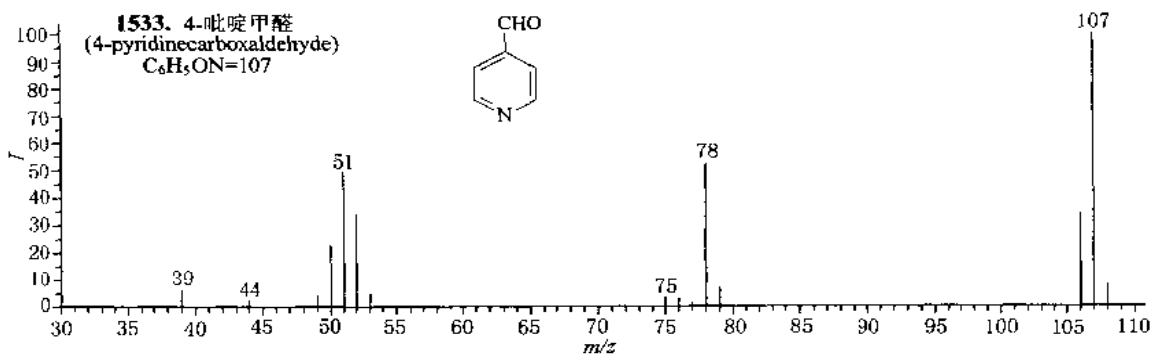




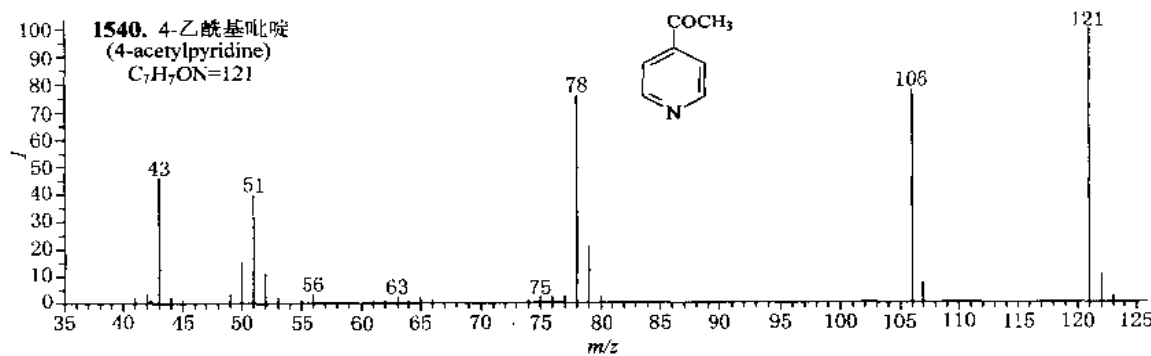
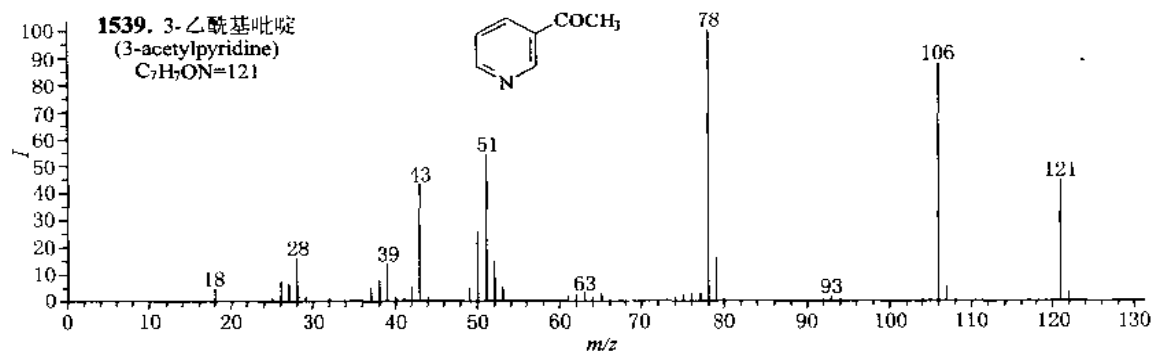
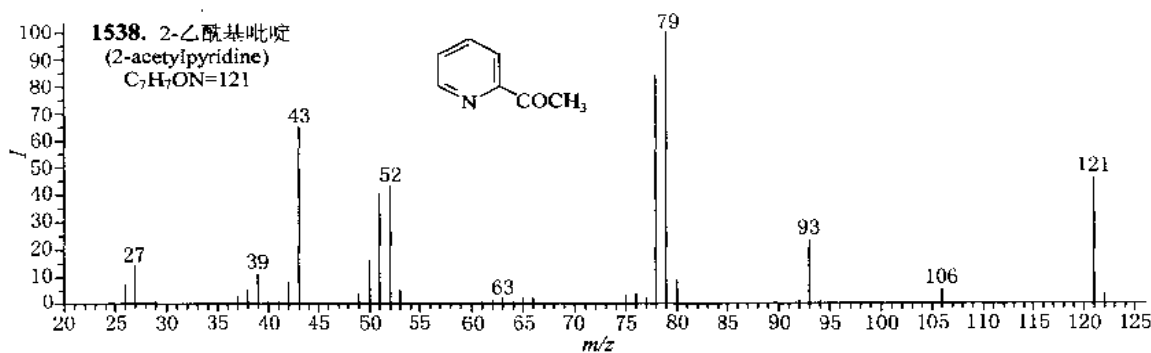
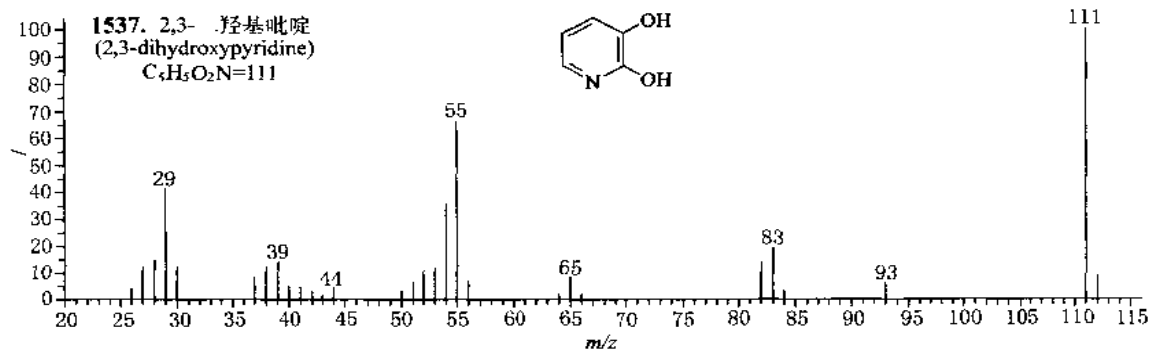


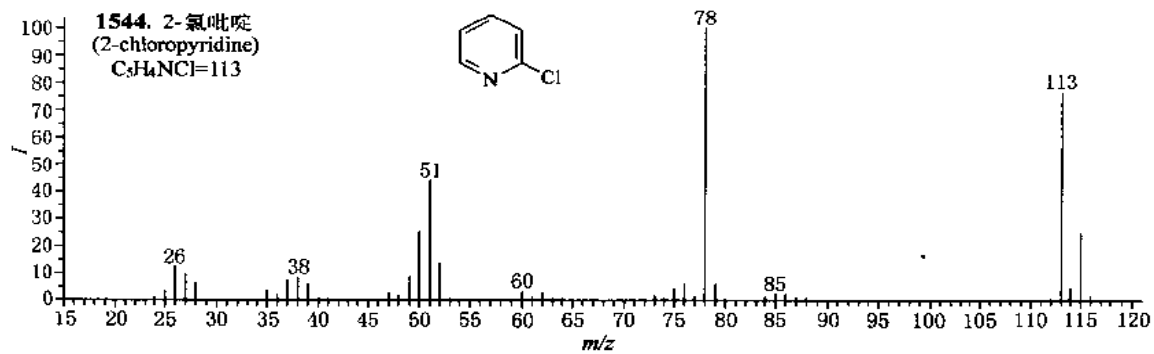
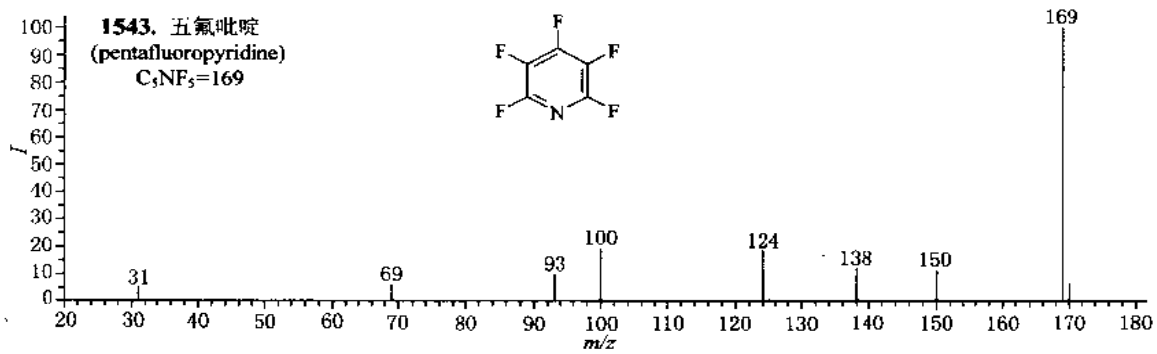
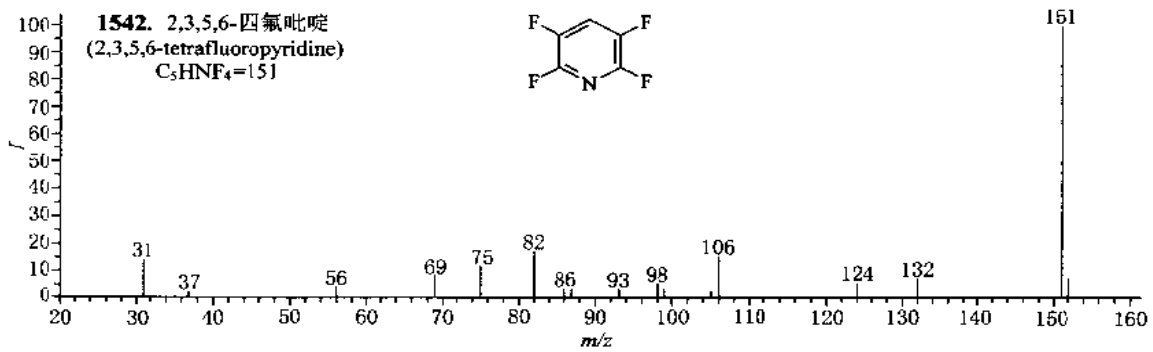
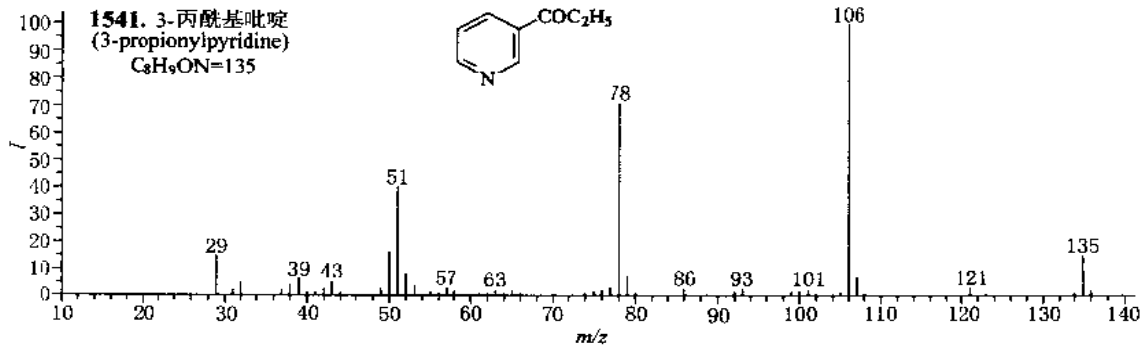


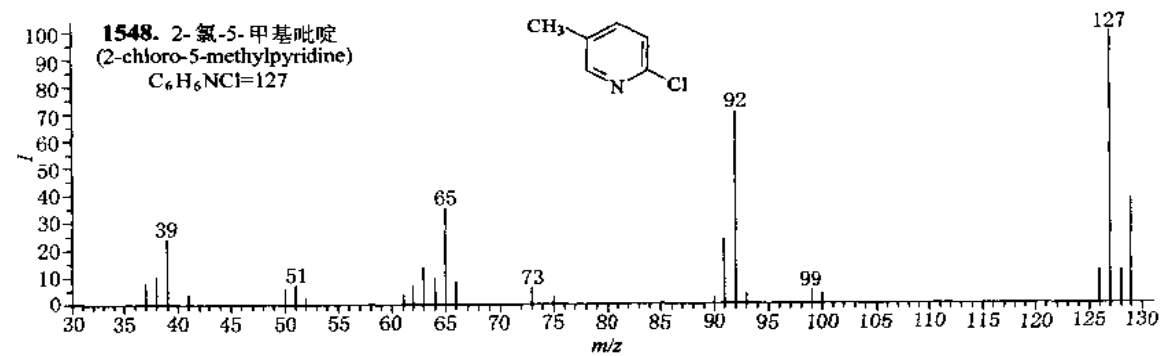
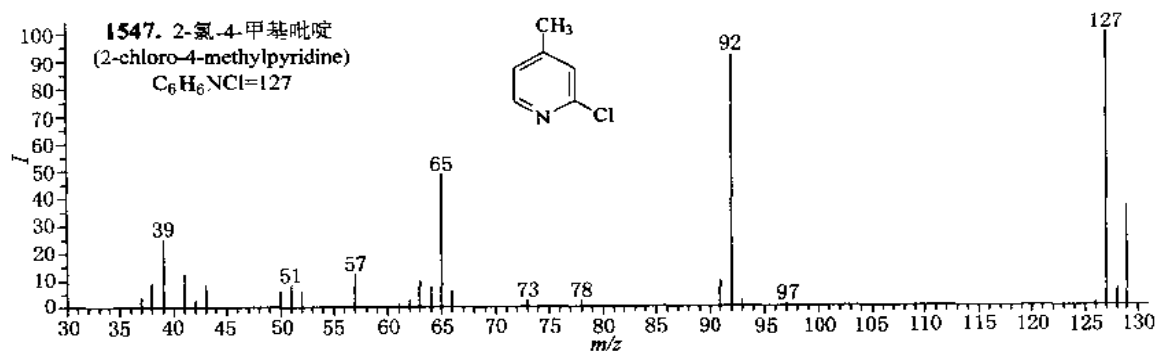
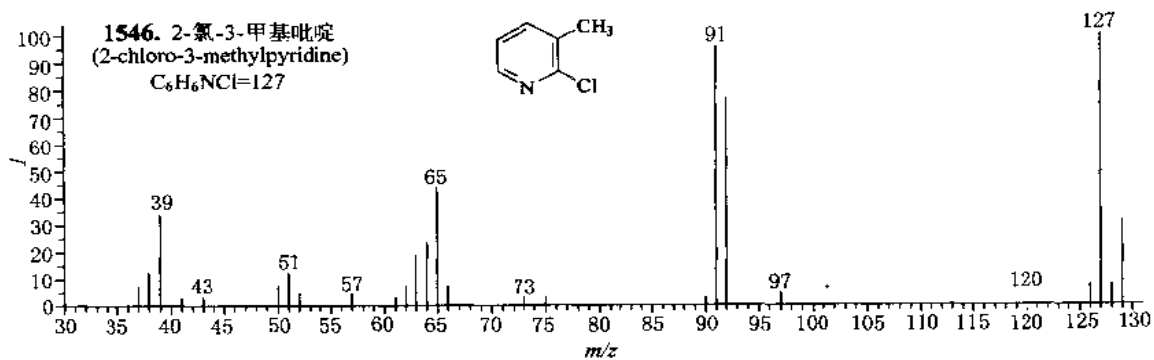
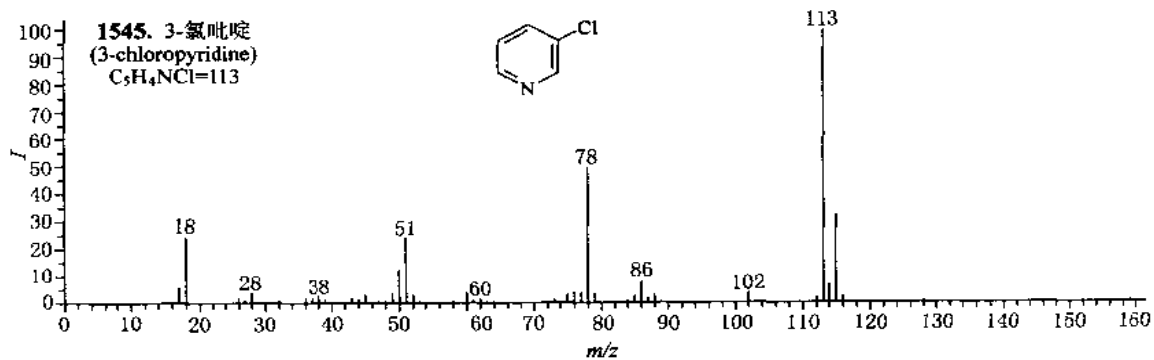


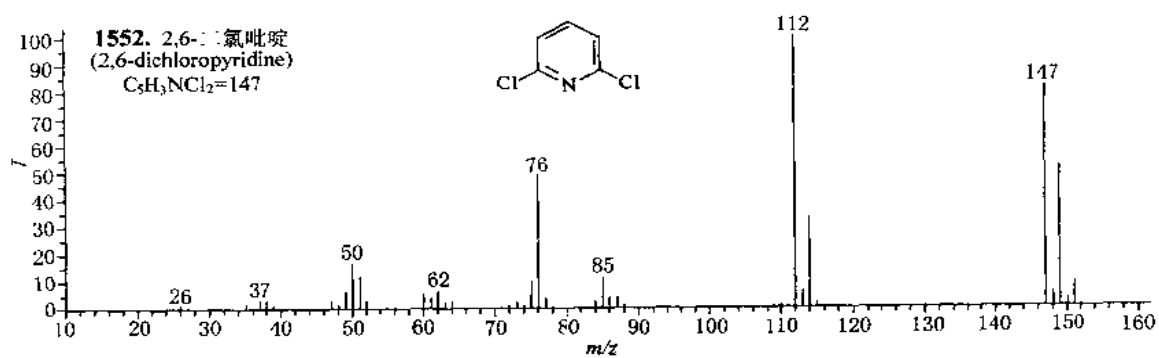
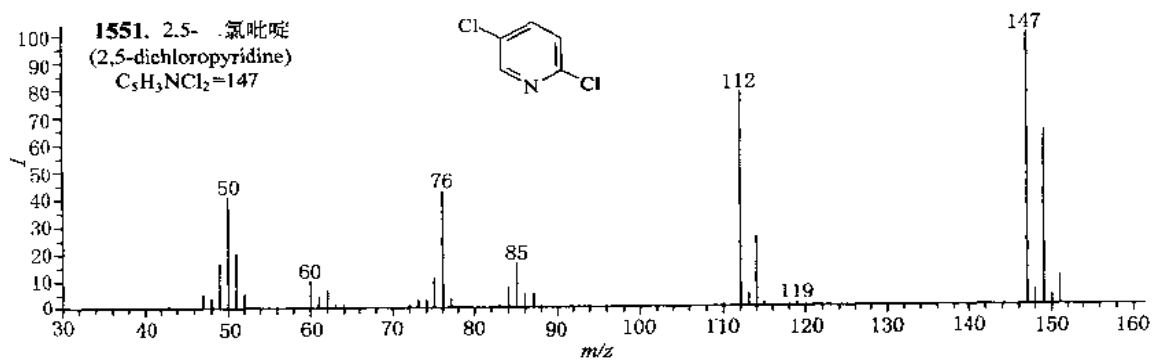
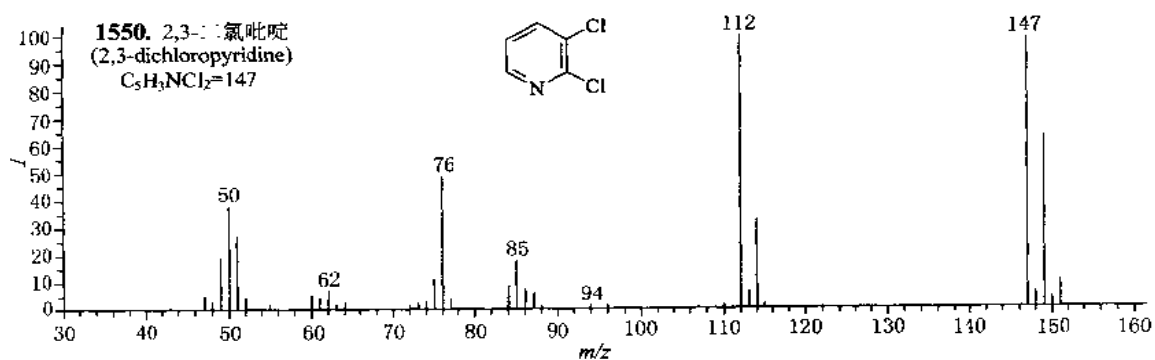
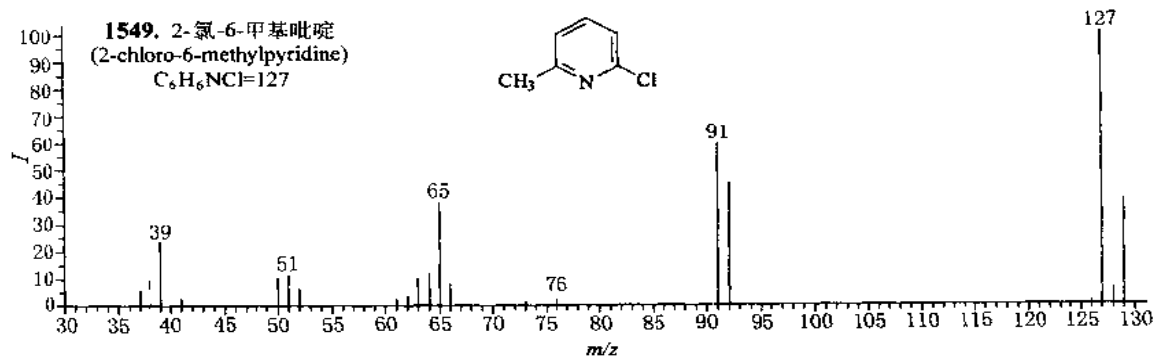


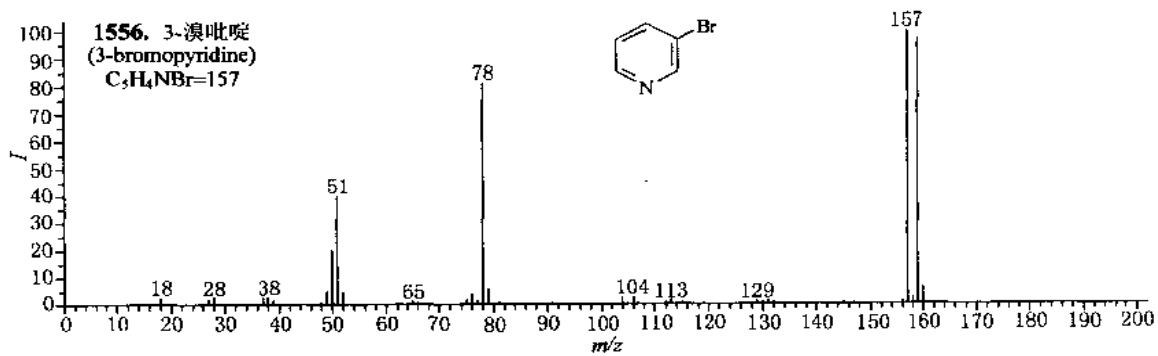
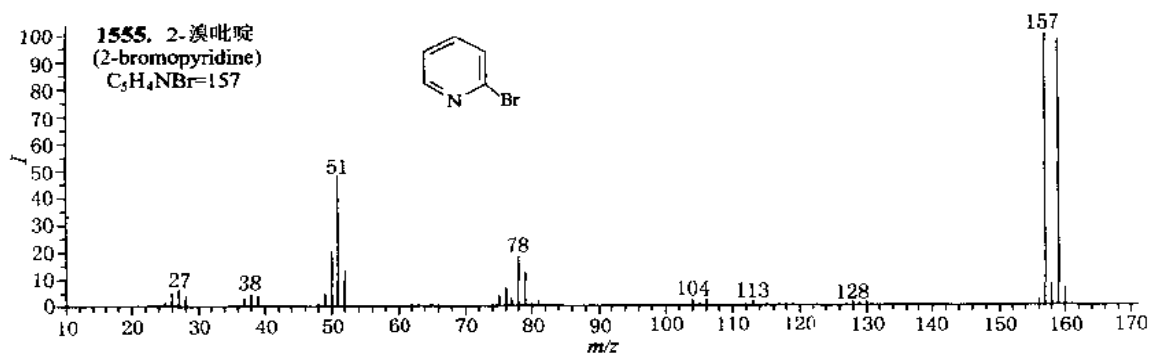
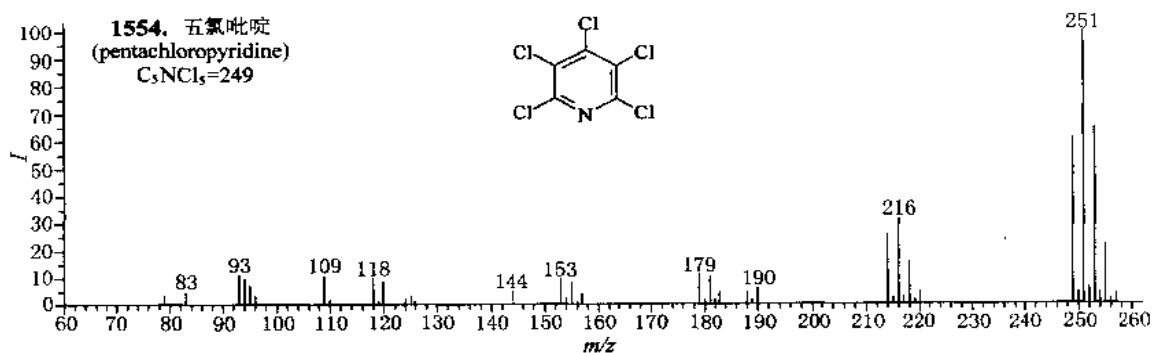
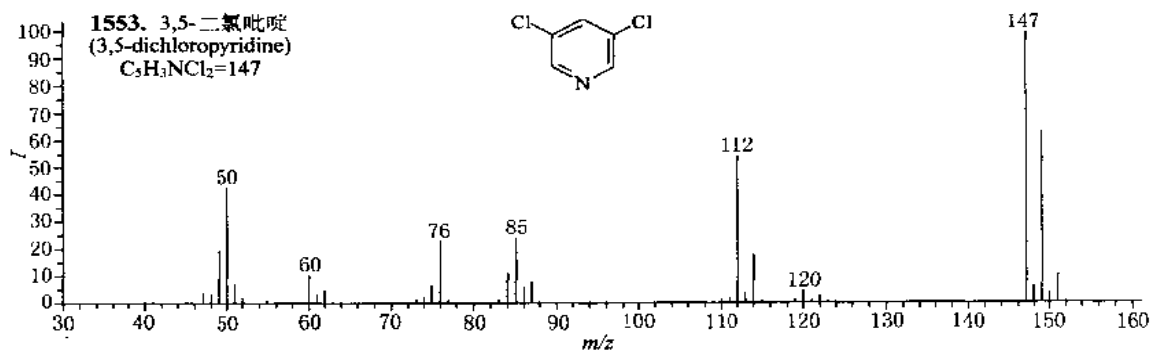


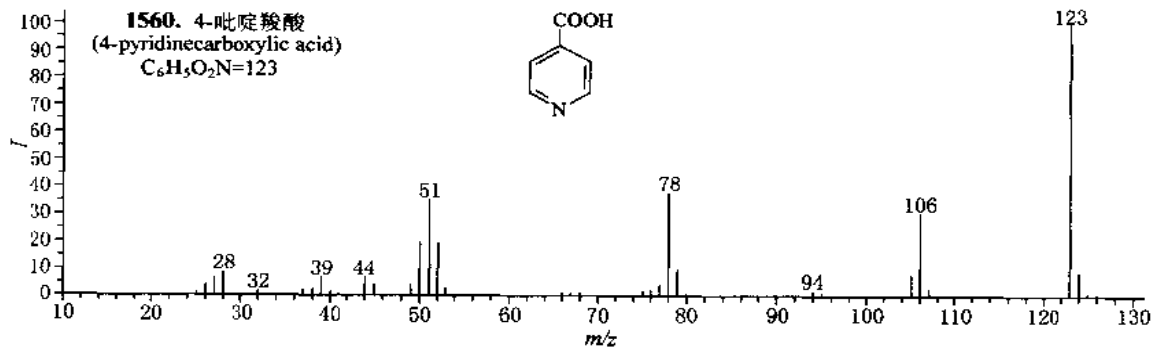
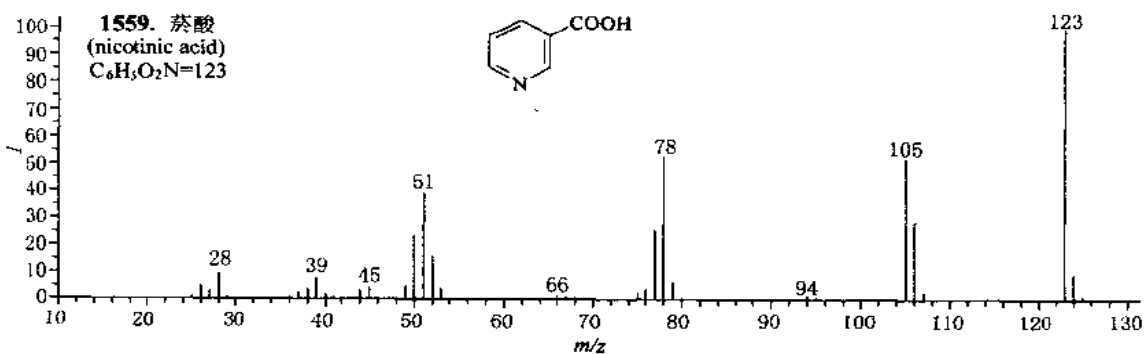
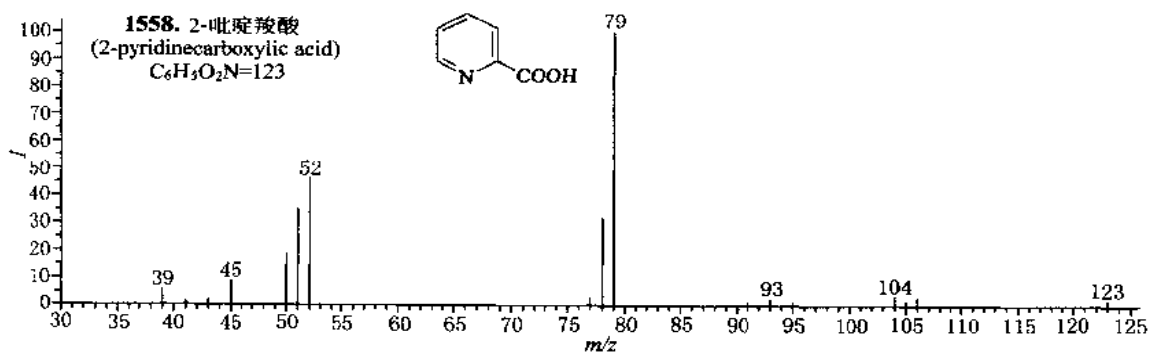
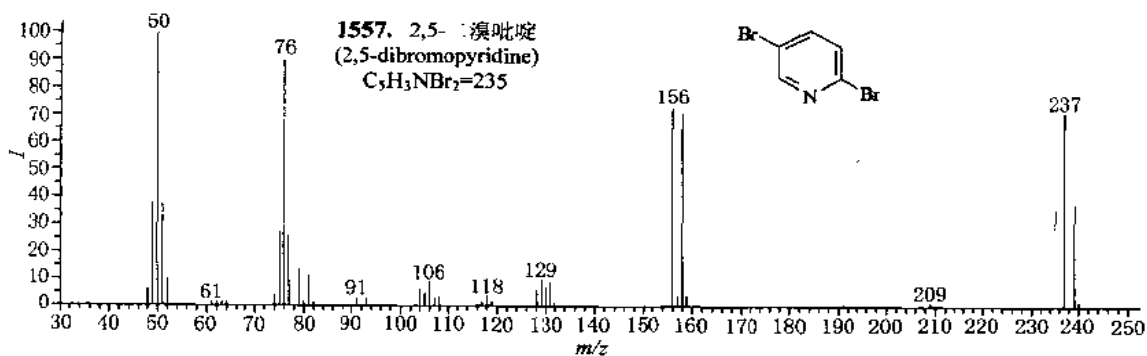


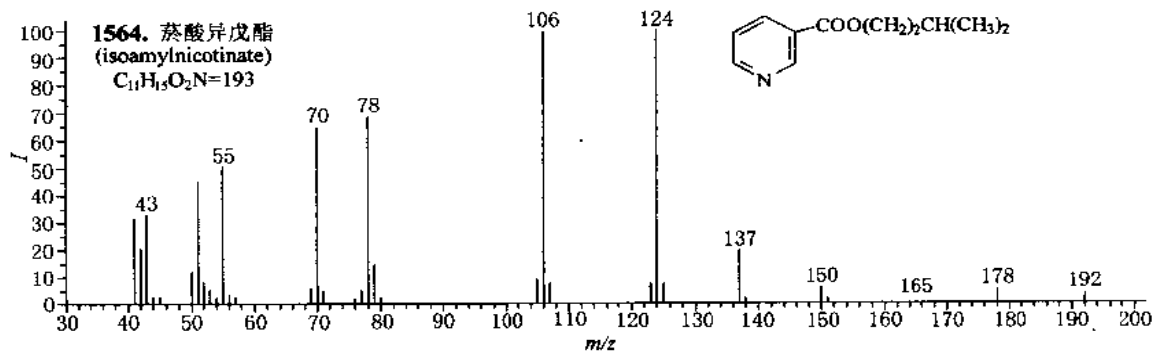
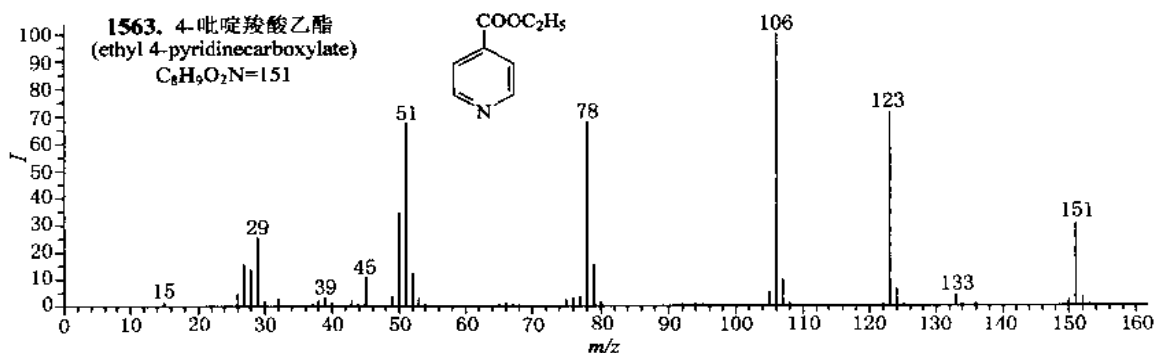
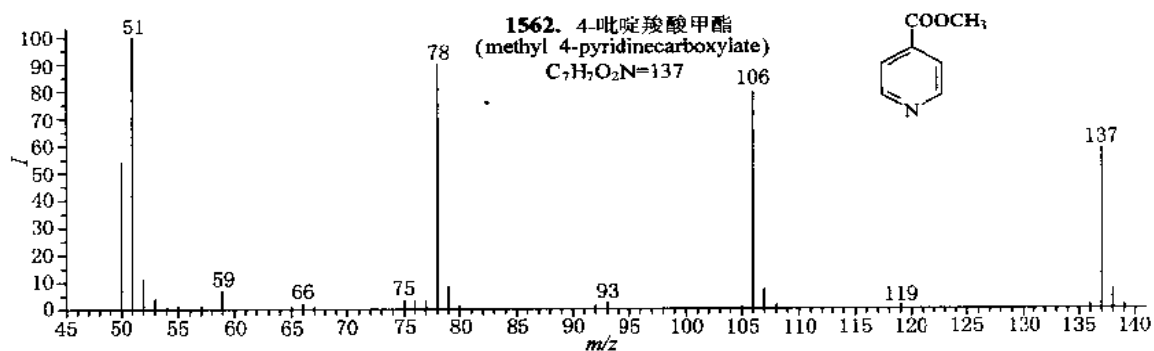
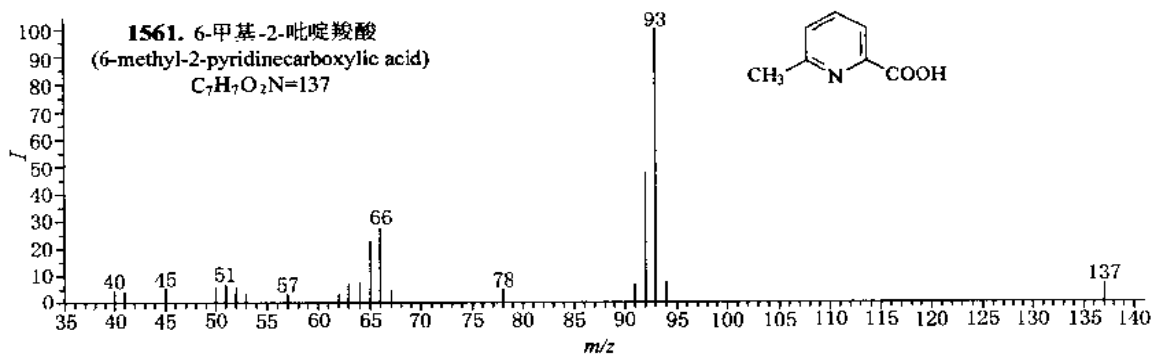


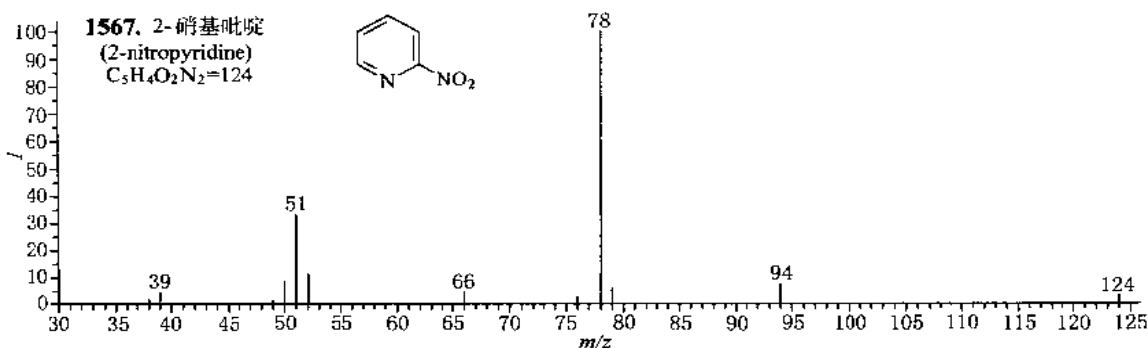
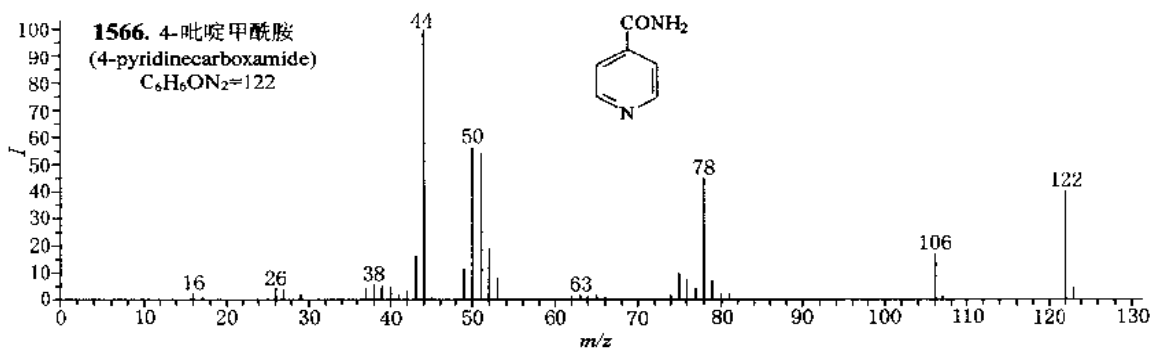
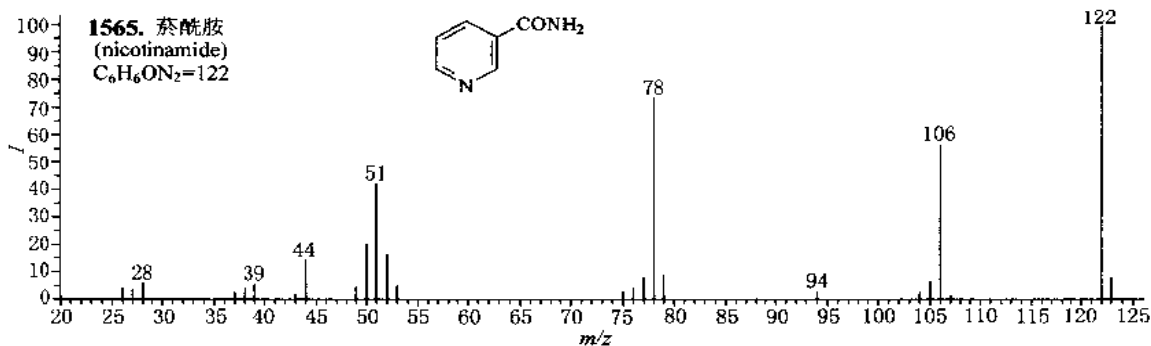












### 三、吡 啶 类

(1) 吡啶 (1568) 本身只有  $M-CHN$  离子, 甲基吡啶类 (1570, 1571) 的裂解途径是  $M-H-CHN$ ,  $N$ -甲基取代者 (1569) 尚有较强的  $CH_3N^+ \equiv CH$  离子。二甲基吡啶类 (1572~1574) 的裂解途径是  $M-H-CHN$  和  $M-H-CH_3CN$ , 另有  $M-CH_3$  离子。再多一乙基取代的化合物 (1576) 还增加了  $M-C_2H_4$  和  $M-C_2H_5$  离子。

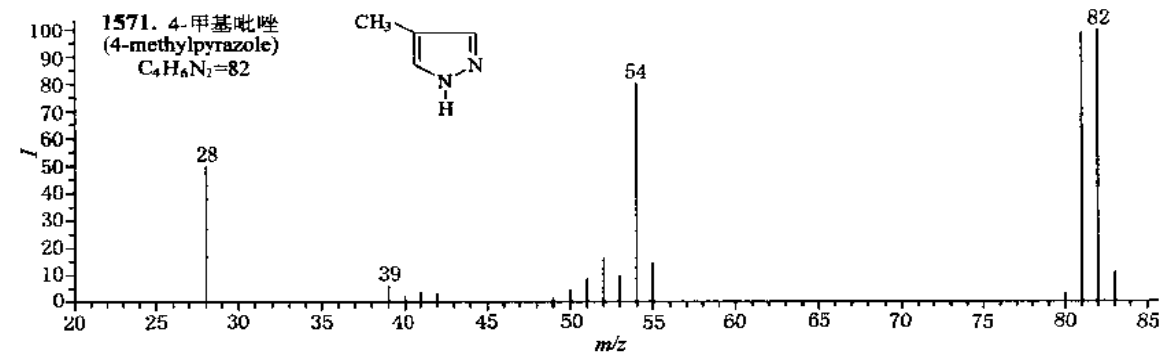
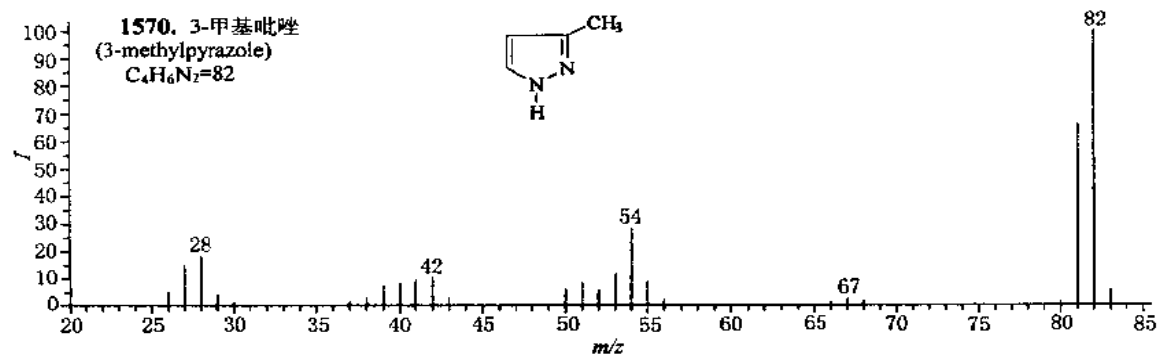
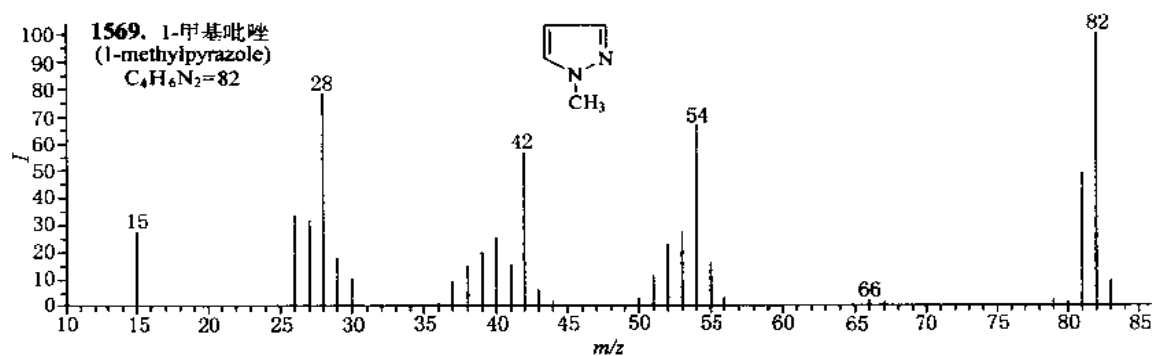
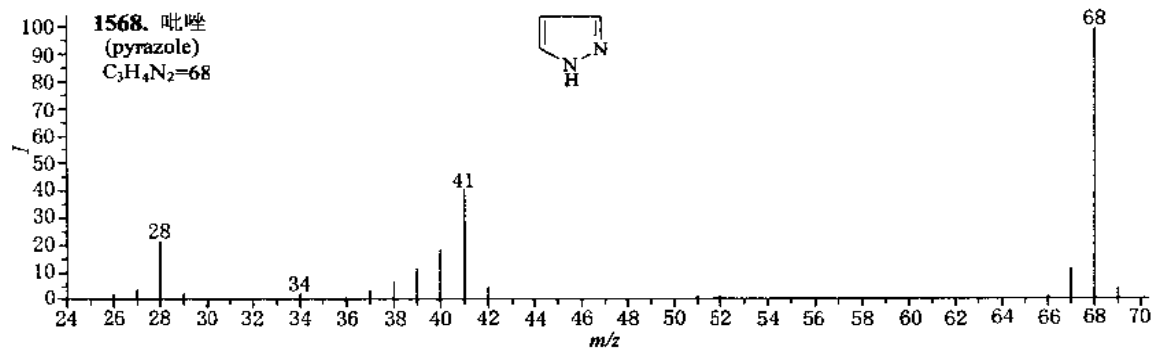
(2) 甲氧基取代的吡啶类 (1577), 主要裂解是  $M-CH_3-CO$ 。

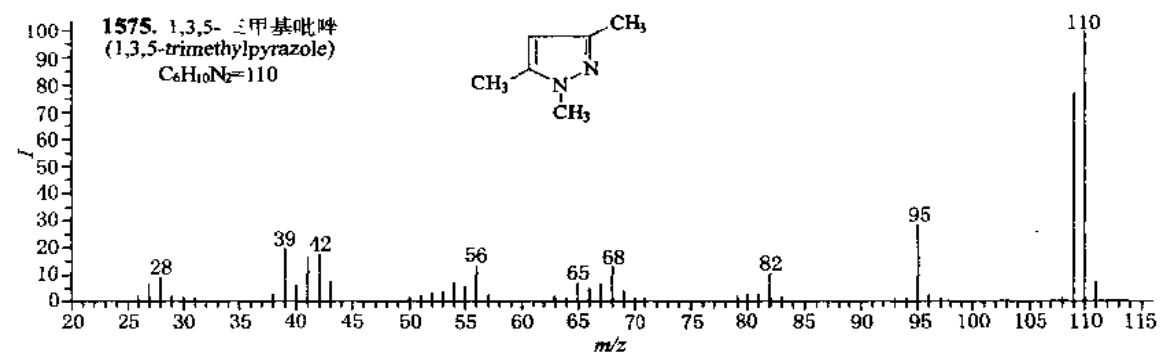
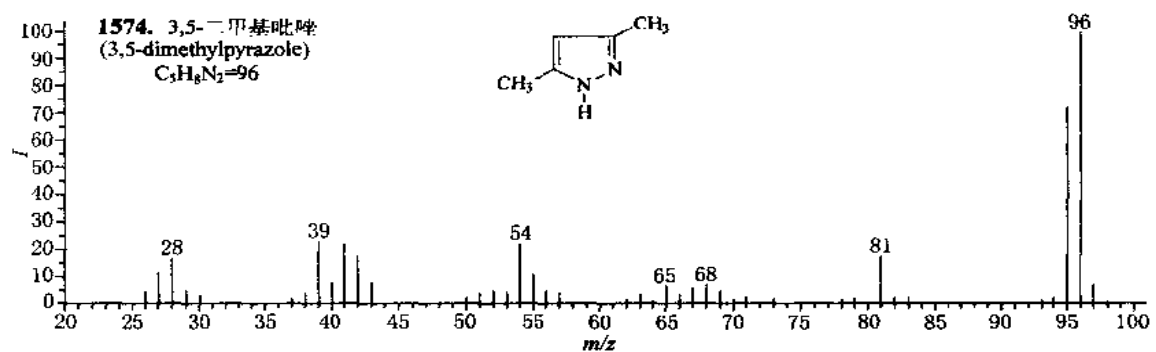
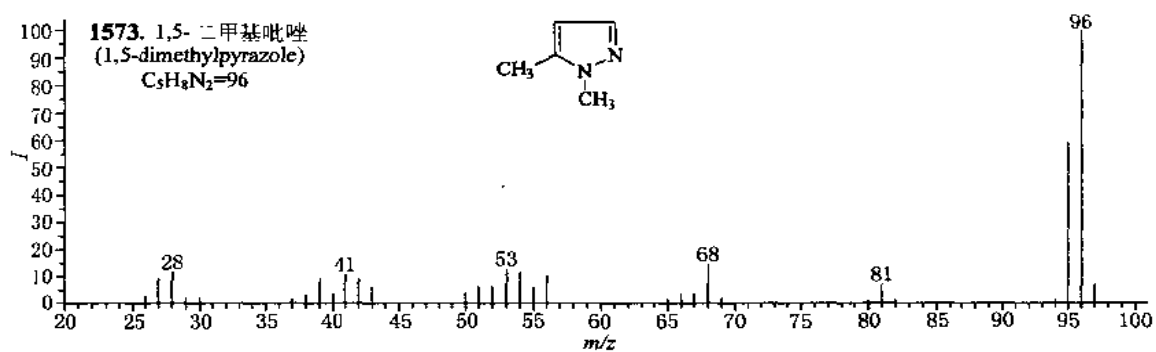
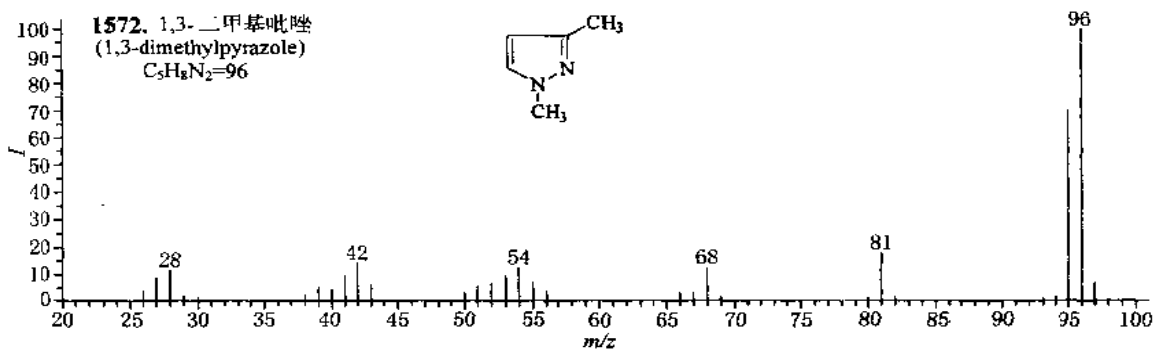
(3) 4-氯吡啶 (1578) 能失去 2 分子  $CHN$ ,  $M-Cl$  离子很弱。

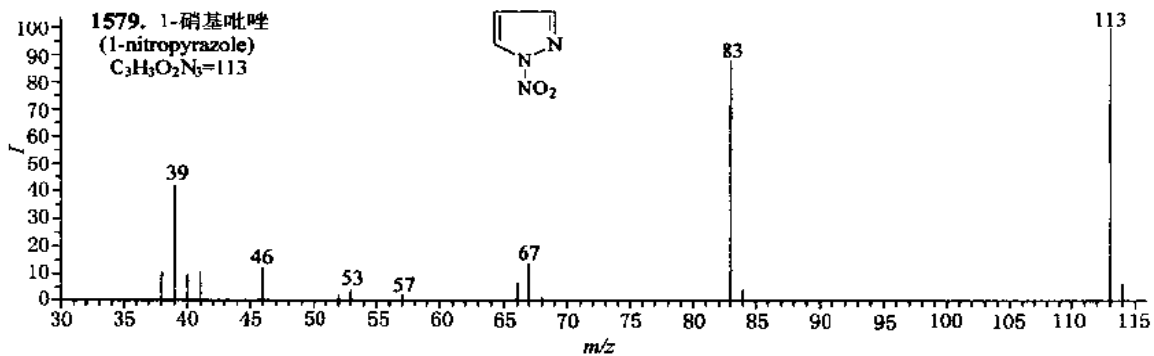
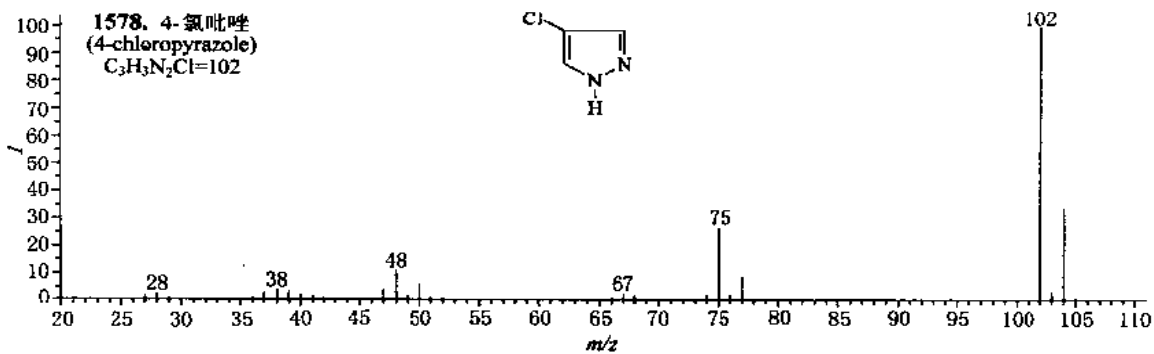
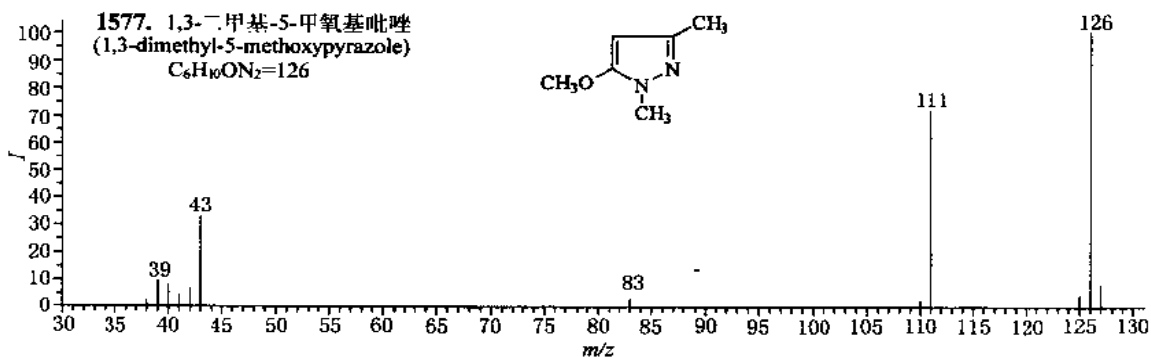
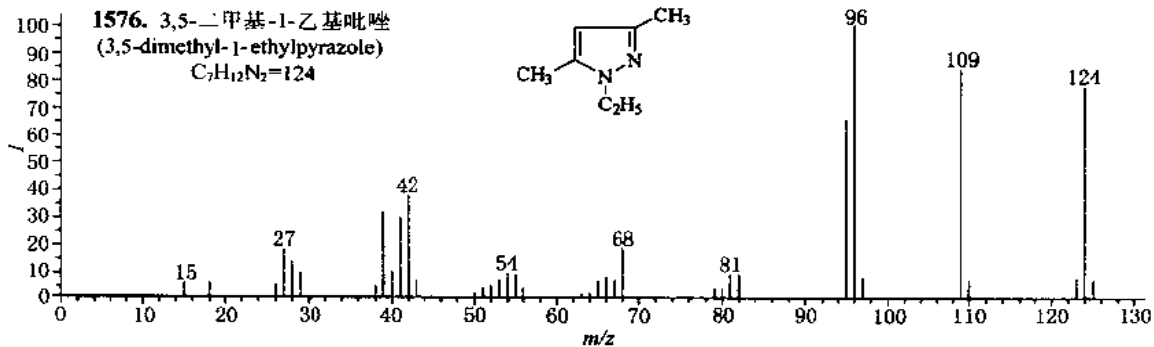
(4) 硝基吡啶类 (1579~1581) 都有较强的  $M-NO$  离子和较弱的  $M-NO_2$  离子。

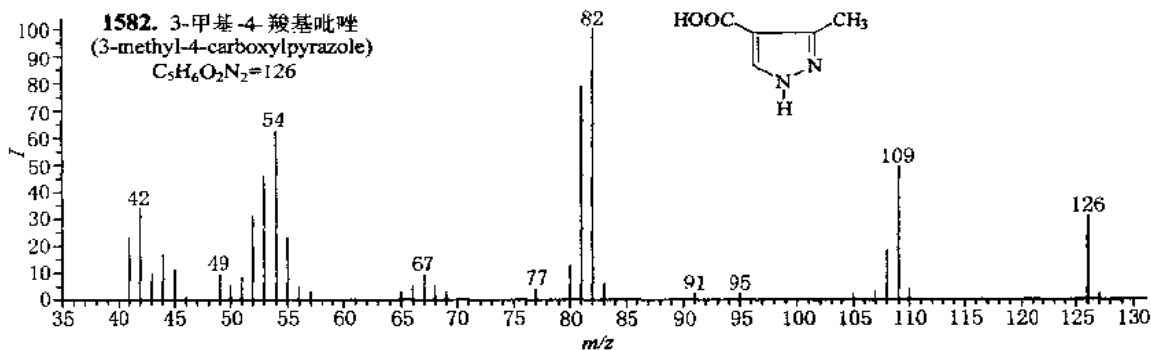
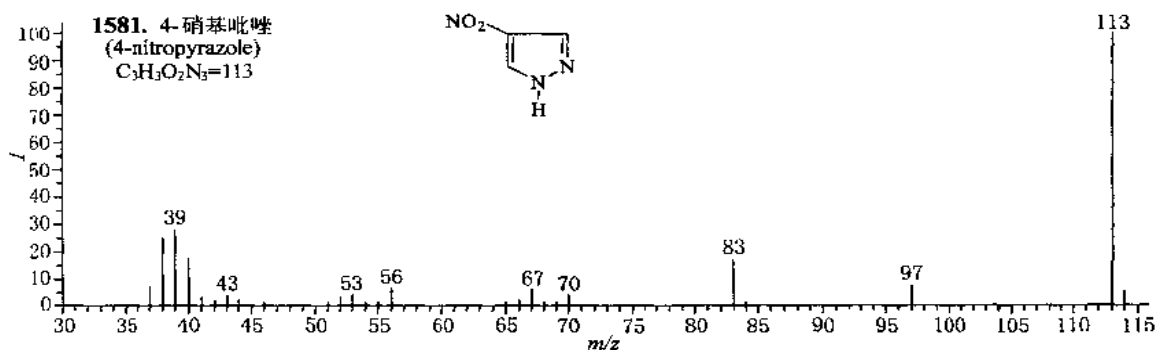
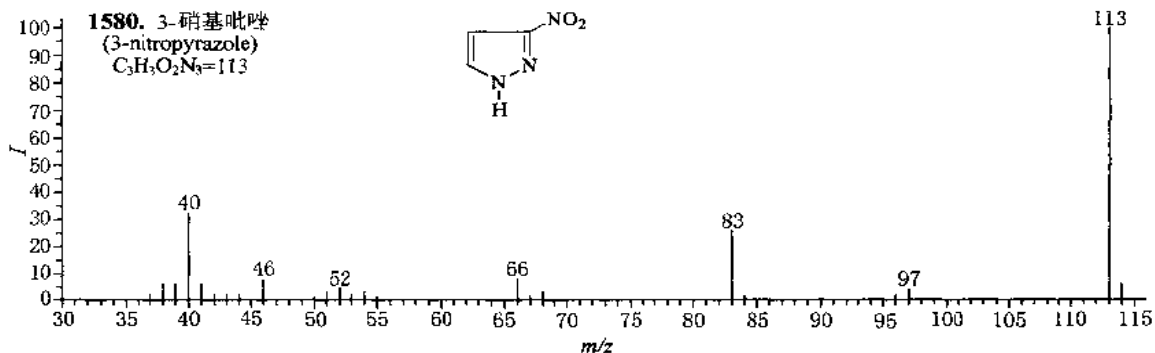
(5) 甲基和羧基邻位取代的吡啶 (1582) 有两条裂解途径, 即  $M-OH-CHN-CO$  和  $M-H_2O-CHN-CO$ 。









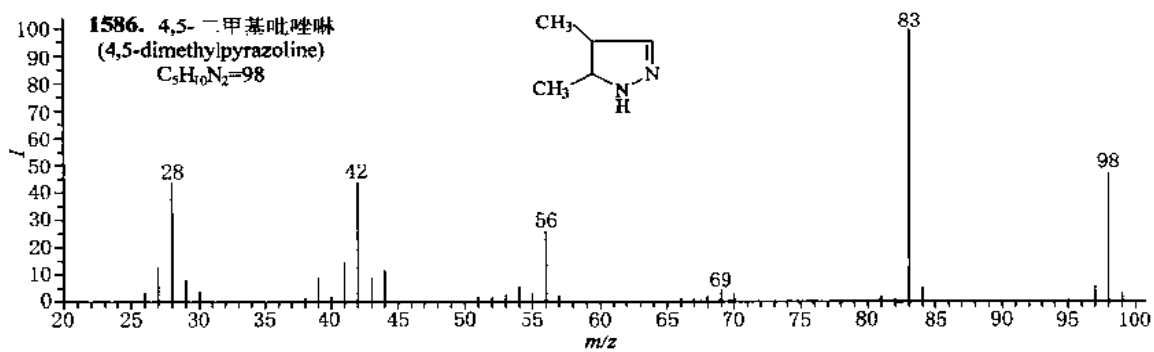
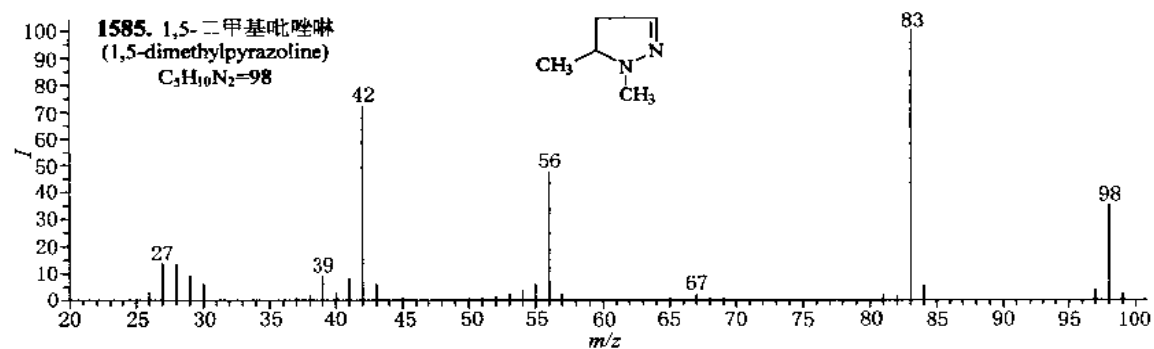
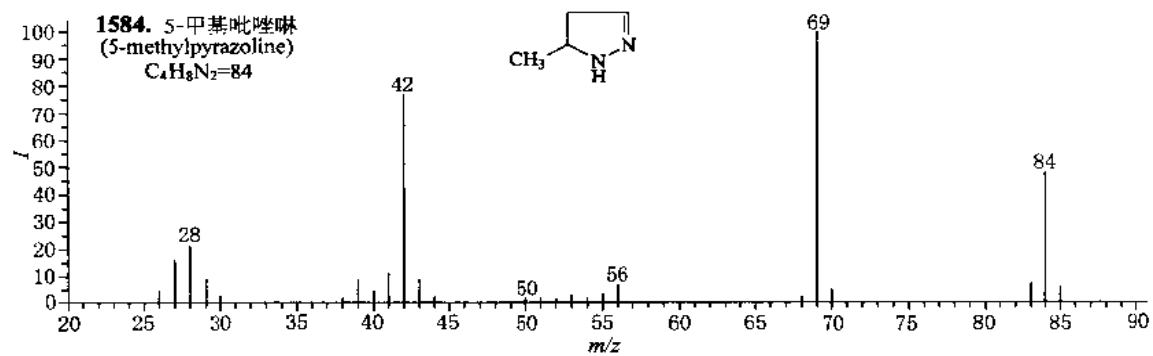
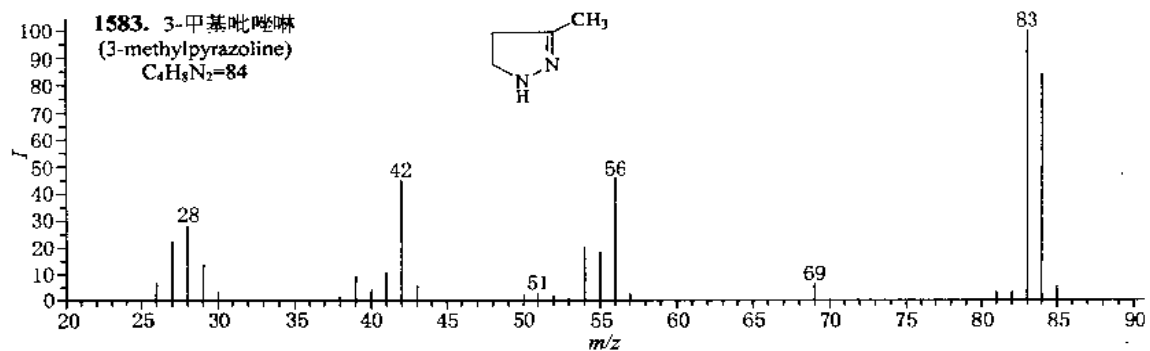


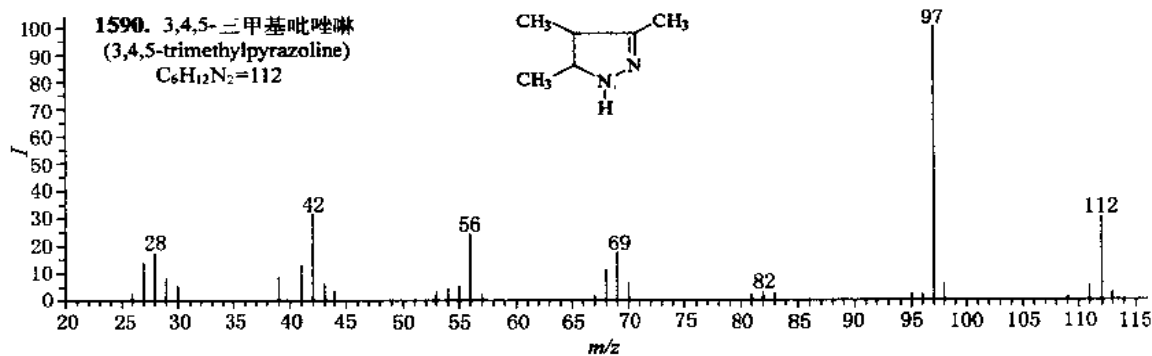
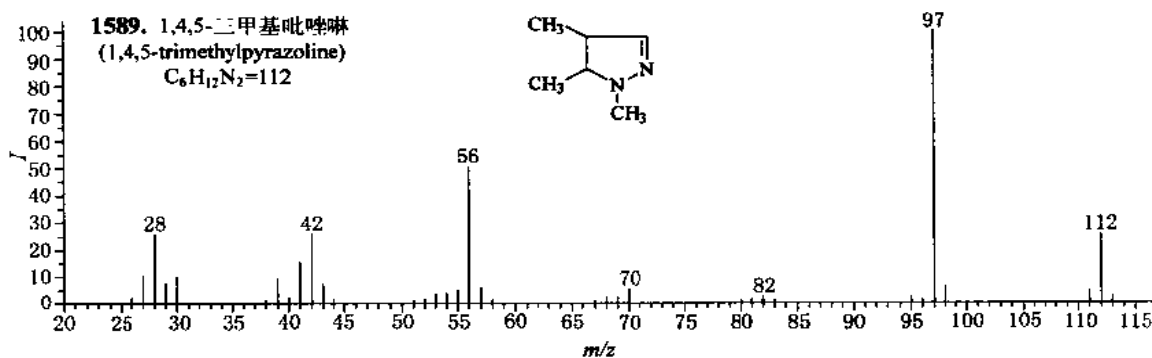
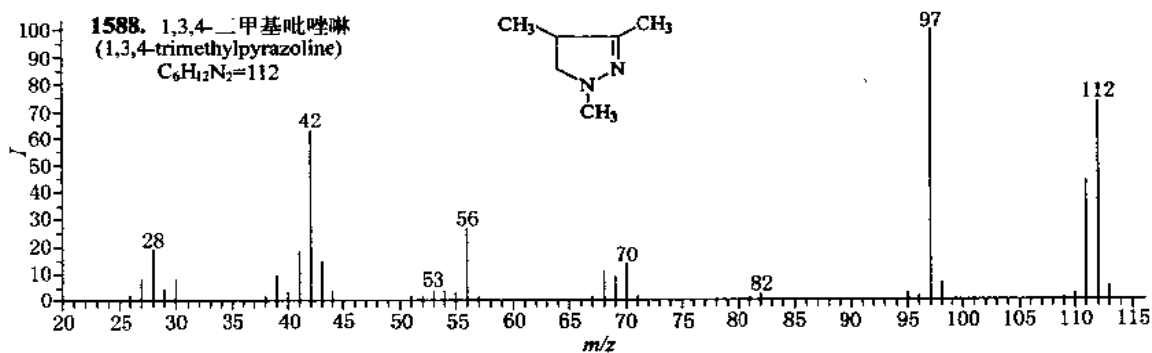
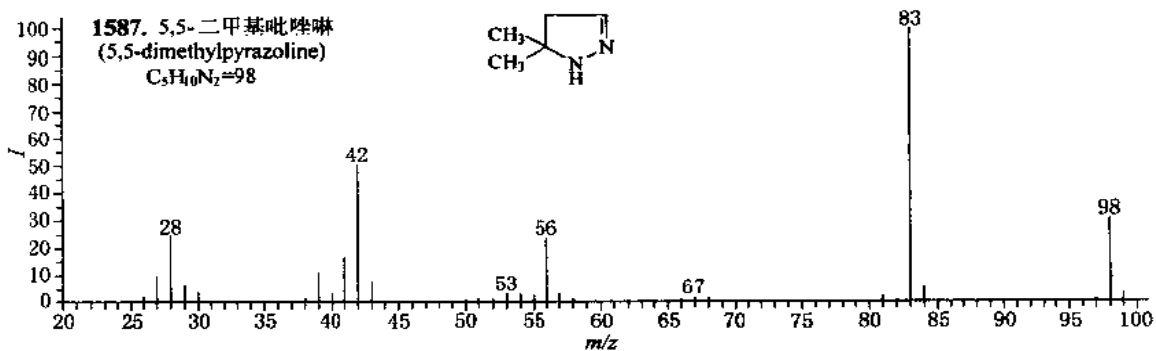
#### 四、吡唑啉类

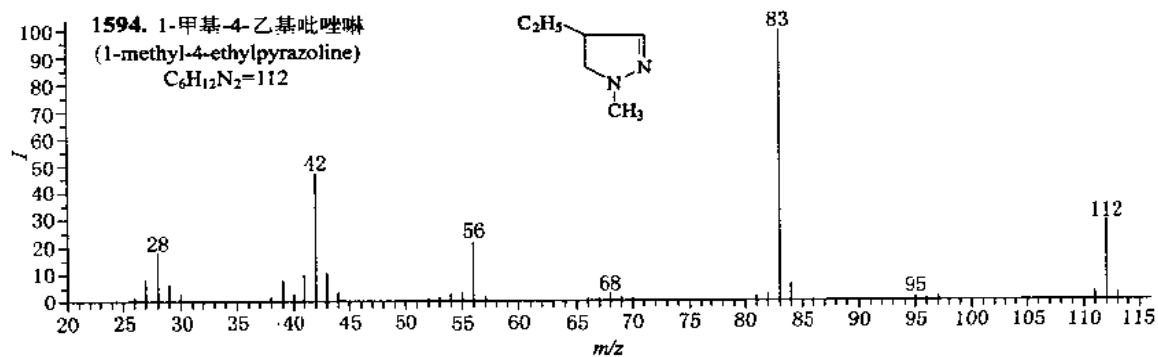
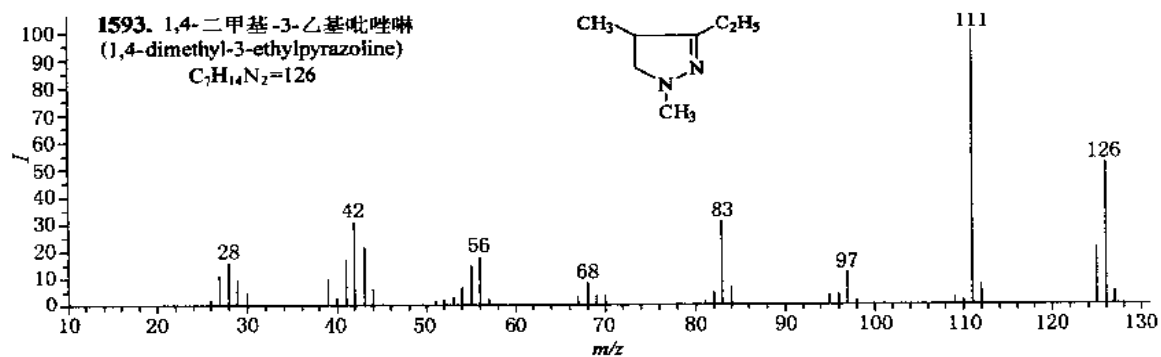
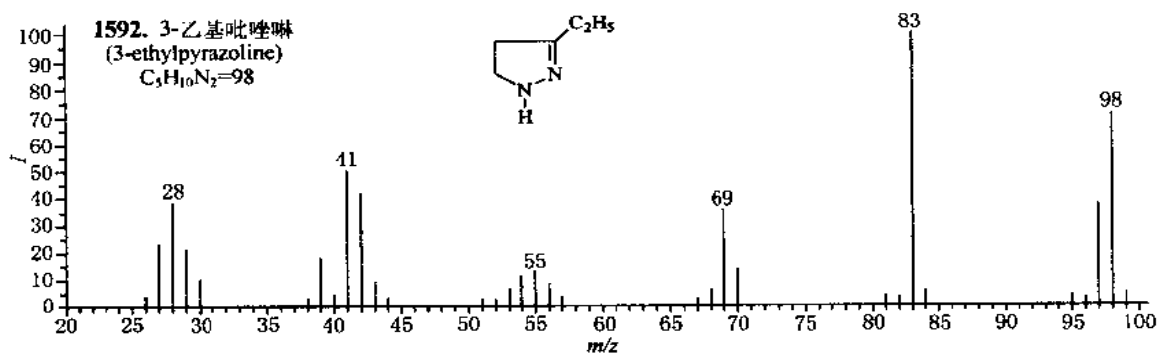
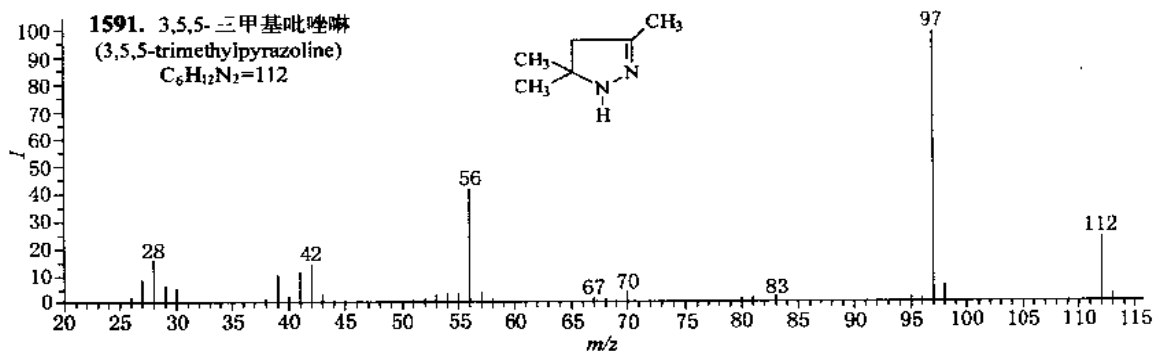
(1) 甲基吡唑啉类中的甲基与双键相连者 (1583), 常有强的  $M-H$  离子, 然后是失去  $CHN$ 。甲基与氮原子邻位者 (1584~1587, 1589~1591) 或  $N$ -甲基取代者 (1588, 1589),  $M-CH_3$  离子很强, 然后也是失去  $CHN$  或  $CH_3CN$ , 后者的离子  $m/z$  42 很强, 它具有  $CH_3N^+ \equiv CH$  的结构。

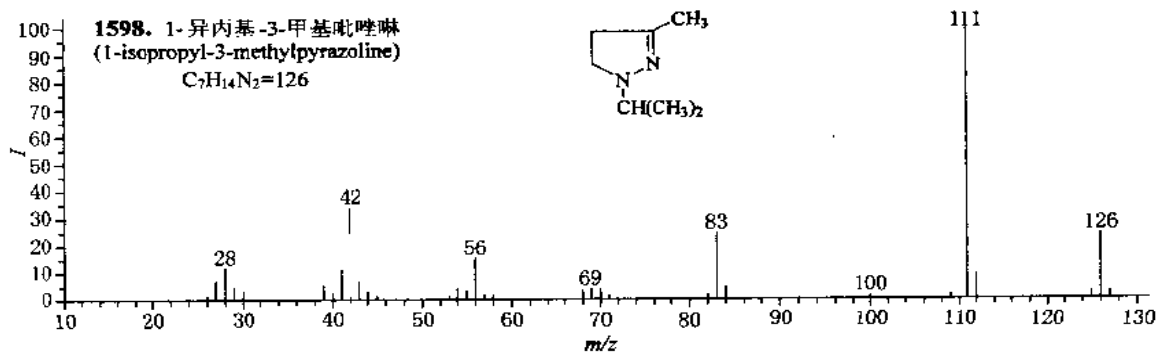
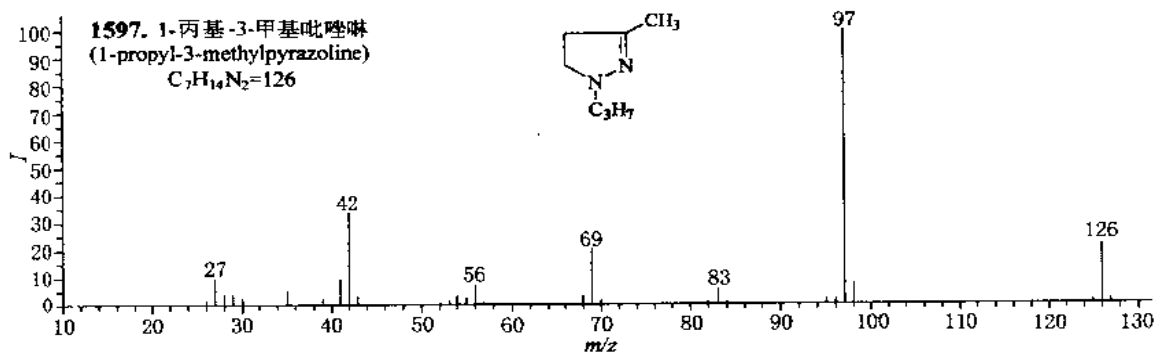
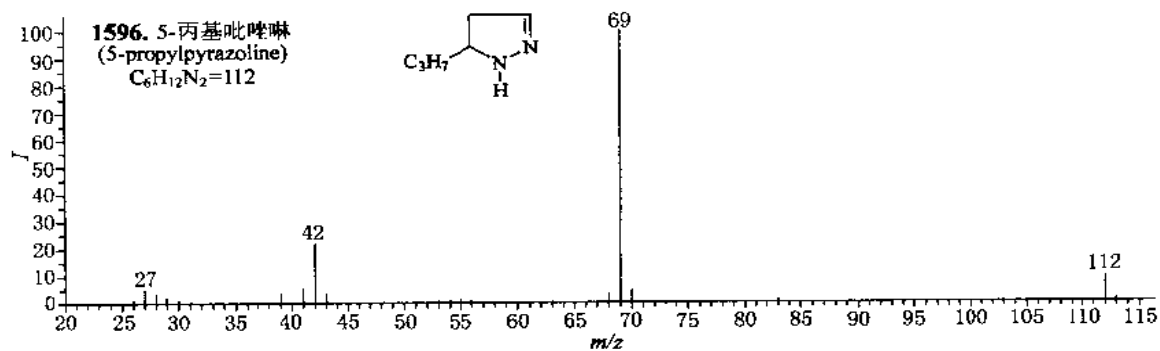
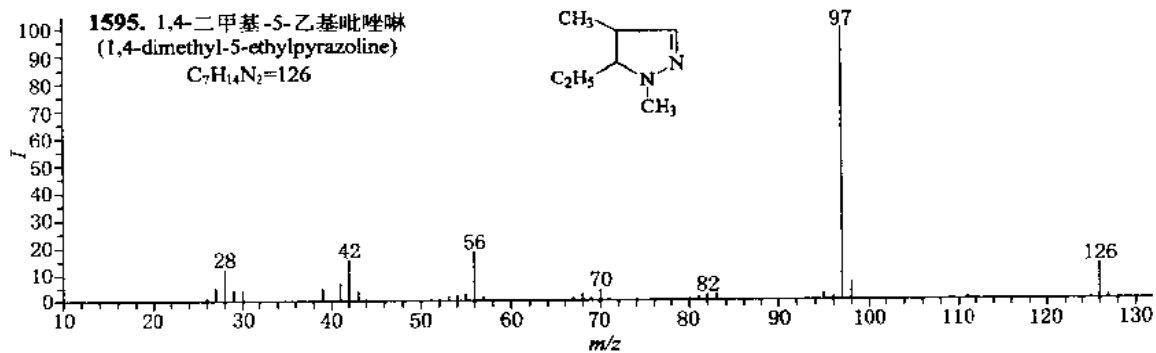
(2) 乙基取代的吡唑啉类, 乙基连在双键或氮上者 (1592, 1593),  $M-CH_3$  离子很强; 连在单键上者 (1594, 1595),  $M-C_2H_5$  离子很强。丙基取代者 (1596, 1597) 情况相同, 前者失去乙基, 后者失去丙基。异丙基取代者 (1598), 前者失去甲基, 后者失去异丙基。

(3) 吡唑啉酮类 (1599~1603) 增加了  $M-CO$  或  $M-CHO$  离子。

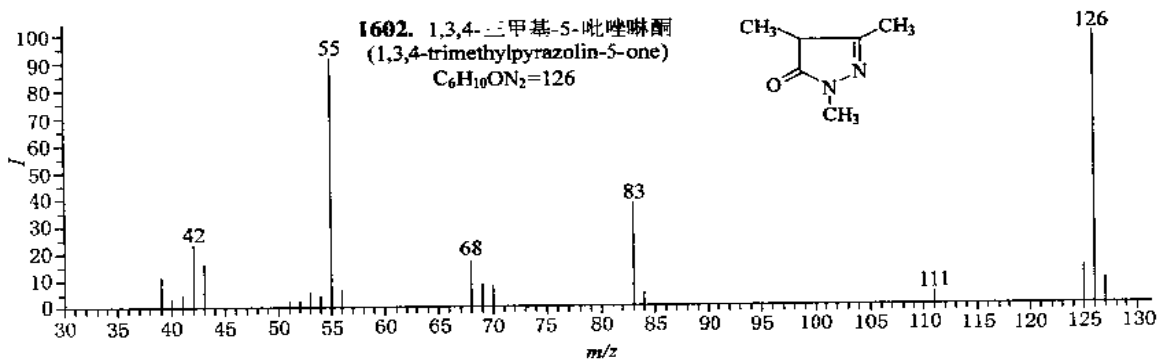
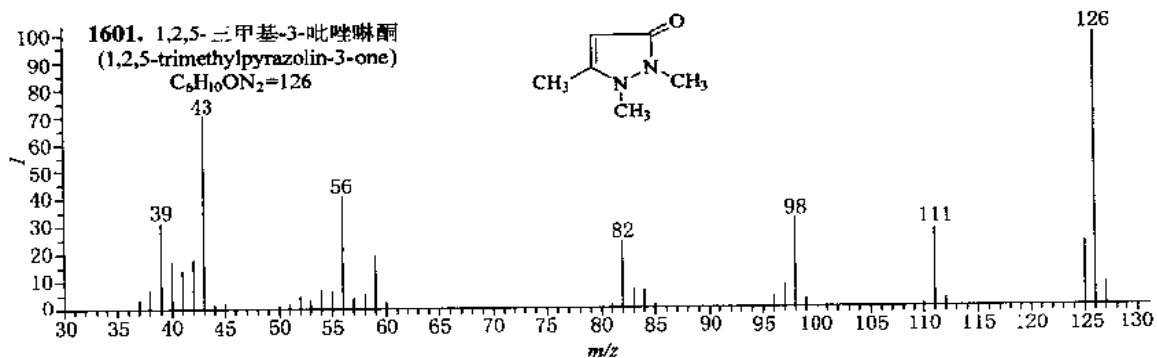
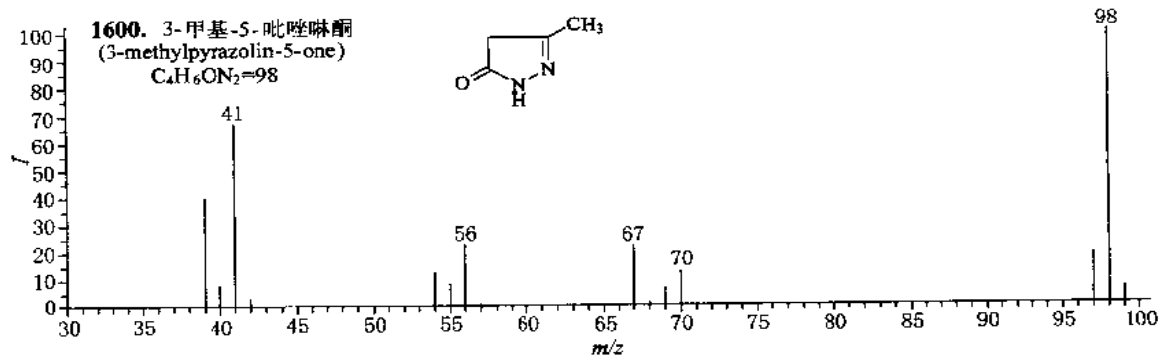
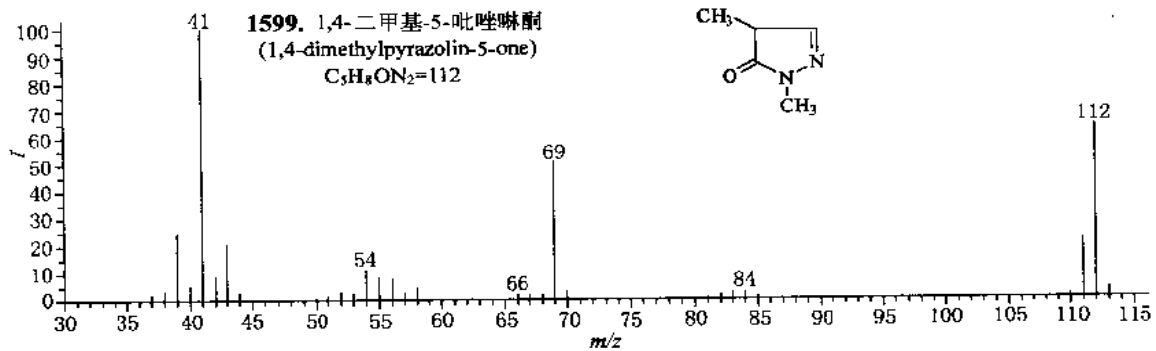


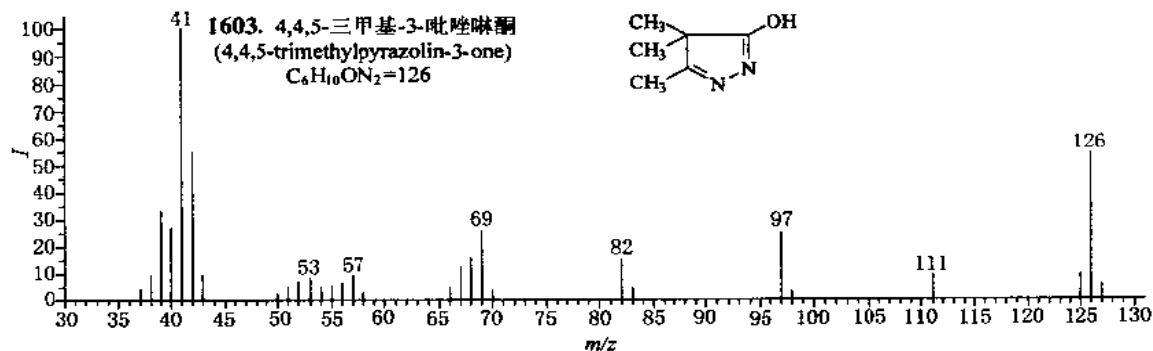












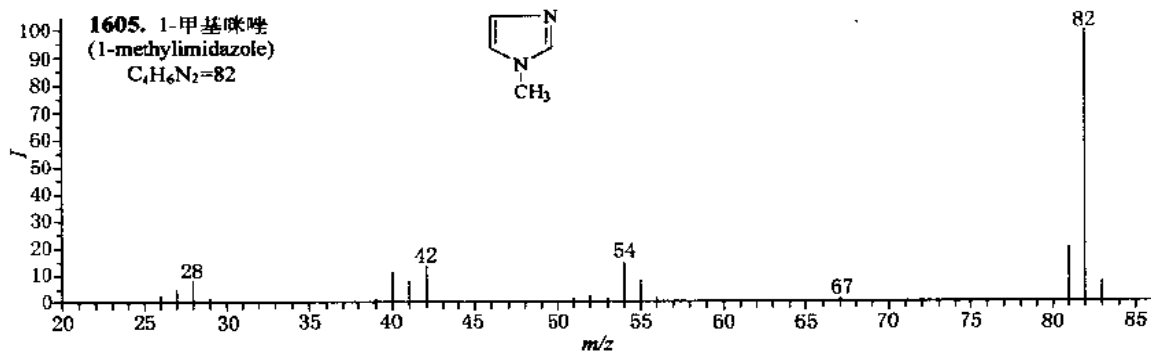
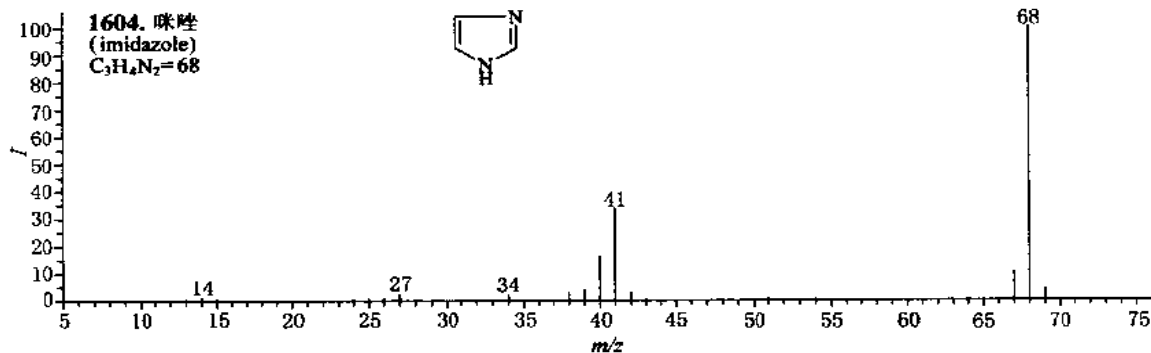
### 五、咪 唑 类

(1) 咪唑 (1604) 本身的裂解是  $M-CHN$ , 单甲基取代的咪唑类 (1605~1607) 主要裂解是  $M-H-CHN$  和  $M-CHN$ , 二甲基取代物 (1608, 1609) 还有  $M-CH_3CN$  和  $M-H-CH_3CN$  离子。乙基取代物 (1610~1612) 有  $M-CH_3-CHN$  和  $M-C_2H_4-CHN$  的裂解途径。羟甲基取代物 (1613) 又增加了  $M-CH_2O-CHN$  的裂解途径。

(2) 乙酰基咪唑 (1615) 有  $M-CH_3-CO-CHN$  的裂解途径。

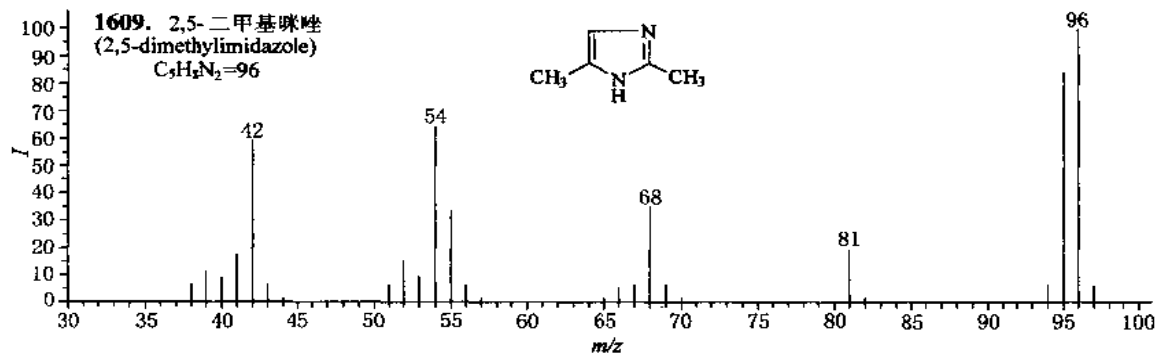
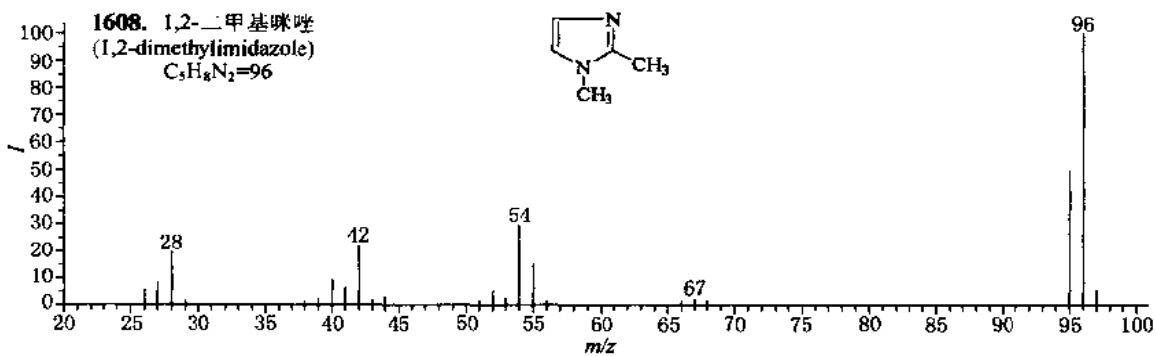
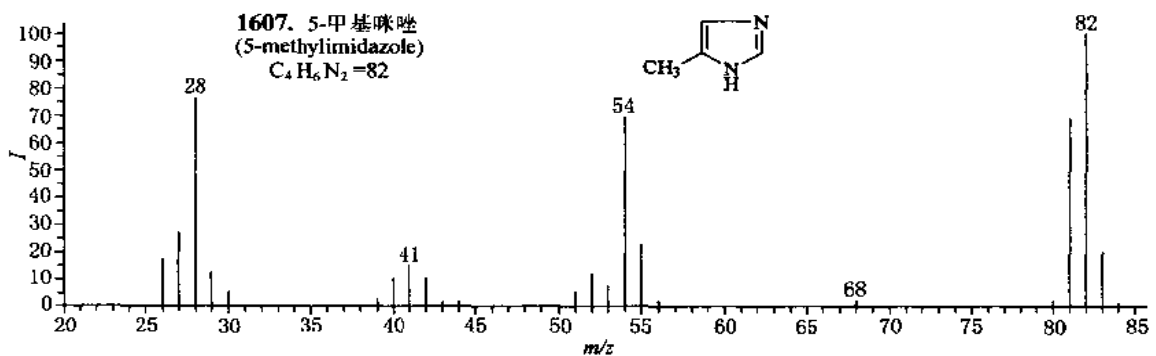
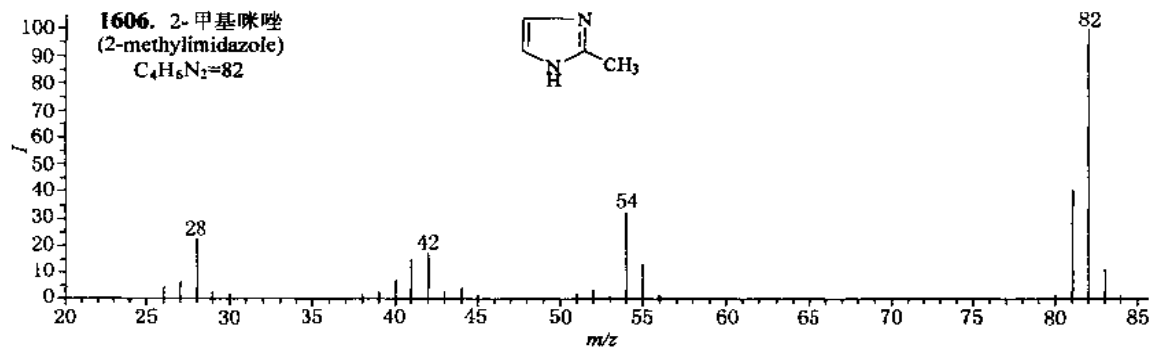
(3) 羧基咪唑类 (1616, 1617) 的裂解有  $M-OH$ ,  $M-H_2O$ ,  $M-CO_2$ ,  $M-COOH$ ,  $M-CO_2-CHN$  和  $M-COOH-CHN$ 。

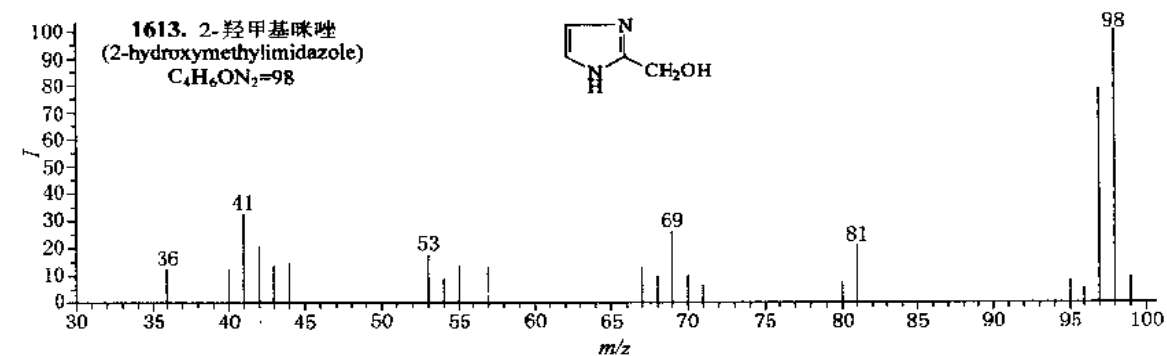
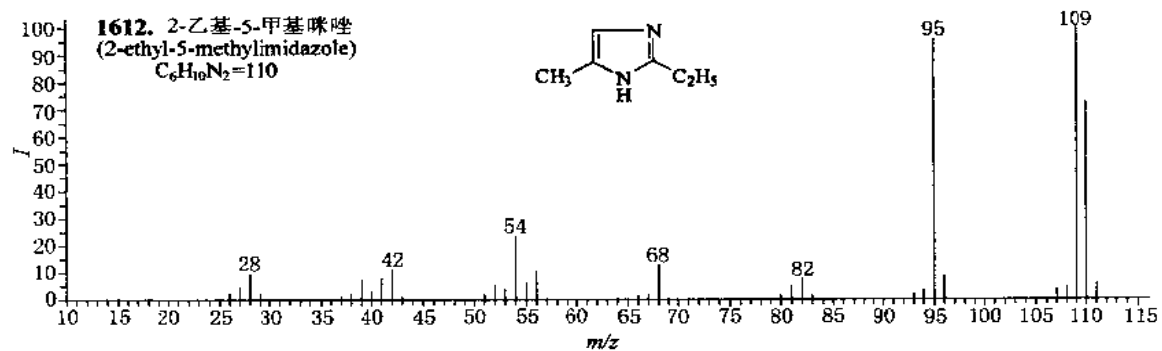
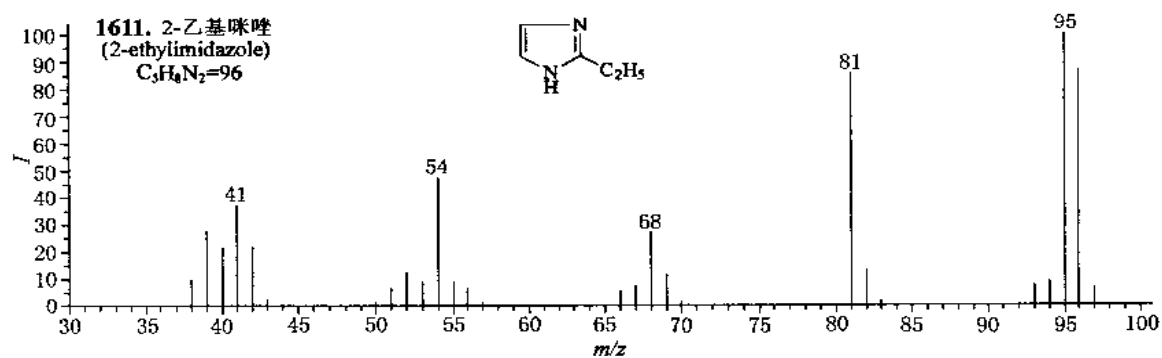
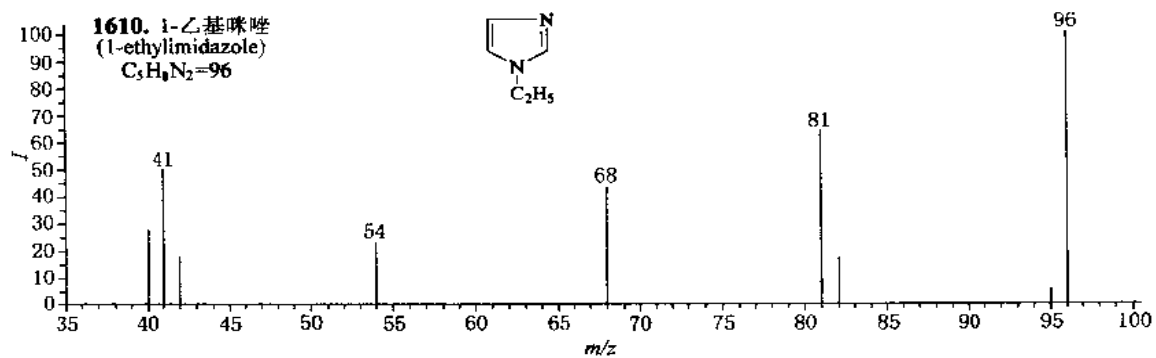
(4) 甲氧羰基咪唑类 (1618, 1619) 的裂解途径是  $M-OCH_3-CHN-CO$  或  $M-OCH_3-CO-CHN$ 。

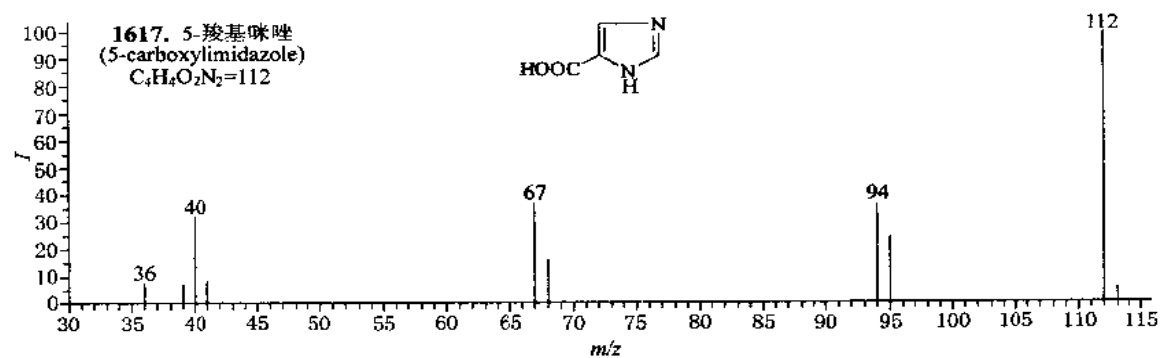
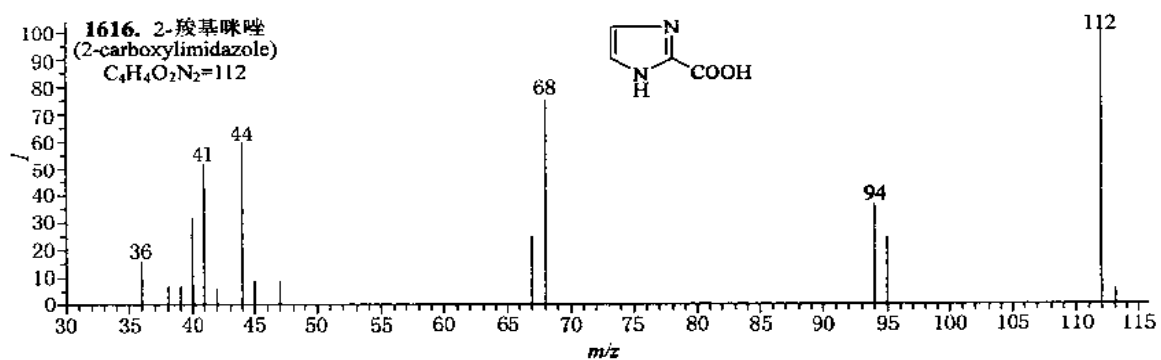
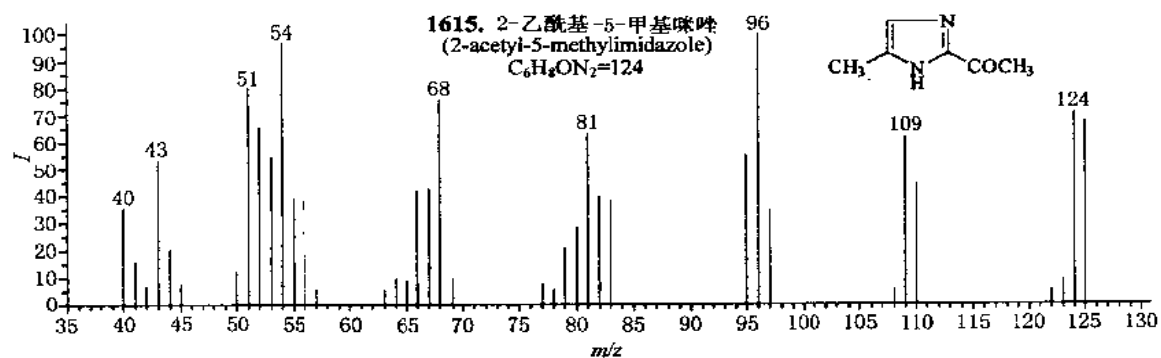
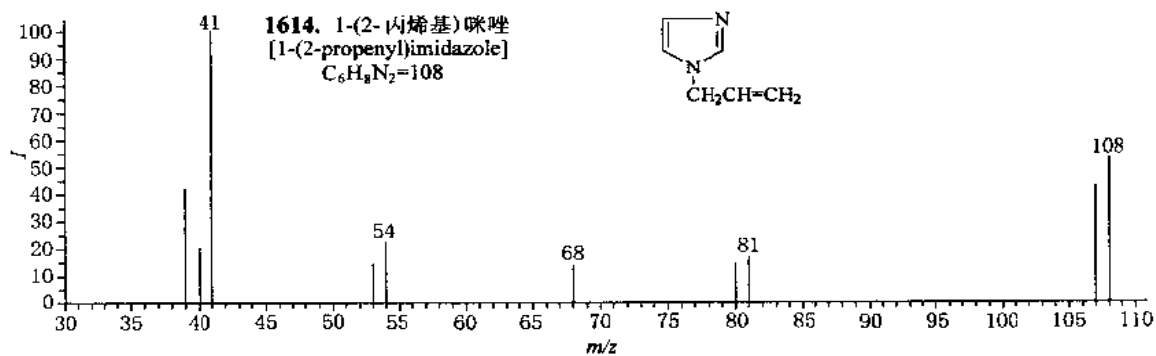


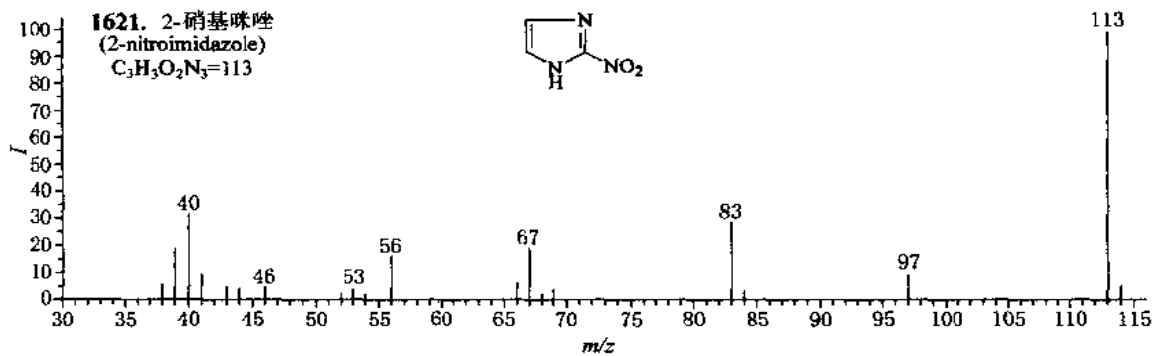
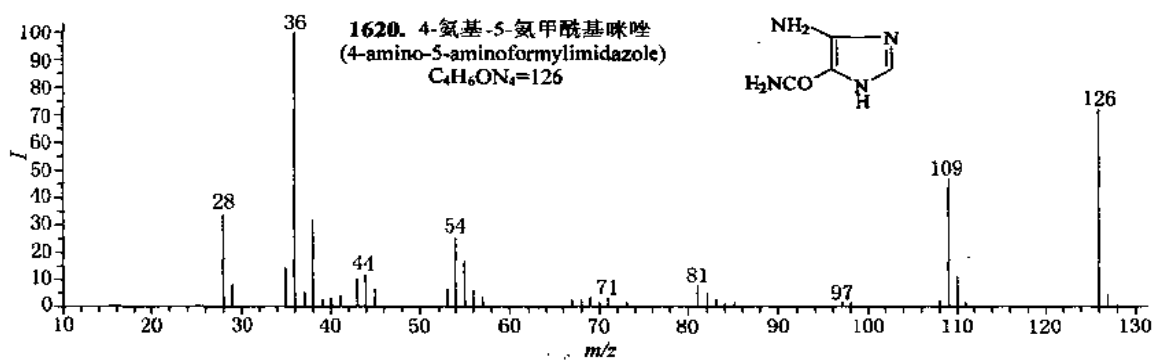
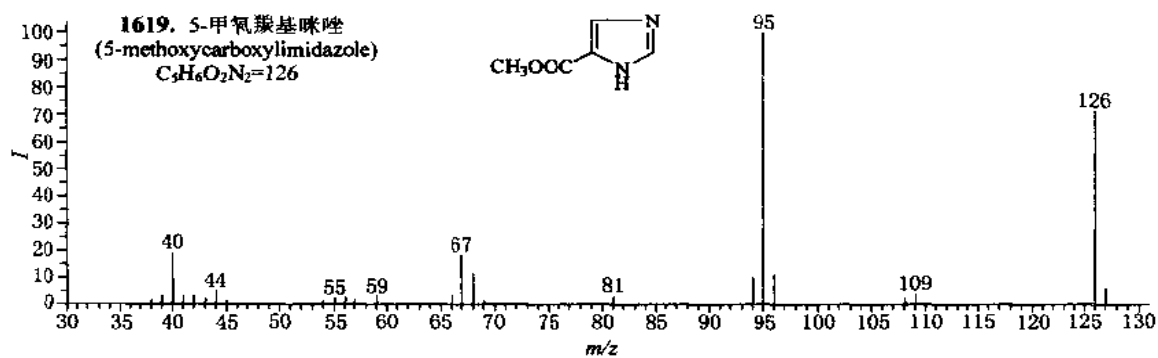
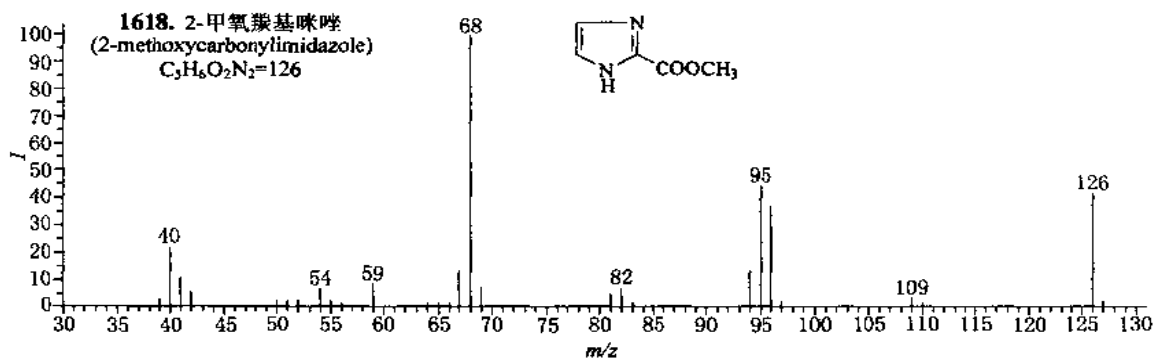
(5) 4-氨基-5-氨甲酰基咪唑 (1620) 有两条裂解途径, 即  $M-NH_2-CO-CHN$  和  $M-NH_2-CO-CHN$ 。

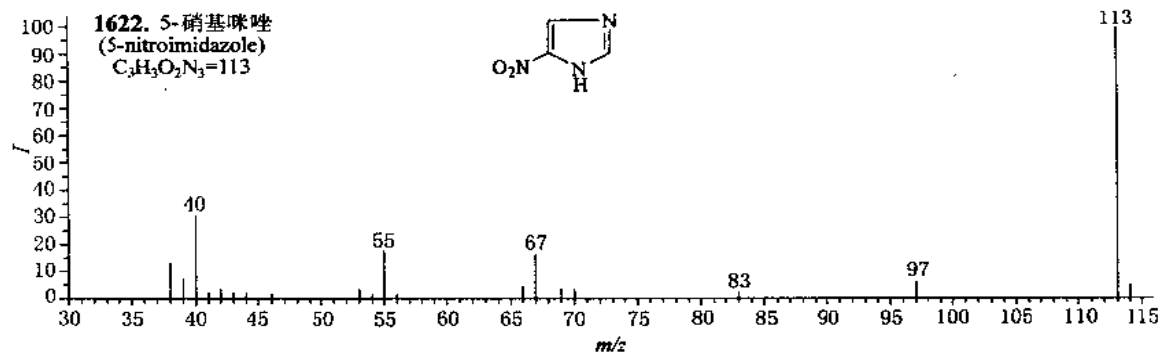
(6) 硝基咪唑类中的 2 位取代物 (1621) 的两条裂解途径是  $M-NO-CHN$  和  $M-NO_2-CHN$ , 5-硝基物 (1622) 的前一条裂解途径改为  $M-NO-CO$ 。







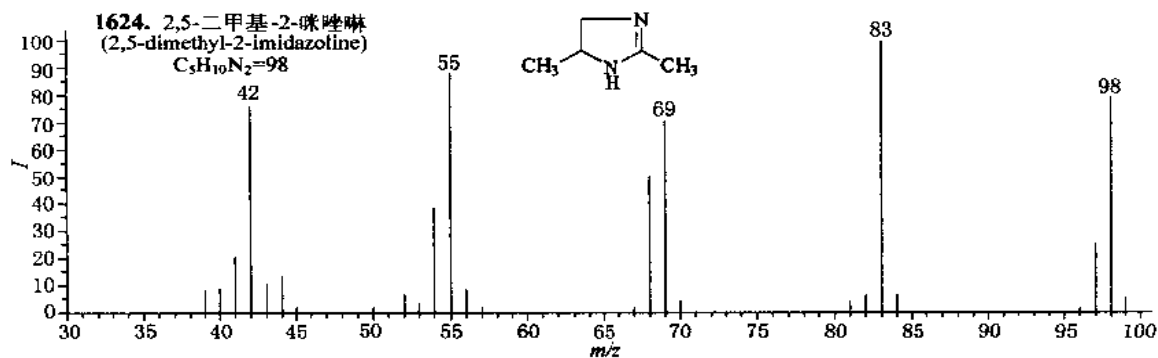
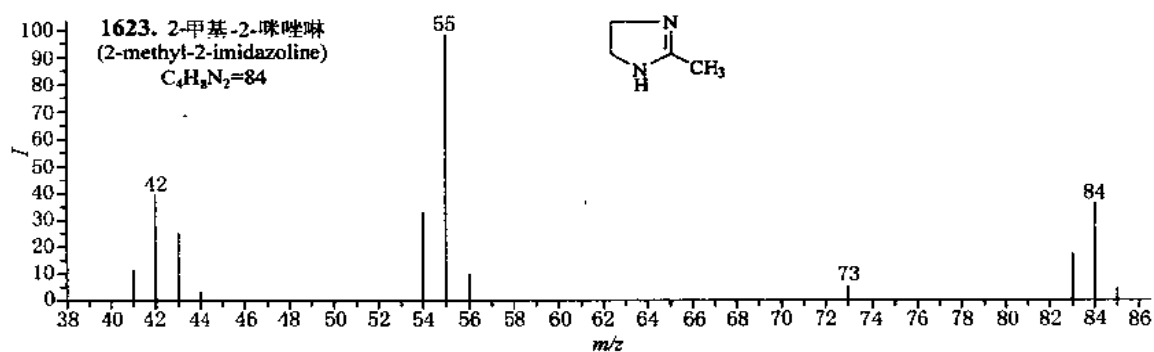


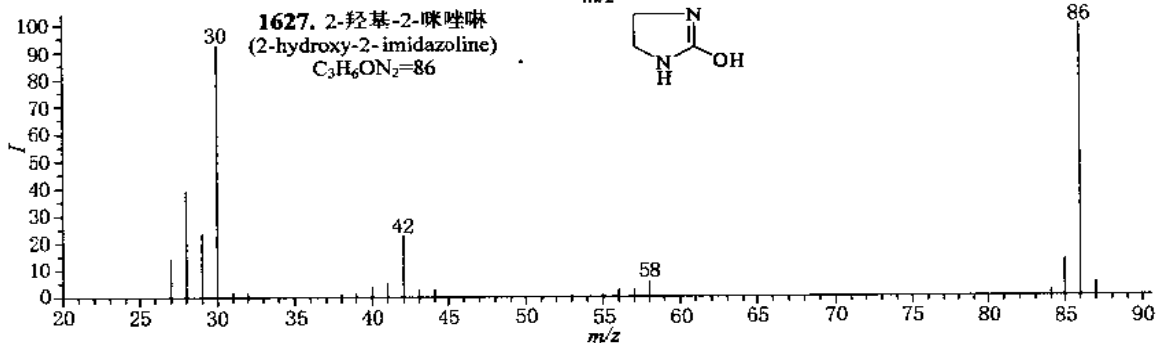
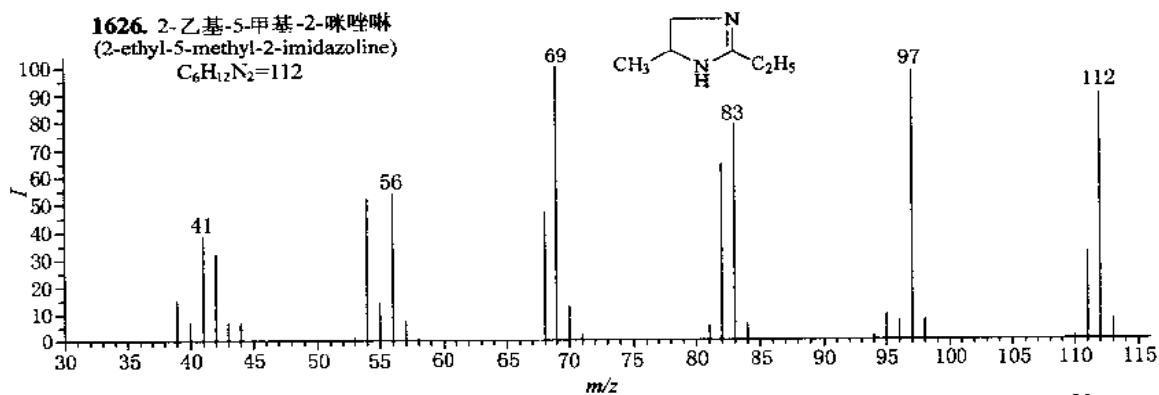
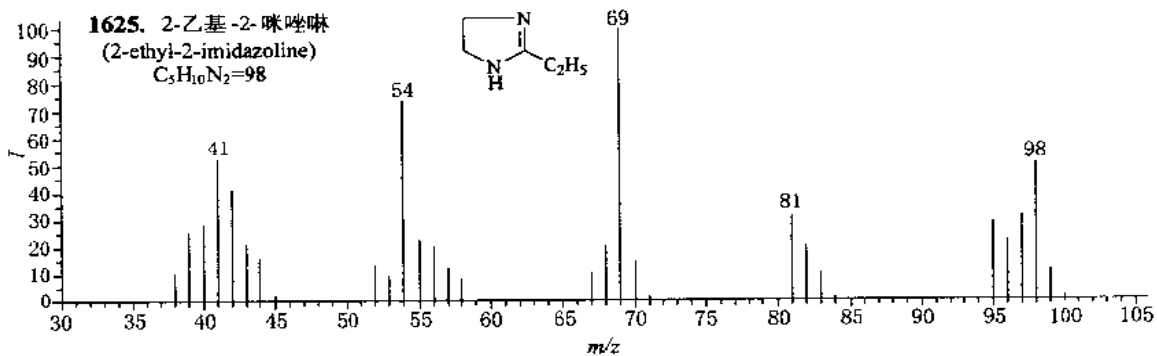


## 六、咪唑啉类

(1) 2-甲基-2-咪唑啉 (1623) 有  $M-H$ ,  $M-CH_2NH$  和  $M-CH_2NH_2$  离子, 二甲基取代物 (1624) 有  $M-CH_3$  和  $M-NHCHCH_3$  离子, 乙基咪唑啉类 (1625, 1626) 能失去乙基。

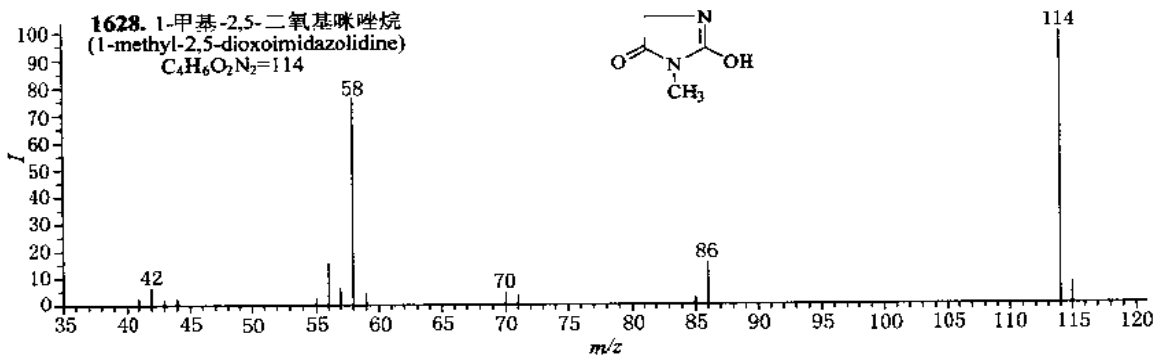
(2) 2-羟基-2-咪唑啉 (1627) 有  $M-CO$ ,  $M-NH\dot{C}OH$  和  $CH_2=N^+H_2$  离子。



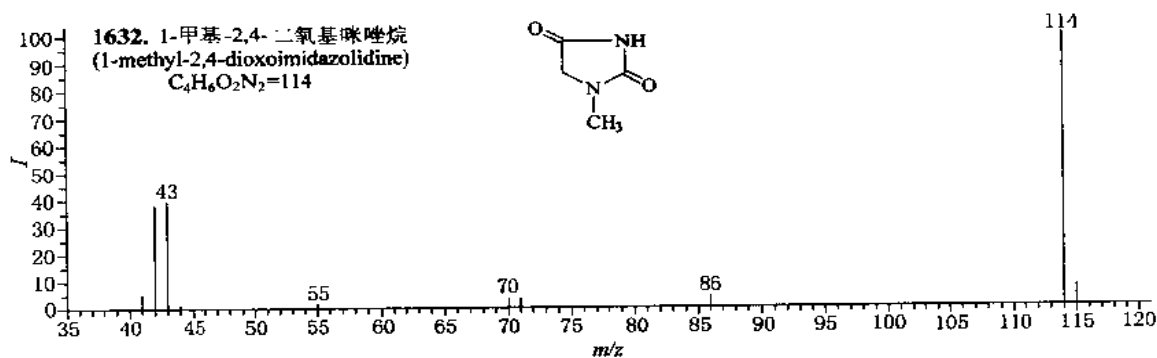
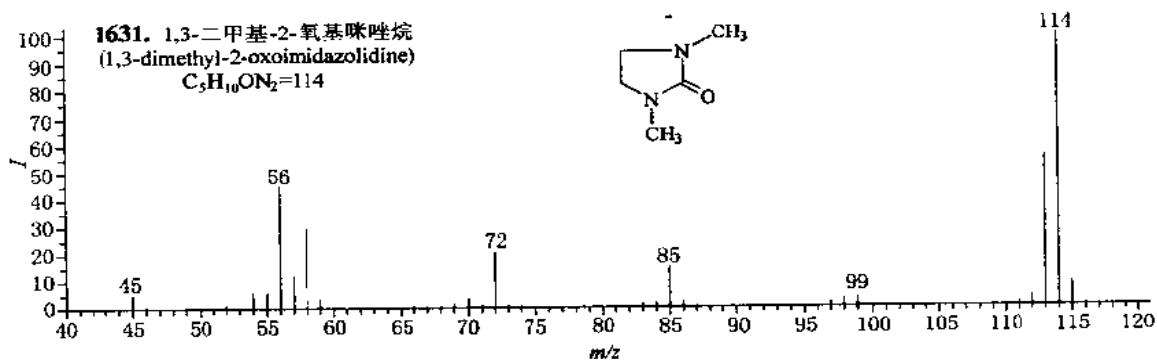
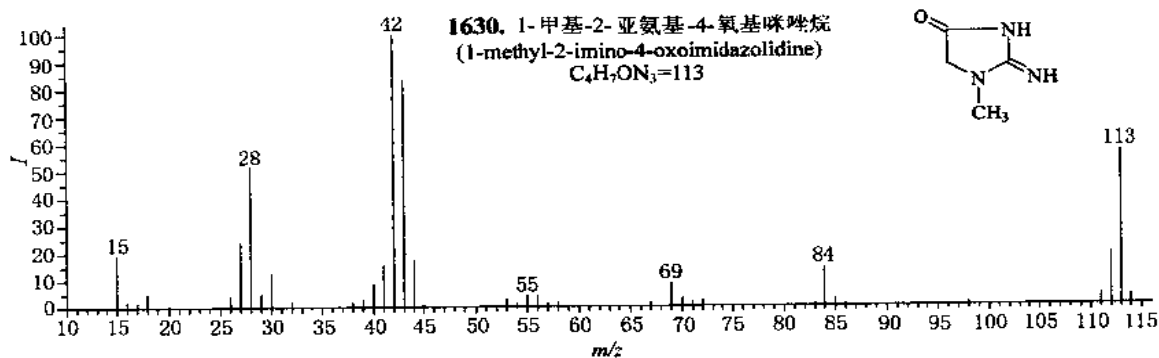
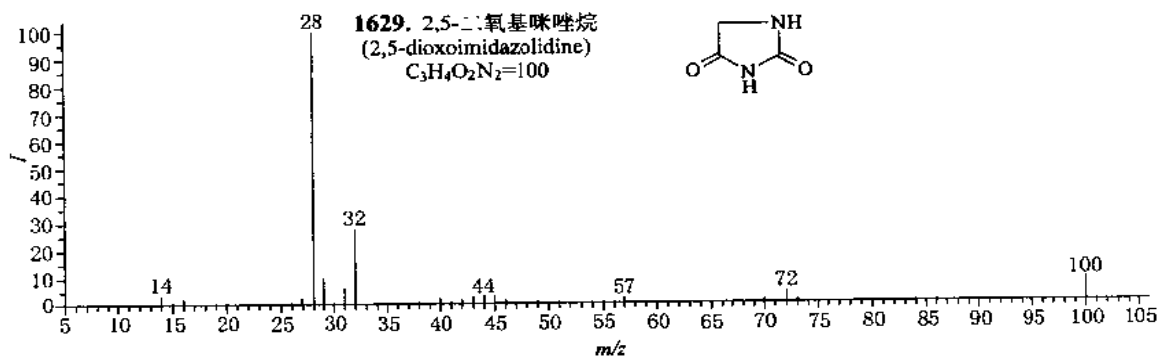


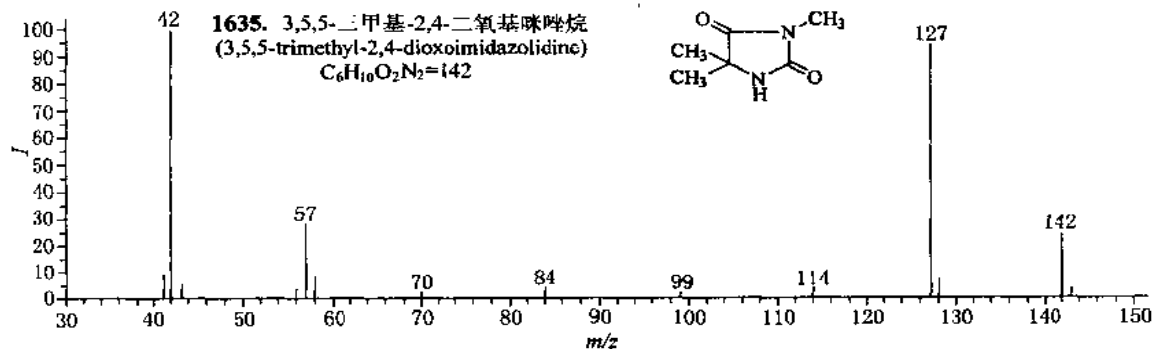
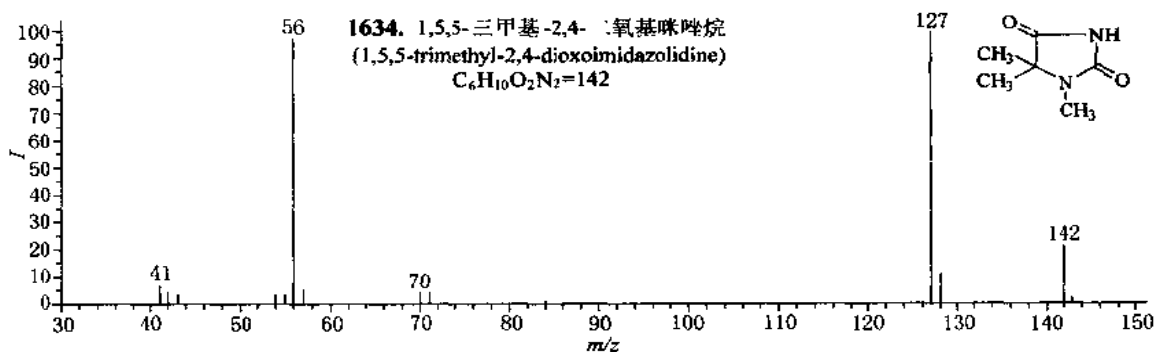
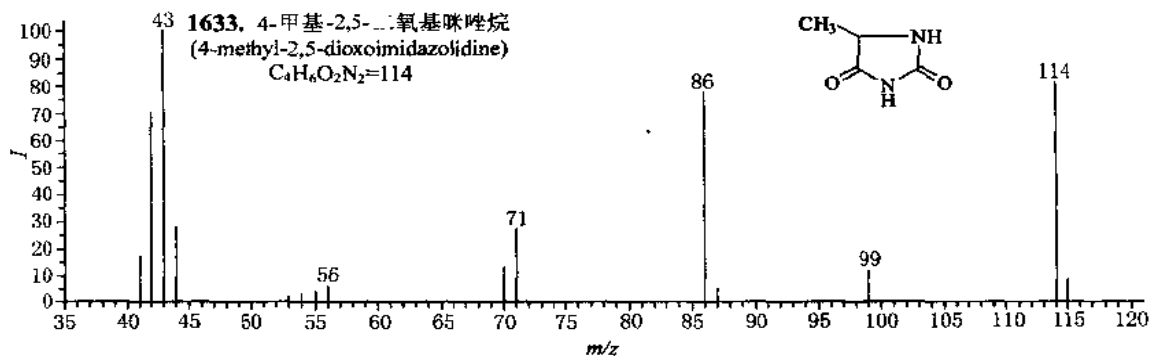
## 七、咪唑烷酮类

几个咪唑烷酮化合物 (1628~1635) 都有  $M-CO$  离子。



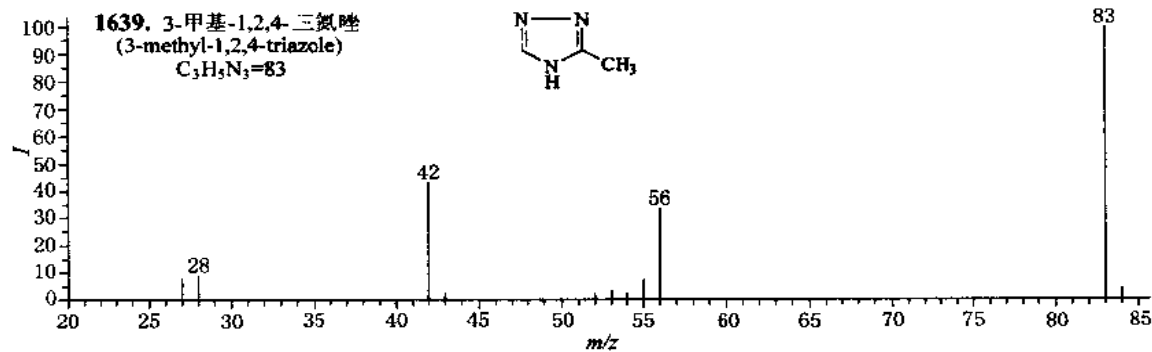
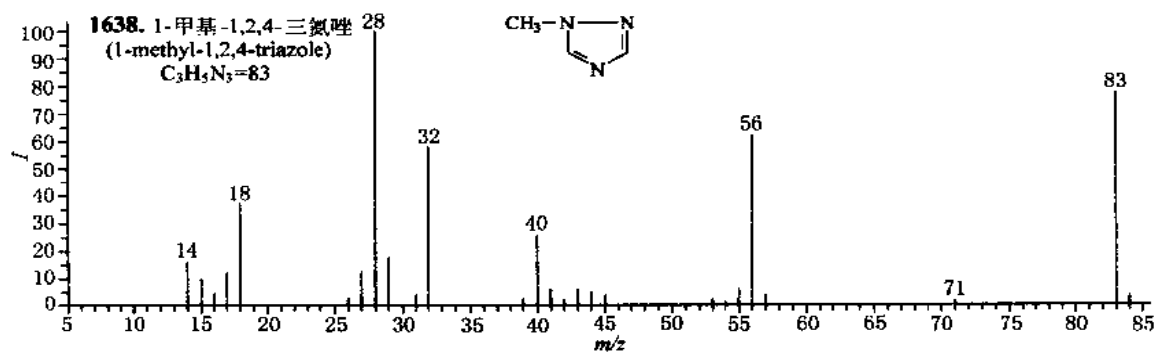
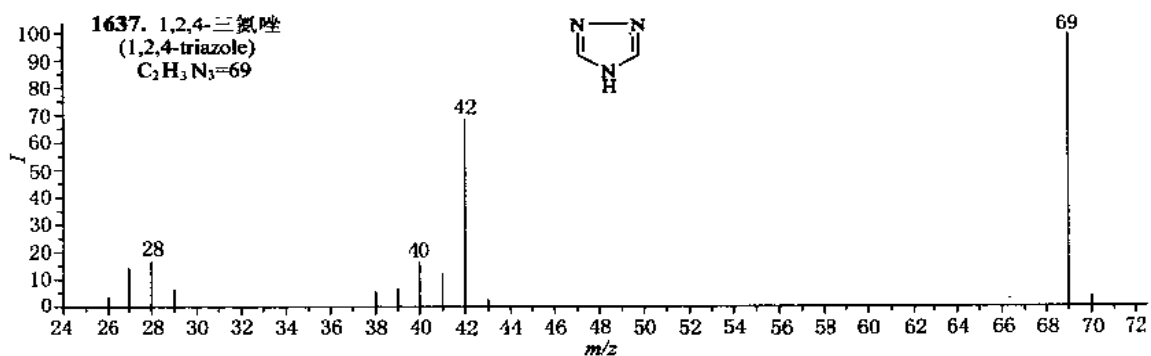
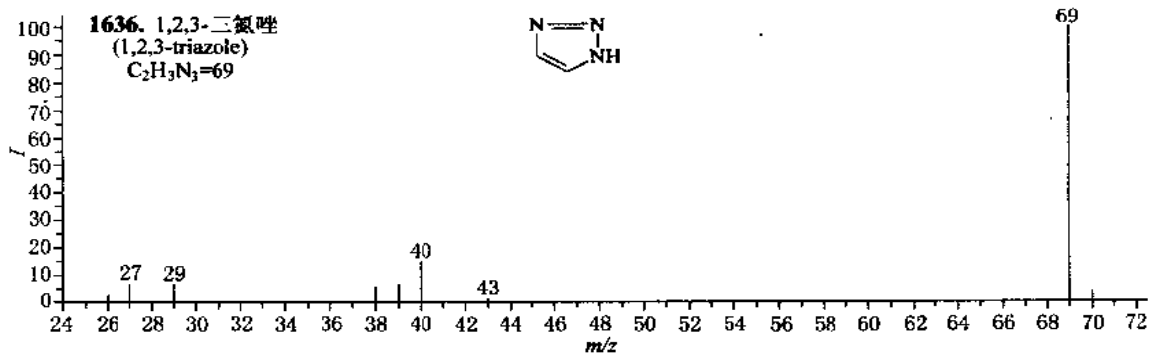


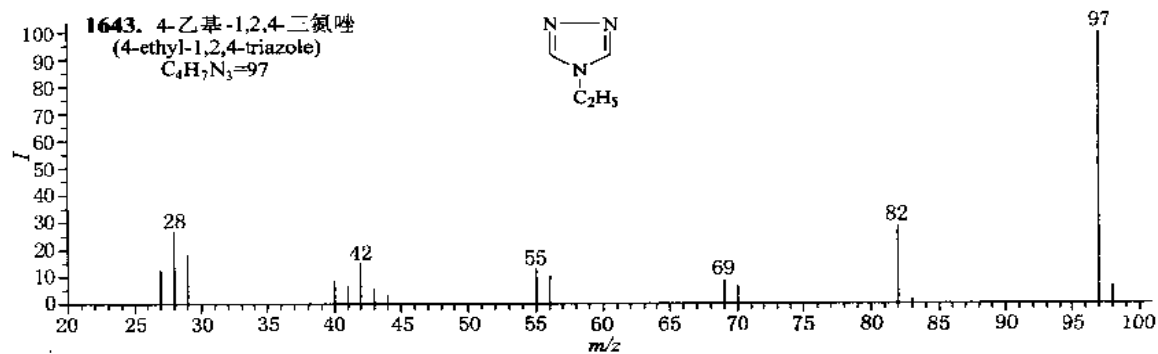
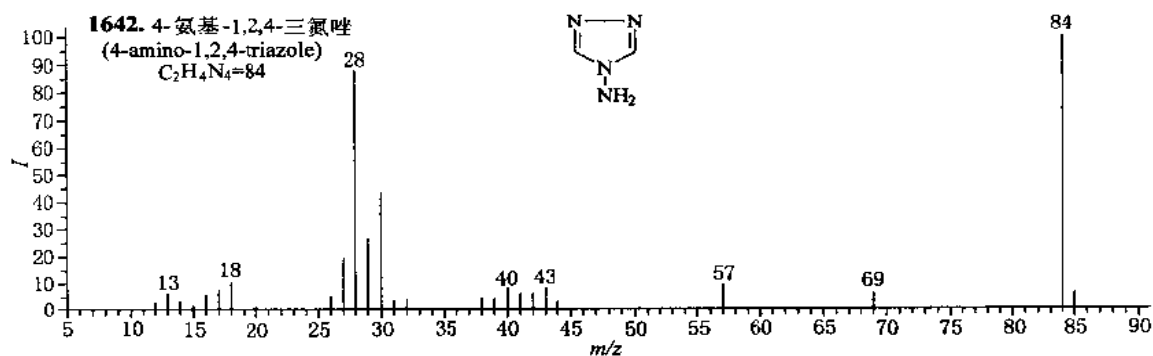
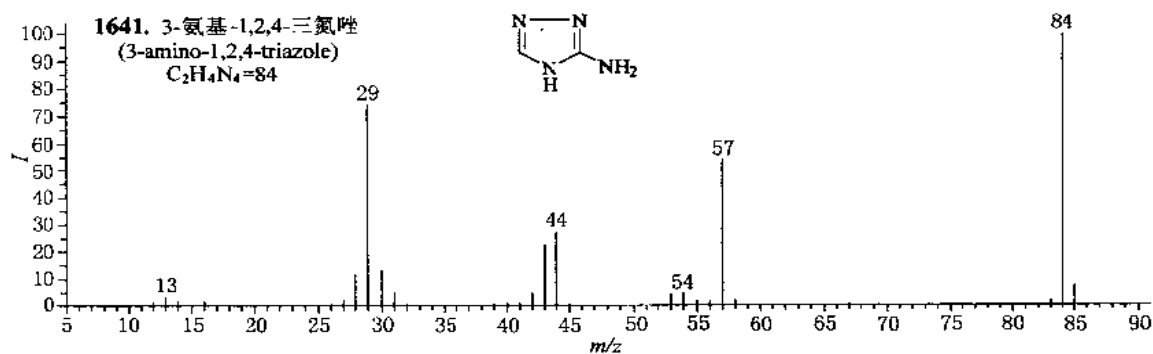
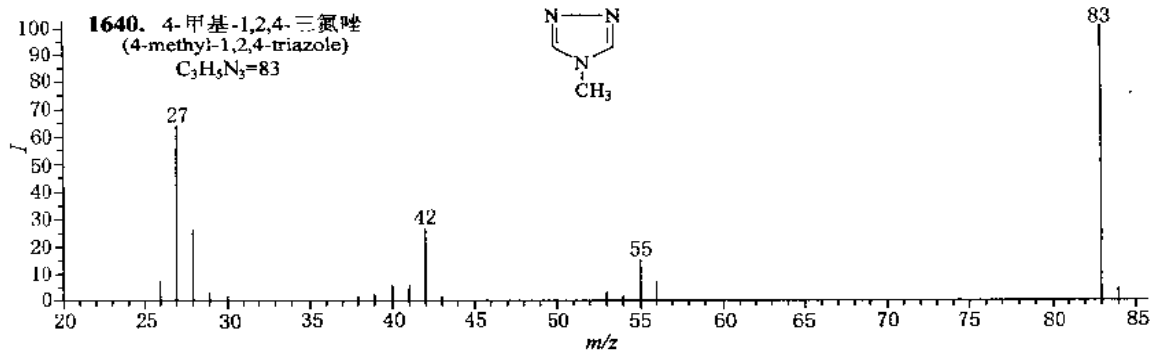


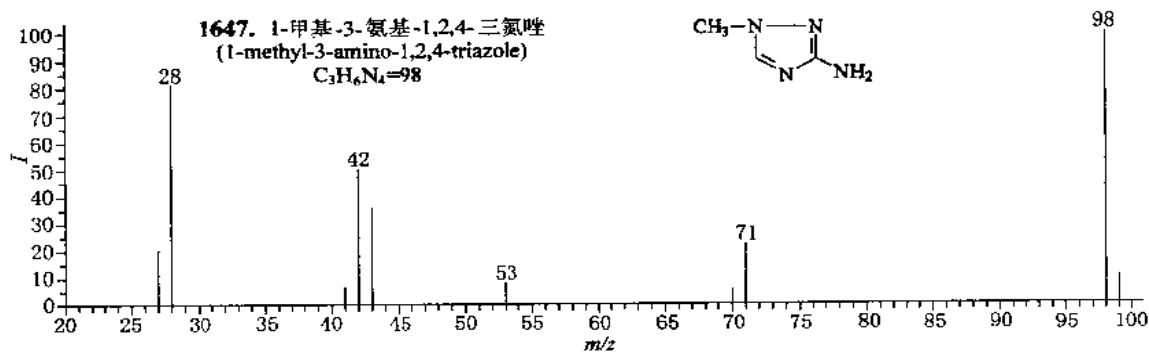
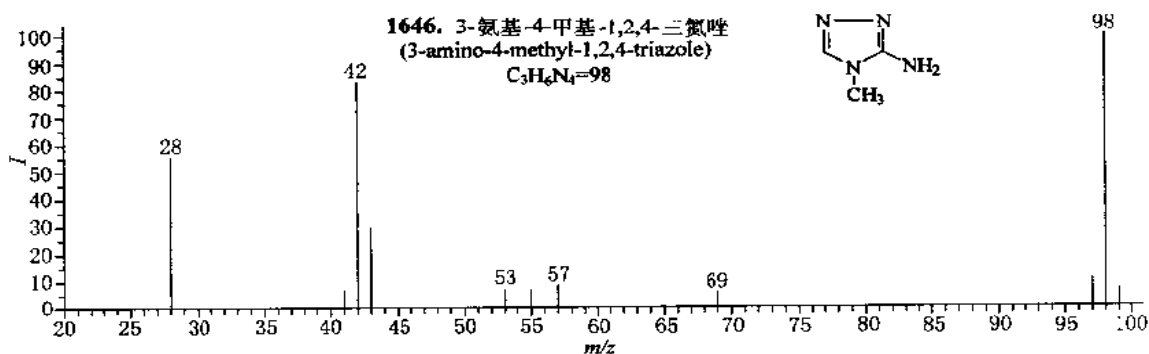
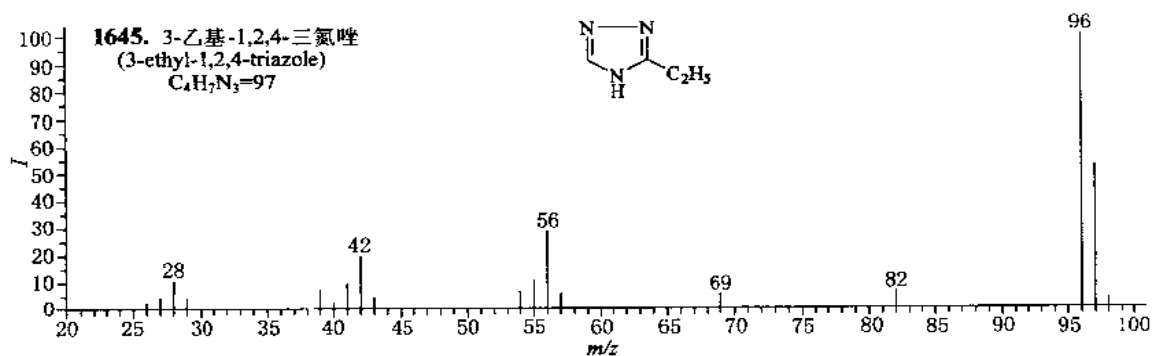
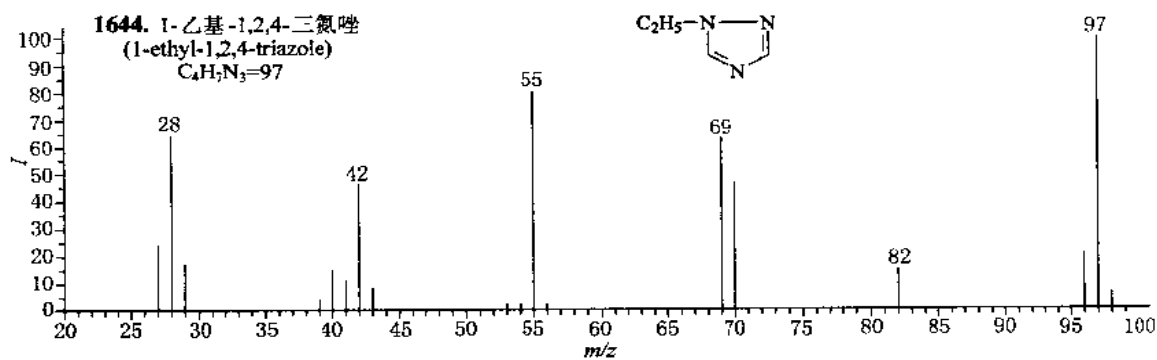


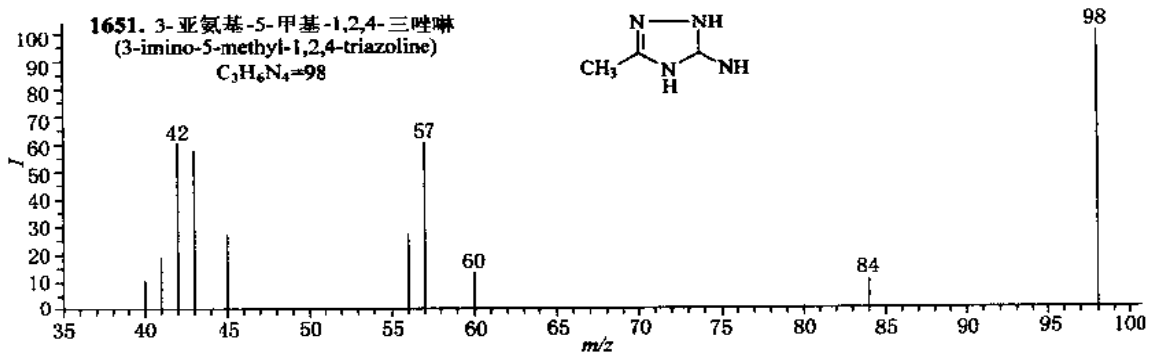
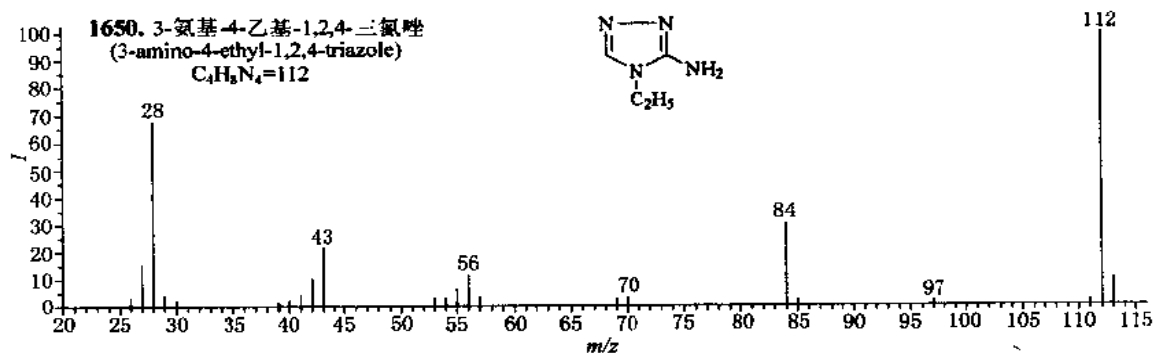
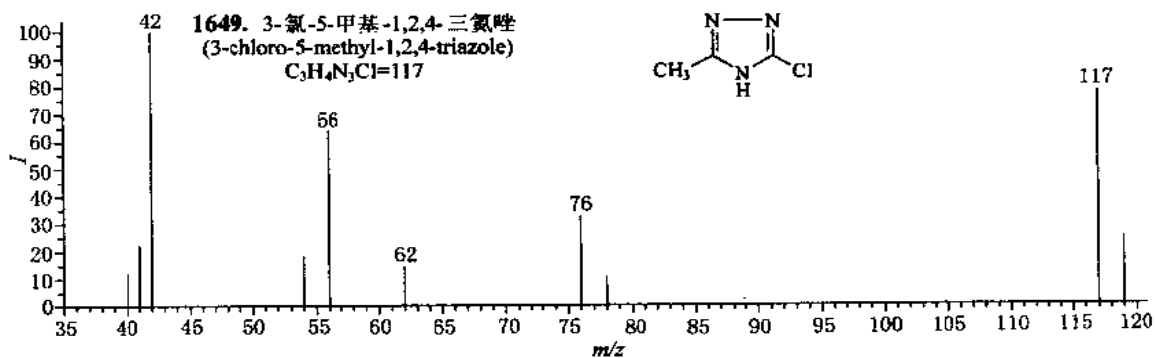
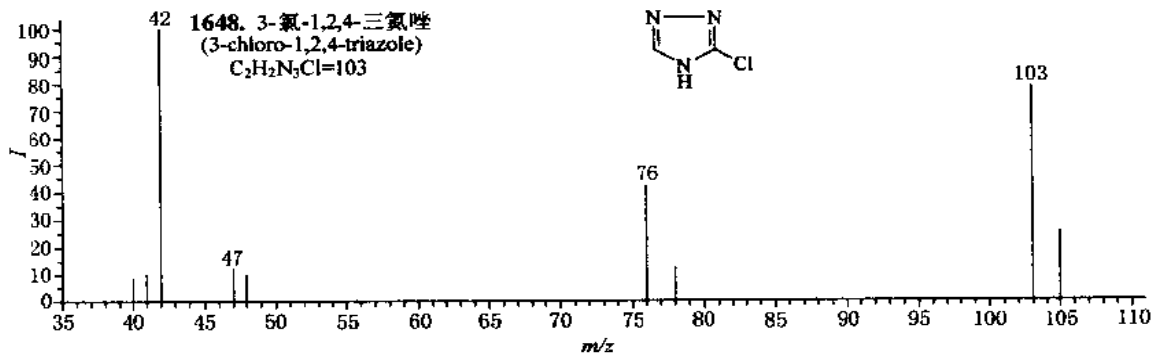
## 八、三唑类

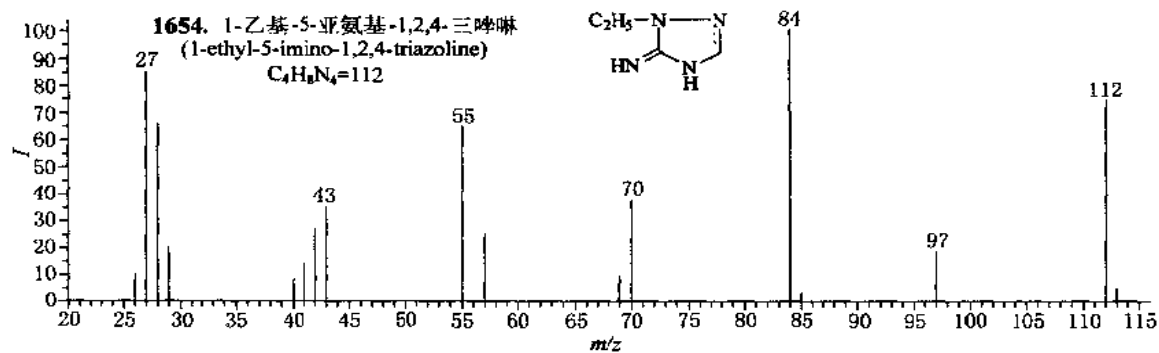
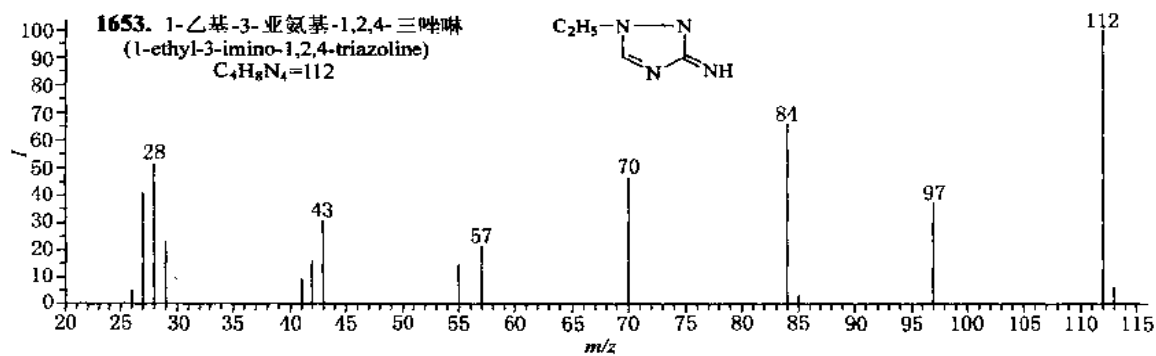
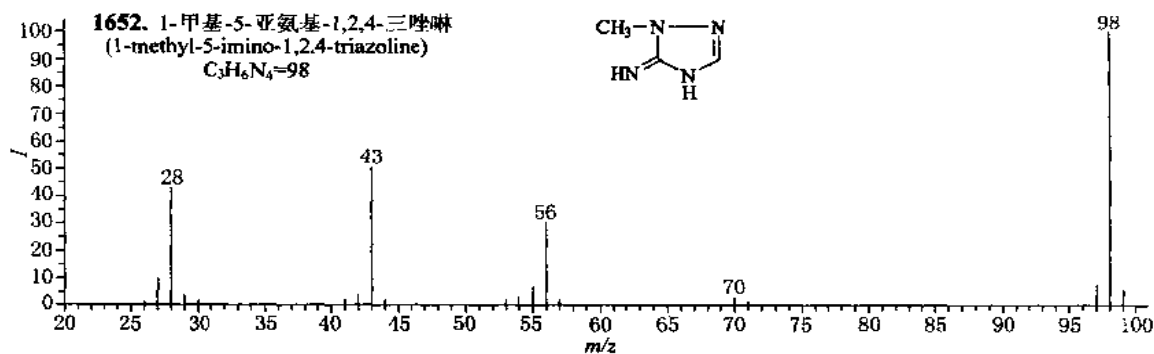
- (1) 三唑类 (1636~1642, 1646, 1647) 的主要裂解是  $M-CHN$ 。
- (2) 乙基三唑类 (1643~1645) 的主要裂解是  $M-CH_2-CHN$  和  $M-CHN$ , 有的出现  $M-C_2H_4$  离子。
- (3) 氯代三唑类 (1648, 1649) 的裂解仍然是  $M-CHN$ 。
- (4) 不能失去  $CHN$  的甲基取代三唑类, 常能失去  $CH_2C\equiv N$ 。
- (5) 具有亚氨基取代的三唑类化合物 (1651~1654) 常能失去  $NH-C=NH$ 。





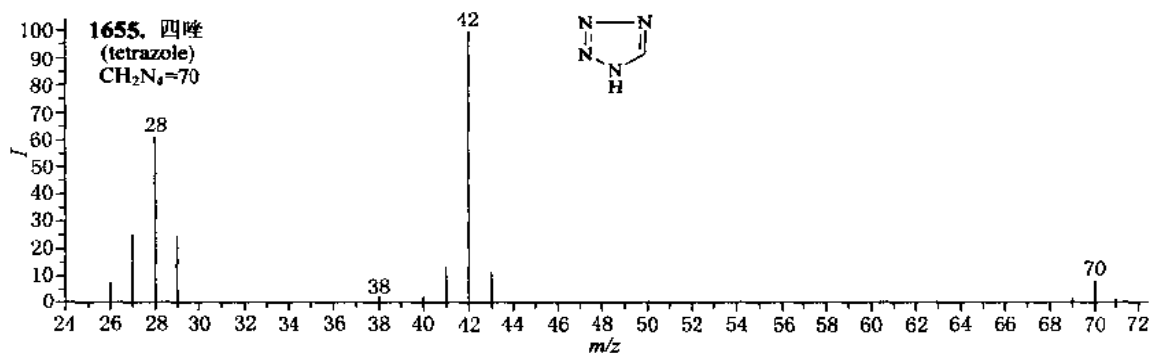


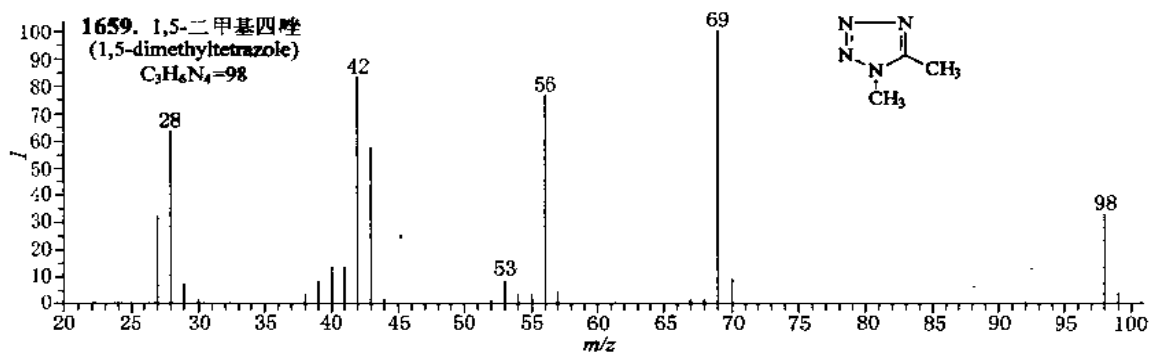
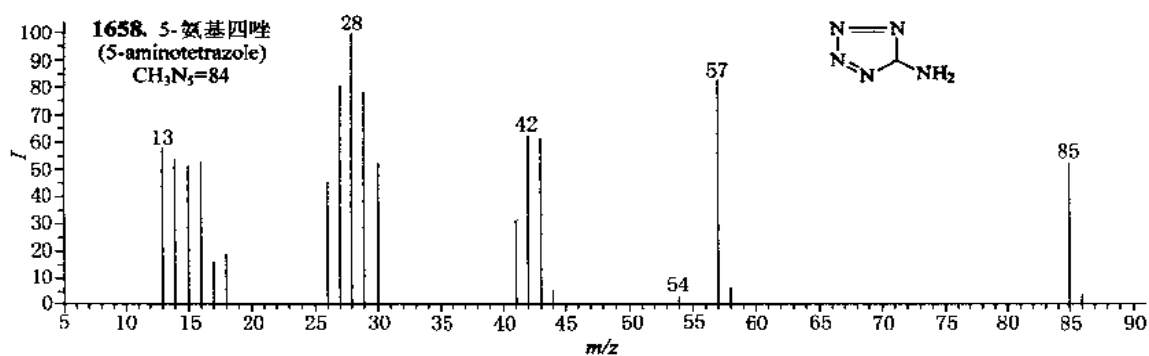
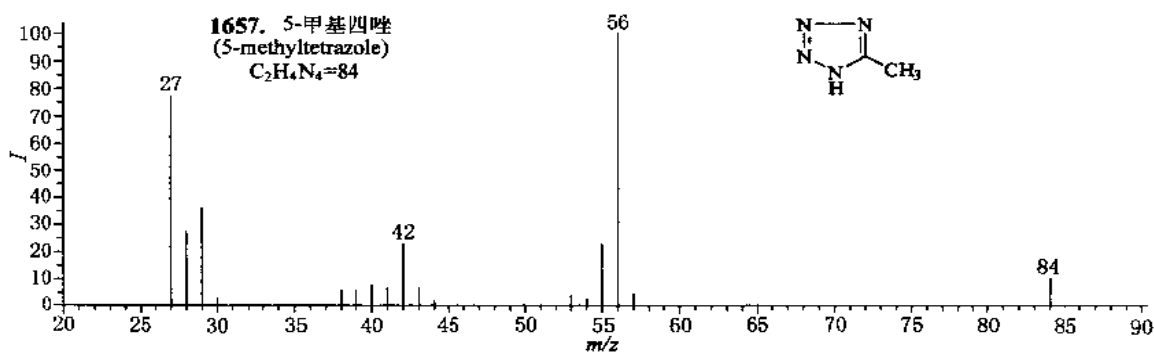
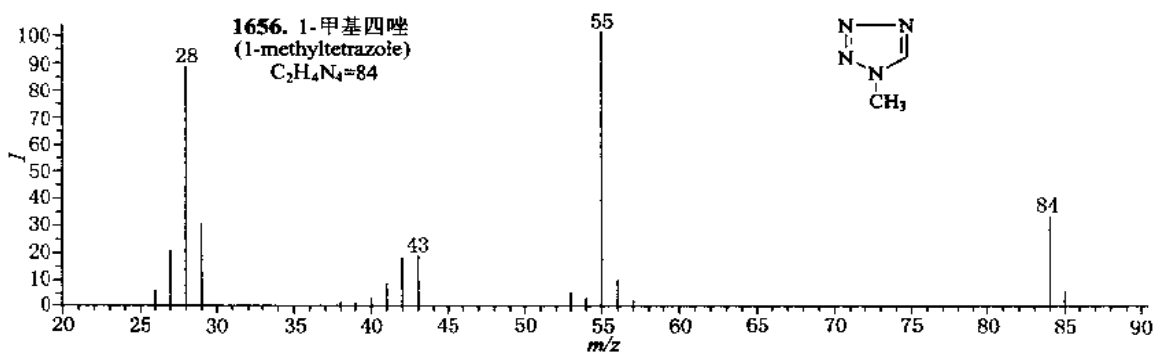




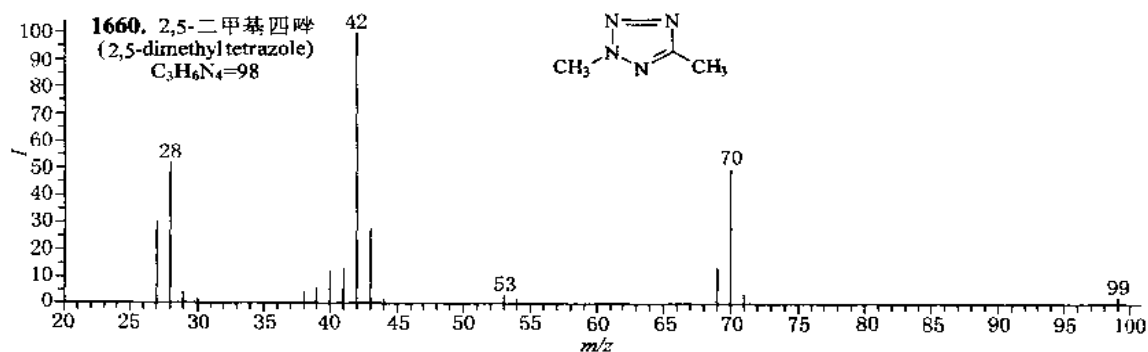
### 九、四唑类

四唑类 (1655~1660) 的裂解是  $M-N_2$  或  $M-N_2H$ 。









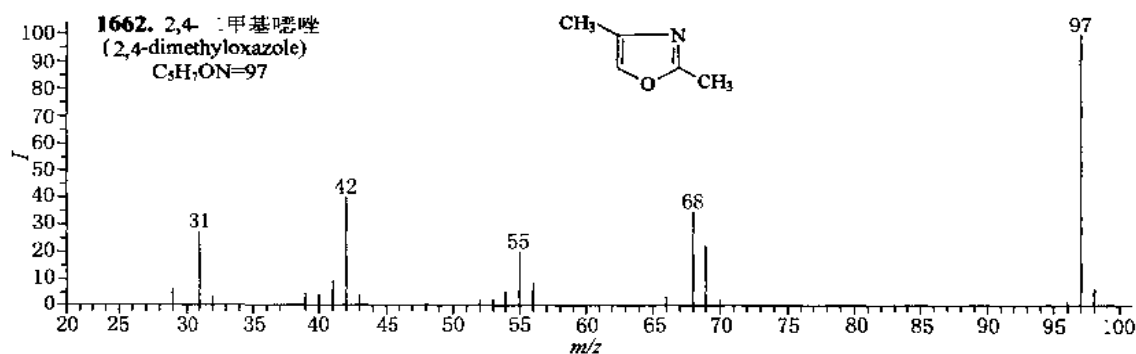
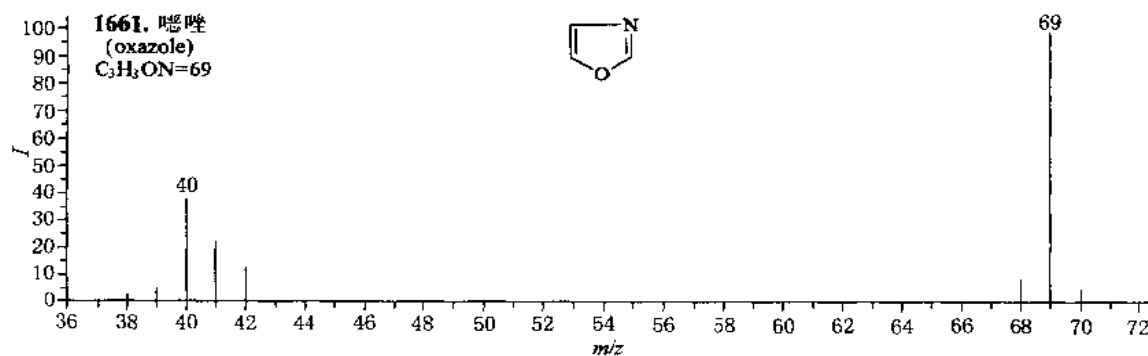
### 十、噁唑类

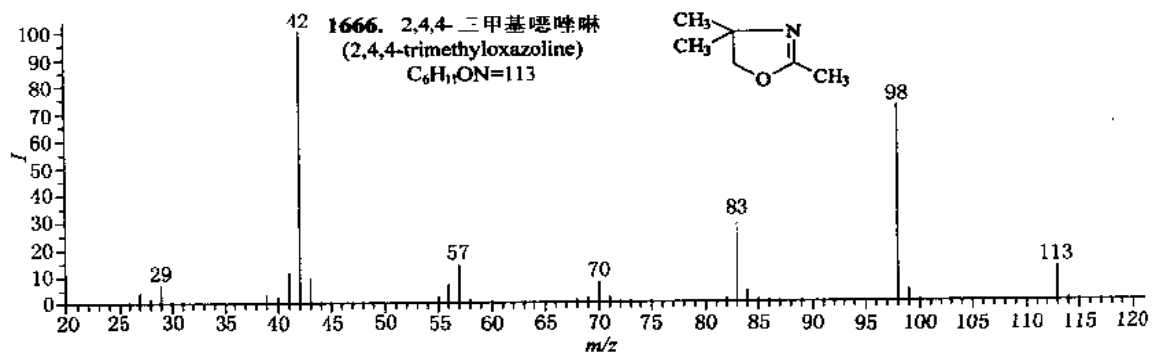
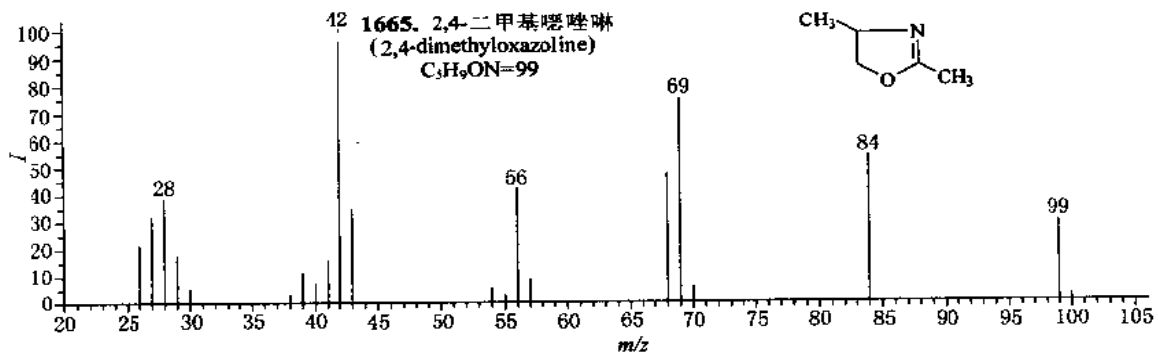
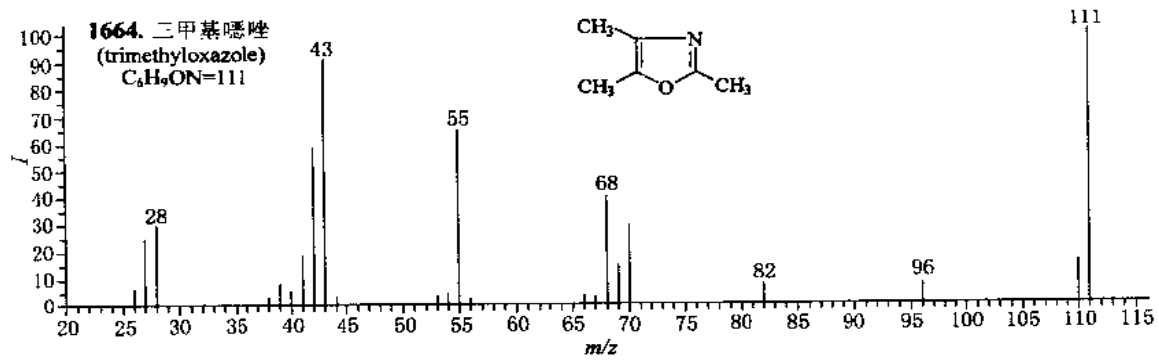
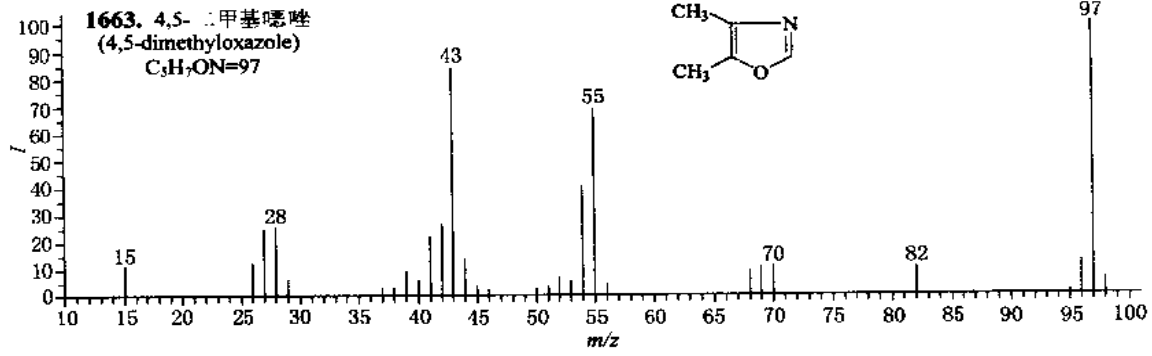
(1) 噁唑 (1661) 本身的 3 个碎片离子是  $M-CHN$ ,  $M-CO$  和  $M-CHO$ 。

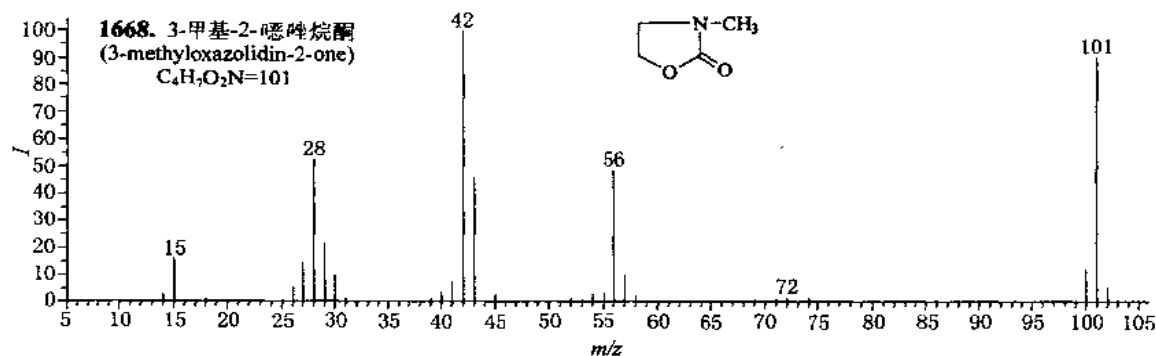
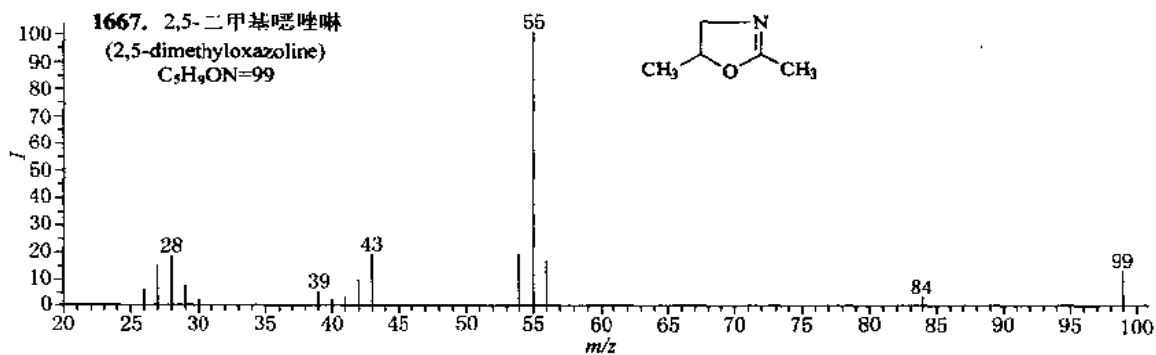
(2) 甲基衍生物 (1662~1664) 增加了  $M-CH_3$ 、 $M-CH_3CN$ 、 $M-CH_3-CHN$  和  $M-CH_3-CH_3CN$  离子。

(3) 甲基噁唑啉类 (1665~1667) 有  $M-CH_3$ 、 $M-CH_2O$  和  $M-CH_3CHO$  离子, 后者甲基的位置要适当。

(4) 噁唑烷酮 (1668) 有  $M-CO_2$  和  $M-COOH$  离子, 这也必须有适当位置的羰基。

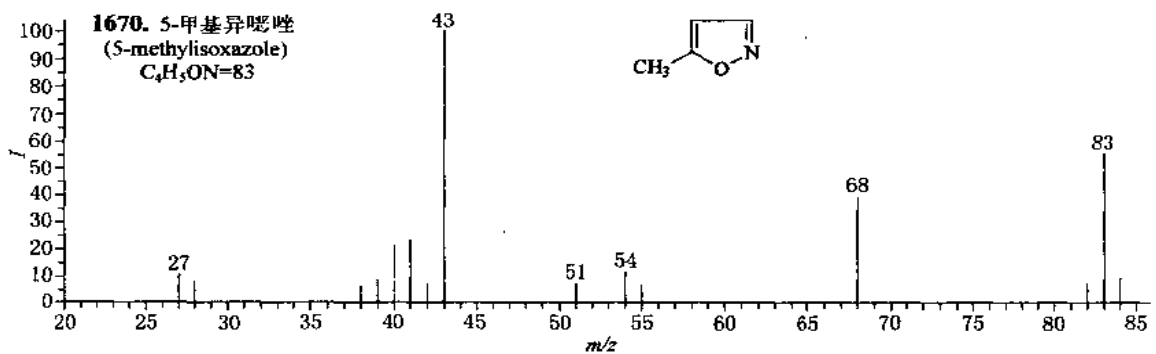
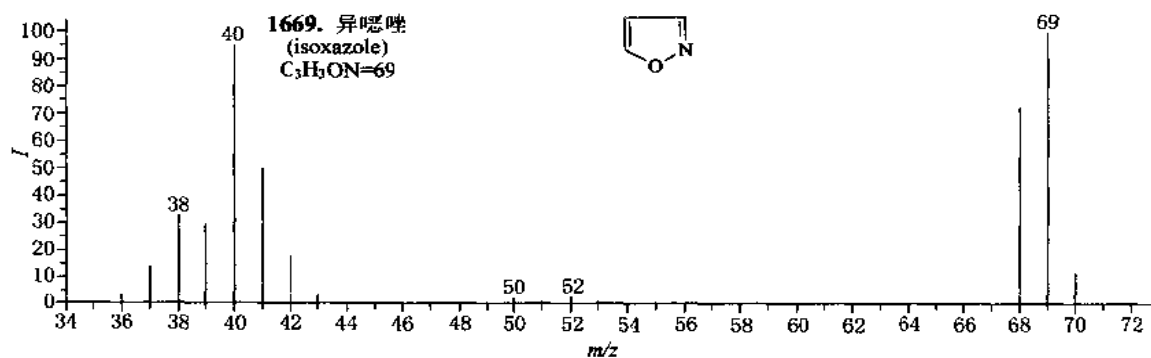


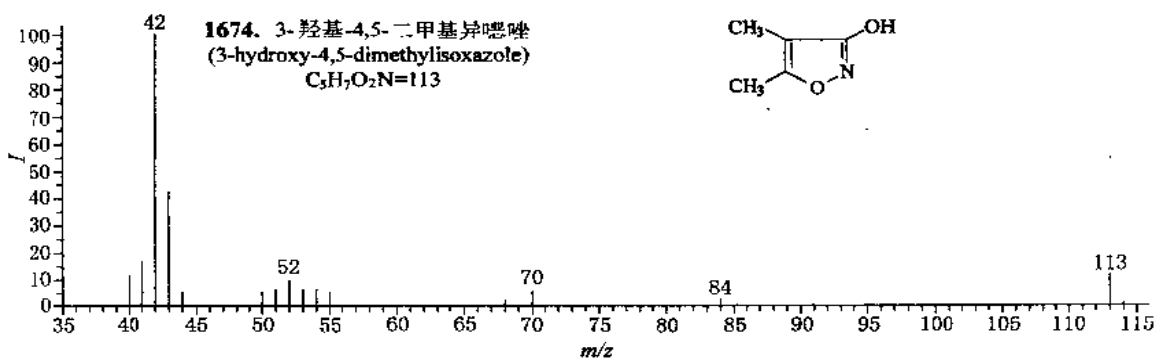
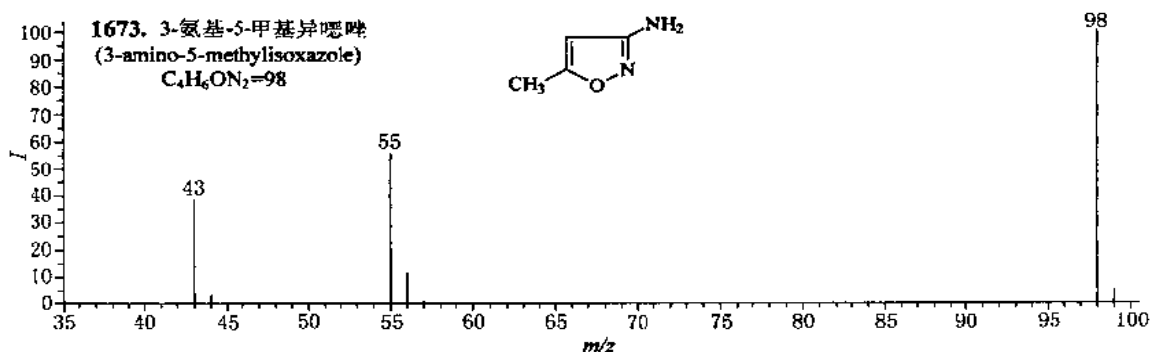
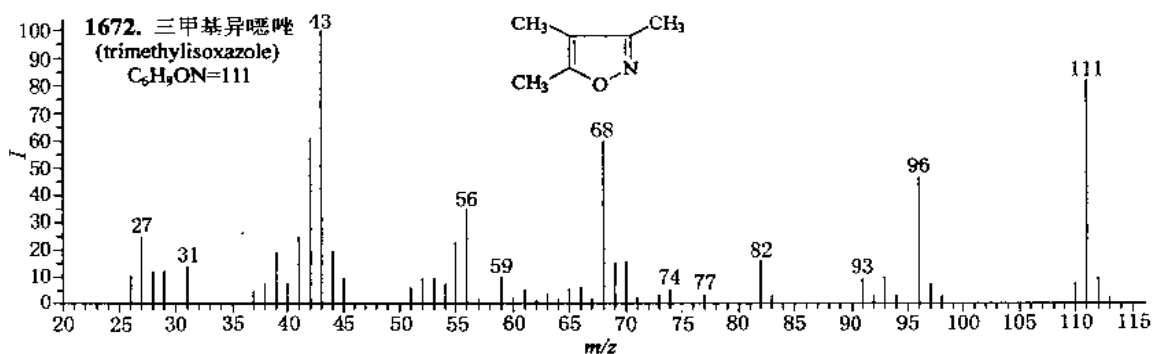
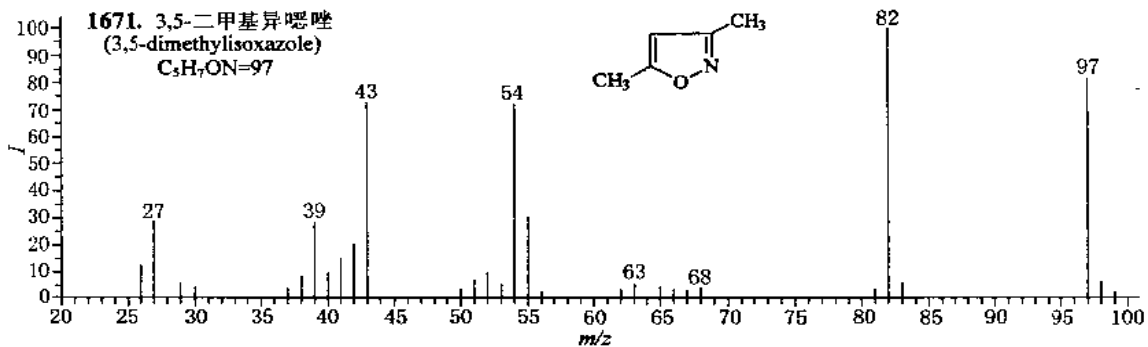




### 十一、异噁唑类

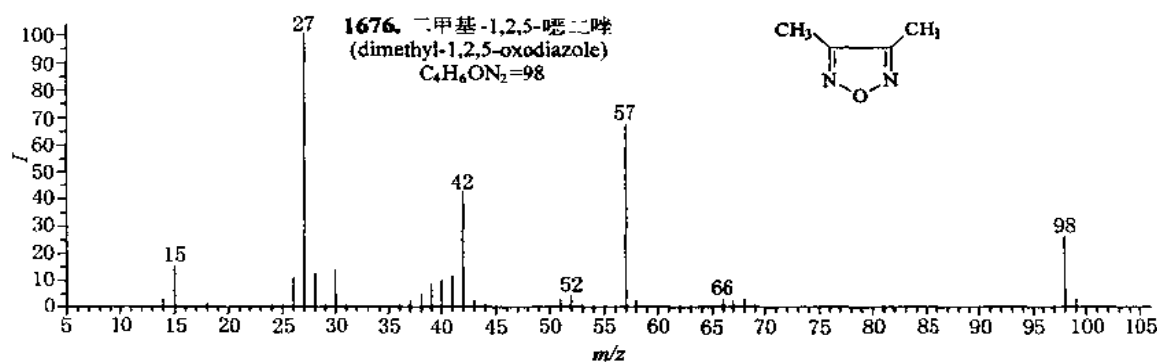
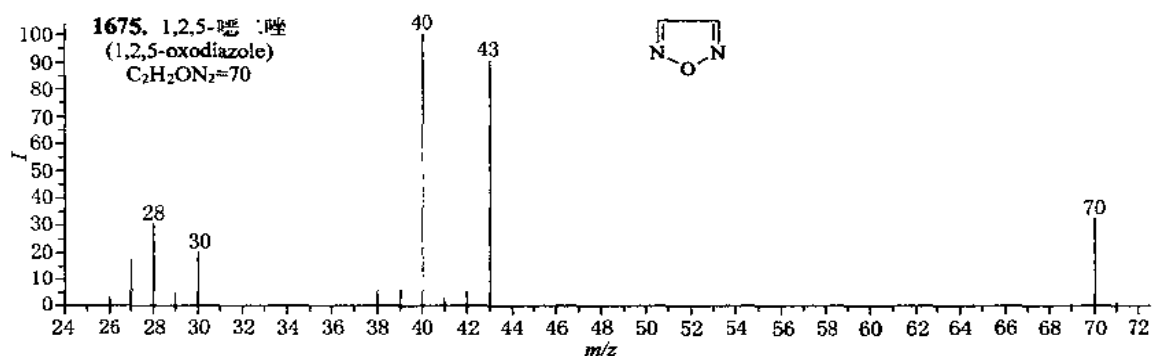
- (1) 异噁唑 (1669) 本身也有如噁唑的 3 个离子, 即  $M-CHN$ ,  $M-CO$  和  $M-CHO$ 。
- (2) 5-甲基异噁唑 (1670) 有  $M-CH_3$  和  $M-CH\equiv CCH_3$  离子。
- (3) 其他异噁唑 (1671~1674) 大多数有  $M-CH_2CO$  和  $M-CH_3CO$  离子。





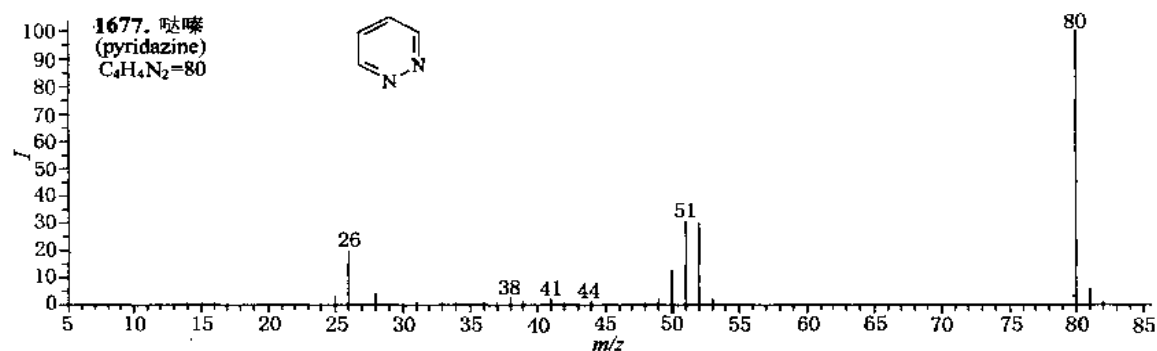
## 十二、噁二唑类

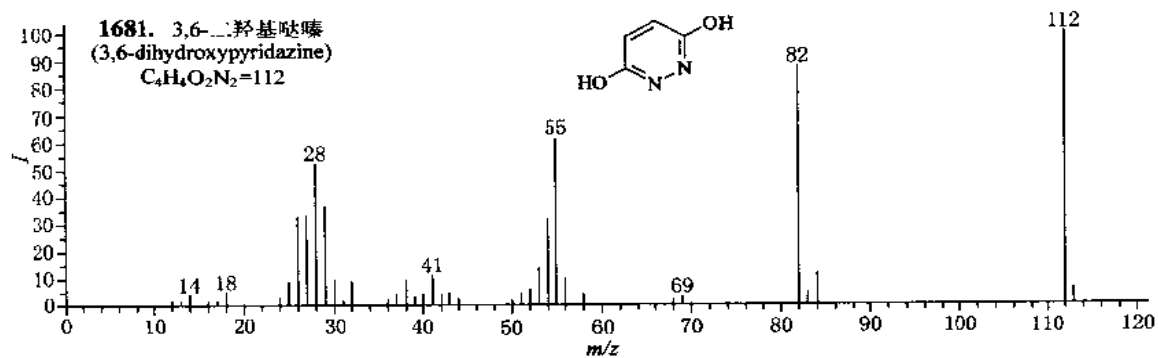
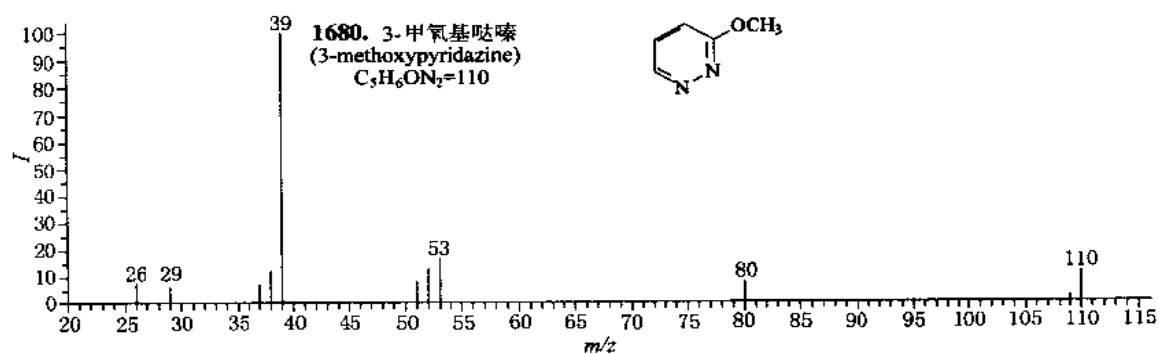
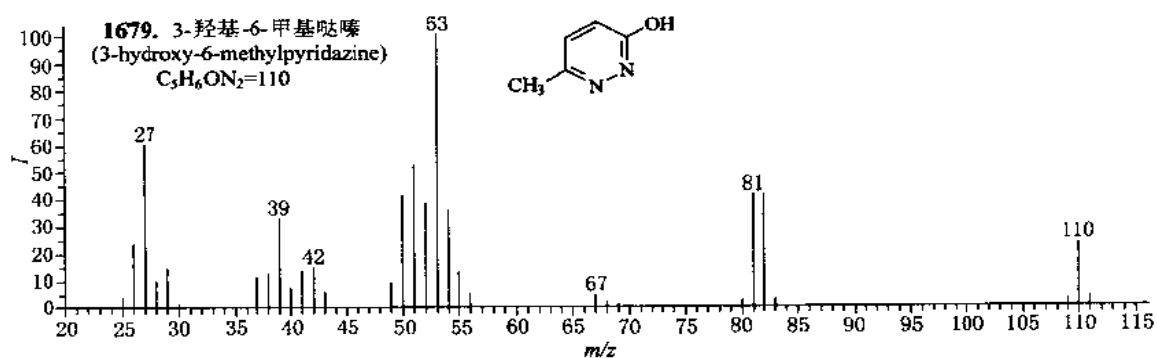
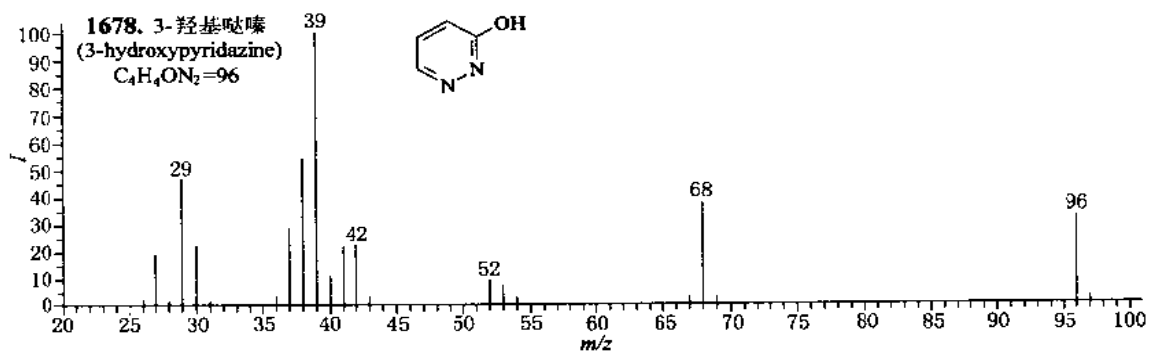
噁二唑类 (1675, 1676) 的主要裂解是  $M-CHN$  或  $M-CH_3CN$ 。

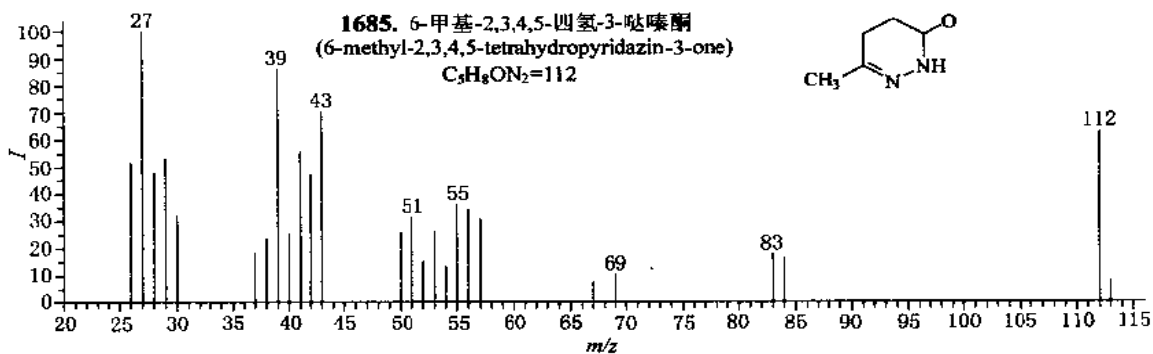
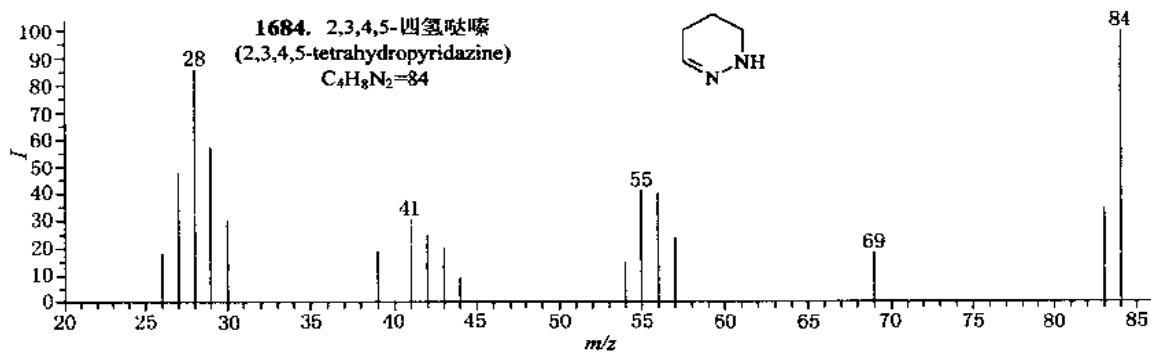
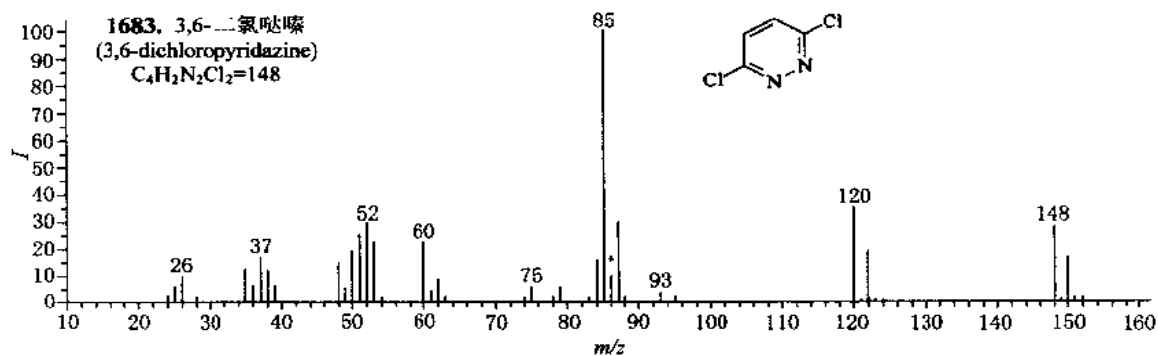
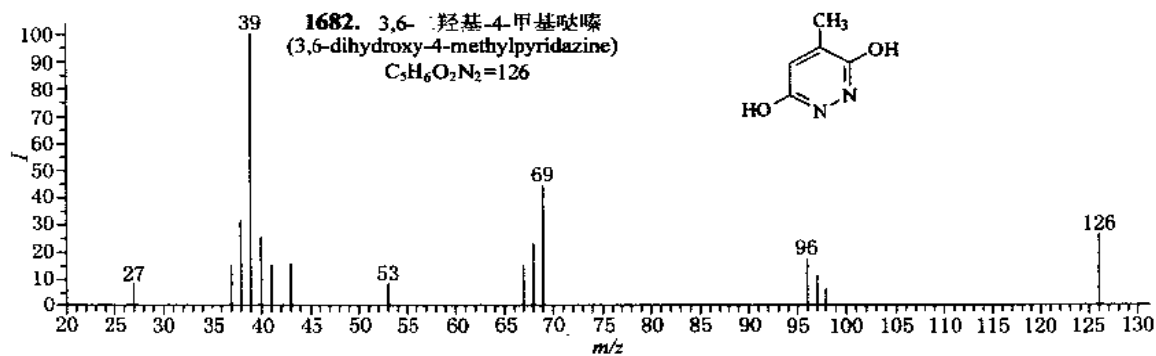


## 十三、哒嗪类

- (1) 哒嗪 (1677) 本身的主要裂解是失去氮分子。
- (2) 羟基取代者 (1678, 1679, 1681, 1682) 能失  $CO$  和  $CHO$ 。
- (3) 甲氧基取代者 (1680) 能失  $CH_2O$ 。
- (4) 氯代物 (1683) 能失氯原子。

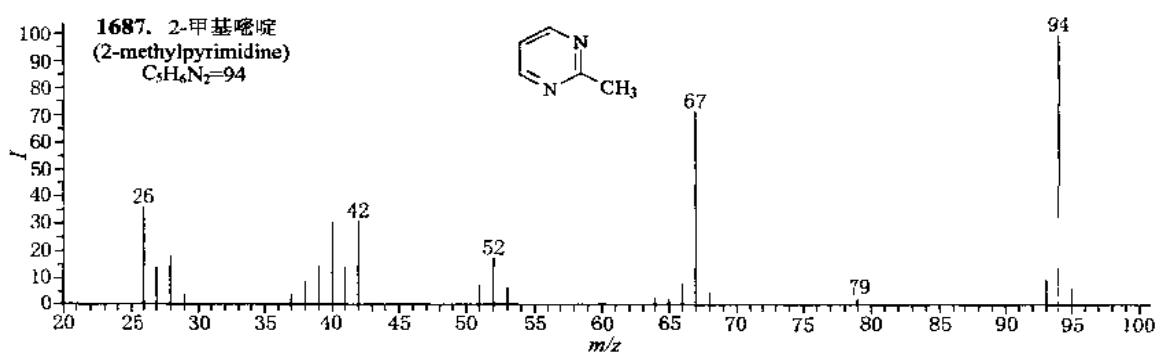
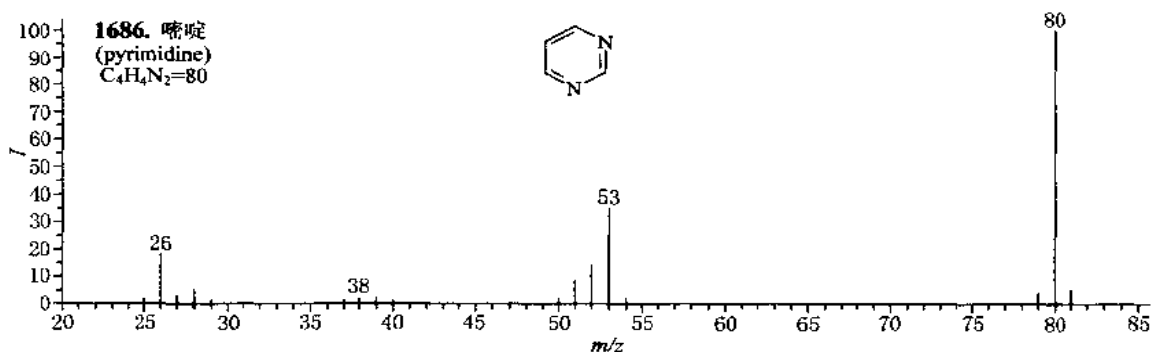




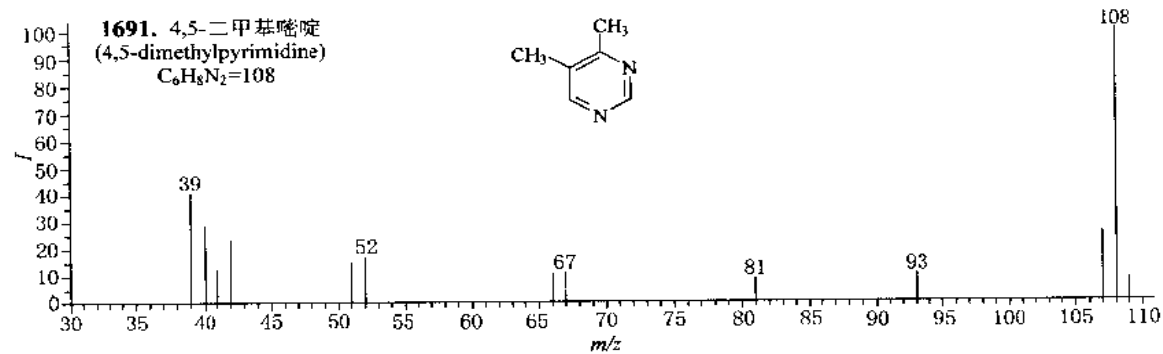
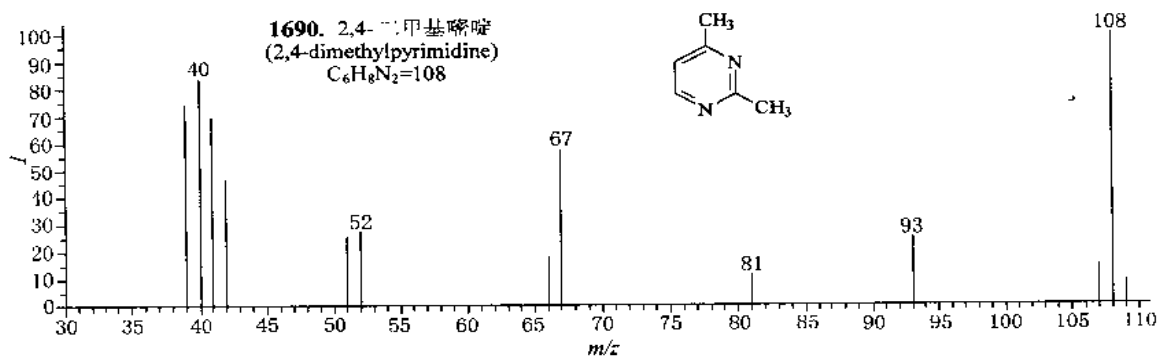
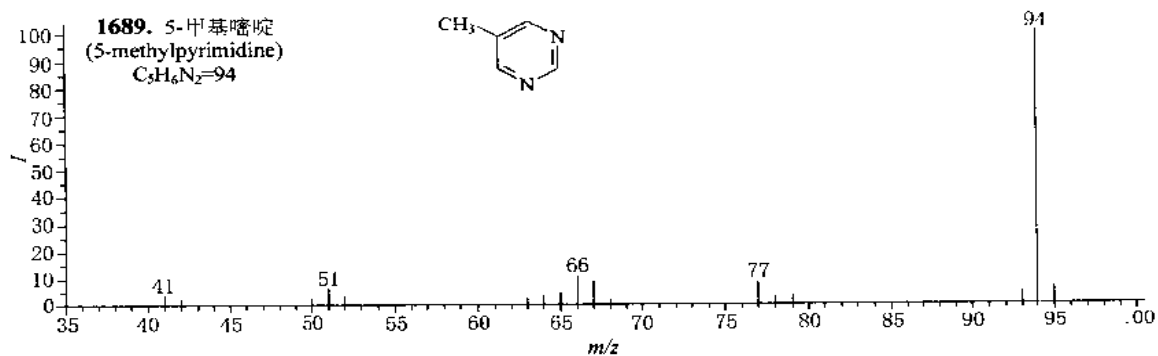
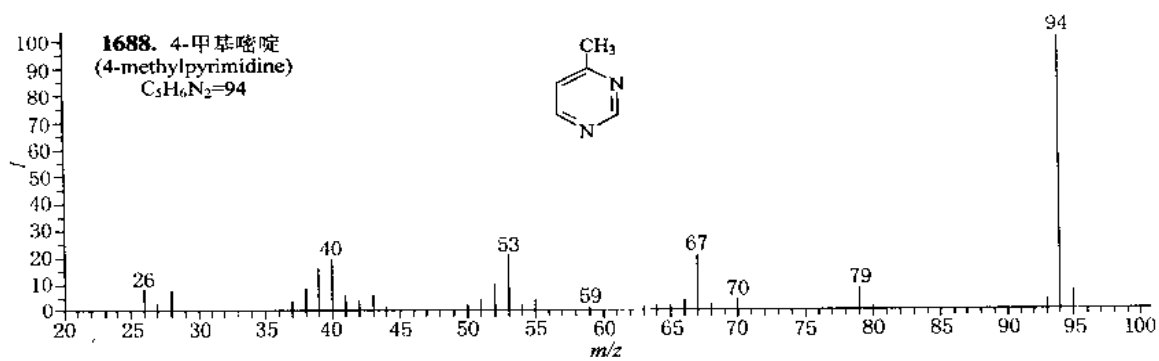


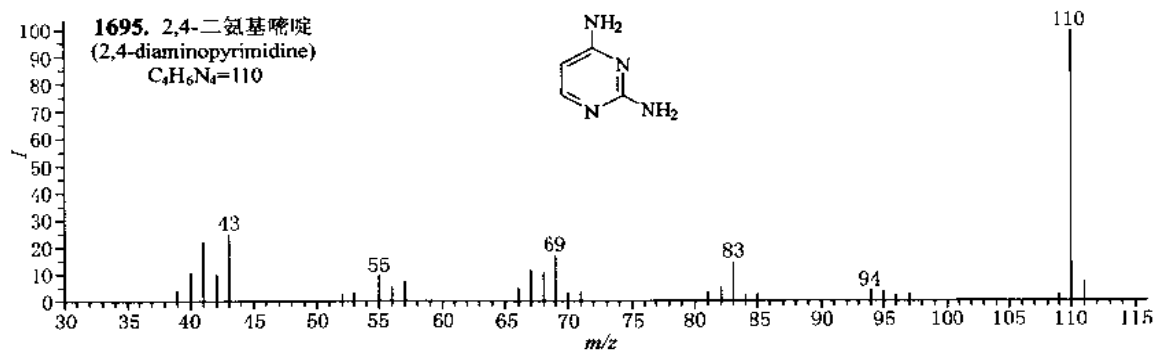
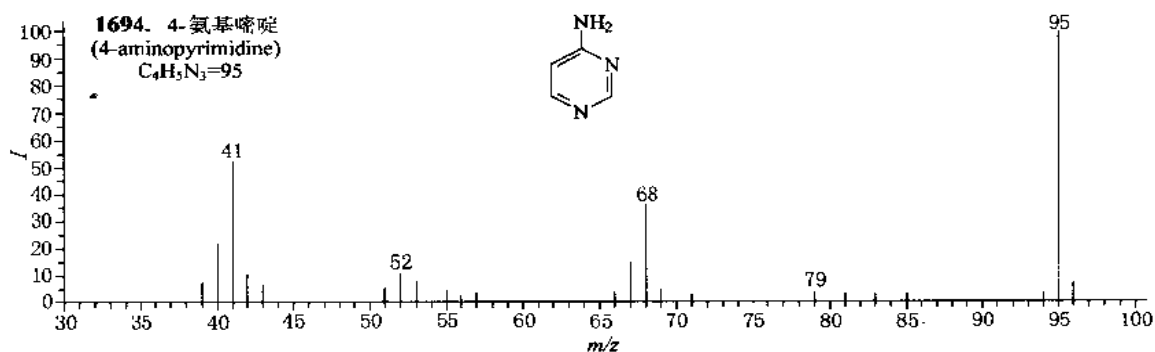
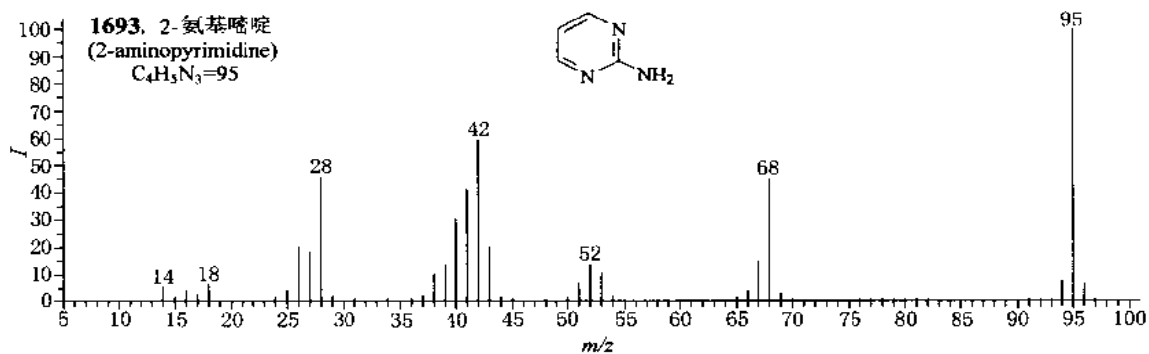
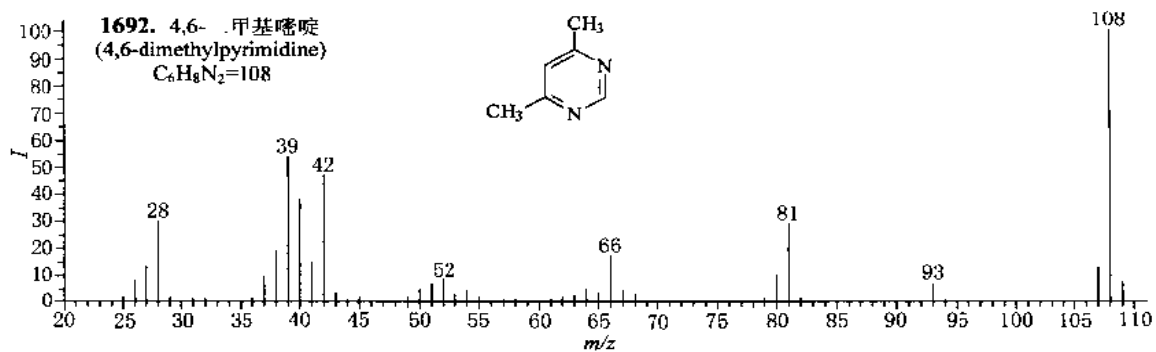
## 十四、嘧啶类

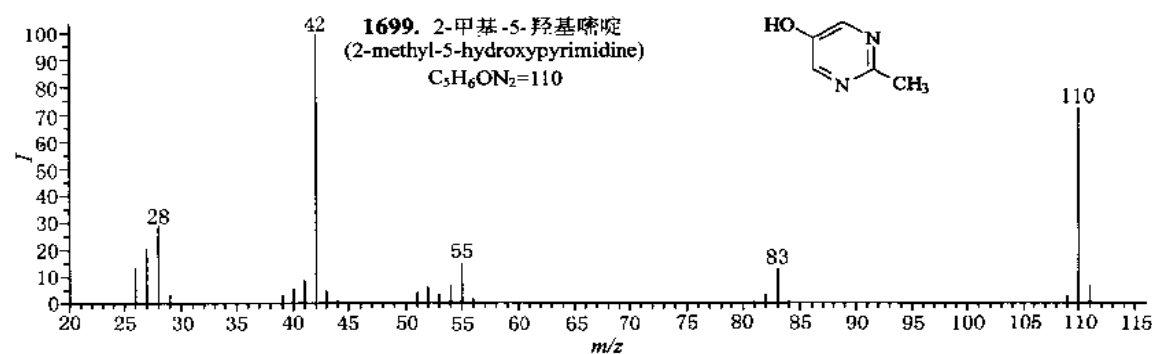
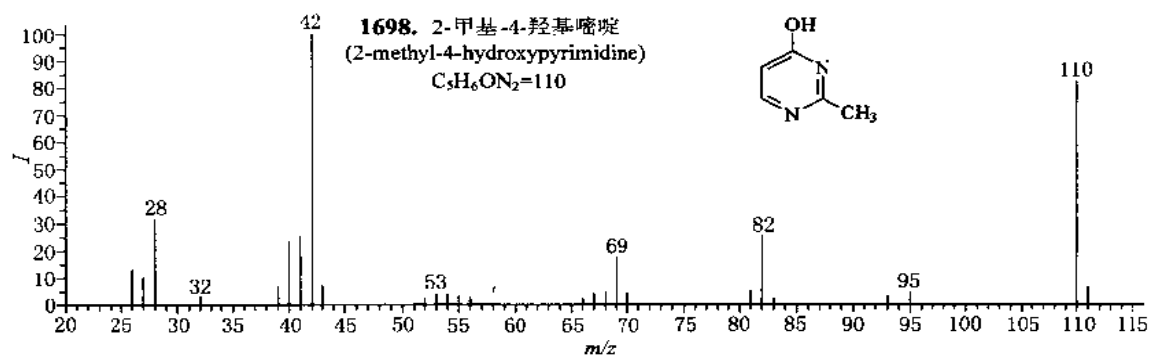
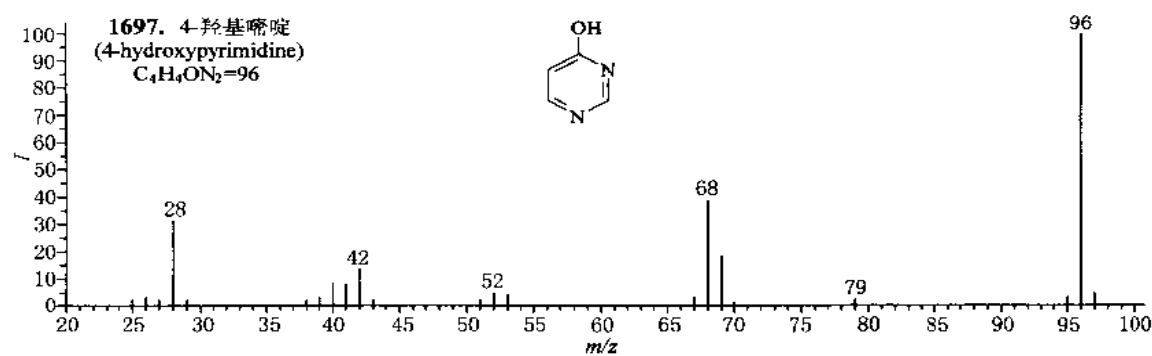
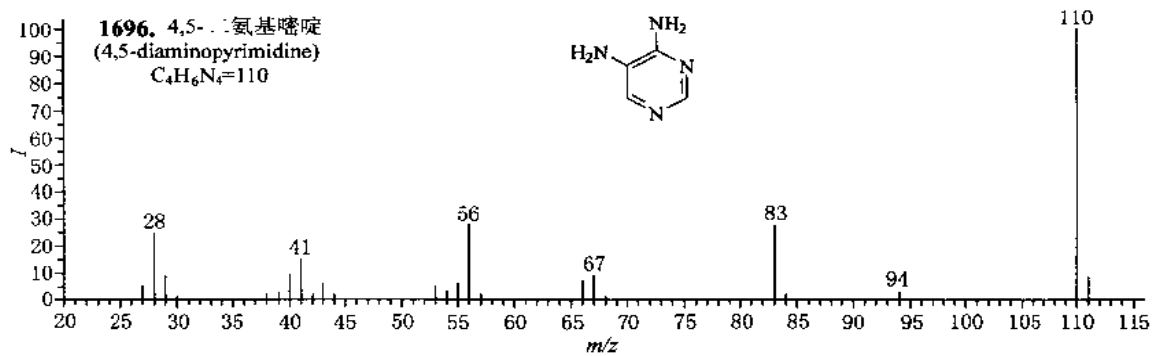
- (1) 嘧啶 (1686) 和甲基嘧啶类 (1687~1692) 的主要裂解是  $M-CHN$ 。
- (2) 氨基嘧啶类 (1693~1696) 的主要裂解是  $M-CN H_2$ ，二氨基嘧啶类有  $M-CN H-CN H$  的裂解途径。
- (3) 羟基嘧啶 (1697) 的主要裂解有  $M-OH-CHN$ ， $M-CHN$  和  $M-CO$ 。
- (4) 羟基和甲基二取代的嘧啶类化合物 (1698~1700) 的主要裂解是  $M-CO-CHN$ 。
- (5) 甲氧基嘧啶 (1701) 的裂解途径是  $M-CH_2O-CHN$ 。
- (6) 羟基和氨基二取代的嘧啶类化合物 (1702, 1703) 除有  $M-CO$  离子外，又增加了  $M-NH_2CN$  离子。
- (7) 二羟基取代的嘧啶化合物 (1704) 主要裂解有  $M-HOCN$ 。
- (8) 二甲基和氨基取代的嘧啶类化合物 (1705, 1706) 裂解为  $M-CN H$ ，甲基和二氨基取代者 (1707) 为  $M-CN H-CN H$ 。
- (9) *N,N*-二甲氨基嘧啶 (1719) 主要有  $M-CH_3$  和  $M-C_2H_5$  离子。
- (10) 甲酰基嘧啶 (1720) 主要是失去一氧化碳。
- (11) 氯和溴取代的嘧啶类化合物 (1721~1725) 主要裂解是失去氯和溴原子，也伴有再失  $CHN$  的离子。
- (12) 二氢嘧啶酮类化合物 (1727~1730) 和嘧啶三酮 (1731) 都能失去一氧化碳。

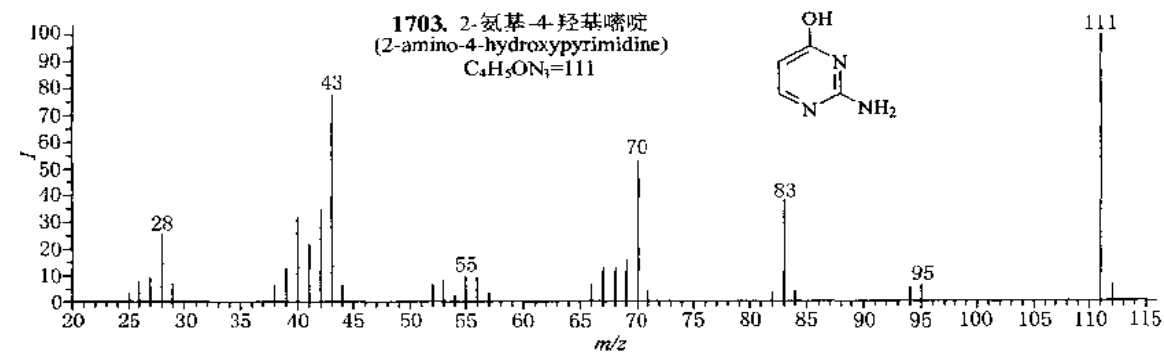
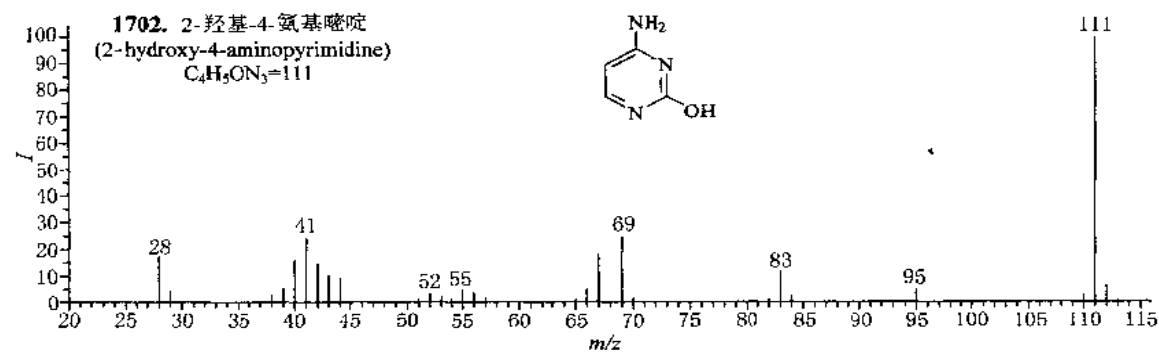
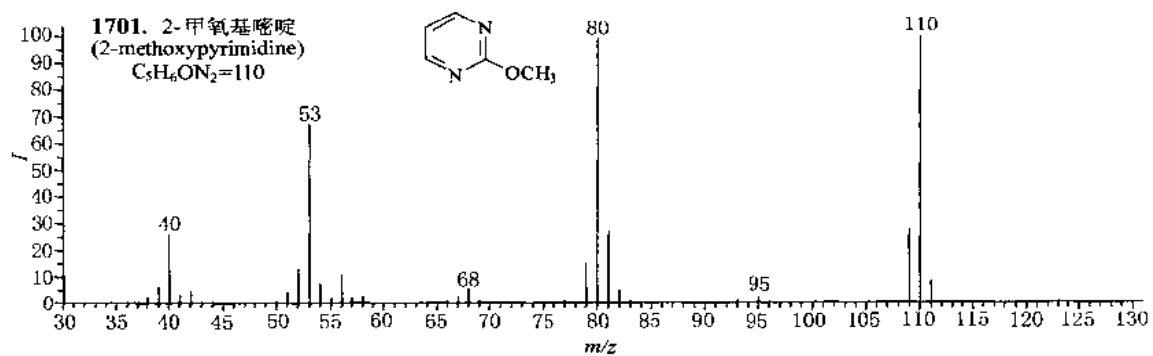
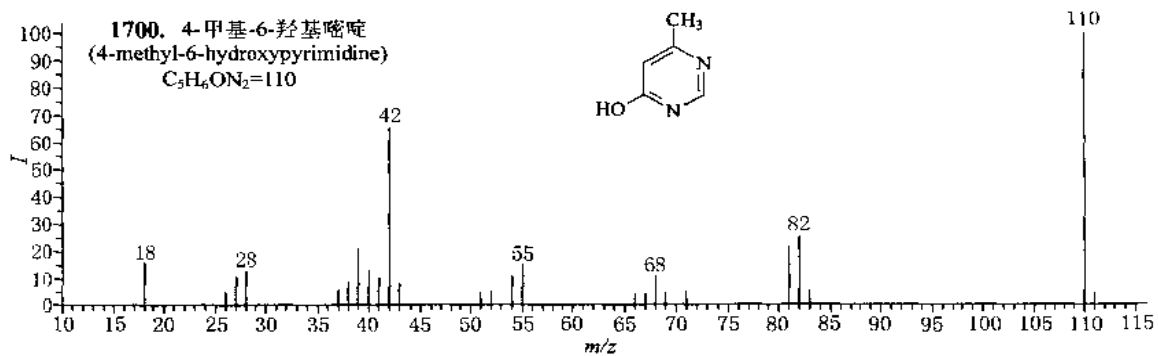


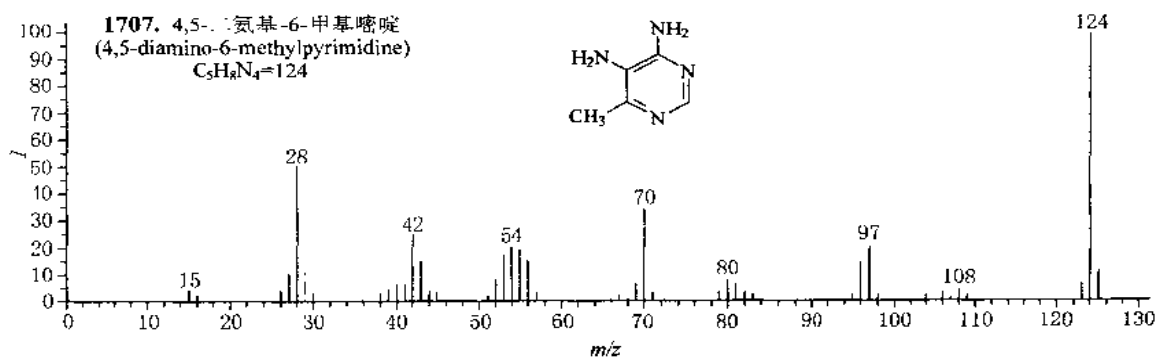
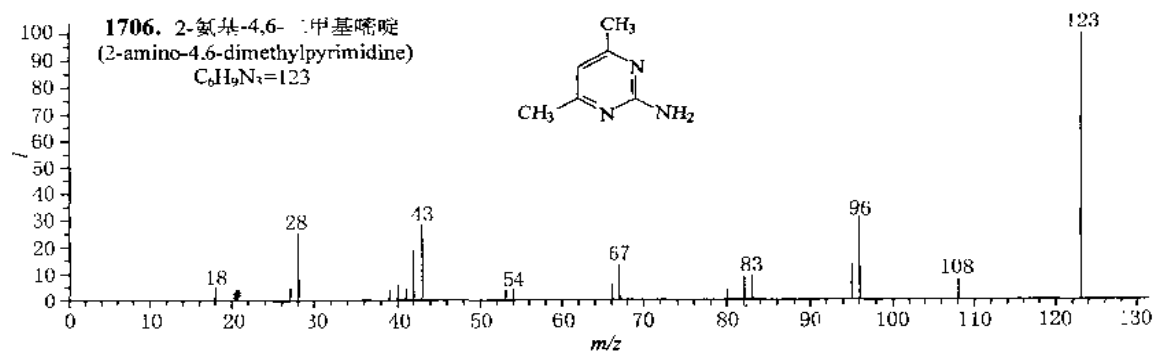
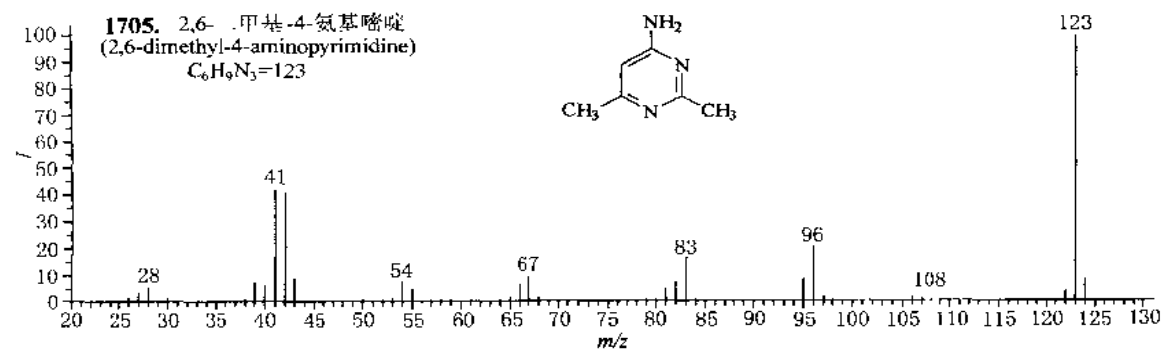
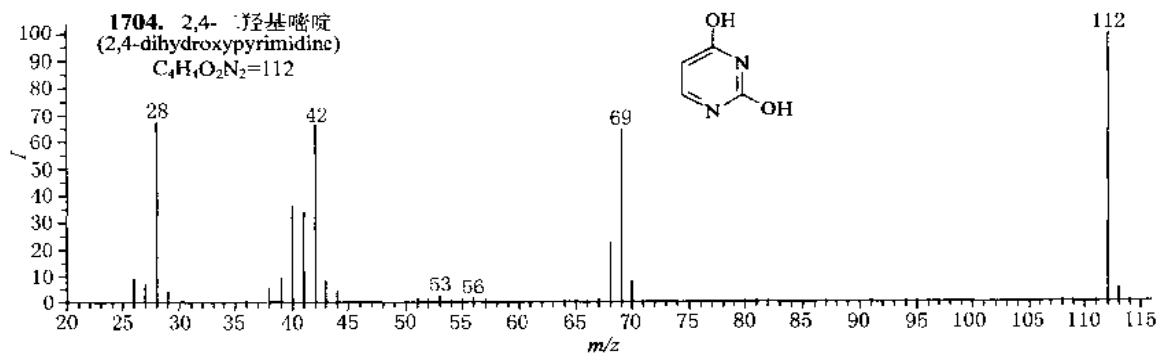


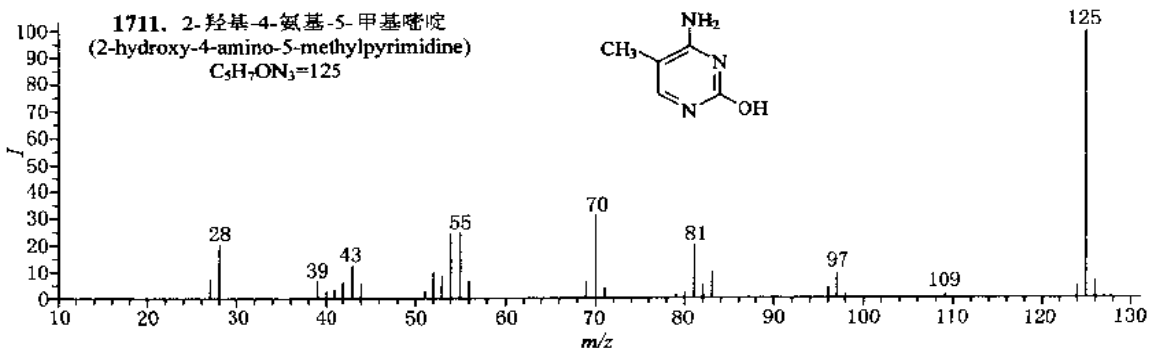
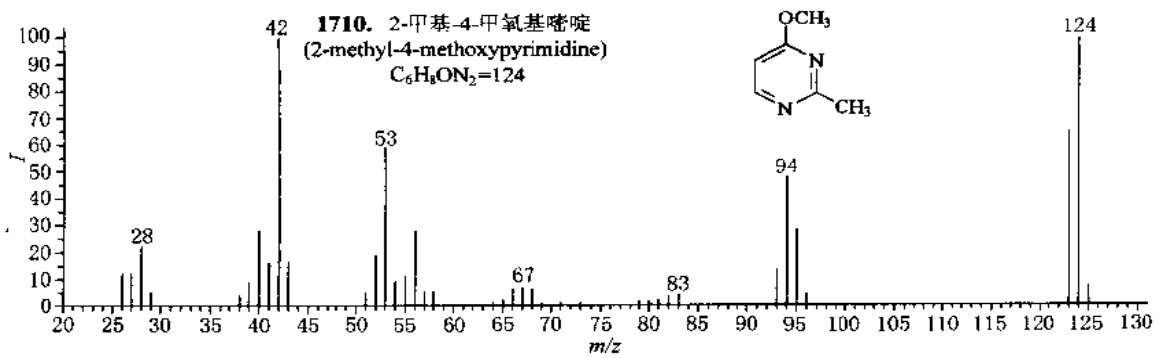
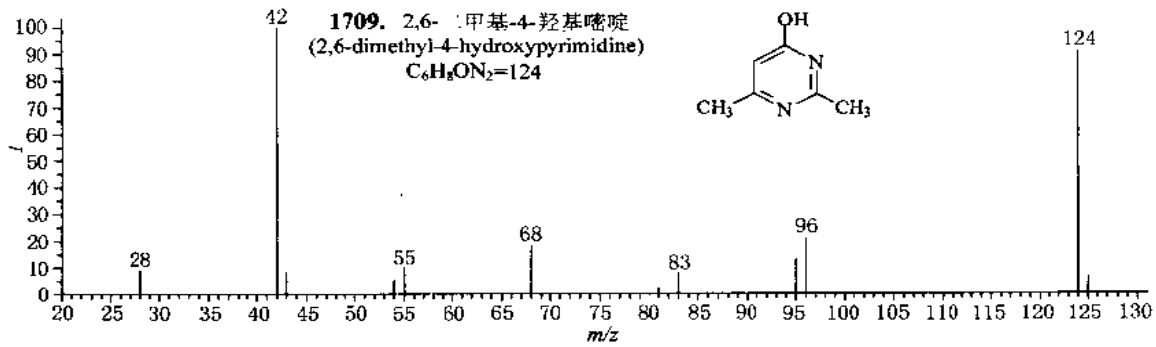
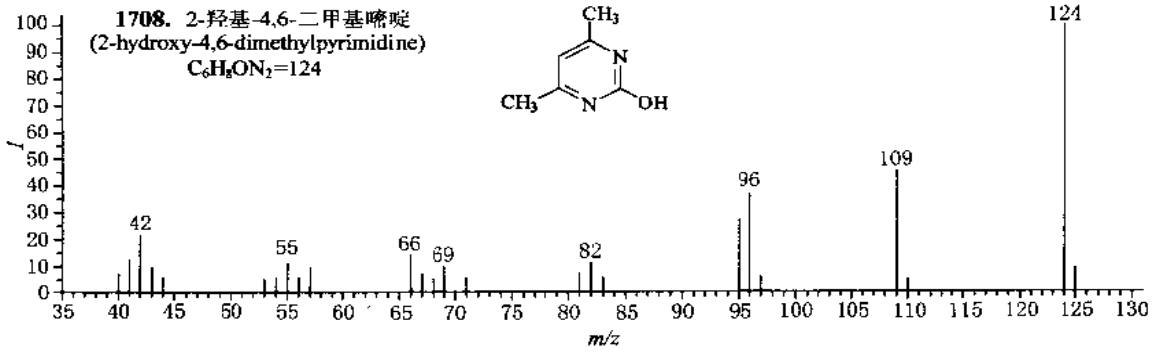


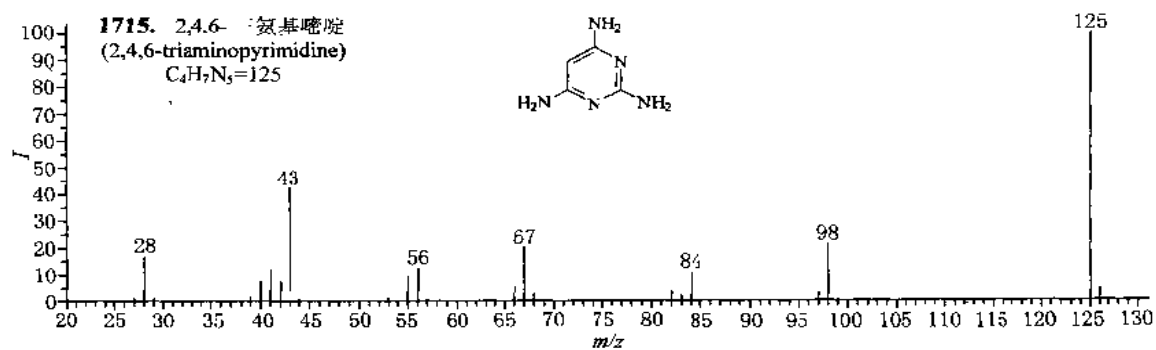
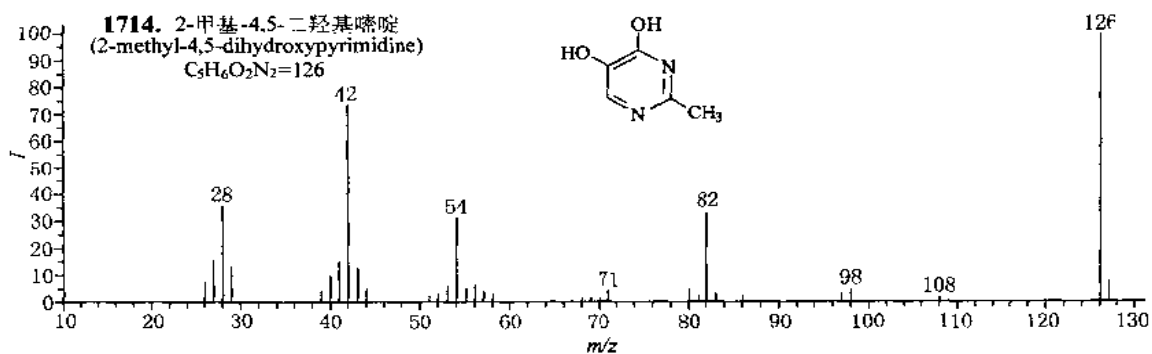
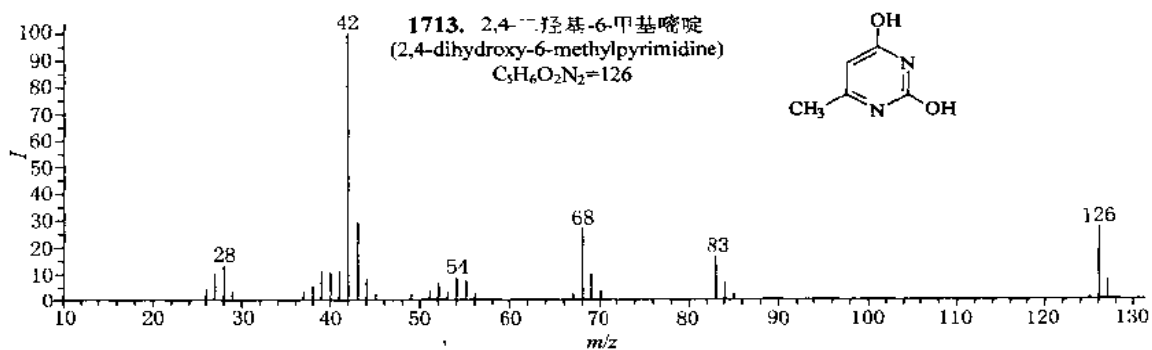
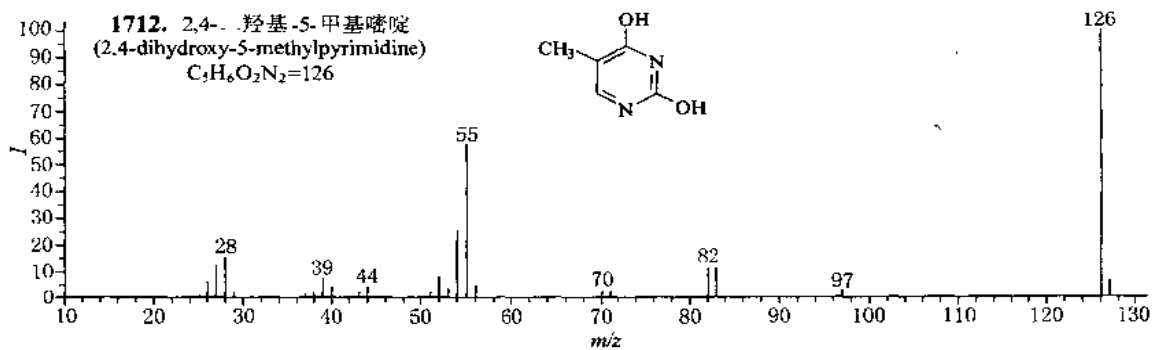


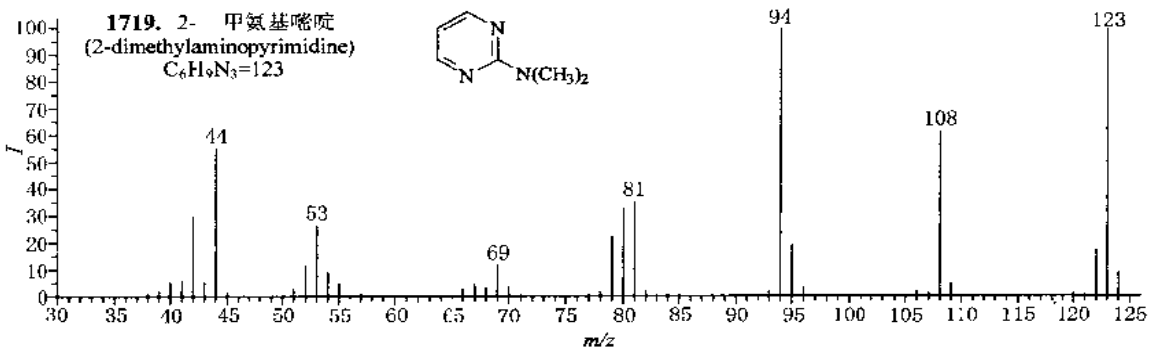
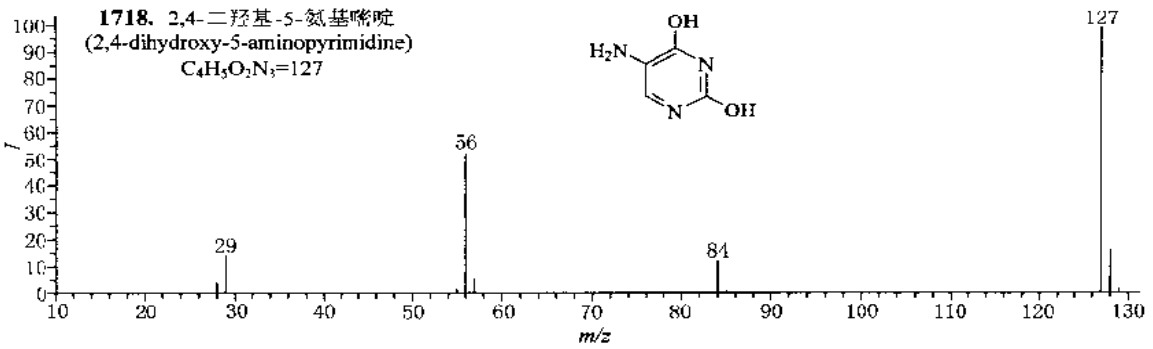
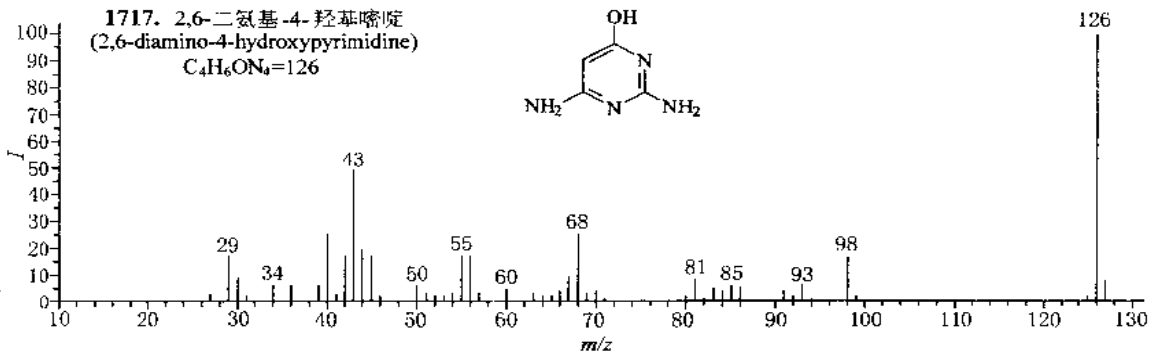
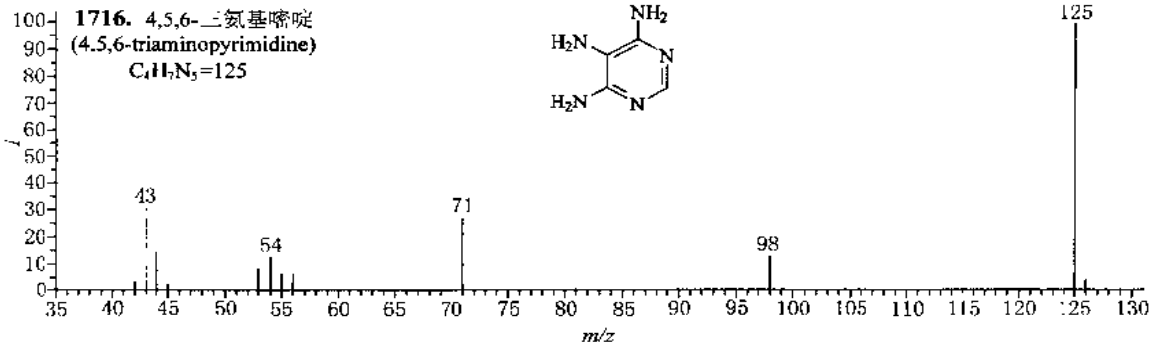




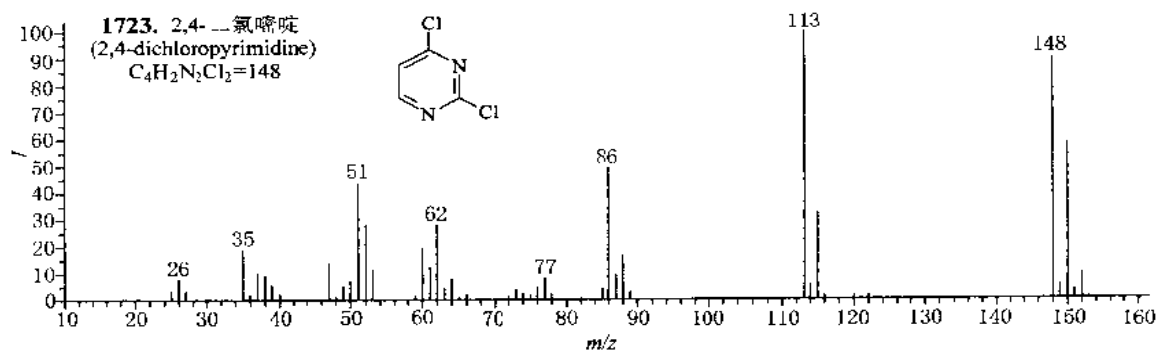
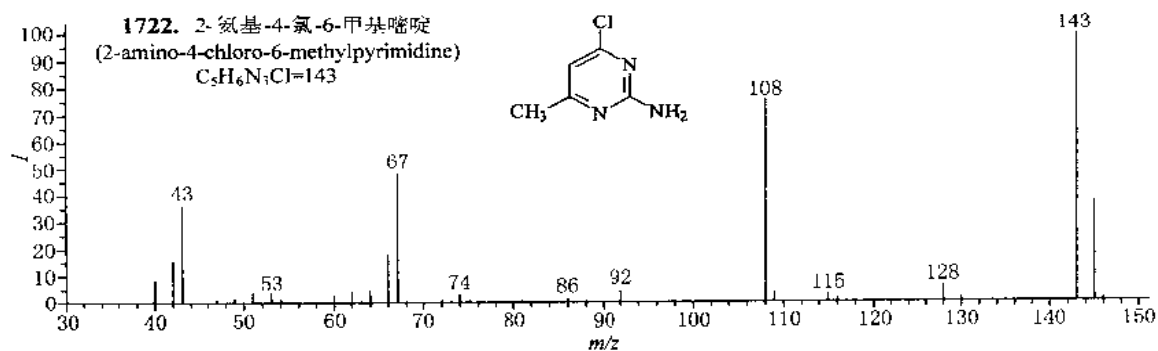
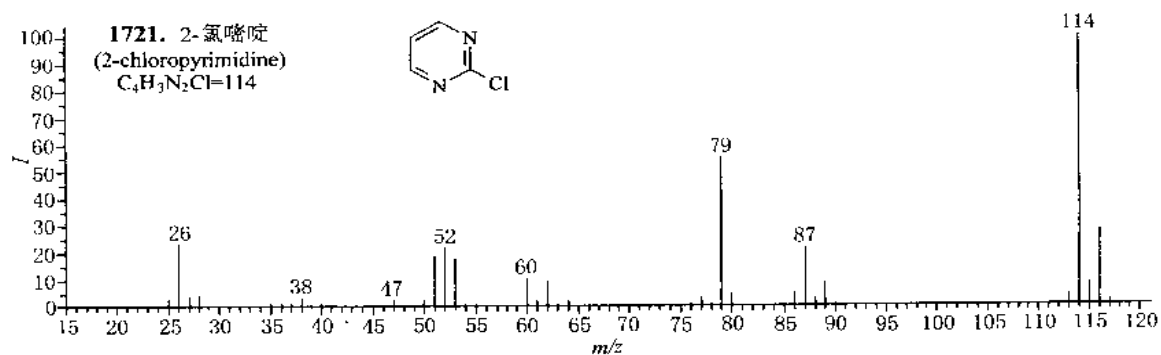
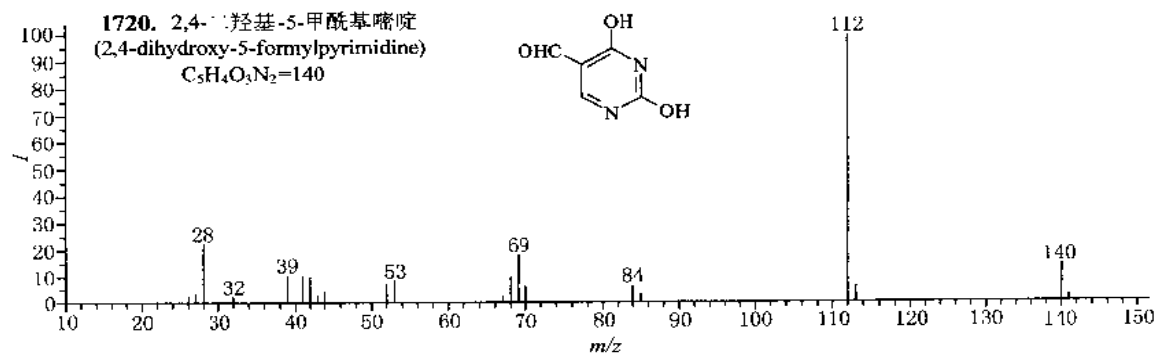


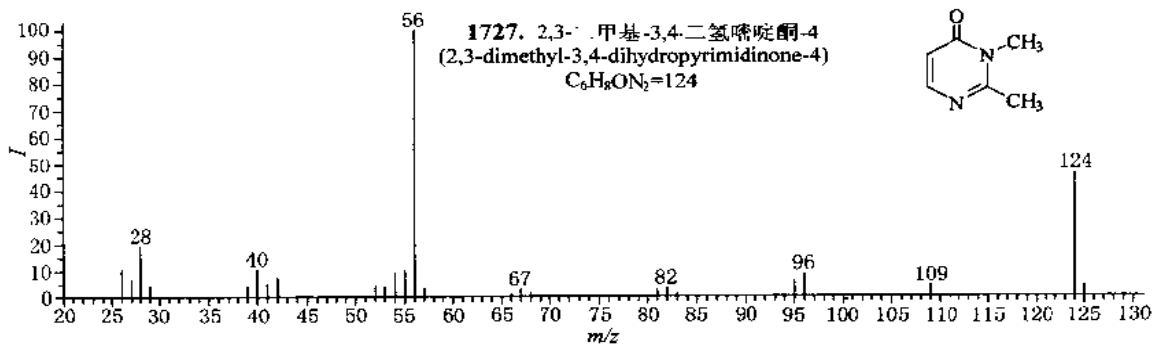
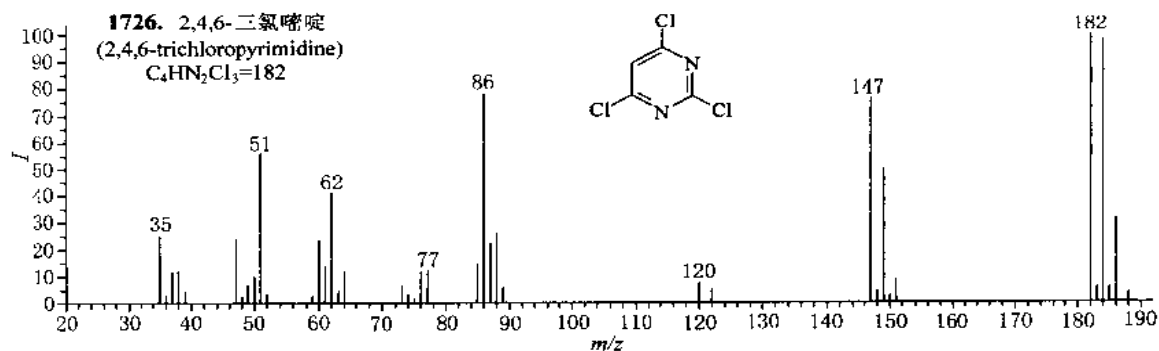
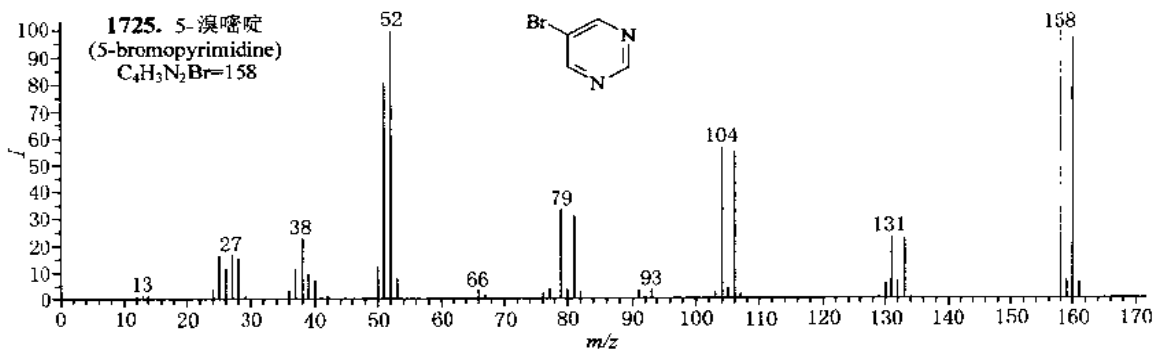
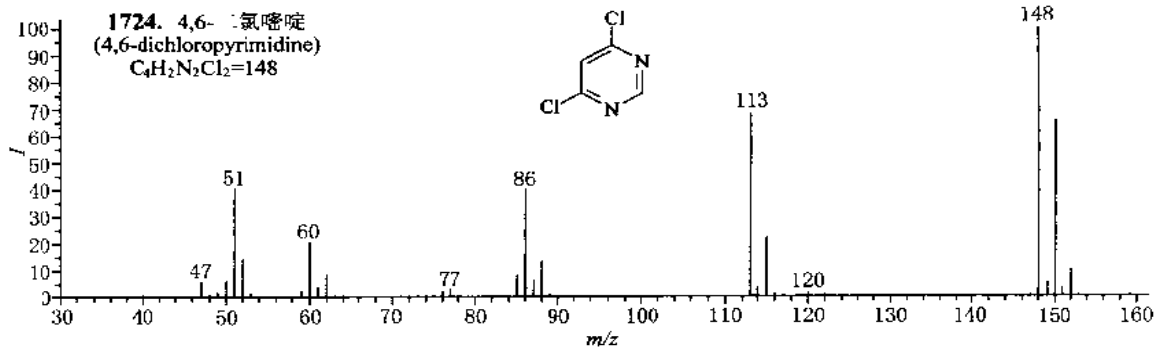


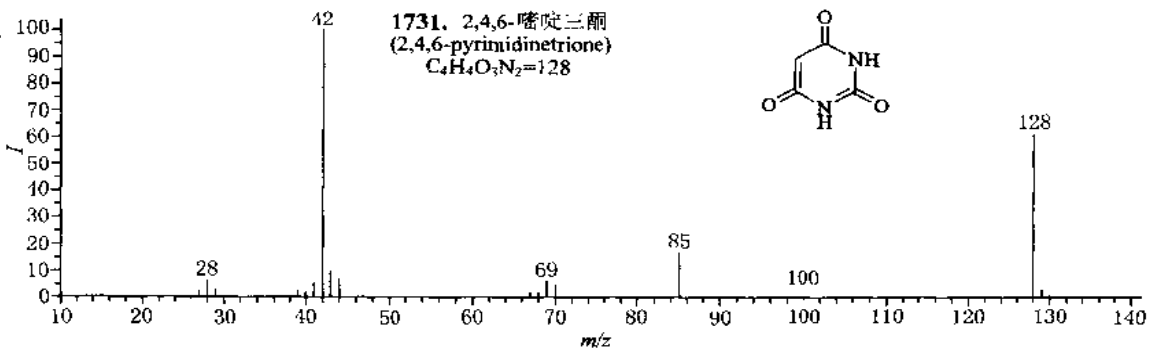
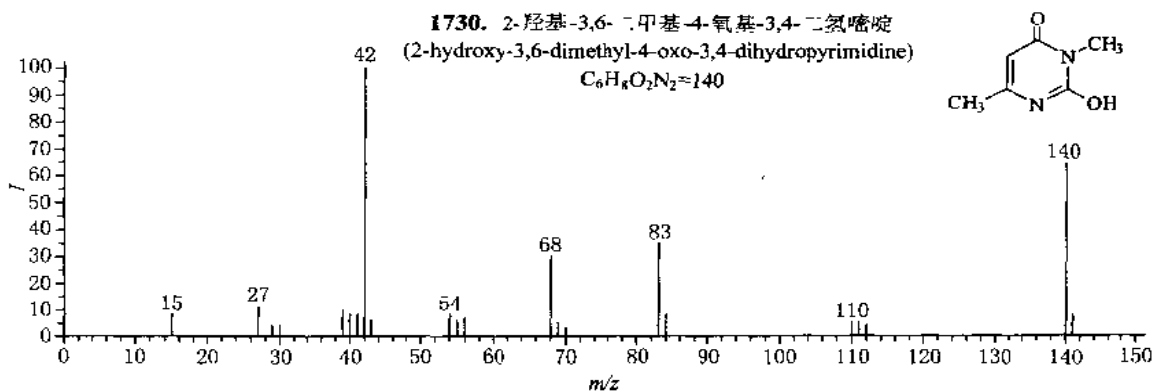
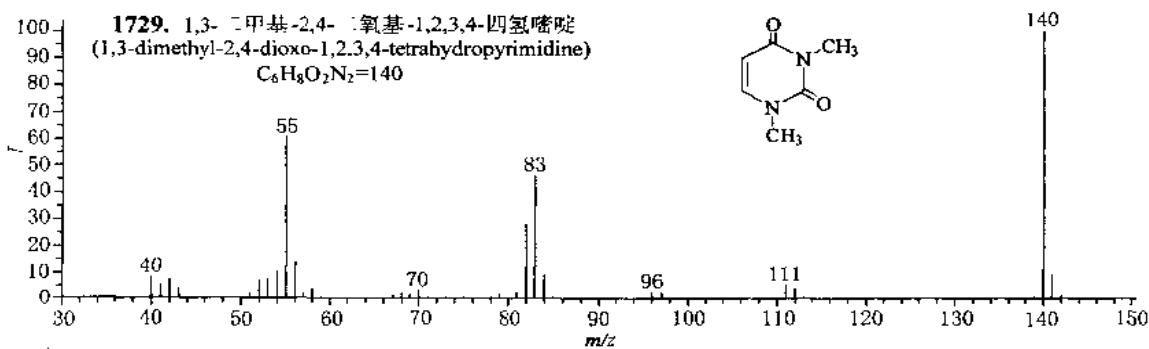
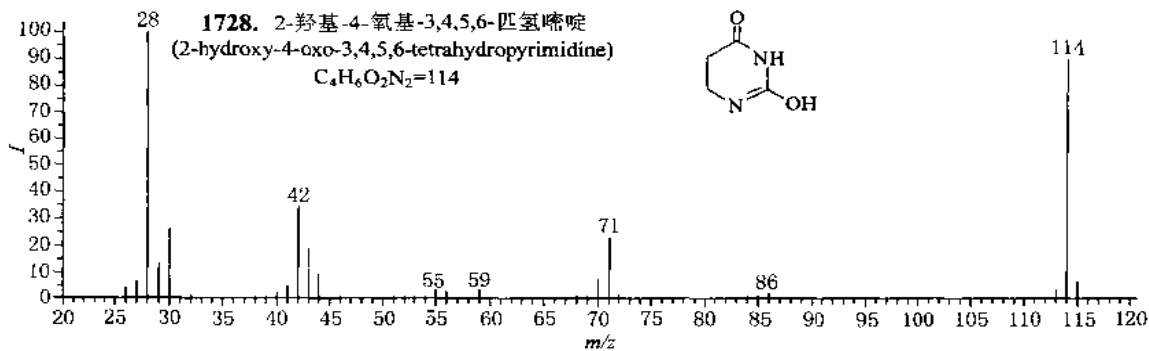






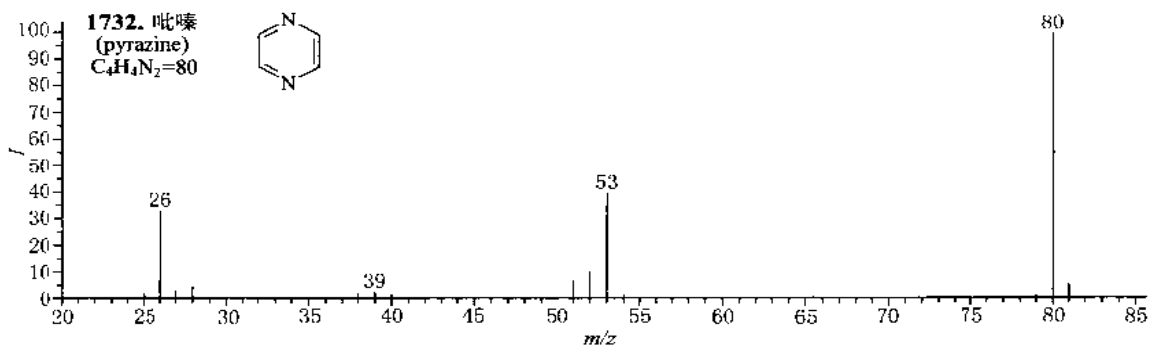






## 十五、吡嗪类

(1) 吡嗪 (1732) 自身只有  $M-CHN$  的碎片离子。



(2) 甲基、二甲基和三甲基吡嗪类化合物 (1733~1737) 除有  $M-CHN$  离子外, 还有  $M-CH_2CN$  离子, 四甲基吡嗪 (1738) 有  $M-CH_2CN-CH_2CN$  两种碎片离子。

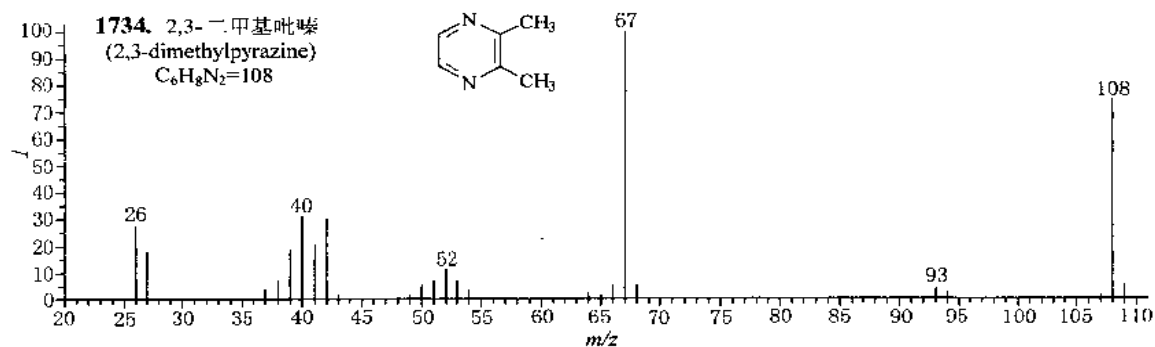
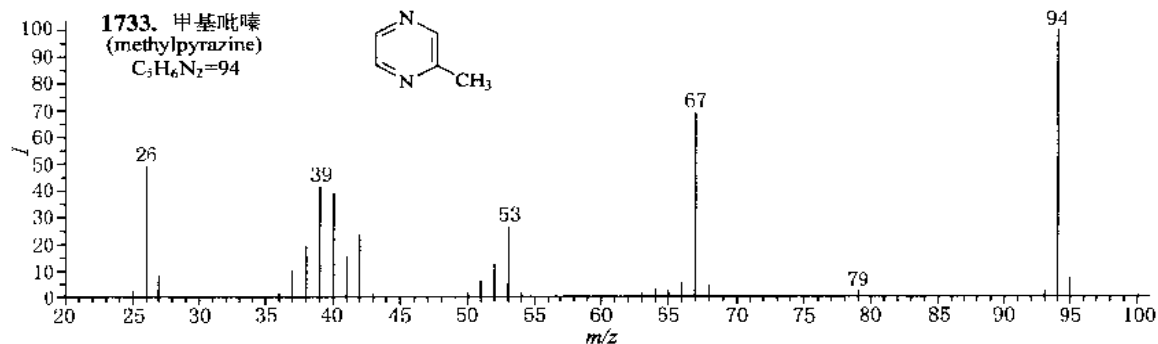
(3) 乙基、甲基乙基和二乙基吡嗪类化合物 (1739~1743) 还增加了  $M-CH_2CH_2CN$  离子, 四乙基吡嗪 (1744) 的  $M-CH_3$  离子很强。

(4) 丙基吡嗪 (1745) 能进行麦氏重排裂解失去乙烯。

(5) 烯基吡嗪 (1746) 有两条裂解途径, 即  $M-C_2H_2-CHN$  和  $M-C_2H_3-CHN$ 。

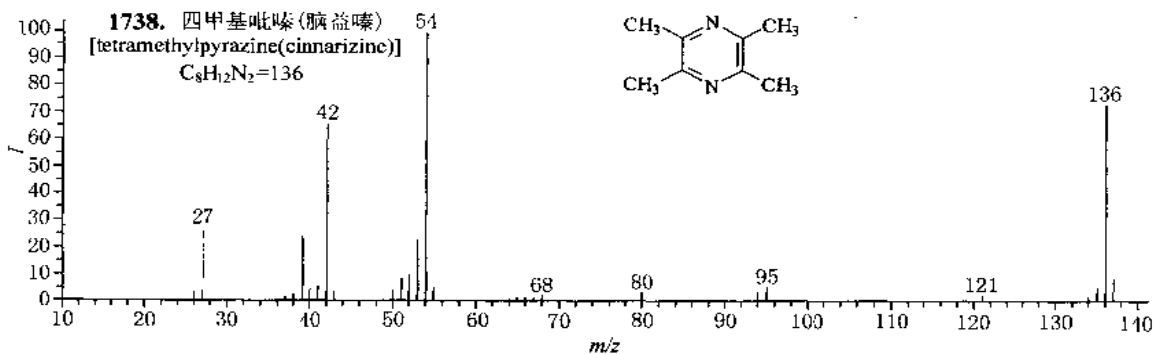
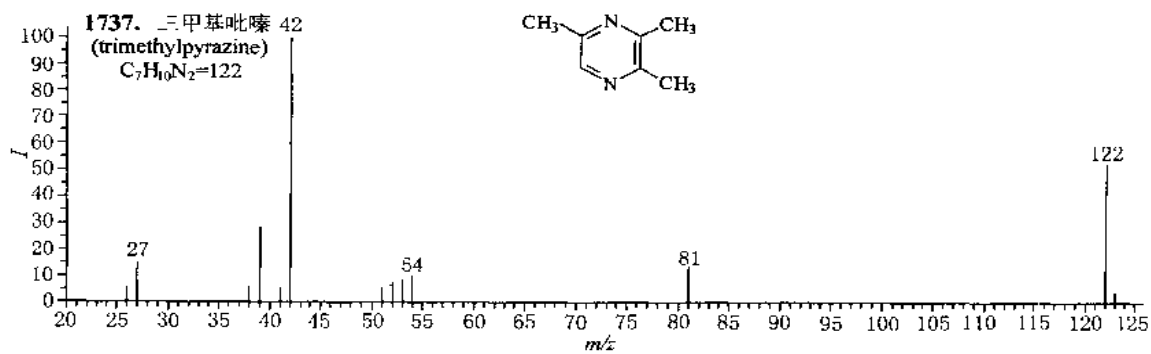
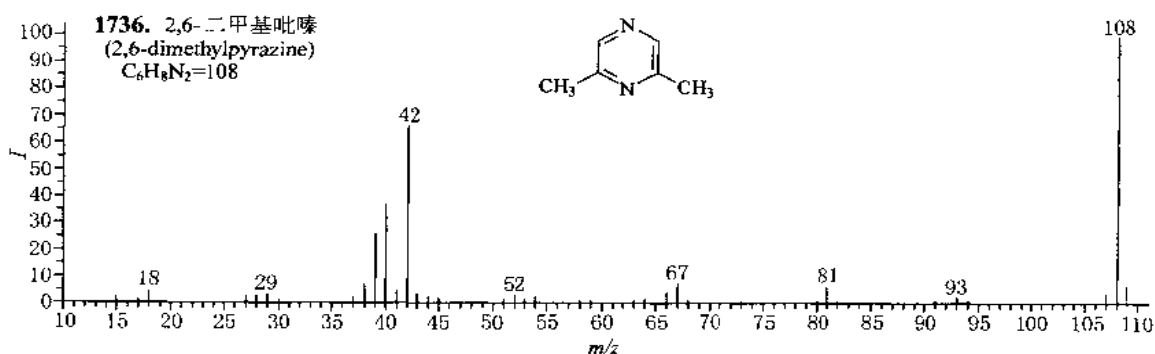
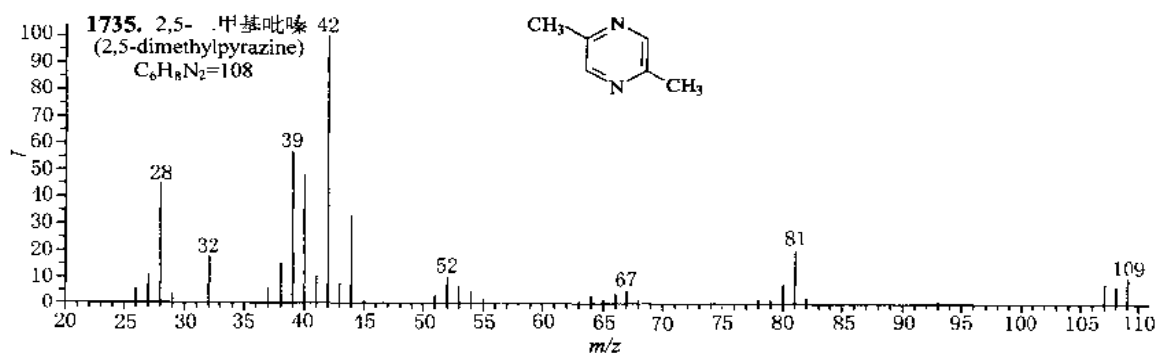
(6) 甲氧基吡嗪类 (1747~1749) 增加了  $M-CH_2O$  离子。

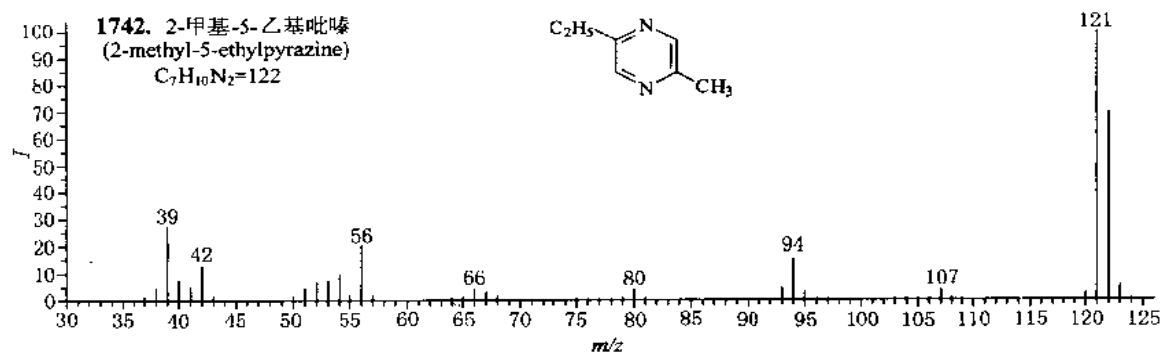
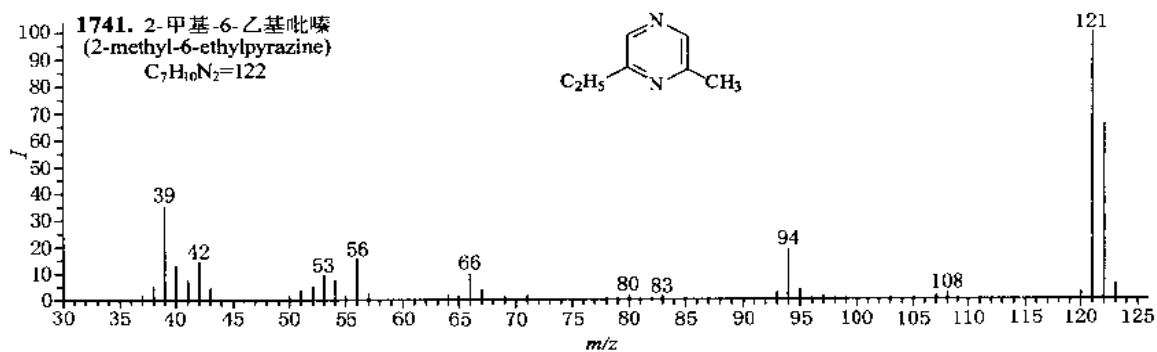
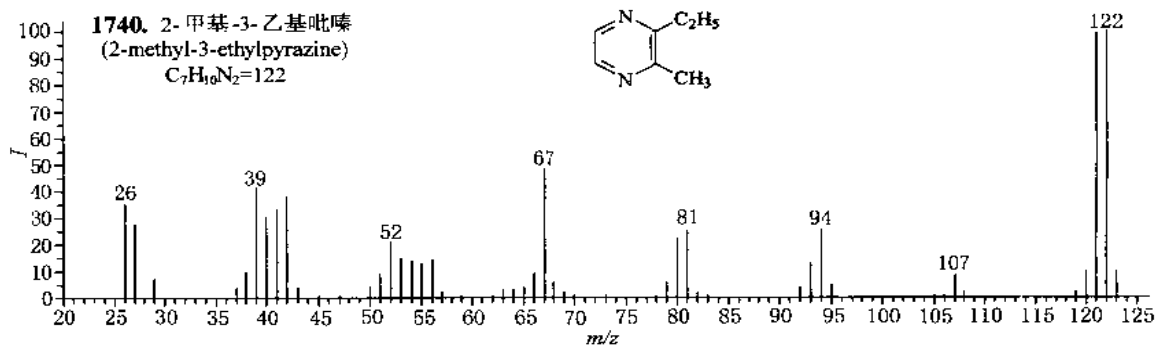
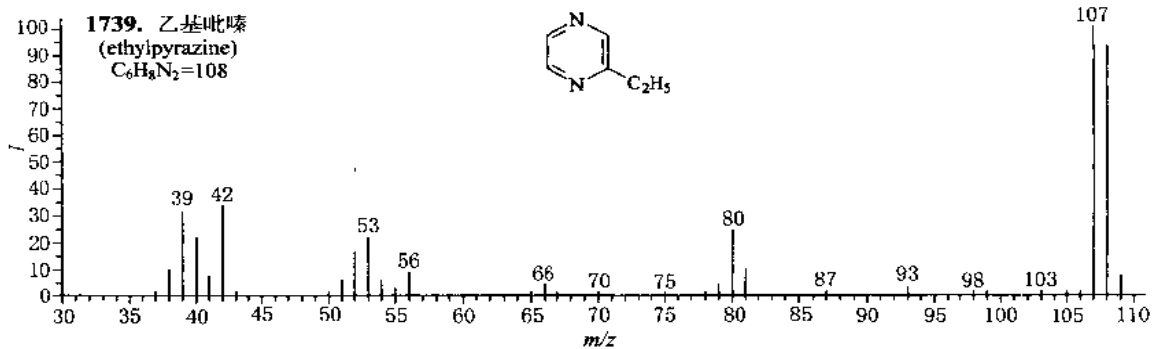
(7) 二氨基吡嗪 (1750) 有  $M-CNHCNH$  的裂解途径。

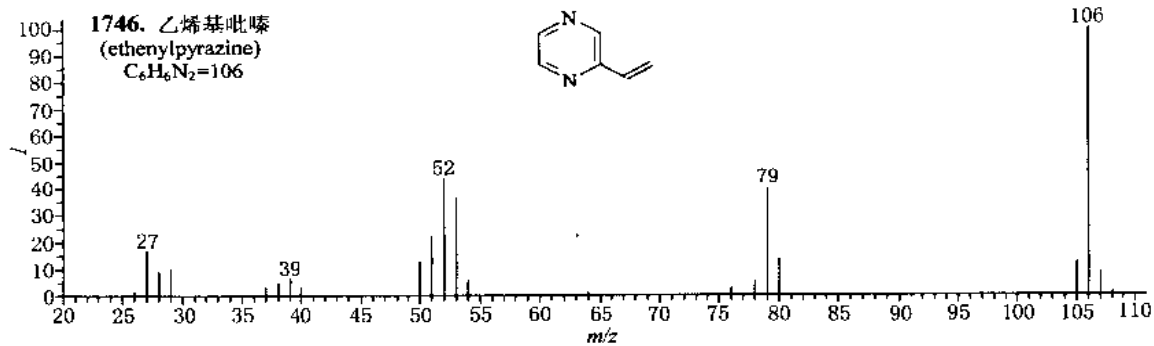
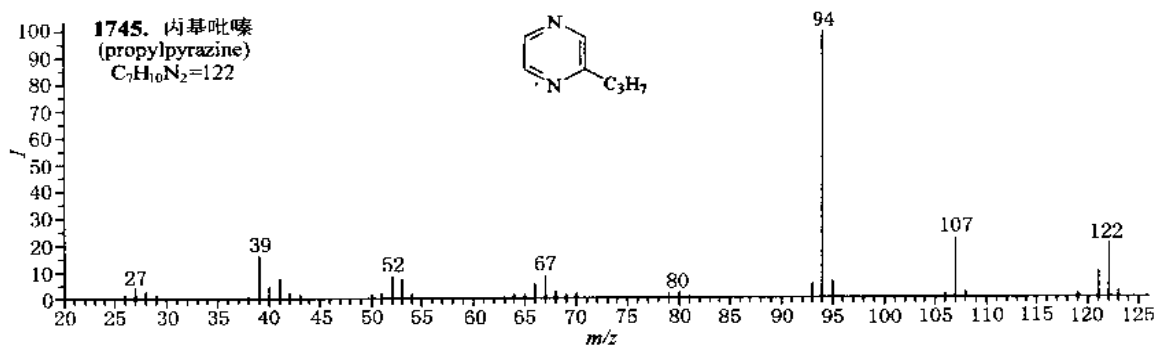
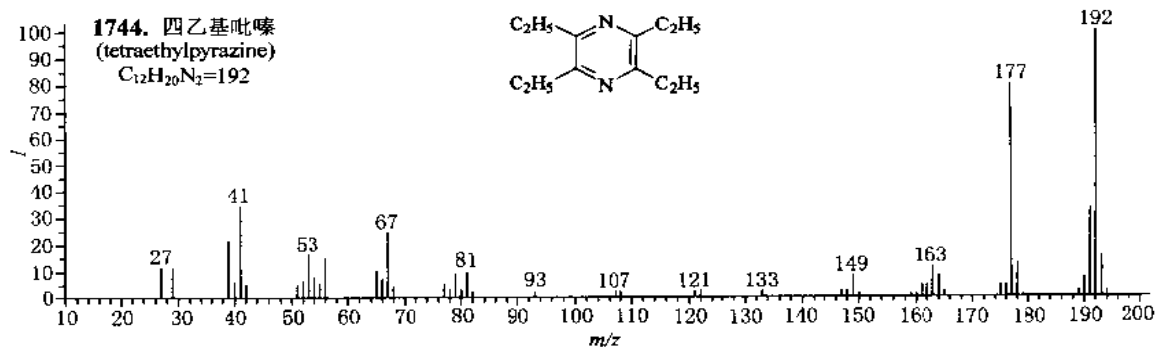
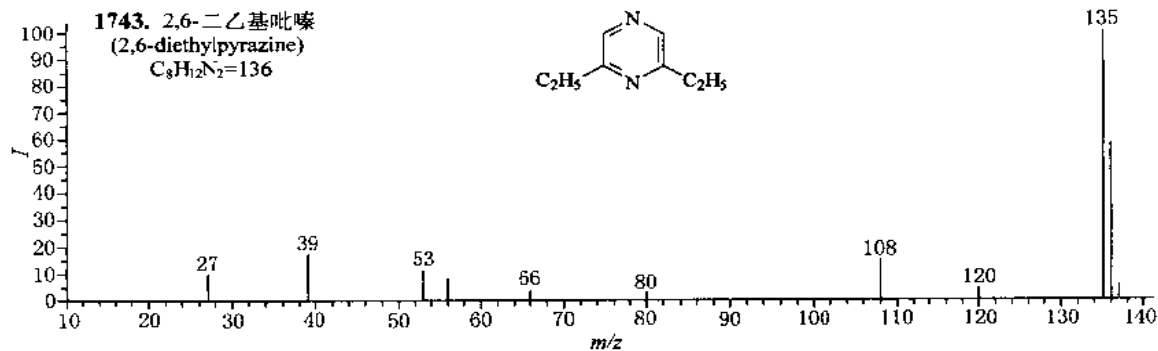


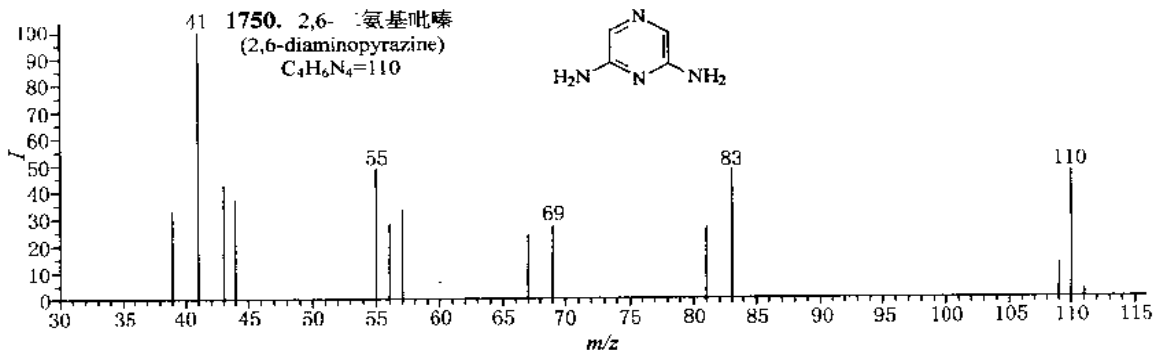
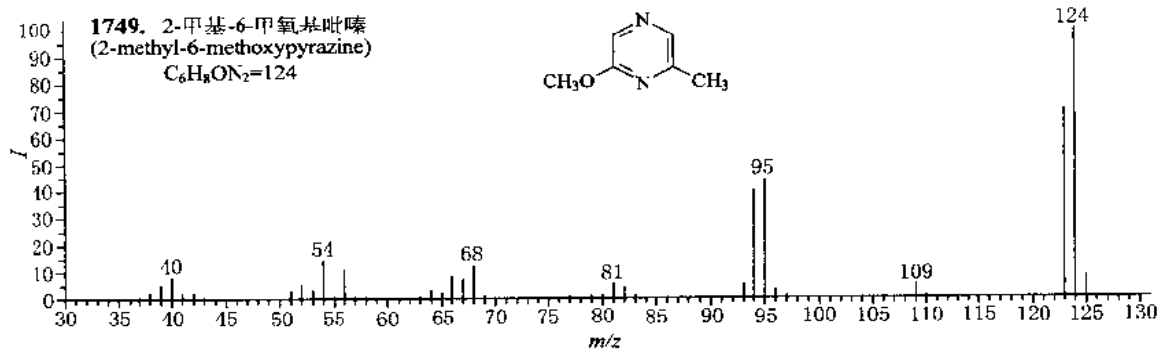
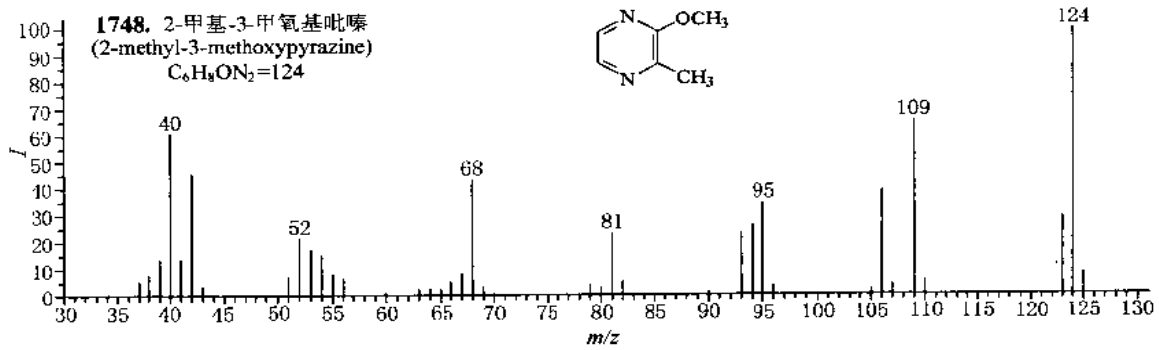
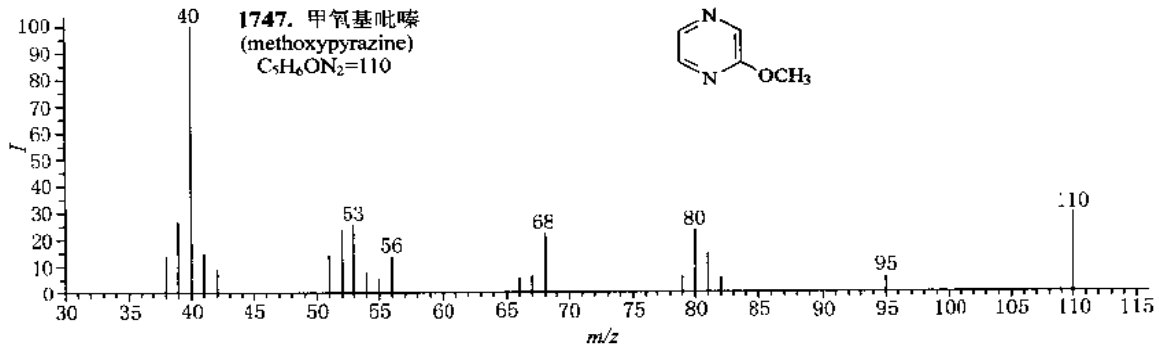
(8) 吡嗪甲酰胺 (1751) 的裂解途径是  $M-\text{CONH}-\text{CHN}$  和  $M-\text{CONH}_2-\text{CHN}$ , 另外有重要离子  $\text{CONH}_2$ 。

(9) 二氧化吡嗪 (1752) 的裂解途径是  $M-\text{O}-\text{O}$  和  $M-\text{CHN}$ 。

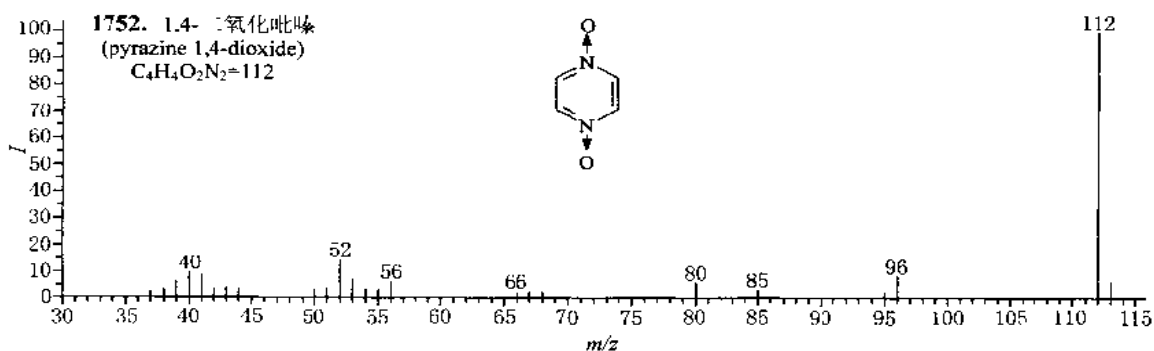
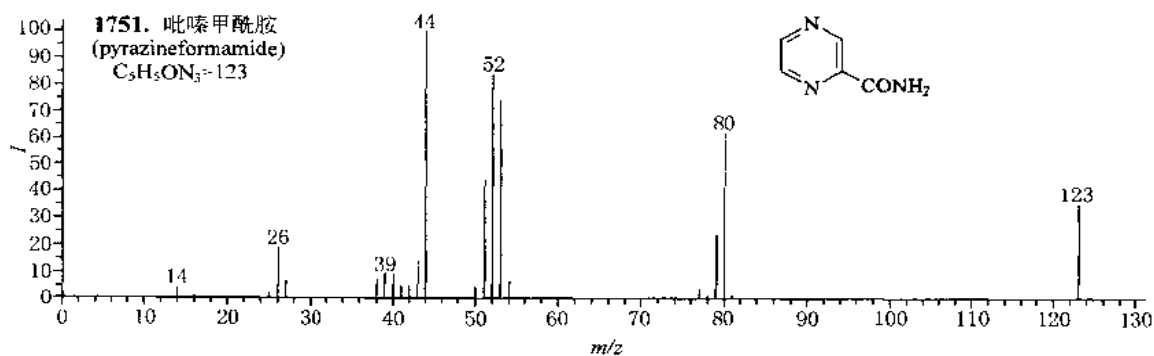








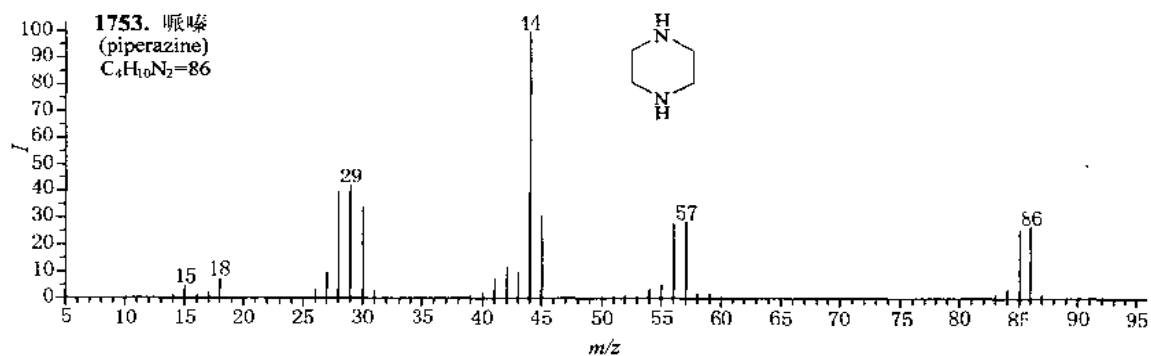


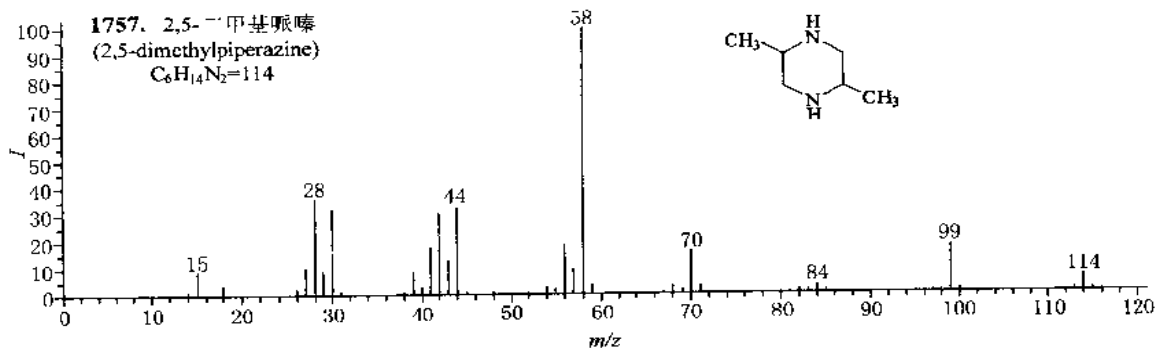
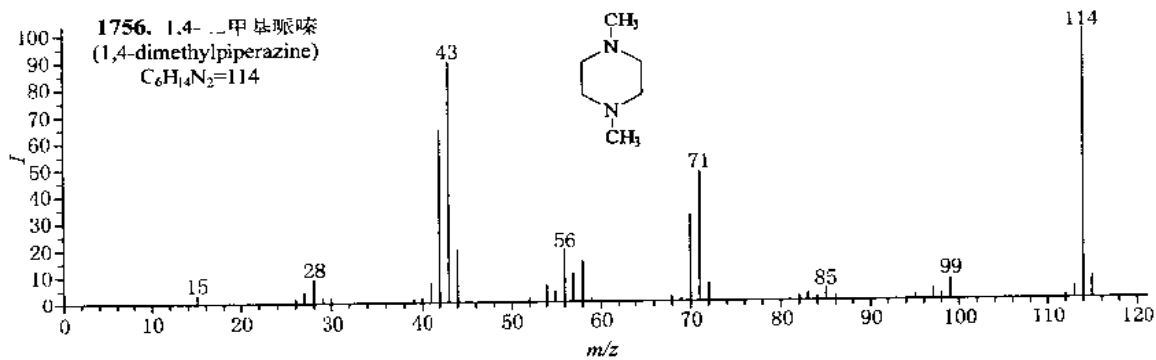
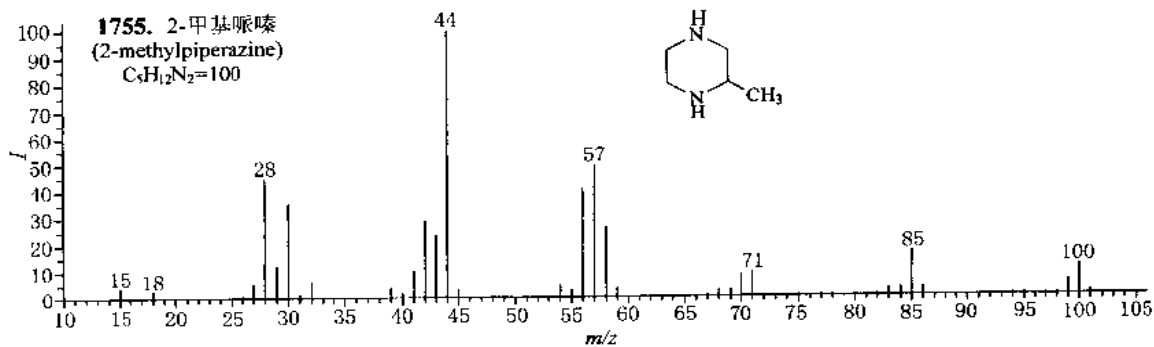
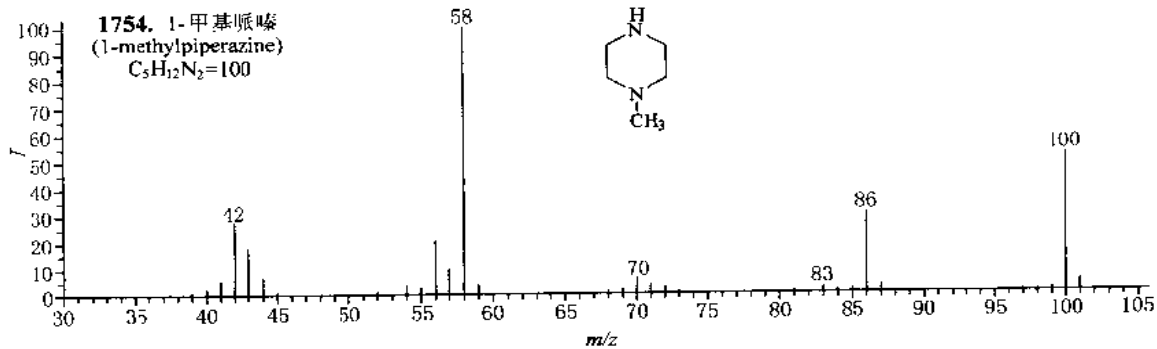


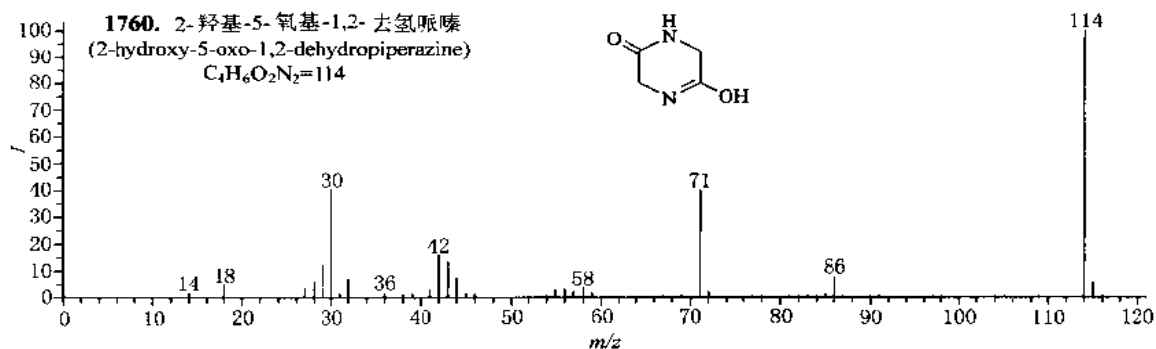
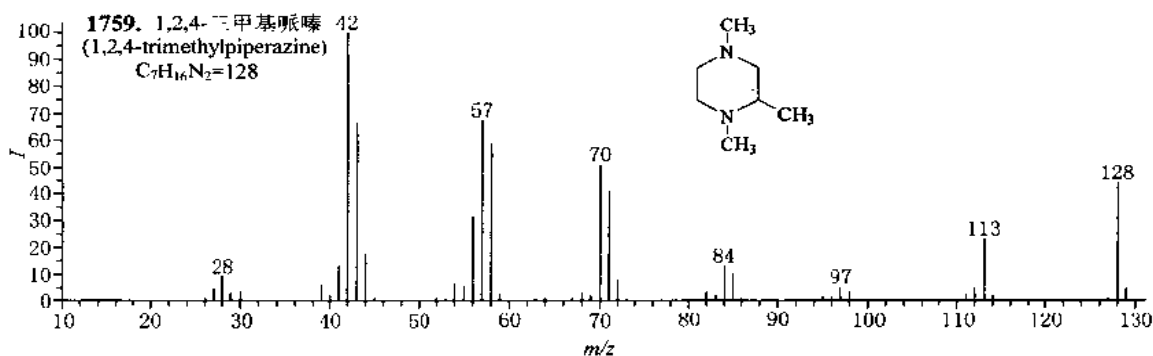
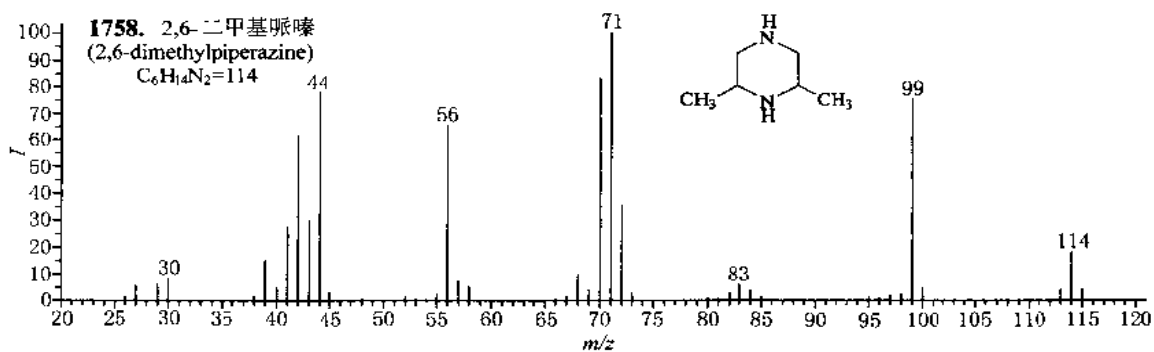
## 十六、哌嗪类

(1) 哌嗪 (1753) 自身有  $M-CH_2NH$ ,  $M-CH_2NH_2$  和  $M-CH_2NCH_2$  离子, 甲基和二甲基哌嗪 (1754, 1755) 还有  $CH_3CH-N^+H_2$  离子, 二甲基成对位取代时 (1756, 1757, 1759) 则出现  $CH_3CH-N^+HCH_3$  离子。

(2) 羟基或羰基衍生物 (1760) 有  $M-CO$  和  $M-CONH$  离子。







### 十七、三 嗪 类

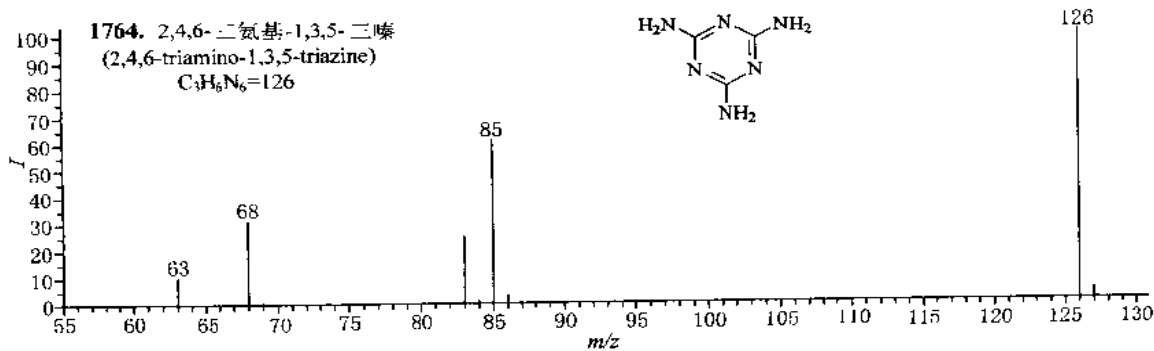
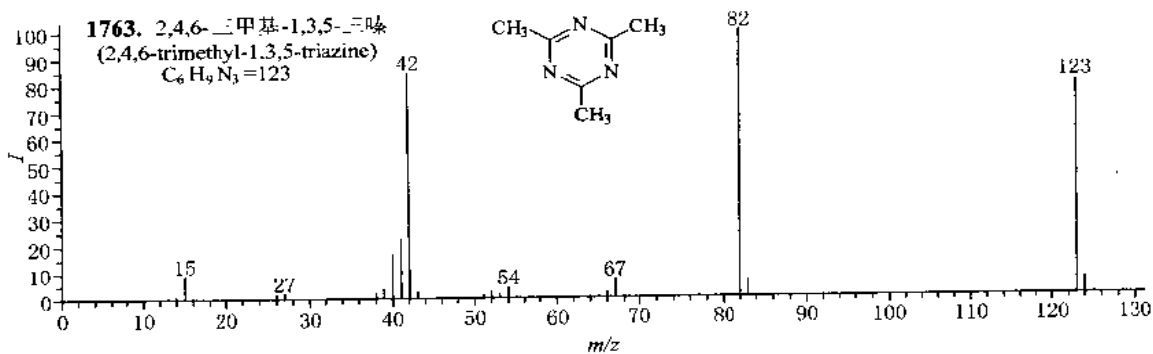
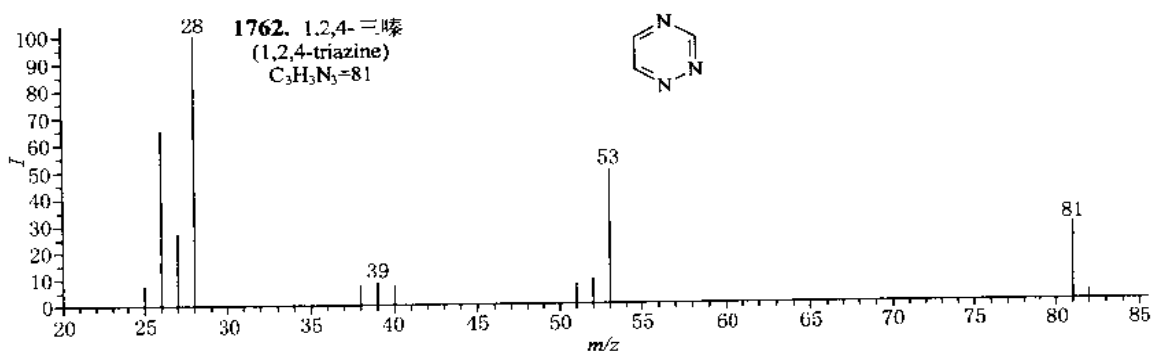
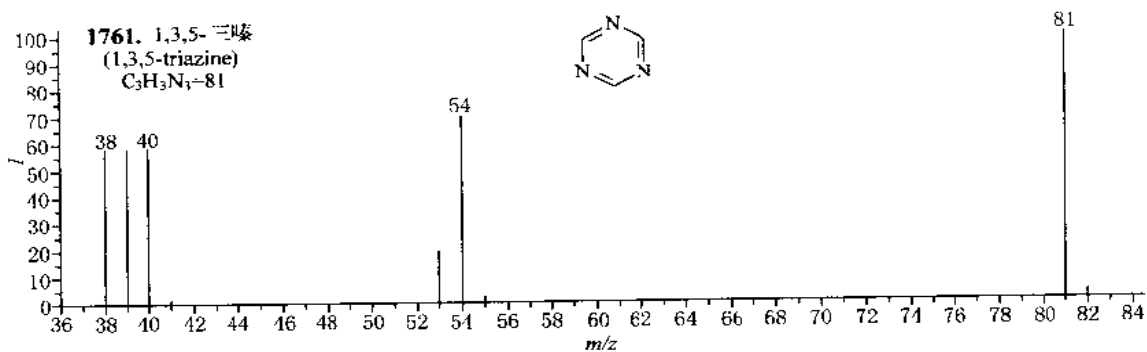
(1) 1,3,5-三嗪 (1761) 的主要裂解是  $M-CHN$ , 2,4,6-三甲基-1,3,5-三嗪 (1763) 的主要离子是  $M-CH_3CN$  和  $CH_3C\equiv N^+H$ , 1,2,4-三嗪 (1762) 的特征离子是  $M-N_2$ 。

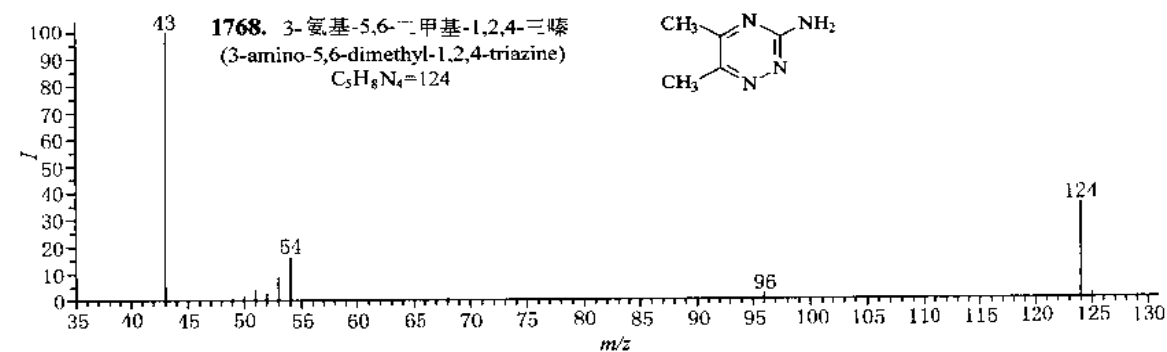
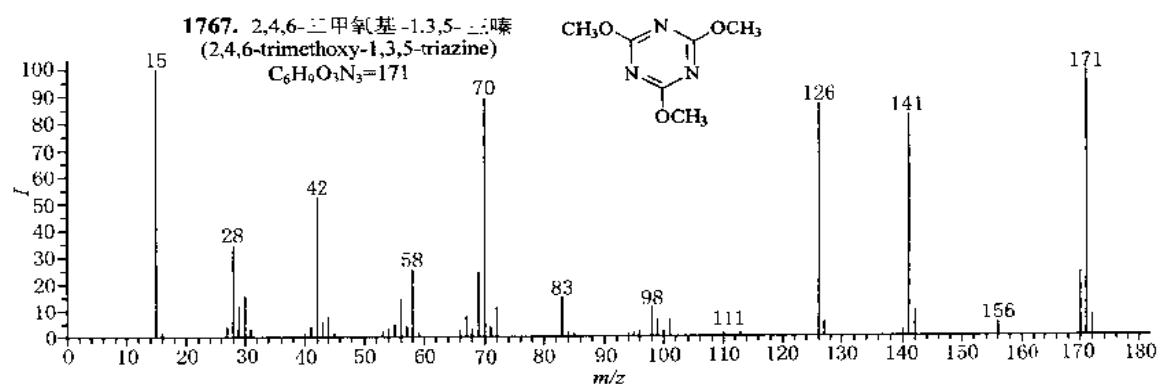
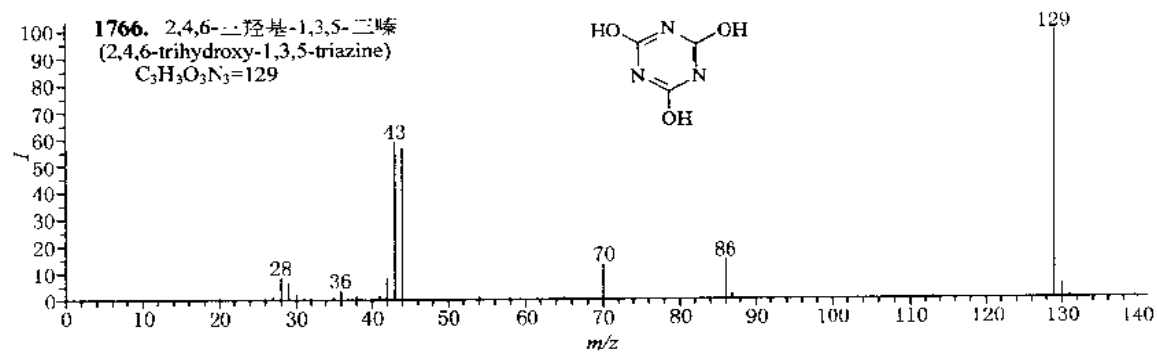
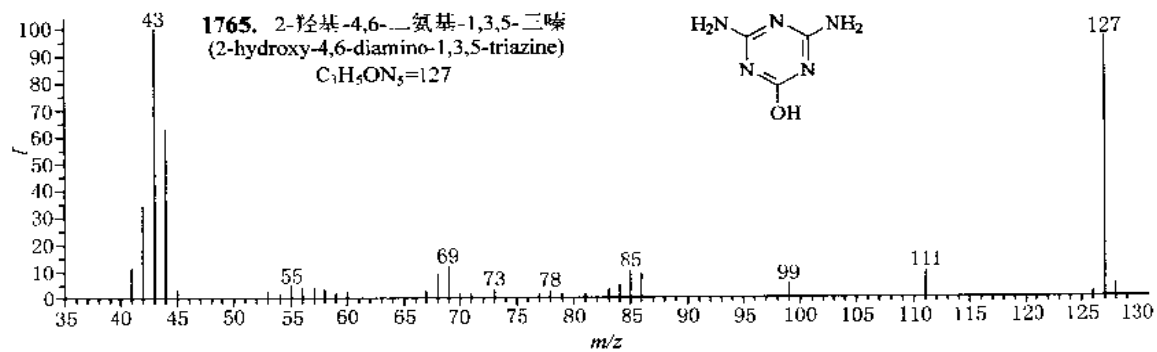
(2) 2,4,6-三氨基-1,3,5-三嗪 (1764) 的主要裂解是失去  $NHCN$ 。羟基二氨基三取代三嗪 (1765) 能失去氨基和一氧化碳。三羟基取代三嗪 (1766) 有  $M-HOCN-HOCN$  的裂解途径。

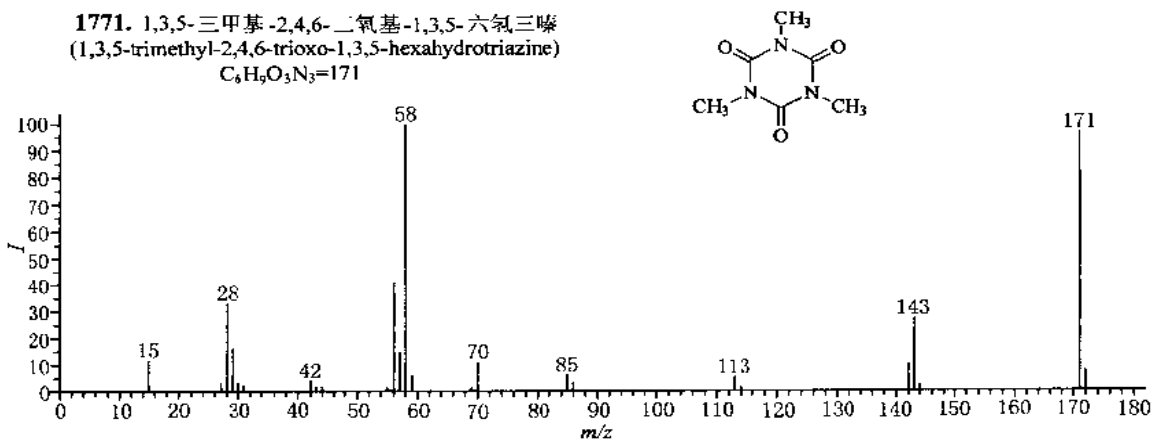
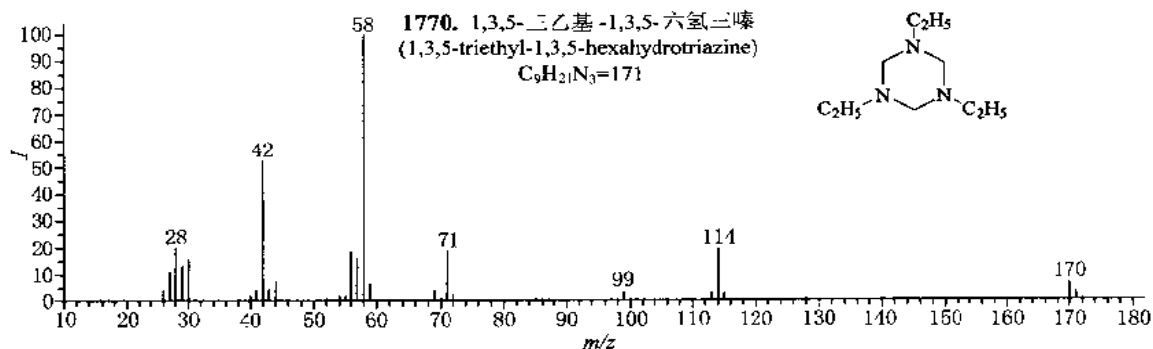
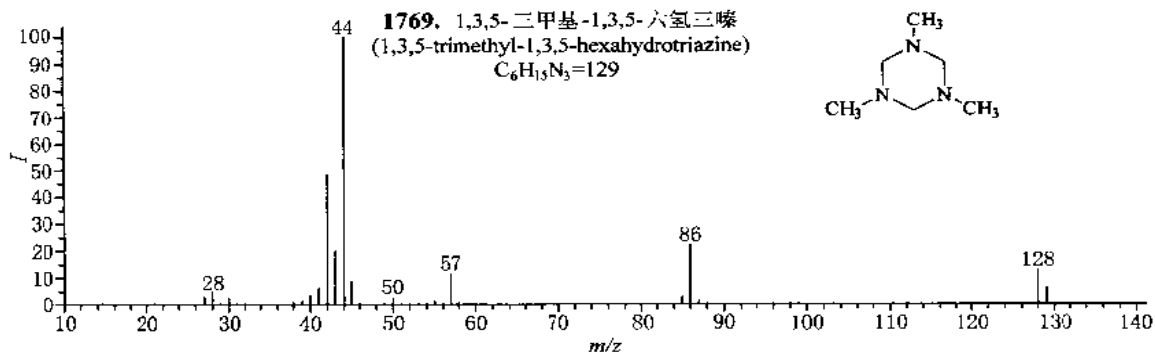
(3) 三甲氧基取代三嗪 (1767) 的质谱特征是  $M-CH_3$ ,  $M-CH_2O$  和  $M-CH_3-CH_2O$ 。

(4) 三甲基 (1769) 和三乙基 (1770) 六氢三嗪的特征离子分别为  $CH_3NHCH_2$  和  $C_2H_5NHCH_2$ 。

(5) 三甲基二氧基六氢三嗪 (1771) 的特征离子是  $\text{CH}_3\text{NHCO}$ 。





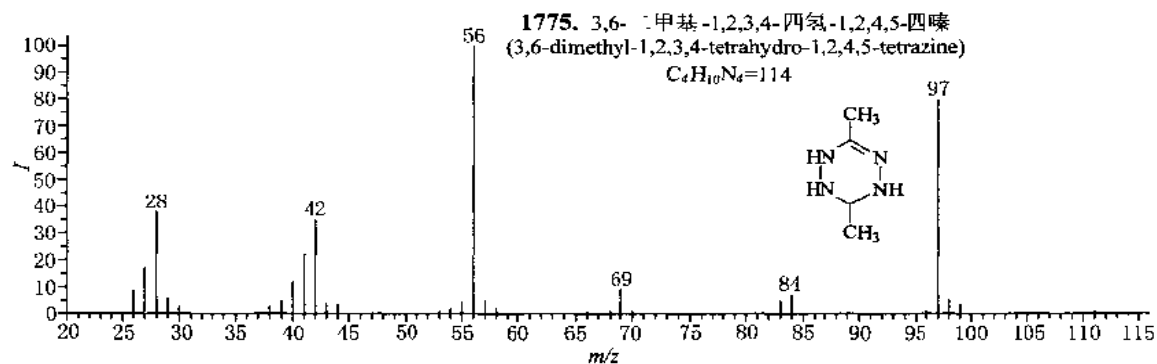
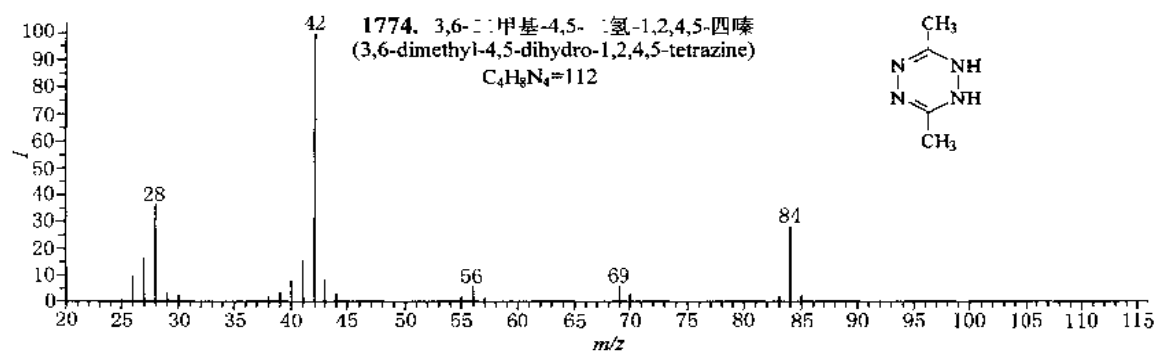
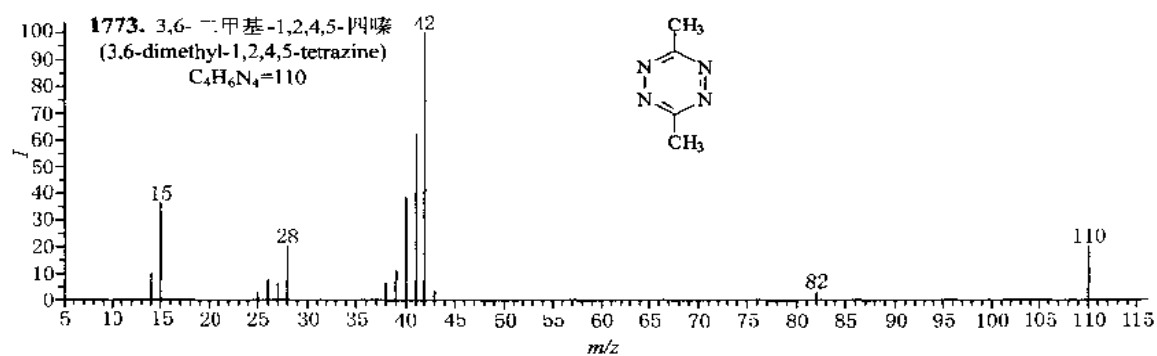
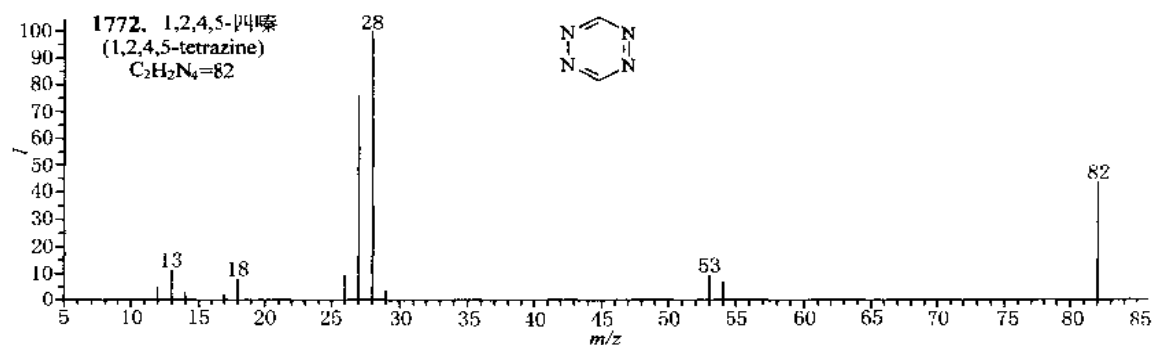


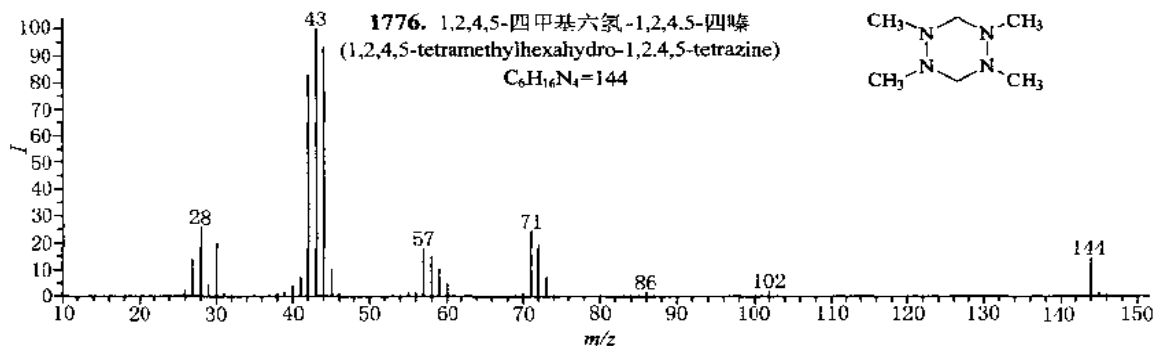
#### 十八、四 嗪 类

(1) 四嗪 (1772~1774) 的氮原子上无取代时, 特征离子是  $M-N_2$ 。

(2) 3,6-二甲基四氢四嗪 (1775) 有特征离子  $CH_3-\begin{matrix} N^+ \\ | \\ C \\ | \\ NH \end{matrix}$ , 没有 RDA 裂解出现。

(3) 四甲基六氢四嗪 (1776) 有特征离子  $CH_3\dot{N}HCH_2$  和  $CH_3\dot{N}CH_2$ 。

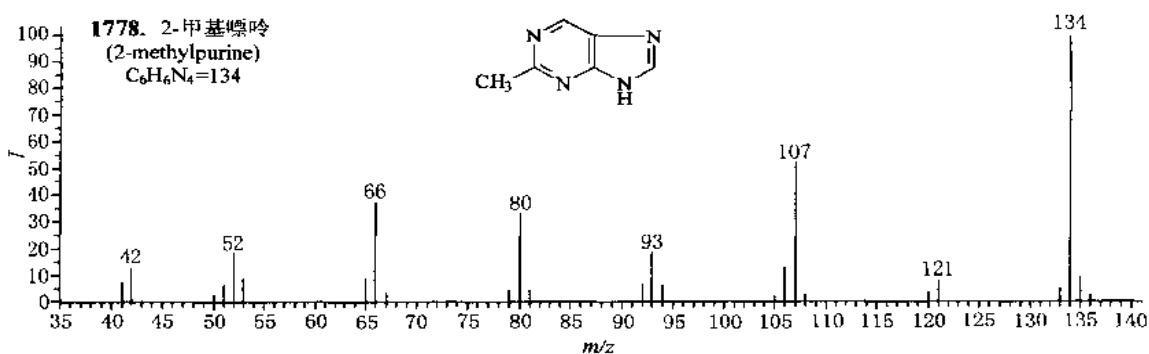
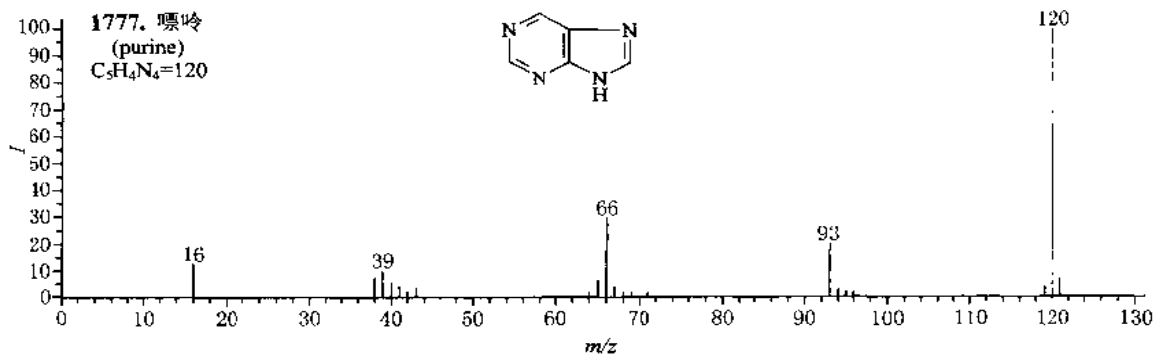




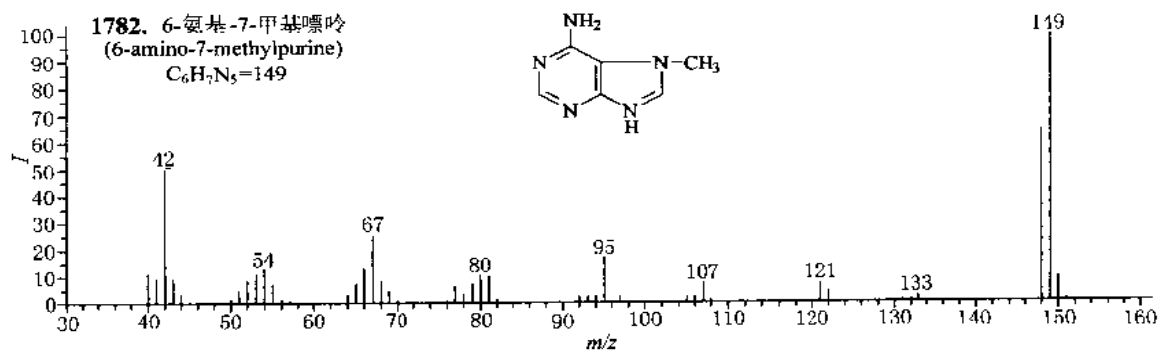
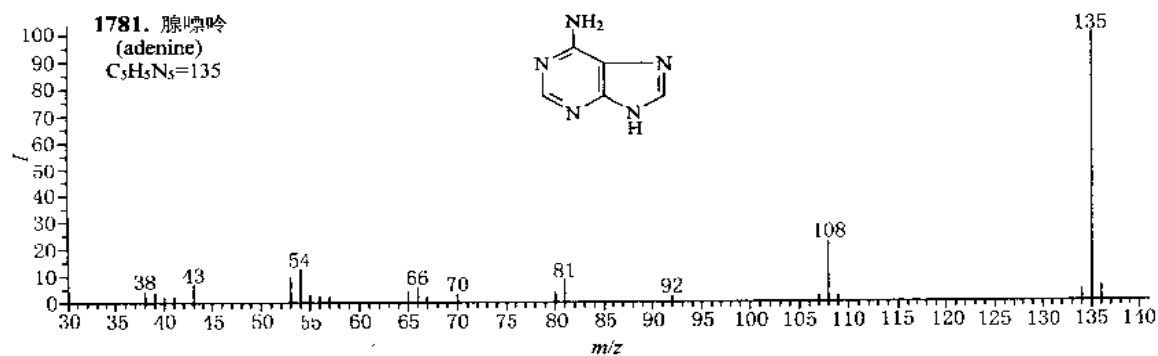
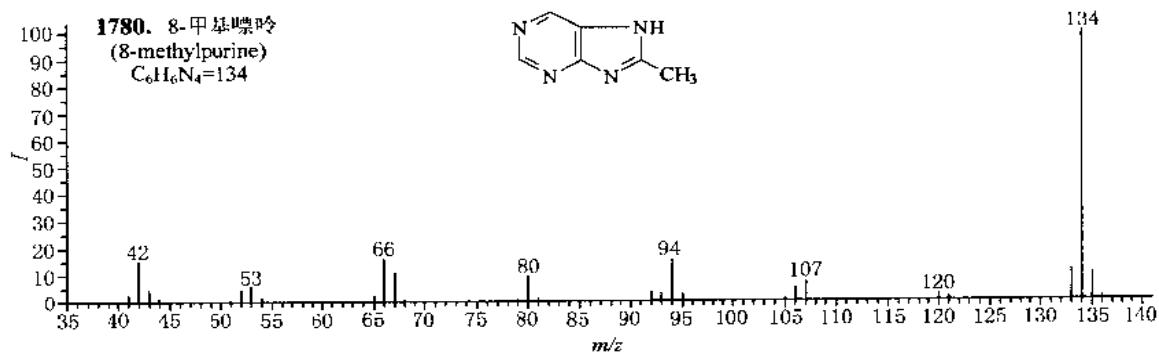
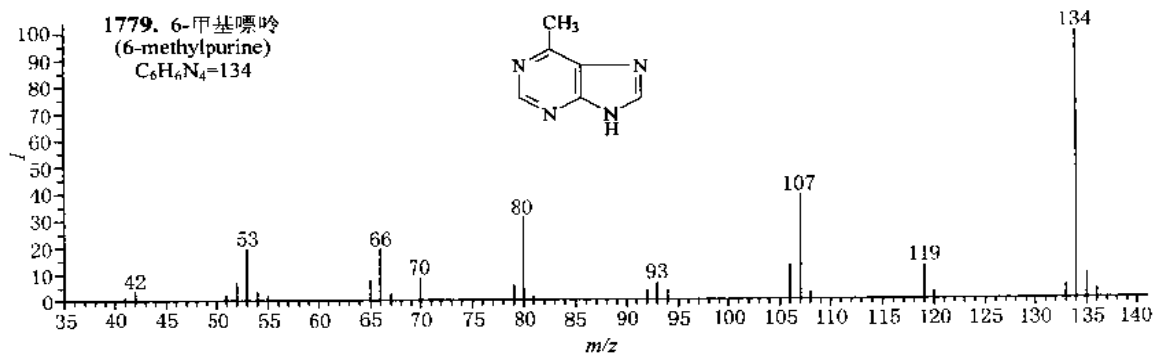
### 十九、嘌呤类

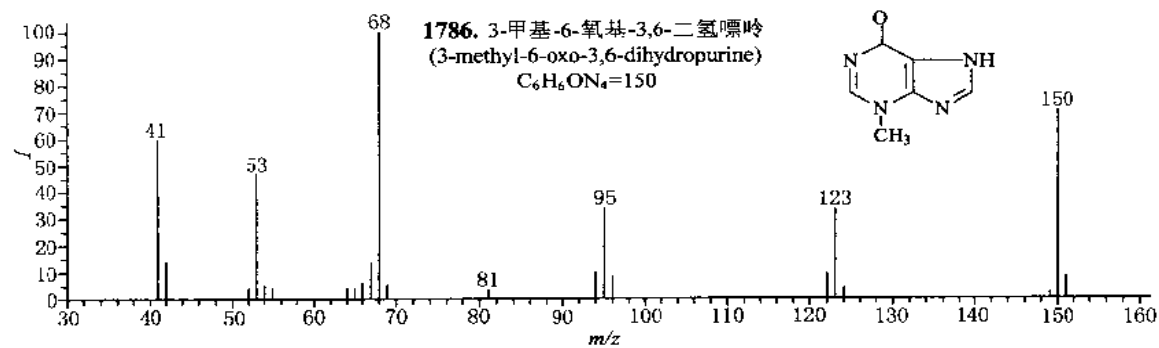
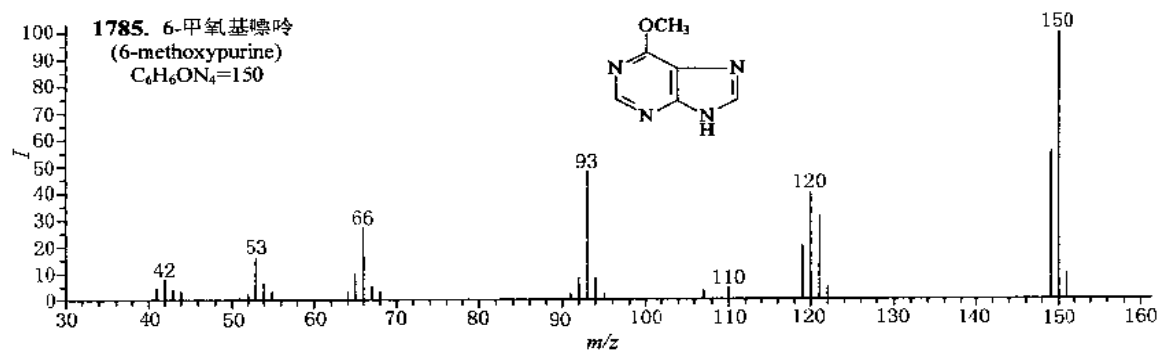
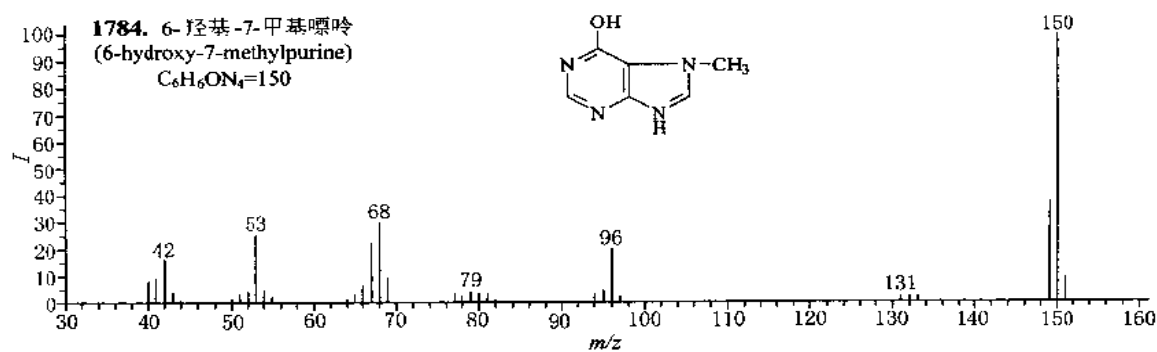
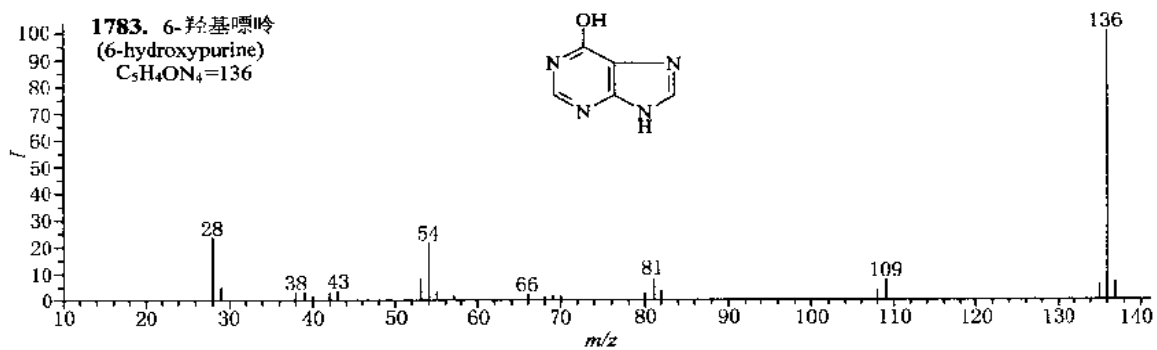
- (1) 嘌呤 (1777) 本身的裂解途径是  $M-CHN-CHN$ 。
- (2) 甲基嘌呤类 (1778~1780) 的裂解途径是  $M-CHN-CHN$  和  $M-CH_2CN-CHN$ 。
- (3) 腺嘌呤 (1781, 1782) 的裂解是  $M-CN-CHN$  和  $M-CH_2CN-CN$ 。
- (4) 羟基嘌呤 (1783, 1784) 的裂解途径是  $M-CHN-CO-CHN$ 。
- (5) 甲氧基嘌呤 (1785) 有  $M-CHO$ ,  $M-OCH_3$  和  $M-CH_2O-CHN-CHN$  的裂解。
- (6) 氧基嘌呤 (1786, 1788) 的裂解途径是  $M-CHN-CO-CHN$  或  $M-CO-CHN-CHN$ 。

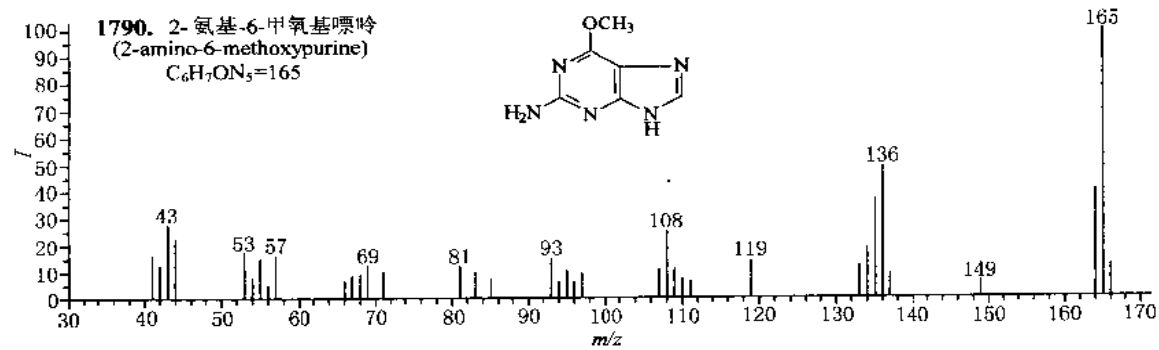
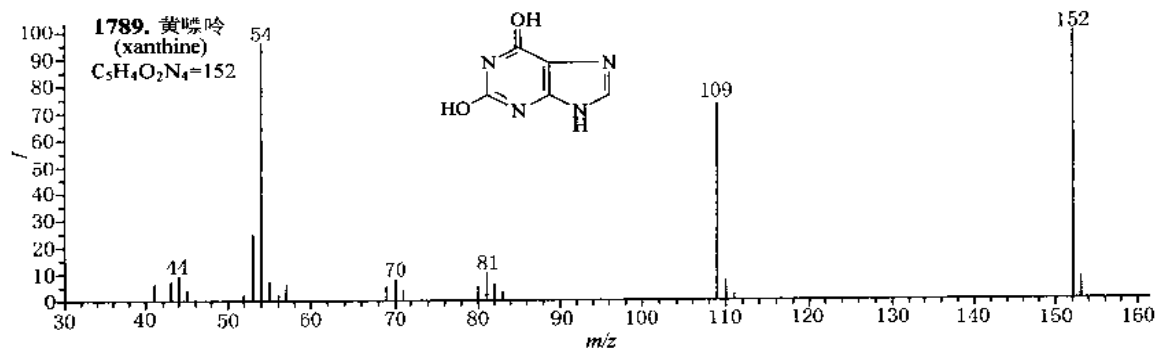
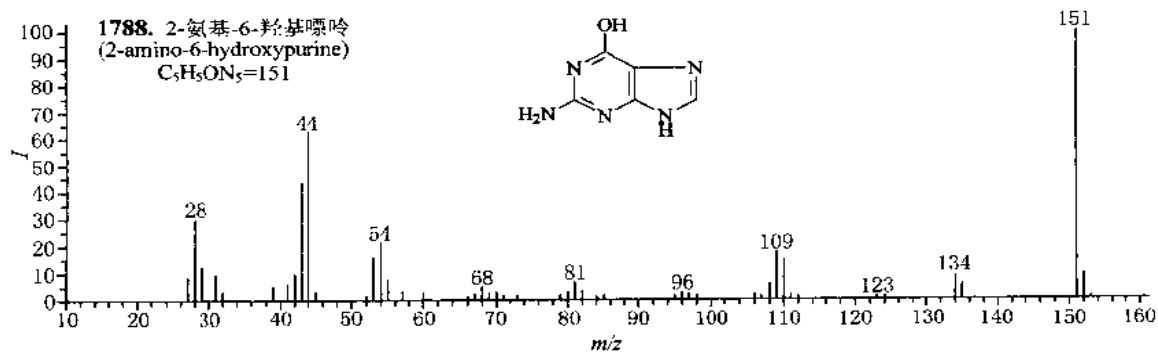
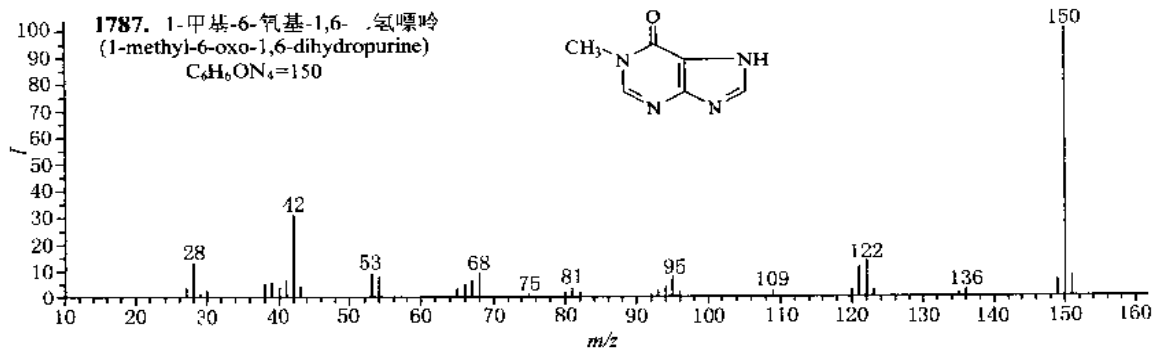
(7) 黄嘌呤类 (1789~1796) 的主要离子是  $M-HOCN$  和  $m/z$  54, 后者的结构可能是

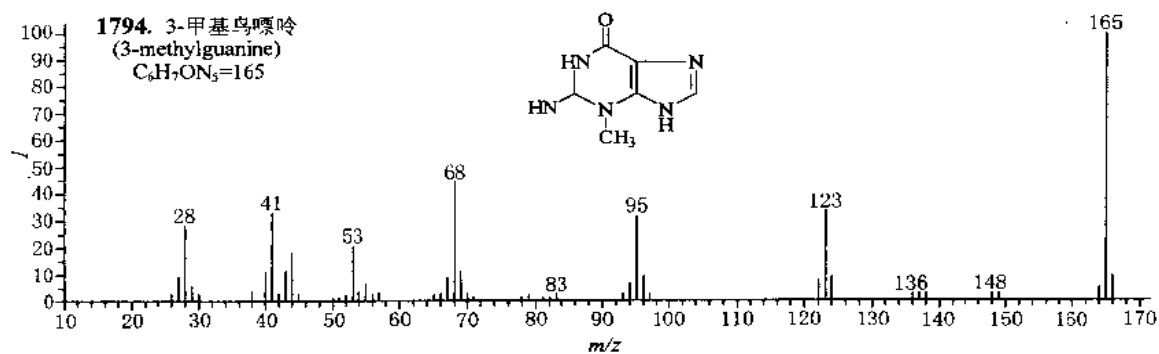
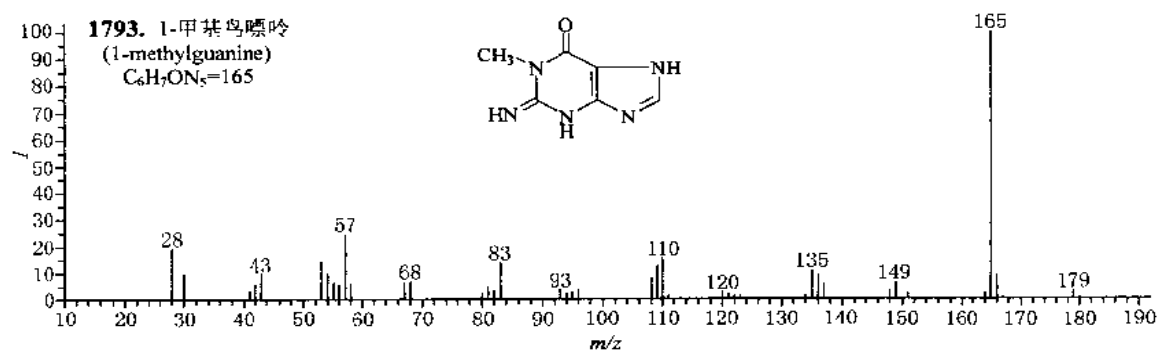
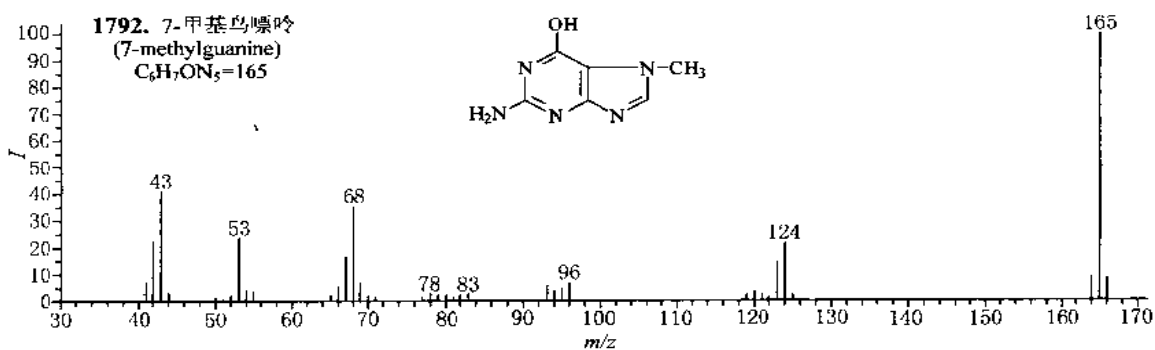
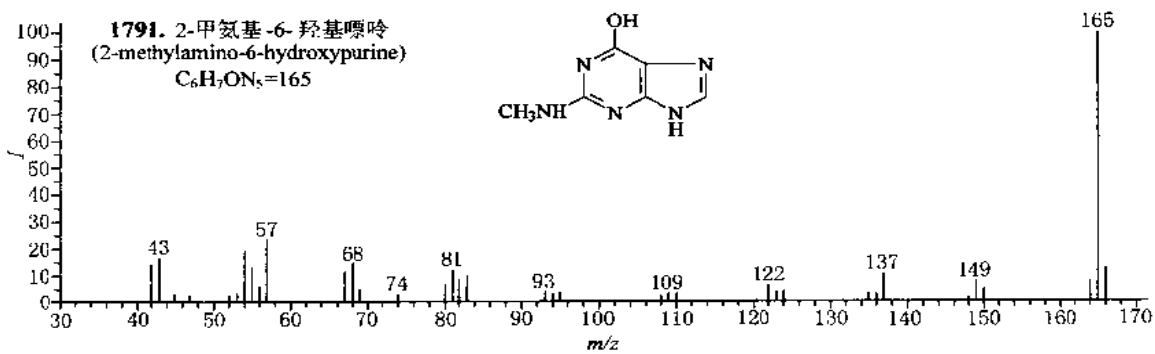


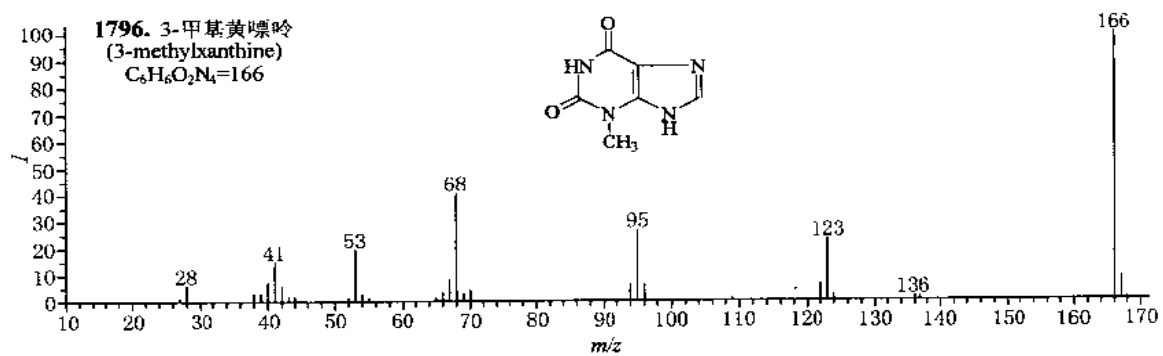
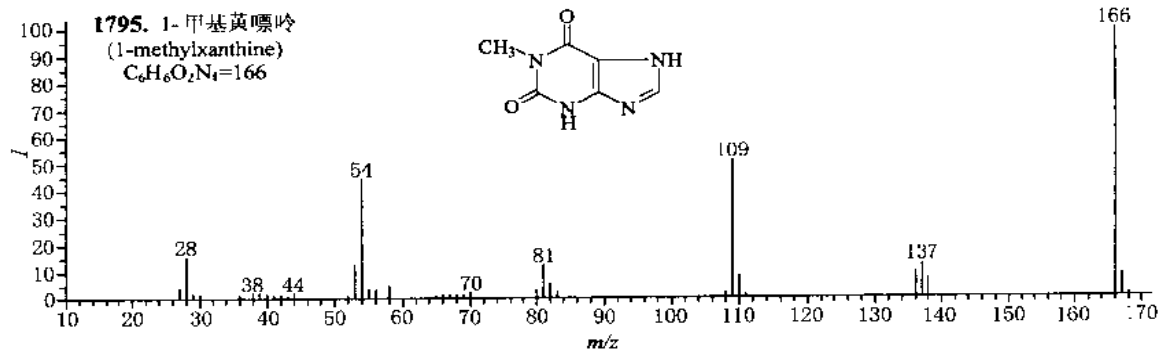










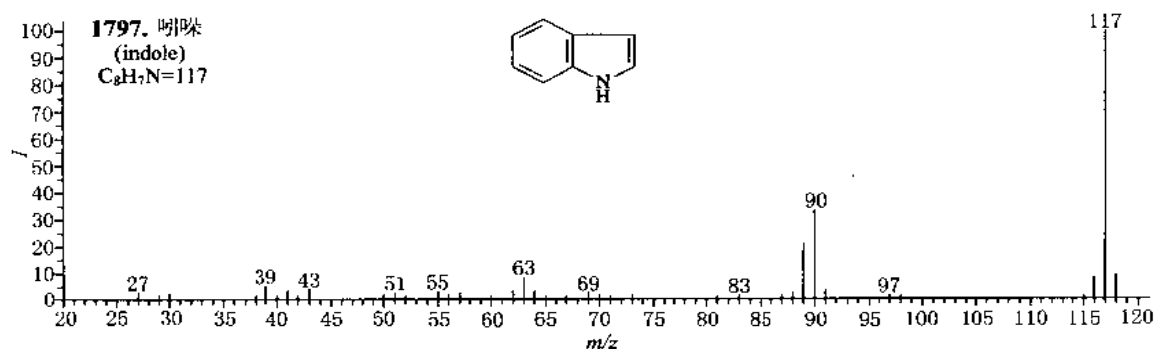


## 第十二章 吲哚、喹啉和异喹啉类

### 第一节 吲哚类

#### 一、简单吲哚类

(1) 吲哚 (1797) 本身的裂解途径是  $M-CHN-H-C_2H_2$ 。



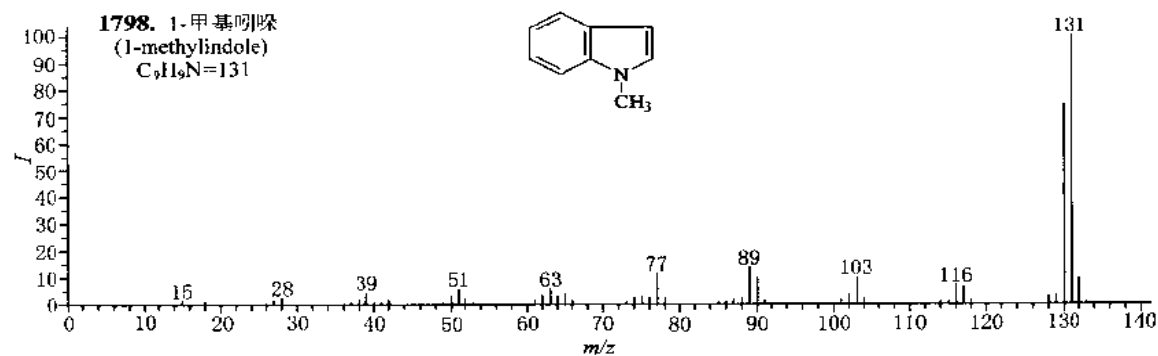
(2) 甲基吲哚类化合物 (1798~1804) 的裂解途径是  $M-H-CHN-C_2H_2-C_2H_2$  和  $M-CH_3CN-H-C_2H_2-C_2H_2$ 。二甲基吲哚类化合物 (1805~1811) 的裂解途径是  $M-CH_3-CHN-C_2H_2-C_2H_2$ ,  $M-H$  离子也很强。

(3) 羟基吲哚 (1812, 1813) 有两条裂解途径, 即  $M-CO-CHN$  和  $M-CO-H-CHN-C_2H_2$ 。

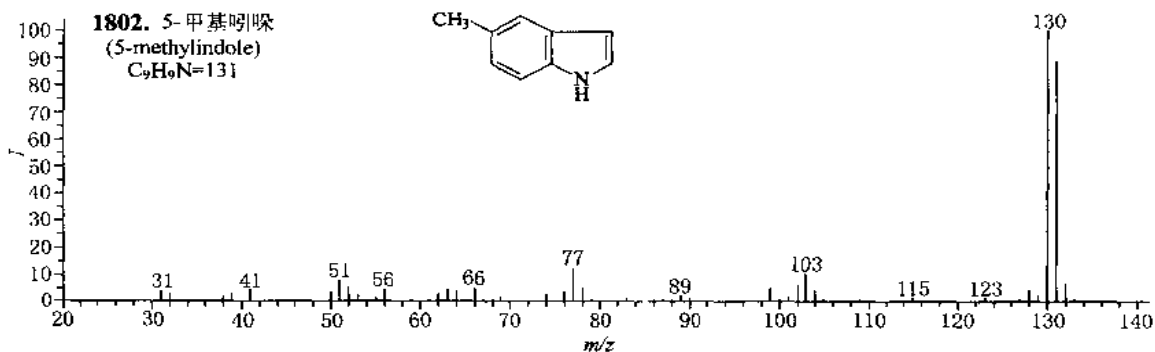
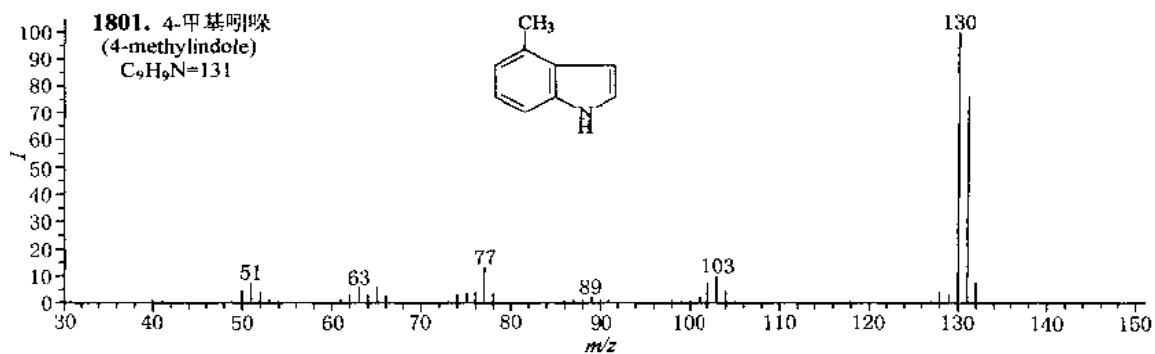
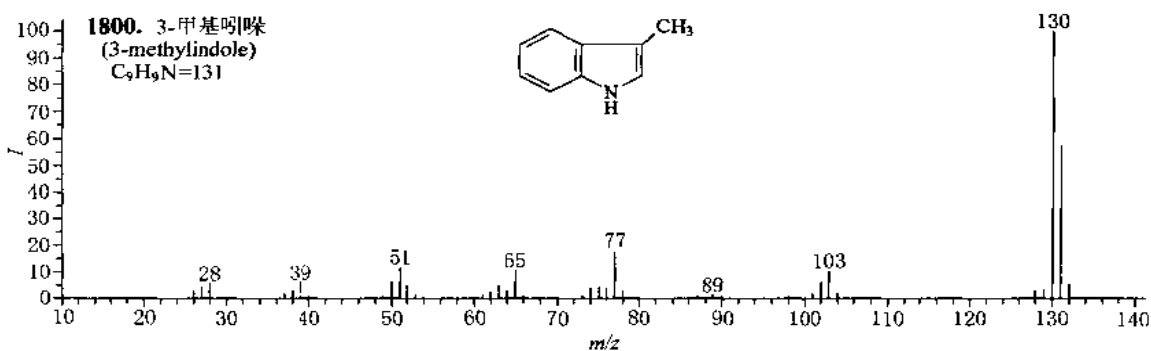
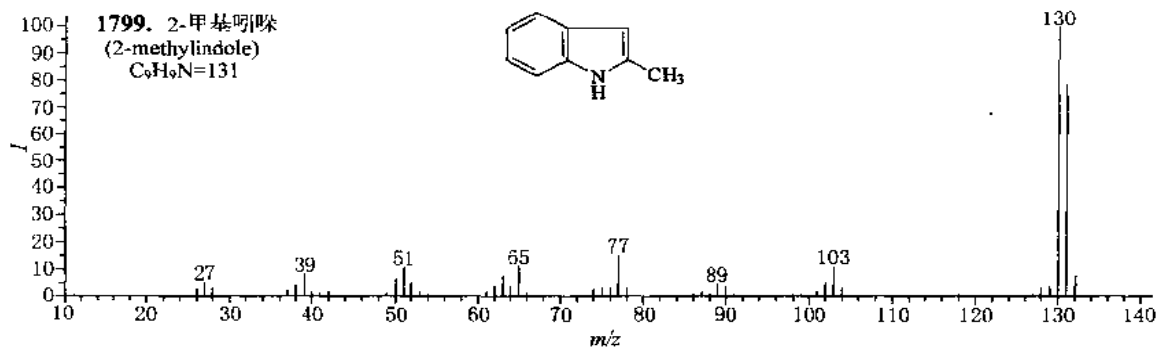
(4) *N*-甲氧基吲哚 (1814) 有三条裂解途径, 即  $M-CH_3$ ,  $M-CH_2O-CHN$  和  $M-OCH_3-CHN-C_2H_2$ , 其他位置取代的甲氧基吲哚 (1815~1818), 一般有两条裂解途径, 即  $M-CH_3-CO-CHN-C_2H_2$  和  $M-OCH_3-CHN-C_2H_2$ 。

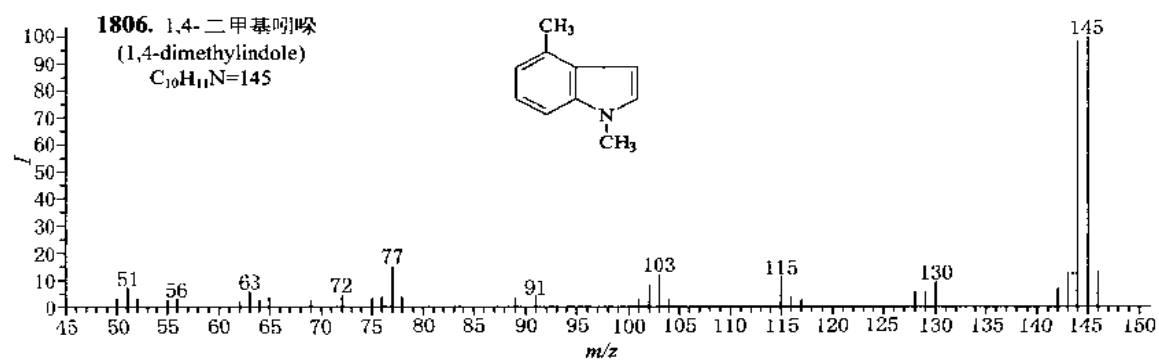
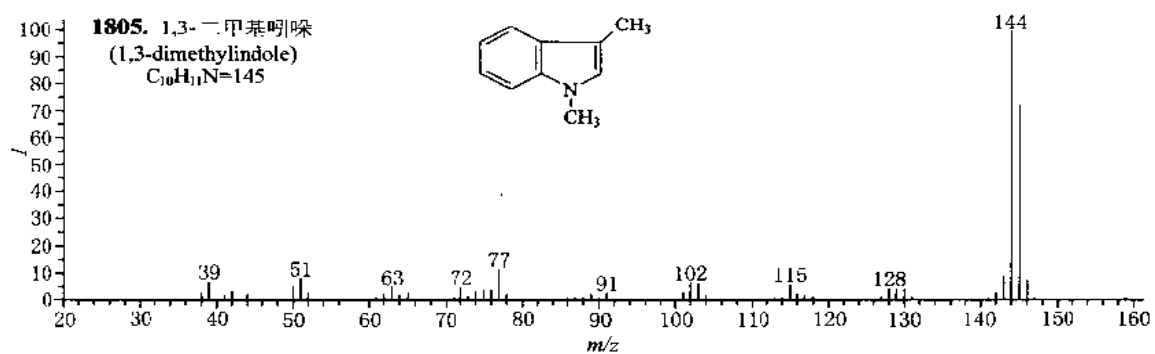
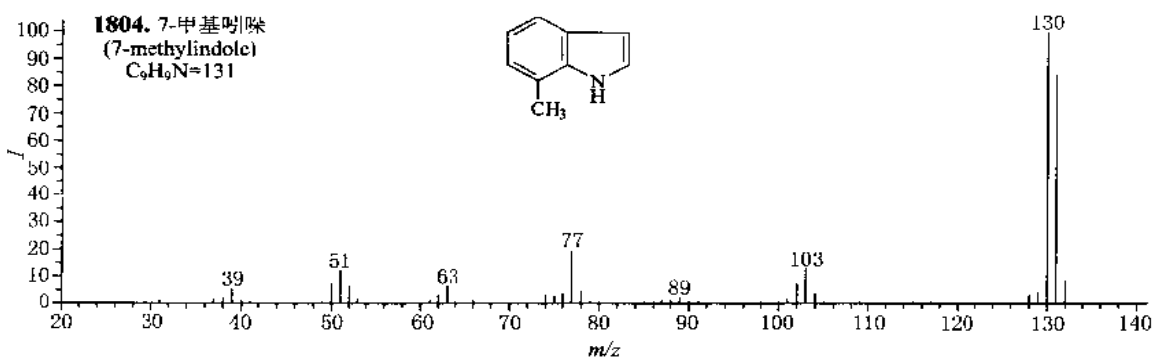
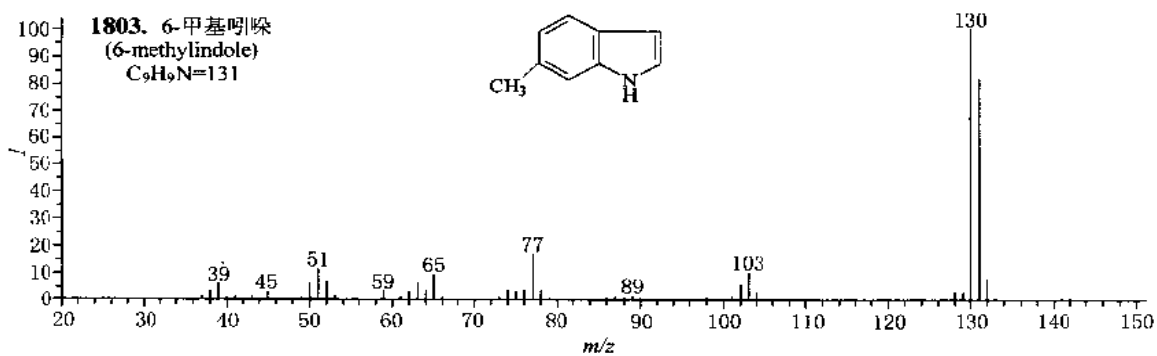
(5) 羟基和甲基二取代的吲哚 (1819), 主要裂解途径是  $M-H-CO-CHN-C_2H_2-C_2H_2$ 。

(6) 一氯一溴取代的吲哚 (1820~1822), 主要裂解途径是  $M-X-CHN-C_2H_2$ 。

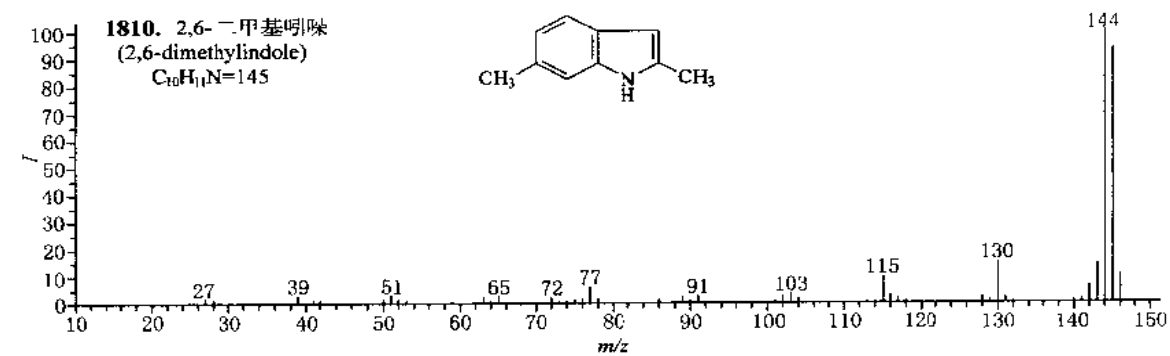
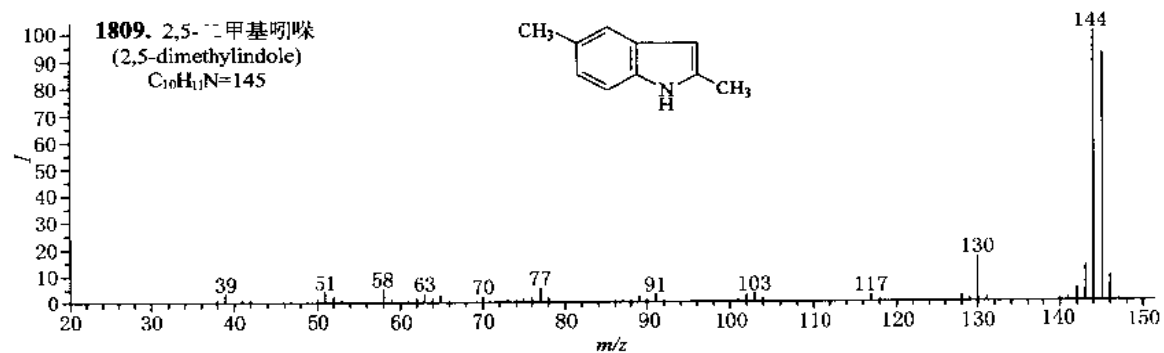
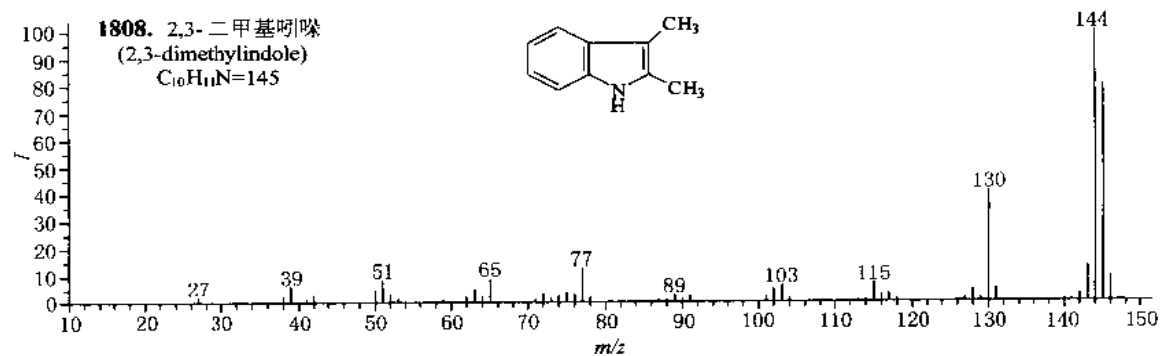
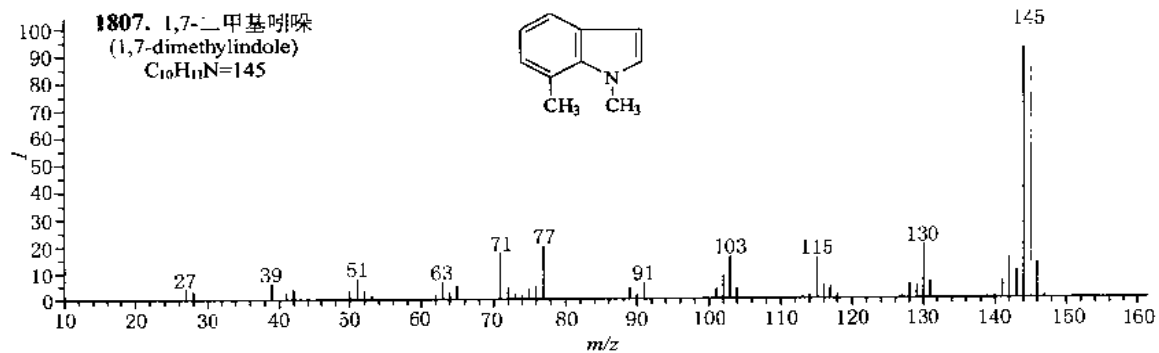


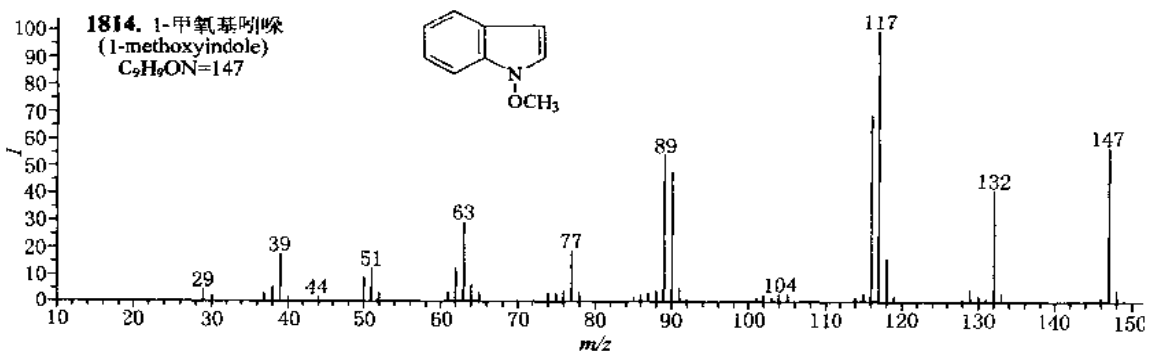
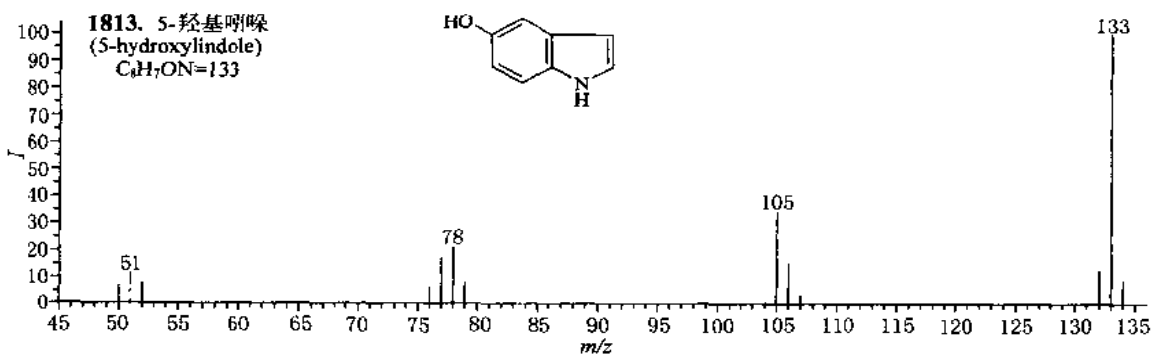
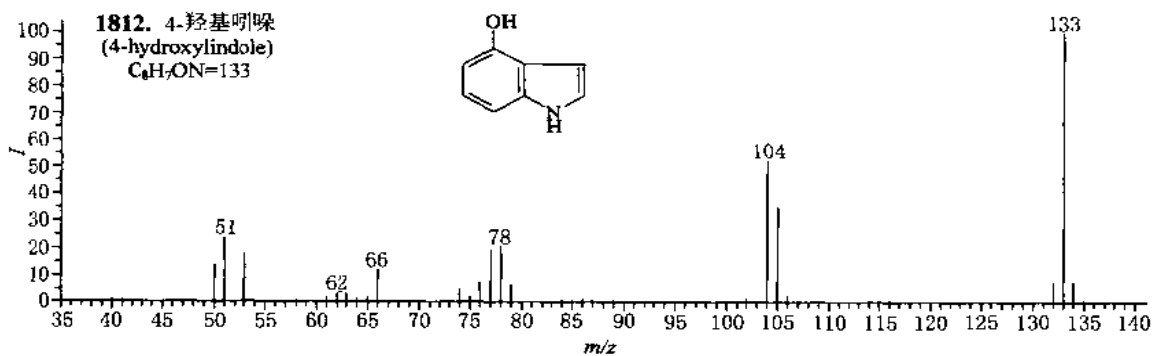
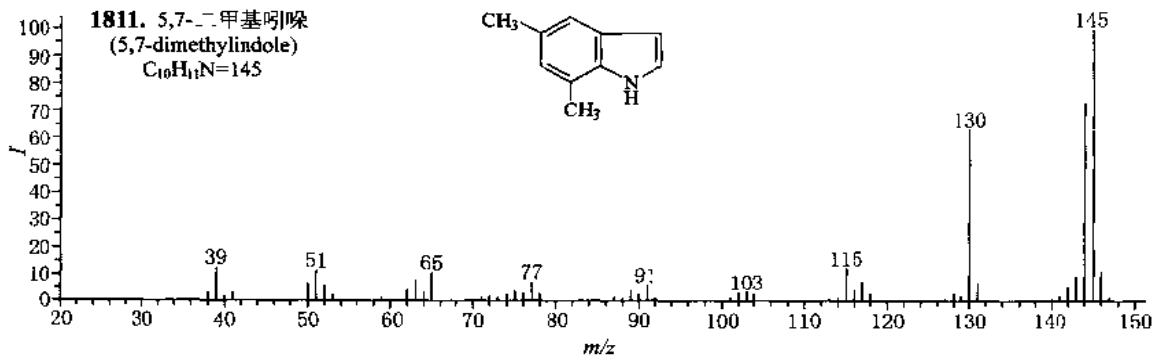
(7) 二氢吲哚 (1823) 本身的裂解途径是  $M-H-CHN-C_2H_2-C_2H_2$ , 甲基二氢吲哚 (1824) 有两条裂解途径, 即  $M-C_2H_4-CHN-C_2H_2$  和  $M-C_2H_5-CHN-C_2H_2$ 。二甲基二氢吲哚 (1825) 的主要裂解是  $M-CH_3-CH_3$ 。

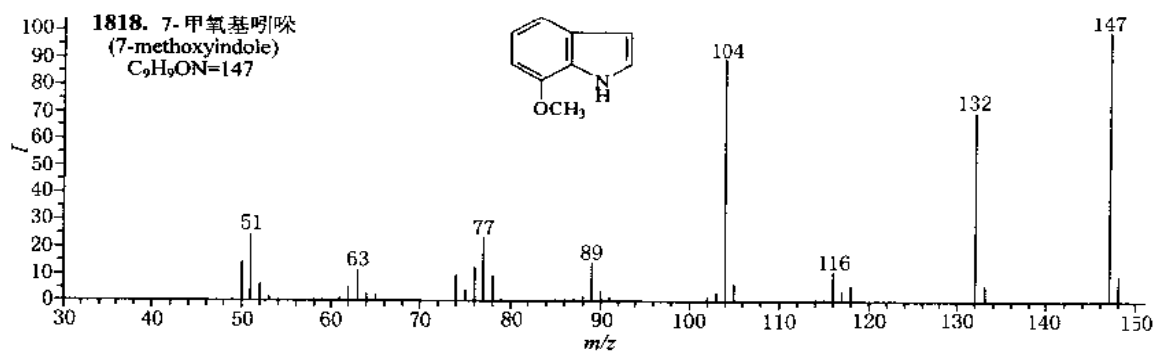
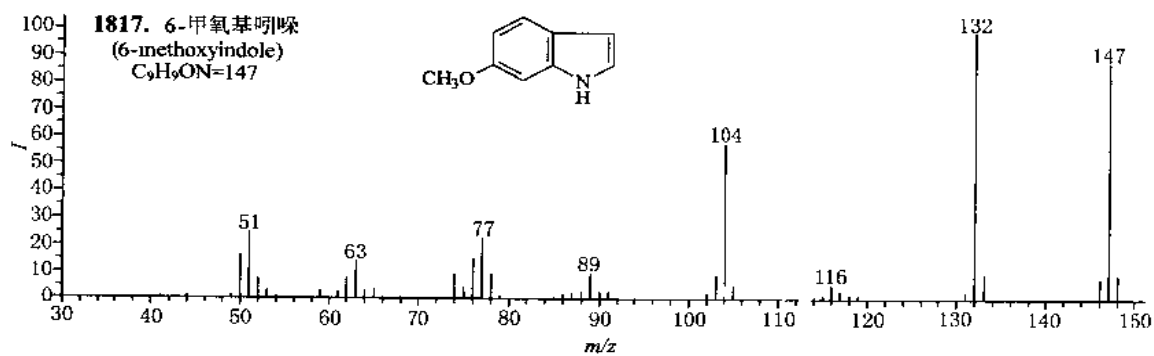
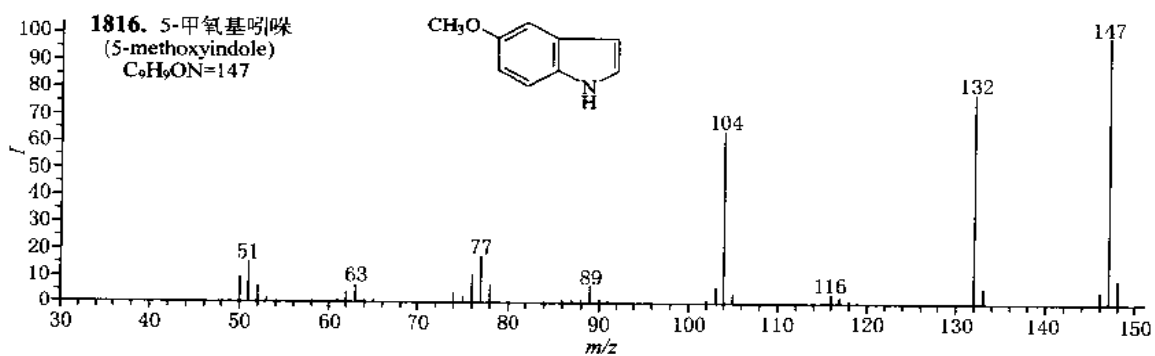
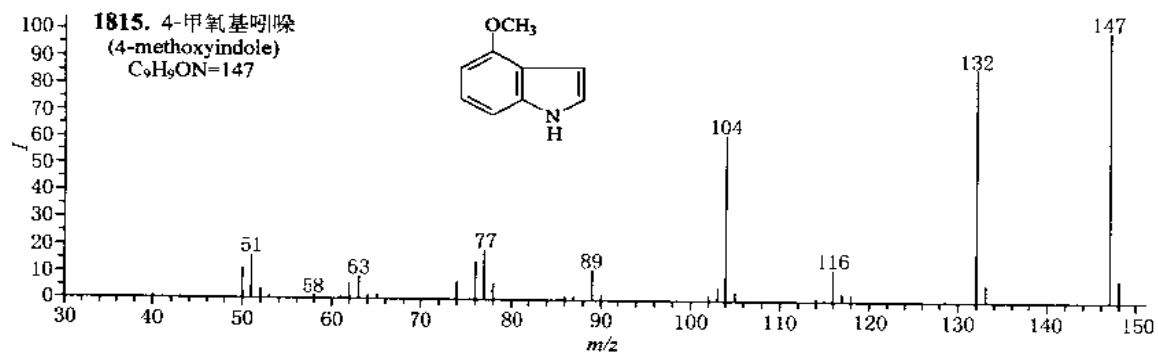


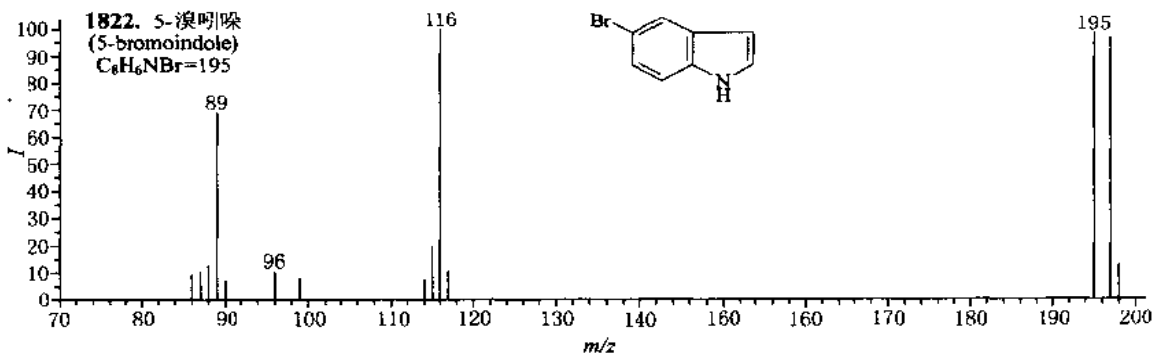
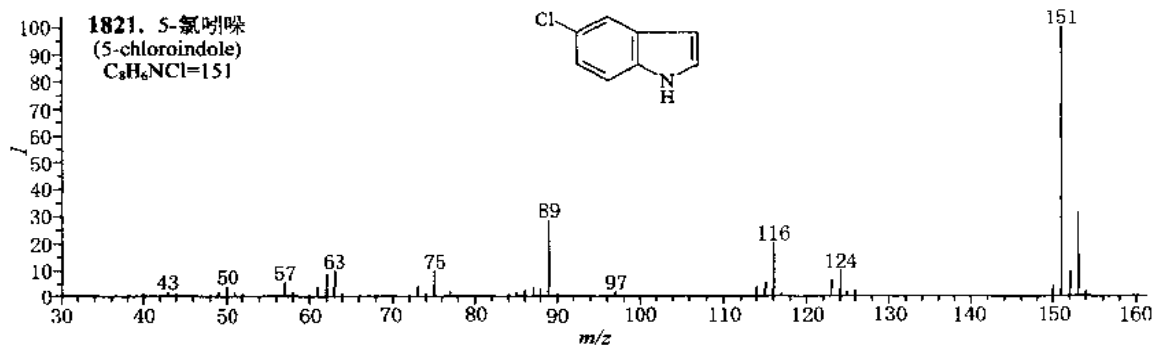
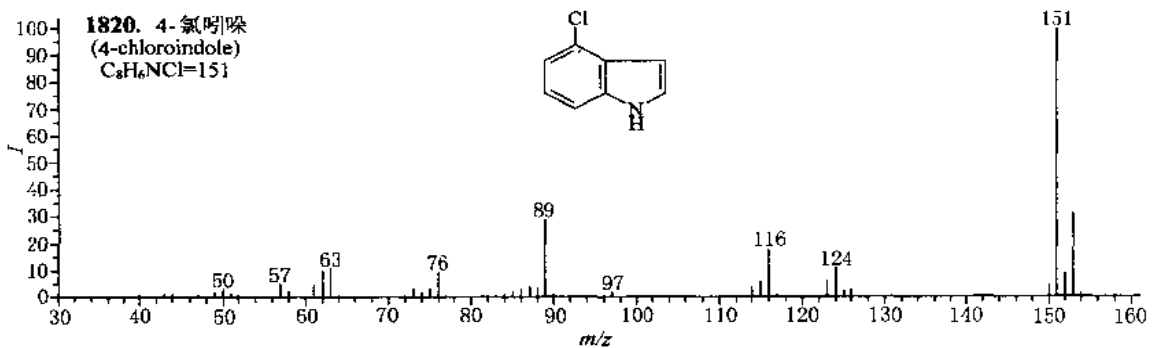
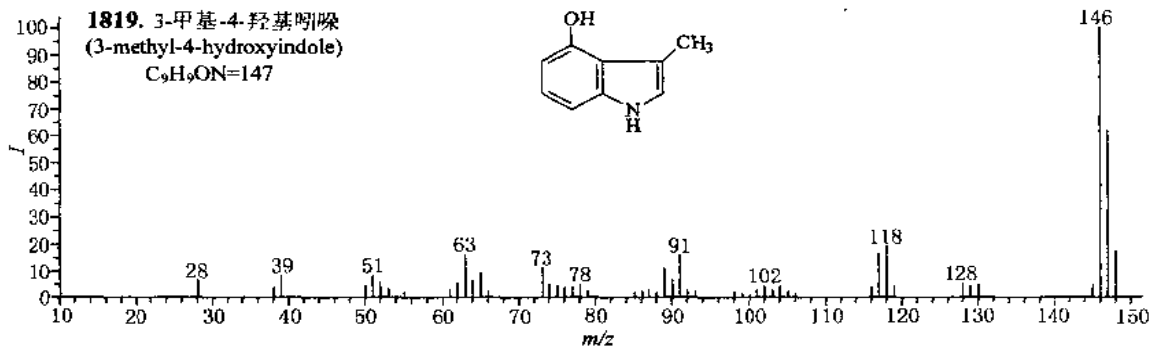


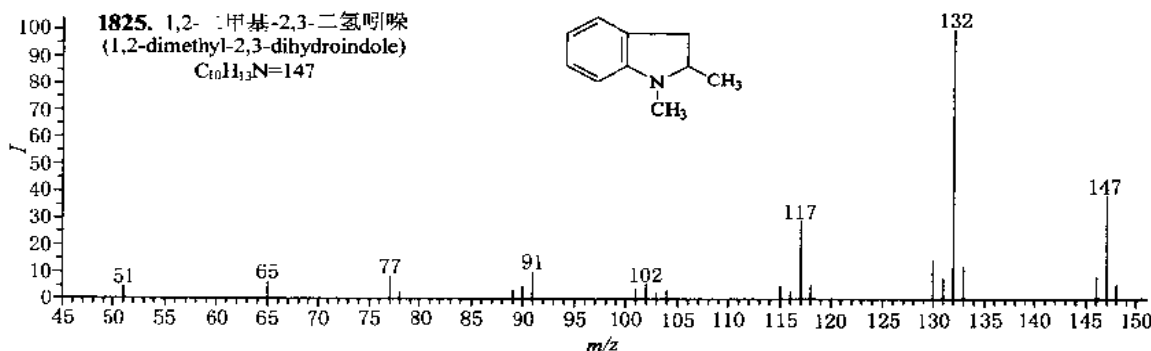
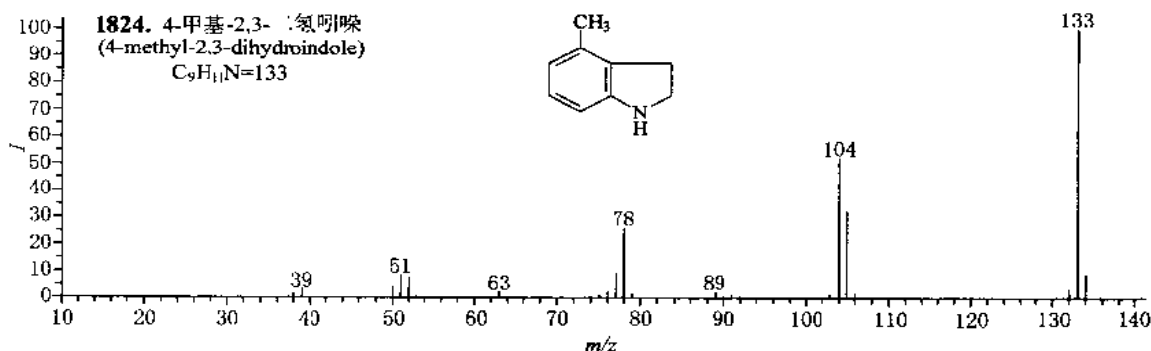
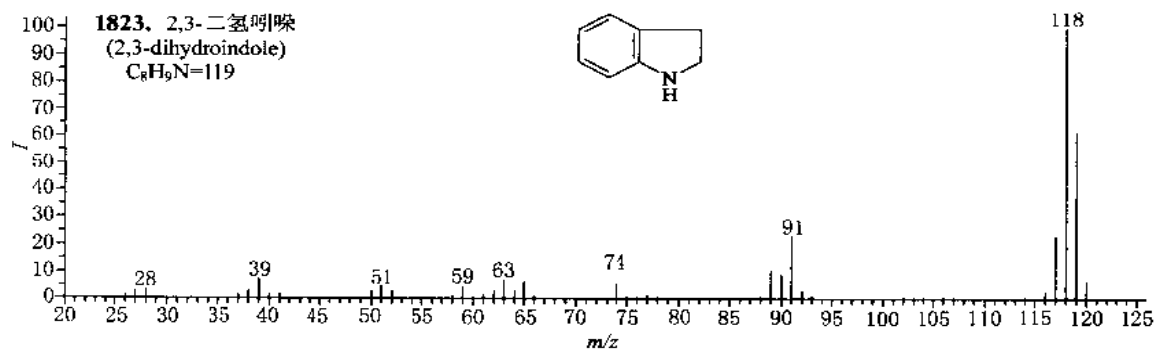












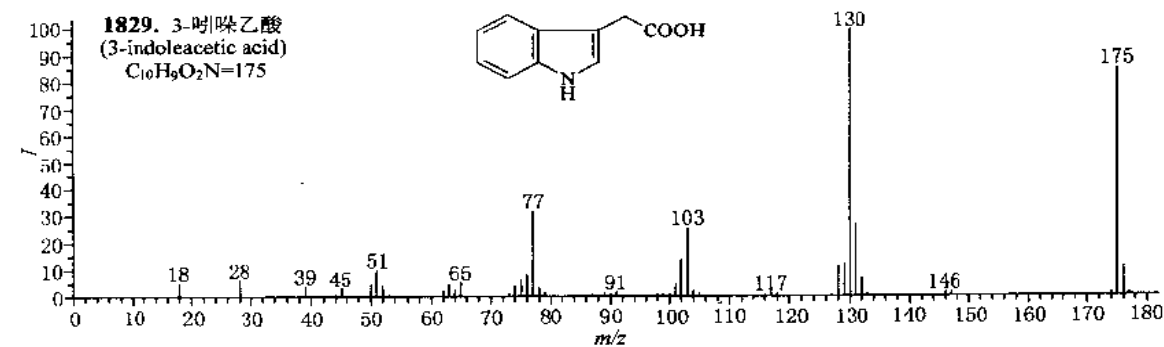
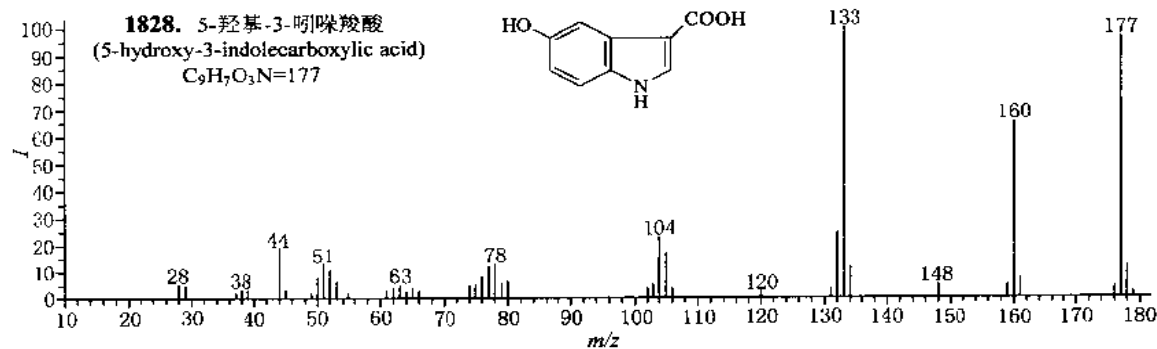
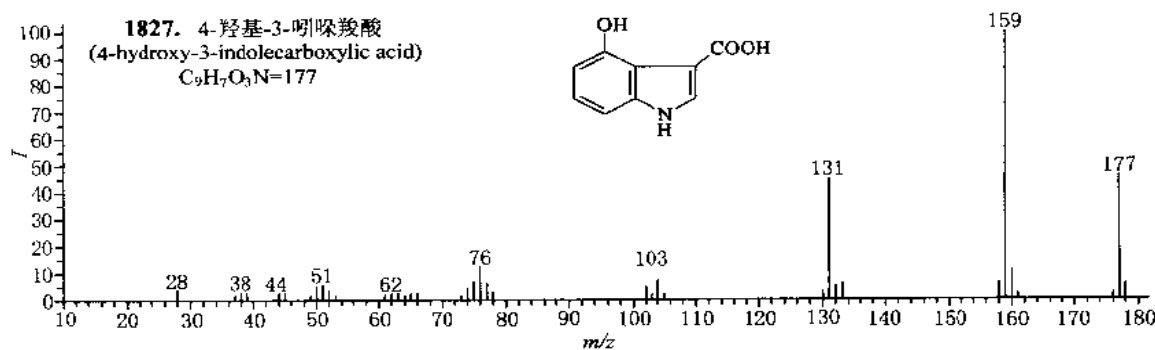
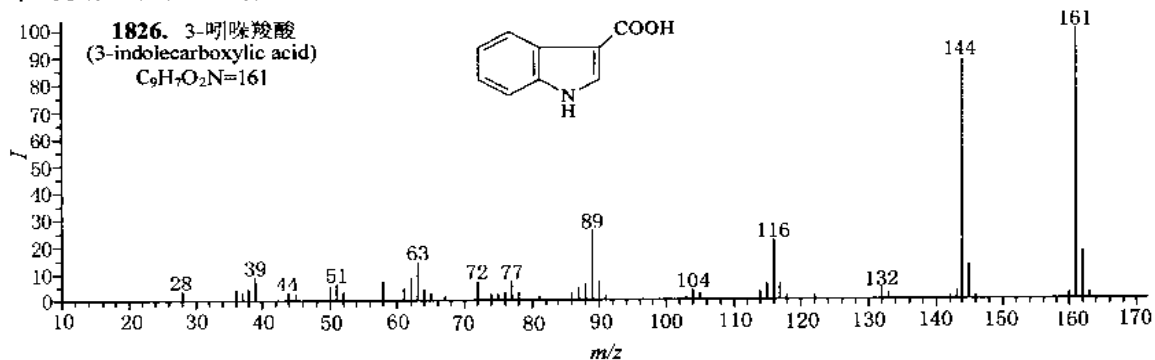
## 二、3-吲哚羧酸及其酯类

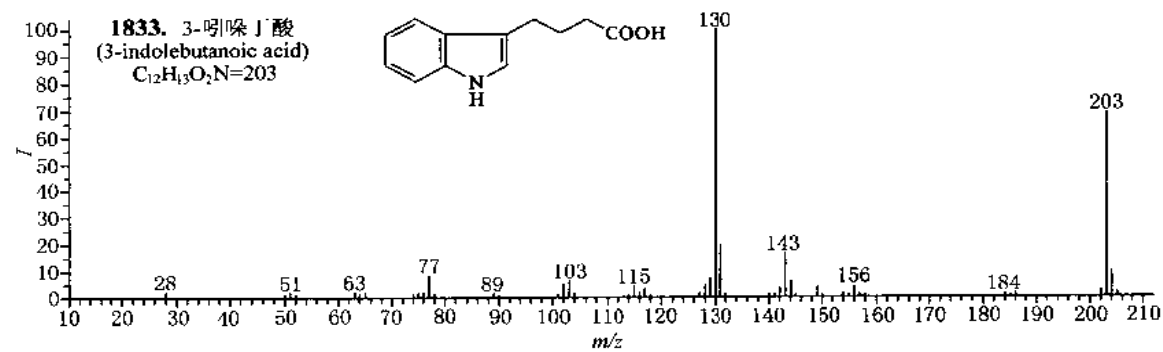
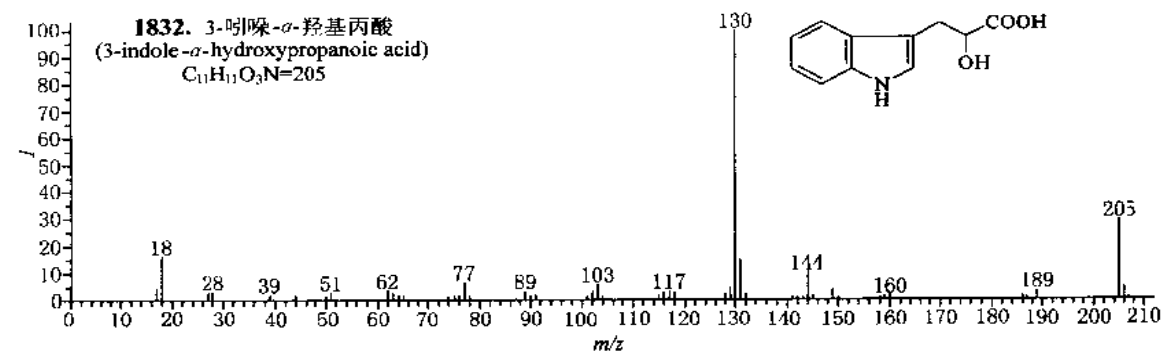
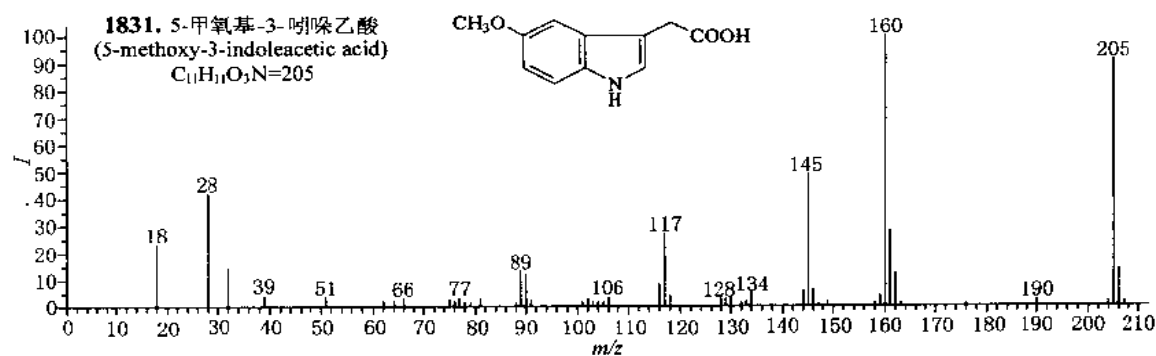
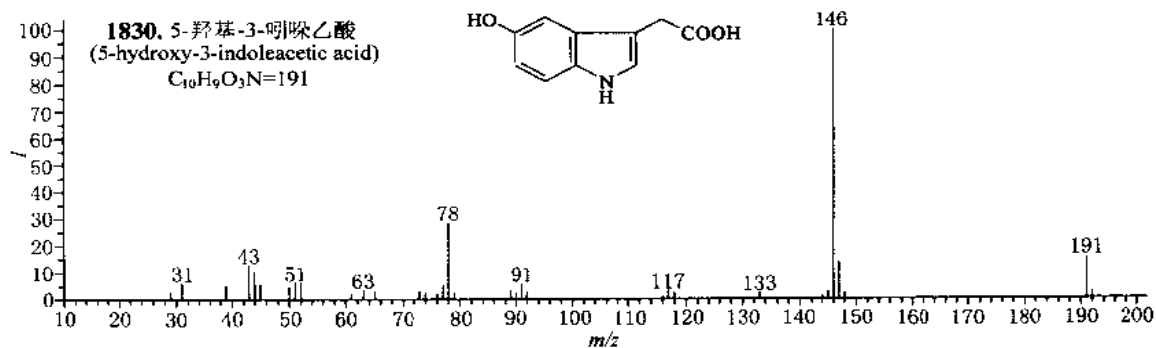
(1) 3-吲哚羧酸 (1826) 的裂解途径是  $M-OH-CO-CHN-C_2H_2$ 。

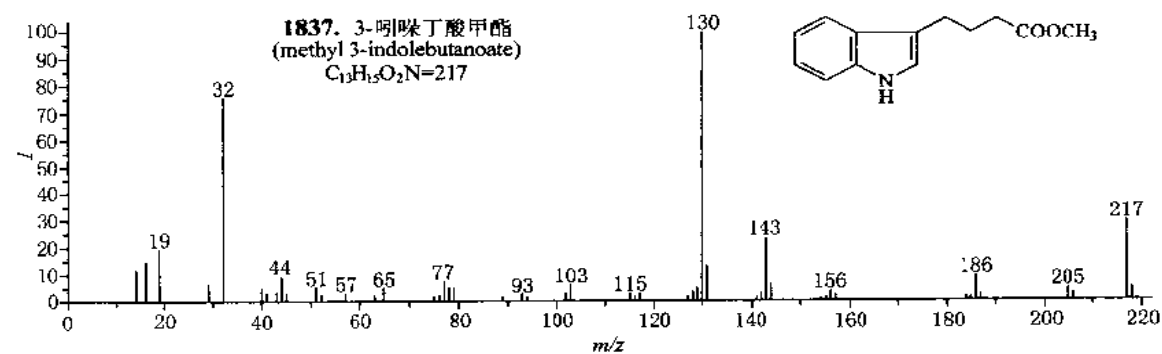
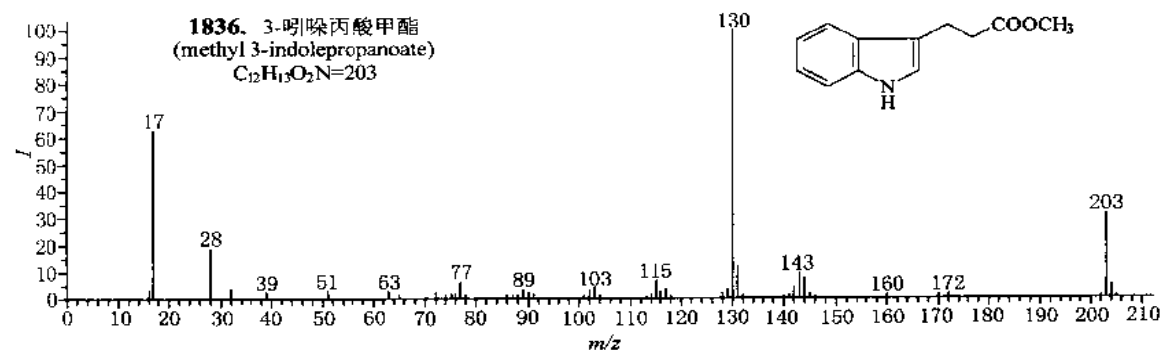
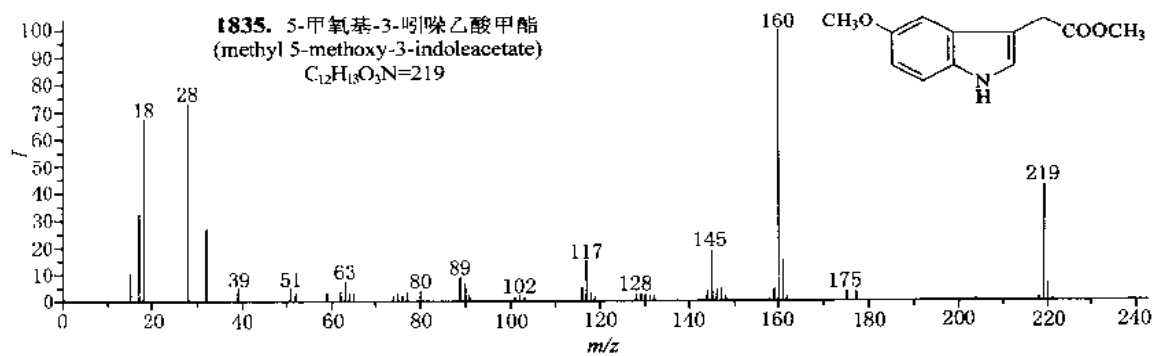
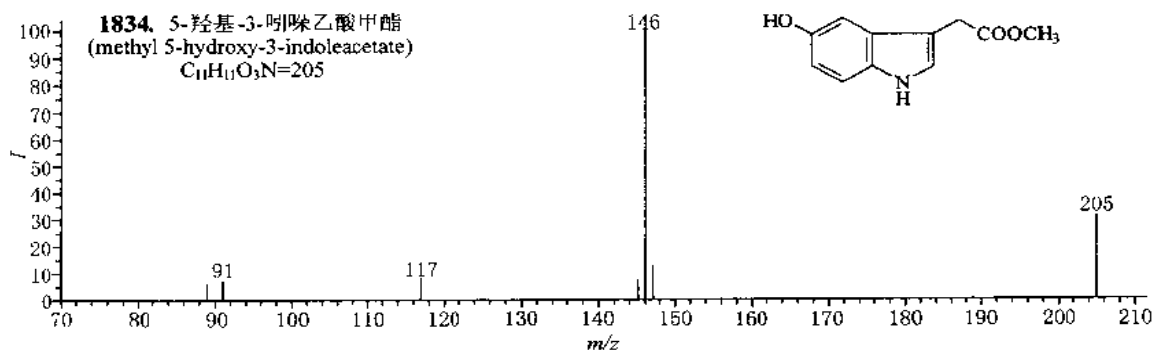
(2) 4-羟基-3-吲哚羧酸 (1827) 的裂解途径是  $M-H_2O-CO-CO-C_2H_2$ , 5-羟基-3-吲哚羧酸 (1828) 的裂解途径则是  $M-OH-CHN-CO-CO-C_2H_2$  和  $M-OH-CO-CO-C_2H_2-C_2H_2$ 。

(3) 从吲哚乙酸 (1829) 开始, 以上的长链吲哚羧酸的主要裂解方式是吲哚环的  $\beta$ -裂解; 吲哚乙酸 (1829) 是失去  $COOH$ , 吲哚丙酸是失去  $CH_2COOH$ , 吲哚丁酸 (1833) 是失去  $CH_2CH_2COOH$  等, 然后是连续失去  $CHN$ 、 $C_2H_2$  和  $C_2H_2$ 。有其他羟基取代的 (1834) 还能失去  $CO$ , 有甲氧基取代的 (1835) 还能失去甲基, 并再失去  $CO$ 。自吲哚丁酸 (1833) 开始, 能进行羧基碳基的麦氏重排裂解失去乙酸, 得  $M-60$  离子。

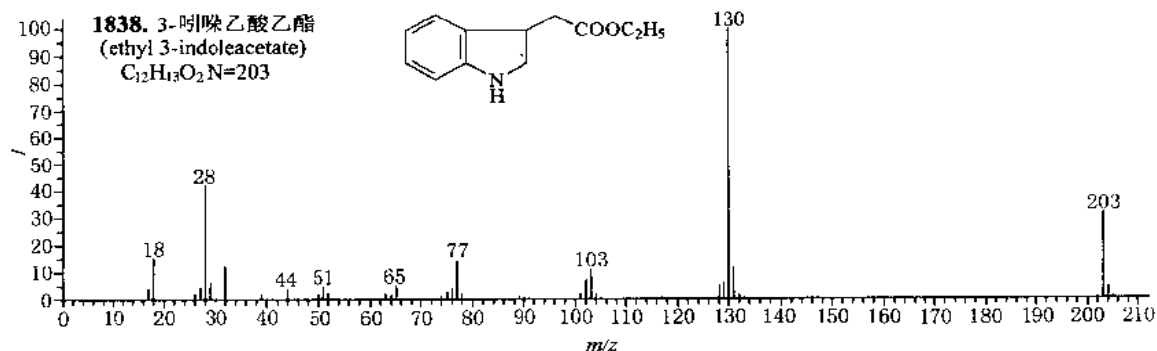
(4) 吲哚乙酸甲酯类化合物 (1834, 1835) 能进行  $\beta$ -裂解失去  $\text{COOCH}_3$ , 吲哚丙酸甲酯是失去  $\text{CH}_2\text{COOCH}_3$ , 吲哚丁酸甲酯 (1837) 则是失去  $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOCH}_3$ 。自吲哚丁酸甲酯开始, 能进行羧基羰基的麦氏重排裂解失去乙酸甲酯, 得  $M-74$  离子。吲哚乙酸乙酯 (1838) 也是  $\beta$ -裂解, 但失去的是  $\text{COOC}_2\text{H}_5$ 。





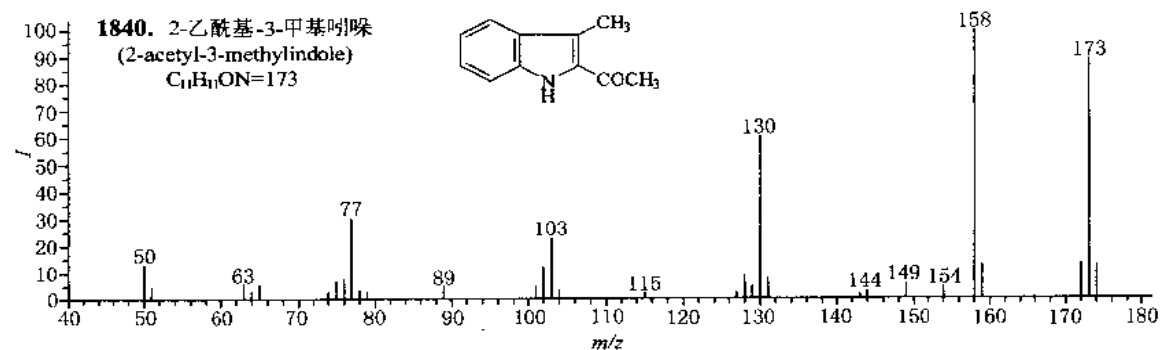
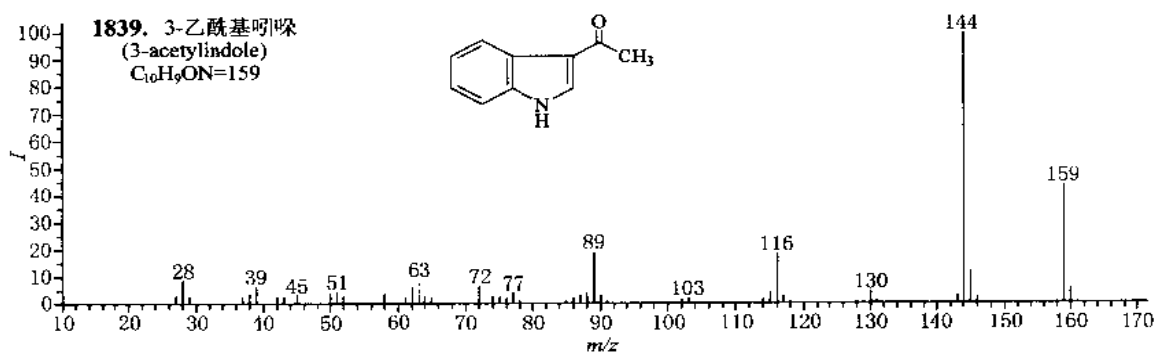






### 三、其他取代吲哚类

(1) 2-和 3-乙酰基吲哚 (1839, 1840) 的裂解途径都是  $M-CH_3-CO-CHN-C_2H_2$ 。



(2) 2-吲哚羧酸 (1841) 的裂解途径是  $M-OH-CHN-CO-C_2H_2$  或  $M-OH-CO-CHN-C_2H_2$ 。

(3) 2-和 3-苯基吲哚类化合物 (1842~1844) 可以失去苯基, 所有裂解都很弱。

(4) 3-吲哚乙胺 (1845) 的主要离子是  $M-CH_2NH$  和  $M-CH_2NH_2$ , 3-吲哚-*N,N*-二甲基胺类化合物 (1846~1848) 都有很强的  $\beta$ -裂解产生的  $CH_2\overset{+}{N}(CH_3)_2$  离子 ( $m/z$  58), 而  $M-58$  则不强。

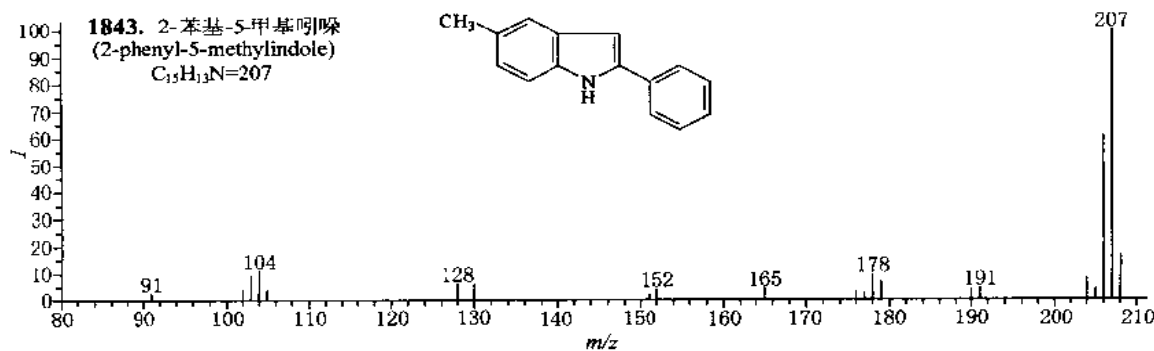
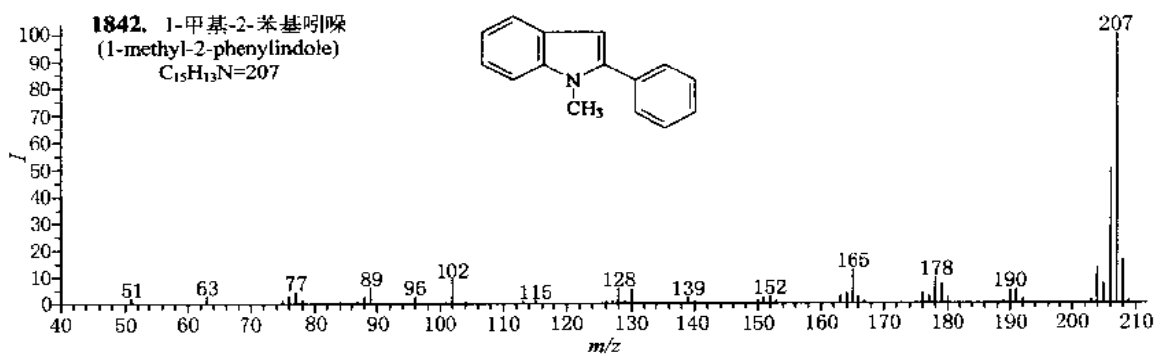
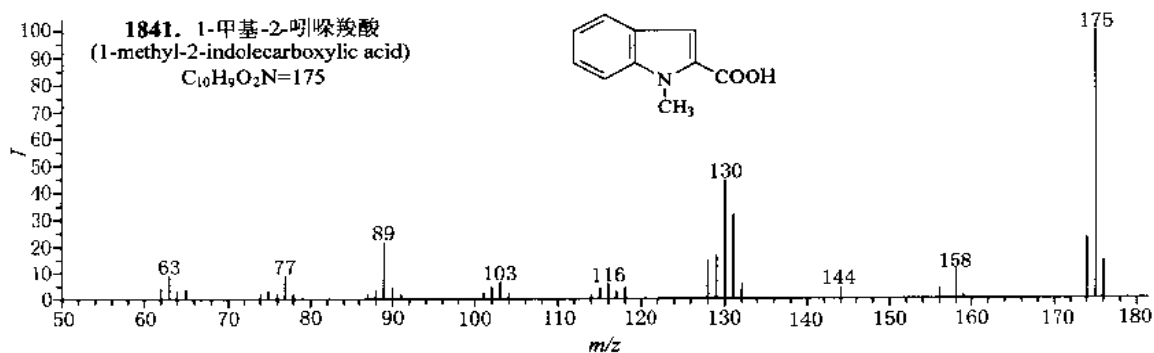
(5) 3-吲哚乙醇类化合物 (1849, 1850) 都有很强的  $\beta$ -裂解离子  $M-CH_2OH$ , 然后是失去  $CHN$ ,  $C_2H_2$  和  $C_2H_2$ 。

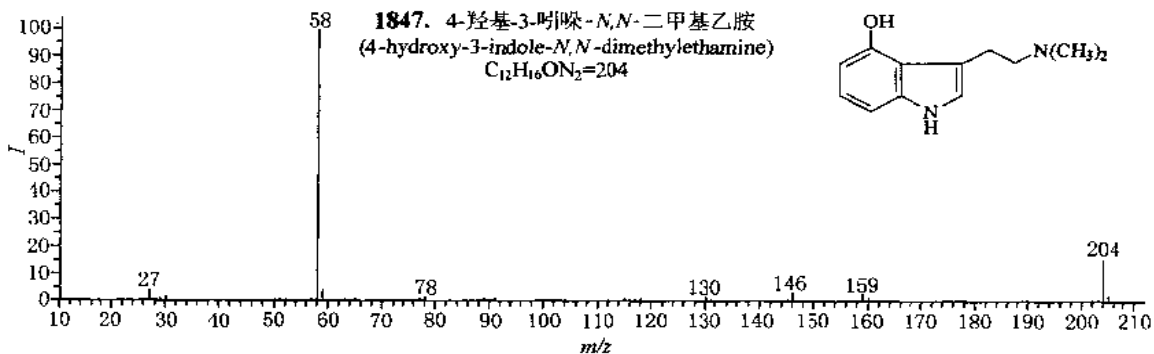
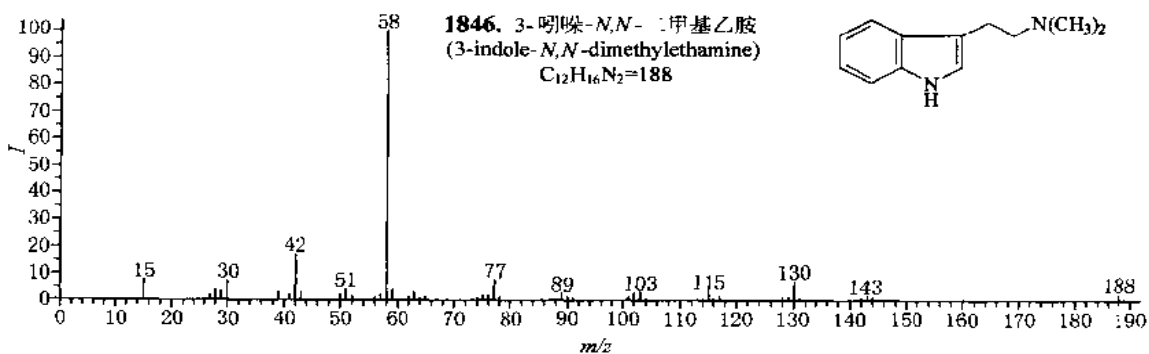
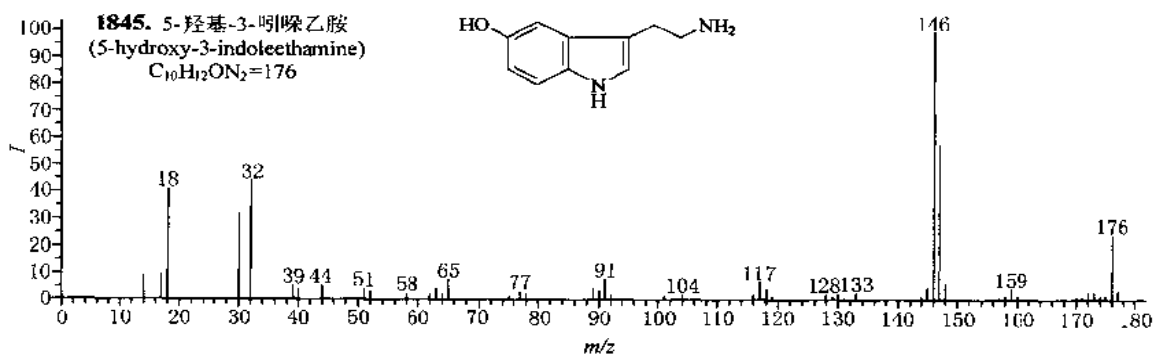
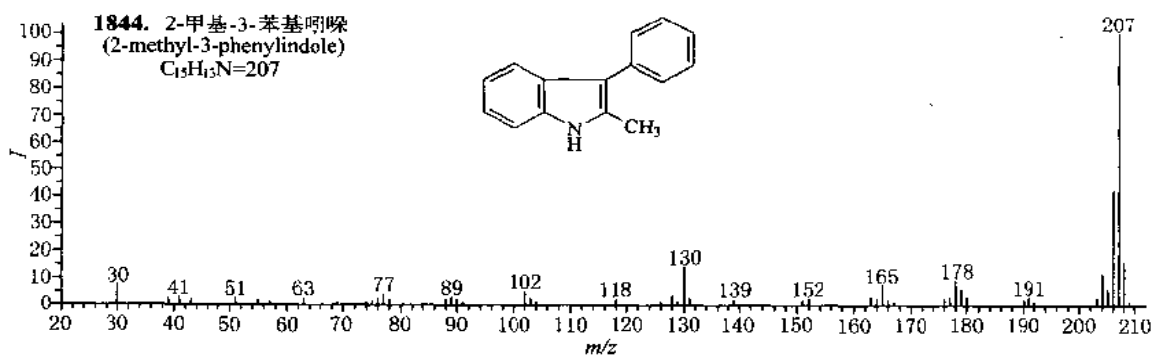
(6) 3-吲哚丙酮 (1851) 的基峰是  $M-CH_3CO$  离子, 然后也是失去  $CHN$ ,  $C_2H_2$  和  $C_2H_2$ 。

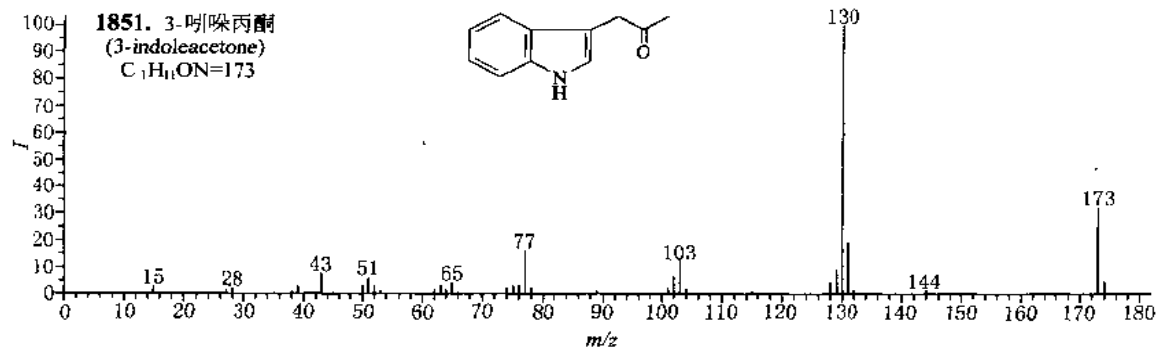
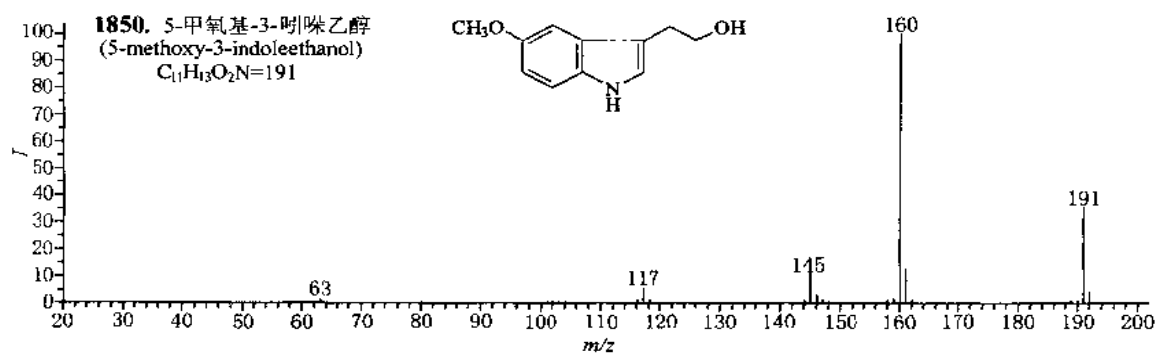
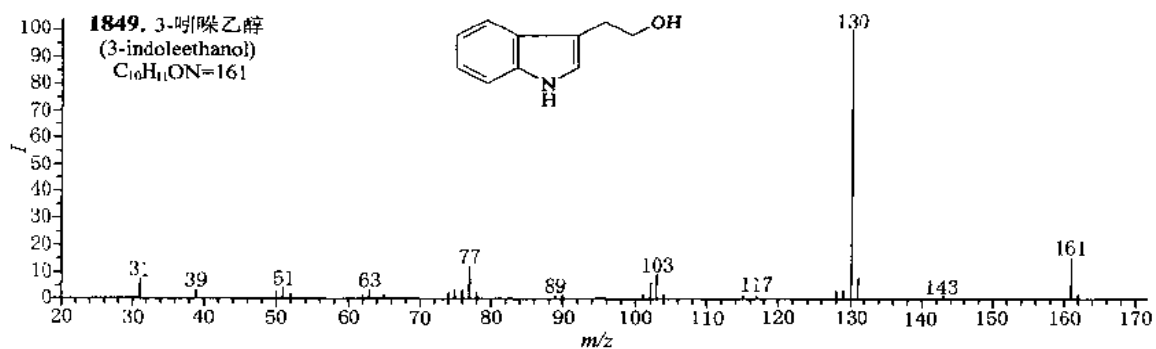
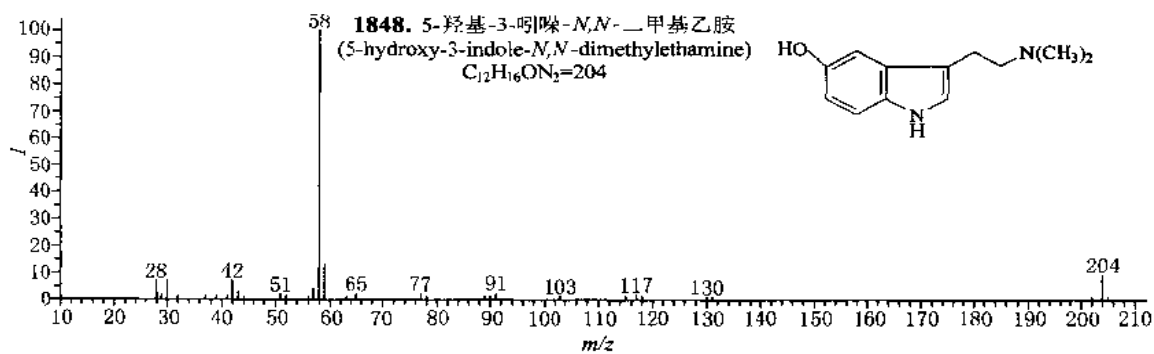
(7) 1,3,3-三甲基-2-氧化吲哚 (1852) 的主要离子是苯基裂解产物  $M-CH_3$  离子。

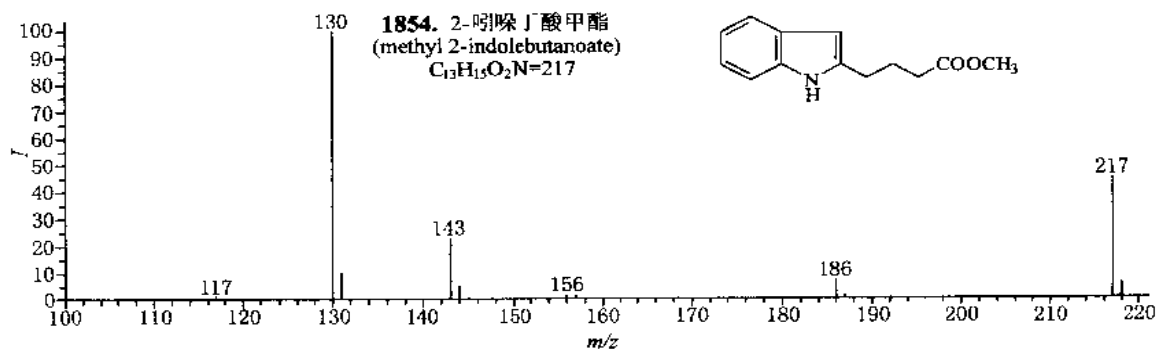
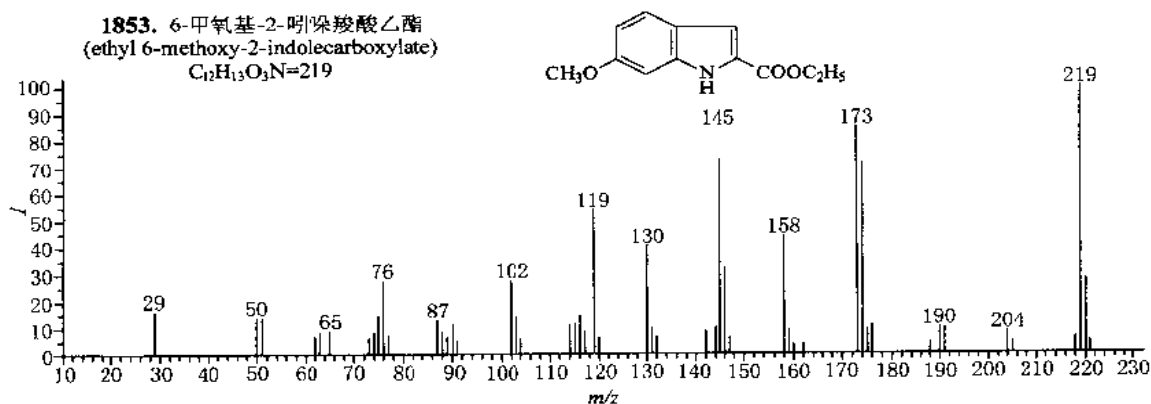
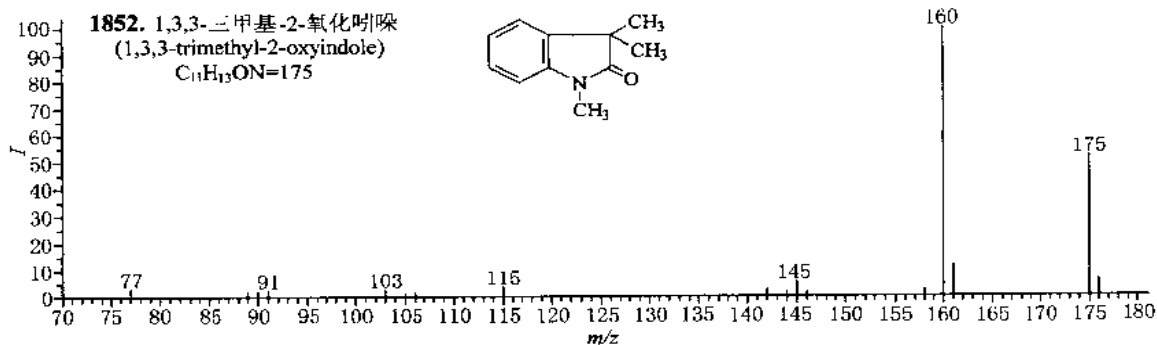
(8) 吲哚-2-甲酸乙酯 (1853) 的裂解途径是  $M-OC_2H_5-CO-CHN$  和  $M-OC_2H_5-H-CO-CHN$ 。

(9) 2-吲哚丁酸甲酯 (1854) 的裂解方式与 3-吲哚丁酸甲酯 (1837) 的完全一致, 两者不能用质谱区别。









## 第二节 喹 啉 类

### 一、简单取代喹啉类

(1) 喹啉 (1855) 本身的裂解途径是  $M-C_2H_2-CHN-C_2H_2$ 。

(2) 甲基喹啉类化合物 (1856~1862) 有三条裂解途径, 即  $M-H-CHN-C_2H_2-C_2H_2$ ,  $M-CH_3-CHN-C_2H_2$  和  $M-CHN-C_2H_2-C_2H_2$ 。而以第一条裂解途径为主。

(3) 氨基喹啉类化合物 (1863~1869) 有两条裂解途径, 即  $M-CN H-H-CHN-C_2H_2$  和  $M-CN H-CHN$ 。

(4) 羟基喹啉类化合物 (1870~1875) 也有两条裂解途径, 即  $M-CO-CHN-C_2H_2$  和

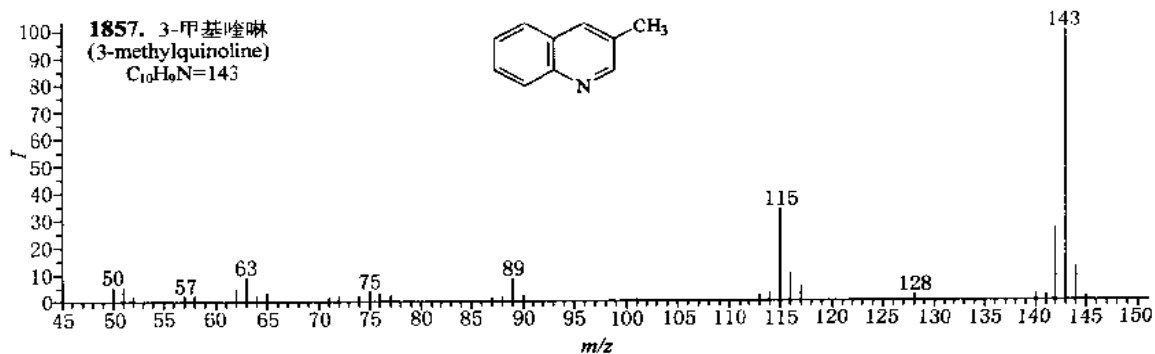
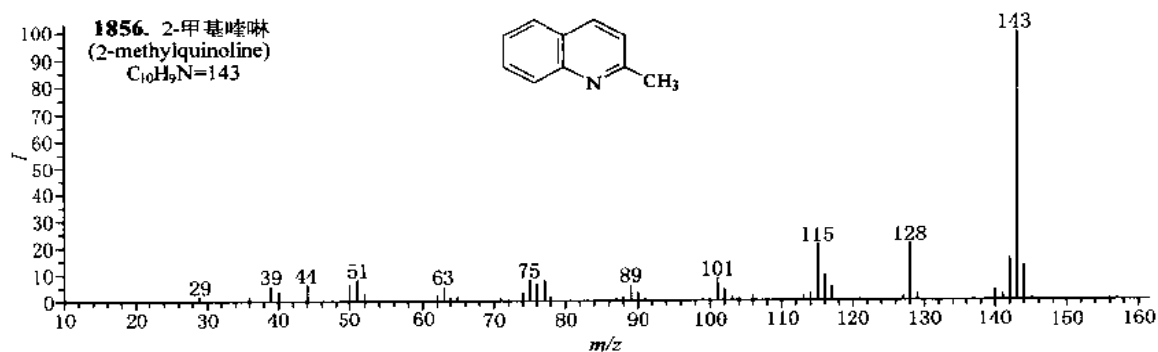
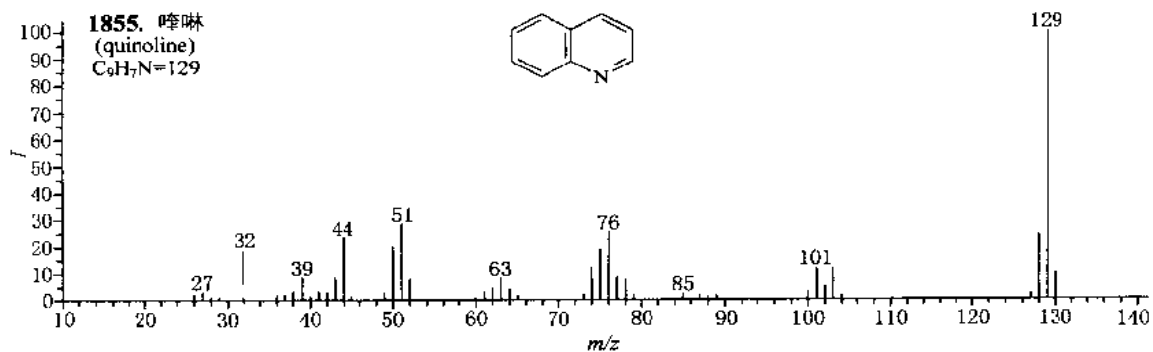
$M-CO-CHN-H-C_2H_2$ 。

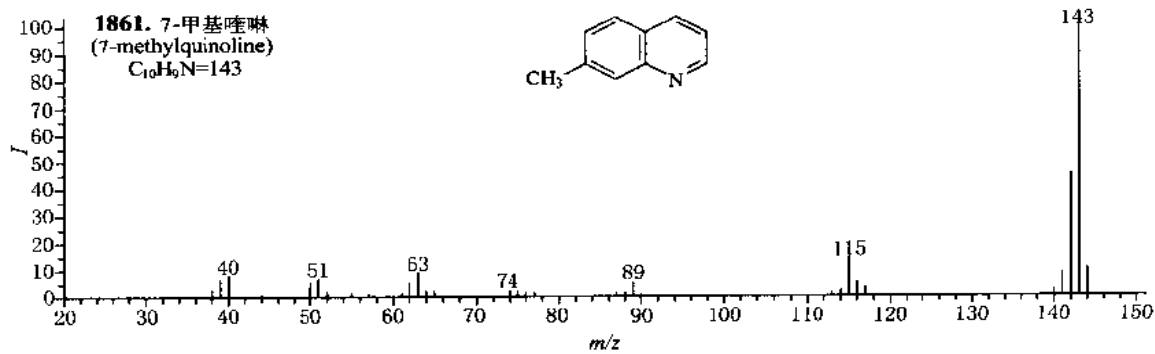
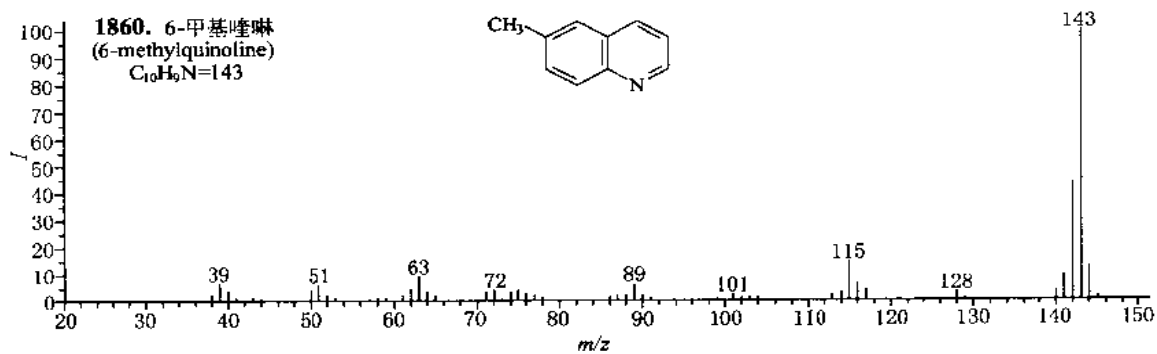
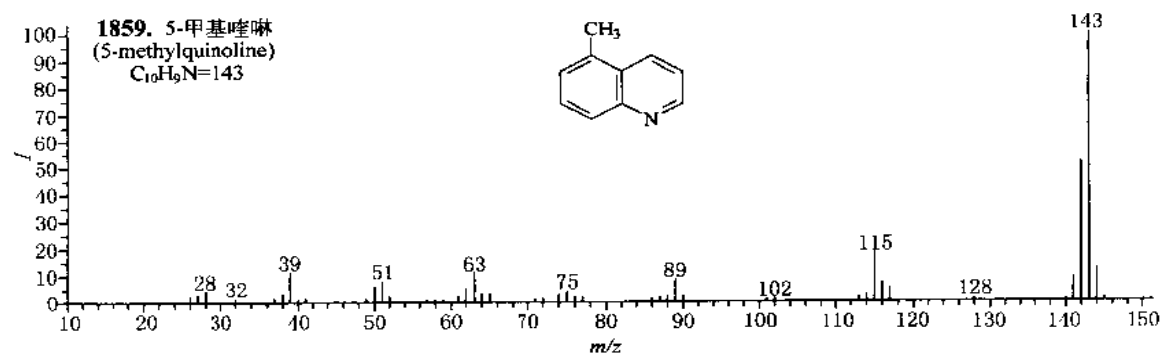
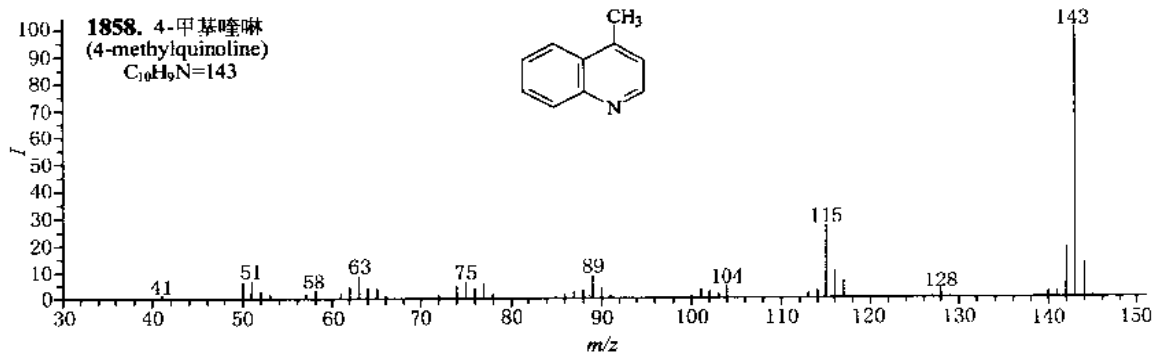
(5) 甲氧基喹啉类化合物 (1876, 1877) 的裂解途径是  $M-CH_3-CO-CHN-C_2H_2-C_2H_2$ 。

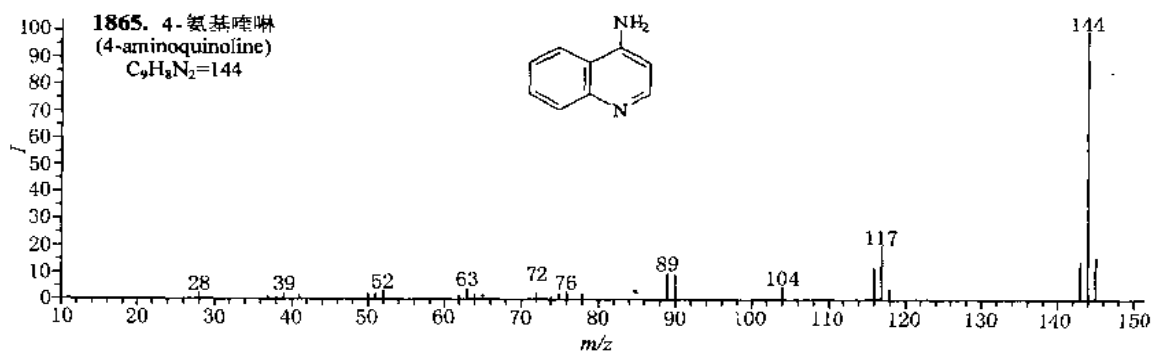
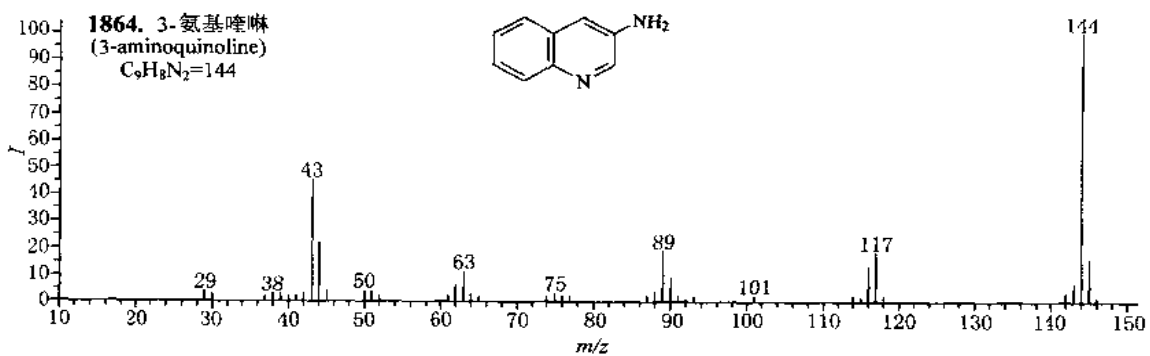
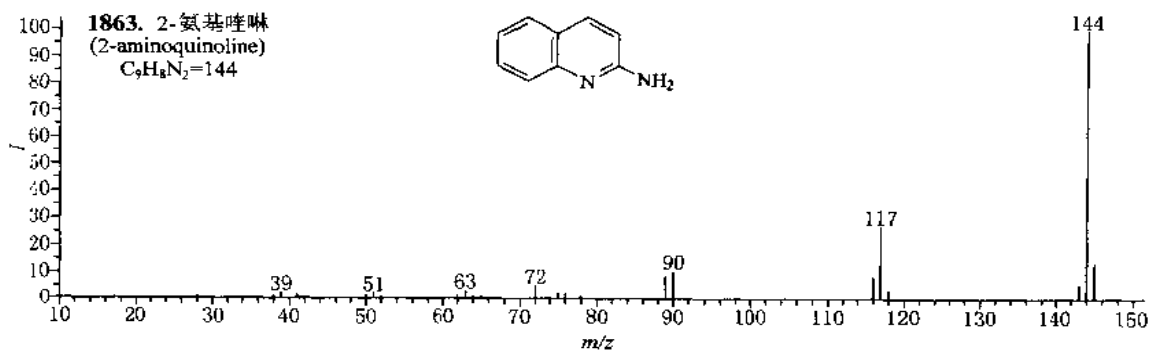
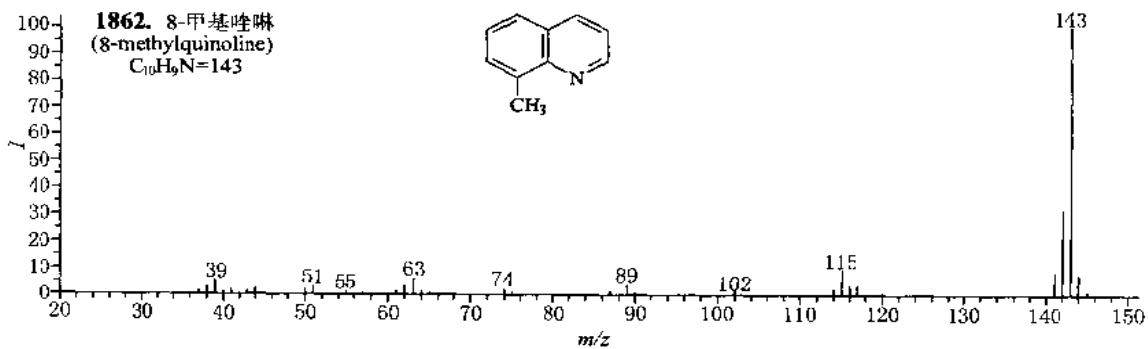
(6) 氯代喹啉类化合物 (1878~1880) 的裂解途径是  $M-Cl-CHN-C_2H_2$ 。

(7) 喹啉羧酸类化合物 (1881, 1882) 的裂解途径是  $M-CO_2-CHN-C_2H_2$  或  $M-OH-CO-CHN-C_2H_2$ 。

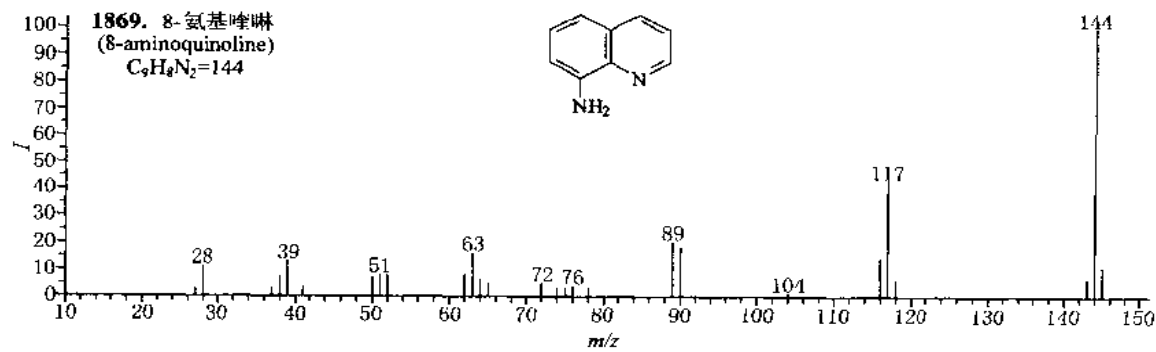
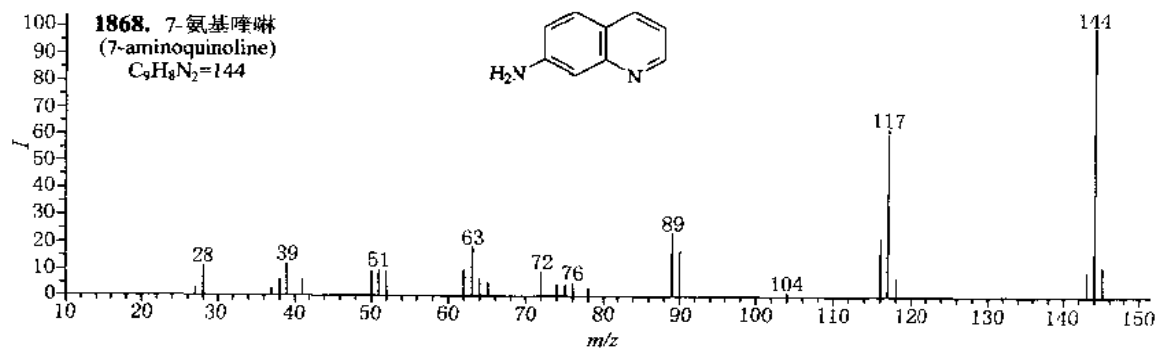
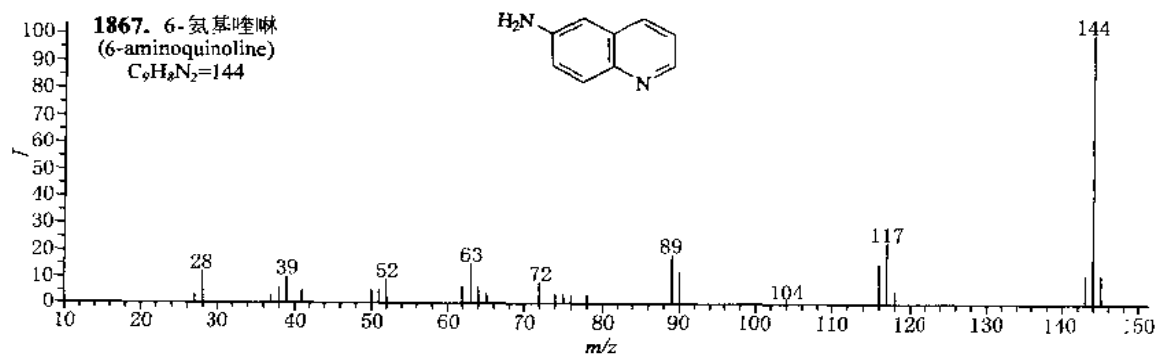
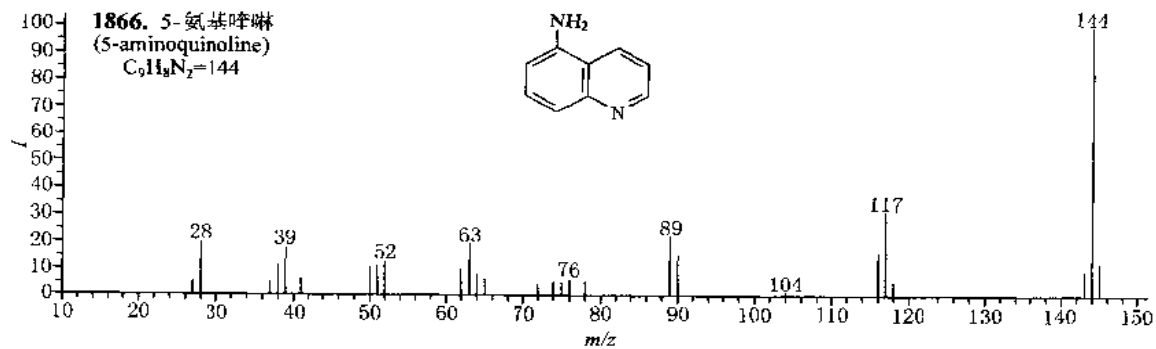
(8) 2-咪唑基喹啉 (1883) 的主要裂解是  $M-CHN$ ,  $M-CHN-CHNH$  和  $M$ -咪唑基。

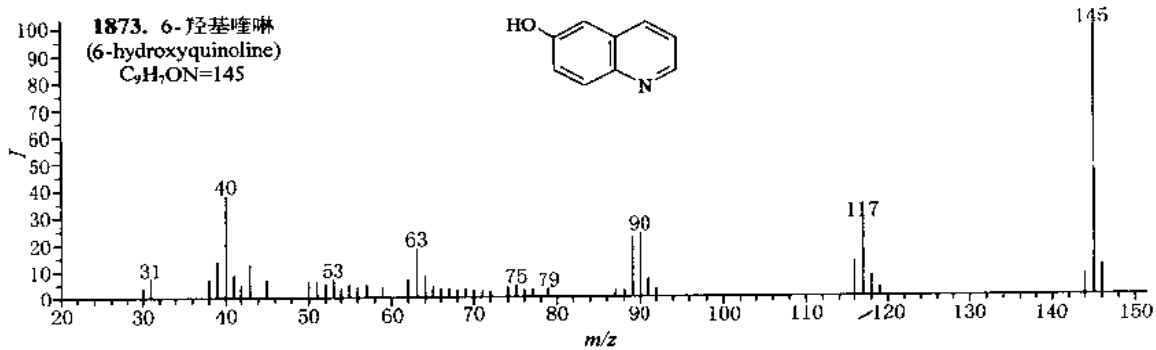
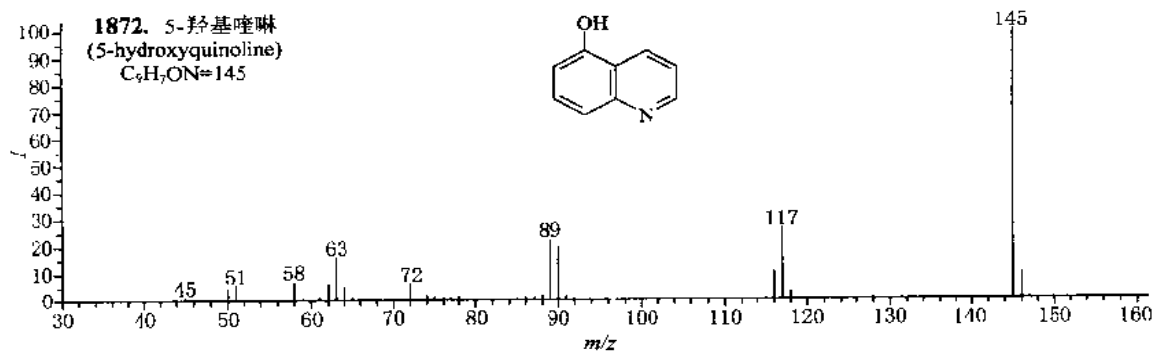
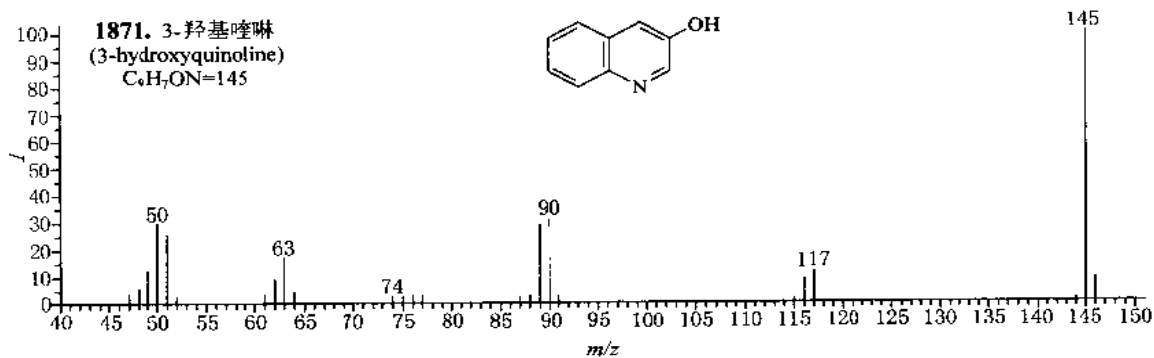
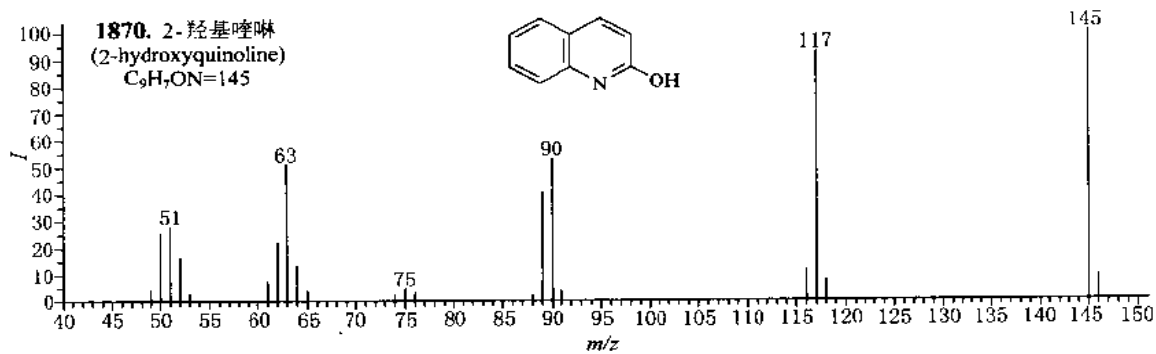


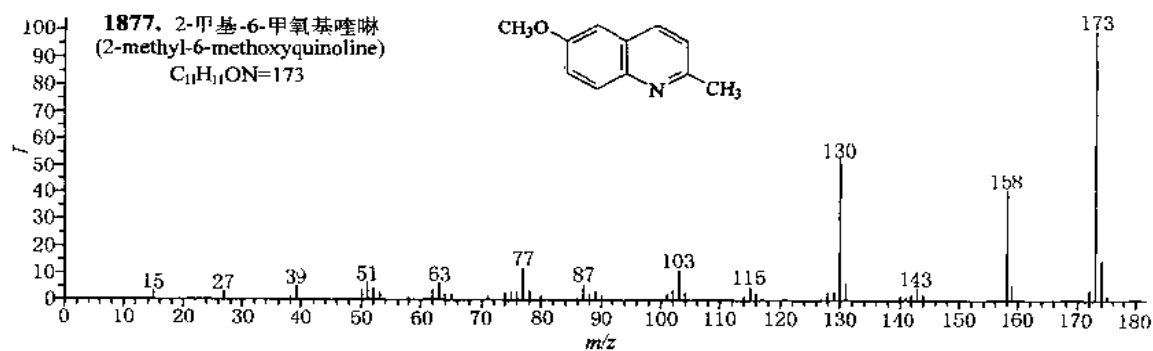
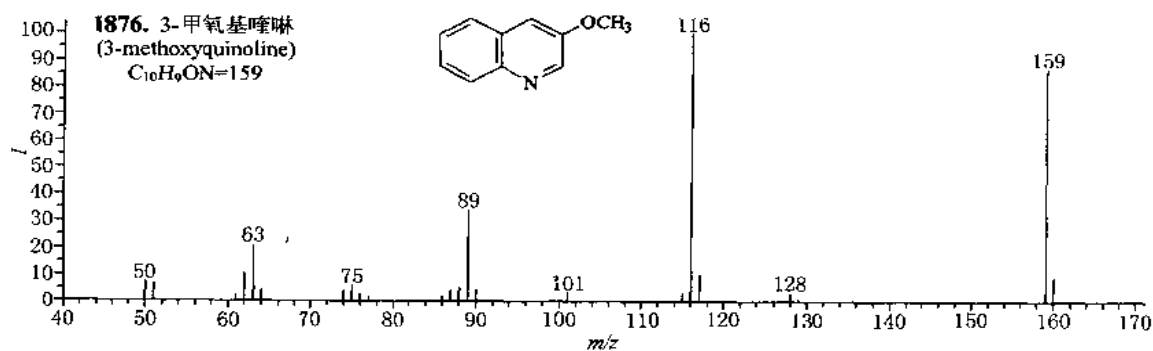
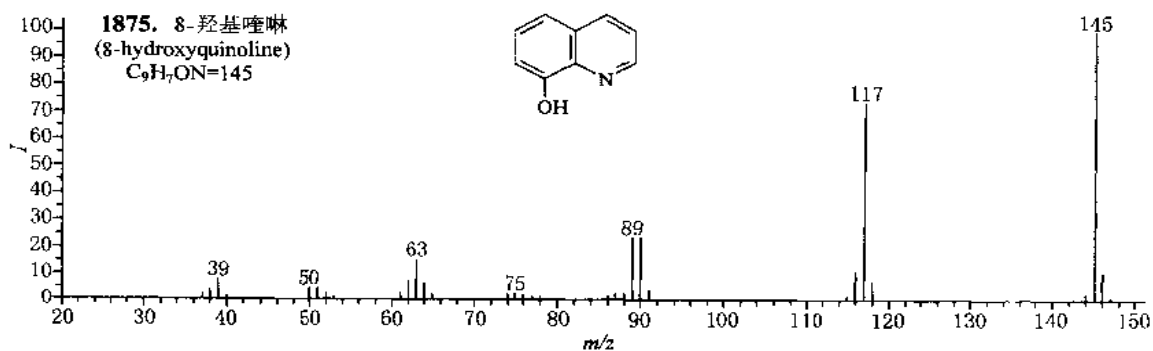
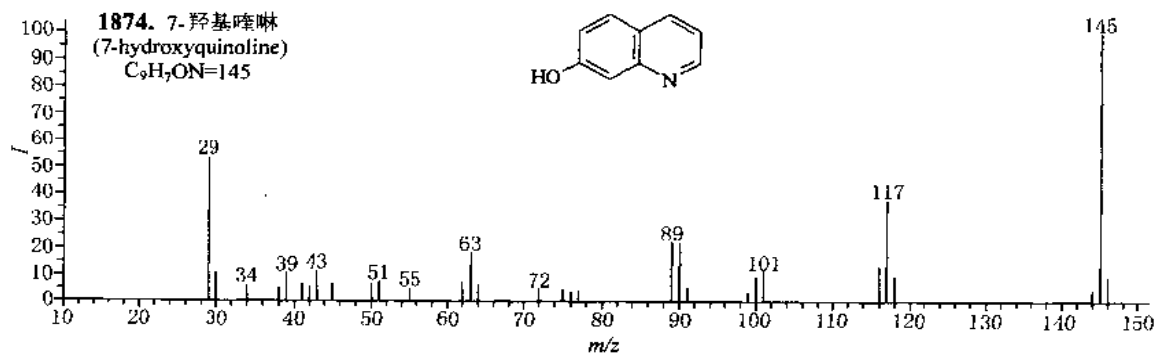


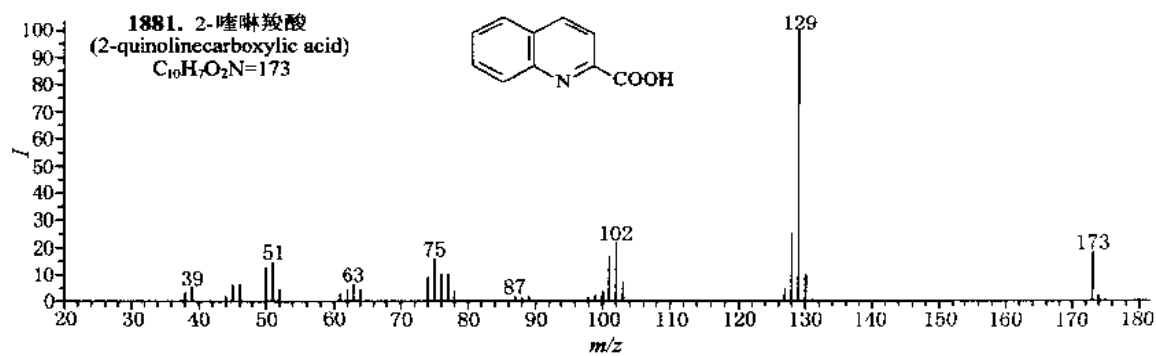
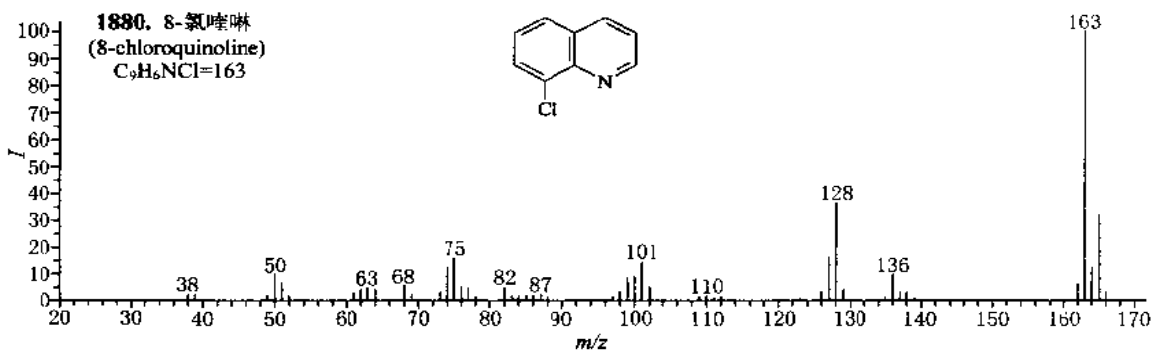
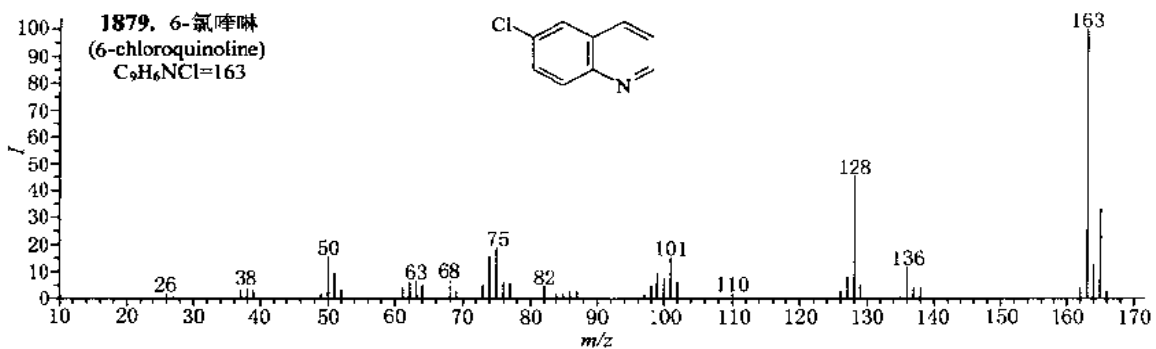
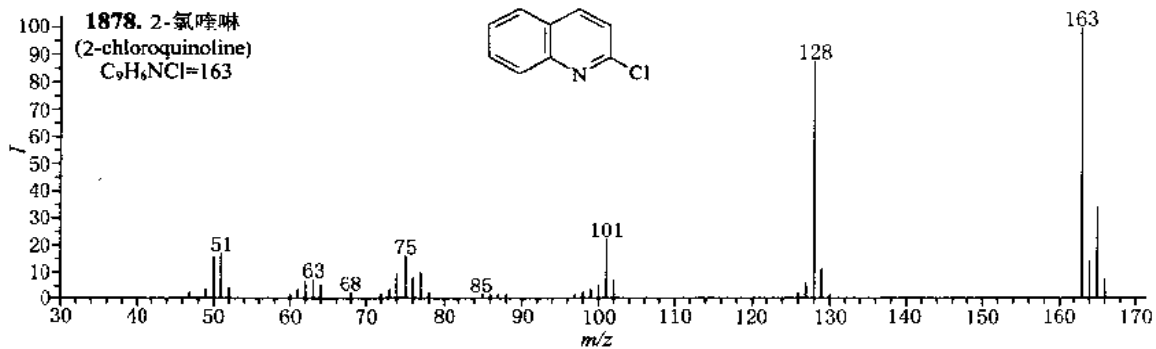


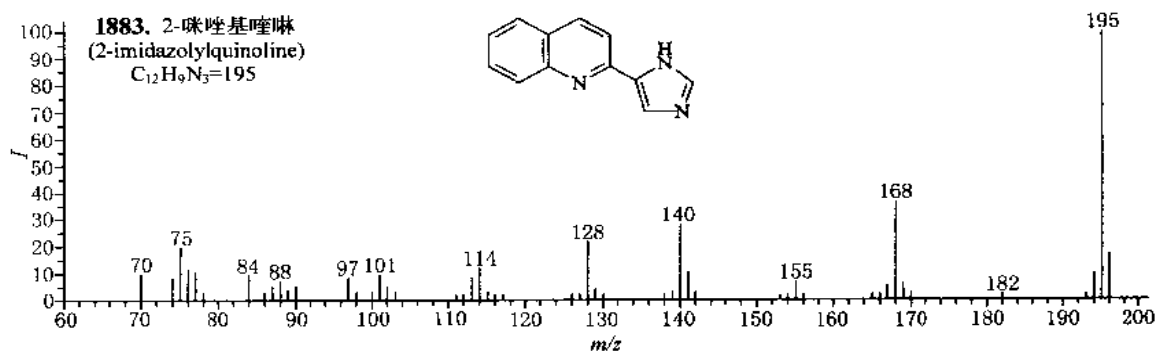
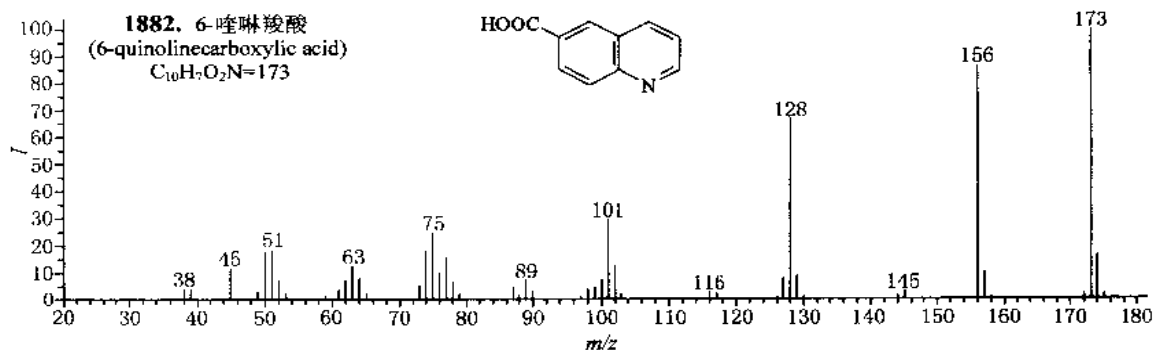






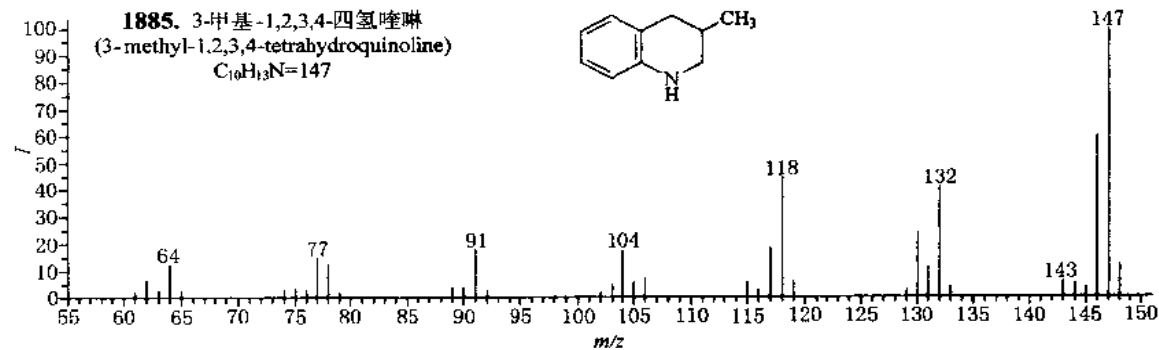
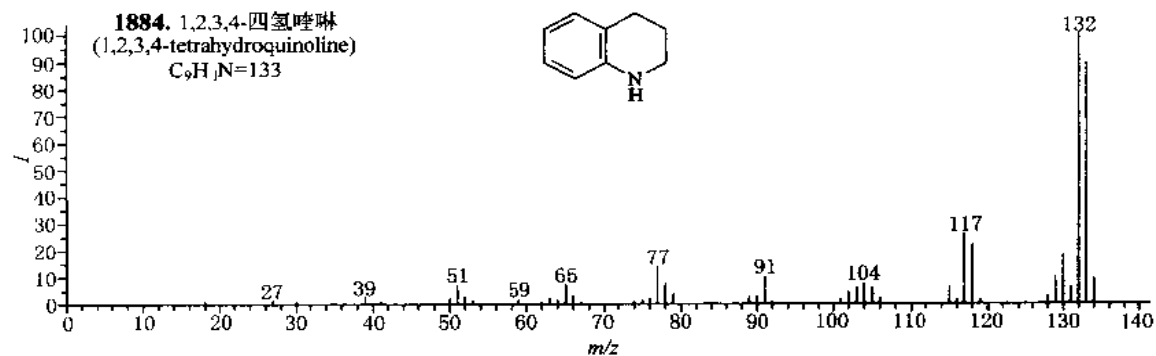


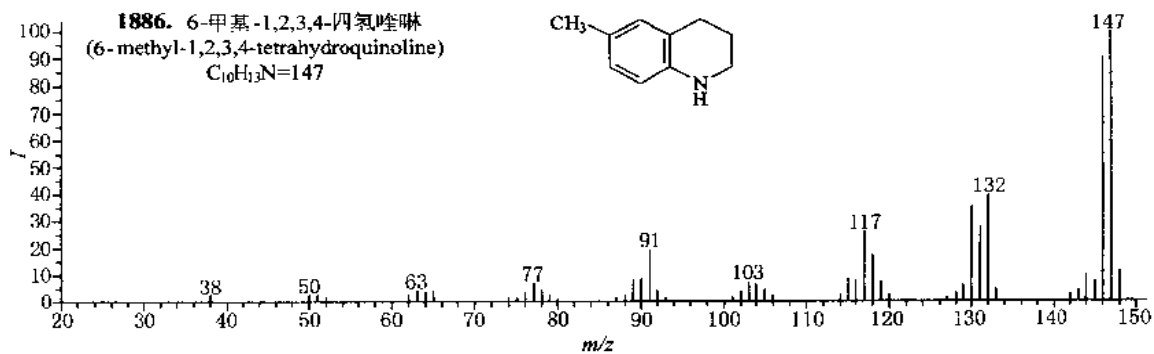




## 二、四氢喹啉类

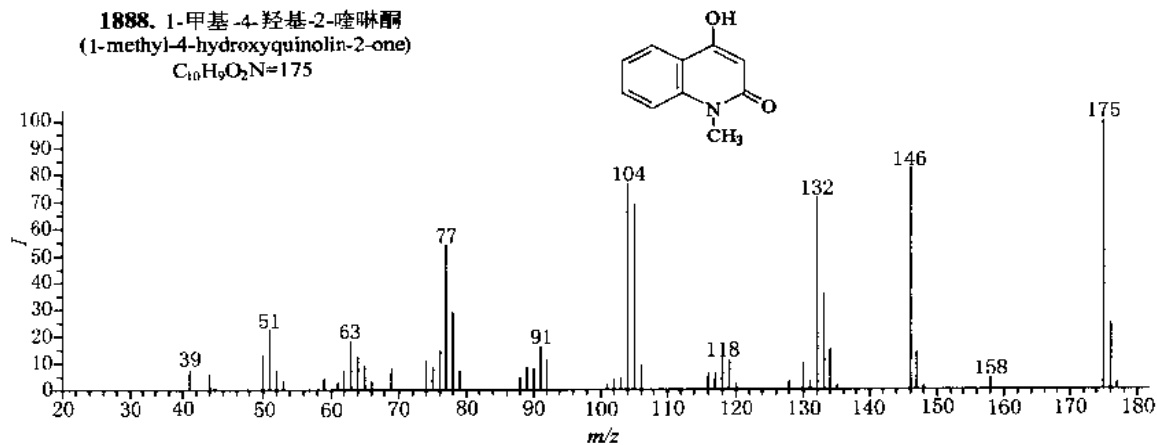
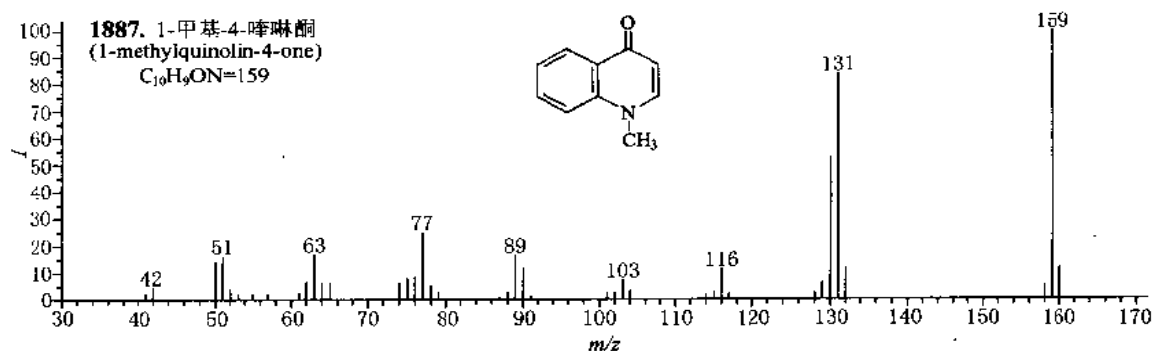
1,2,3,4-四氢喹啉 (1884) 和甲基四氢喹啉 (1885, 1886) 的  $M-H$  离子很强, 其他裂解是  $M-CH_3$  或  $M-H-CH_3$ , RDA 裂解不明显。

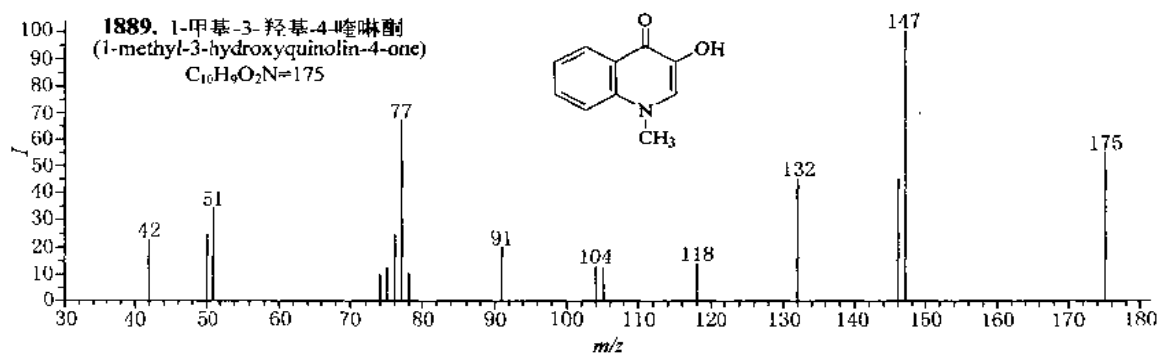




### 三、喹啉酮类

喹啉酮类化合物 (1887~1889) 都有强的  $M-CO$  和  $M-CO-H$  离子, 在这两个离子的基础上再进行其他裂解。

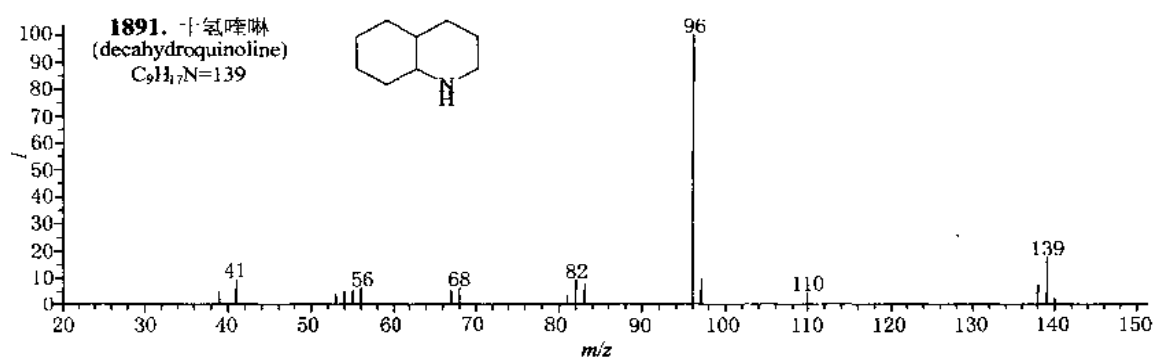
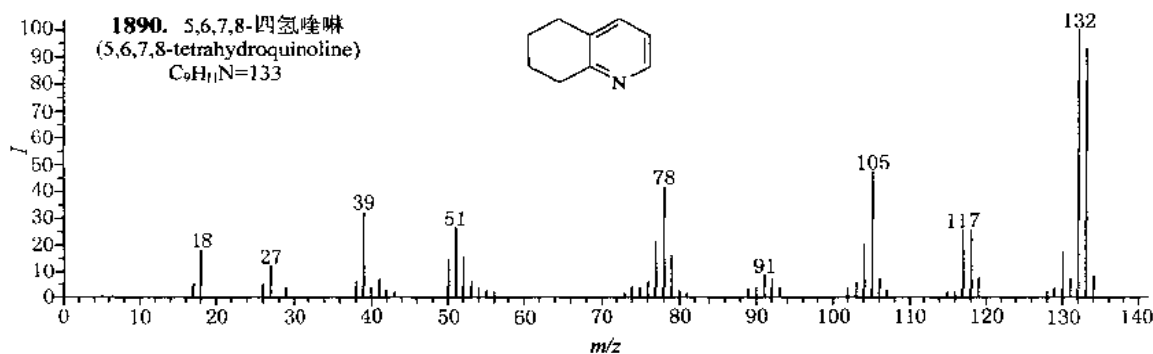




#### 四、其他喹啉类

(1) 5,6,7,8-四氢喹啉 (1890) 的 RDA 裂解失去乙烯的离子明显, 然后再失去 CHN 和乙炔。

(2) 十氢喹啉 (1891) 的主要裂解可能是失去  $CH_2CH_2NH$ 。



### 第三节 异喹啉类

#### 一、简单取代的异喹啉类

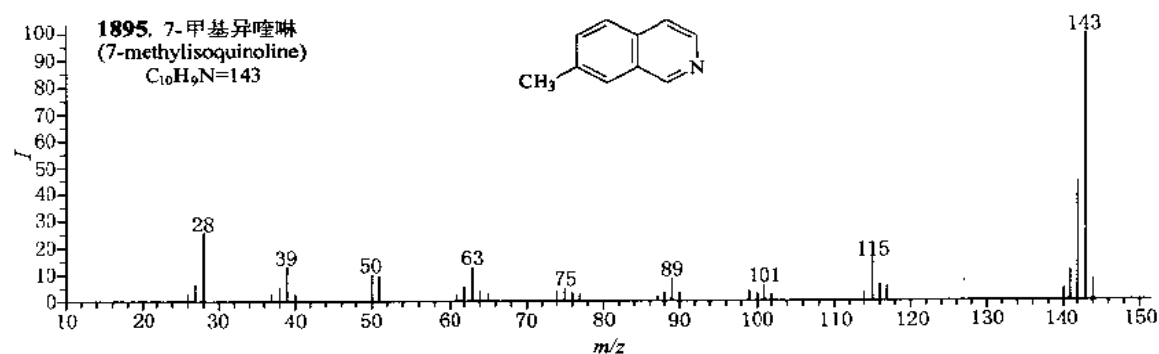
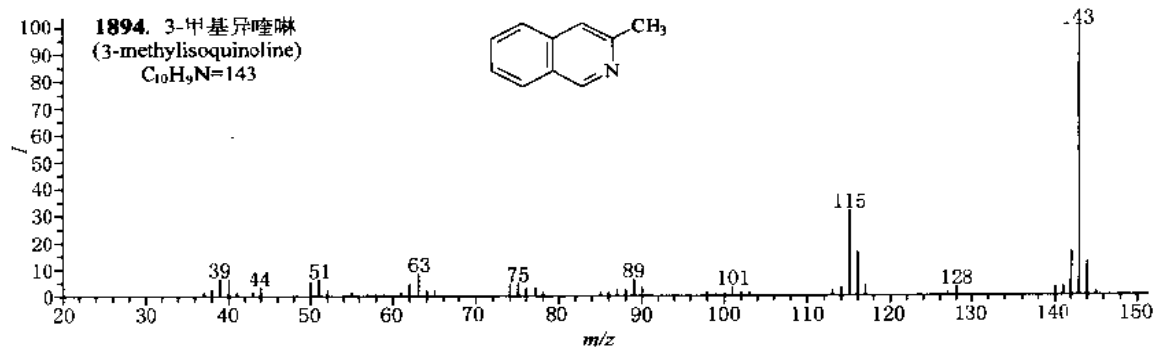
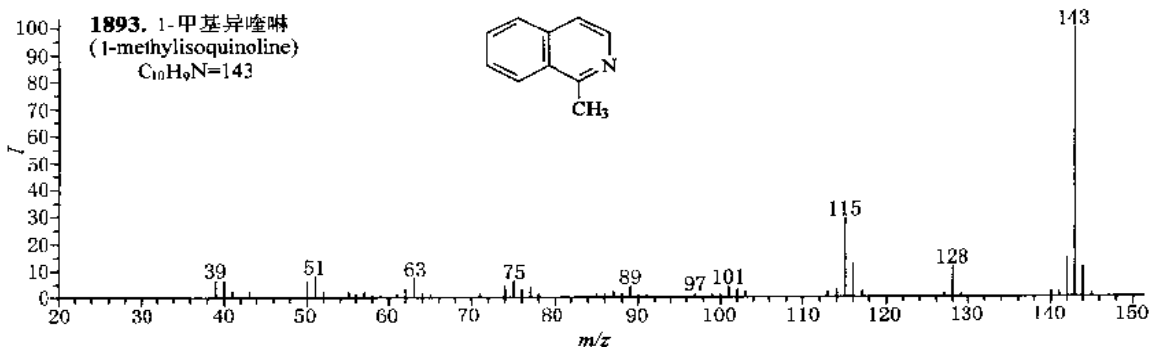
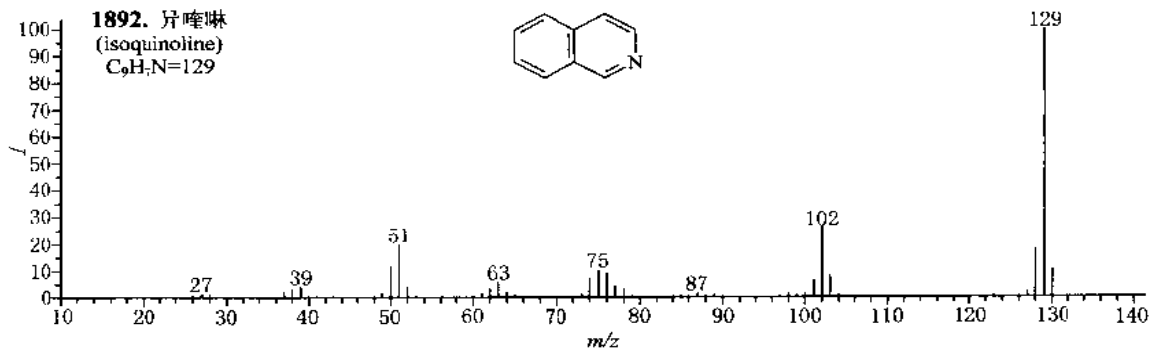
(1) 异喹啉 (1892) 本身的裂解途径是  $M-CHN-C_2H_2-H$ 。

(2) 甲基异喹啉类 (1893~1895) 有三条裂解途径, 即  $M-H-CHN-C_2H_2-C_2H_2$ ,

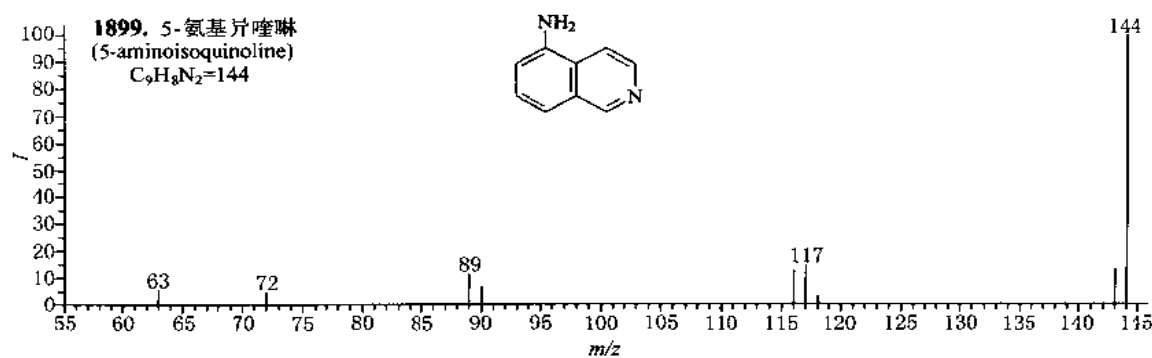
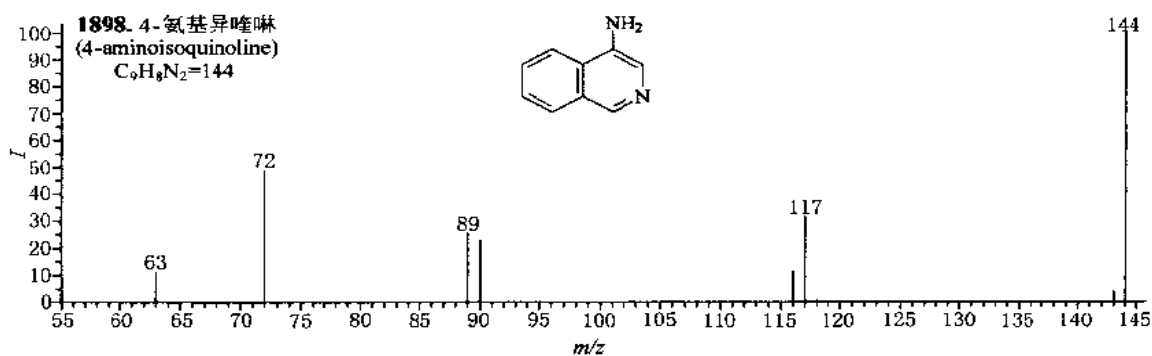
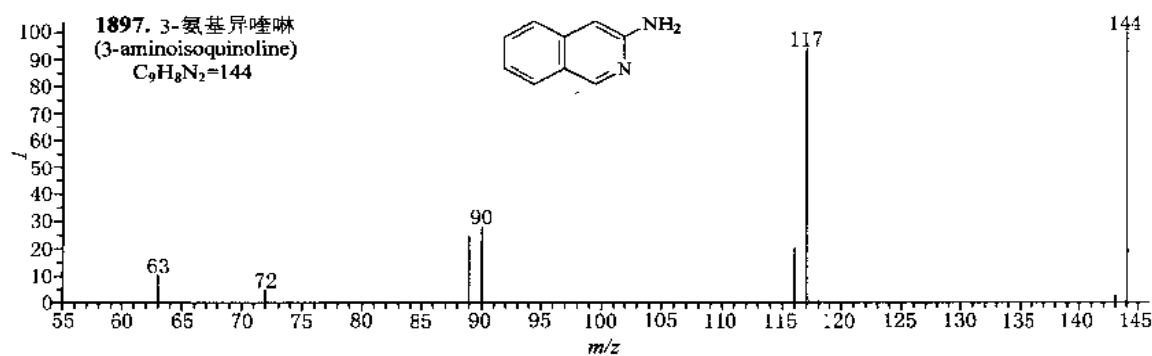
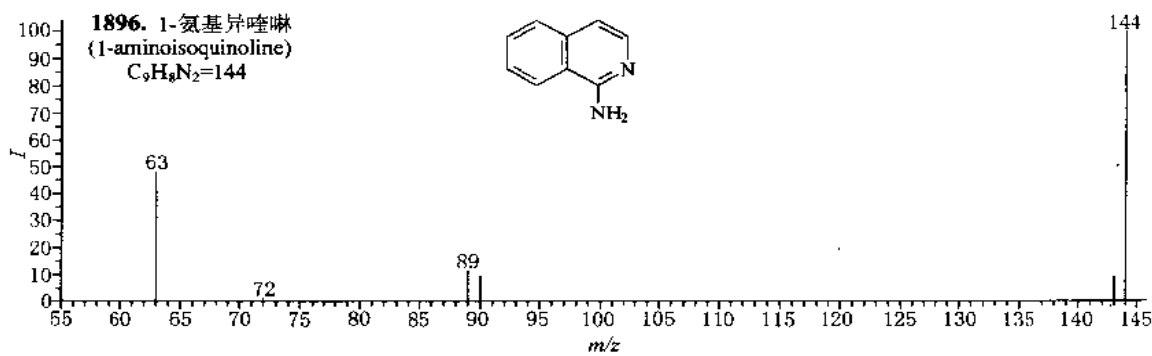
$M-CH_3-CHN-C_2H_2$ 和  $M-CHN$ 。

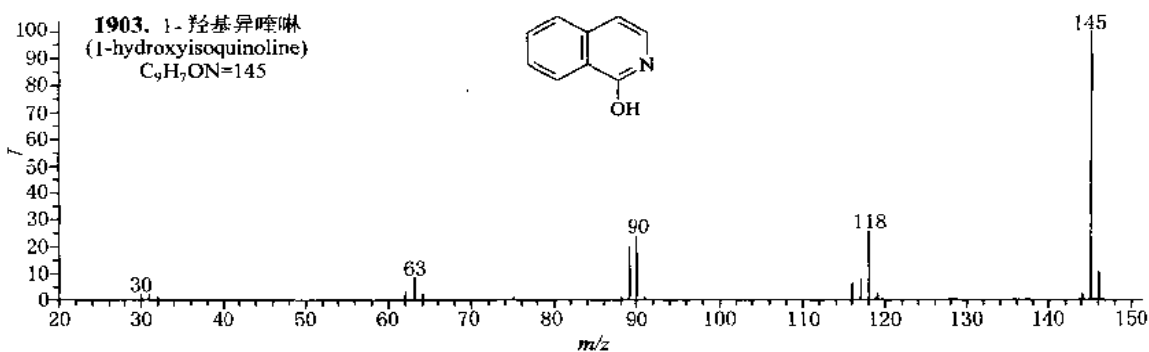
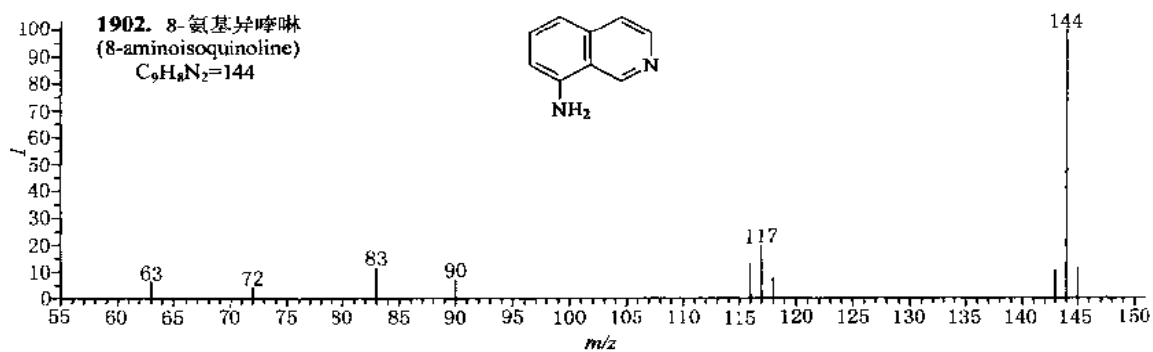
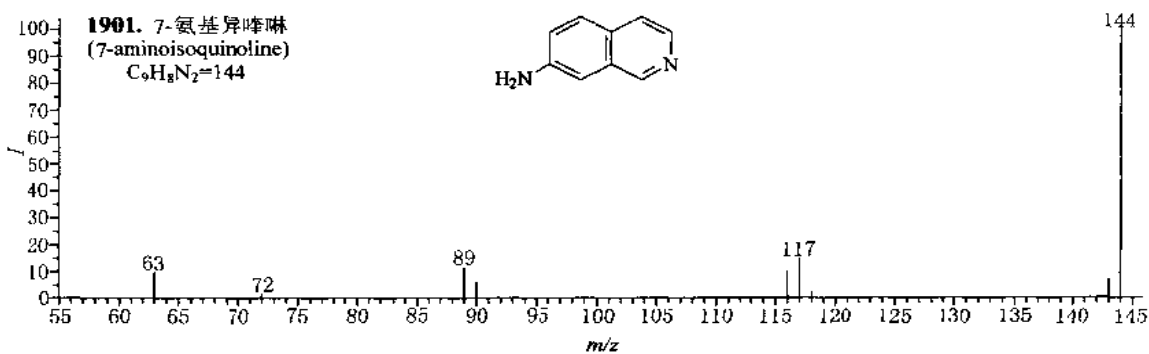
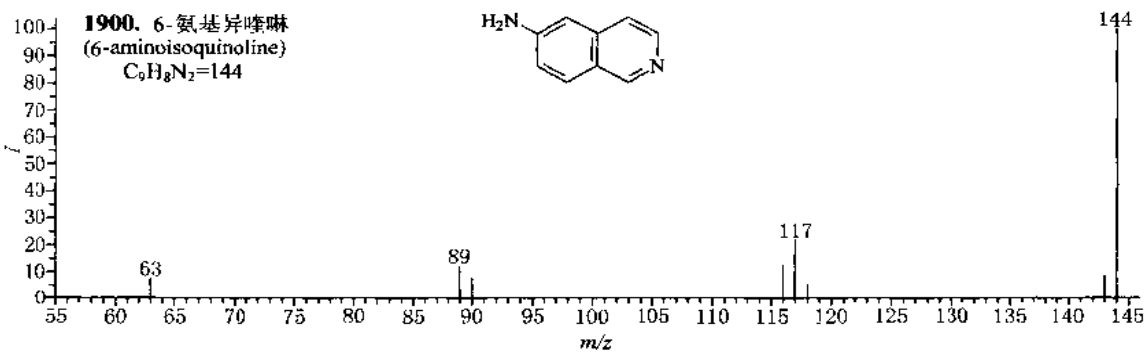
(3) 氨基异喹啉 (1896~1902) 有两条裂解途径, 即  $M-CN H-CHN$  和  $M-CN H-H-CHN-C_2H_2$ , 另外都有明显的双电荷分子离子  $m/z$  72。

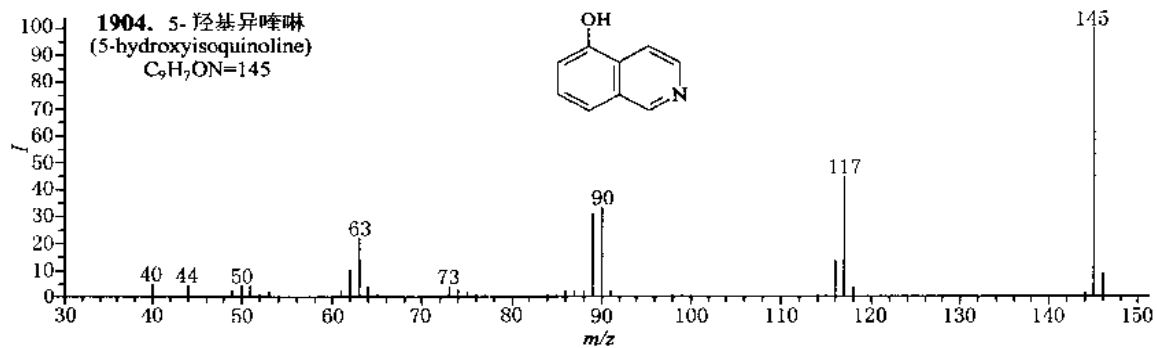
(4) 羟基异喹啉 (1903, 1904) 都有明显的  $M-CO$  和  $M-CO-H$  离子, 然后再失去  $CHN$  和乙炔。







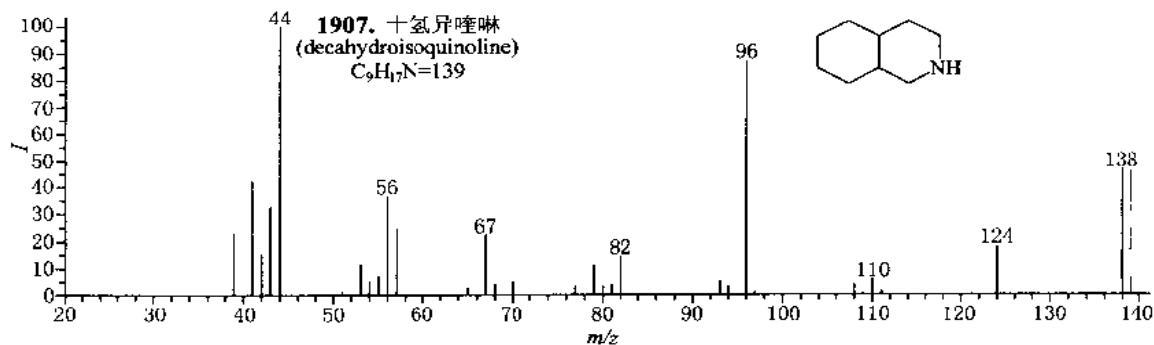
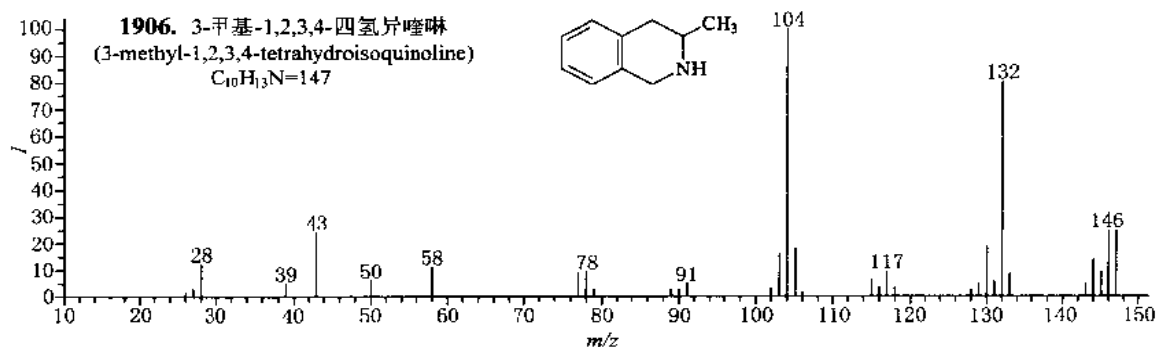
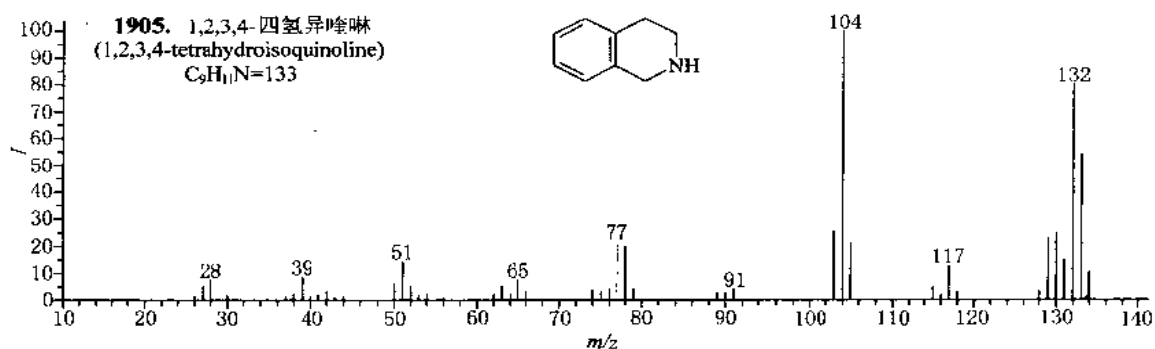




## 二、氢化异喹啉类

(1) 1,2,3,4-四氢异喹啉 (1905) 及其甲基取代物 (1906) 都有明显的 RDA 裂解, 失去的是  $CH_2NH$  和  $CH_3CHNH$ 。

(2) 十氢异喹啉 (1907) 的主要离子是失去  $CH_2CH_2NH$ 。

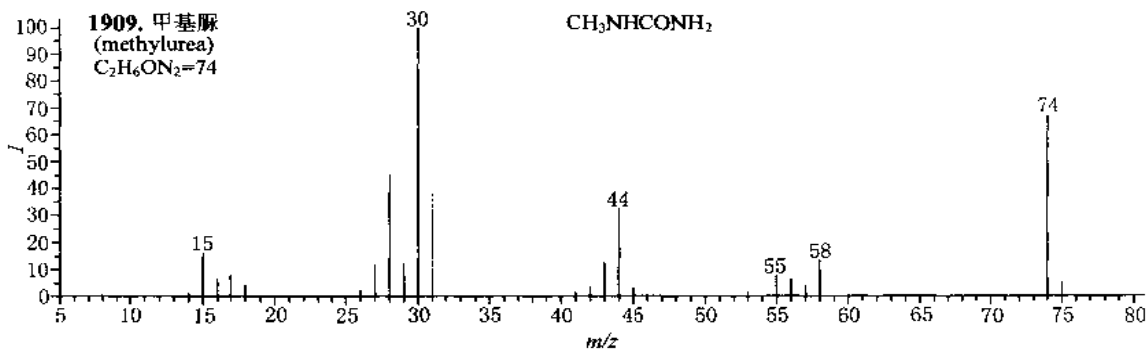
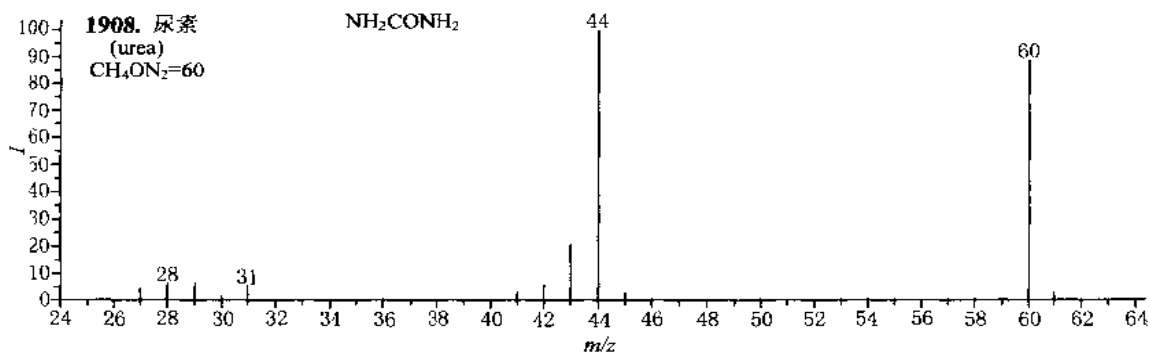


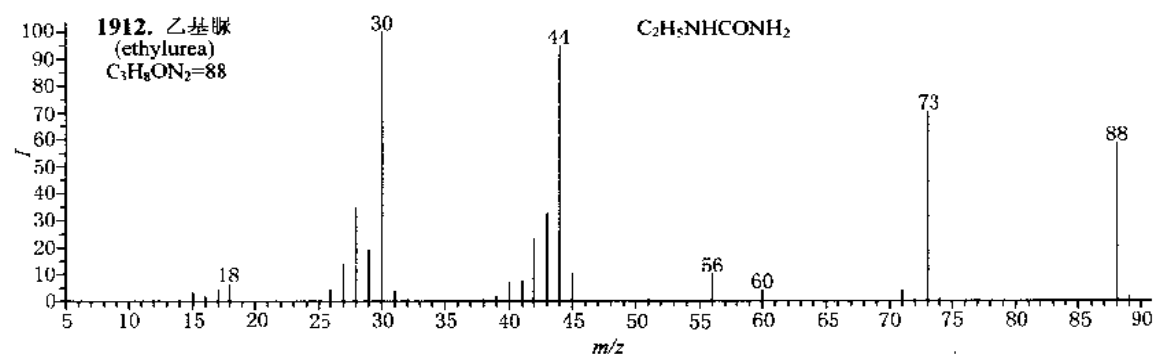
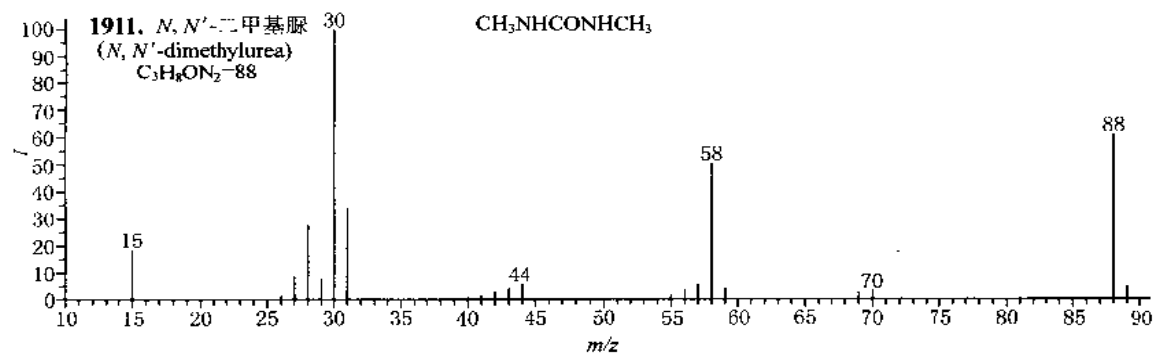
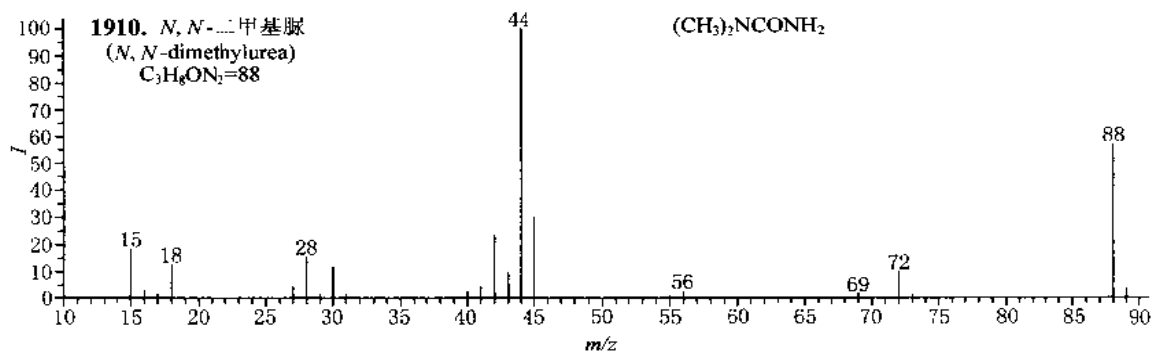
# 第十三章 脲、胍和脲类

## 第一节 脲 和 胍

### 一、脲 类

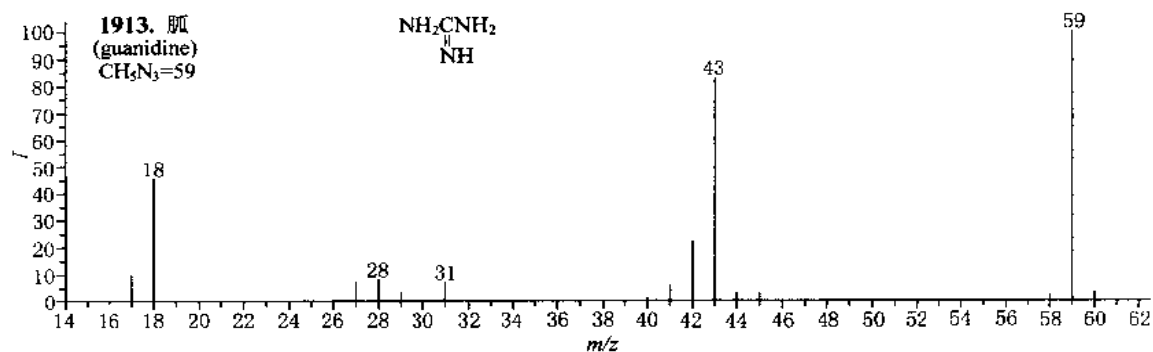
尿素 (1908) 本身有强峰  $M-NH_2$  离子  $m/z$  44, 它的结构是  $NH_2C\overset{\cdot}{O}$ 。甲基尿素 (1909) 仍有  $M-NH_2$  离子 ( $m/z$  58), 也有离子  $m/z$  44, 但又增加了  $CH_2=N^+H_2$  离子。 $N,N'$ -二甲基尿素 (1910) 除有  $M-NH_2$  离子外, 尚有强峰  $m/z$  44, 此离子可能含有两种成分, 即  $C\overset{-}{O}NH_2$  和  $CH_3NHCH_2^+$ 。 $N,N'$ -二甲基尿素 (1911) 的两个碎片离子是  $m/z$  58 ( $CH_3NHC\overset{-}{O}$ ) 和  $30(CH_2N^+H_2)$ 。 $N$ -乙基尿素 (1912) 有三个重要的碎片离子, 即  $m/z$  73 ( $M-CH_3$ ),  $m/z$  44 ( $C\overset{-}{O}NH_2$  和  $CH_3CHN^+H_2$ ) 和  $m/z$  30 ( $CH_2N^+H_2$ )。所有这些离子都是  $\alpha$ -裂解的产物。

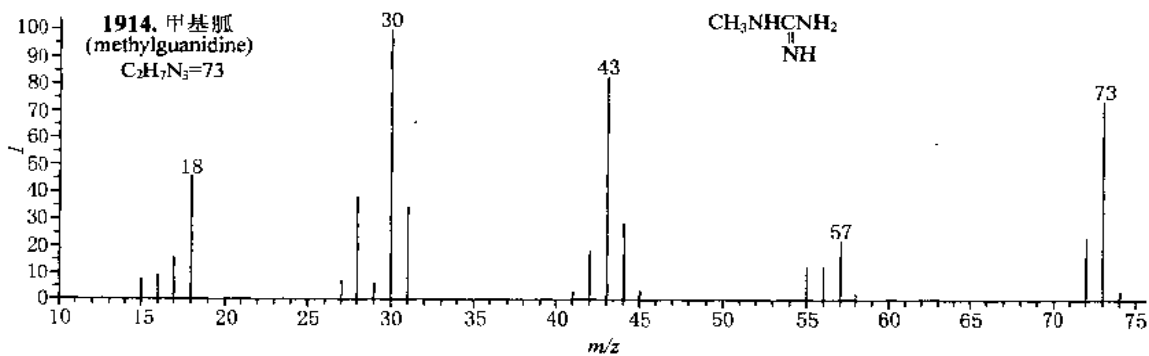




## 二、脲 类

脲 (1913) 本身只有一个重要的碎片离子  $M-NH_2$ , 甲基脲 (1914) 有三个重要的碎片离子, 即  $M-NH_2$ ,  $M-CH_3NH$  和  $CH_2NH_2^+$ 。

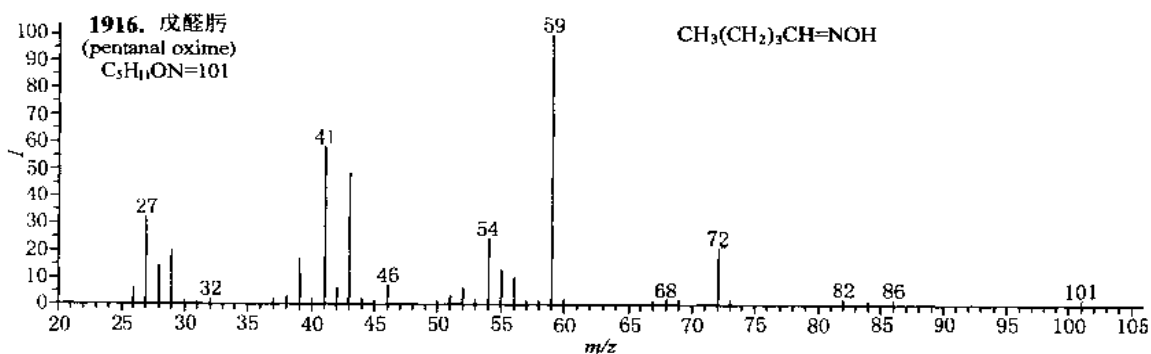
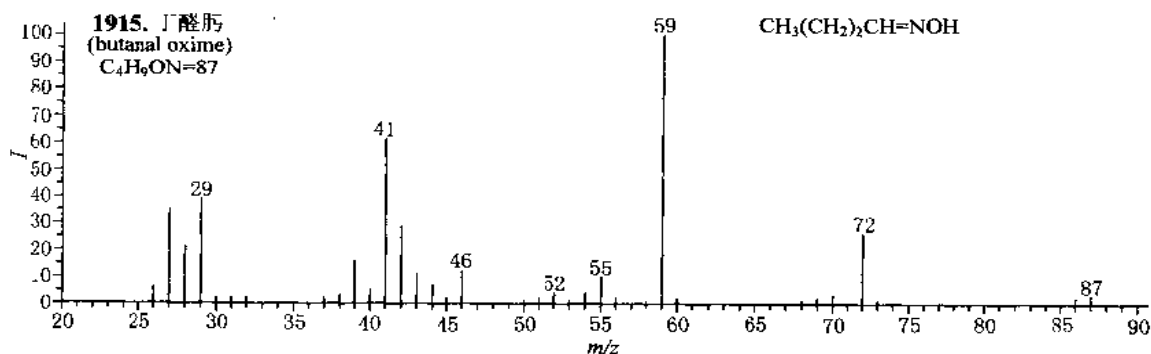




## 第二节 脞 类

### 一、醛脞类

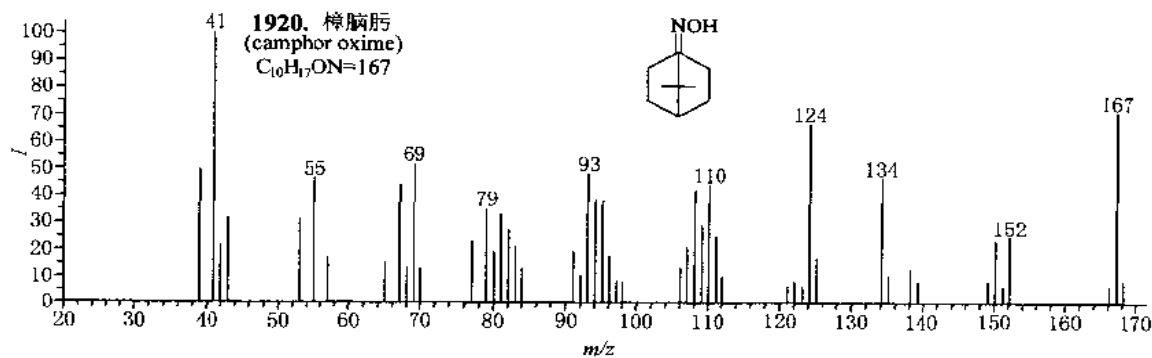
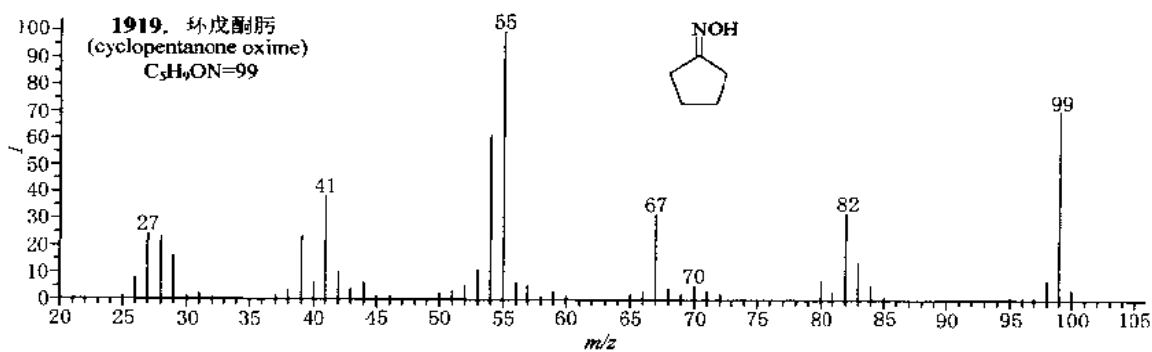
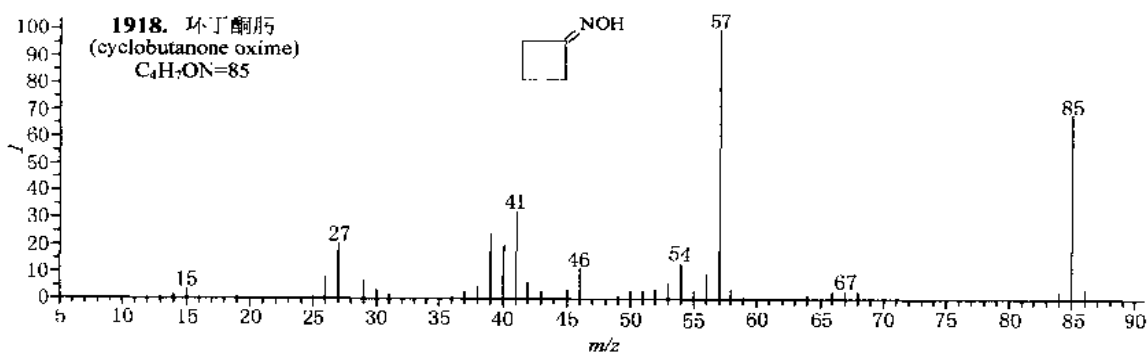
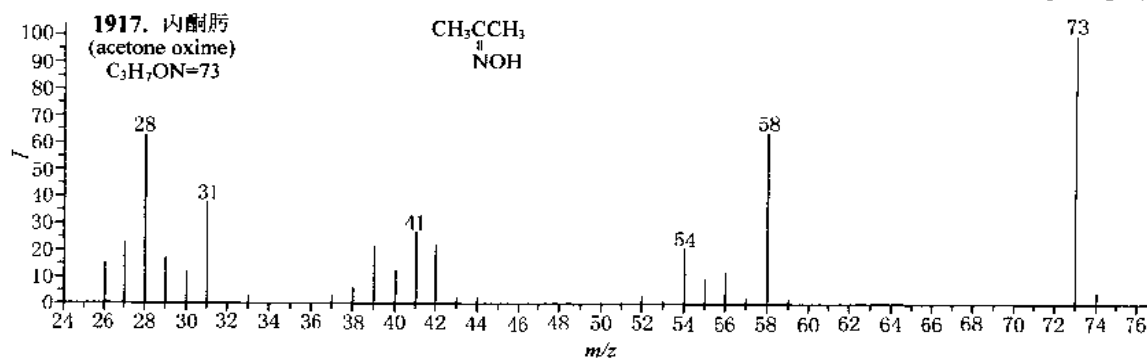
醛脞主要是失去烷基，自丁醛脞 (1915) 开始，以上各脞能进行麦氏重排裂解失去烯类得离子  $m/z$  59。



### 二、酮脞类

- (1) 丙酮脞 (1917) 的主要裂解是失去甲基。
- (2) 环戊酮脞 (1919) 的三个裂解途径是  $M-OH$ ， $M-NHOH$  和  $M-OH-C_2H_5$ 。

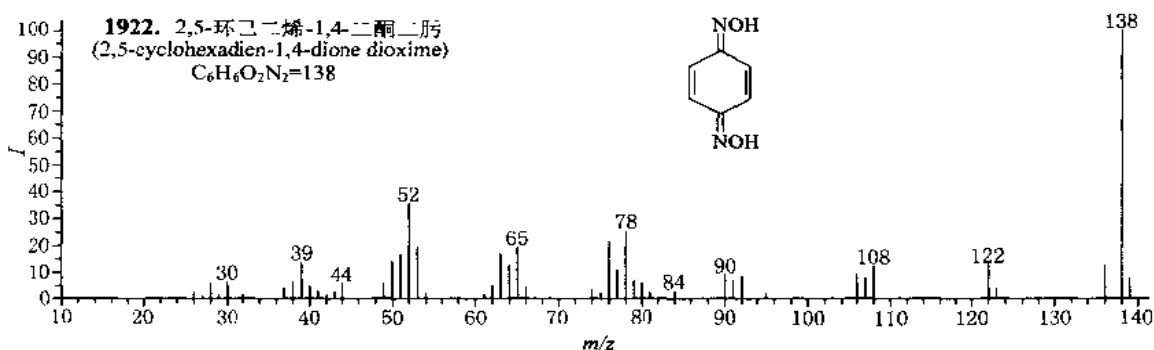
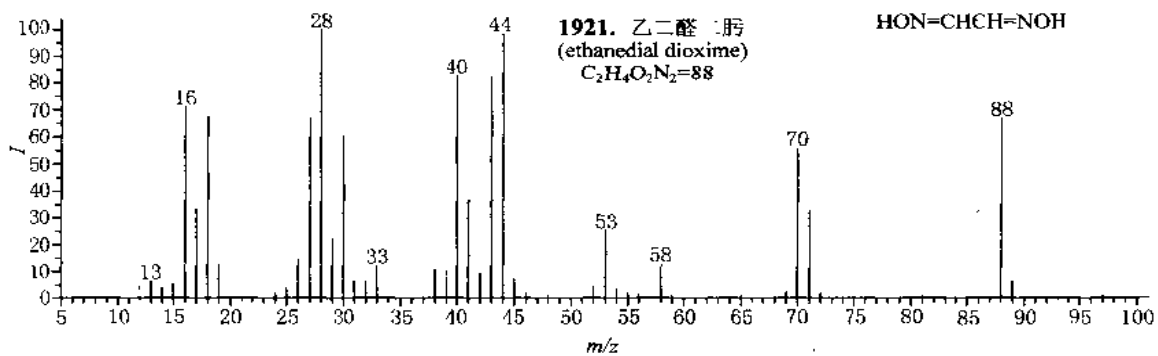
(3) 樟脑肟 (1920) 的裂解是  $M-CH_3$ ,  $M-OH$ ,  $M-CH_3-H_2O$  和  $M-CH_3-C_2H_4$ 。



## 三、二肟类

(1) 乙二醛二肟 (1921) 的裂解是  $M-OH$ ,  $M-H_2O$  和分子离子的对半裂解。

(2) 2,5-环己二烯-1,4-二酮二肟 (1922) 的裂解是失去乙炔, 类似对苯醌 (2456) 的裂解, 其他裂解是  $M-NO-NO-C_2H_2$ , 分别得离子  $m/z$  108, 78 和  $m/z$  52。





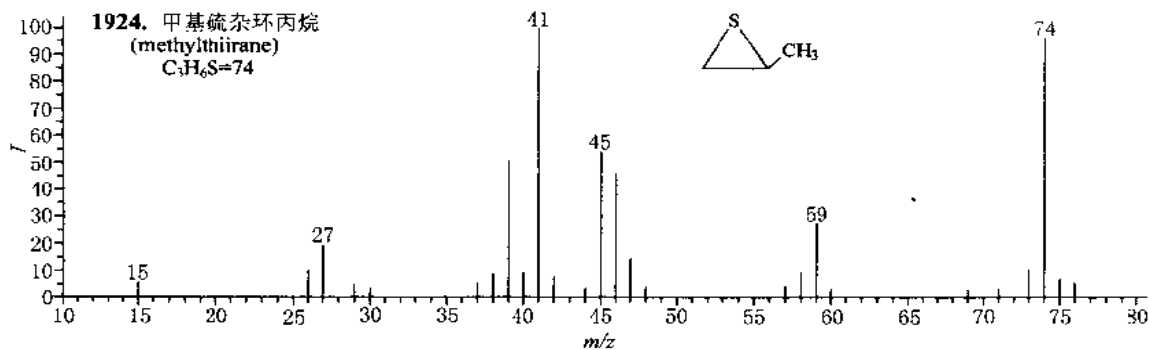
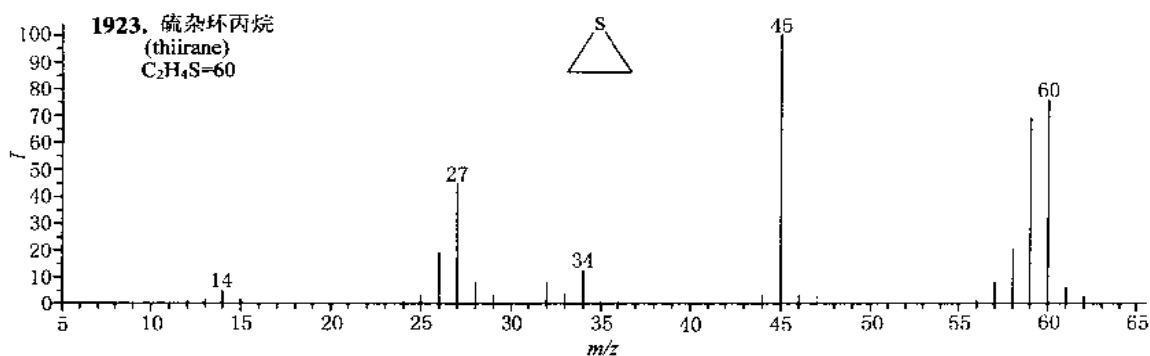
## 第十四章 含硫化合物

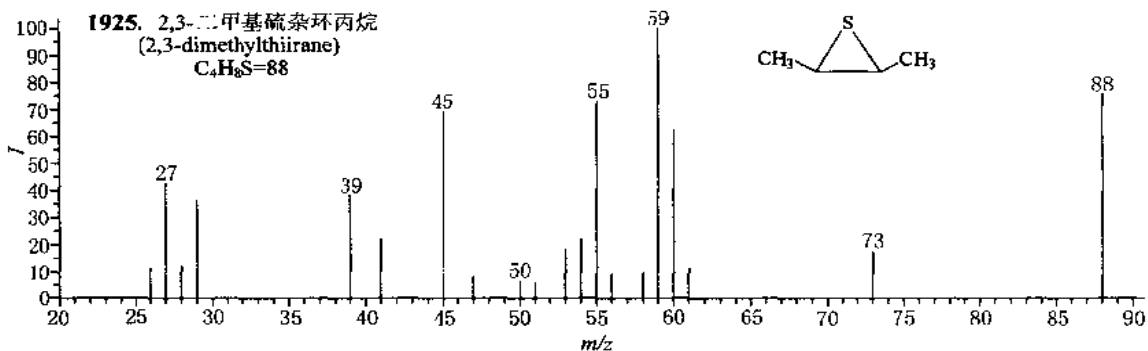
### 第一节 硫杂环烷类

#### 一、硫杂环丙烷类

(1) 硫杂环丙烷 (1923) 本身只有两个重要碎片离子, 即  $M-H$  和  $M-CH_3$ , 后者具有硫代甲酰基结构:  $CH=\dot{S}$ 。

(2) 甲基和二甲基硫杂环丙烷 (1924, 1925) 除有失去烷基的离子外, 前者也有离子  $CH=\dot{S}$ , 且伴有  $CH_2=\dot{S}$  和  $CH_2=\dot{S}H$  离子, 三者分别为  $m/z$  45,  $m/z$  46 和  $m/z$  47。后者尚具有这 3 个离子的甲基取代的离子, 即  $CH_3C\equiv\dot{S}^+$  ( $m/z$  59),  $CH_3CH=\dot{S}^-$  ( $m/z$  60) 和  $CH_3CH=\dot{S}H$  ( $m/z$  61)。

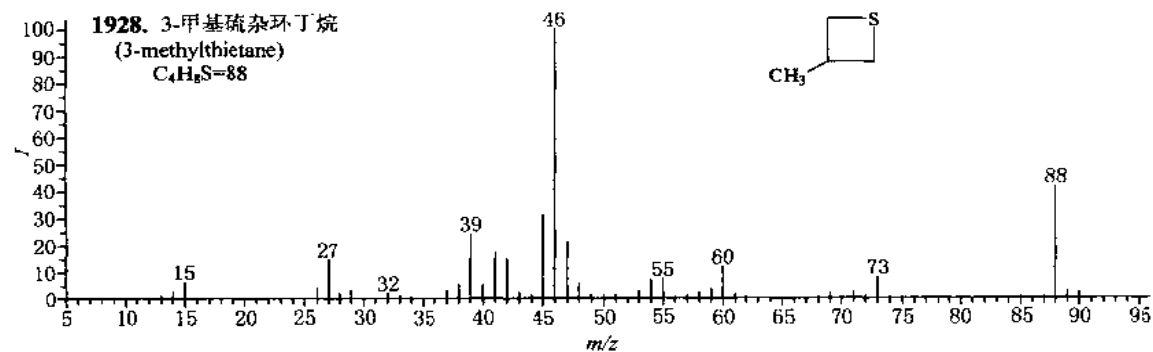
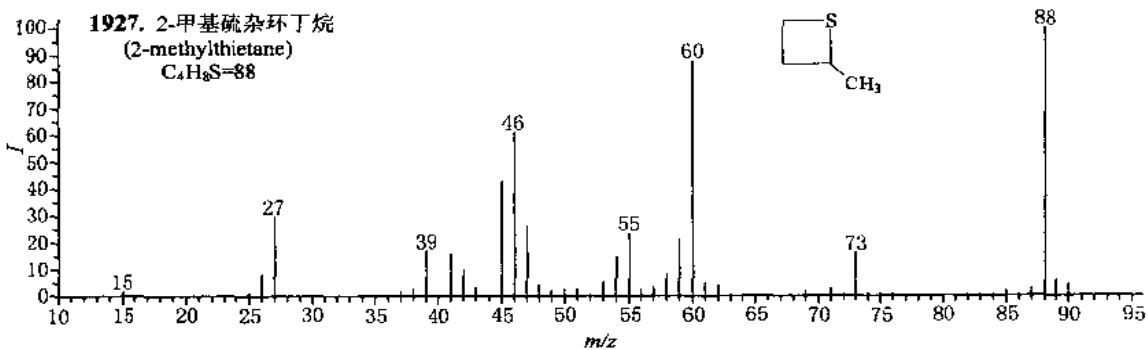
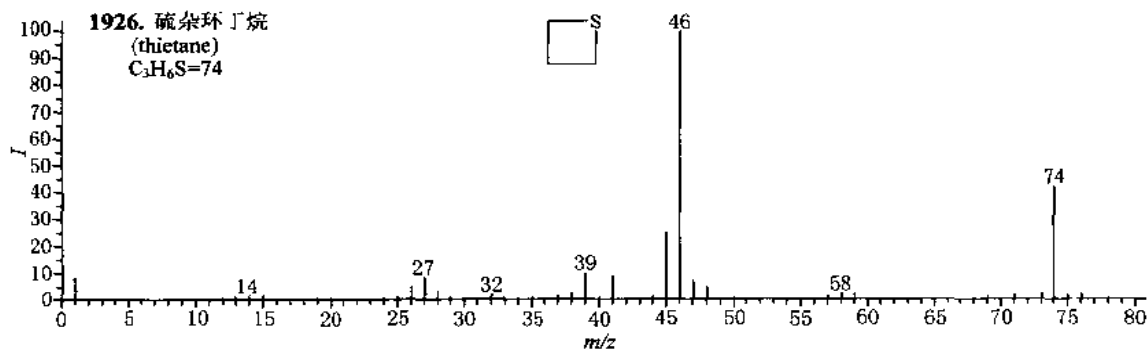




## 二、硫杂环丁烷类

(1) 硫杂环丁烷 (1926) 本身也只有离子  $m/z$  45,  $m/z$  46 和  $m/z$  47, 结构同上。

(2) 甲基硫杂环丁烷 (1927, 1928) 与二甲基硫杂环丙烷 (1925) 一样, 也具有两套离子, 即  $m/z$  45,  $m/z$  46 和  $m/z$  47 以及  $m/z$  59,  $m/z$  60 和  $m/z$  61, 结构也同上述。

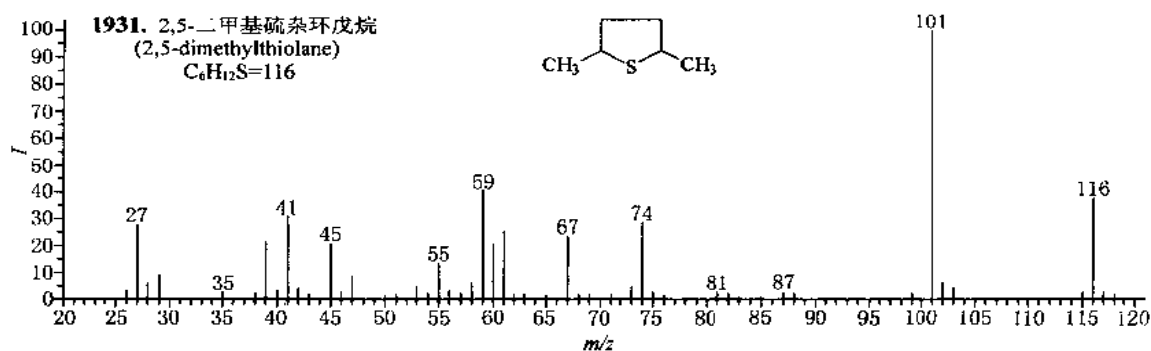
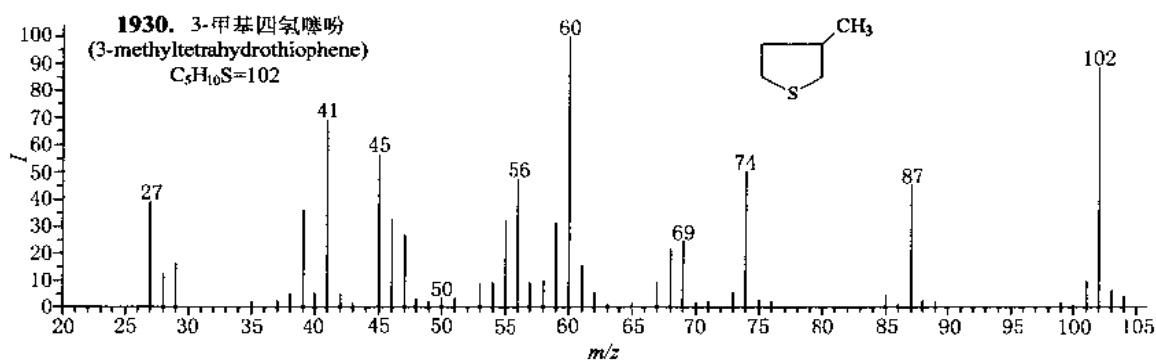
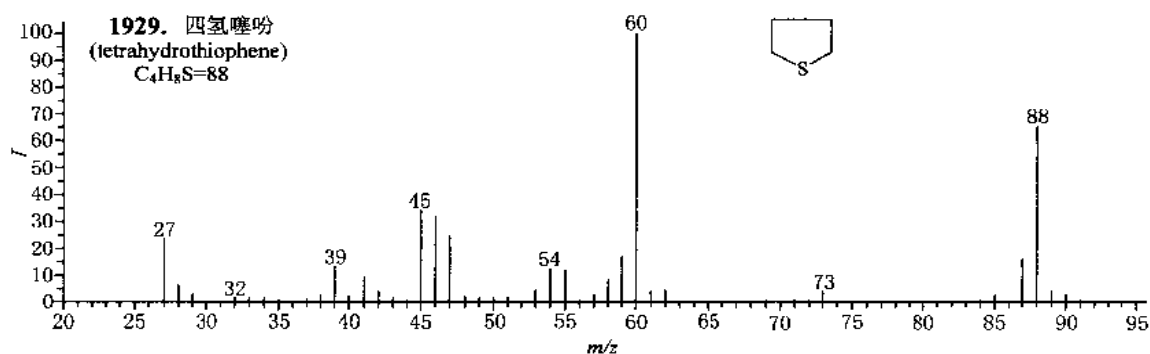


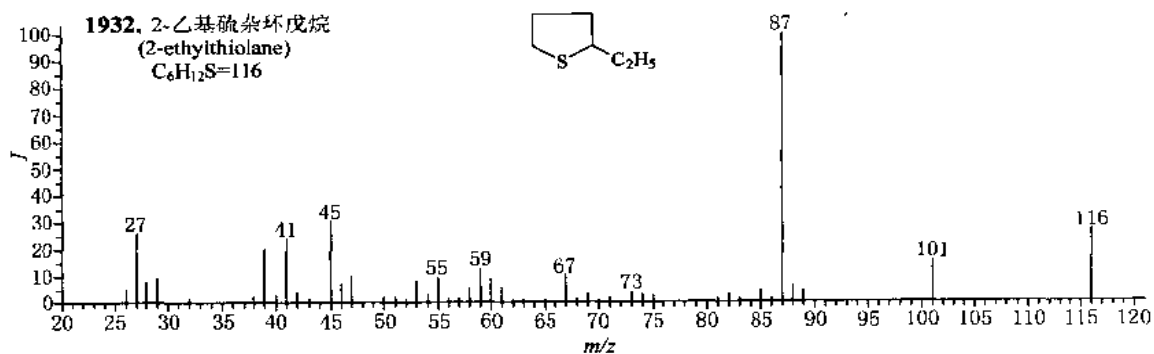
## 三、四氢噻吩类

(1) 四氢噻吩(1929)也有  $m/z$  45,  $m/z$  46 和  $m/z$  47 三个离子, 离子  $m/z$  60 为  $M-C_2H_4$ , 它可能有硫杂环丙烷(1923)的结构。

(2) 甲基和二甲基四氢噻吩(1930, 1931)的质谱中, 以上各离子都存在, 但又增加了一个离子  $m/z$  74, 它可能有甲基硫杂环丙烷的结构。

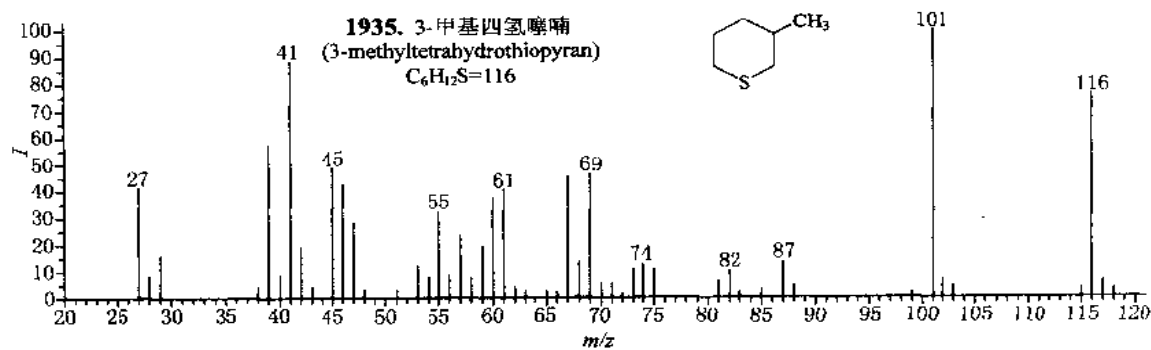
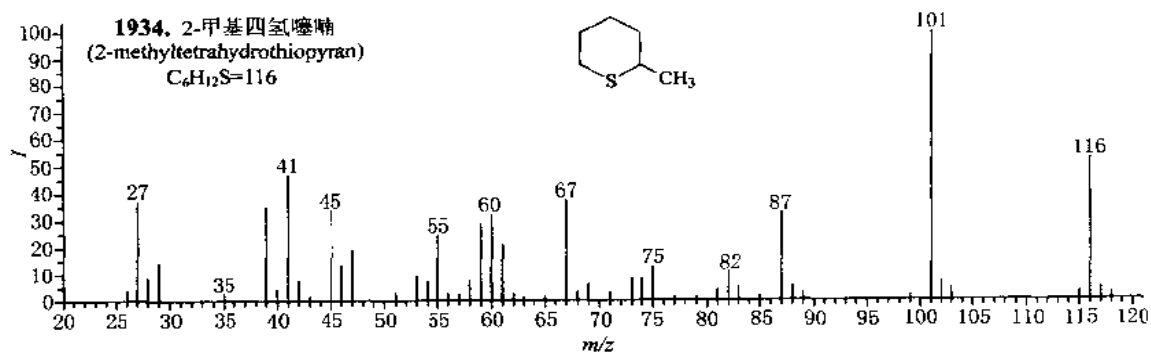
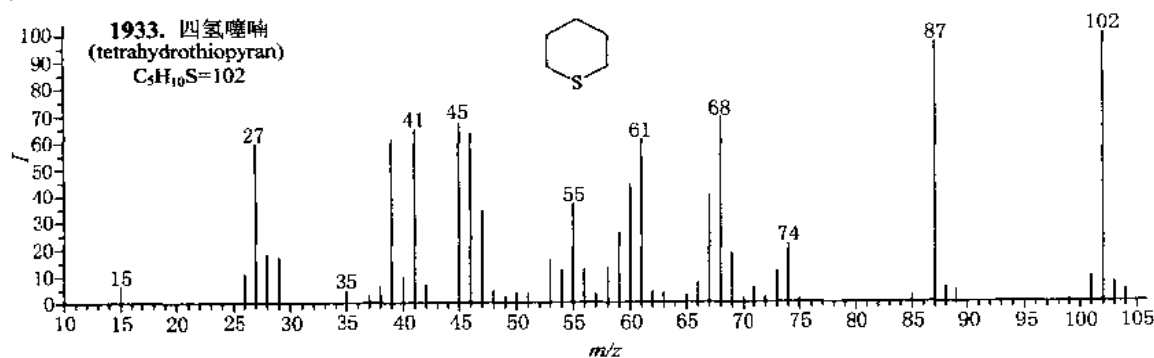
(3) 2-乙基硫杂环戊烷(1932)的主要离子是  $\alpha$ -裂解失去乙基生成的离子  $m/z$  87。

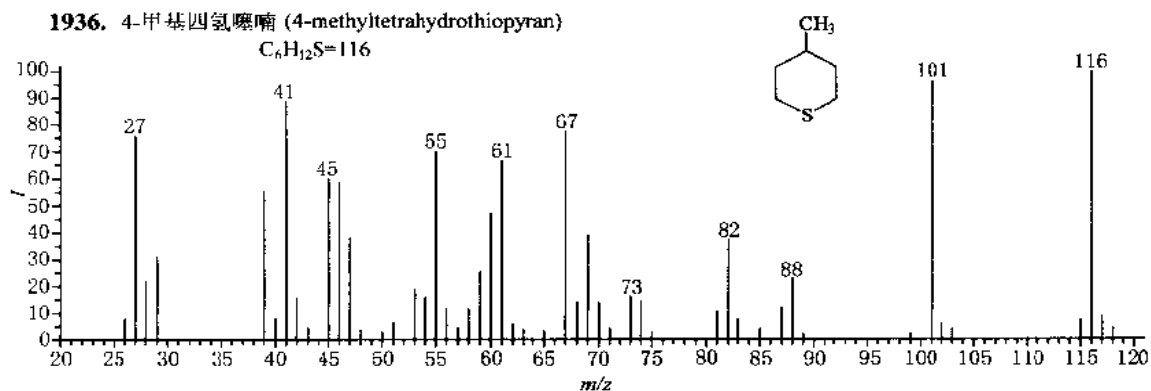




#### 四、四氢噻喃类

四氢噻喃 (1933) 也有上述的三套离子, 但似又增加了  $M-H_2S$  离子 ( $m/z$  68)。甲基四氢噻喃类化合物 (1934~1936) 的  $M-CH_3$  离子很强, 以上各类型离子也都存在。

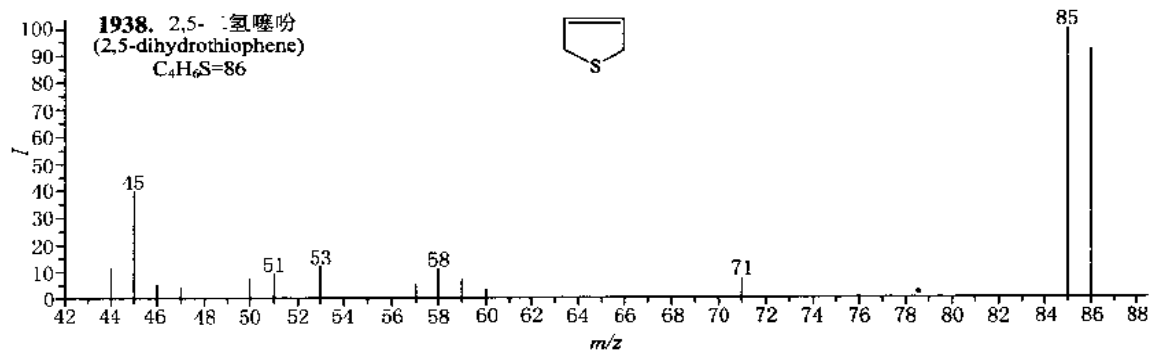
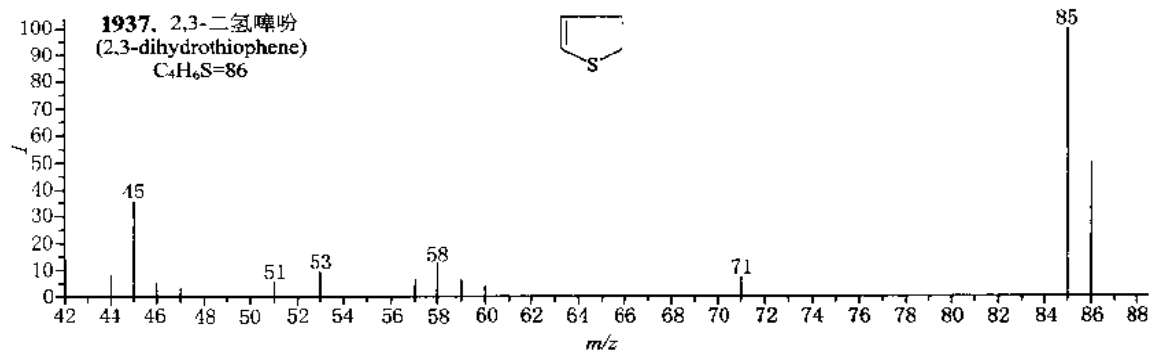


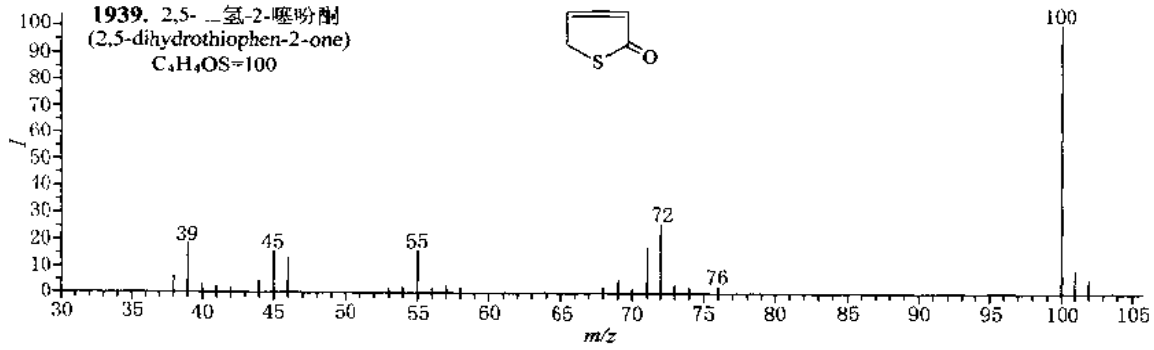


### 五、二氢噻吩类

(1) 二氢噻吩类化合物 (1937, 1938) 有三个重要的碎片离子, 即  $M-CH_3$ ,  $M-C_2H_4$  和  $m/z$  45, 第二个离子可能具有  $\begin{array}{c} \text{S}^+ \\ \diagup \quad \diagdown \end{array}$  结构, 第三个离子仍然是硫代甲酰基离子。

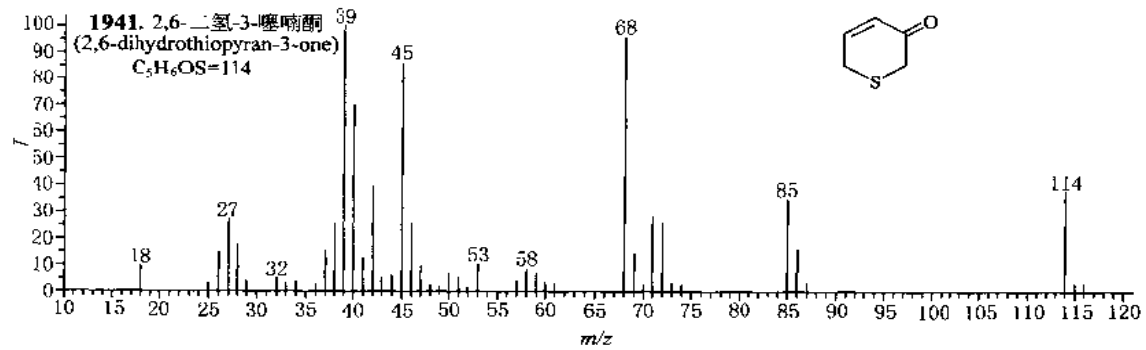
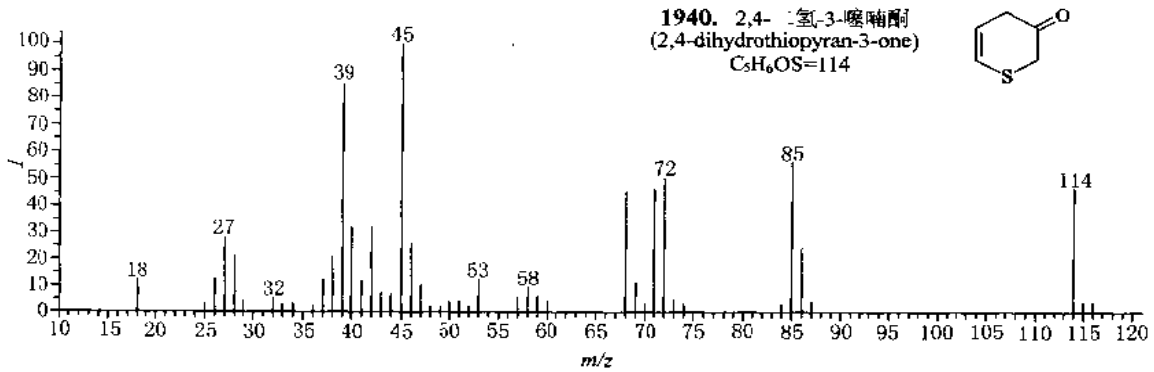
(2) 二氢-2-噻吩酮 (1939) 的  $M-CO$  和  $M-CO-H$  离子很明显, 另有离子  $m/z$  45,  $m/z$  46 和  $m/z$  55, 后一离子可能有  $CH_2=CH-CO^+$  结构。





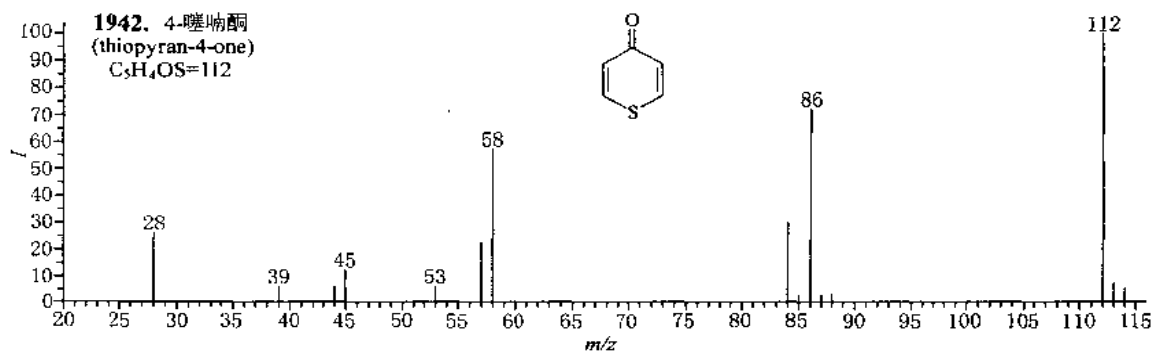
### 六、二氢噻喃酮类

二氢噻喃酮类化合物 (1940, 1941) 能进行 RDA 裂解, 或失去  $CH_2CO$ , 或失去  $CH_2S$ , 这取决于双键的位置。



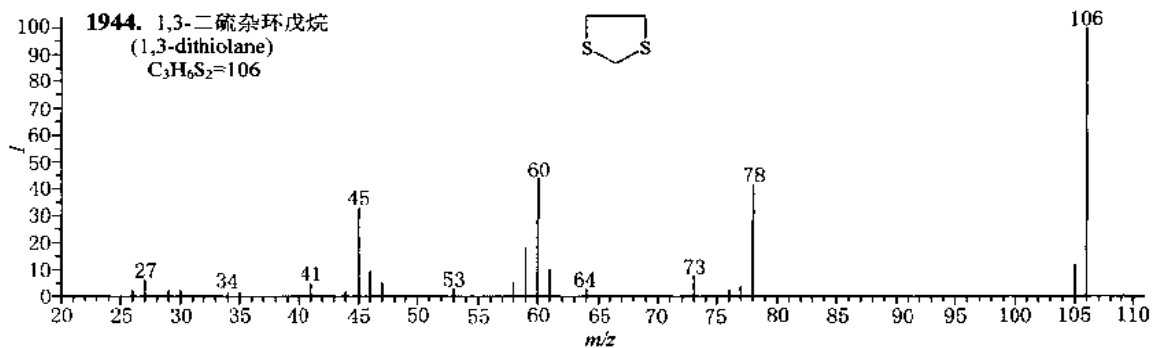
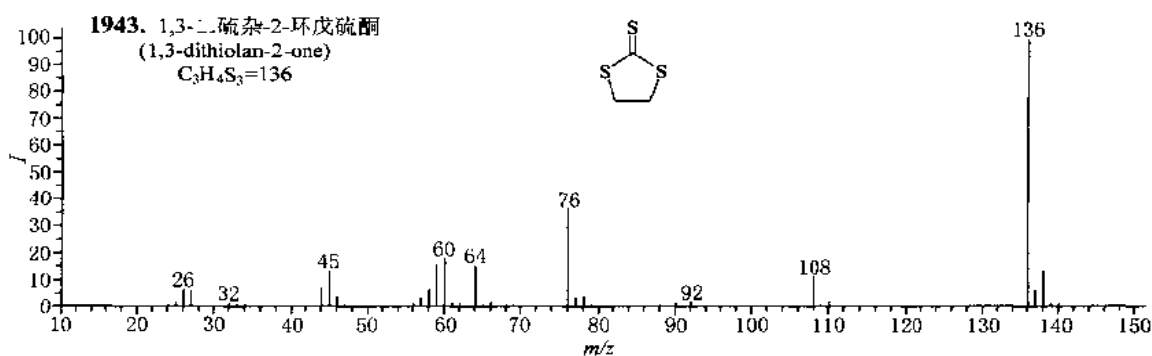
### 七、噻喃酮类

4-噻喃酮 (1942) 的裂解类似于对苯醌 (2456) 的, 即能失去乙炔、一氧化碳和再失去一氧化碳和乙炔。



### 八、1,3-二硫杂环戊烷类

1,3-二硫杂环戊烷类(1943, 1944)除有  $m/z$  45、46、47 和  $m/z$  59、60、61 两套离子外, 又增加了  $M-C_2H_4$  离子, 后者可能有二硫杂环丙烷的结构:  $S_2C_2H_2$ 。离子  $m/z$  64 是二硫杂化合物的质谱特征, 它是  $S_2$  离子。1,3-二硫杂-2-环戊硫酮(1943)的主要离子  $m/z$  76 可能具有二硫化碳结构。



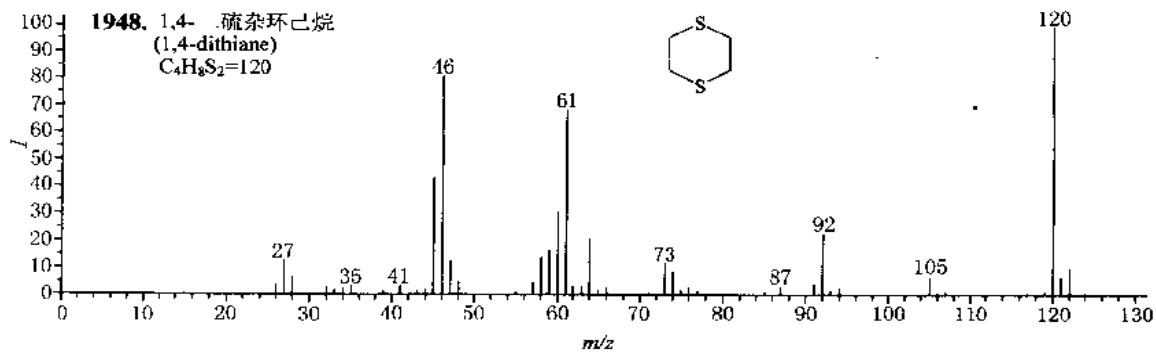
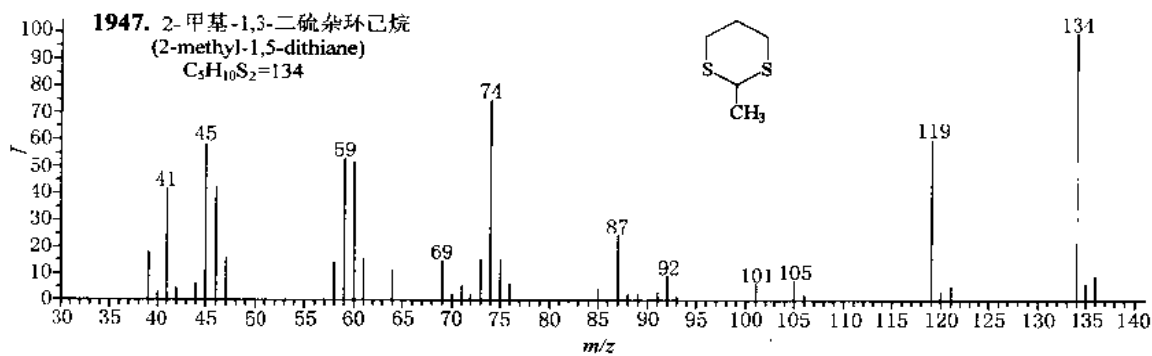
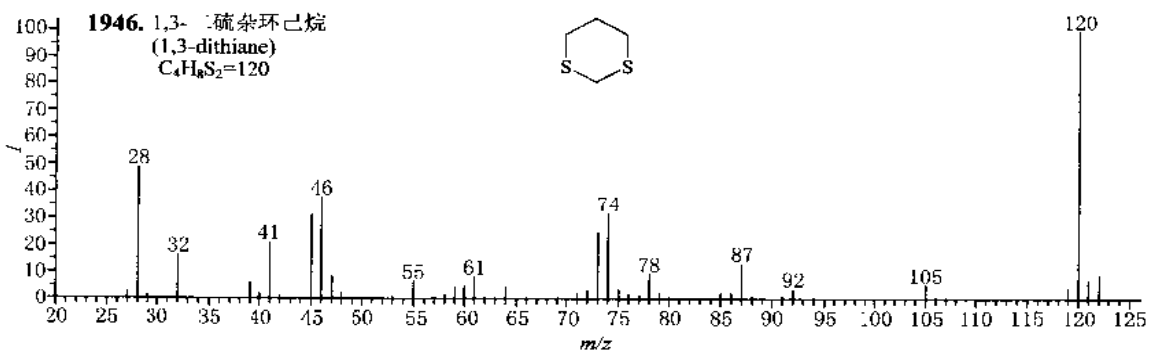
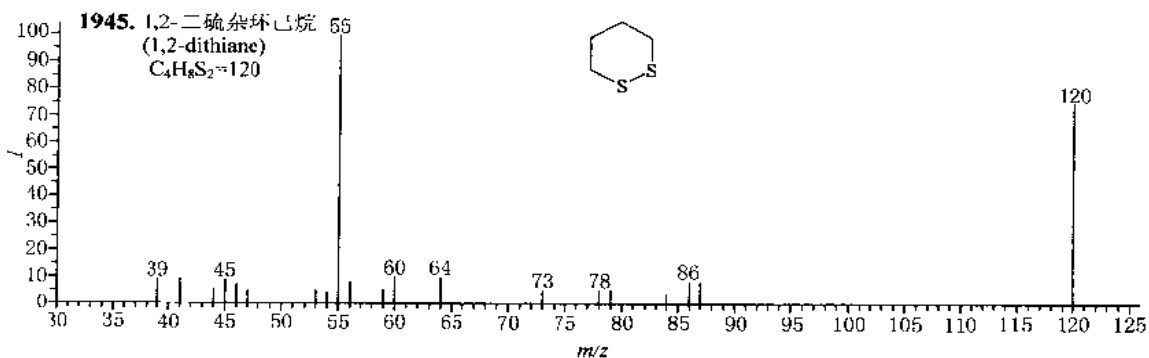
### 九、二硫杂环己烷类

(1) 1,2-二硫杂环己烷(1945)的特征离子是  $M-S_2-H$ 。

(2) 1,3-二硫杂环己烷(1946)的主要离子是  $m/z$  45、46、47、59、60、61、73 和  $m/z$  74,


后两者的结构分别为  $\begin{array}{|c|} \hline \text{S} \\ \hline \end{array}$  和  $\begin{array}{|c|} \hline \text{S} \\ \hline \end{array}$ 。

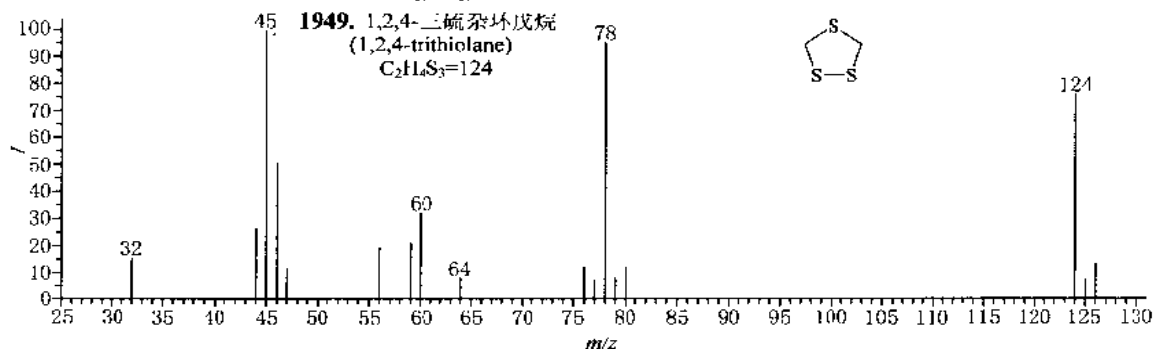
(3) 甲基取代的二硫杂环己烷 (1947) 有明显的  $M-\text{CH}_3$  离子, 其他同上。1,4-二硫杂环己烷 (1948) 的裂解也同上述。





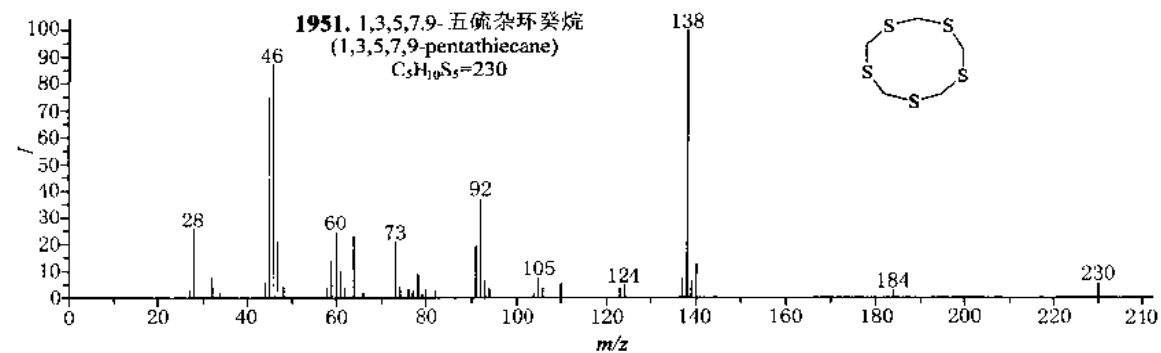
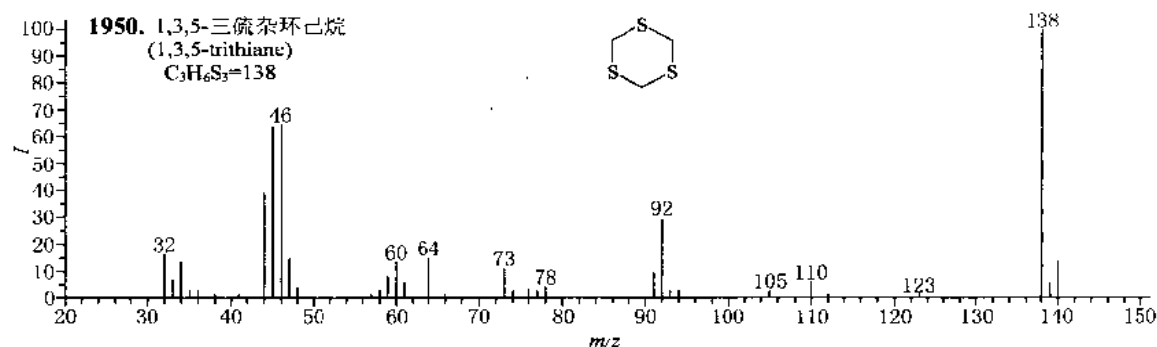
### 十、三硫杂环戊烷类

三硫杂环戊烷 (1949) 除有  $m/z$  45、46、47、59、60 和 61 离子外, 也有  $M-CH_2S$  离子  $m/z$  78, 结构也是二硫杂环丙烷 .



### 十一、三硫杂环己烷和多硫杂环烷类

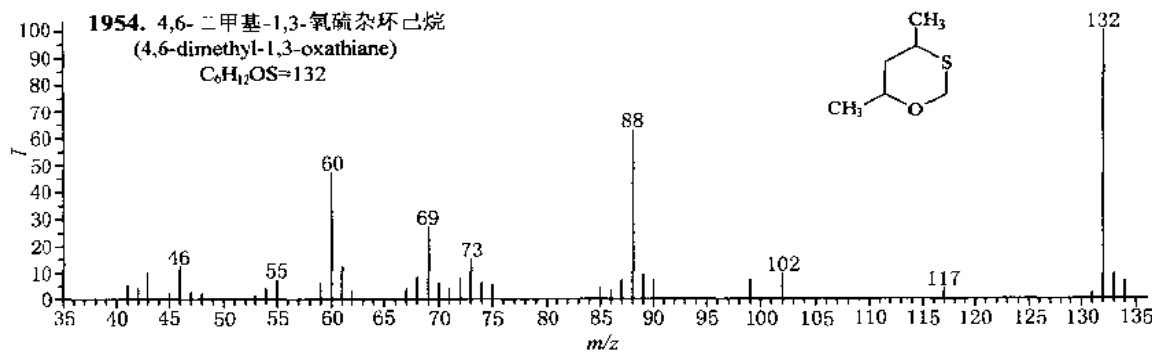
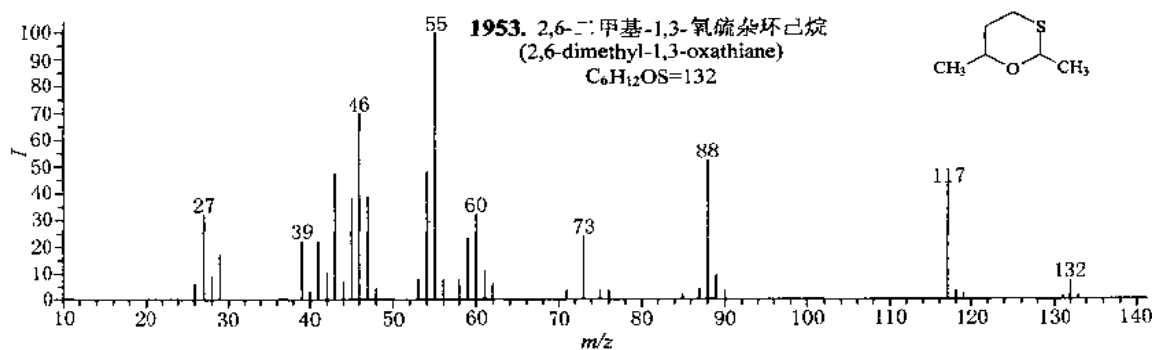
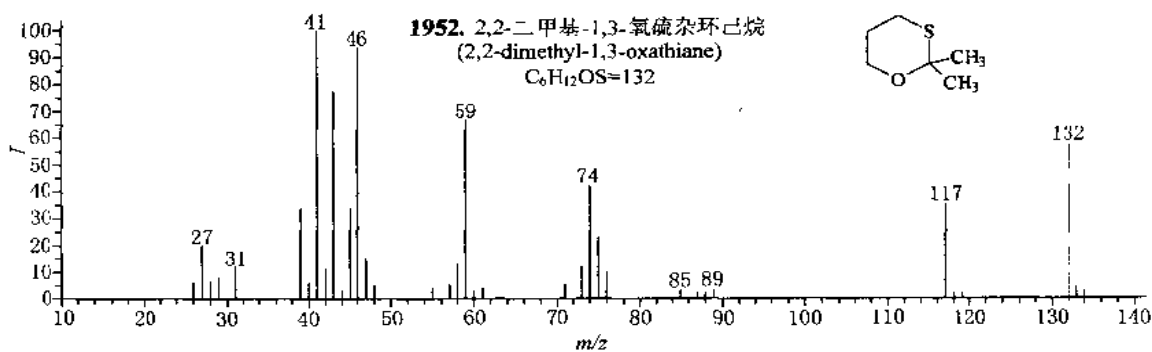
这类化合物 (1950, 1951) 的主要裂解是依次失去  $CH_2S$ 。



### 十二、1,3-氧硫杂环己烷类

(1) 2,2-二甲基-1,3-氧硫杂环己烷 (1952) 的主要裂解是失去丙酮, 另有羟异丙基离子  $m/z$  59。

(2) 2,6-二甲基和 4,6-二甲基-1,3-氧硫杂环己烷 (1953, 1954) 的主要裂解是失去乙醛。



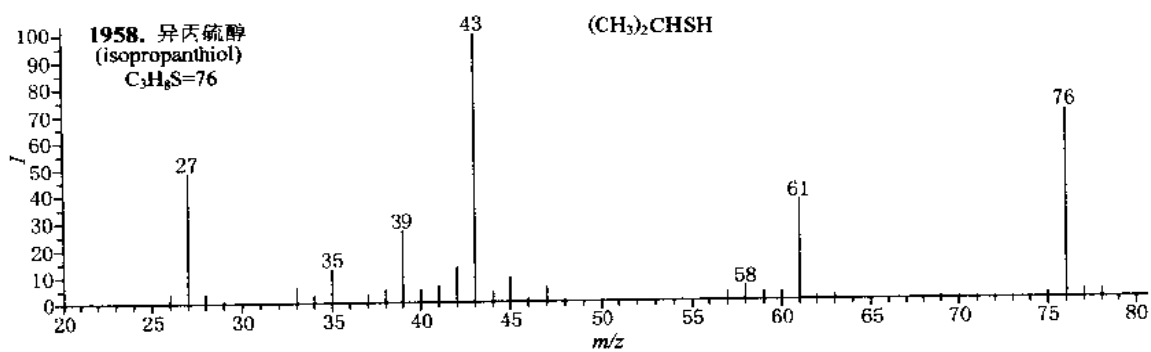
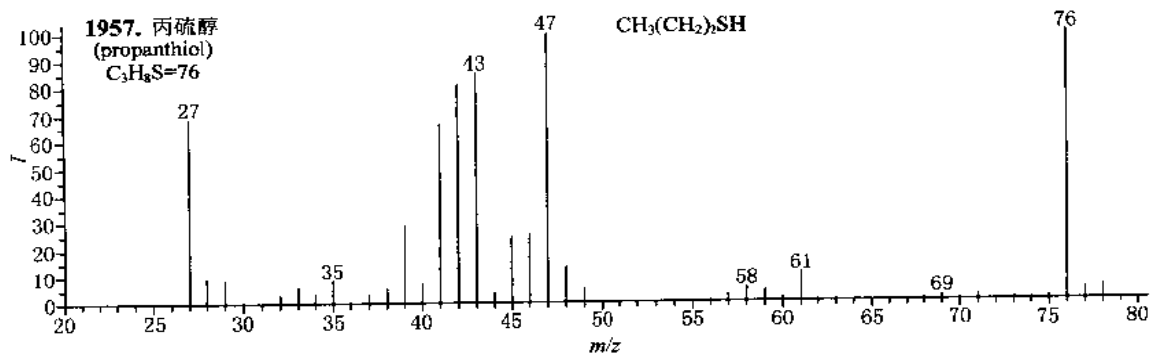
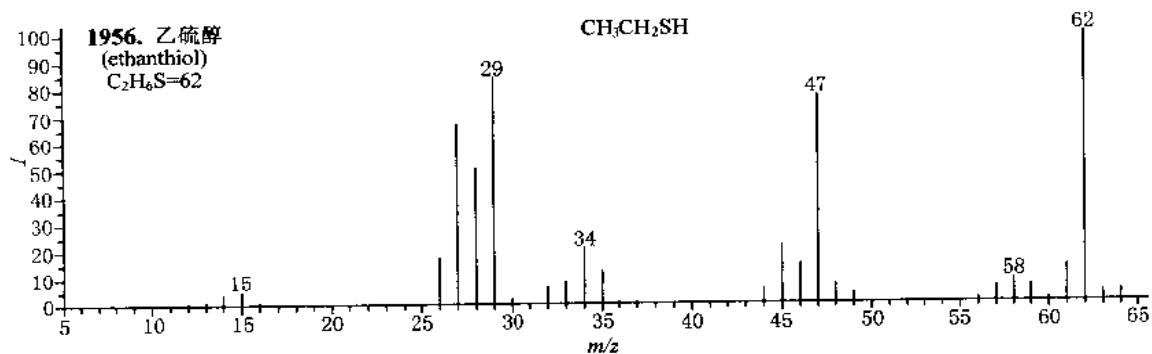
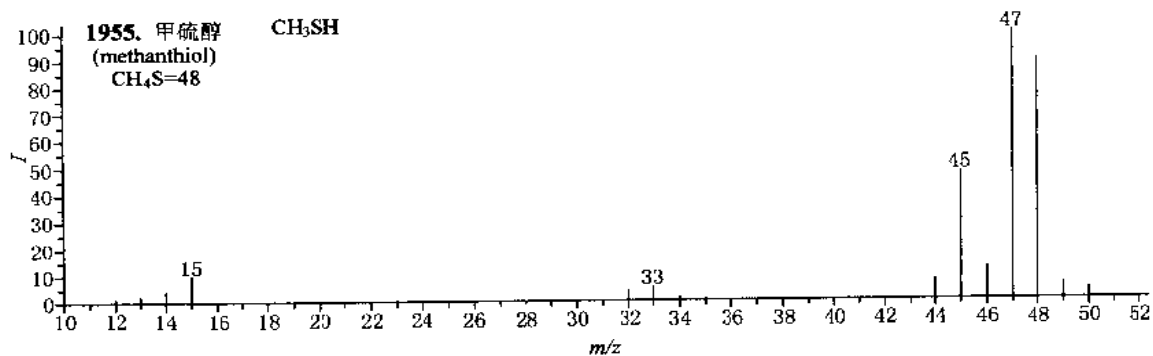
## 第二节 硫醇类

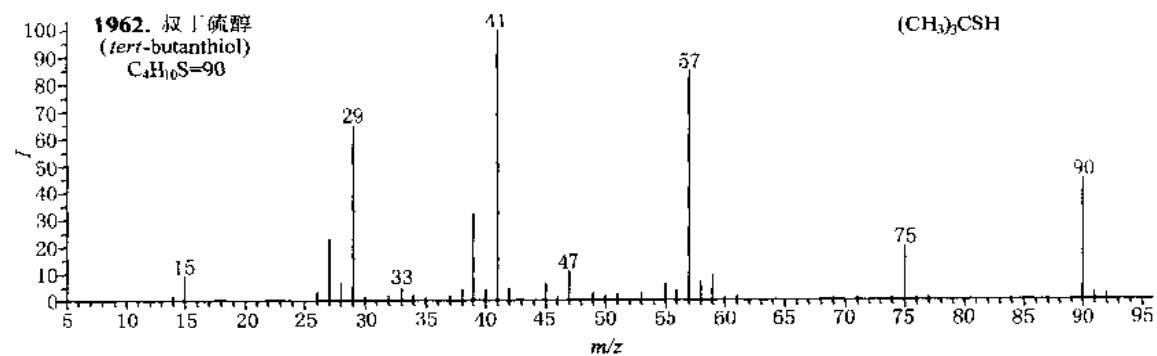
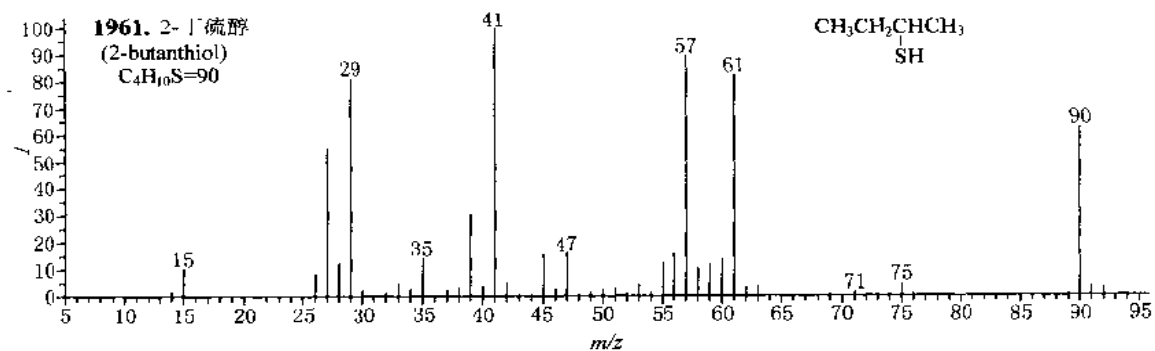
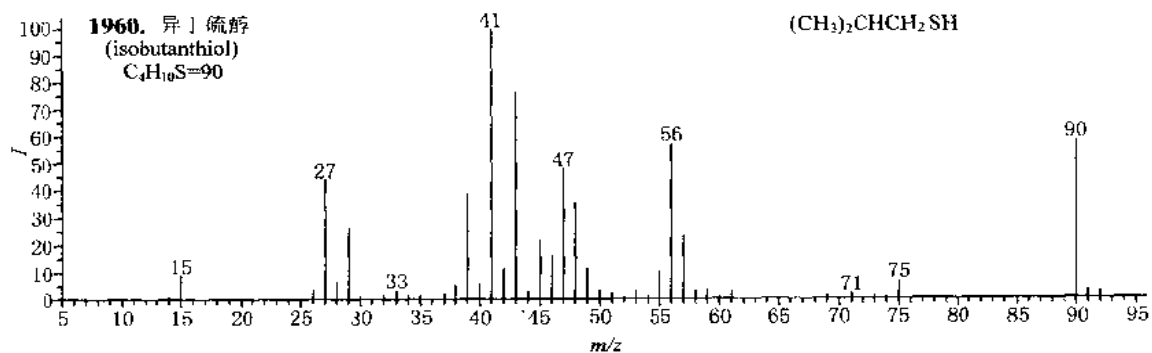
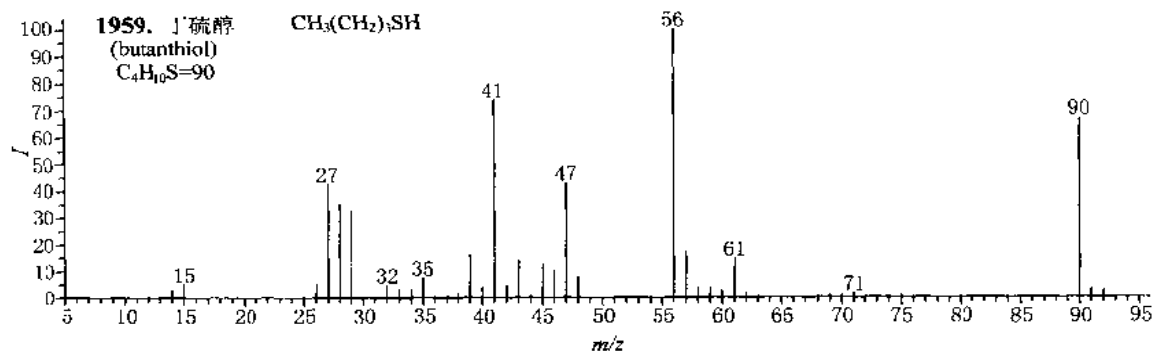
### 一、直链脂肪硫醇类

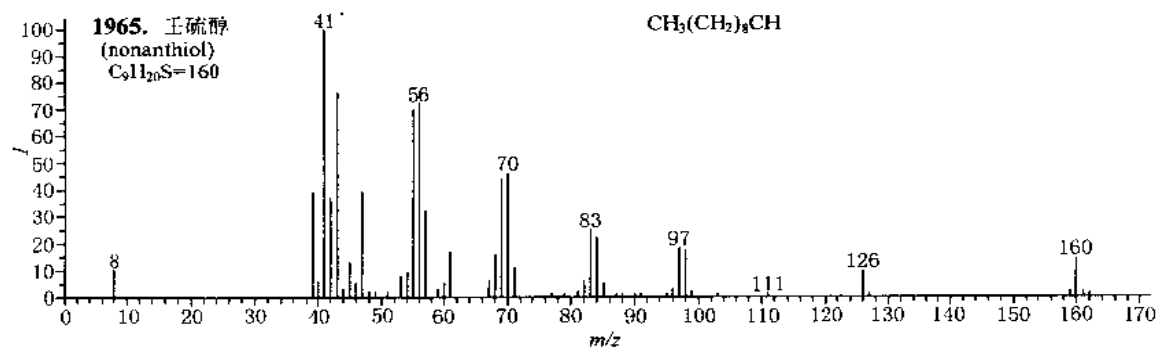
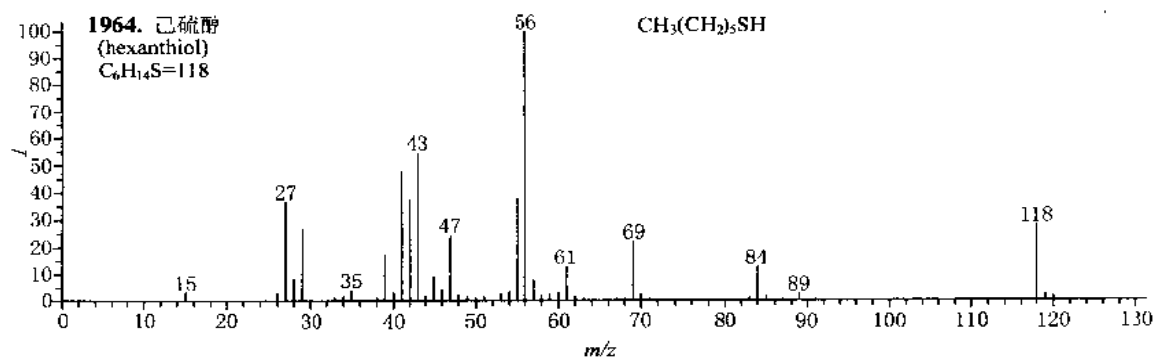
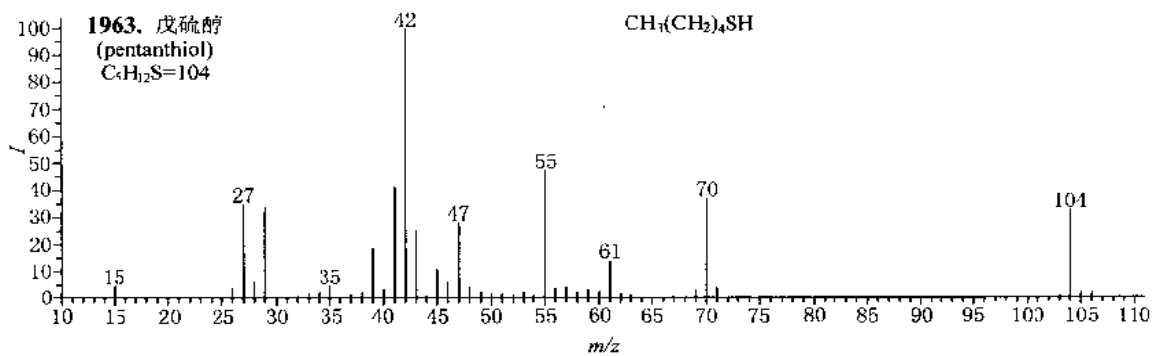
(1) 甲硫醇 (1955) 的裂解类似甲醇的, 主要离子来自  $\alpha$ -裂解产生  $M-H$  离子, 另有失去三个氢原子的硫代甲酰基离子  $CH_2=S^+$ 。

(2) 乙硫醇 (1956) 以上的直链硫醇 (1957~1965) 都能进行  $\alpha$ -裂解失去少一亚甲基的烷基, 得离子  $m/z$  47 ( $CH_2=S^+H$ )。其他离子是  $M-CH_3$ ,  $M-C_2H_5$ ,  $M-C_3H_7$  以及  $M-$

$\text{H}_2\text{S}$  等,  $\text{M}-\text{HS}$  离子也存在, 有些化合物还有  $\text{M}-\text{CH}_3-\text{H}_2\text{S}$  离子, 另外还有  $\text{M}-\text{H}_2\text{S}-\text{C}_2\text{H}_4$ 。



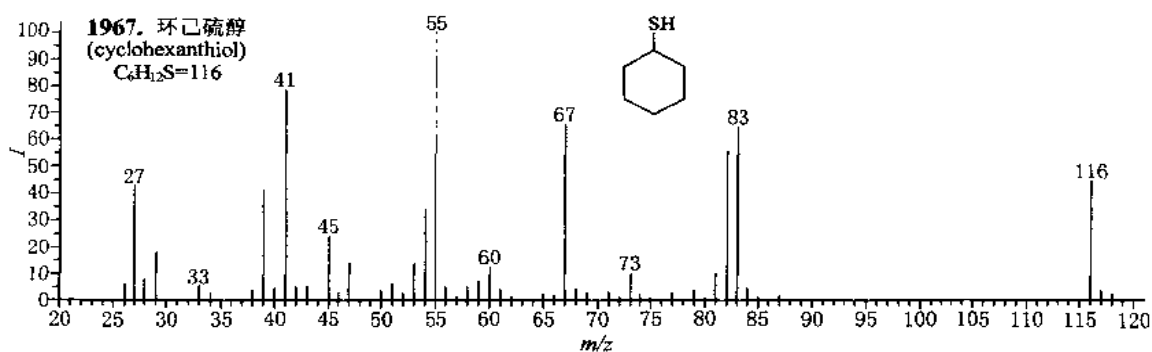
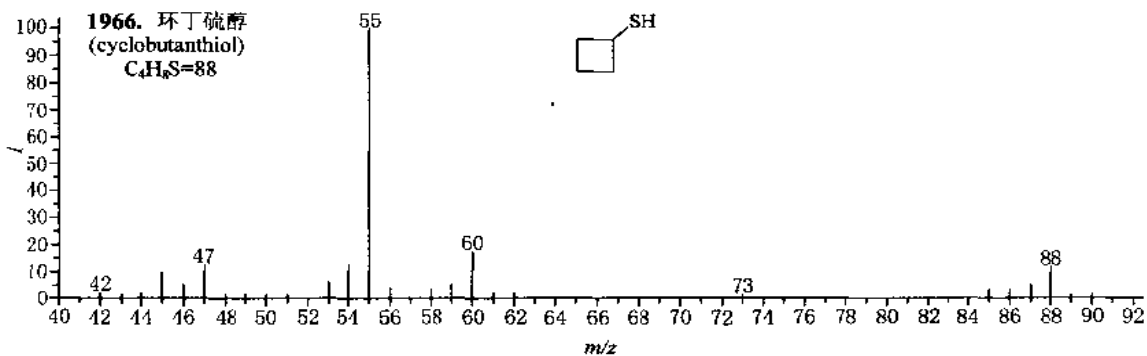




## 二、环脂肪硫醇类

(1) 环丁硫醇 (1966) 的四个主要碎片离子是  $M-C_2H_4$ ,  $M-SH$ ,  $M-H_2S$  和硫代甲酰基离子。

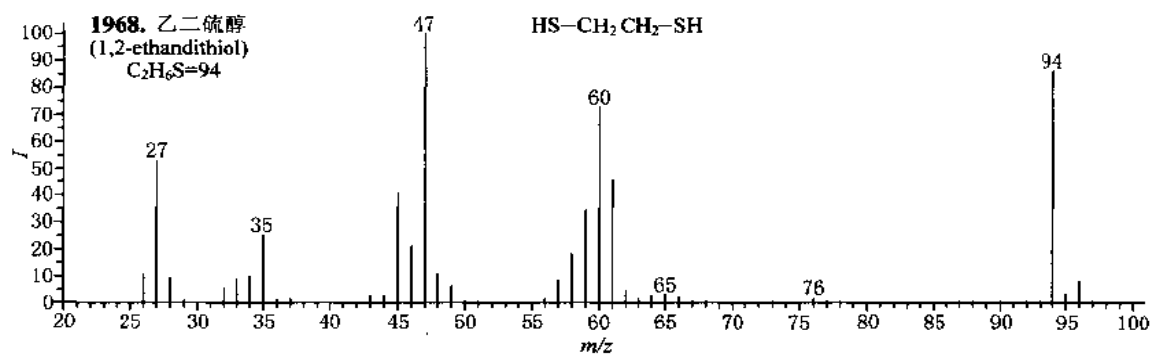
(2) 环己硫醇 (1967) 的四个主要碎片离子是  $M-SH$ ,  $M-H_2S$ ,  $M-H_2S-CH_3$  和  $M-SH-C_2H_5$ 。

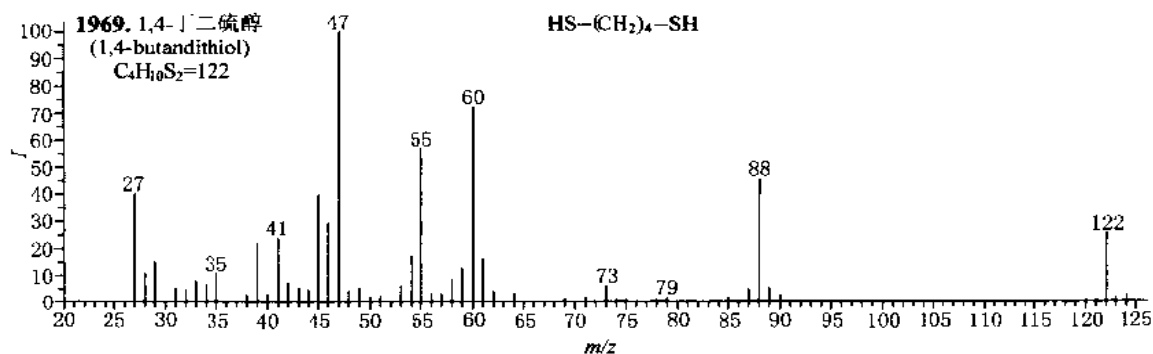


### 三、二 硫 醇 类

(1) 乙二硫醇 (1968) 的 4 个主要碎片离子是  $m/z$  61、60、59 和 47，前三者可能分别具有  $\overset{+}{S}H$ 、 $\overset{-}{S}$  和  $\overset{+}{S}$  的结构。

(2) 1,4-丁二硫醇 (1969) 比乙二硫醇 (1968) 多了两个离子，即  $M-H_2S$  和  $M-H_2S-SH$ 。

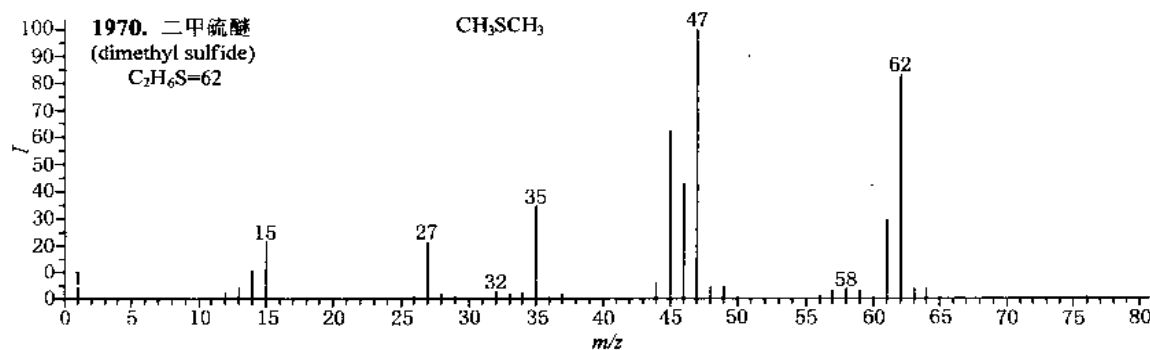




### 第三节 硫 醚 类

#### 一、脂肪硫醚类

(1) 二甲硫醚 (1970) 的  $\alpha$ -裂解只能失去氢原子, 其他 3 个重要碎片离子是上面已经遇到的  $m/z$  47 ( $CH_2=\overset{+}{S}H$ ), 46 ( $CH_2=\overset{+}{S}$ ) 和 45 ( $CH=\overset{+}{S}$ )。



(2) 甲乙硫醚 (1971) 的  $\alpha$ -裂解是失去甲基, 离子  $m/z$  47、46 和 45 仍然存在, 但又增加了离子  $m/z$  48, 它具有甲硫醇 (1955) 的结构。

(3) 二乙硫醚 (1972) 增加了  $m/z$  59、60、61 和 62 四个离子, 结构分别为  $CH_3C\equiv\overset{+}{S}$ ,  $CH_3CH=\overset{+}{S}$ ,  $CH_3CH=\overset{+}{S}H$  和  $CH_3CH_2\overset{+}{S}H$ 。

(4) 甲硫基丁烷 (1973) 的  $\alpha$ -裂解是失去  $C_3H_7$ , 离子  $m/z$  56 为失去甲硫醇生成的 1-丁烯离子。

(5) 二丙硫醚 (1974) 的  $\alpha$ -裂解是失去乙基, 然后是失去乙烯得离子  $m/z$  61 ( $CH_2\overset{+}{S}CH_3$ ), 离子  $m/z$  47 亦存在, 增加的一个新离子是丙硫醇离子  $m/z$  76。

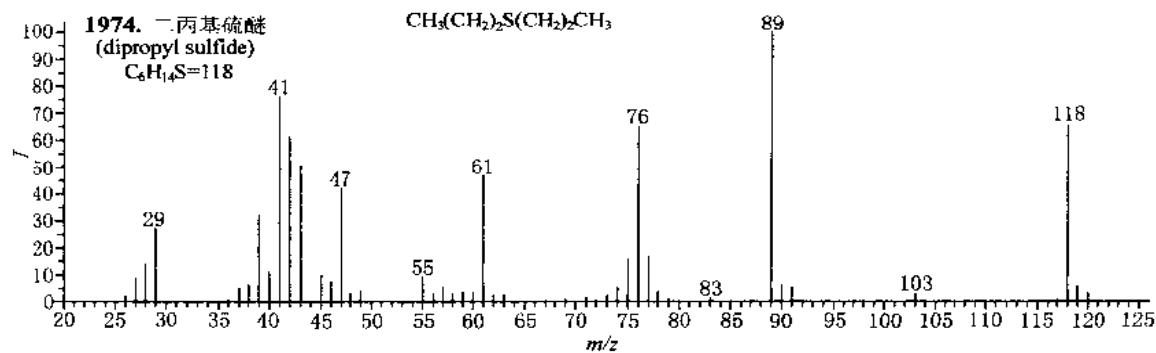
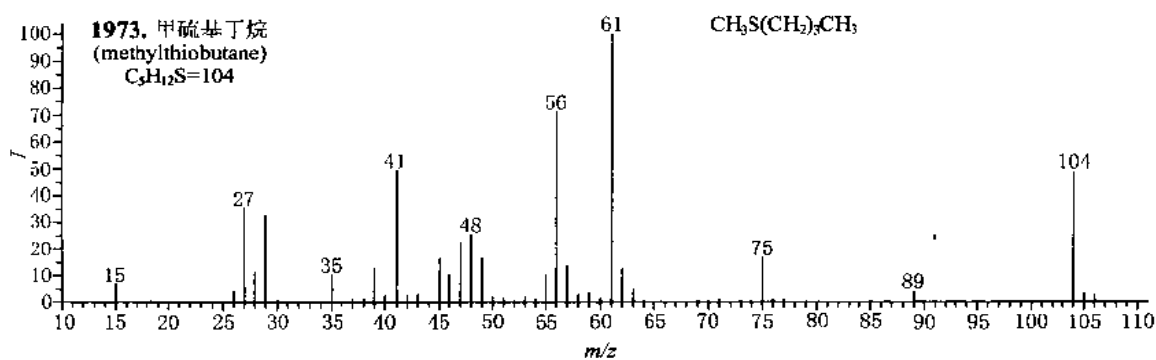
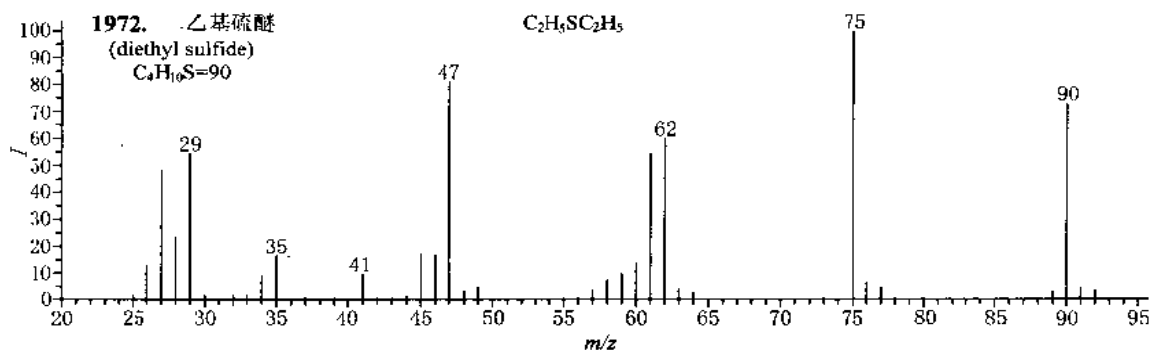
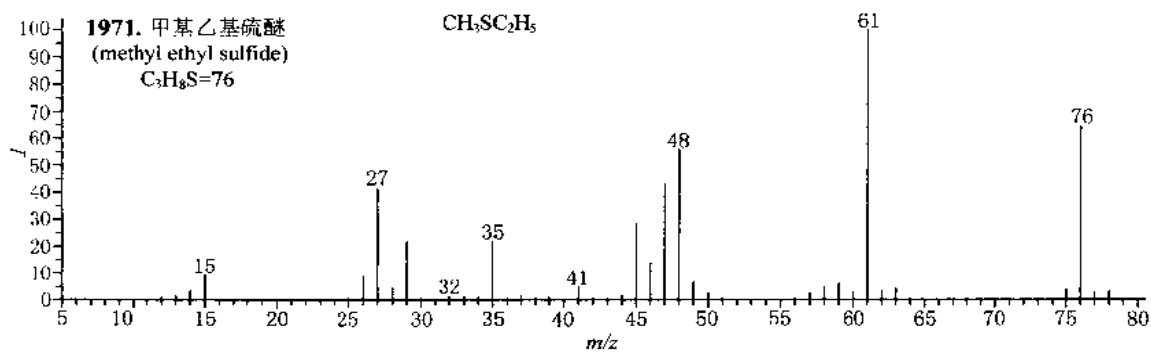
(6) 二丁硫醚 (1975) 的  $\alpha$ -裂解是失去丙基, 然后失去  $C_3H_6$  得离子  $m/z$  61。1-丁烯离子  $m/z$  56 也存在, 可认为是形成丁硫醇的同时生成的互补离子, 也可认为是先生成丁硫醇、然后失去硫化氢的产物。

(7) 二异丁硫醚 (1976) 的  $\alpha$ -裂解是失去异丙基, 也生成异丁硫醇离子, 再失硫化氢也得离子  $m/z$  56。基峰  $m/z$  57 应是异丁基离子。

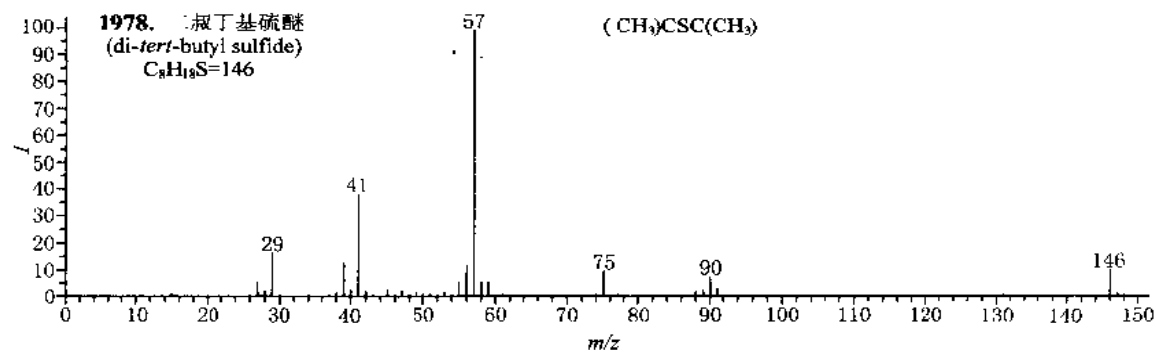
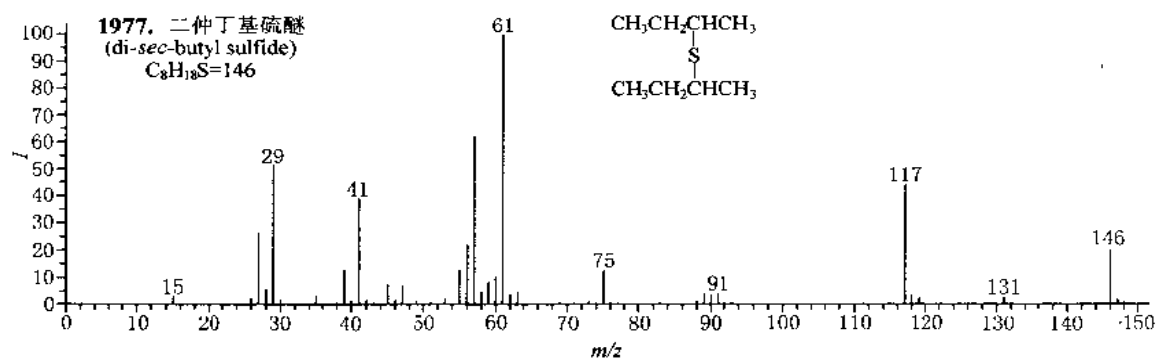
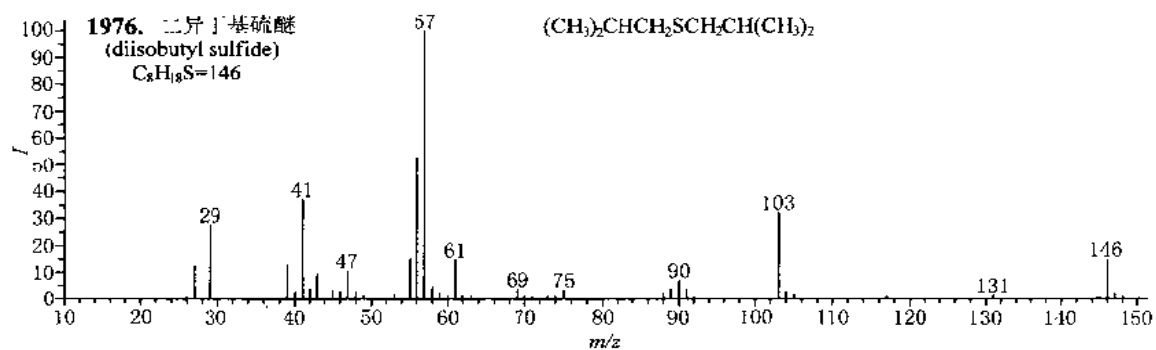
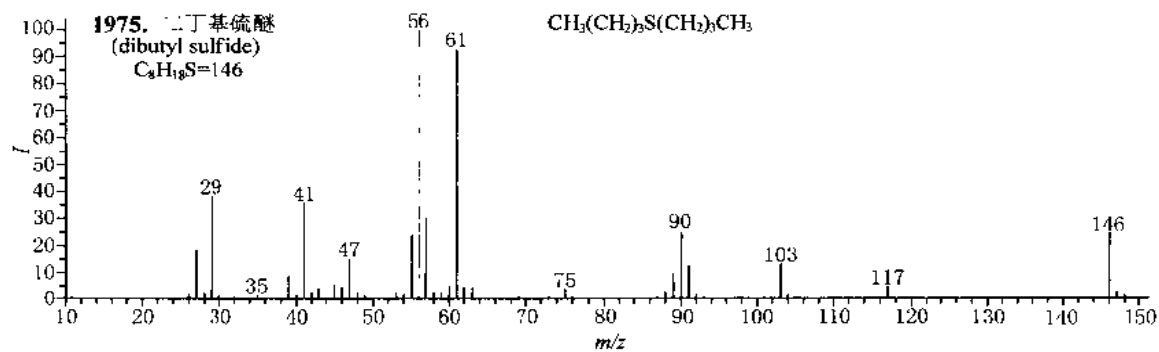
(8) 二仲丁硫醚 (1977) 的  $\alpha$ -裂解是失去乙基, 基峰  $m/z$  61 具有  $CH_3CH=\overset{+}{S}H$  结构, 强峰  $m/z$  57 是仲丁基离子。

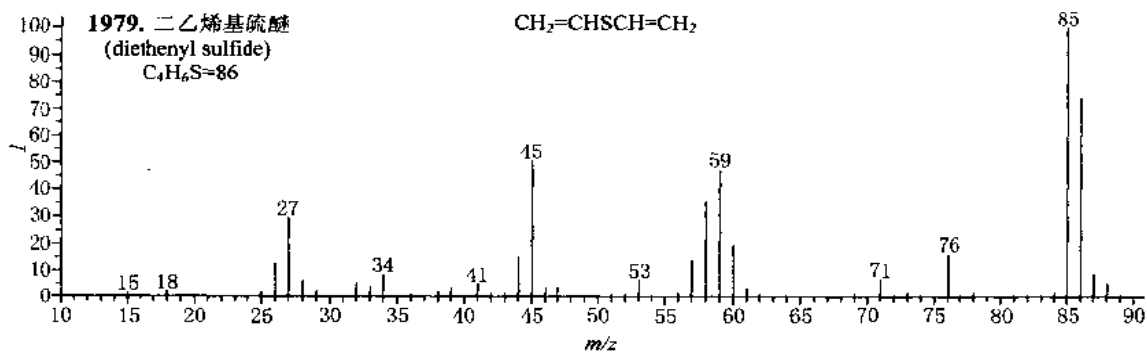
(9) 二叔丁硫醚 (1978) 的基峰是叔丁基离子  $m/z$  57, 离子  $m/z$  90 可看成是叔丁硫醇离子。

(10) 二乙烯基硫醚 (1979) 有  $M-C_2H_2$ ,  $M-C_2H_3$  和  $M-C_2H_4$  离子,  $m/z$  45 仍然是硫代甲酰基离子。







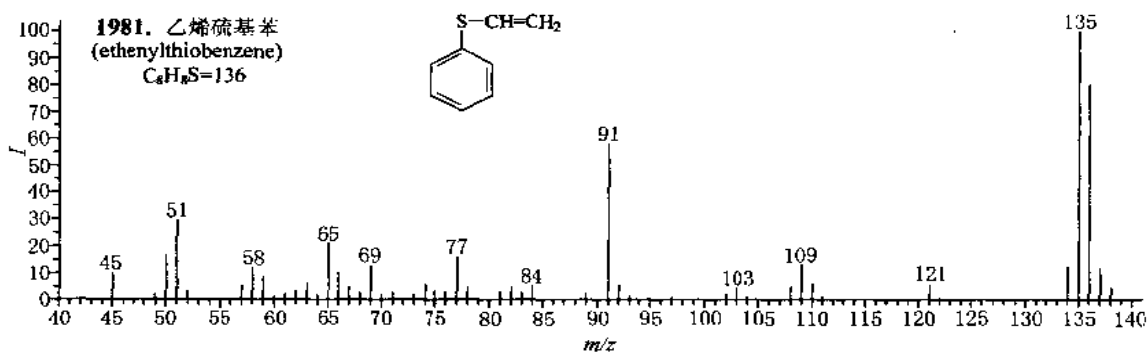
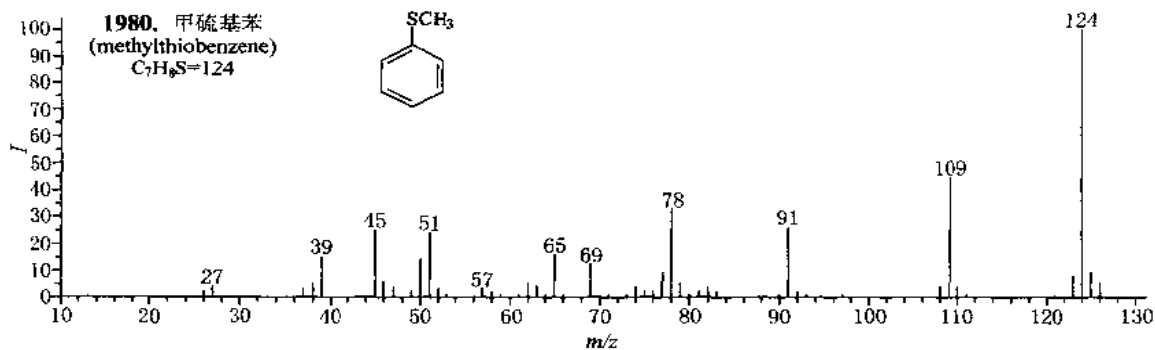


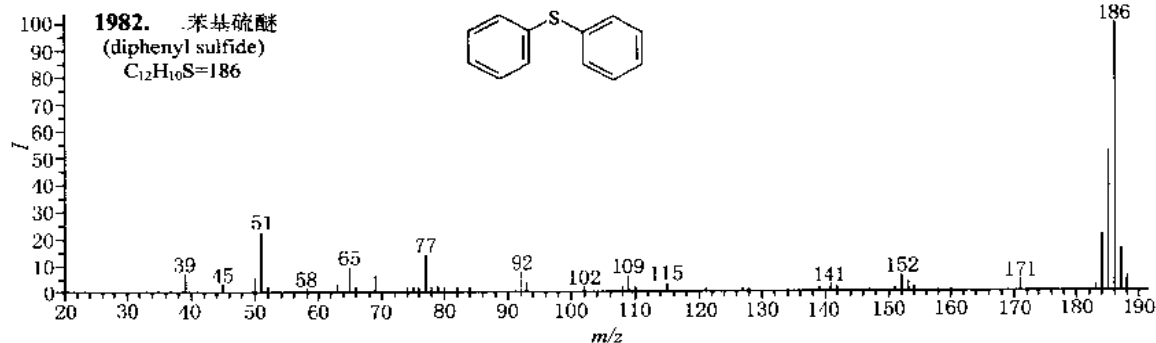
## 二、芳香硫醚类

(1) 甲硫基苯 (1980) 有  $M-CH_3$ 、 $M-SH$ 、 $M-CH_2S$ 、 $M-CH_3-CS$  和  $m/z$  45 等离子, 许多离子的产生要经过重排。

(2) 乙烯硫基苯 (1981) 的  $M-H$  离子很强, 其他离子是  $M-C_2H_3$  和重排生成的离子  $m/z$  91, 后者为萘翰离子。

(3) 二苯基硫醚 (1982) 的主要碎片离子是  $M-C_6H_5$ 、 $M-SC_6H_5$  和  $M-SC_6H_5-C_2H_2$ 。



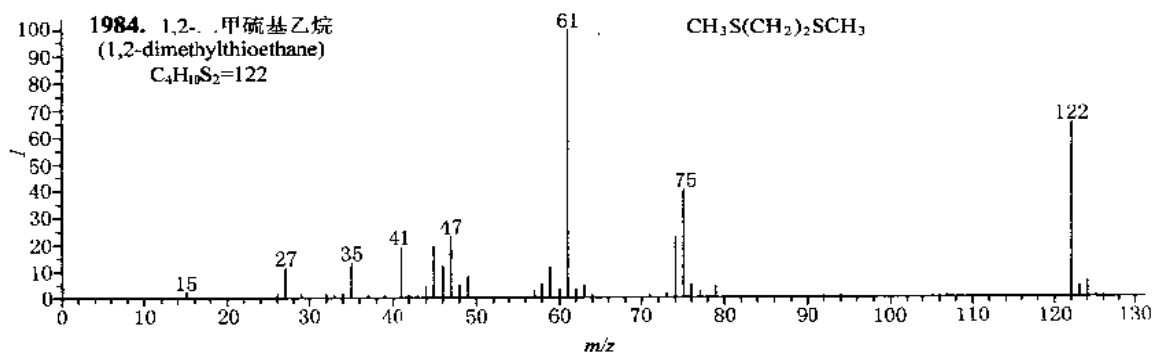
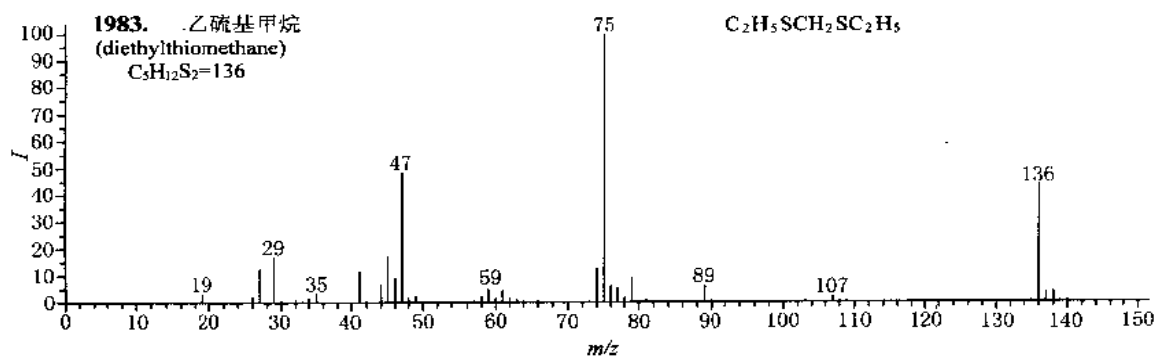


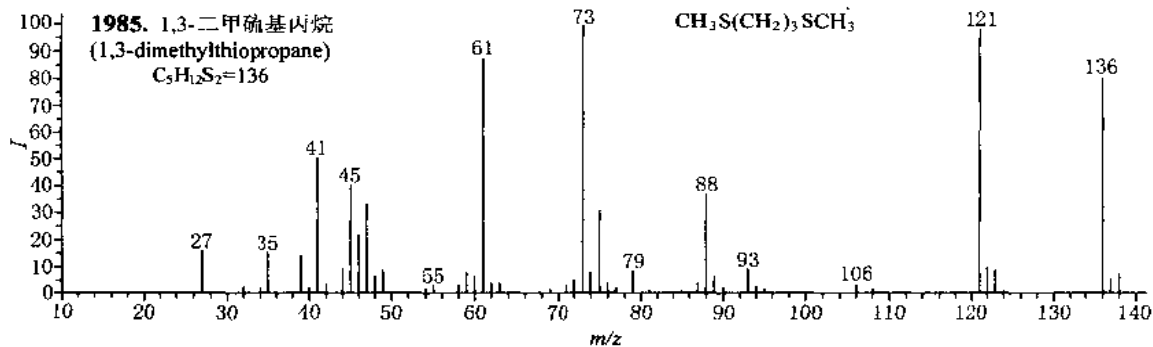
### 三、二硫醚类

(1) 二乙硫基甲烷 (1983) 的主要碎片离子是  $M - SC_2H_5$  ( $m/z$  75) 和  $m/z$  47 ( $CH_2=S^+H$ ), 前者可看成是一个  $CH_2-SR$  基团的  $\alpha$ -裂解, 具有  $CH_3CH_2S^+=CH_2$  的结构。

(2) 1,2-二甲硫基乙烷(1984)的主要裂解是  $\alpha$ -裂解, 使分子离子一分为二, 得离子  $m/z$  61 ( $CH_3S^+=CH_2$ ), 中强离子  $m/z$  75 和  $m/z$  74 为失去  $CH_3S$  和  $CH_3SH$  的产物。

(3) 1,3-二甲硫基丙烷(1985)的主要碎片离子有  $M-CH_3$ ,  $M-CH_3SH$ ,  $M-CH_3S-CH_3$  和  $m/z$  61, 离子  $m/z$  47 和  $m/z$  45 较弱。

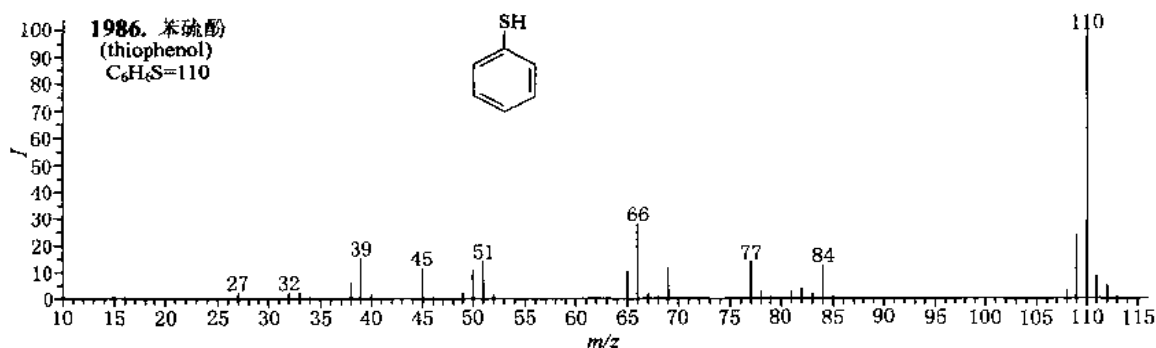




## 第四节 硫 酚 类

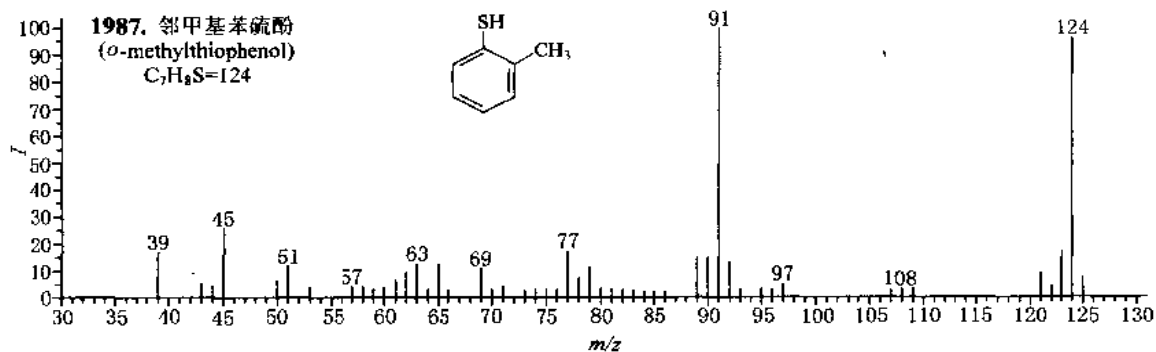
### 一、苯 硫 酚 类

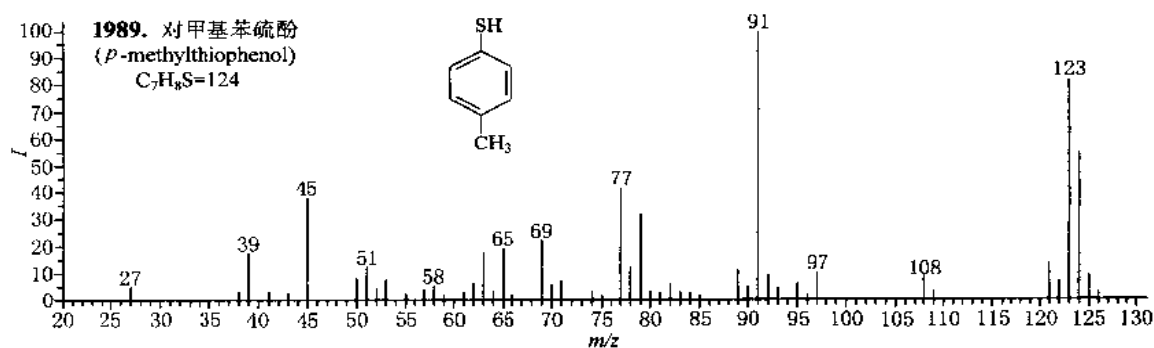
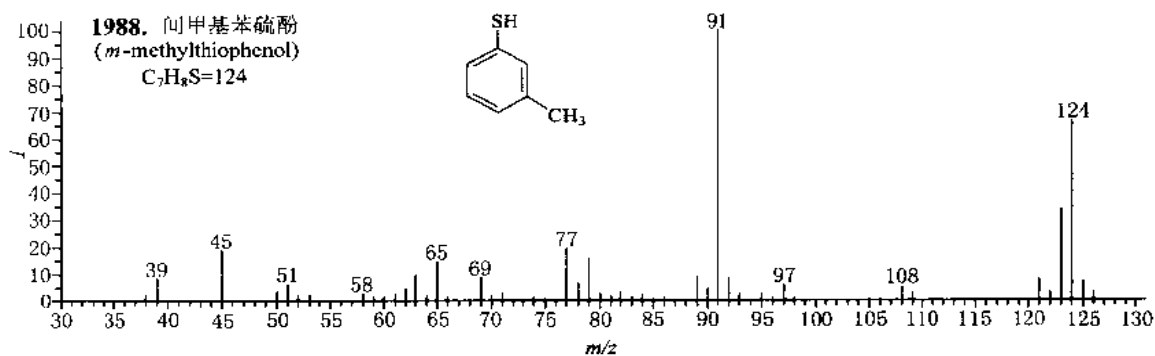
苯硫酚 (1986) 的主要裂解途径是  $M-CS-H-C_2H_2$ , 这如同苯酚 (419) 的裂解, 其他裂解是  $M-SH-C_2H_2$  和  $M-C_2H_2-SH$ 。



### 二、甲 苯 硫 酚 类

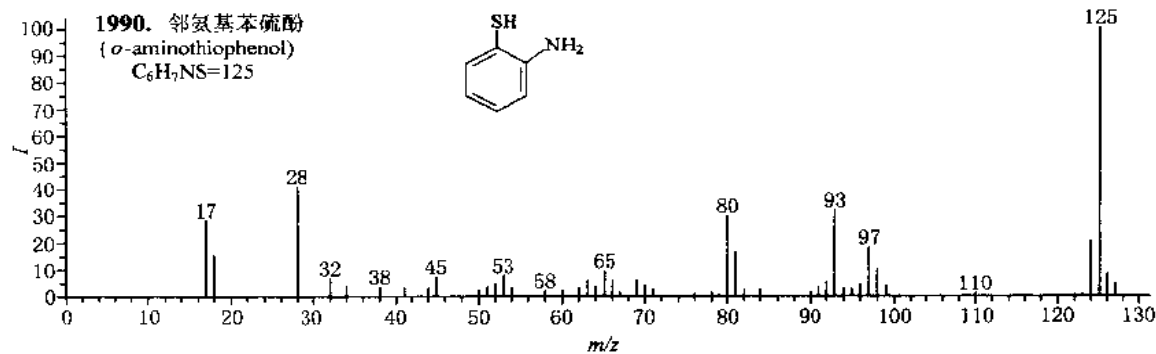
甲苯硫酚类化合物 (1987~1989) 的裂解途径都是  $M-H-CS-C_2H_2$ ,  $M-H$  离子的强度按邻、间、对顺序渐次增强, 因此,  $M-H$  离子可作为彼此区别的特征离子。





### 三、氨基苯硫酚类

邻氨基苯硫酚 (1990) 有三条裂解途径, 即  $M-CN H-H-CS$ ,  $M-CS-H-CN H$  和  $M-S$ 。



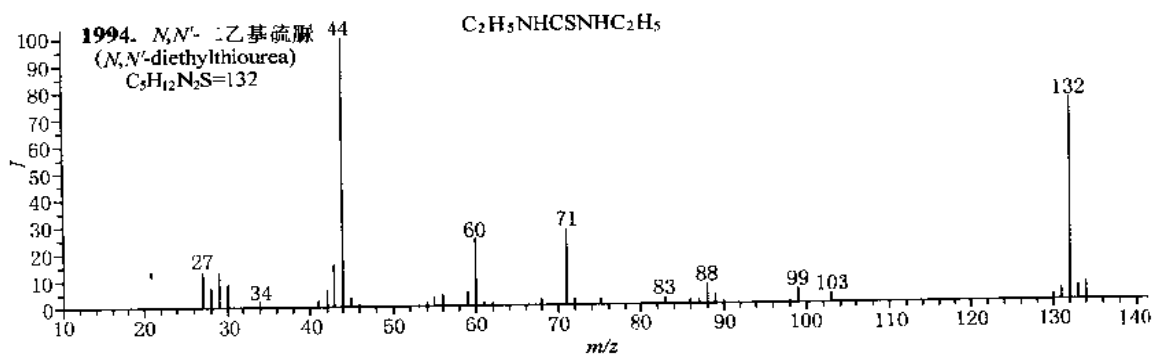
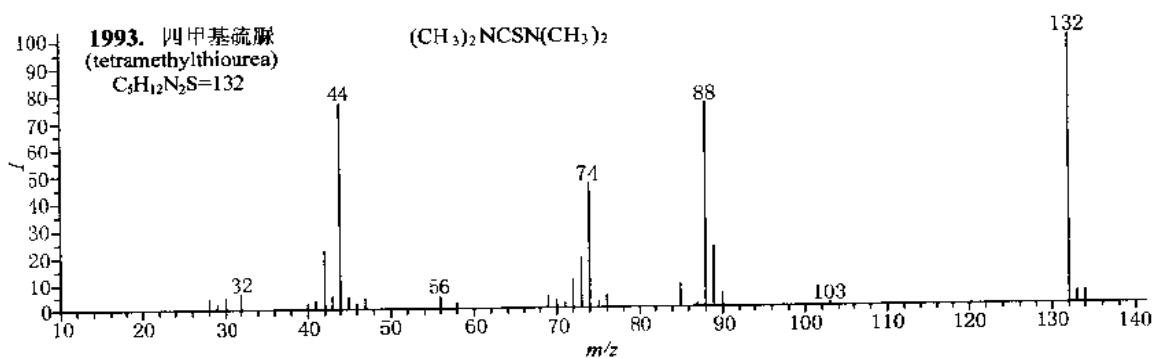
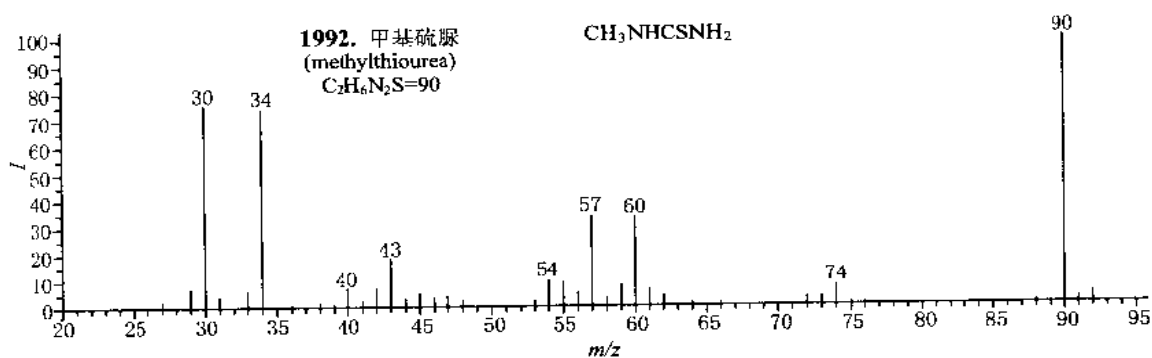
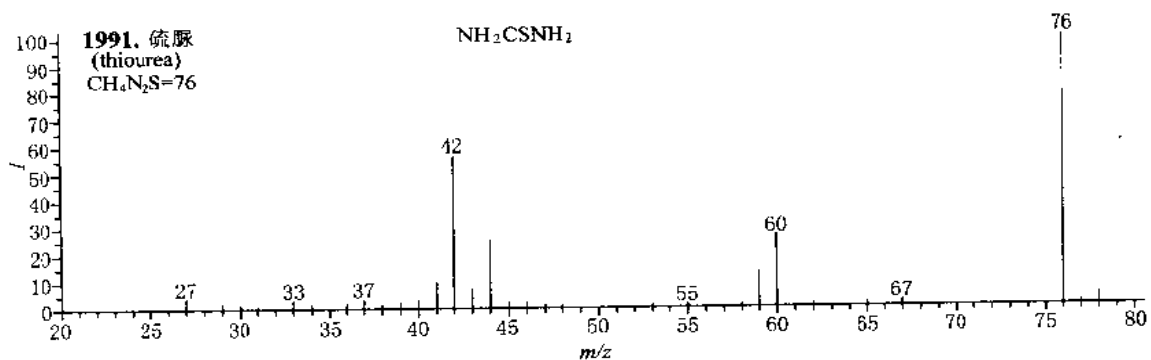
## 第五节 硫代化合物类

### 一、硫脲类

(1) 硫脲 (1991) 本身的裂解是  $\alpha$ -裂解失去氨基, 也能失去硫化氢生成离子  $m/z$  42 ( $HN=C=NH^{1+}$ )。

(2) 甲基硫脲 (1992) 有两种  $\alpha$ -裂解, 即  $M-NH_2$  和  $M-CH_3NH$ , 另有  $M-SH$ ,  $M-$

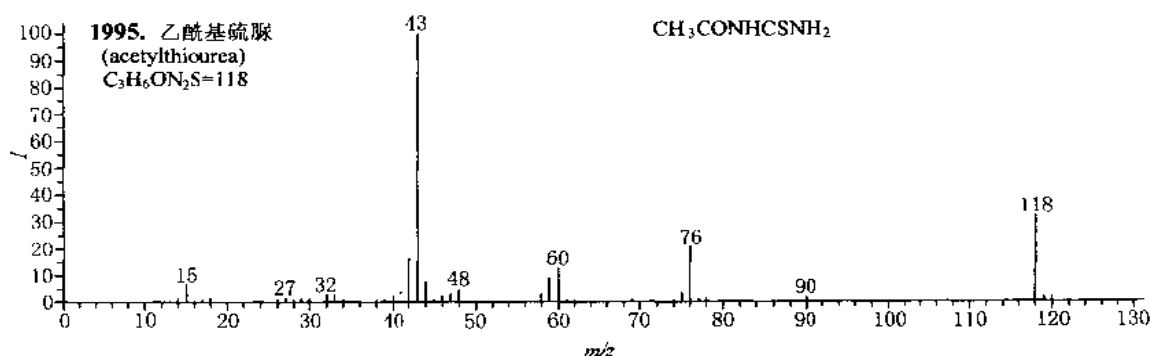
$\text{H}_2\text{S}$  和  $\text{CH}_2=\overset{+}{\text{N}}\text{H}_2$  等离子。



(3) 四甲基硫脲(1993)的 $\alpha$ -裂解是失去 $(\text{CH}_3)_2\text{N}$ ，另有离子 $m/z$  74 ( $\text{CH}_3\ddot{\text{N}}\text{H}=\text{C}=\text{S}$ )和44 ( $\text{CH}_3\ddot{\text{N}}\text{H}=\text{CH}_2$ )。

(4)  $N,N'$ -二乙基硫脲(1994)有 $\text{M}-\text{C}_2\text{H}_5$ ， $\text{M}-\text{SH}$ ， $\text{M}-\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}$ ， $\text{M}-\text{SH}-\text{C}_2\text{H}_5$ ， $m/z$  60 ( $\text{H}_2\ddot{\text{N}}=\text{C}=\text{S}$ )和 $m/z$  44 ( $\text{CH}_3\text{CH}=\text{N}^+\text{H}_2$ )等离子。

(5) 乙酰基硫脲(1995)的两个重要碎片离子是 $\text{M}-\text{CH}_2\text{CO}$ 和 $\text{CH}_3\text{CO}^+$ 离子， $\text{NH}_2\text{C}=\text{S}$ 和 $\text{CH}_3\text{CONH}_2^+$ 离子也存在。

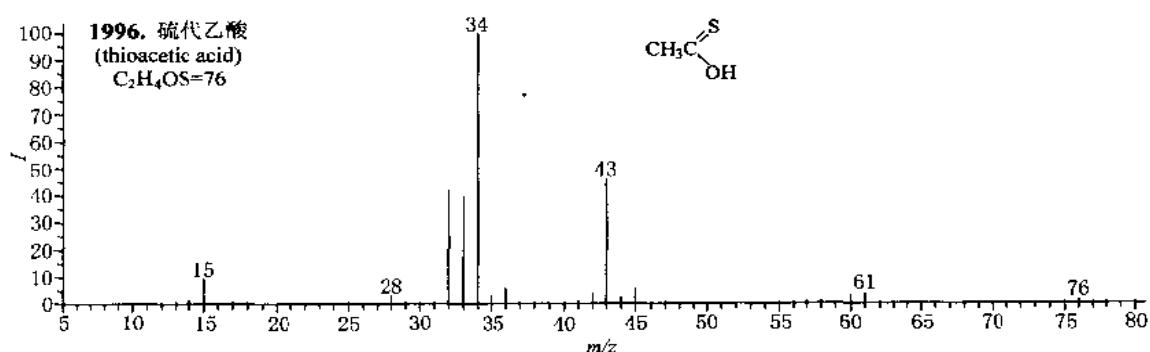


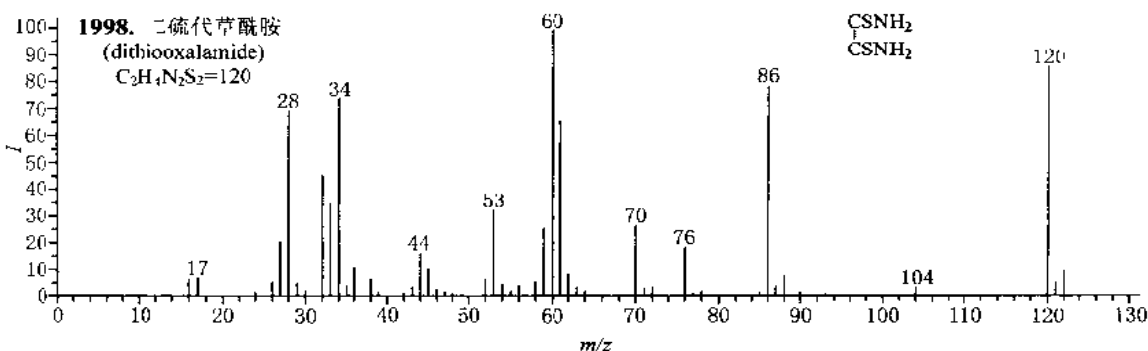
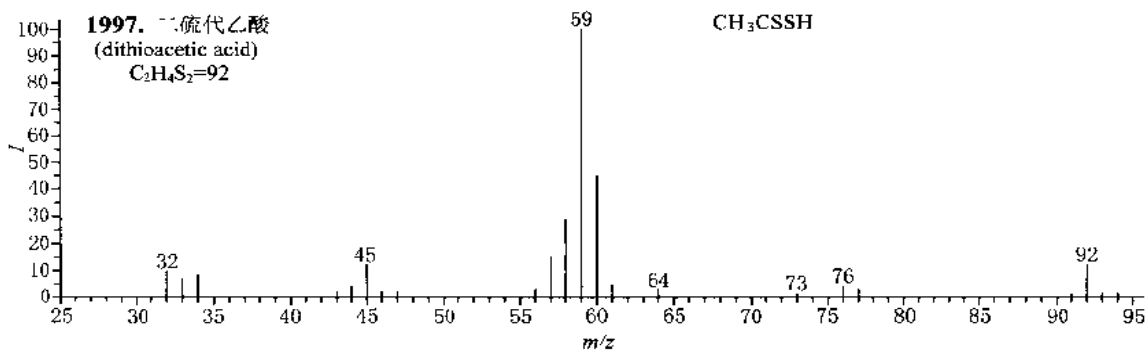
## 二、硫代脂肪酸类

(1) 硫代乙酸(1996)的几个碎片离子是 $\text{M}-\text{CH}_3$ ， $\text{M}-\text{SH}$ ， $\text{H}_2\text{S}^+$ ， $\text{SH}^+$ 和 $\text{S}^+$ 。

(2) 二硫代乙酸(1997)有三个重要碎片离子，即 $m/z$  60 ( $\text{CH}_3\text{CHS}^+$ )，59 ( $\text{CH}_3\text{C}=\text{S}^+$ )和58 ( $\text{CH}_2=\text{C}=\text{S}^+$ )，两个不太重要的离子是 $\text{M}-\text{CH}_3$ 和 $\text{CS}_2^+$ ，离子 $m/z$  45 ( $\text{CH}=\text{S}^+$ )也存在。

(3) 二硫代草酰胺(1998)的主要碎片离子是 $\text{M}-\text{H}_2\text{S}$ ， $m/z$  61 ( $\text{NH}_2\text{C}=\text{S}^+$ )、60 ( $\text{NH}_2\text{C}=\text{S}^-$ )和 $m/z$  34 ( $\text{H}_2\text{S}^+$ )。





### 三、硫代芳香化合物

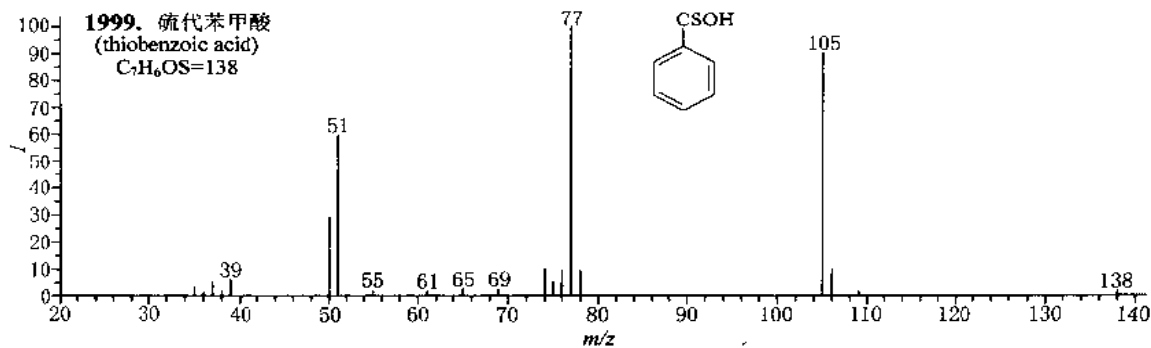
(1) 硫代苯甲酸 (1999) 的裂解途径是  $M-SH-CO-C_2H_2-H$ , 失去 SH 基必须经过重排。

(2) 硫代苯甲酰胺 (2000) 的裂解途径是  $M-SH-CNHC_2H_2-H$ , 裂解过程中也要重排。

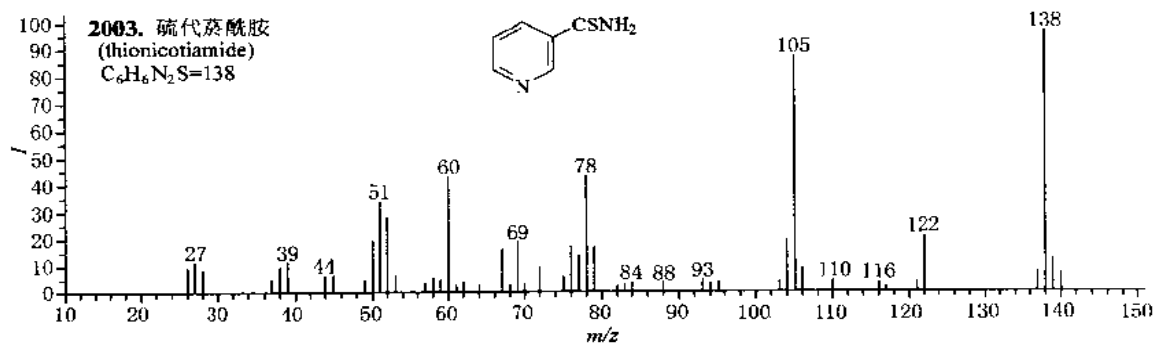
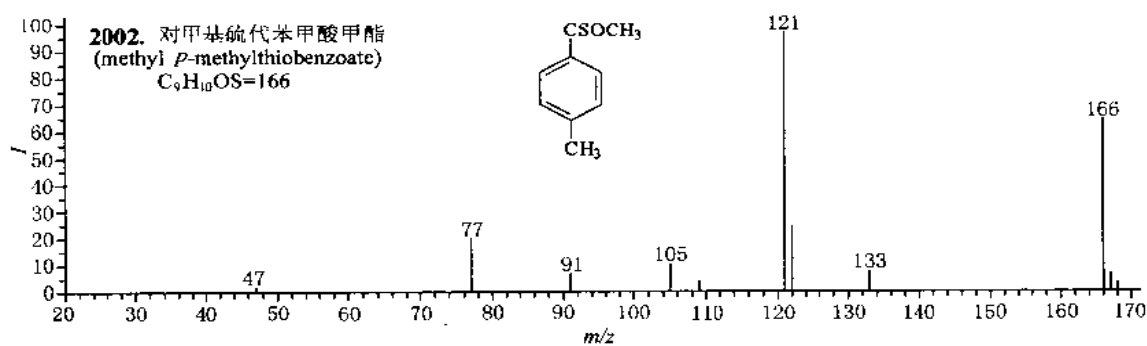
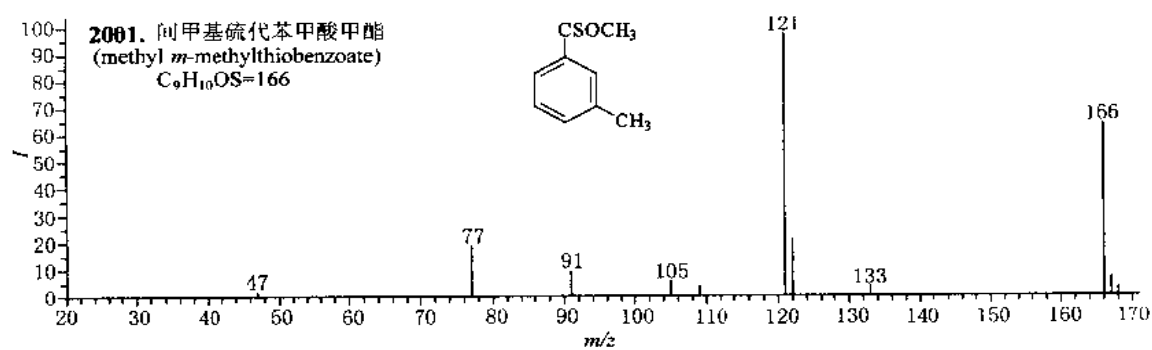
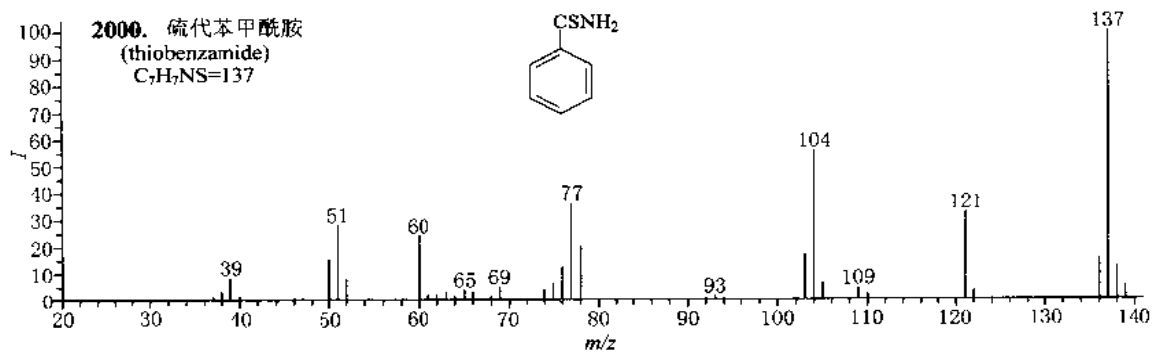
(3) 甲基硫代苯甲酸甲酯类 (2001, 2002) 的主要裂解途径是  $M-HCS-CH_2O$ , 裂解过程也发生了重排。

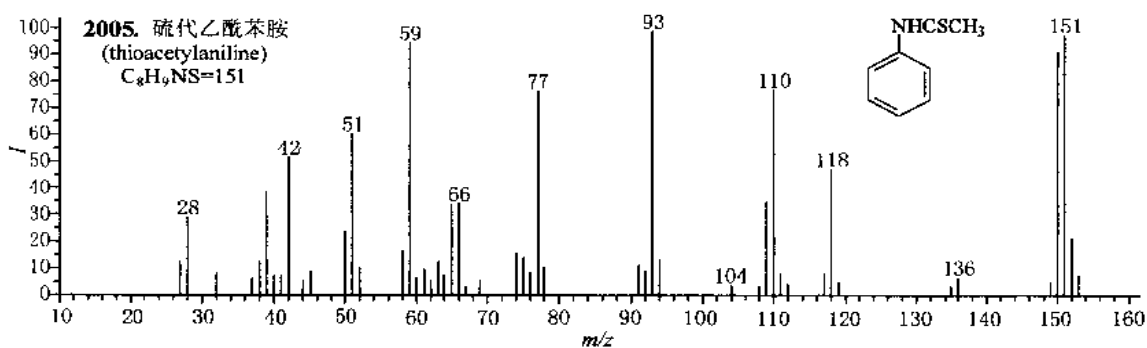
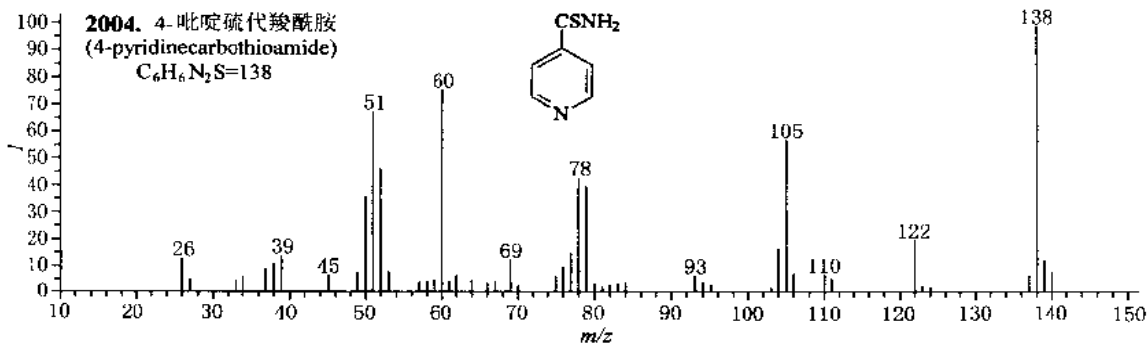
(4) 硫代吡啶甲酰胺类 (2003, 2004) 的主要裂解途径是  $M-SH-CNHCN$ , 离子  $m/z$  60 为氨基硫代甲酰基离子 ( $NH_2-C\equiv S^+$ )。

(5) 硫代乙酰苯胺 (2005) 有  $M-H$ ,  $M-SH$ ,  $M-CH_2S$  以及  $m/z$  110 和  $m/z$  59 等离子, 后两个离子分别为  $C_6H_5SH^{H+}$  和  $CH_3C\equiv O^+$ , 生成  $C_6H_5SH$  要经过重排。



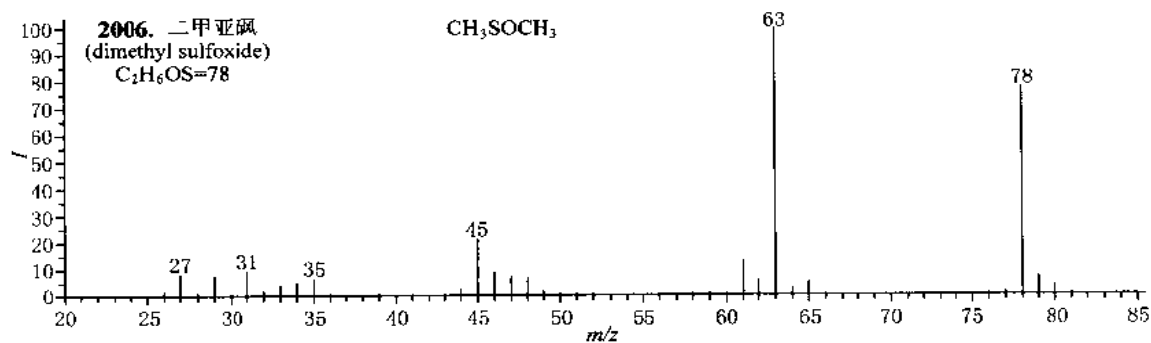






#### 四、二甲亚砜类

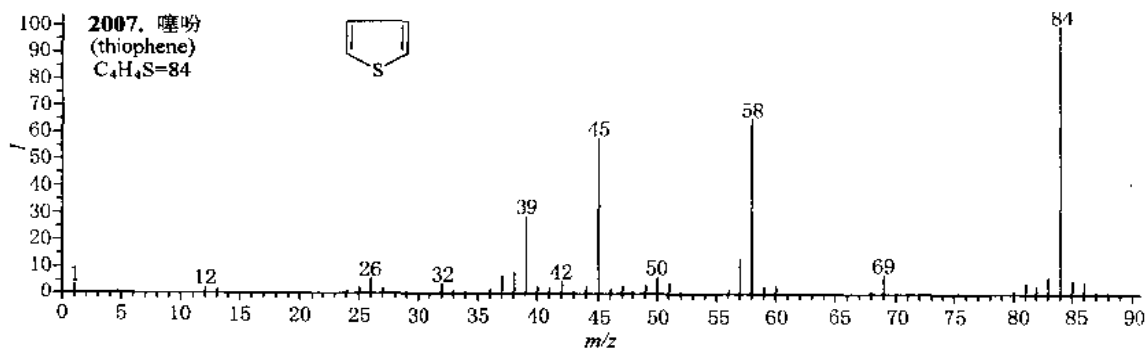
二甲亚砜 (2006) 只有两个重要碎片离子, 即  $\alpha$ -裂解失去甲基和重排生成的  $CH\equiv S^+$  ( $m/z$  45)。



### 第六节 噻吩类

#### 一、噻吩

噻吩 (2007) 只有三个重要的碎片离子, 即  $M - C_2H_2$ ,  $m/z$  45 ( $CH\equiv S^+$ ) 和 39 ( $C_3H_3^+$ )。

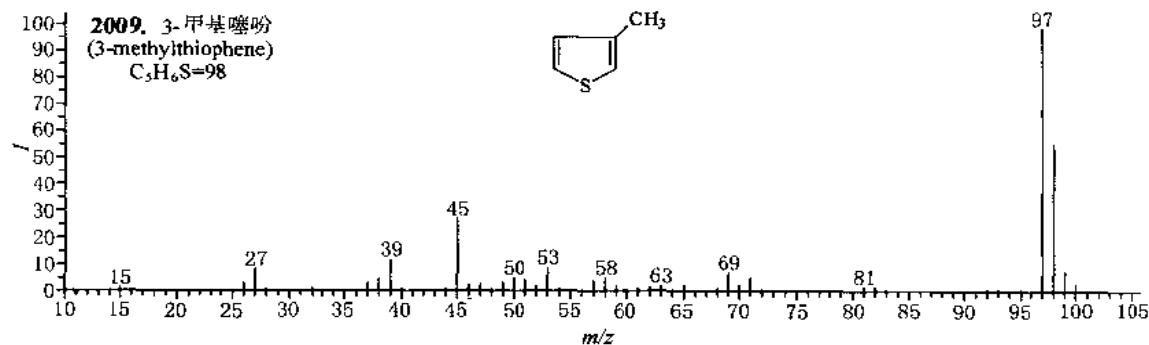
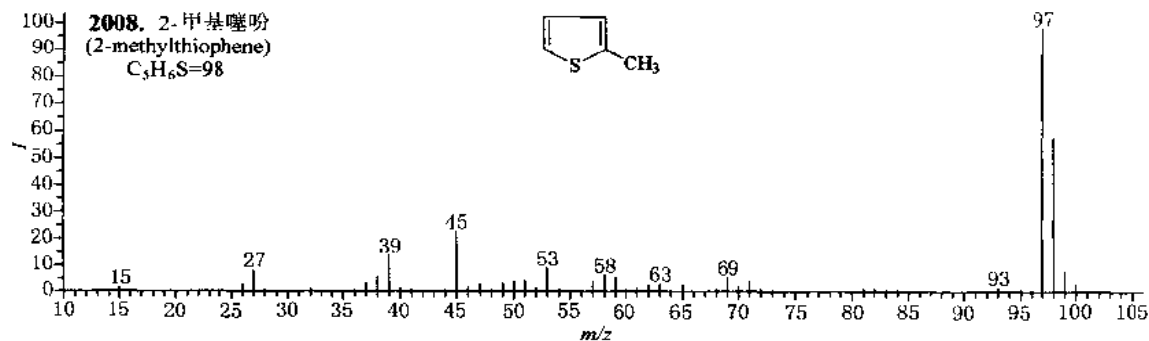


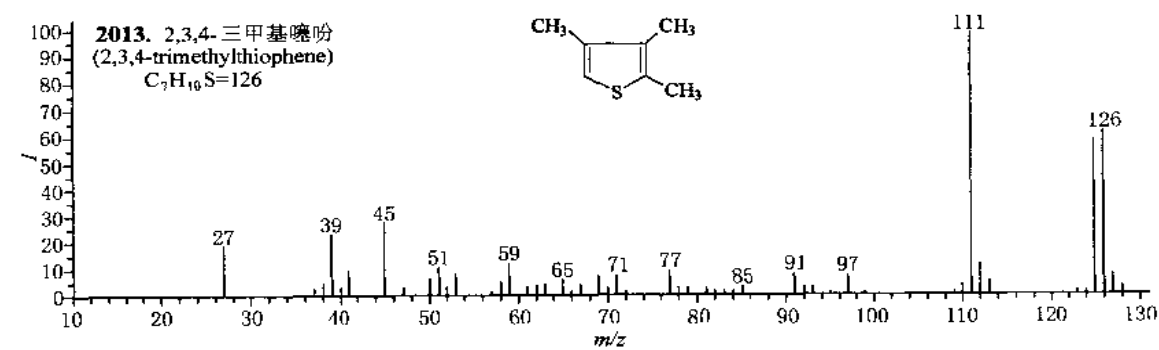
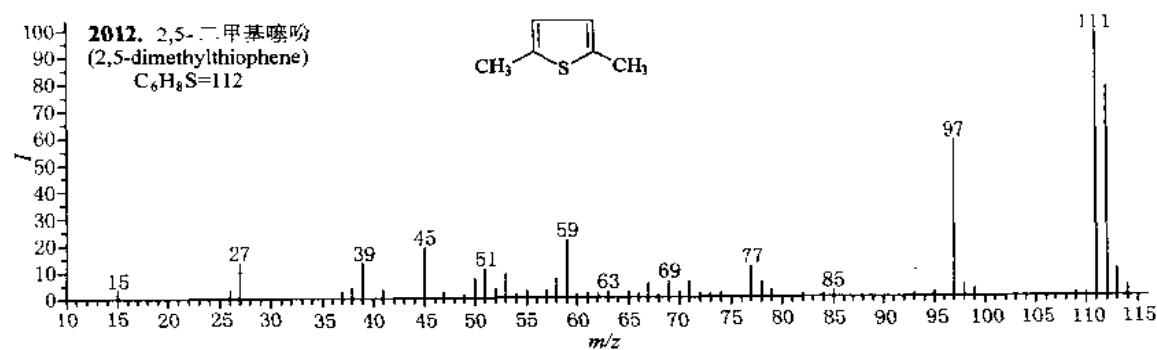
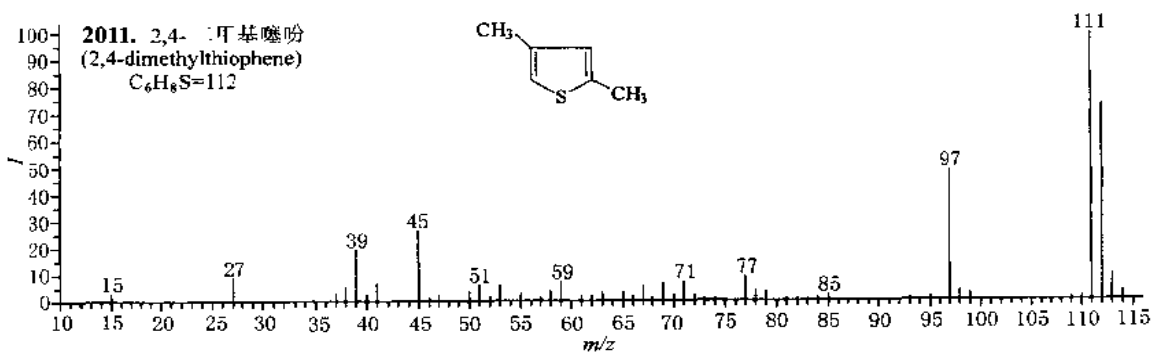
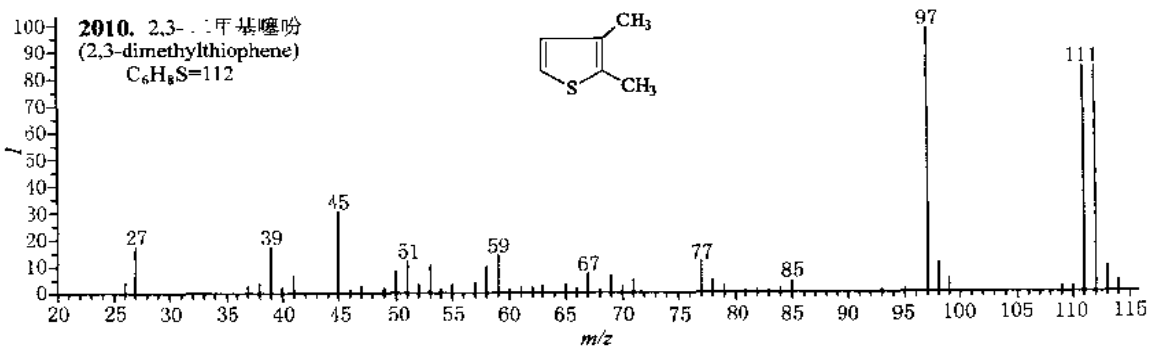
## 二、甲基噻吩类

(1) 单甲基噻吩类 (2008, 2009) 的  $M-H$  离子很强, 其他较弱离子是  $M-CH_2CCH$ ,  $M-CHS$ ,  $m/z$  45 和  $m/z$  39。  $M-CH_3CCH$  相当于噻吩的  $M-C_2H_2$ ,  $m/z$  45 和  $m/z$  39 的结构也与之相同。

(2) 二甲基噻吩类 (2010~2012) 的  $M-H$  离子也很强, 另有明显的  $M-CH_3$  离子,  $m/z$  45 和  $m/z$  39 同样存在, 增加的两个离子是  $m/z$  59 ( $CH_3C\equiv S^+$ ) 和  $m/z$  53 ( $M-CH_3CS$ )。

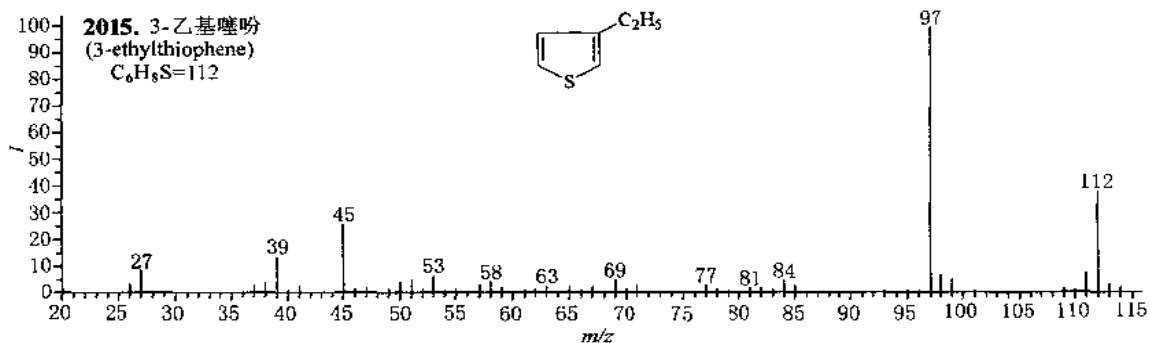
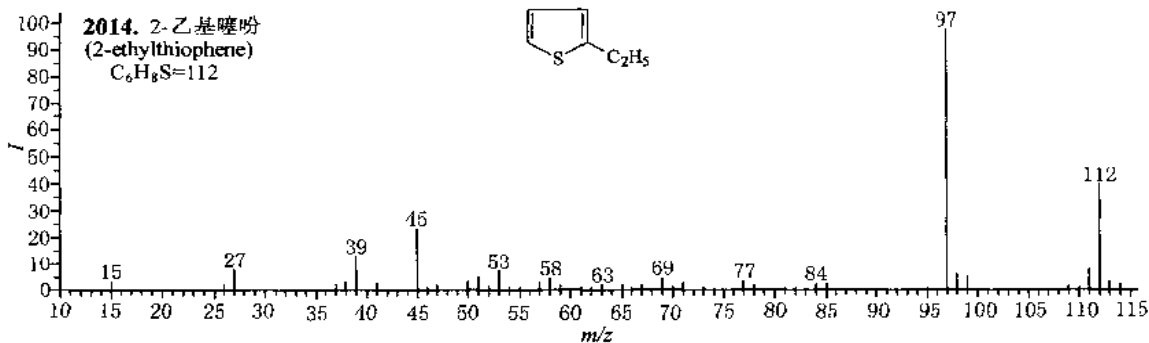
(3) 三甲基噻吩 (2013) 的裂解与二甲基取代者的相似, 但  $M-CH_3$  离子更强些。





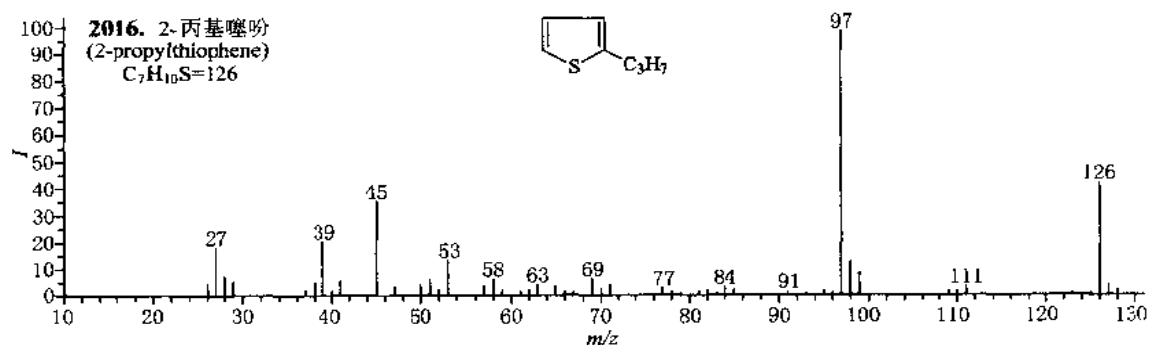
### 三、乙基噻吩类

乙基噻吩类 (2014, 2015) 的  $M-H$  离子很弱,  $M-CH_3$  离子与三甲基取代者的相似是基峰,  $m/z$  45 和  $m/z$  39 普遍存在。



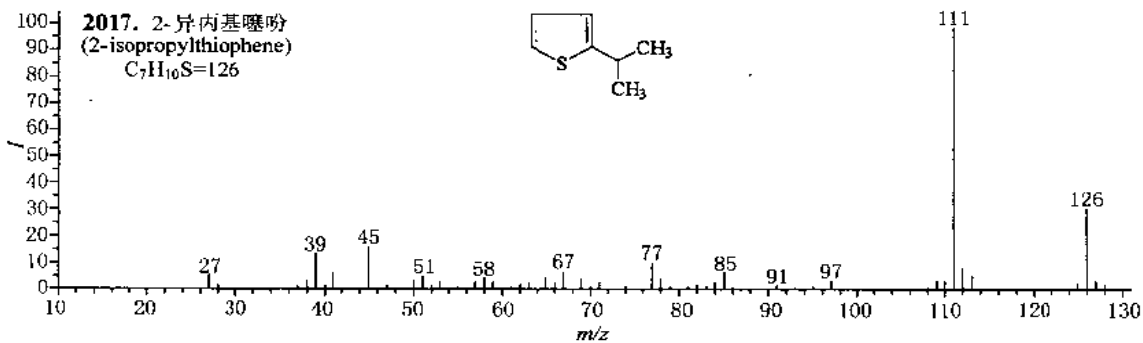
### 四、丙基噻吩类

丙基噻吩 (2016) 的  $M-C_2H_5$  离子是基峰, 另有离子  $m/z$  45 和  $m/z$  39。



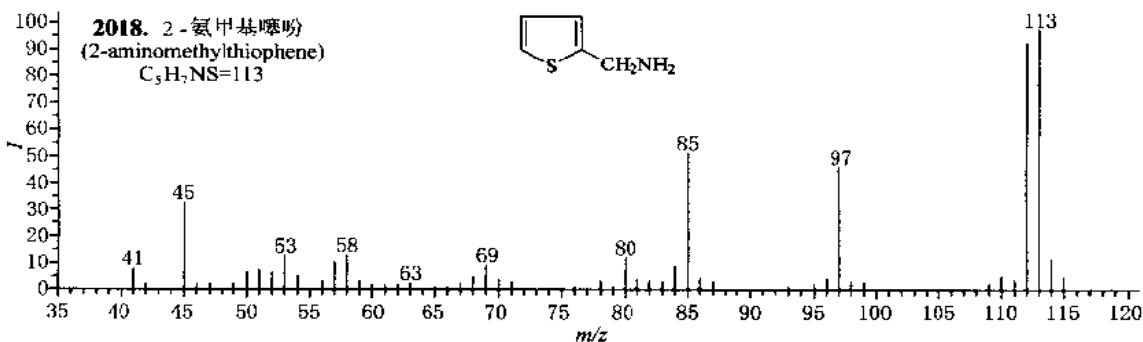
### 五、异丙基噻吩类

异丙基噻吩 (2017) 的  $M-CH_3$  离子是基峰, 仍有离子  $m/z$  45 和  $m/z$  39。



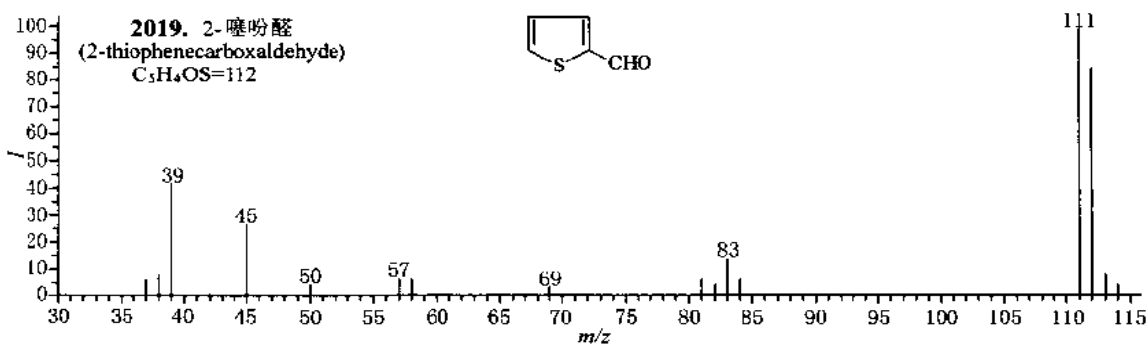
## 六、氨基噻吩类

氨基噻吩 (2018) 有强峰  $M-H$ ,  $M-NH_2$ ,  $M-H-CN$ ,  $m/z$  45 和  $m/z$  39。



## 七、噻吩醛类

噻吩醛 (2019) 有很强的  $M-H$  离子, 其他离子是  $M-CO$ ,  $M-CO-H$ ,  $m/z$  45 和  $m/z$  39。

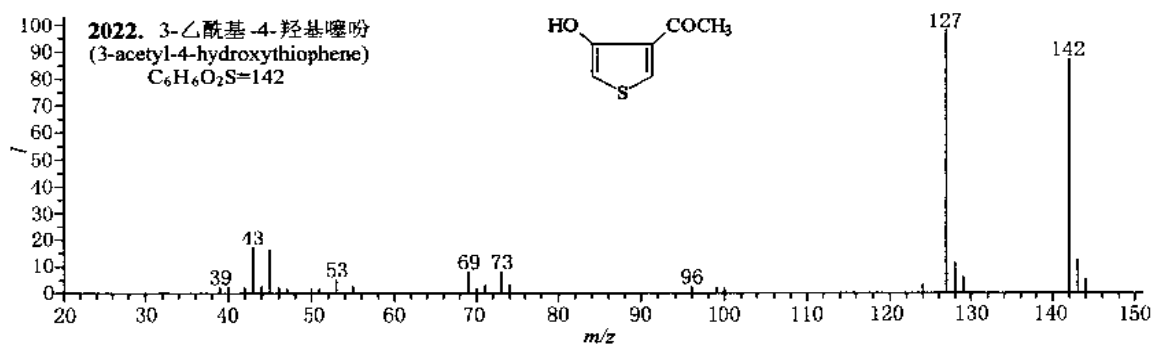
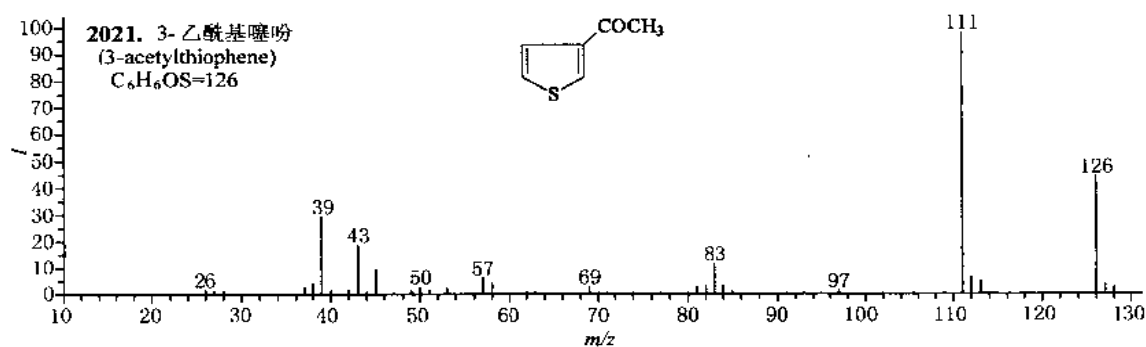
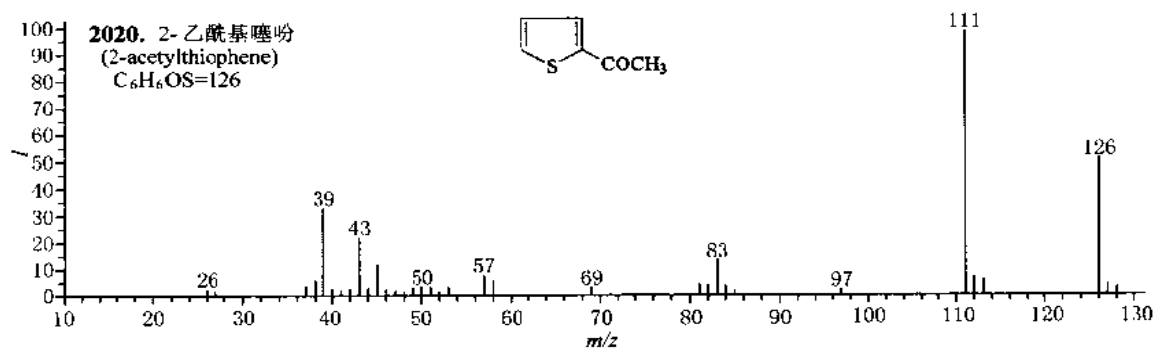


## 八、乙酰基噻吩类

(1) 乙酰基噻吩类 (2020, 2021) 都有很强的  $M-CH_3$  离子, 继续的裂解是失去一氧化碳,  $m/z$  45 和  $m/z$  39 仍存在, 区别于烷基噻吩类的特征是这类化合物有明显的离子  $m/z$  43

$(\text{CH}_3\text{C}^+\text{O})$ 。

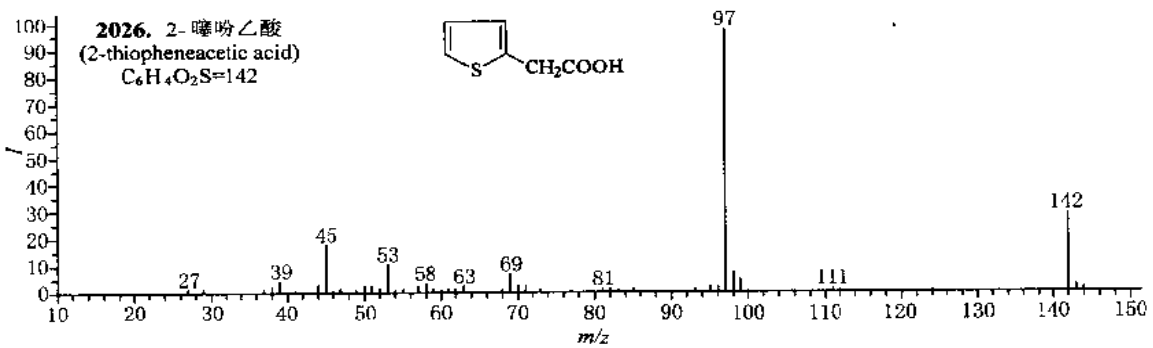
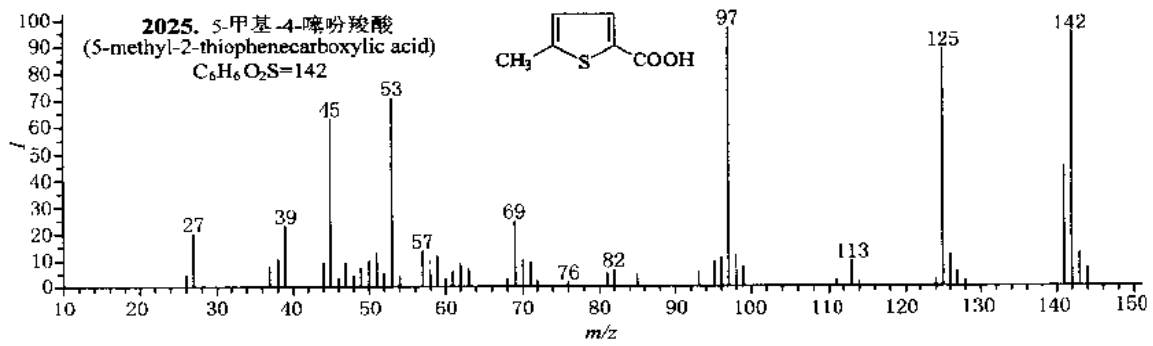
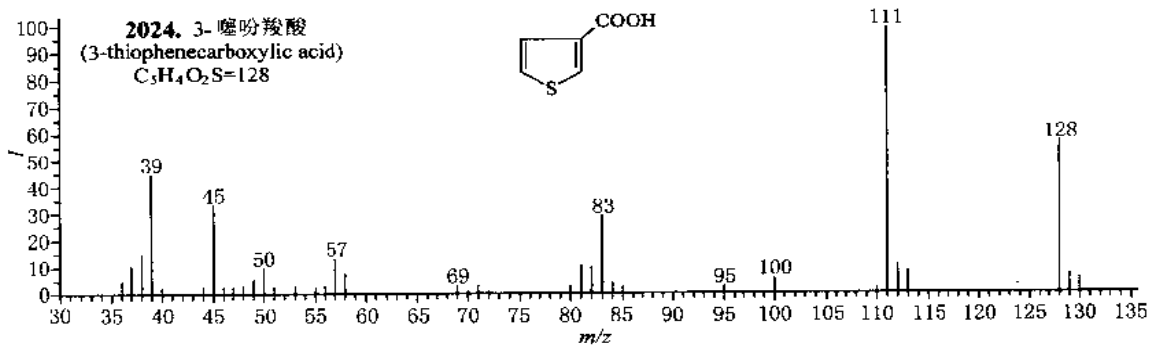
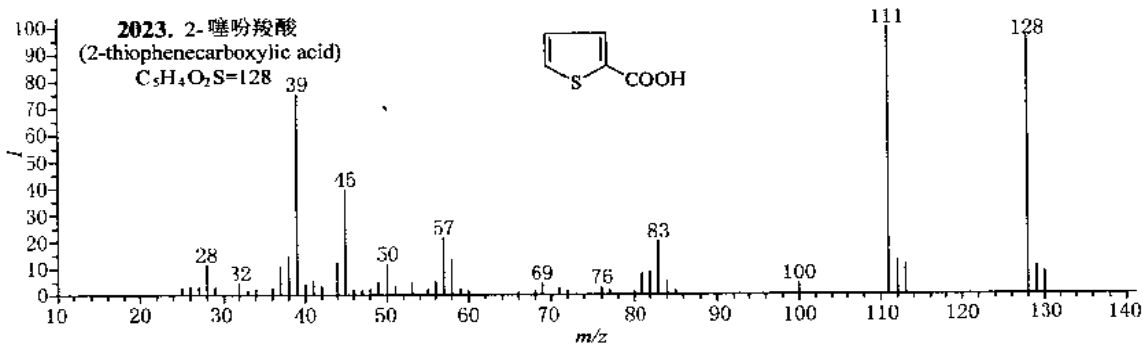
(2) 3-乙酰基-4-羟基噻吩 (2022) 的裂解基本与上述相同, 但有不强的失水离子  $m/z$  124 为其特征峰。



## 九、噻吩羧酸类

(1) 噻吩甲酸类 (2023~2025) 的裂解途径是  $\text{M}-\text{OH}-\text{CO}$ 。

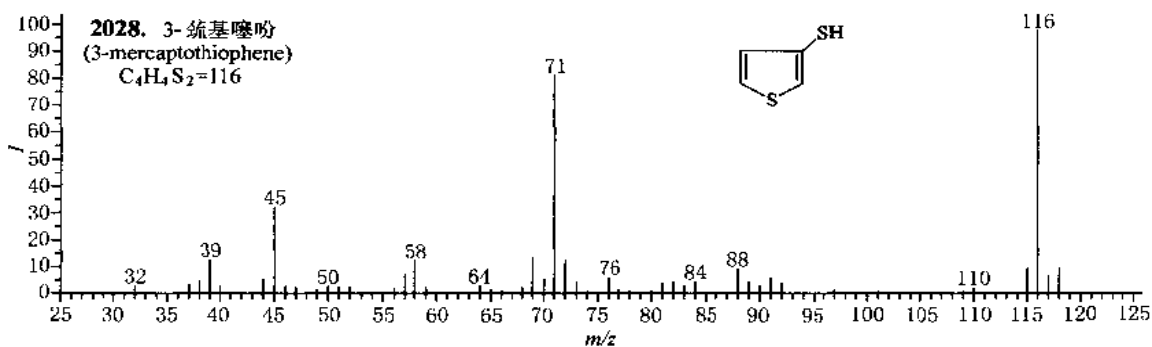
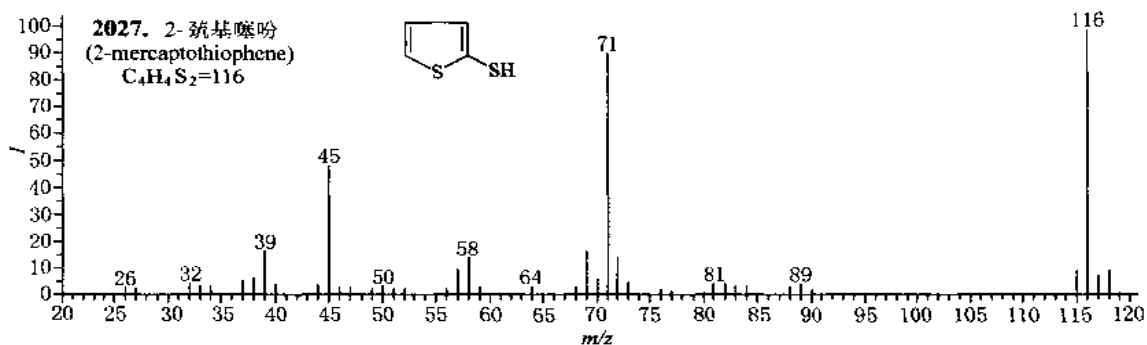
(2) 噻吩乙酸 (2026) 的主要裂解是失去羧基。





## 十、巯基噻吩类

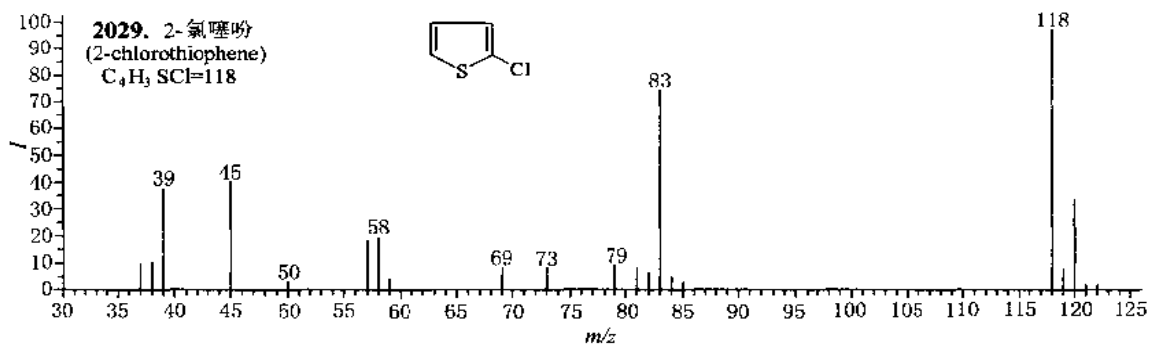
巯基噻吩类 (2027, 2028) 主要有 - 对互补离子  $m/z$  71 ( $M-45$ ) 和  $m/z$  45 ( $M-71$ )。

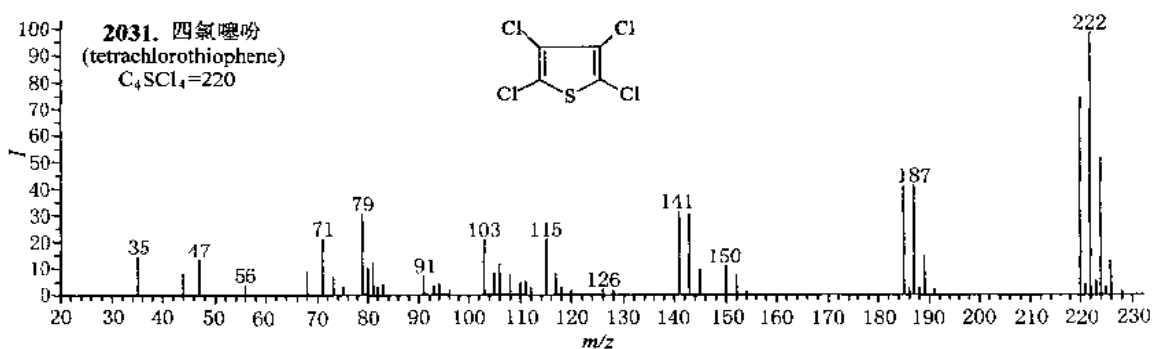
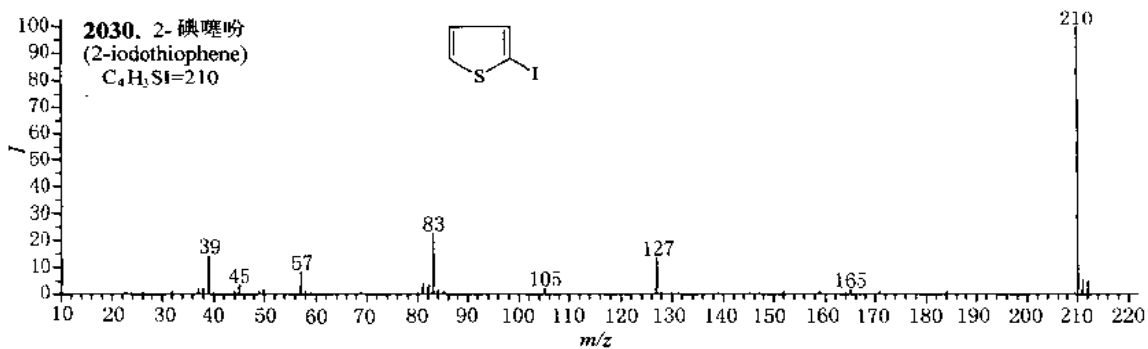


## 十一、卤代噻吩类

(1) 氯和碘代噻吩 (2029, 2030) 主要是失去卤原子。

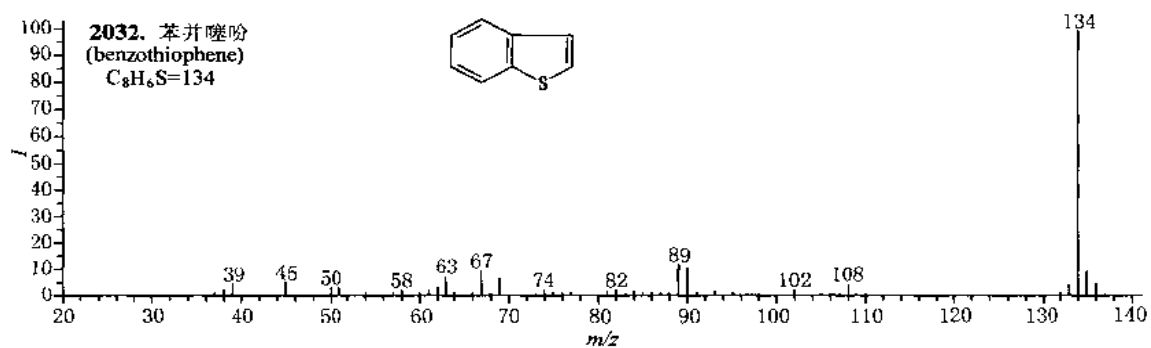
(2) 四氯噻吩 (2031) 能连续失去全部的氯原子, 另有  $M-ClCS$  离子 ( $m/z$  141)。





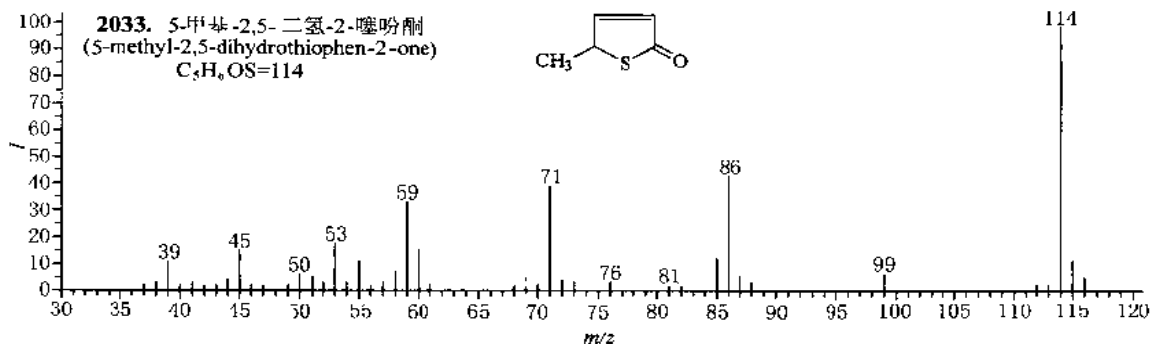
## 十二、苯并噻吩类

苯并噻吩 (2032) 主要有  $M-C_2H_2$  和  $M-CHS$  离子。



## 十三、甲基二氢噻吩酮类

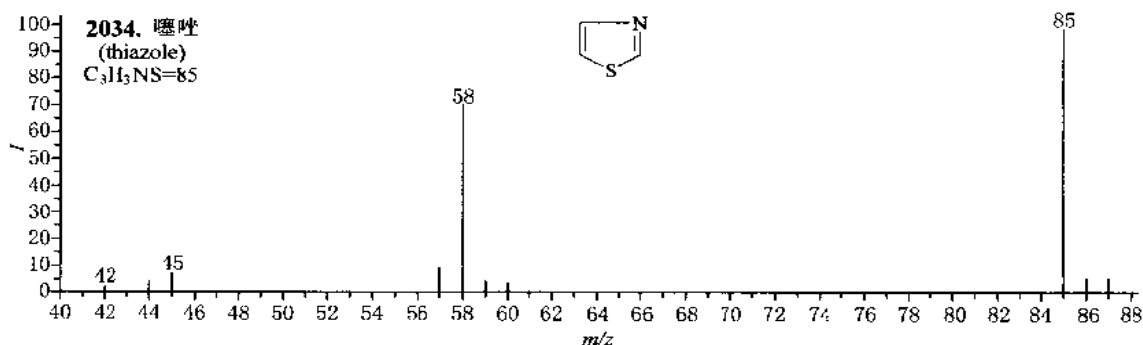
5-甲基-2,5-二氢-2-噻吩酮 (2033) 的裂解途径是  $M-CH_3-CO$  或  $M-CO-CH_3$ 。



## 第七节 噻唑类

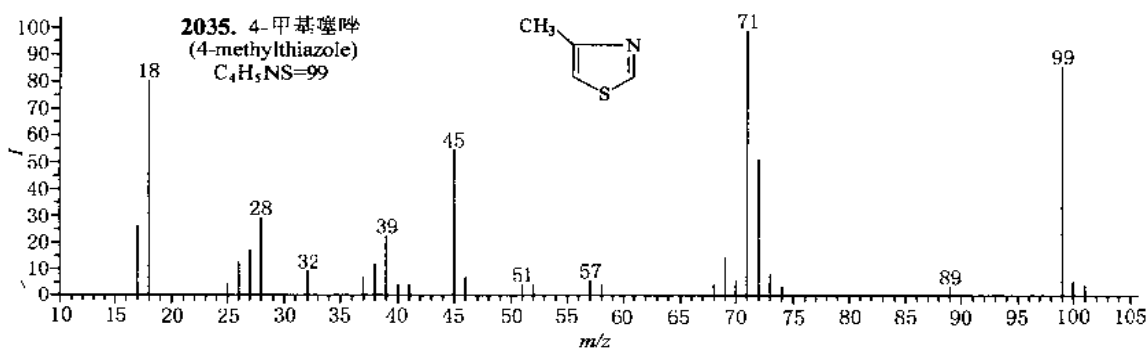
### 一、噻唑

噻唑 (2034) 的两个主要碎片离子是  $M-CHN$  和  $m/z$  45, 两者的结构是  $\begin{array}{c} \text{S}^+ \\ \triangle \end{array}$  和  $CH\equiv S$ .



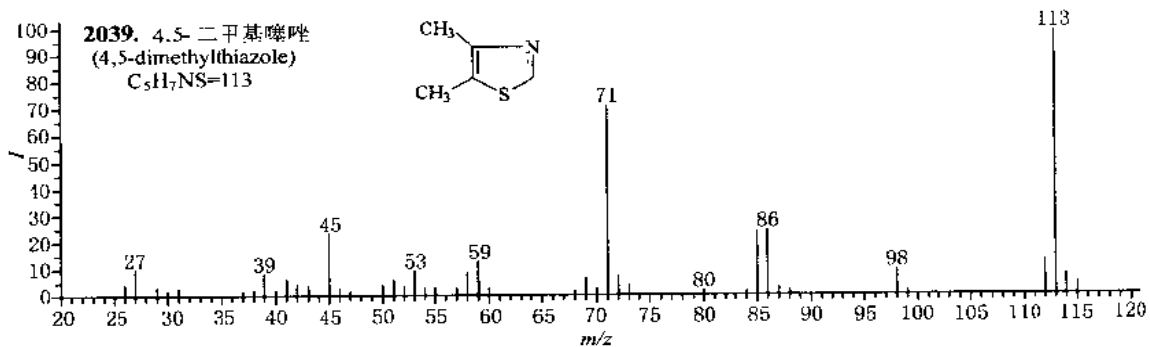
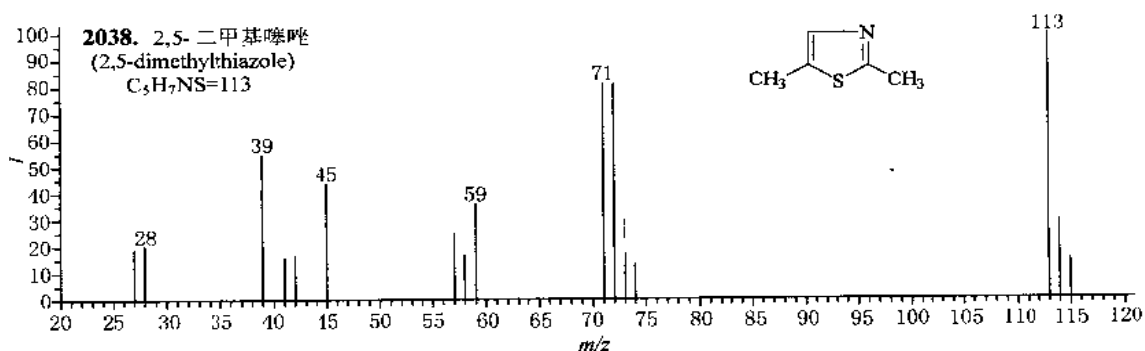
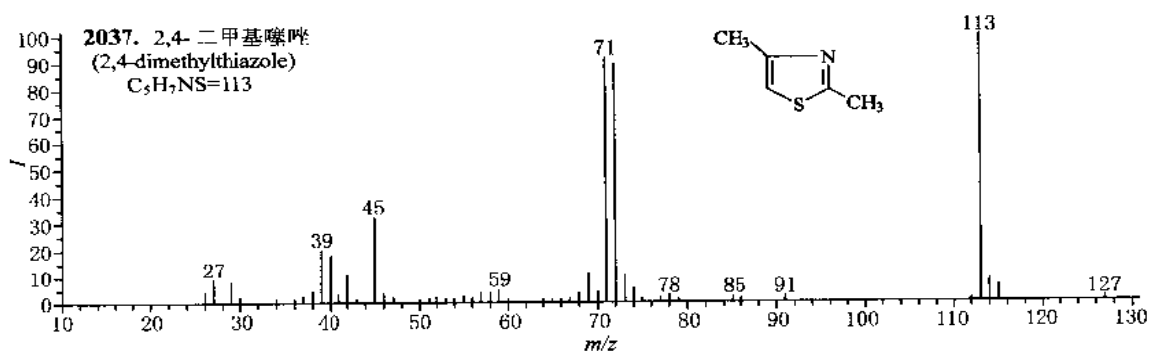
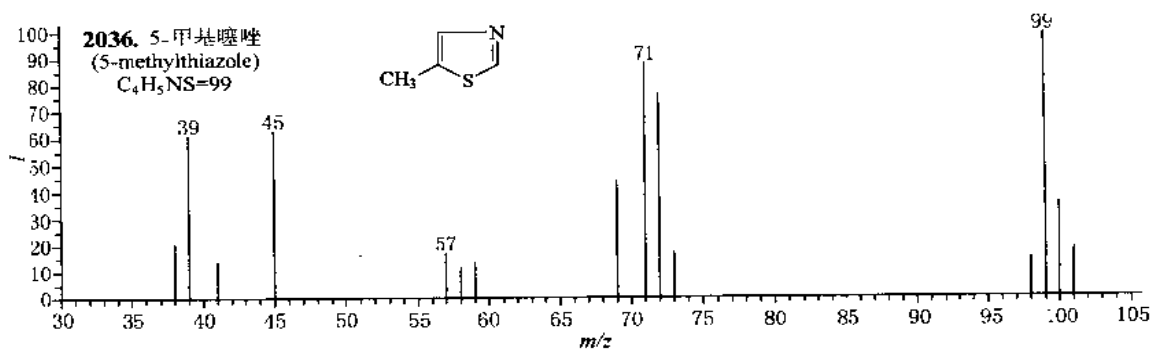
### 二、甲基噻唑类

(1) 单甲基噻唑类 (2035, 2036) 主要有三个碎片离子, 即  $M-CHN$ ,  $M-CHN-H$  和  $m/z$  45。



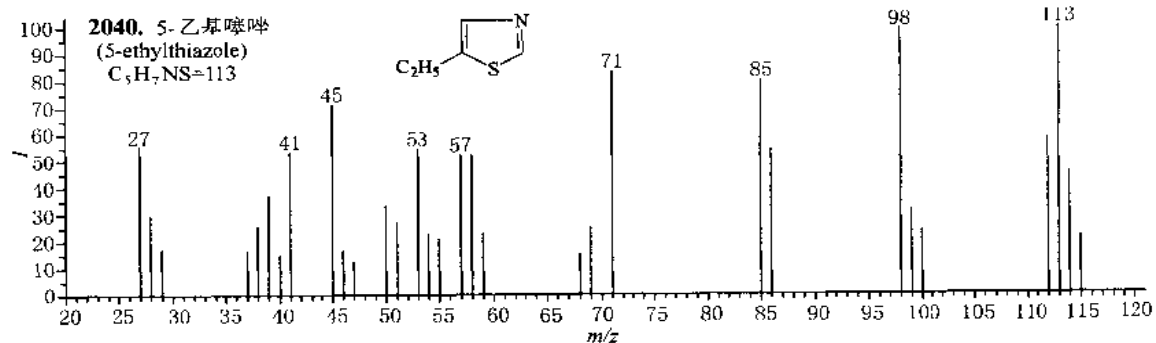
(2) 2,4-和 2,5-二甲基噻唑 (2037, 2038) 都有四个主要离子, 即  $M-CH_3CN$ ,  $M-CH_3CN-H$ ,  $CH_3C\equiv S^-$  和  $CH\equiv S^+$ , 4,5-二甲基噻唑 (2039) 有五个重要离子, 即  $M-CH_3$ ,

M-CHN, M-CHN-H, M-CH<sub>3</sub>-CHN 和 CH≡S̄。



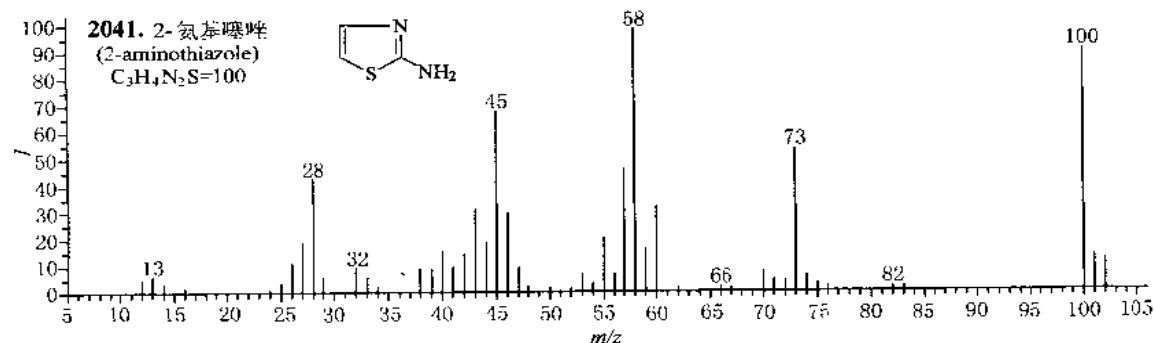
### 三、乙基噻唑类

乙基噻唑 (2040) 有三条裂解途径, 即  $M-H$ ,  $M-CH_3-CHN$  和  $M-C_2H_4-CHN$ 。



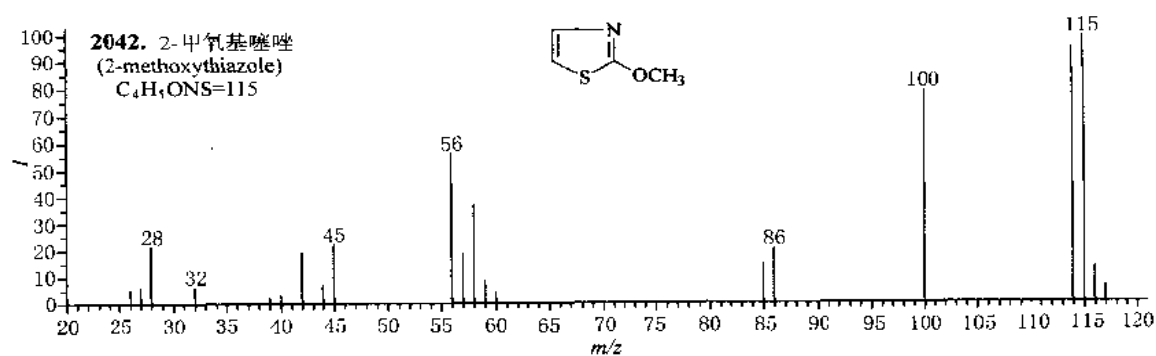
### 四、氨基噻唑类

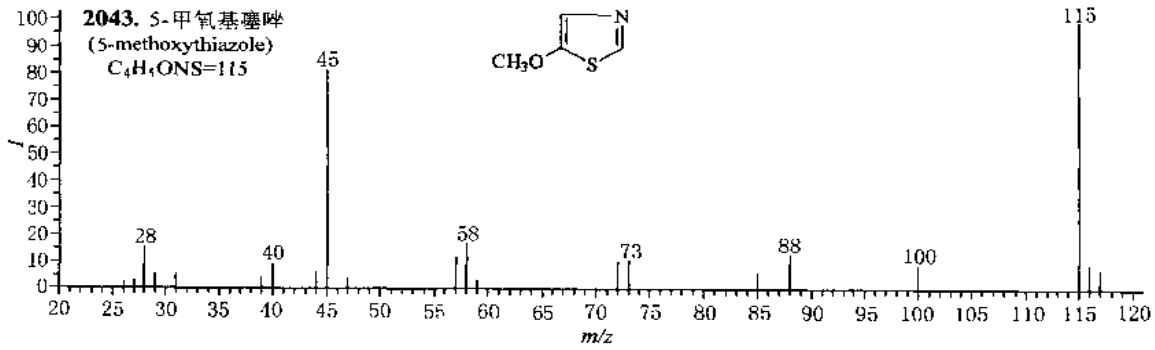
氨基噻唑 (2041) 主要有三个碎片离子, 即  $M-CN$ ,  $M-NH_2CN$  和  $CH\equiv S$ 。



### 五、甲氧基噻唑类

甲氧基噻唑类 (2042, 2043) 有一个共同的碎片离子  $m/z$  58, 它可能来自  $M-CH_2O-CHN$  或  $M-CHN-CH_2O$ 。

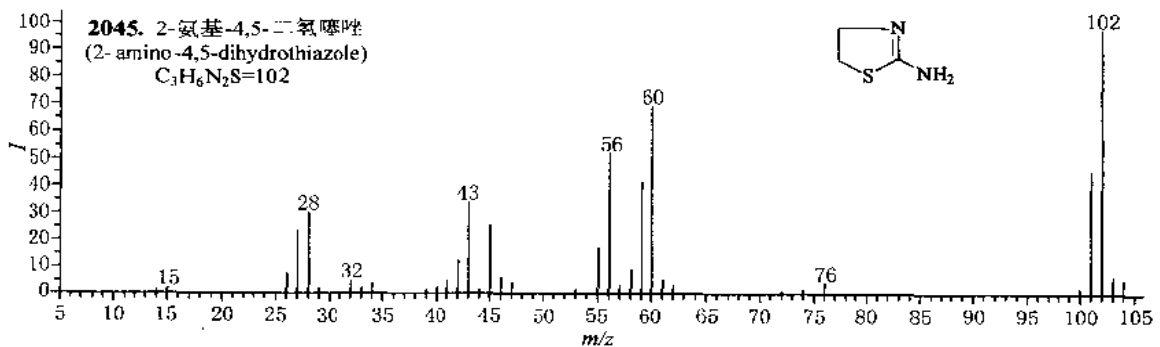
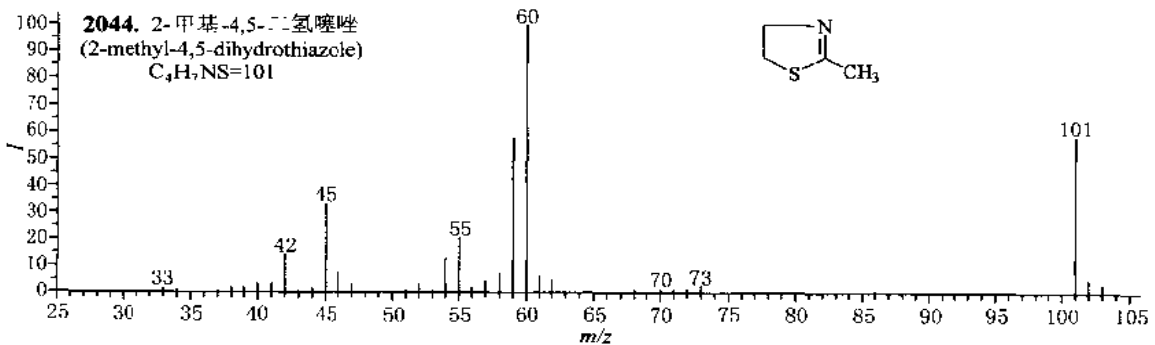


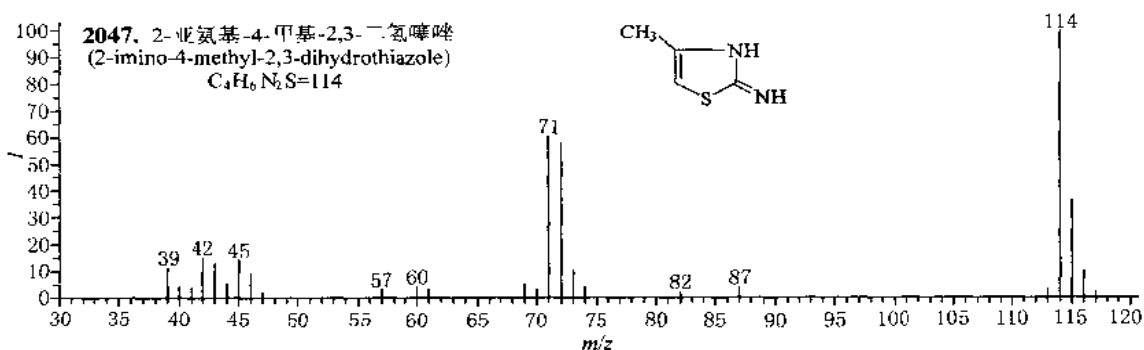
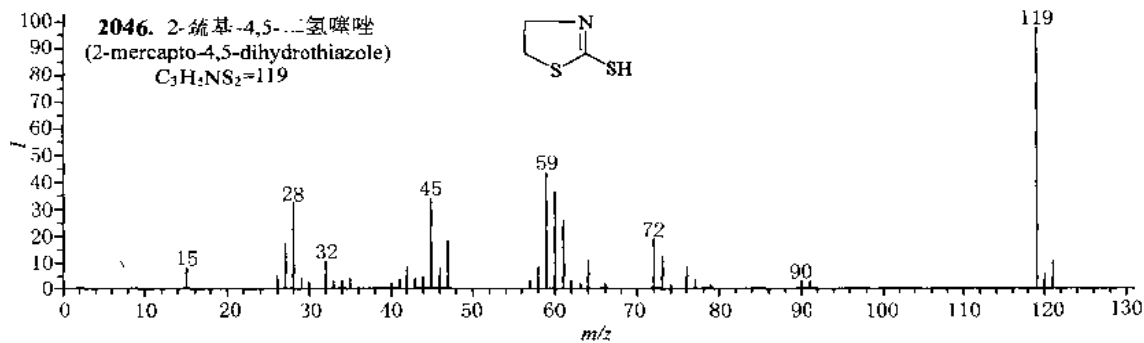


## 六、二氢噻唑类

(1) 2-甲基二氢噻唑 (2044)、2-氨基二氢噻唑 (2045) 和 2-巯基二氢噻唑 (2046) 都有显著的离子  $m/z$  60, 它应有共同的结构  $\begin{array}{c} \text{S}^+ \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array}$ , 分别为  $M-CH_3CN$ 、 $M-NH_2CN$  和  $M-SHCN$ 。

(2) 2-亚氨基-4-甲基-2,3-二氢噻唑 (2047) 的两个重要的碎片离子是  $m/z$  72 和  $m/z$  71, 前者为  $M-NHCNH$ , 后者为再失一氢产生的, 两者的结构可能是  $\begin{array}{c} \text{S}^+ \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array} CH_3$  和  $\begin{array}{c} \text{S} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array} CH_2^+$ 。





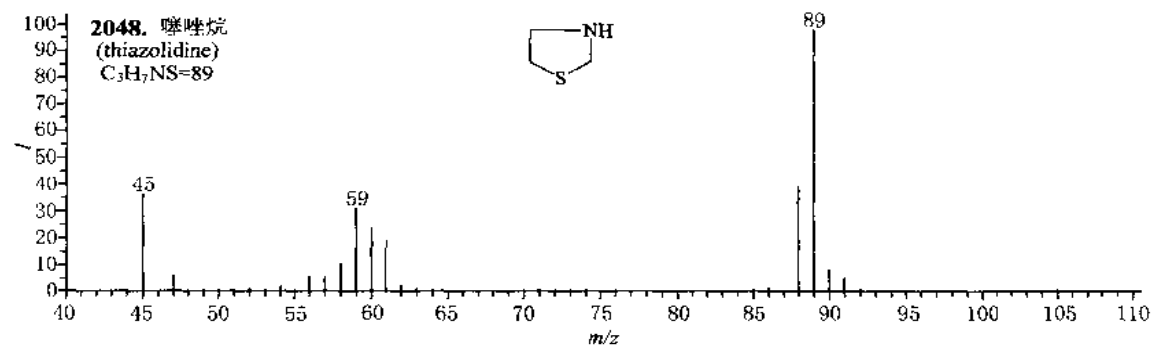
## 七、噻唑烷类

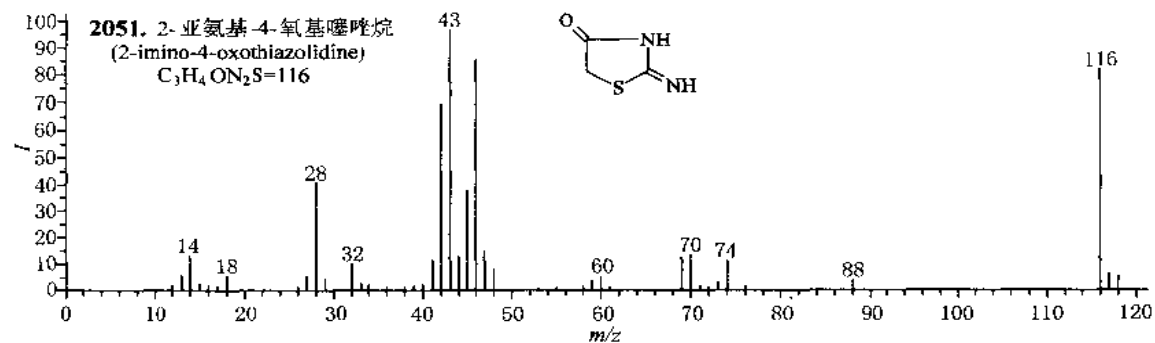
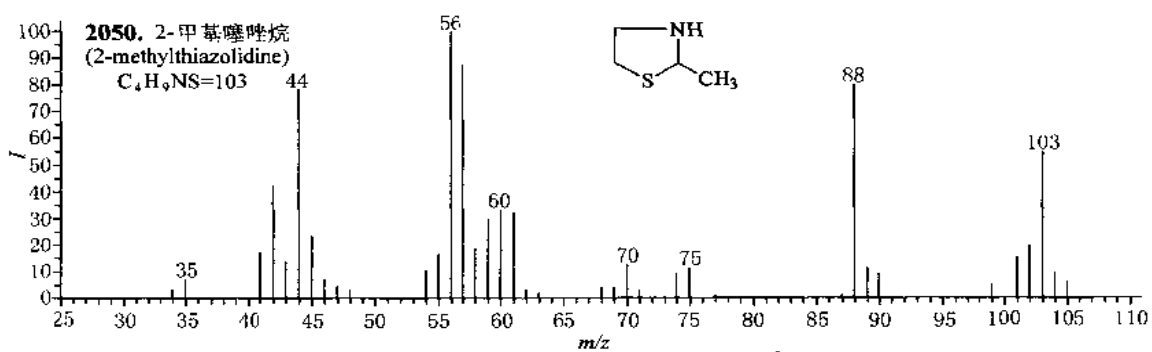
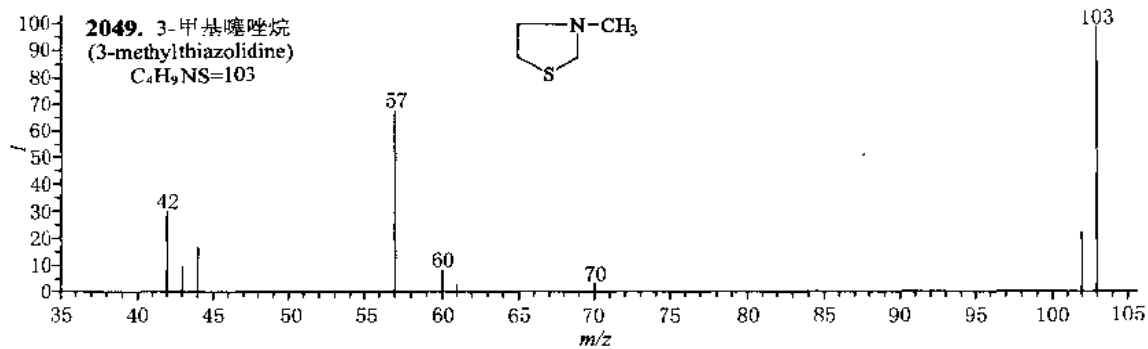
(1) 噻唑烷(2048)本身的 M-H 离子很强, 另有四个碎片离子  $m/z$  61、60、59 和  $m/z$  45, 前三者的结构可能分别为  $\triangle_{S-N}^+$ ,  $\triangle_{S}^+$  和  $\triangle_{N}^+$ 。

(2) *N*-甲基噻唑烷(2049)的主要碎片离子  $m/z$  57 是分子离子失去  $CH_2S$ 。

(3) 2-甲基噻唑烷(2050)有  $M-CH_3$ ,  $M-CH_2S$ ,  $M-CH_2S-H$  和  $CH_3CH=N^+H_2$  四个主要碎片离子, 分别为  $m/z$  88、57、56 和  $m/z$  44。

(4) 2-亚氨基-4-氧基噻唑烷(2051)的三个重要碎片离子  $m/z$  46、43 和  $m/z$  42 可能分别有结构  $CH_2^+S$ ,  $NHC=O^+$  和  $NH=C=NH^+$ 。



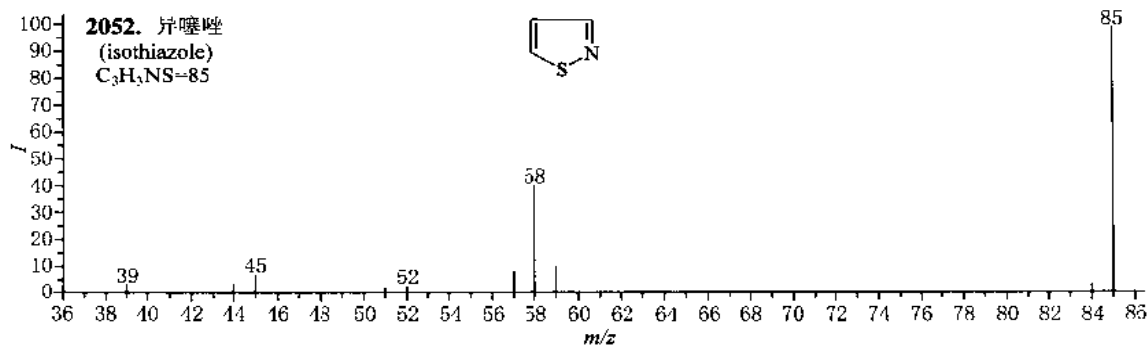


## 第八节 异噻唑类

### 一、异噻唑

异噻唑 (2052) 和噻唑 (2034) 一样, 也是只有两个主要离子  $M-CHN$  ( $m/z$  58) 和  $m/z$  45。



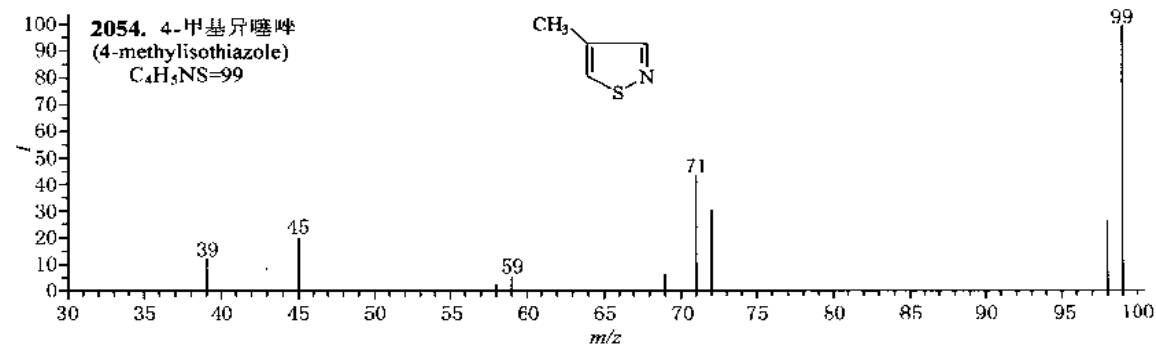
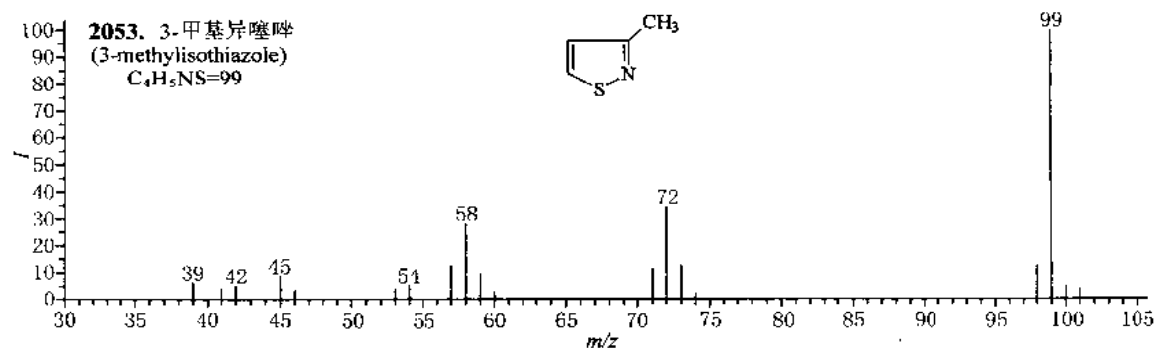


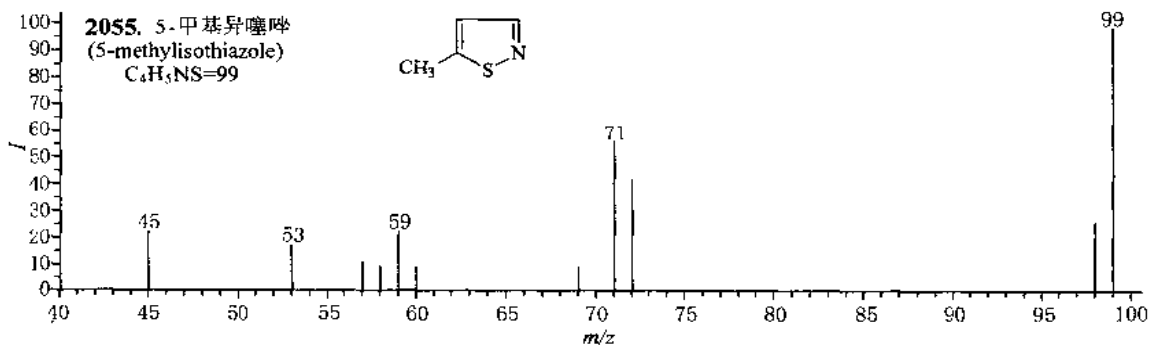
## 二、甲基异噻唑类

(1) 3-甲基异噻唑 (2053) 的特征离子是  $M-CH_3CN$  ( $m/z$  58), 产生离子  $m/z$  72 ( $M-CHN$ ) 要重排甲基到别的碳原子上。

(2) 4-和 5-甲基异噻唑 (2054, 2055) 都有  $M-H-CHN$  和  $M-CHN$  (分别为  $m/z$  71 和  $m/z$  72) 离子, 但后者的离子  $m/z$  59 ( $CH_3C\equiv S^+$ ) 更强些。

以上三个化合物都有离子  $m/z$  45, 它仍然是硫代甲酰基离子。



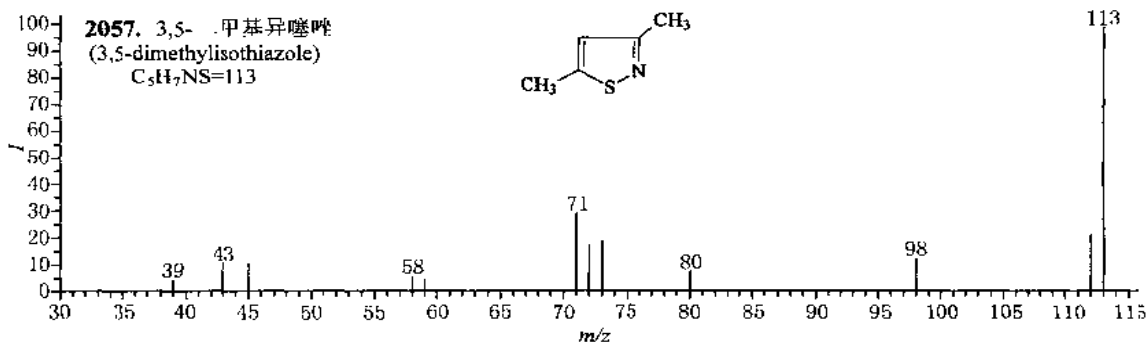
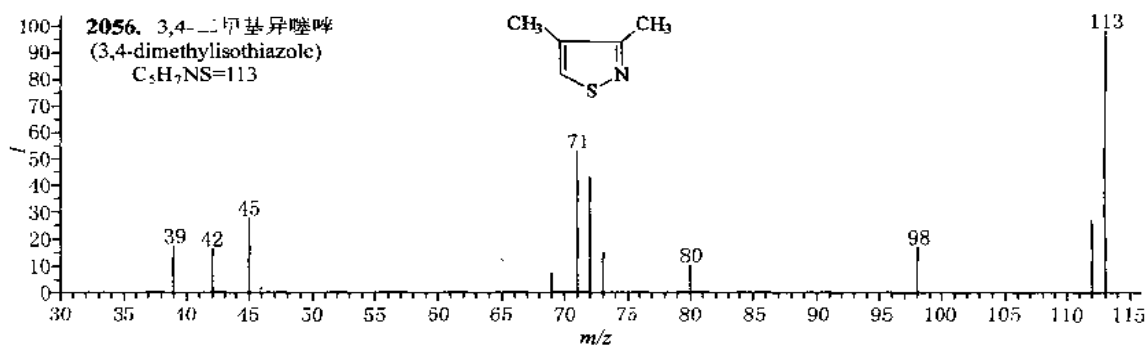


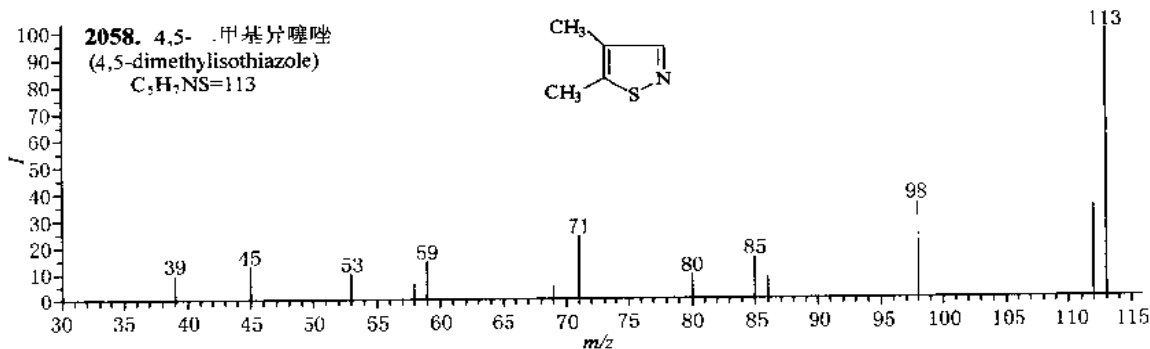
### 三、二甲基异噻唑类

(1) 3,4-二甲基和 3,5-二甲基异噻唑 (2056, 2057) 都有  $M-CH_3CCH$ ,  $M-CH_3CN$  和  $M-CH_3-CHN$  离子, 分别为  $m/z$  73、72 和  $m/z$  71。

(2) 3,5-二甲基和 4,5-二甲基异噻唑 (2057, 2058) 都有离子  $m/z$  59 ( $CH_3C\equiv S^+$ ), 因而能与 3,4-二甲基取代物相区别。

(3) 4,5-二甲基异噻唑 (2058) 的  $M-CH_3$  和  $M-CH_3-CHN$  离子较强, 又有  $M-CHN$  和  $M-CHN-H$  离子 (分别为  $m/z$  98、71、86 和  $m/z$  85), 而缺少  $m/z$  72 和  $m/z$  73 离子, 因而能与 3,4-和 3,5-二甲基取代物 (2056, 2057) 相区别。



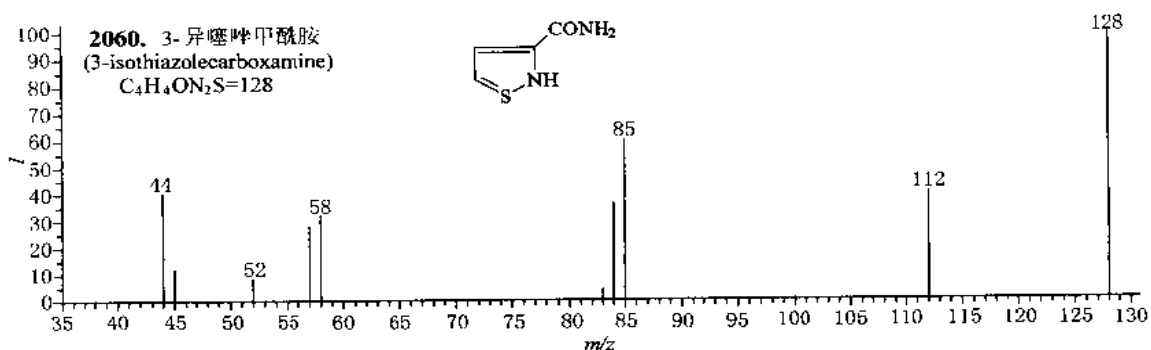
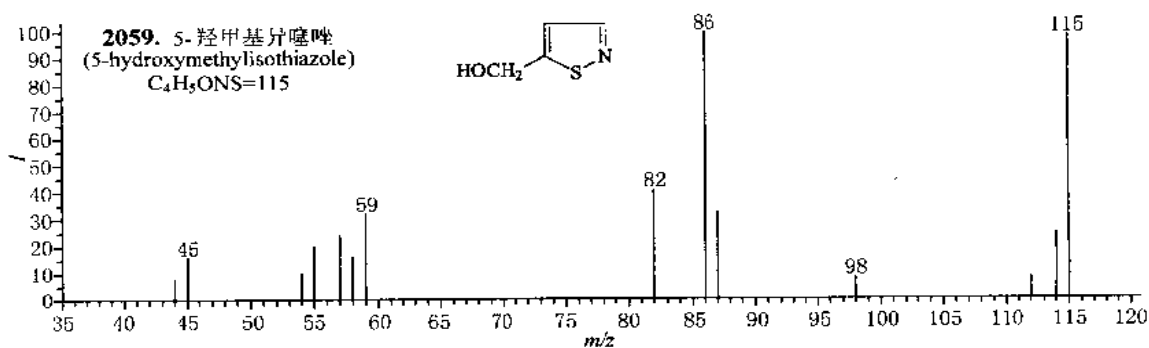


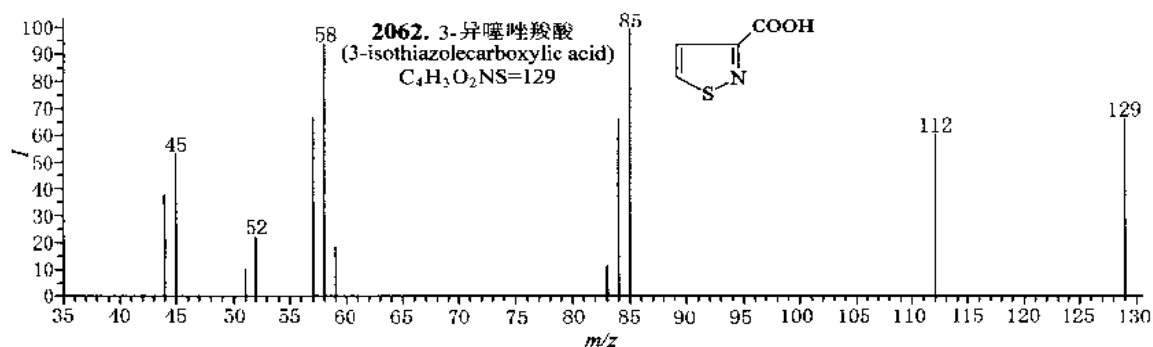
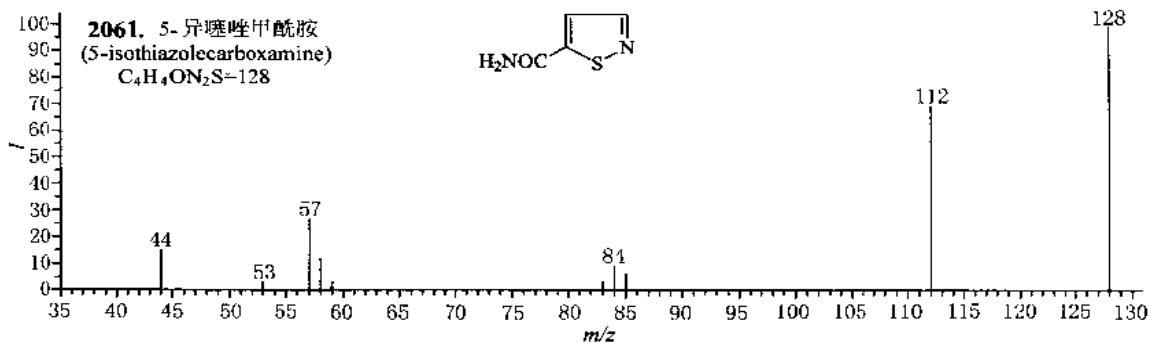
#### 四、其他取代的异噻唑类

(1) 5-羟甲基异噻唑 (2059) 主要有  $M-H$ ,  $M-OH$ ,  $M-H-CHN$ ,  $M-CHO$  和  $M-SH$  离子, 离子  $m/z$  59 可能具有  $\begin{matrix} + \\ \text{S} \\ \text{N} \end{matrix}$  结构。

(2) 3-异噻唑甲酰胺 (2060) 和 5-异噻唑甲酰胺 (2061) 有相同质量的各碎片离子, 但它们的相对丰度差别较大, 这些碎片离子是  $m/z$  112 ( $M-NH_2$ ),  $m/z$  85 ( $M-HNCO$ ),  $m/z$  84 ( $M-NH_2-CO$ ),  $m/z$  58 ( $M-HNCO-CHN$ ),  $m/z$  57 ( $M-NH_2-CO-CHN$ ) 和  $m/z$  44 ( $CONH_2$ )。

(3) 3-异噻唑羧酸 (2062) 有两条裂解途径, 即  $M-OH-CO-CHN$  和  $M-CO_2-CHN$ 。





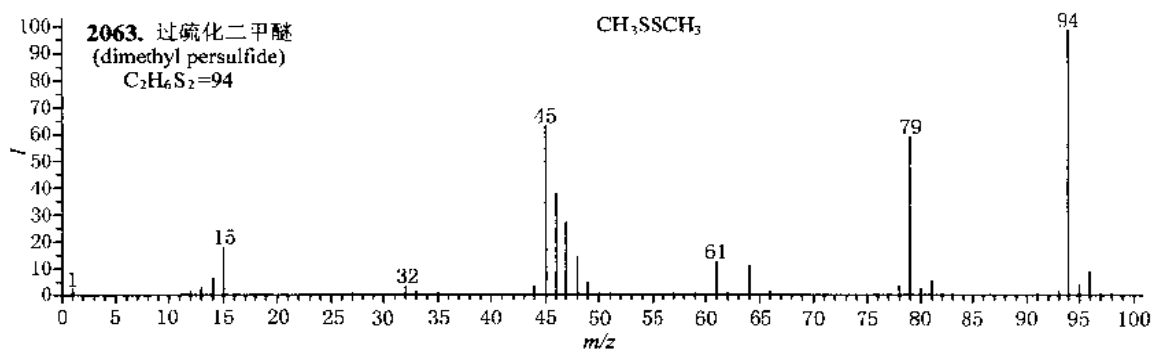
## 第九节 多硫化物

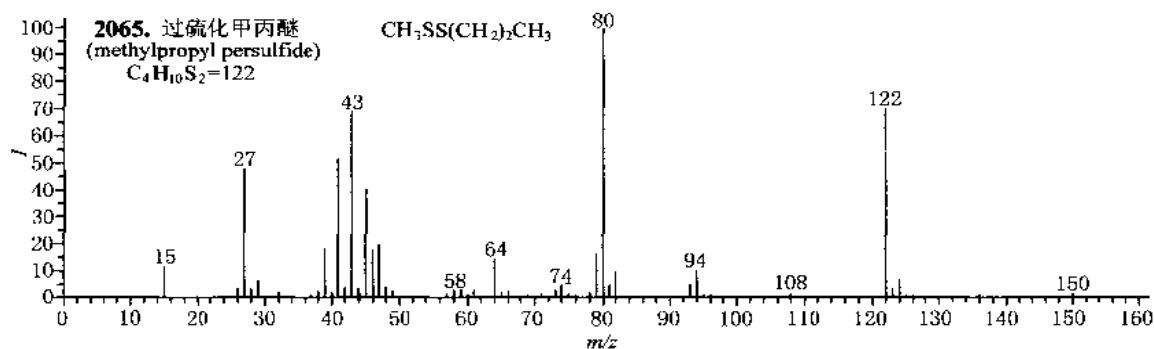
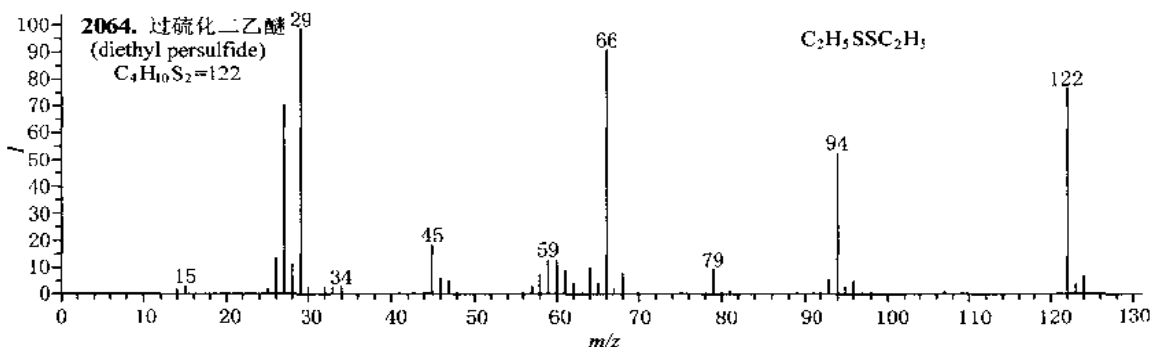
### 一、过硫化物

(1) 过硫化二甲醚 (2063) 的主要碎片离子是  $M-CH_3$  ( $m/z$  79),  $m/z$  48 ( $CH_3S^+H$ ),  $m/z$  47 ( $CH_2=S^+H$ ),  $m/z$  46 ( $CH_2S^-$ ) 和  $m/z$  45 ( $CH=S^+$ )。

(2) 过硫化二乙醚 (2064) 的三个主要碎片离子是  $m/z$  94 ( $M-C_2H_4$ ),  $m/z$  66 ( $M-C_2H_4-C_2H_4$ ) 和  $m/z$  29 ( $C_2H_5^+$ )。

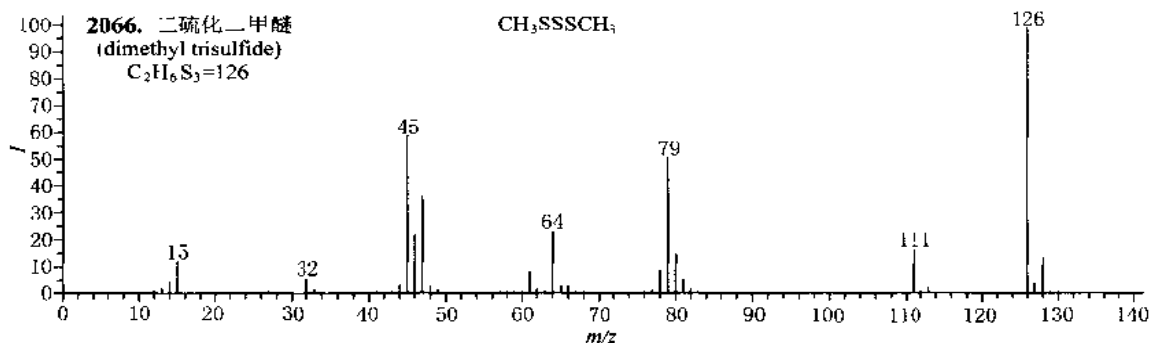
(3) 过硫化甲丙醚 (2065) 的主要碎片离子是  $M-CH_3CHCH_2$  ( $m/z$  80),  $m/z$  45 ( $CH=S^-$ ) 和  $m/z$  43 ( $C_3H_7^+$ )。





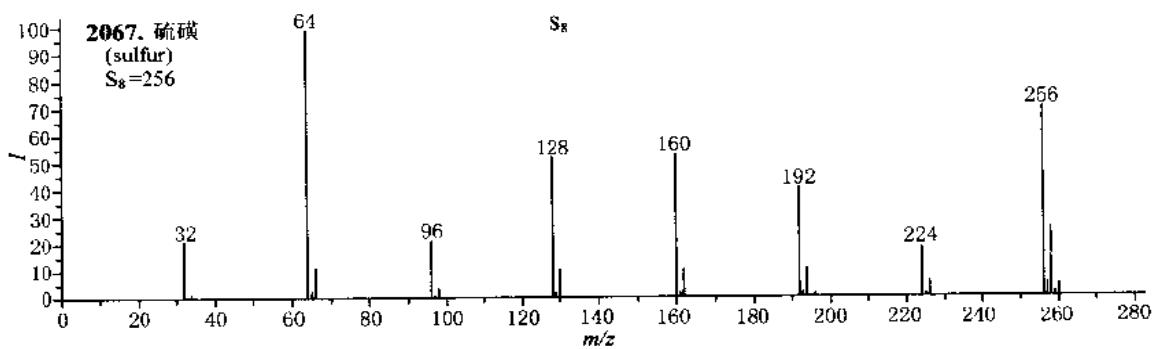
## 二、三硫化合物

三硫化二甲醚 (2066) 有  $M-CH_3$ ,  $M-SCH_3$ ,  $m/z$  47 ( $CH_2=\overset{+}{S}H$ ), 46 ( $CH_2\overset{-}{S}$ ) 和 45 ( $CH\equiv\overset{-}{S}$ ) 离子。



## 三、硫 磺

硫磺 (2069) 有  $m/z$  32、64、96、128、160、192、224 和分子离子  $m/z$  256 八个离子, 分别为  $S$ ,  $S_2$ ,  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $S_5$ ,  $S_6$ ,  $S_7$  和  $S_8$ , 以  $S_2$  ( $m/z$  64) 最强。所有多硫化合物都有强度不同的离子  $m/z$  64, 甚至在二硫之间有亚甲基存在时也有  $S_2$  离子出现, 这是由于  $S_2$  为结合最紧密的离子。

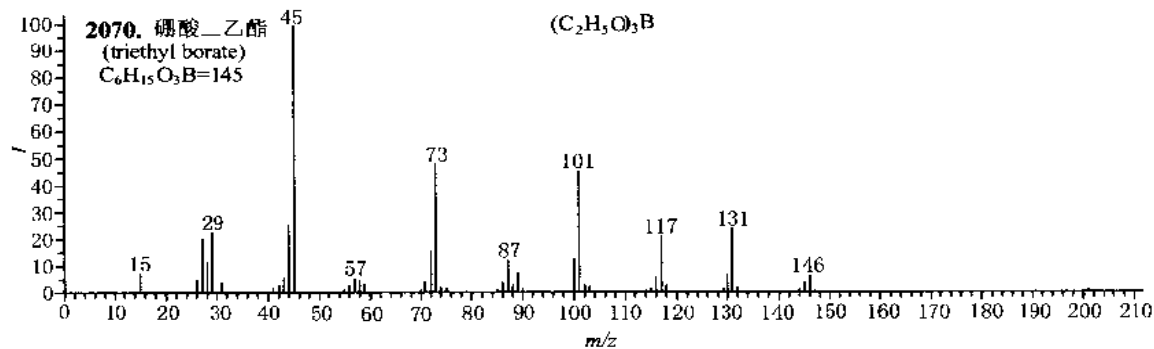
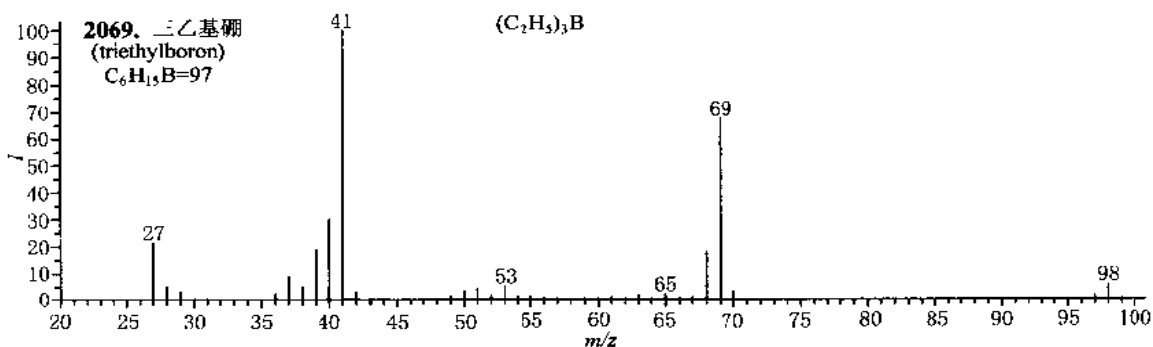
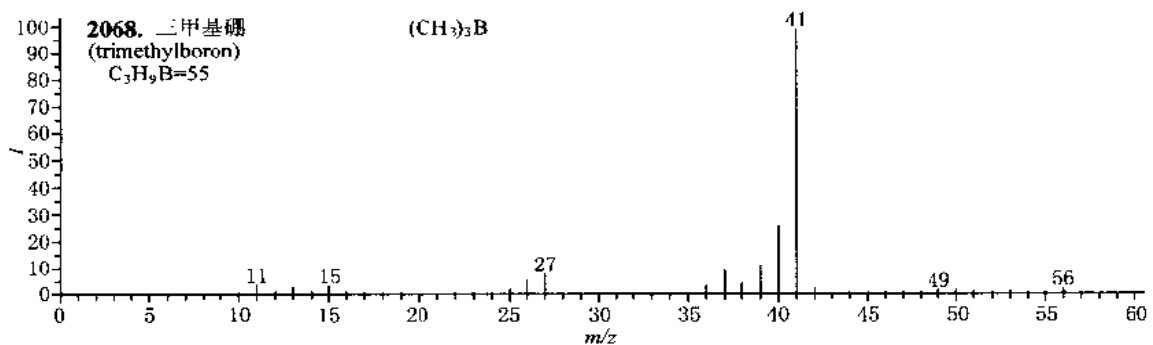


# 第十五章 元素有机化合物

## 第一节 含硼、铝的化合物

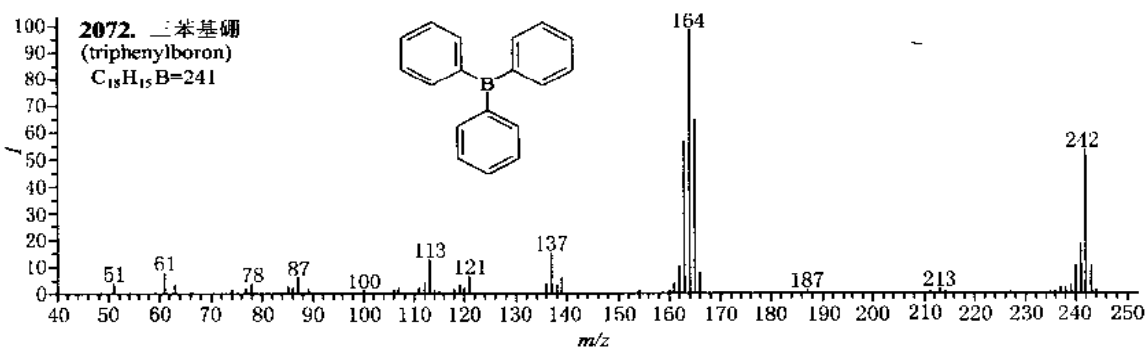
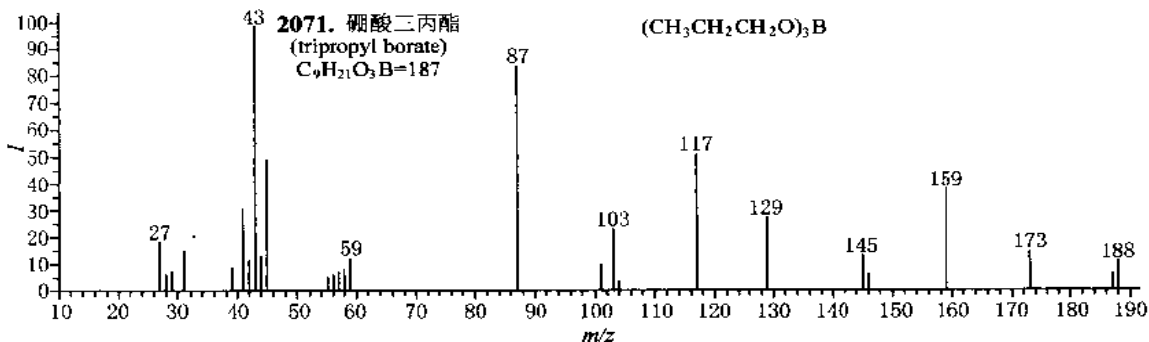
### 一、含硼的化合物

- (1) 三甲基硼 (2068) 的裂解只有失去甲基。
- (2) 三乙基硼 (2069) 的裂解途径是  $M - C_2H_5 - C_2H_4$ ，后一步反应要转移氢原子。



(3) 硼酸三乙酯 (2070) 的裂解是  $M-CH_3$ ,  $M-C_2H_5$ ,  $M-OC_2H_5$ ,  $M-OC_2H_5-C_2H_5$ , 另有基峰离子  $m/z$  45 ( $CH_3CH=O^+$ )。硼酸三丙酯 (2071) 的裂解方式相类似, 例如有离子  $M-CH_3$ ,  $M-C_2H_5$ ,  $M-C_3H_7$ ,  $M-OC_3H_7$ ,  $M-C_2H_5-C_3H_6$ ,  $M-C_3H_7-C_3H_6$  和  $M-OC_3H_7-C_3H_6$ , 另有离子  $m/z$  43 ( $C_3H_7^+$ ) 和 59 ( $CH_3CH_2CH=O^+$ )。

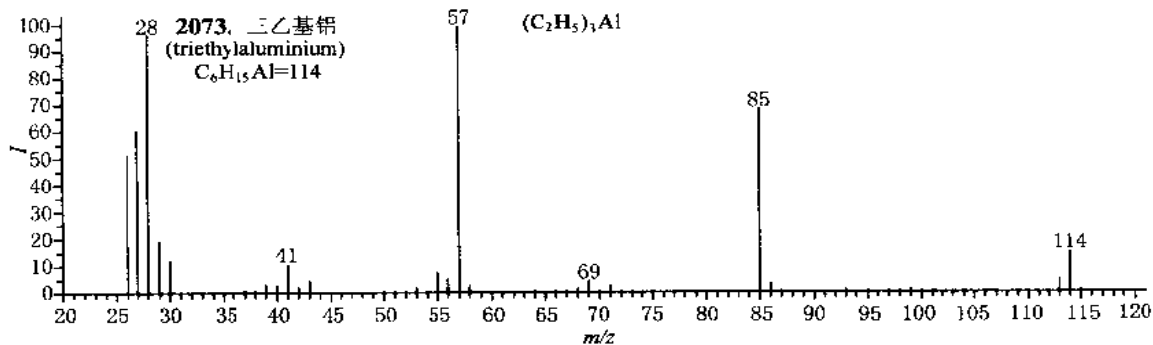
(4) 三苯基硼 (2072) 的裂解是  $M-C_6H_5-H-H$ 。



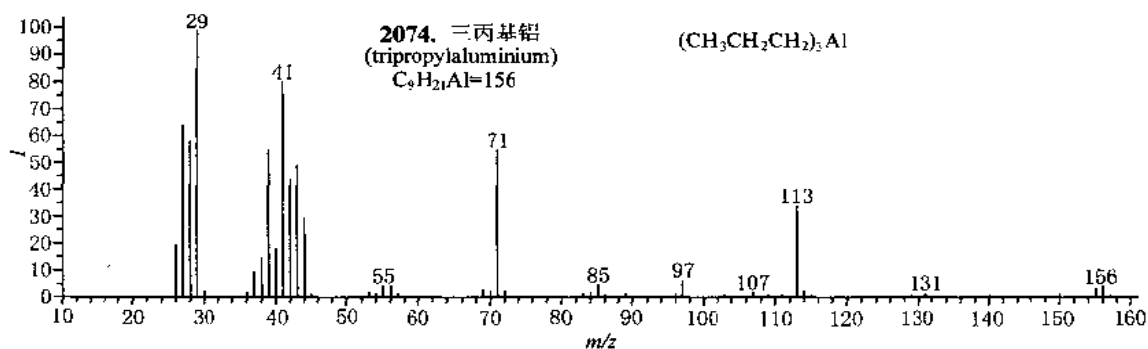
## 二、含铝的化合物

(1) 三乙基铝 (2073) 的裂解途径是  $M-C_2H_5-C_2H_4$  (氢重排)。

(2) 三丙基铝 (2074) 的裂解途径是  $M-C_3H_7-C_3H_6-C_3H_6$  (氢重排)。







## 第二节 含硅、锗、铅的化合物

### 一、含硅的化合物

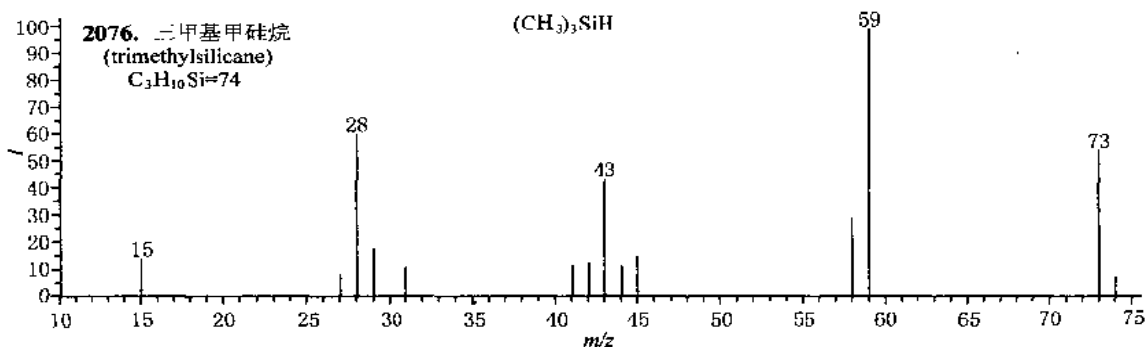
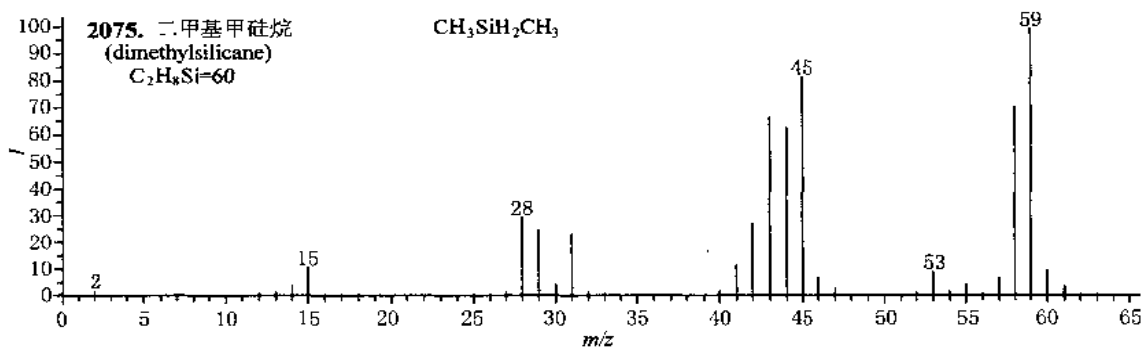
(1) 二甲基甲硅烷 (2075) 的  $M-H$  和  $M-H-H$  离子很强, 另外四个主要碎片离子是  $M-CH_3$ ,  $M-H-CH_3$ ,  $M-2H-CH_3$  和  $m/z$  31 ( $SiH_3^+$ ), 最后一个离子在含硅的化合物质谱中几乎普遍存在, 但丰度不大。

(2) 三甲基甲硅烷 (2076) 的  $M-H$  离子很强, 其他裂解是  $M-CH_3$ ,  $M-H-CH_3$  和  $M-H-CH_3-CH_3$ 。

(3) 四甲基甲硅烷 (2077) 只有  $M-CH_3$  离子很强。

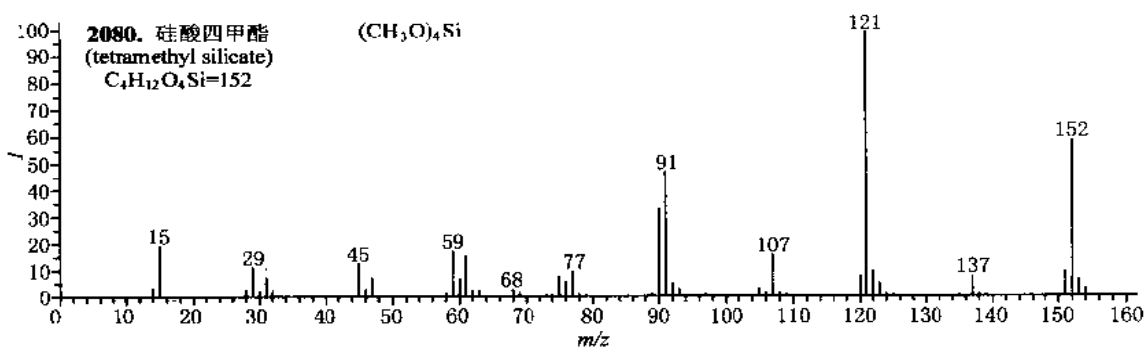
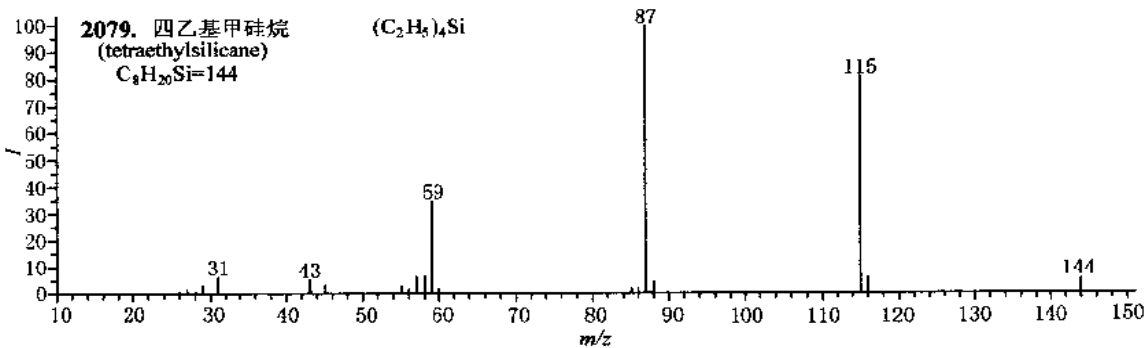
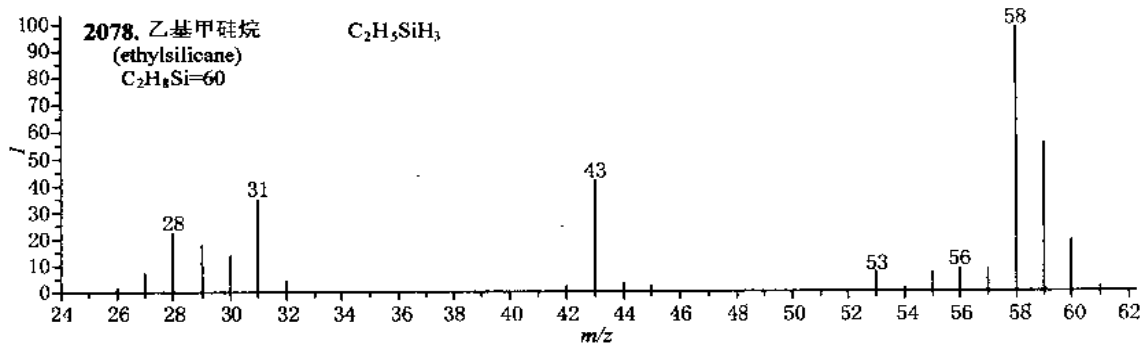
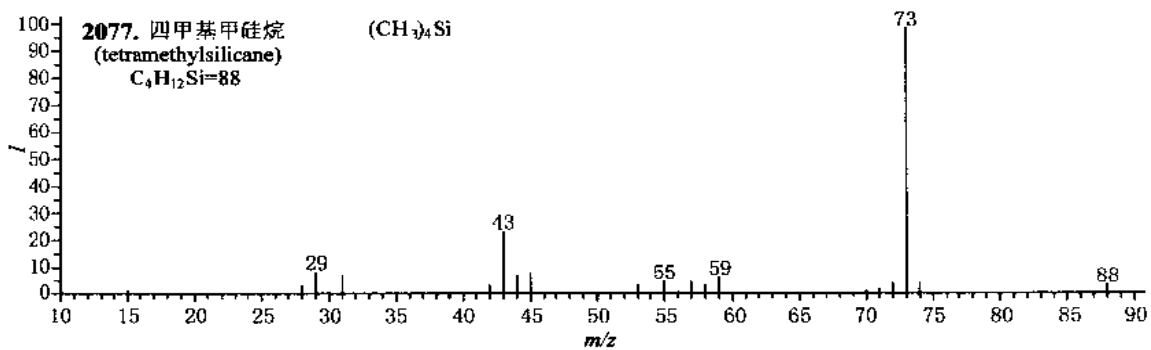
(4) 乙基甲硅烷 (2078) 的  $M-H$  和  $M-H-H$  离子也很强, 另一离子是  $M-H-C_2H_5$ 。

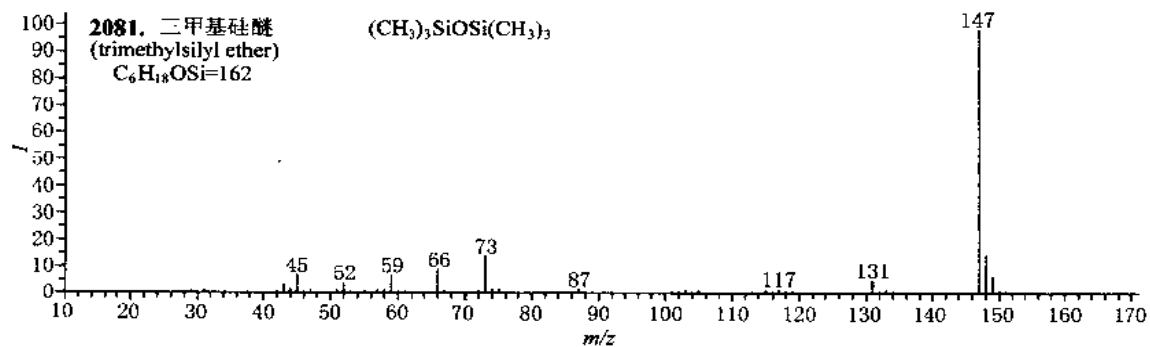
(5) 四乙基甲硅烷 (2079) 的裂解途径是  $M-C_2H_5-C_2H_5-C_2H_5$ 。



(6) 硅酸四甲酯 (2080) 有三条裂解途径, 即  $M-CH_3-CH_2O$ ,  $M-OCH_3-CH_2O$  和  $M-OCH_3-OCH_3$ 。

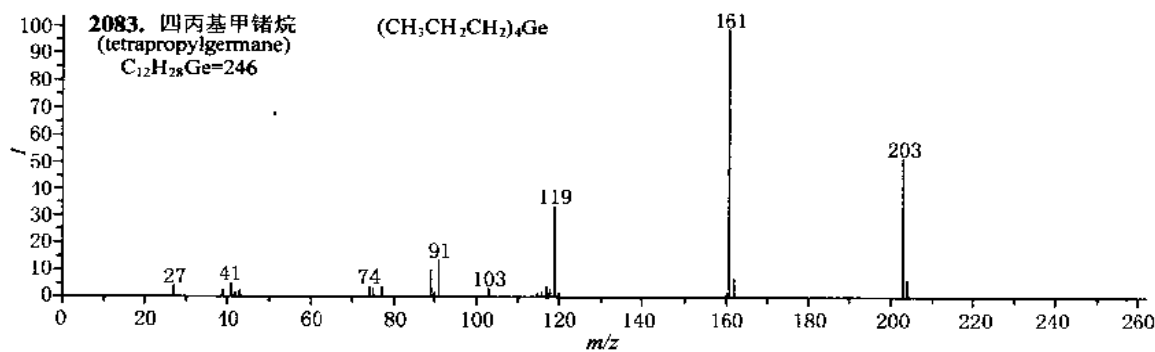
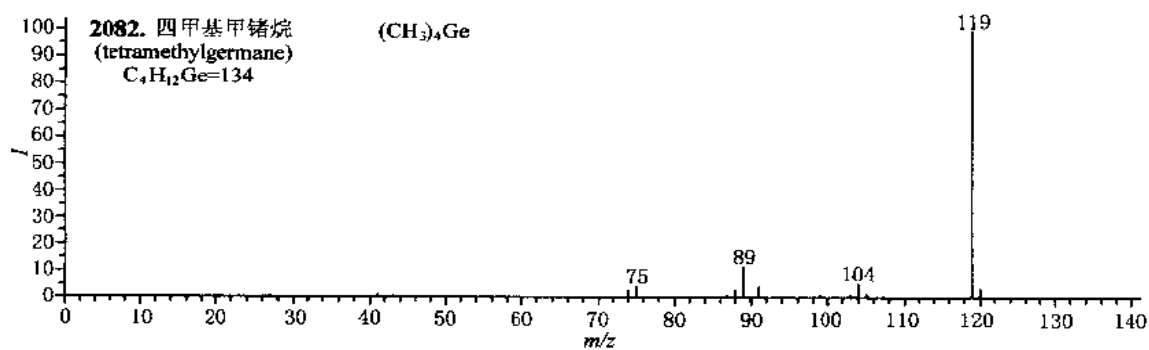
(7) 三甲基硅醚 (2081) 的主要离子是  $M-CH_3$  ( $m/z$  147), 离子  $m/z$  73  $[Si(CH_3)_3]^+$  不强, 但为其特征离子。





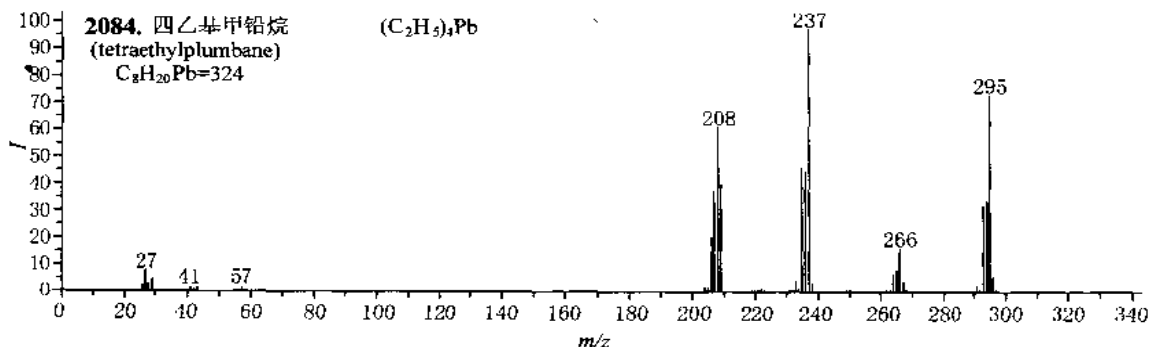
## 二、含锗的化合物

- (1) 四甲基甲锗烷 (2082) 主要有一个碎片离子, 即  $\text{M}-\text{CH}_3$ ,  $\text{GeCH}_3^+$  离子不强。  
 (2) 四丙基甲锗烷 (2083) 的裂解途径只有一条, 即  $\text{M}-\text{C}_3\text{H}_7-\text{C}_3\text{H}_6-\text{C}_3\text{H}_6$  (氢重排)。



## 三、含铅的化合物

四乙基甲铅烷 (2084) 的裂解途径是  $\text{M}-\text{C}_2\text{H}_5-\text{C}_2\text{H}_5-\text{C}_2\text{H}_5-\text{C}_2\text{H}_5$ 。



### 第三节 含磷、砷、锑的化合物

#### 一、含磷的化合物

(1) 二甲基磷 (2085) 有四个主要碎片离子, 即  $M-H$ ,  $M-CH_3$ ,  $CH_3P^+=CH$  ( $m/z$  59) 和  $HP^+=CH$  ( $m/z$  45)。

(2) 二乙基磷 (2086) 的四个主要碎片离子是  $M-CH_3$ ,  $M-C_2H_4$ ,  $CH_3P^+=CH$  和  $HP^+=CH$ 。

(3) 三乙基磷 (2087) 有两条裂解途径, 即  $M-CH_3-C_2H_5$  和  $M-C_2H_4-C_2H_4$ 。

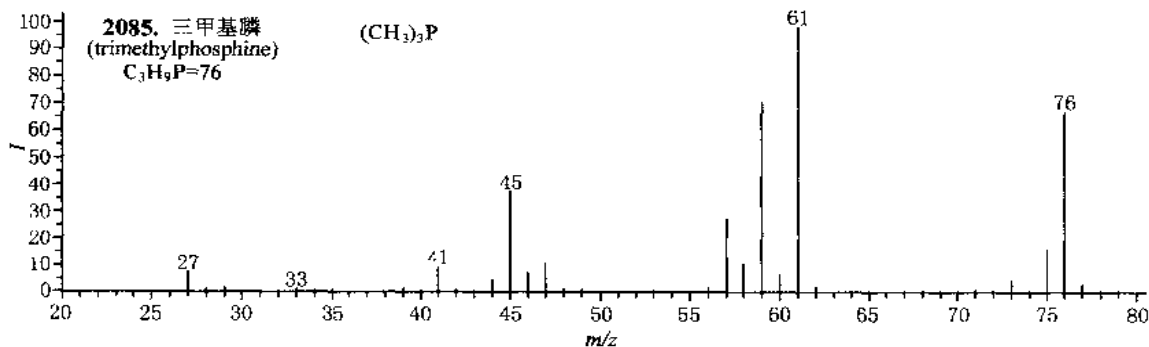
(4) 亚磷酸三甲酯 (2088) 的三条裂解途径, 即  $M-CH_3-CH_2O$ ,  $M-CH_2O-OCH_3$  和  $M-OCH_3-CH_2O$ , 另有离子  $PO^+$ 。

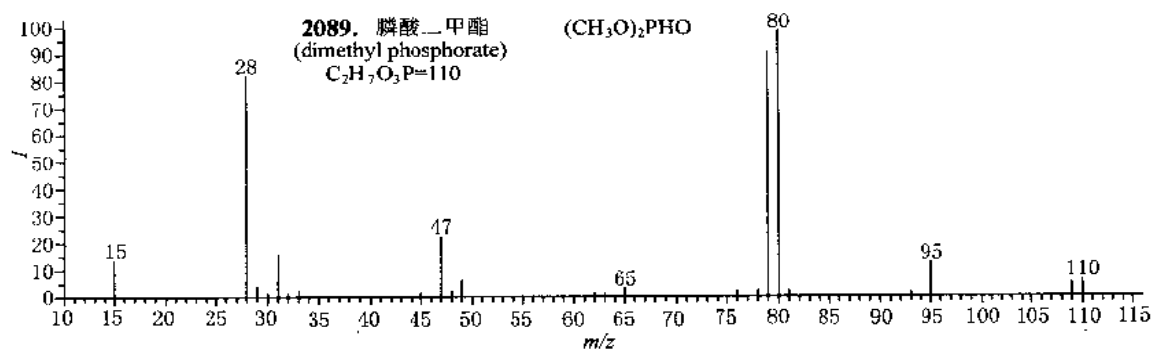
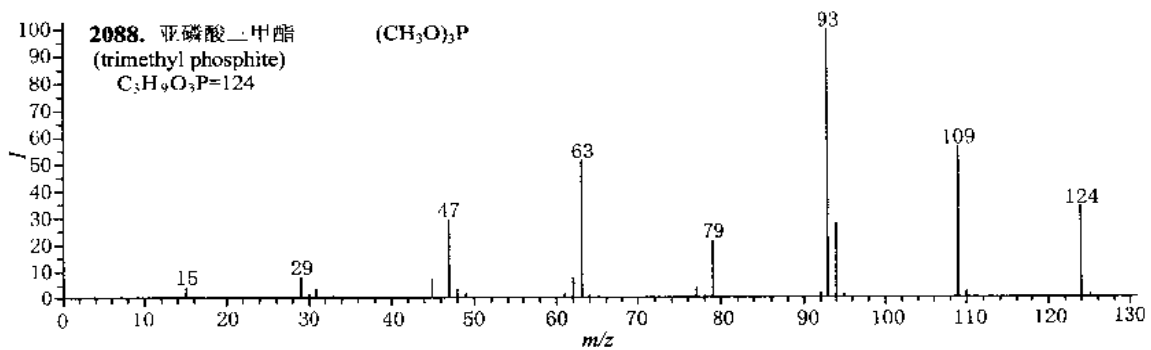
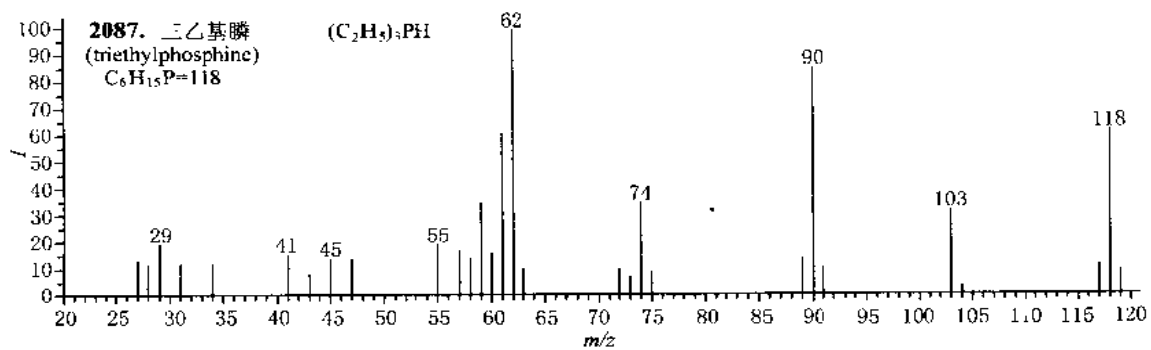
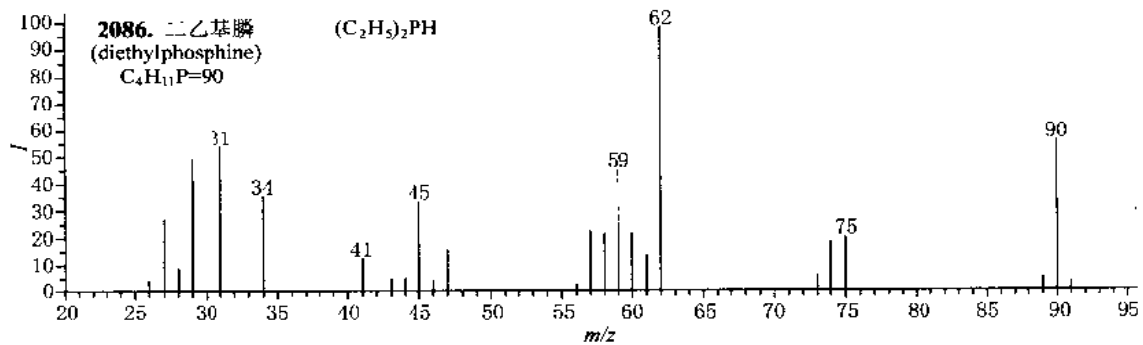
(5) 磷酸二甲酯 (2089) 的主要碎片离子是  $M-CH_2O$  和  $M-OCH_3$ , 也有离子  $PO^+$ 。磷酸二乙酯 (2090) 的主要裂解途径是  $M-C_2H_5-C_2H_4$ , 另有离子  $m/z$  45 ( $CH_3CH=O^+H$ ) 和 31 ( $CH=O^+H$ )。

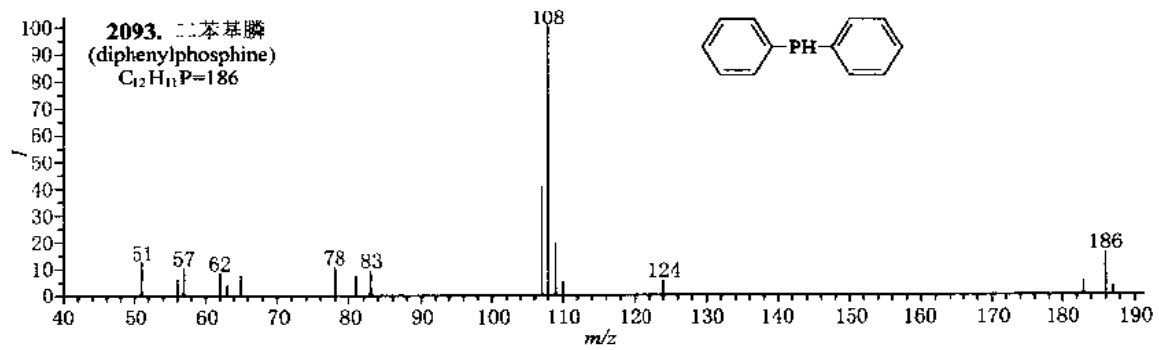
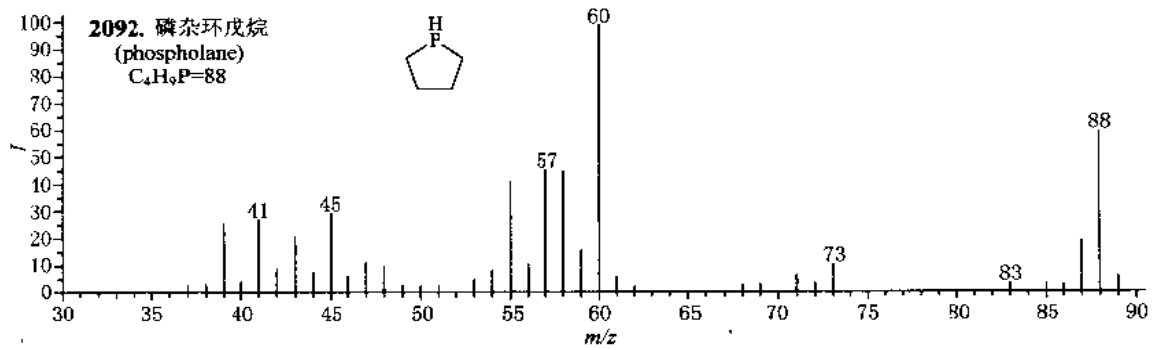
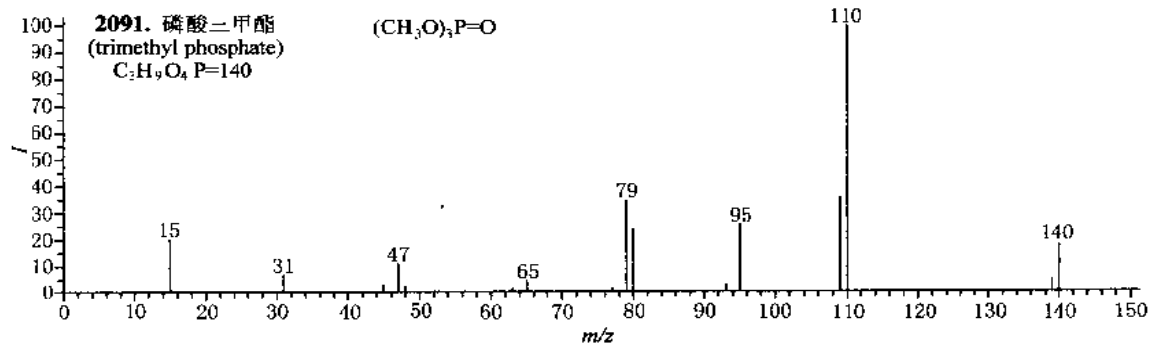
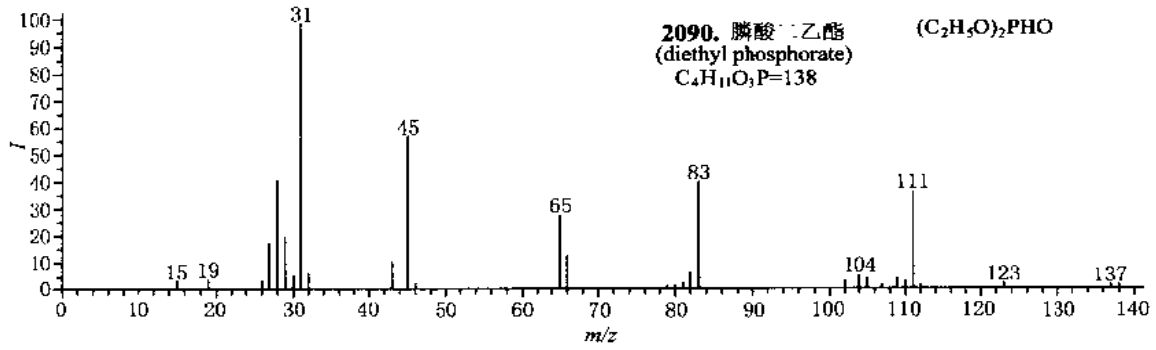
(6) 磷酸三甲酯 (2091) 有三条裂解途径, 即  $M-CH_2O-CH_3$ ,  $M-CH_2O-CH_2O-CH_3$  和  $M-OCH_3-CH_2O$ , 另有离子  $PO^+$ 。

(7) 磷杂环戊烷 (2092) 的主要离子是失去  $C_2H_4$ 。

(8) 二苯基磷 (2093) 的主要离子有三个, 即  $M-C_6H_5$ ,  $M-C_6H_5-H$  和  $M-C_6H_5-2H$ 。







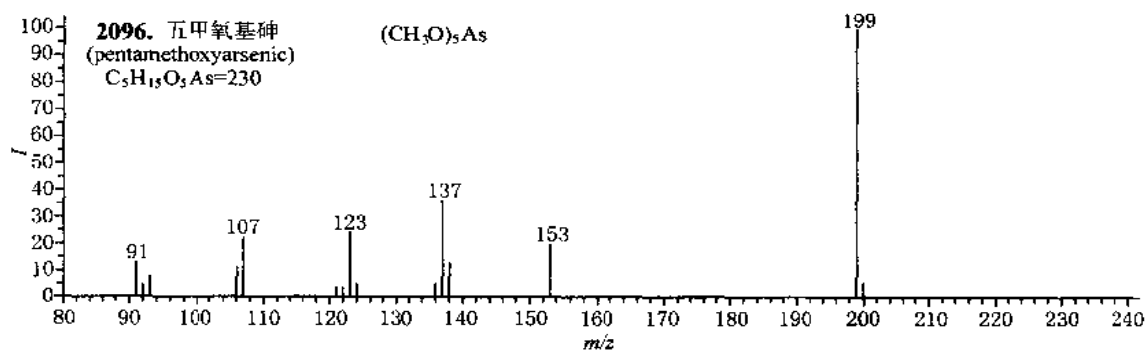
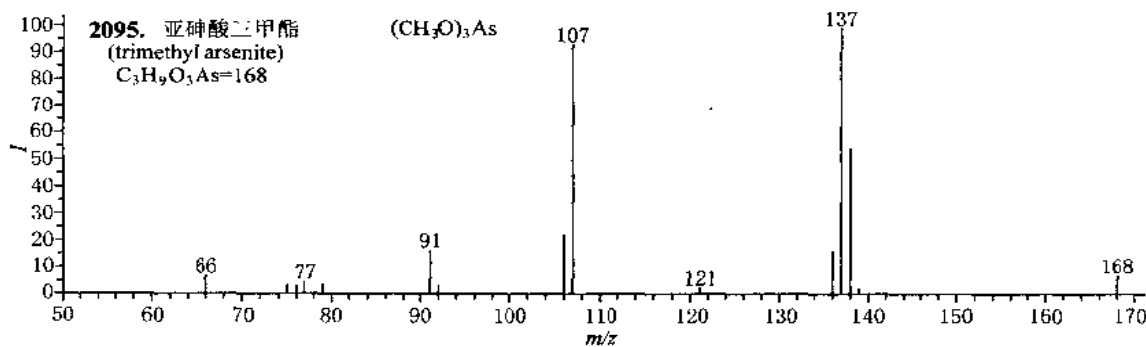
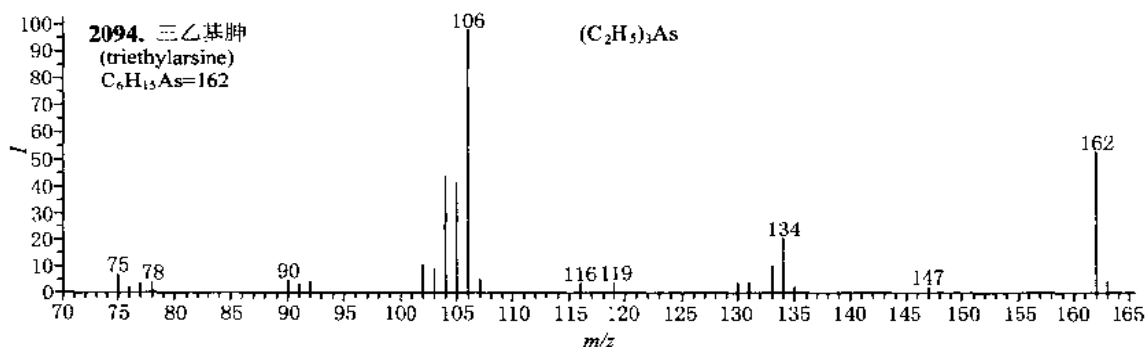
## 二、含肿的化合物

(1) 三乙基肿 (2094) 的裂解途径有三条, 即  $M-C_2H_4-C_2H_4$ ,  $M-C_2H_5-C_2H_4$  和  $M-C_2H_5-C_2H_5$ 。

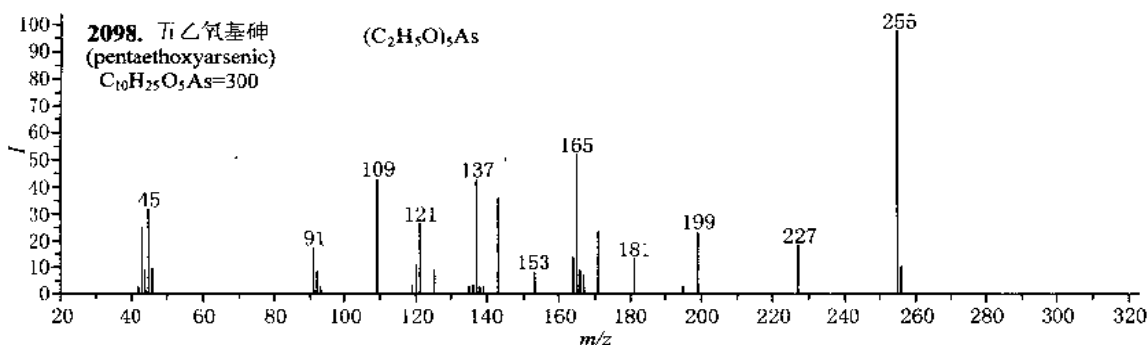
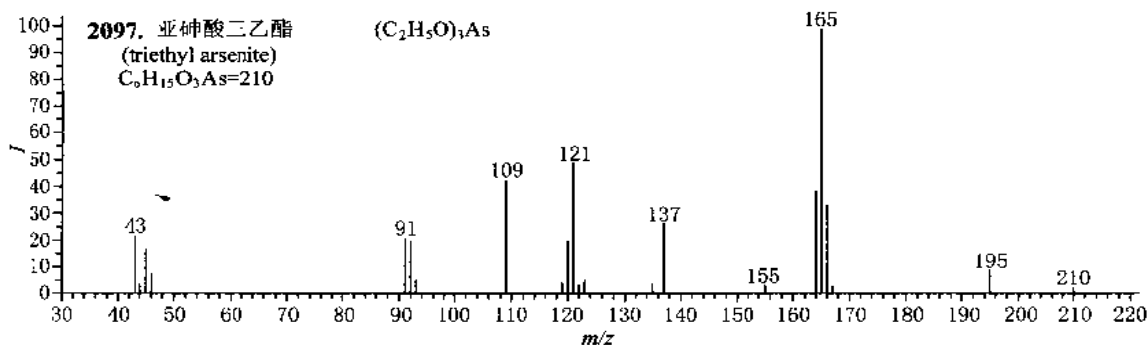
(2) 亚肿酸三甲酯 (2095) 的裂解途径也有三条, 即  $M-CH_2O-OCH_3$ ,  $M-OCH_3-CH_2O$  和  $M-OCH_3-OCH_3$ 。

(3) 五甲氧基肿 (2096) 的主要离子是  $M-OCH_3$ , 其他较弱离子  $m/z$  153、137、123、107 和  $m/z$  91 的结构可能分别为  $(CH_3O)_2As=O^+$ ,  $CH_3OAs=O^+CH_3$ ,  $CH_3OAs=OH^+$ ,  $CH_3O=AsH^+$  和  $AsO^+$ 。

(4) 亚肿酸三乙酯 (2097) 的两个主要离子来自  $M-OC_2H_5-OC_2H_4$  的裂解途径, 较弱的两个离子  $m/z$  137 和  $m/z$  109 是来自  $M-OC_2H_5-C_2H_4-C_2H_4$  的裂解途径。



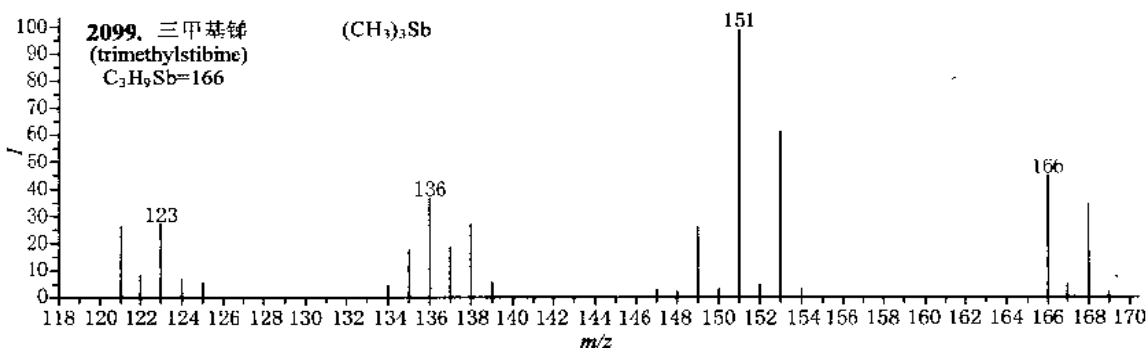
(5) 五乙氧基砷 (2098) 的裂解途径有  $M-OC_2H_5-C_2H_4-C_2H_4-C_2H_4-C_2H_4$ ,  $M-OC_2H_5-OC_2H_5-C_2H_5-C_2H_4-C_2H_4$  和  $O=\overset{+}{As}(OC_2H_5)_2 (m/z\ 181)-C_2H_4-C_2H_4$ 。离子  $m/z\ 181$  应来自  $M-2OC_2H_5-C_2H_5$ , 另外也有离子  $\overset{+}{As}O$ 。



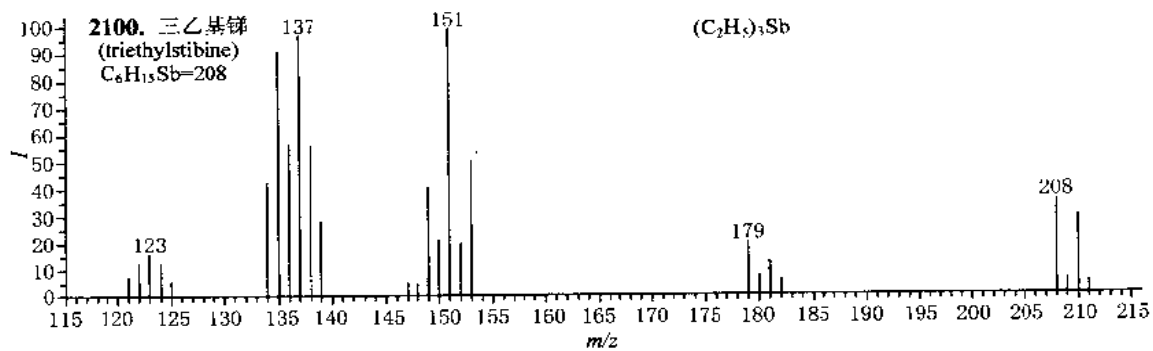
### 三、含锑的化合物

(1) 三甲基锑 (2099) 的裂解途径是  $M-CH_3-CH_3-CH_3$ 。

(2) 三乙基锑 (2100) 的裂解途径是  $M-C_2H_5-C_2H_4-C_2H_4$ , 另有离子  $m/z\ 134$  和  $m/z\ 135$ , 结构分别为  $\overset{-}{Sb}\equiv CH$  和  $HSb\equiv CH$ 。







### 主要参考文献

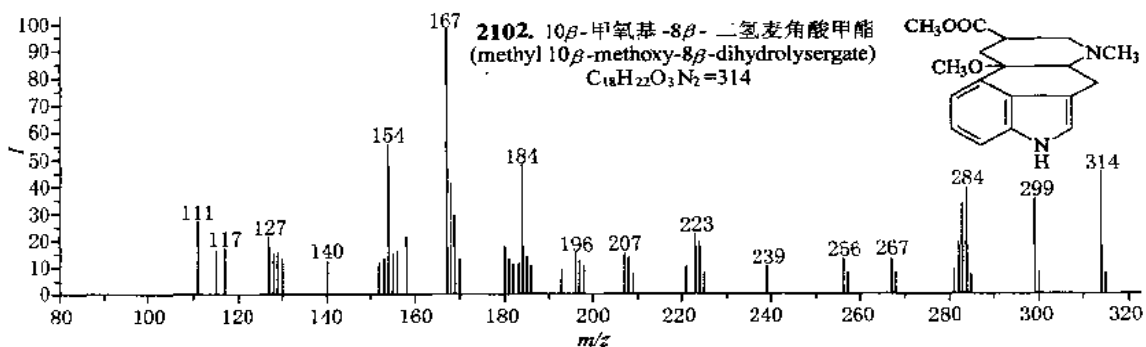
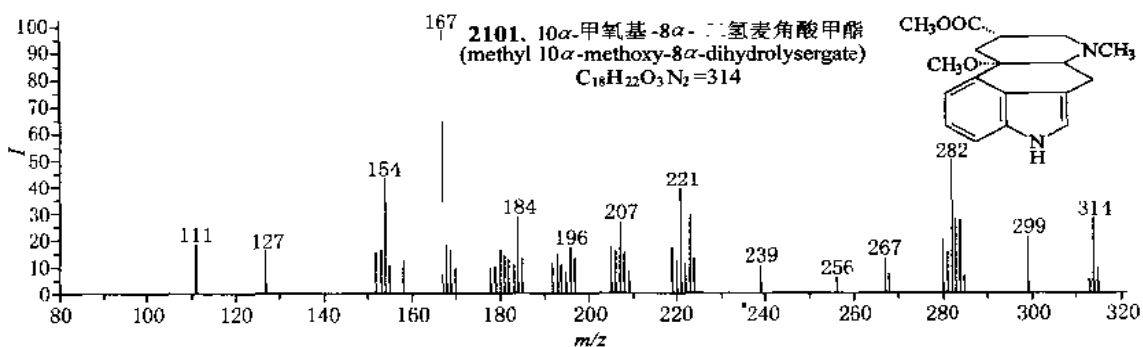
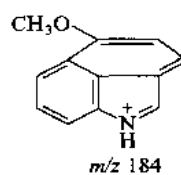
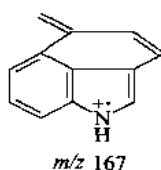
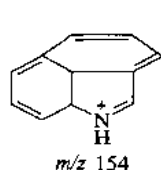
- 1 美国 NBS 质谱数据库
- 2 丛浦珠. 质谱学在天然有机化学中的应用. 北京: 科学出版社, 1987

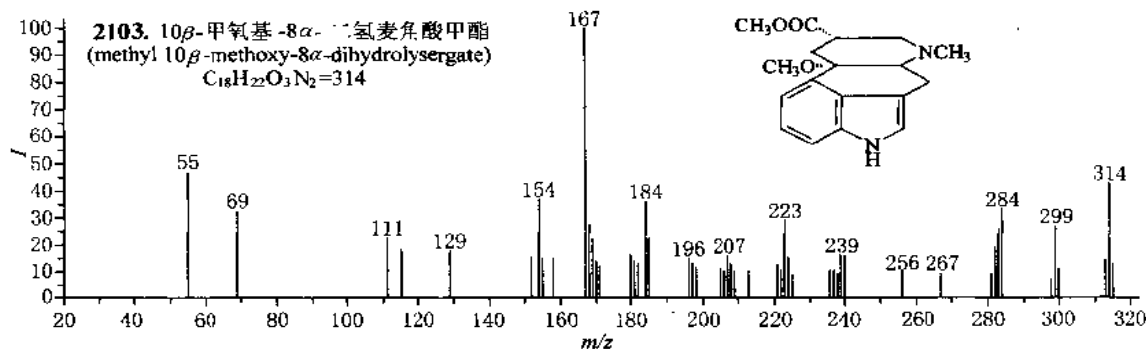
# 第三篇 天然有机化合物的质谱

## 第十六章 生物碱类

### 第一节 吲哚生物碱类

这里收录的吲哚生物碱主要是三个麦角碱类生物碱，三个化合物（2101~2103）都有明显的离子  $m/z$  154, 167 和 184，三个离子都含吲哚环，可能的结构如下：

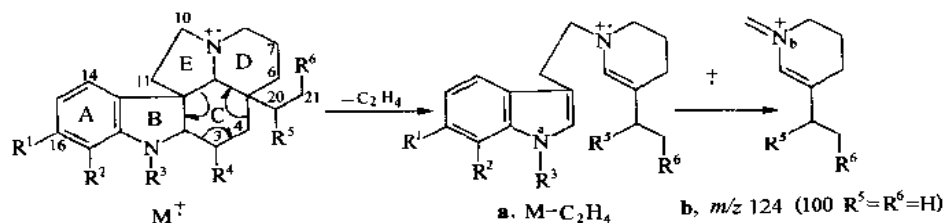




## 第二节 二氢吲哚生物碱类

### 一、白坚米定类

这类生物碱 (2104~2135) 的主要裂解是失去 C<sub>3</sub> 和 C<sub>4</sub> 得 M-C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 的离子 **a**, 然后 C<sub>10</sub>、C<sub>11</sub> 键进行  $\alpha$ -裂解生成含 D 环的离子  $m/z$  124 (**b**, 基峰):



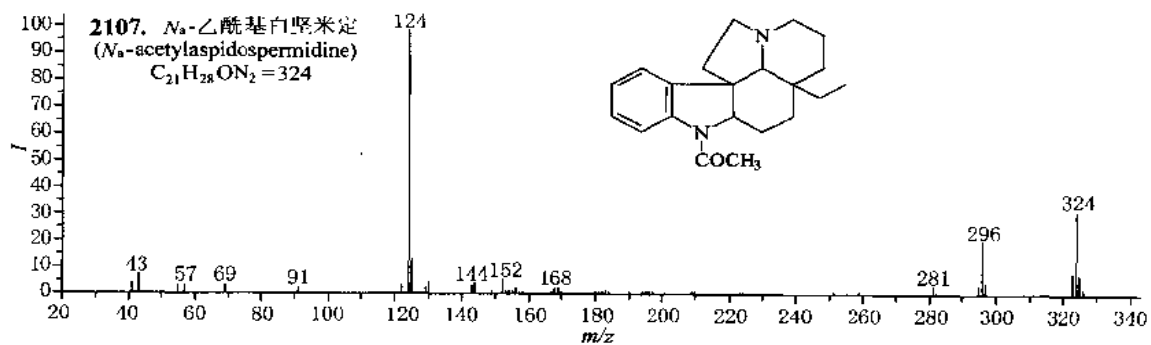
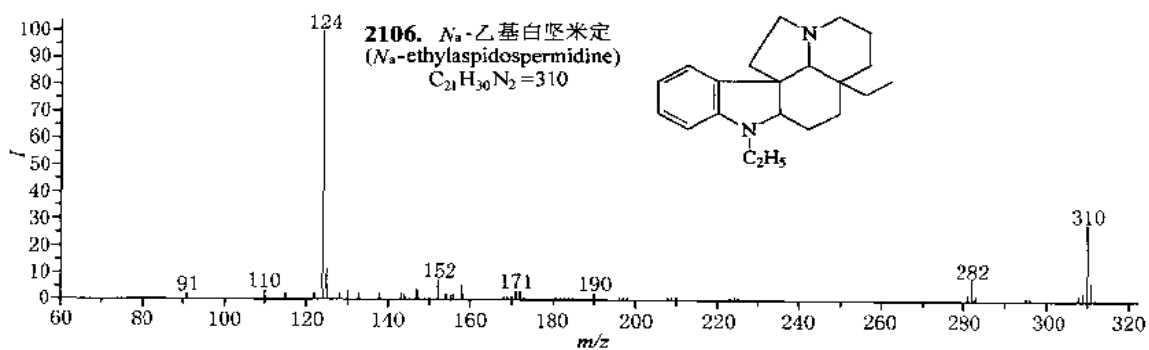
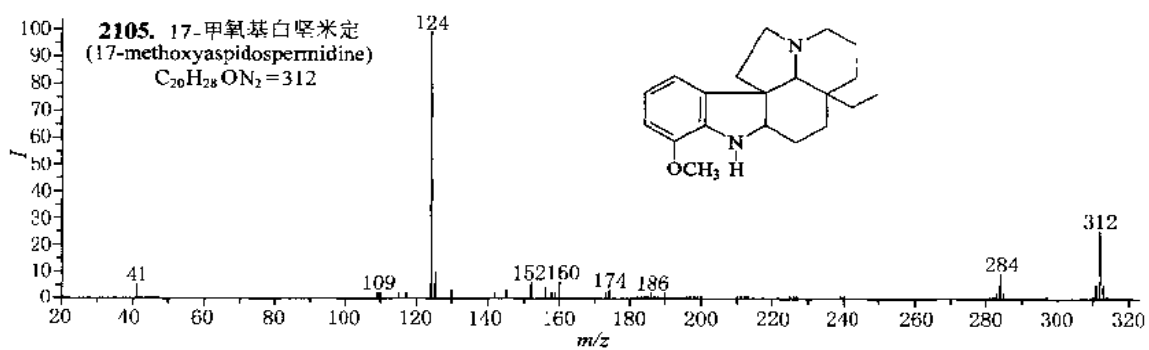
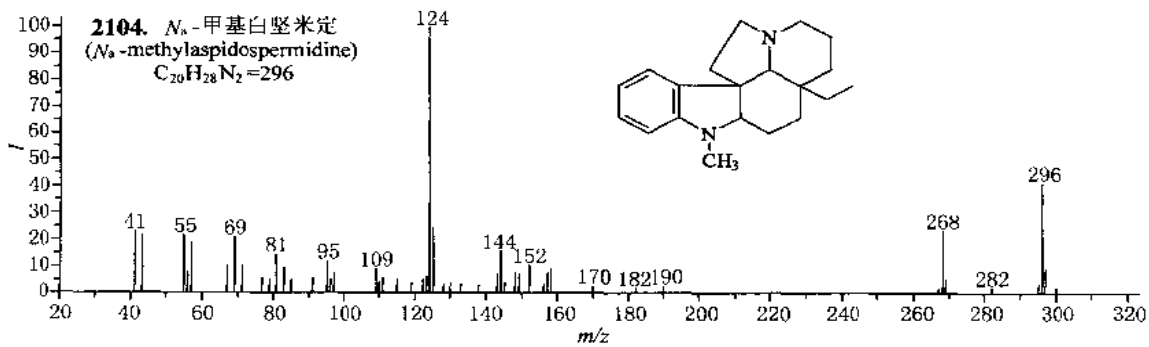
C<sub>3</sub> 有取代的化合物 (2116, 2117), 不影响上述裂解方式, 当 R<sup>4</sup>=OH 时, 第一步裂解是 M-44 (**a**), 当 R<sup>4</sup>=COOCH<sub>3</sub> 时, 第一步裂解是 M-86 (**a**)。

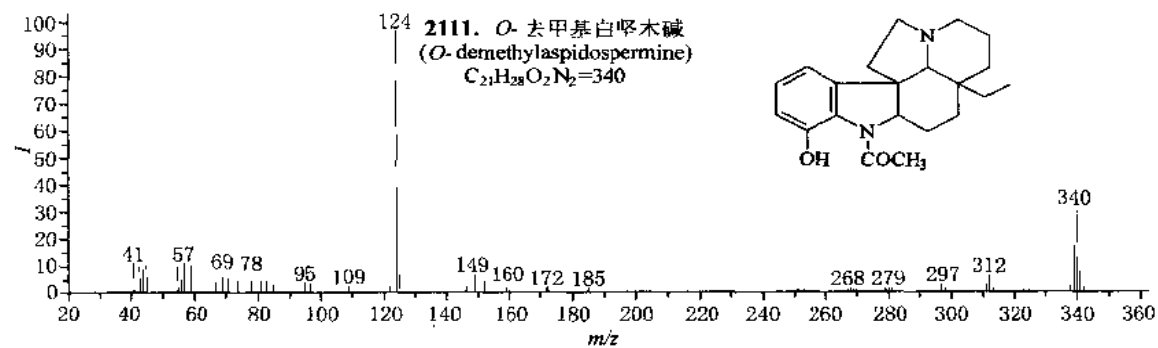
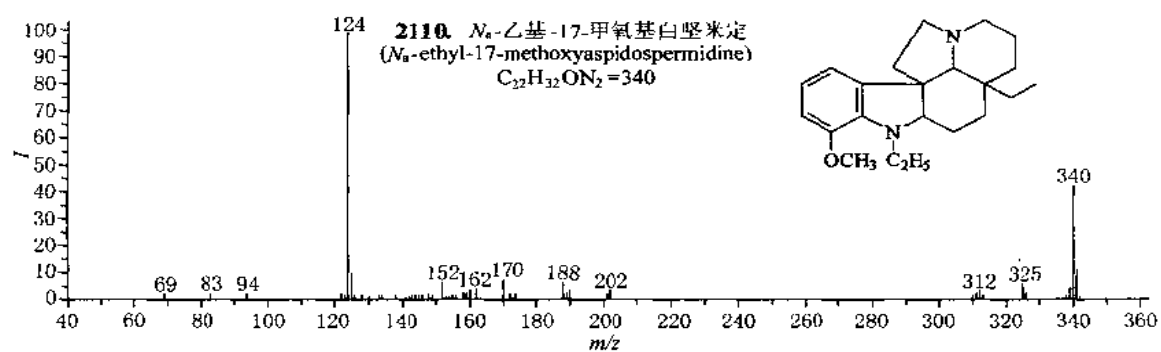
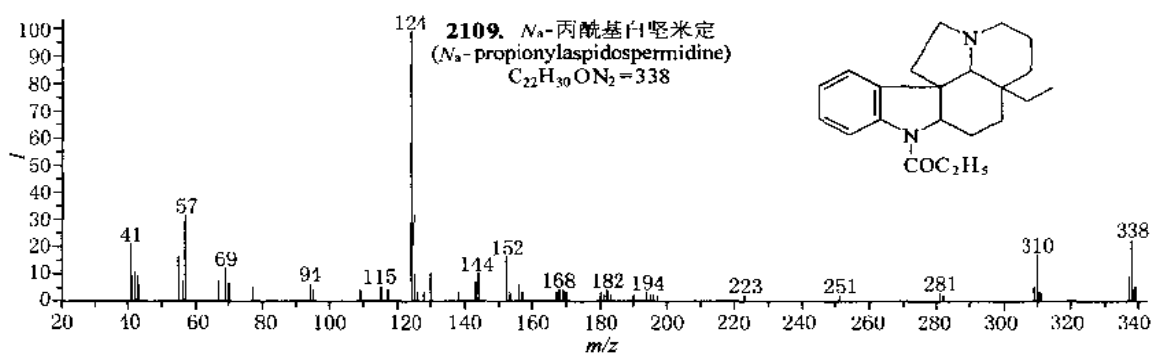
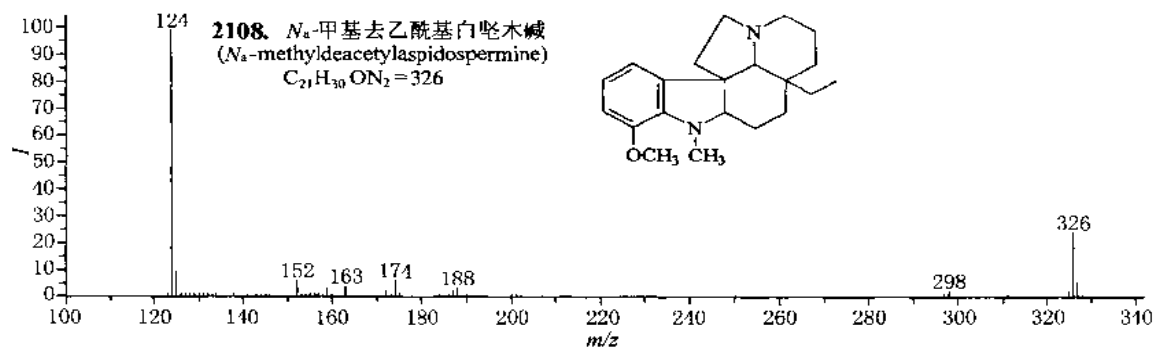
C<sub>21</sub> 有羟基取代 (R<sup>6</sup>=OH, 2118~2121) 时, 也不影响上述裂解方式, 第二步裂解所得的离子 **b** 是  $m/z$  140。C<sub>21</sub> 是甲酸甲酯 (2122~2128, 2130) 时, 除上述裂解方式外, 又增加了 M-74 的离子 **c**, 这是由于甲酸甲酯中的羰基引起的侧链麦氏重排裂解失去了 CH<sub>2</sub>=C(OH)OCH<sub>3</sub> 产生的。来自 D 环的离子 **b** 则移到了  $m/z$  168, C<sub>20</sub> 再增加一个羟基时 (R<sup>5</sup>=OH), 离子 **b** 移到了  $m/z$  184, 而离子 **c** 变成了 M-90。C<sub>20</sub>-羟基还能引起  $\alpha$ -裂解产生离子 **d** (M-89), 它比产生离子 **c** 时少失一个氢原子。

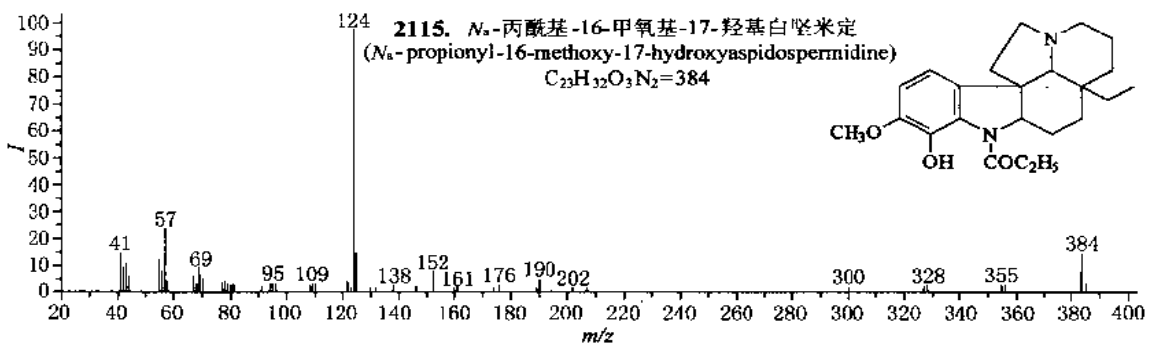
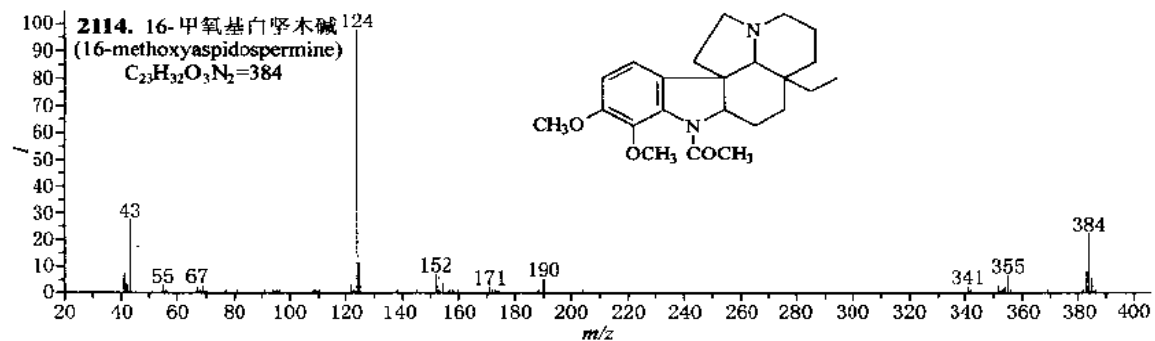
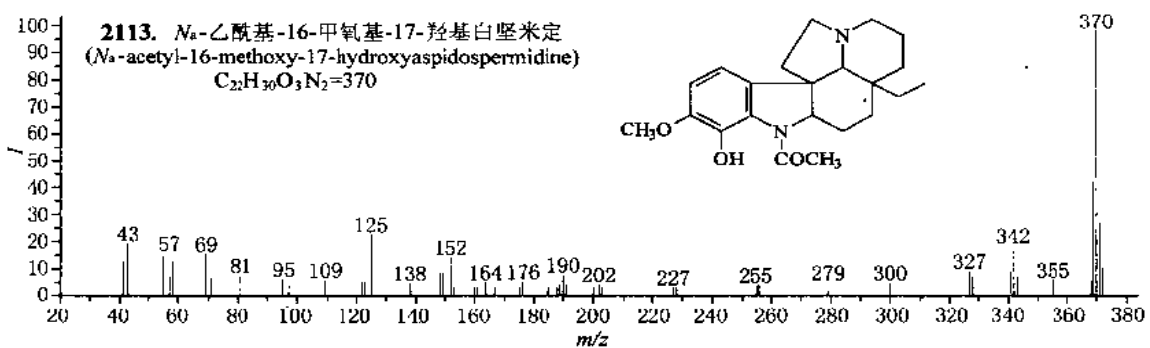
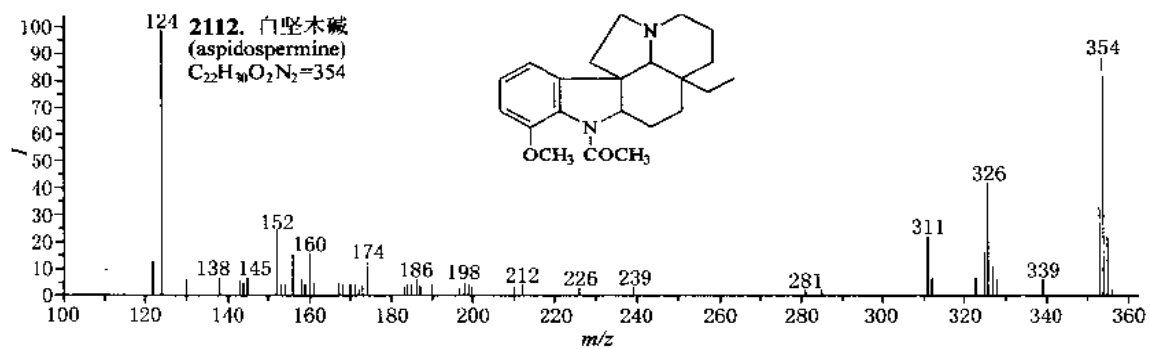
C<sub>6</sub>、C<sub>7</sub> 有双键的 2, 3-二氢他波索宁 (2130) 的基峰是离子  $m/z$  135, 它可能比离子 **b** 再多一碳原子, 而离子 **b** ( $m/z$  122) 降为中等强度, 离子 **a** 则为  $m/z$  252。

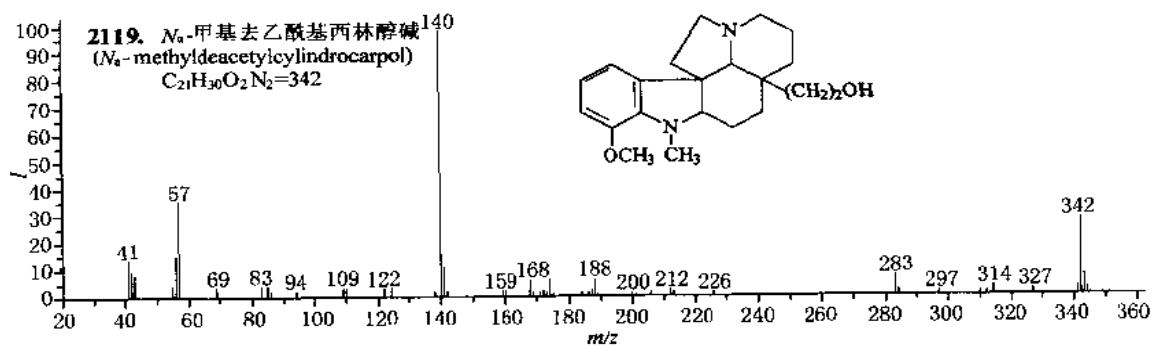
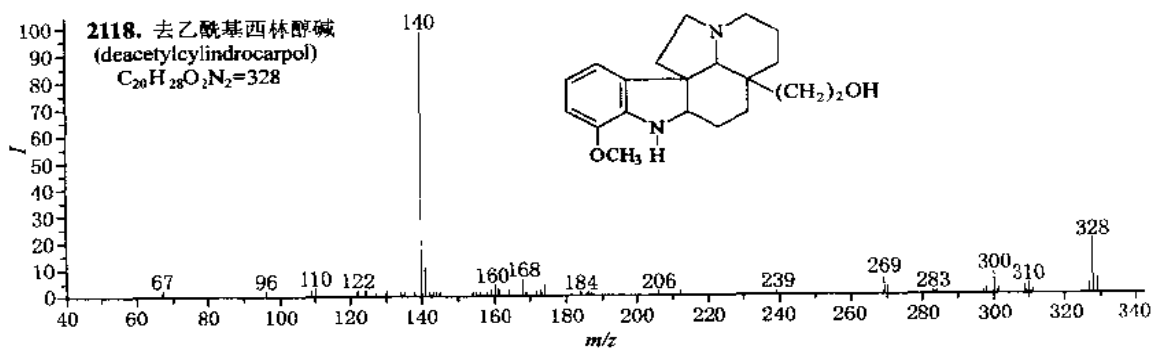
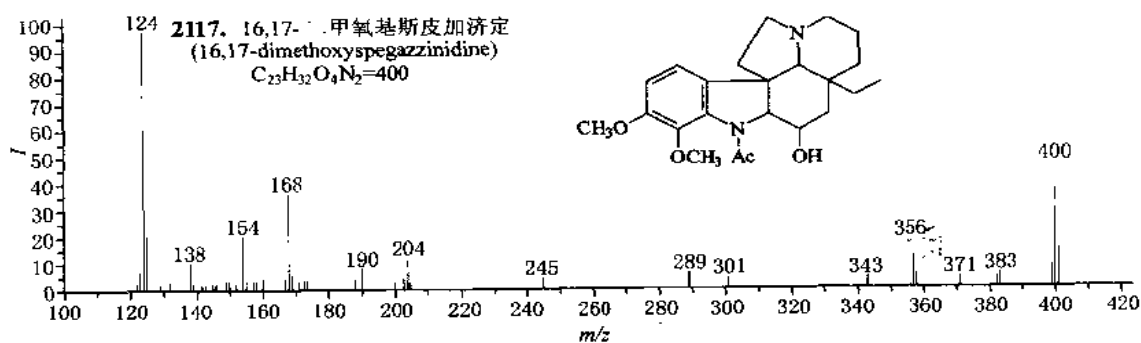
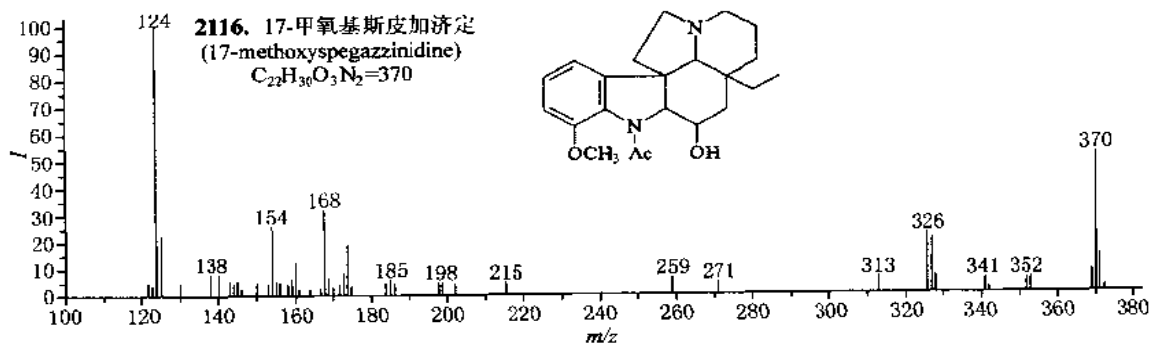
C<sub>10</sub> 为羰基的化合物 (2129), 由于 N<sub>b</sub> 的碱性降低不易失去电子, 产生离子 **b** 的裂解消失, 主要离子是失去 N<sub>a</sub> 的乙酰基并转移 1 个氢原子, 产物是 M-42 ( $m/z$  370)。

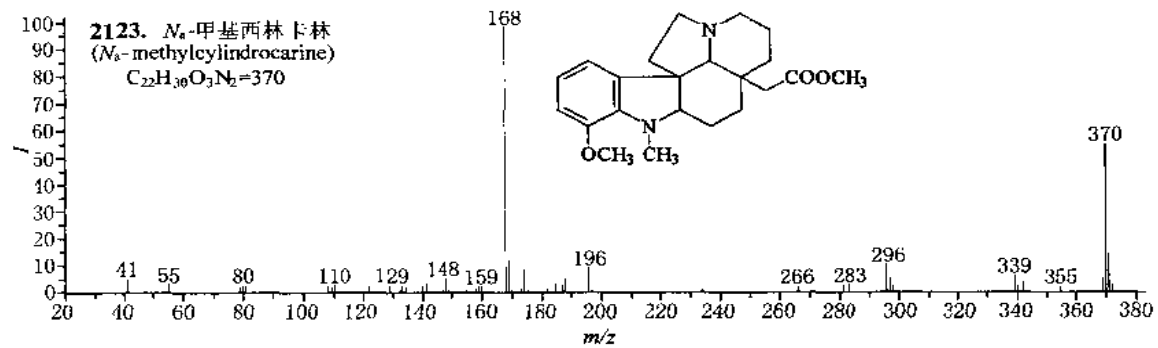
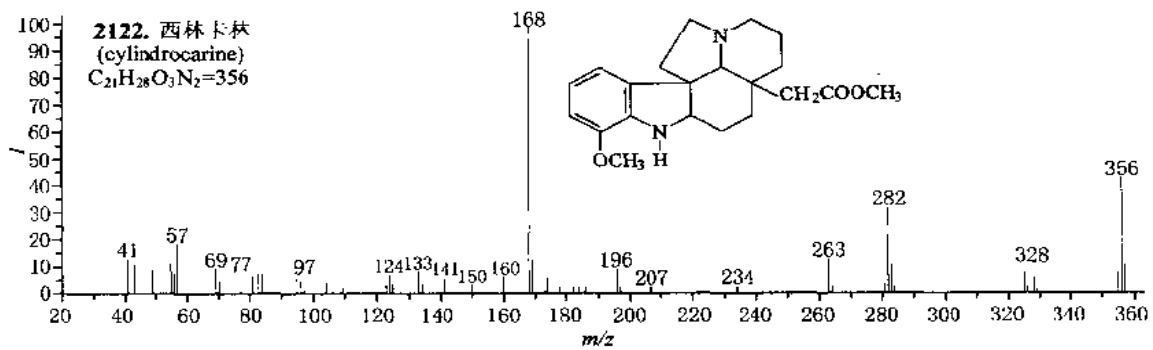
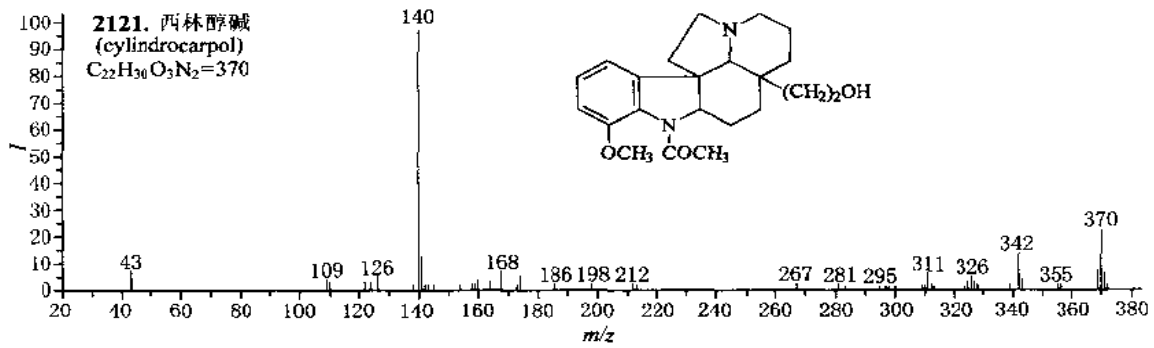
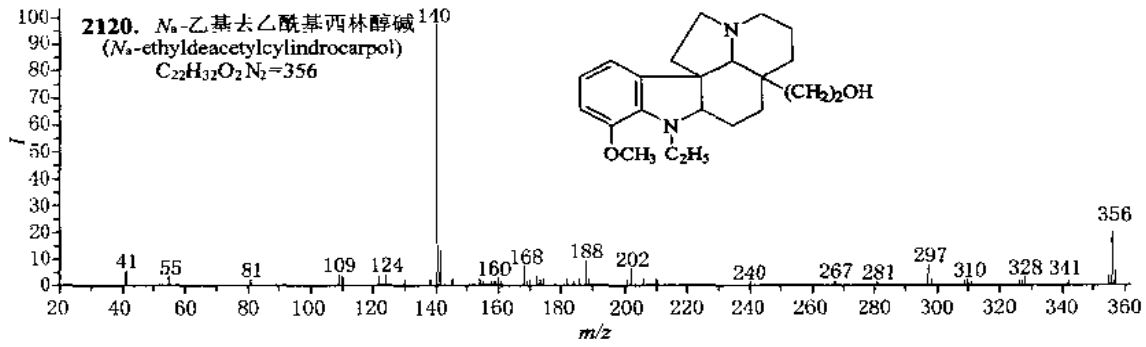
C<sub>2</sub>、C<sub>3</sub> 有双键的化合物 (2131~2135), 可因 C 环的 RDA 裂解, 也产生强的离子 **b**, 这些离子是  $m/z$  124 (R<sup>5</sup>=R<sup>6</sup>=H), 140 (R<sup>5</sup>=OH, R<sup>6</sup>=H) 和 138 (R<sup>5</sup>=O)。16-甲氧基米诺文辛 (2135) 的离子  $m/z$  244 是离子 **b** ( $m/z$  138) 的互补离子, 另有因乙酰基存在 (R<sup>5</sup>=O) 而引起的离子  $m/z$  43 较强。



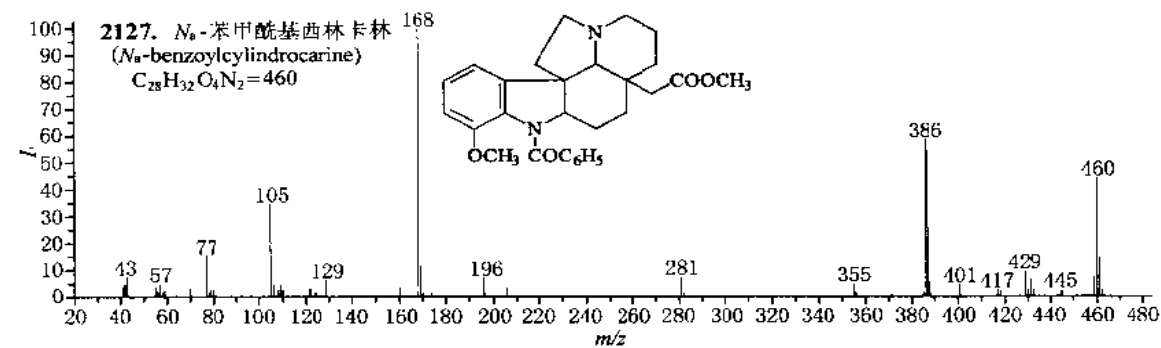
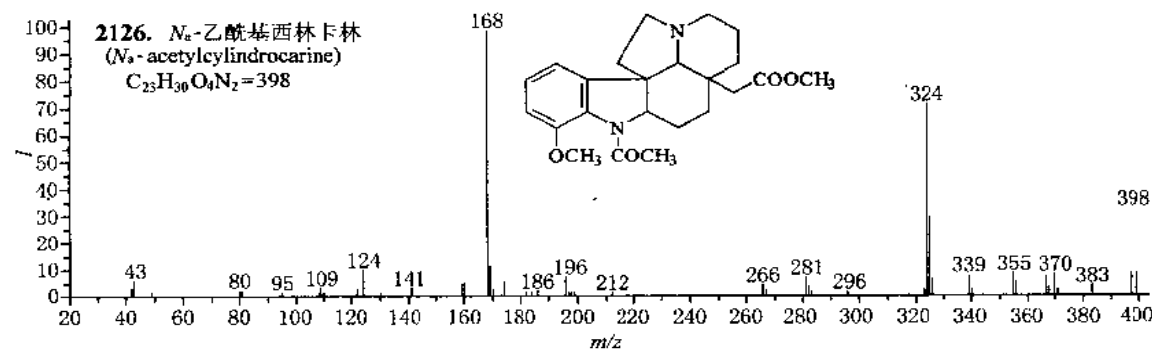
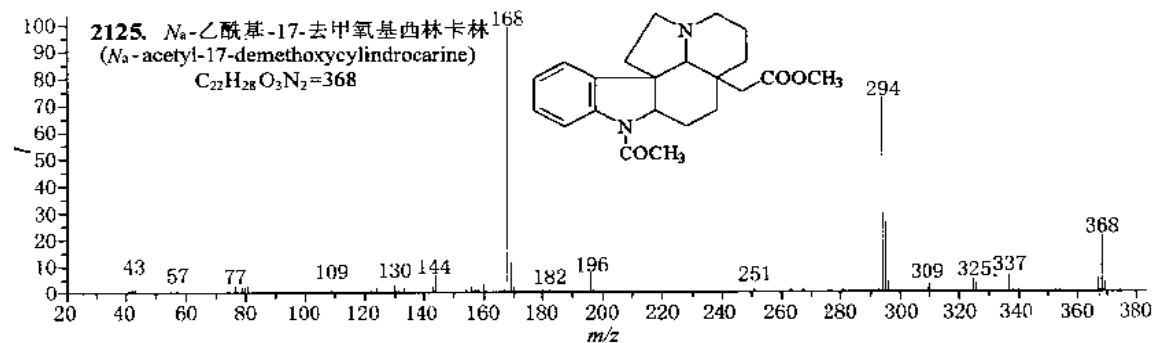
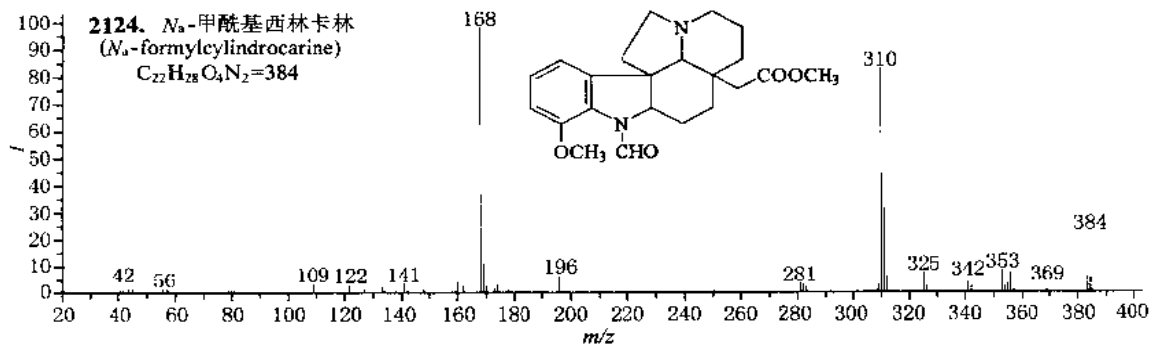


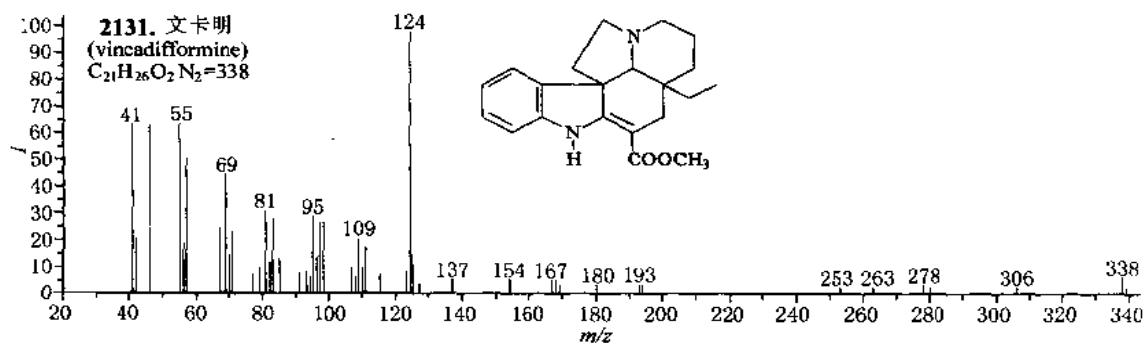
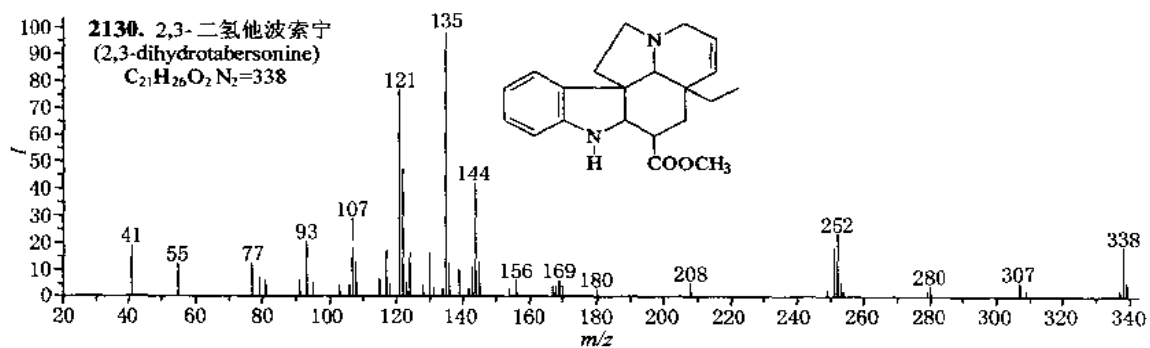
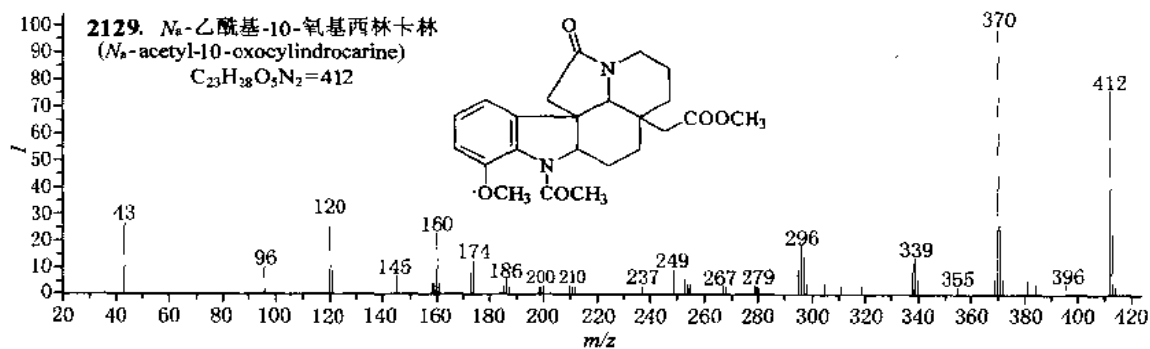
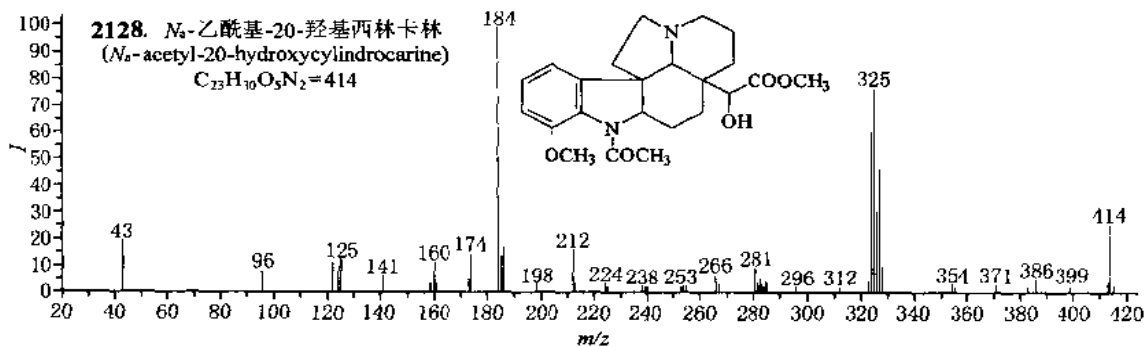


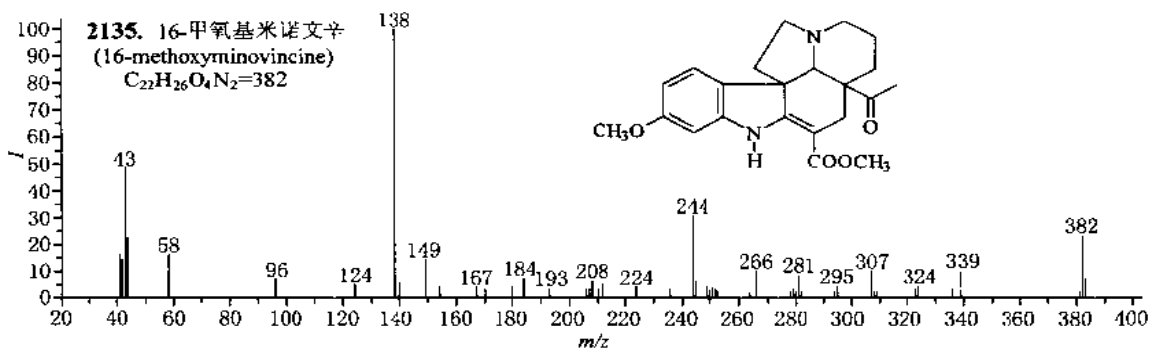
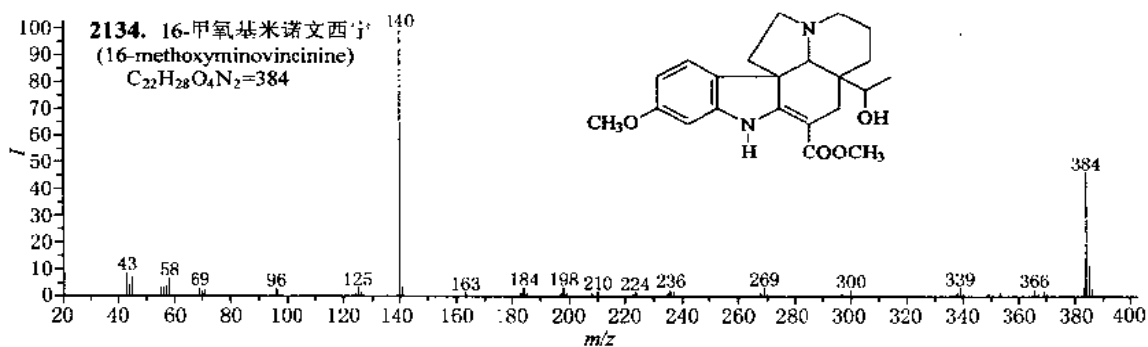
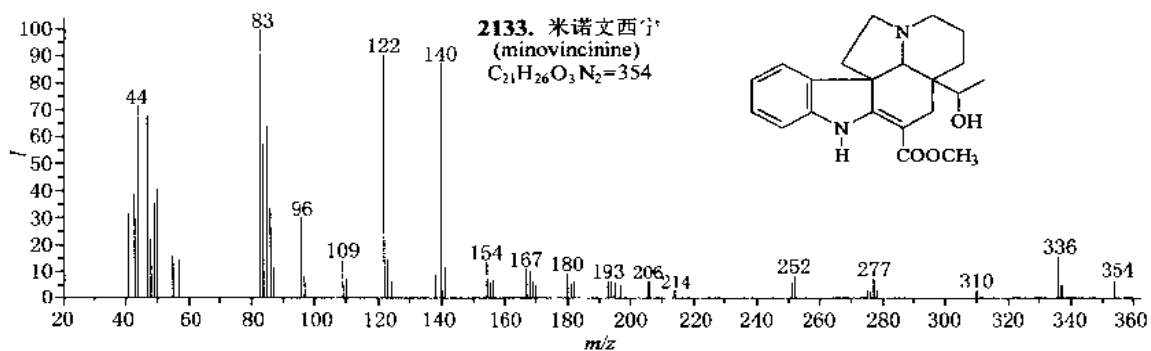
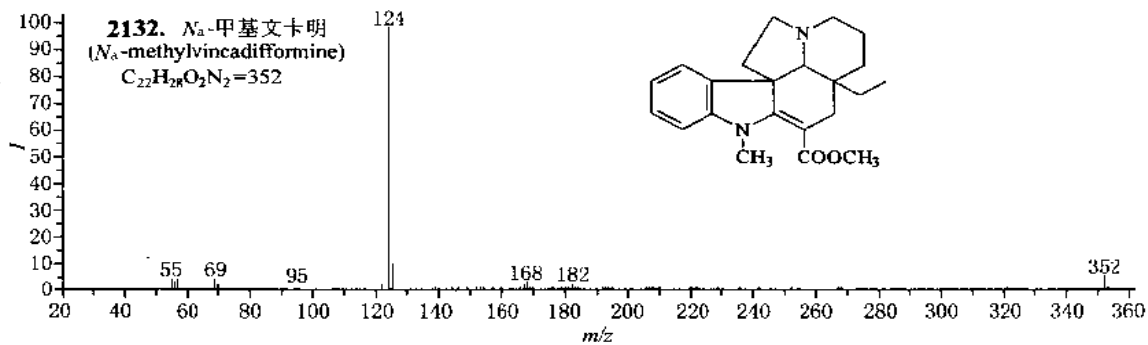






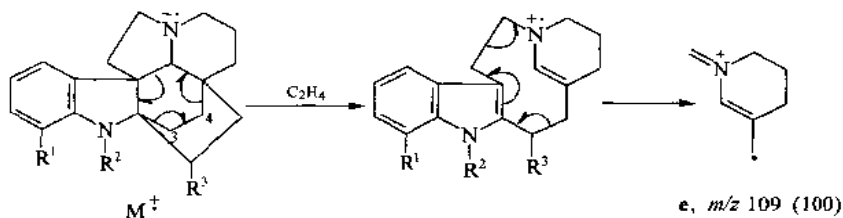




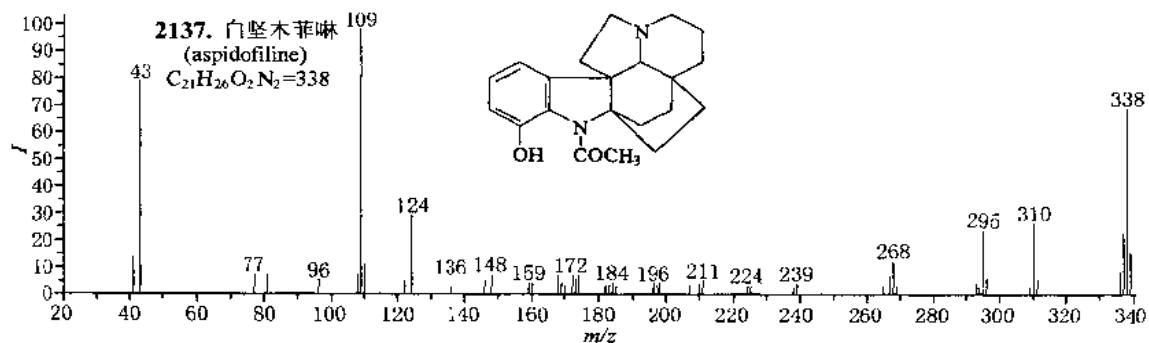
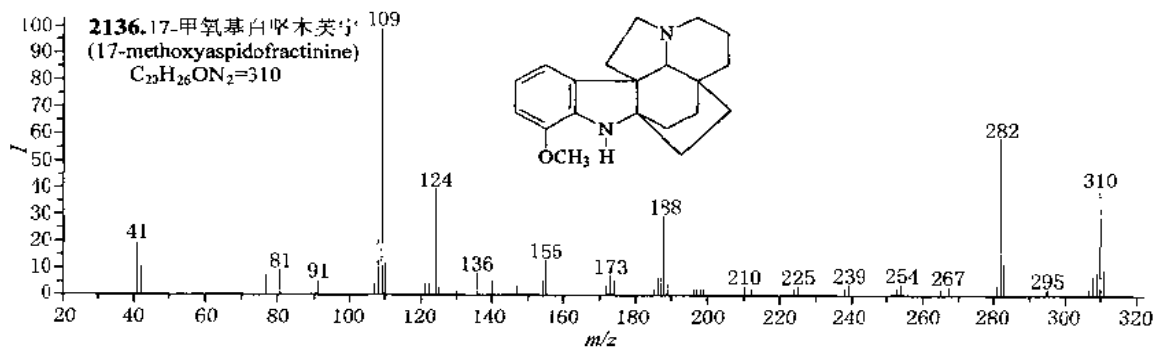
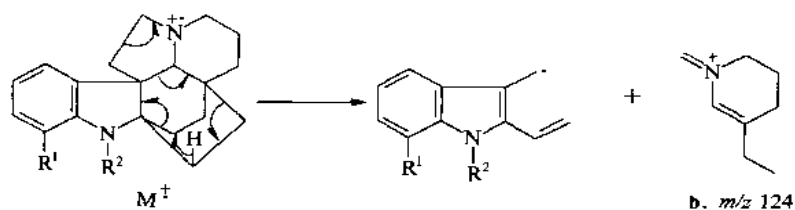


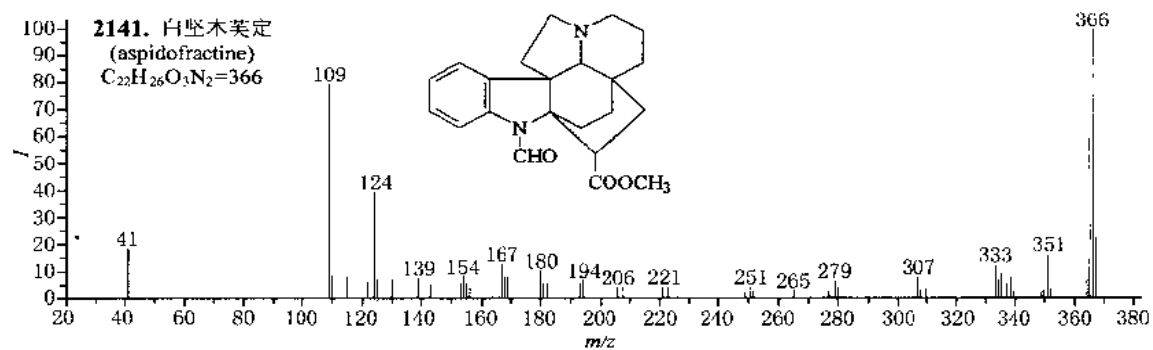
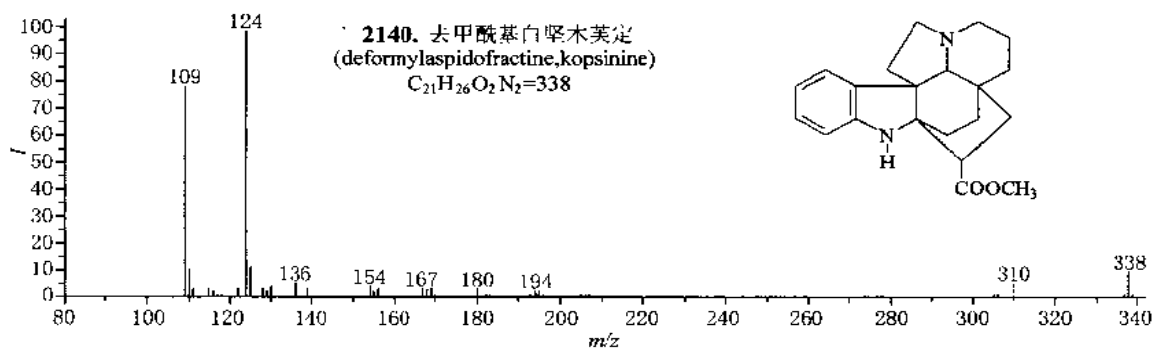
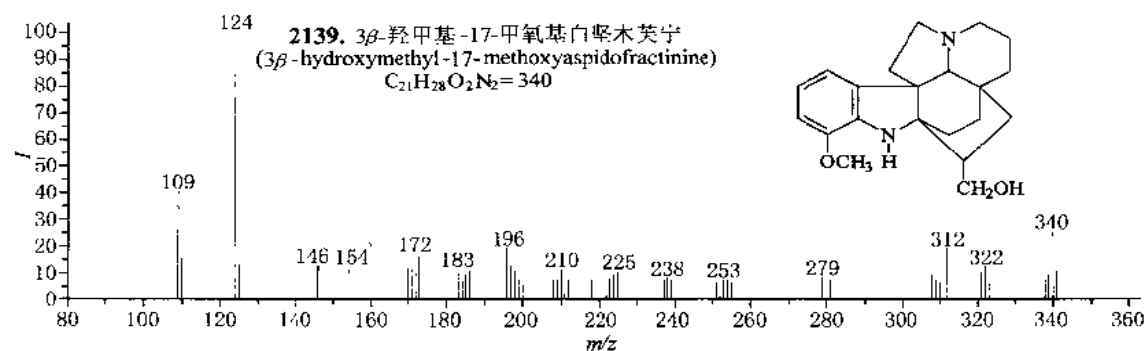
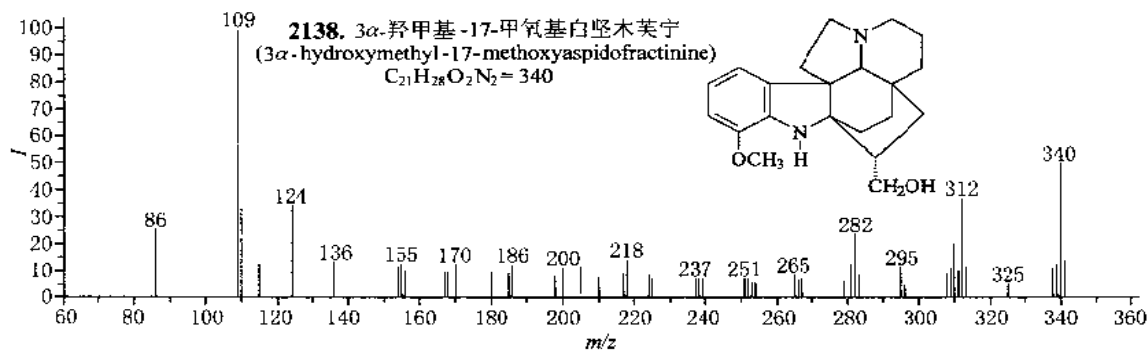
## 二、白坚木美宁类

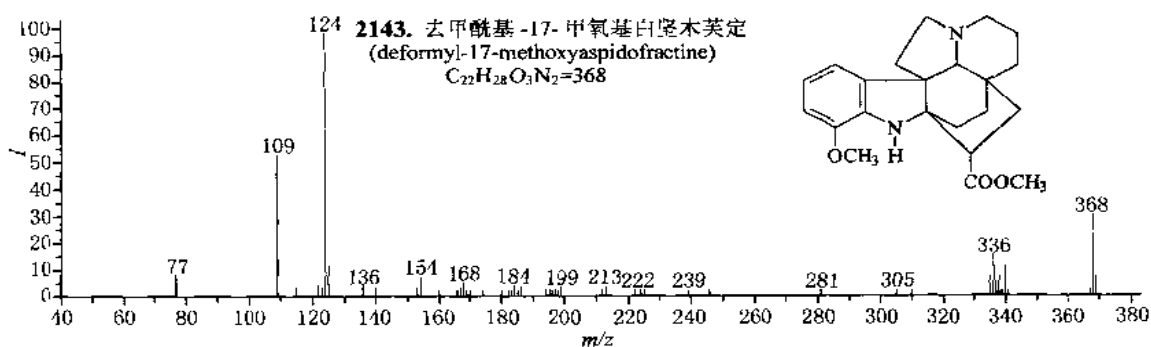
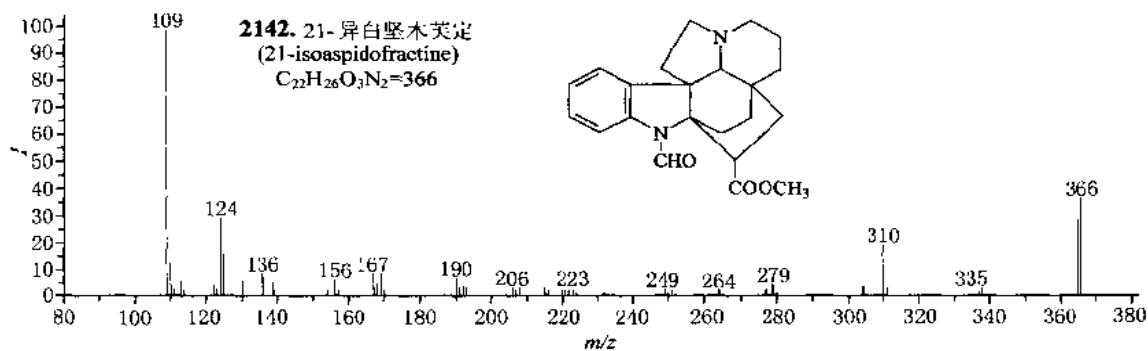
这类生物碱 (2136~2143) 的第一步裂解同上, 也是失去  $C_3$ 、 $C_4$ , 然后如下所示的裂解得基峰离子 **e**,  $m/z$  109:



离子  $m/z$  124 (**b**) 的产生方式如下:

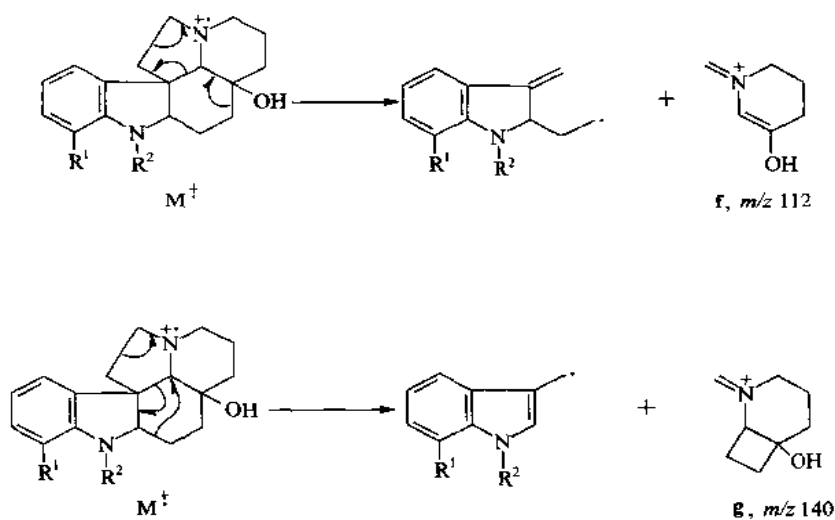


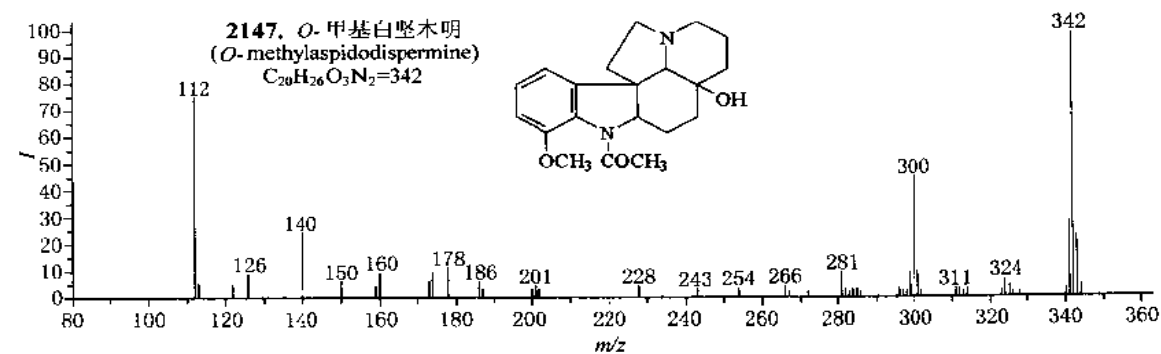
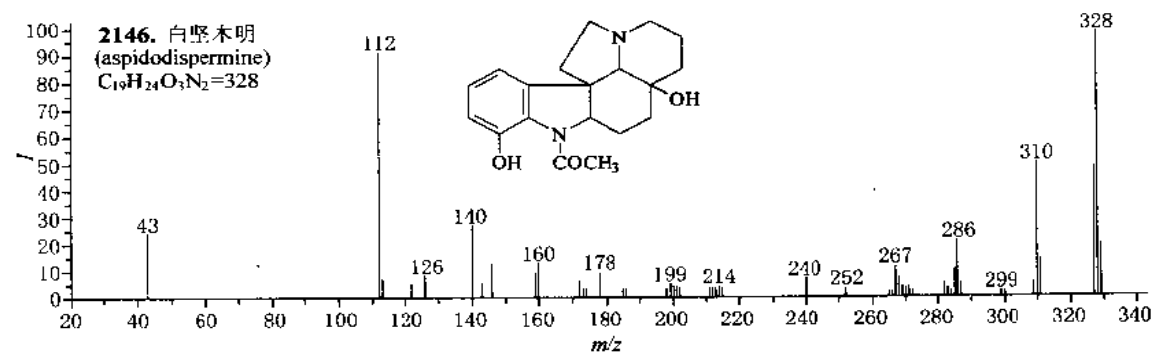
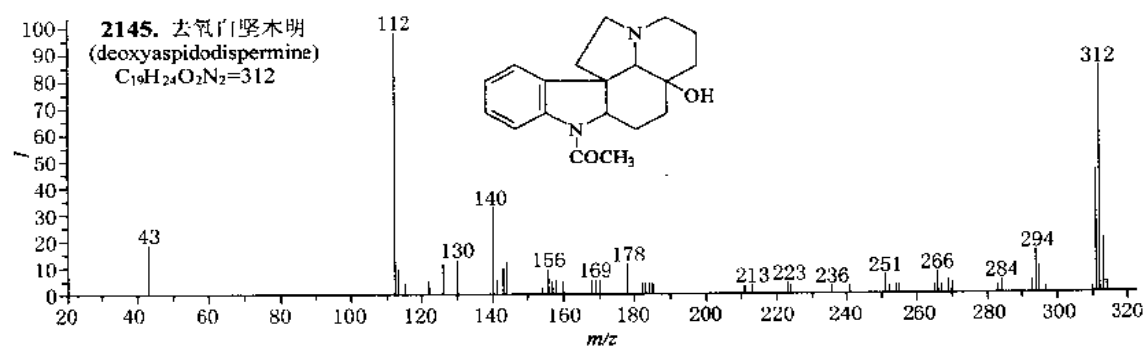
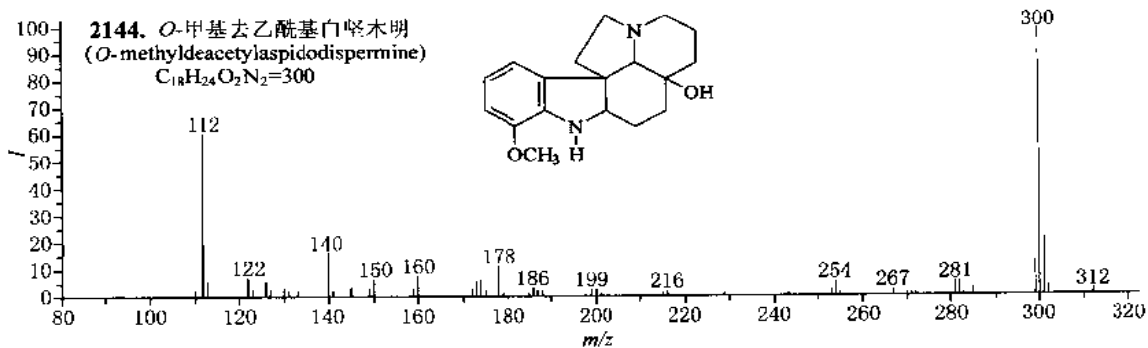




### 三、白坚木明类

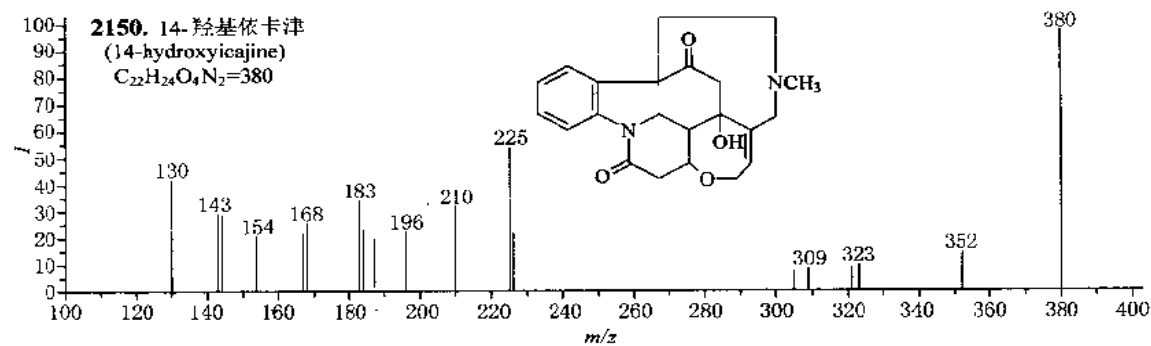
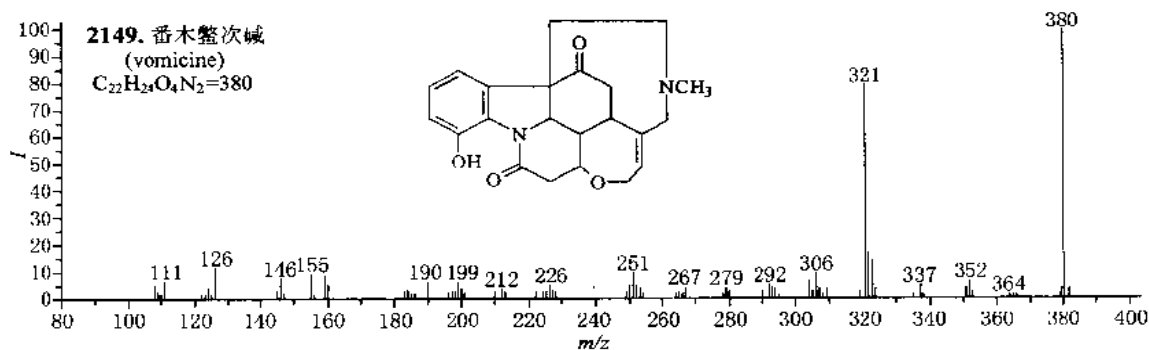
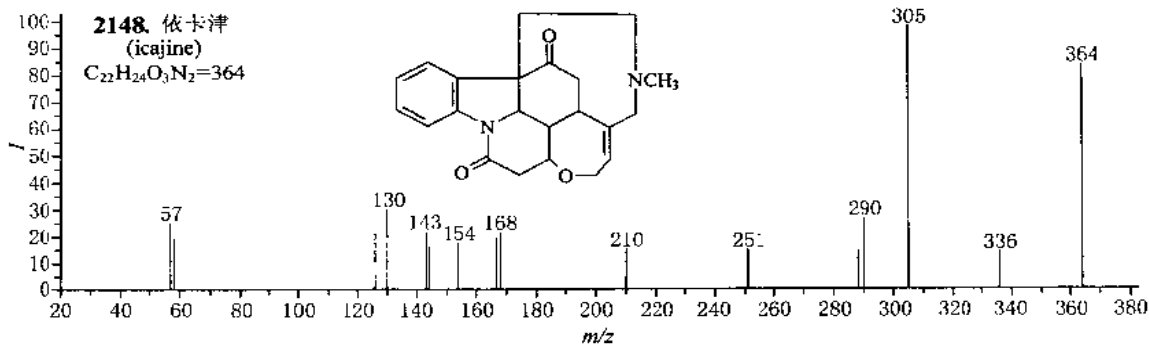
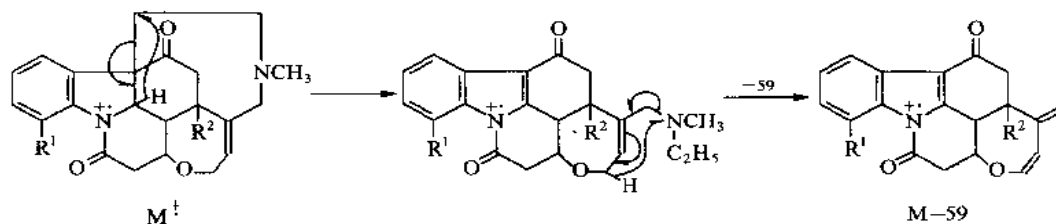
这类生物碱 (2144~2147) 的  $M-H_2O$  离子有一定强度, 但主要裂解是产生离子  $m/z$  112 (f) 和 140 (g):





## 四、马钱子碱生物碱类

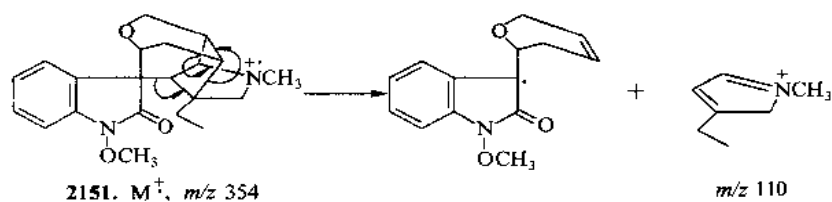
依卡津 (2148) 和番木鳖次碱 (2149) 都有很强的 M-59 离子, 14-羟基依卡津 (2150) 的这个离子较弱, 这个离子的产生方式如下:



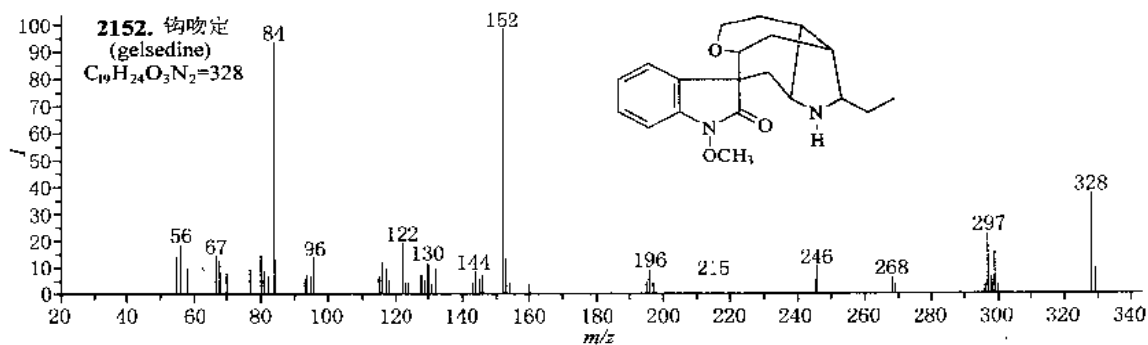
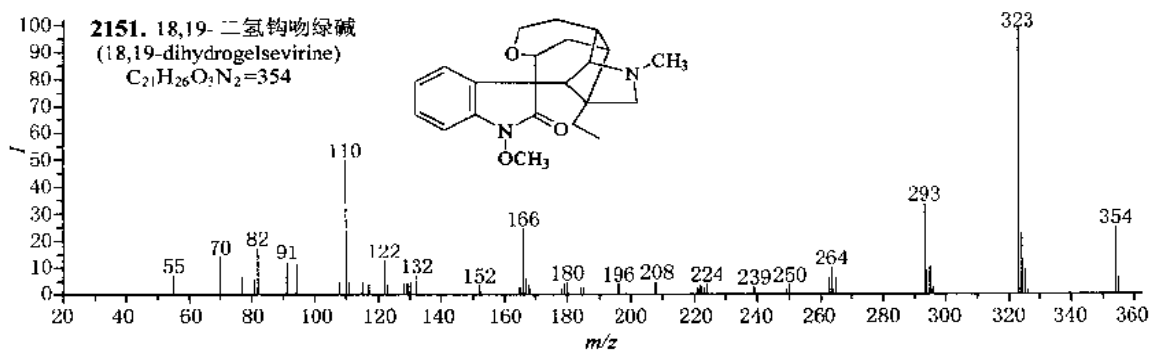
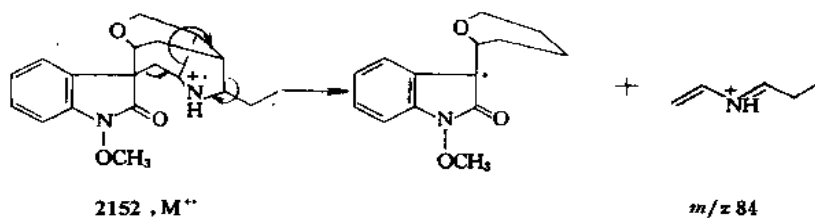
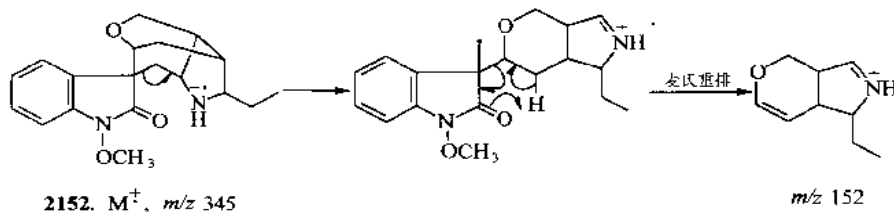


五、C<sub>2</sub> 氧化吲哚生物碱类

18,19-二氢钩吻绿碱 (2151) 的特征离子是  $m/z$  110, 产生方式如下:

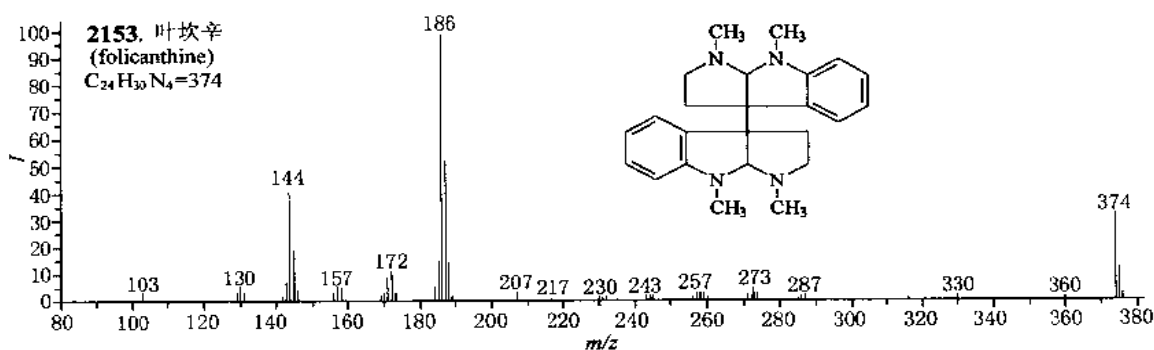


钩吻定 (2152) 的特征离子是  $m/z$  152 和  $m/z$  84, 产生方式如下:



## 六、四氢吡咯吲哚类

这类生物碱中的叶坎辛 (2153) 的主要裂解是分子离子 ( $m/z$  374) 的对半裂解和转移氢原子的对半裂解, 分别得离子  $m/z$  187 和  $m/z$  186, 两者分别再失去  $\text{CH}_3\text{N}=\dot{\text{C}}\text{H}$ , 即得中强离子  $m/z$  145 和  $m/z$  144。

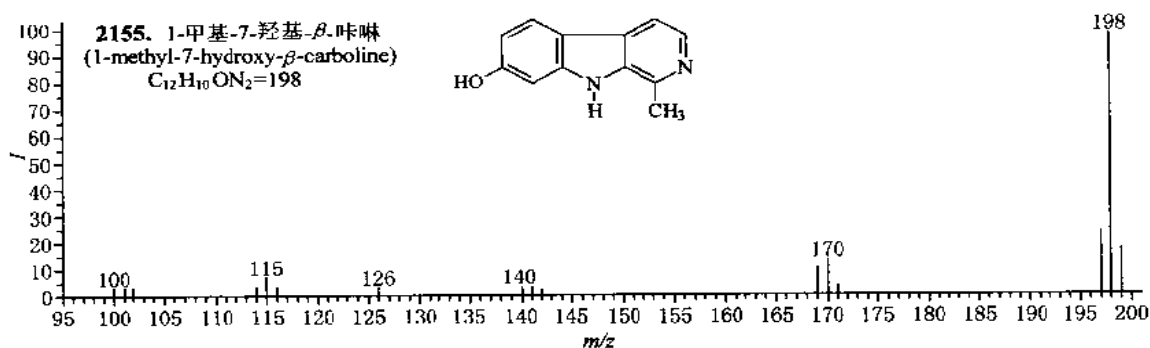
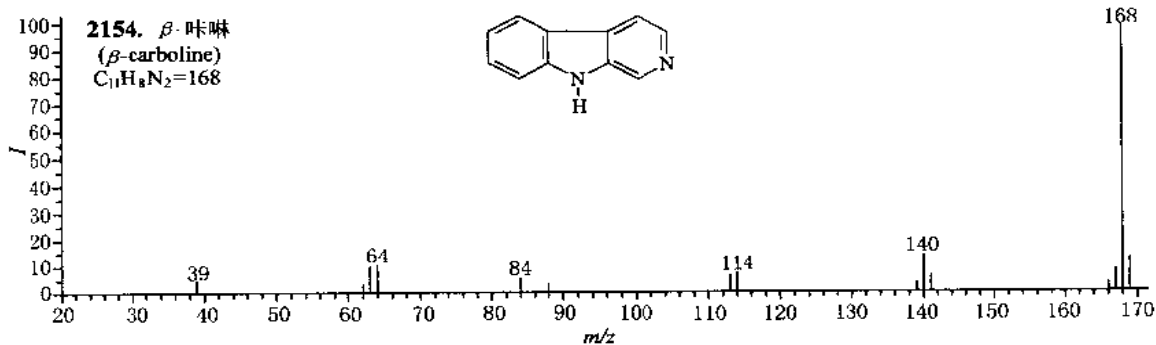


## 第三节 $\beta$ -咔啉生物碱与四氢- $\beta$ -咔啉生物碱类

### 一、 $\beta$ -咔啉生物碱类

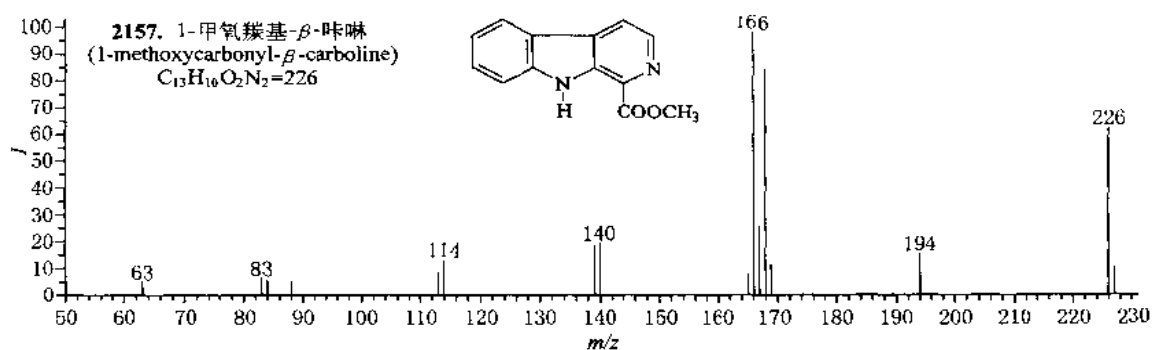
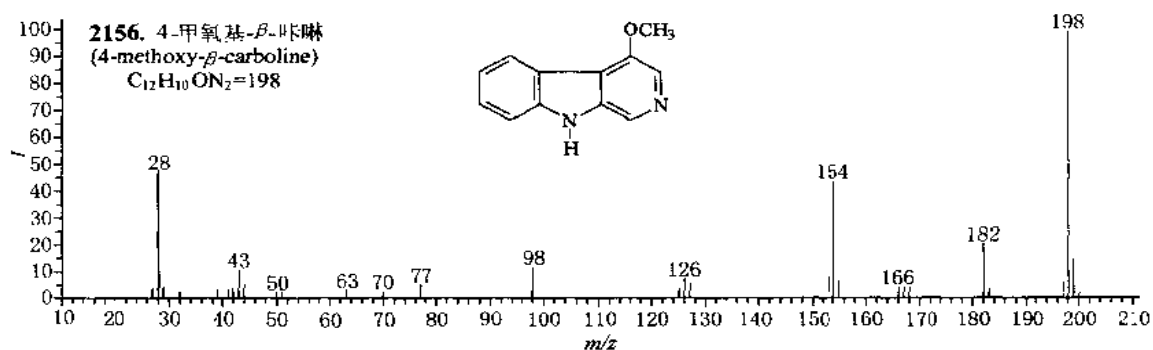
(1)  $\beta$ -咔啉 (2154) 自身的裂解途径是  $\text{M}-\text{CHN}-\text{H}$  和  $\text{M}-\text{CHN}-\text{CHN}-\text{H}$ 。

(2) 1-甲基-7-羟基- $\beta$ -咔啉 (2155) 的裂解途径是  $\text{M}-\text{H}-\text{CHN}-\text{H}$ ,  $\text{M}-\text{CO}$  的裂解也存在。



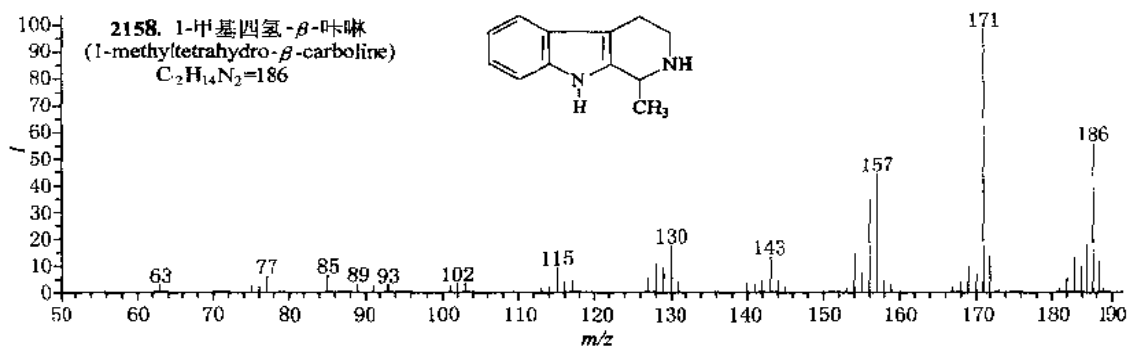
(3) 4-甲氧基- $\beta$ -咔啉 (2156) 的裂解途径是  $M-CH_3-CO$ 。

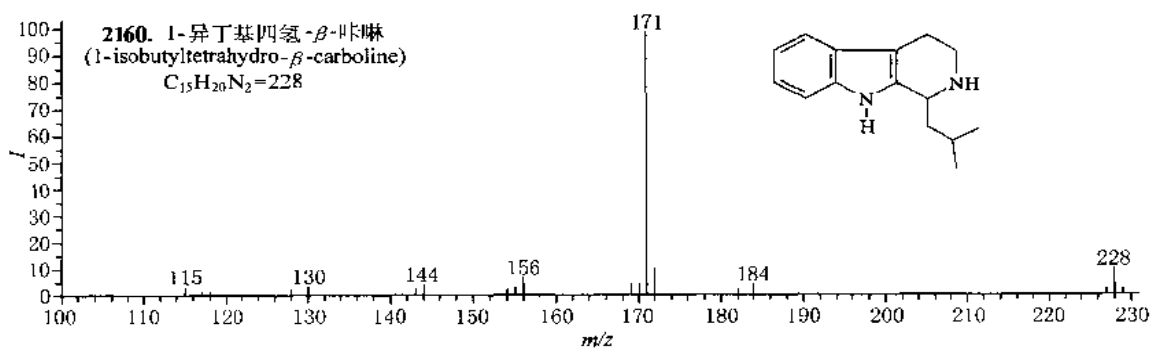
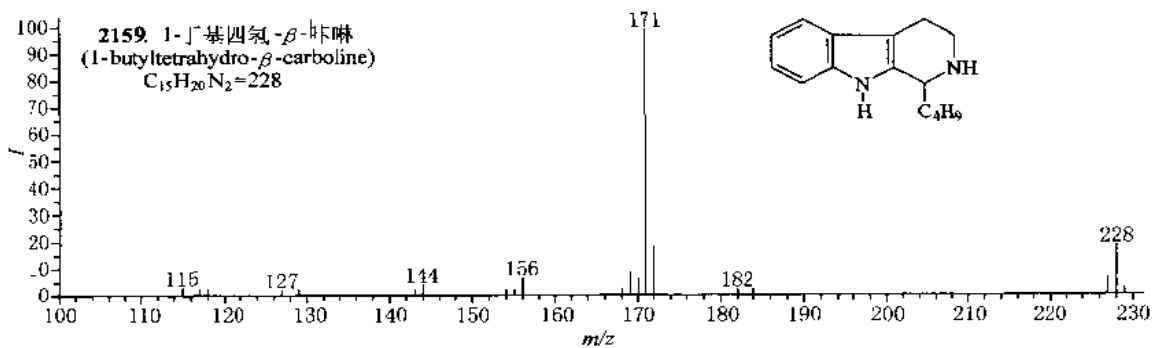
(4) 1-甲氧羰基- $\beta$ -咔啉 (2157) 能失去甲醇, 然后失一氧化碳, 也能一步失去  $COOCH_3$ 。



## 二、四氢- $\beta$ -咔啉生物碱类

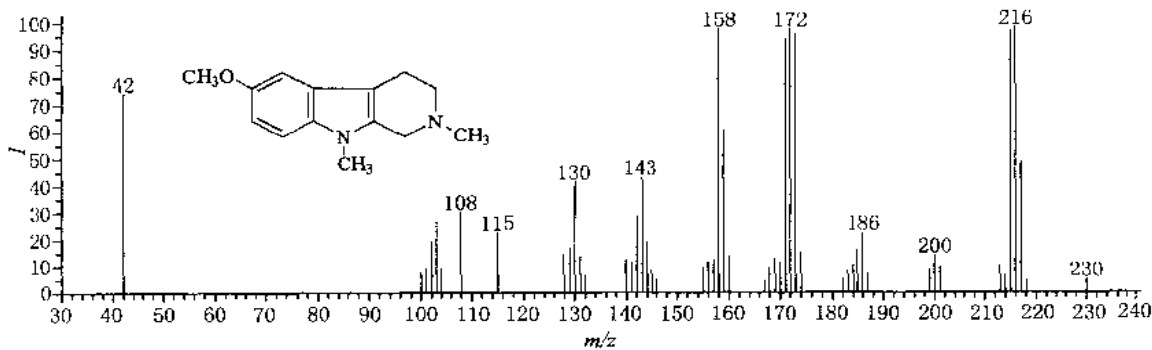
1-烷基取代的四氢- $\beta$ -咔啉类 (2158~2161) 的主要裂解是失去 1-烷基, 1-甲基四氢- $\beta$ -咔啉 (2158) 还能进行 C 环的 RDA 裂解失去  $CH_2=NH$ 。





**2161.**  $N_a, N_b$ -二甲基-6-甲氧基四氢- $\beta$ -咔啉 ( $N_a, N_b$ -dimethyl-6-methoxytetrahydro- $\beta$ -carboline)

$C_{14}H_{18}ON_2=230$



## 第四节 四环、五环四氢- $\beta$ -咔啉生物碱

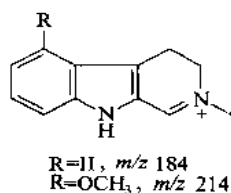
### 一、四环四氢- $\beta$ -咔啉生物碱类

(1) 毛茛因 (2162) 的主要碎片离子有 2 个, 即  $m/z$  225 和  $m/z$  223, 前者是直接失去侧链的产物, 后者来自  $M-H$  离子再进行侧链双键的麦氏重排裂解失去侧链的产物。

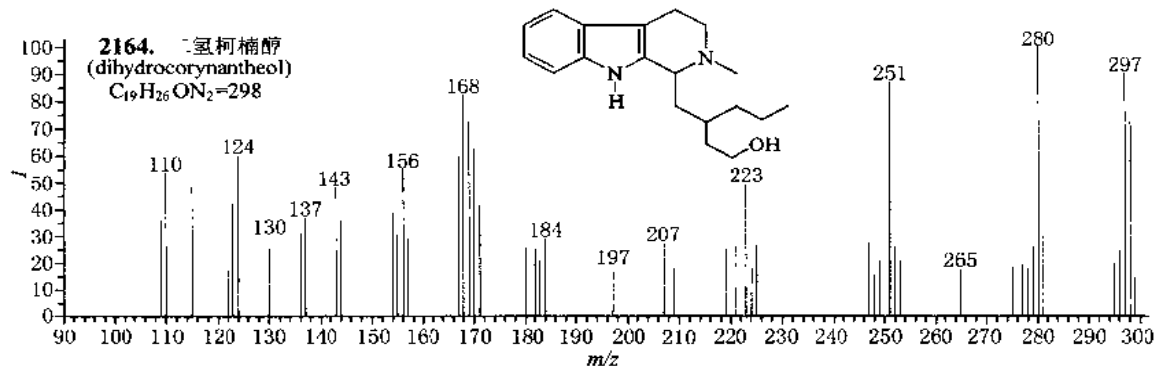
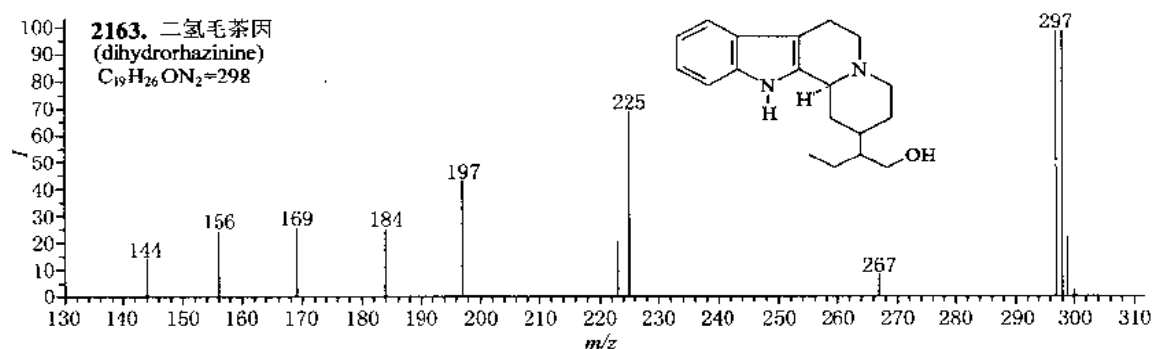
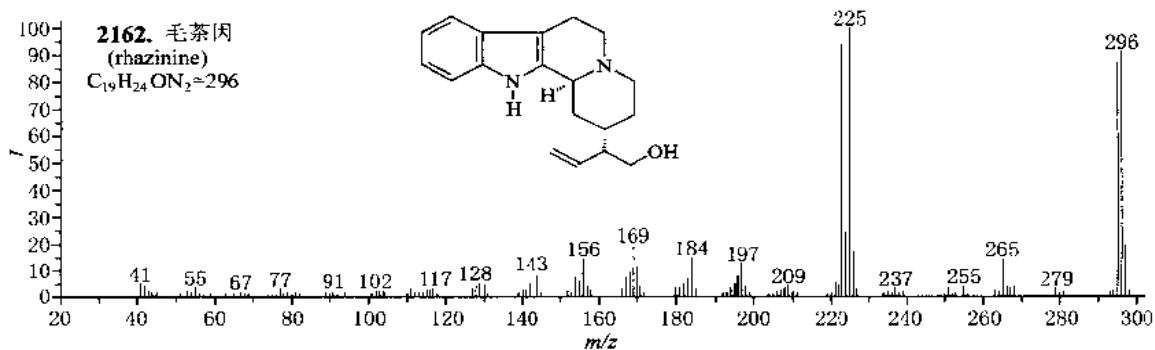
(2) 二氢毛茛因 (2163) 的离子  $m/z$  225 很强, 这也是分子离子直接失去侧链的产物, 因为侧链没有双键, 所以不能进行麦氏重排裂解, 离子  $m/z$  223 就弱多了。

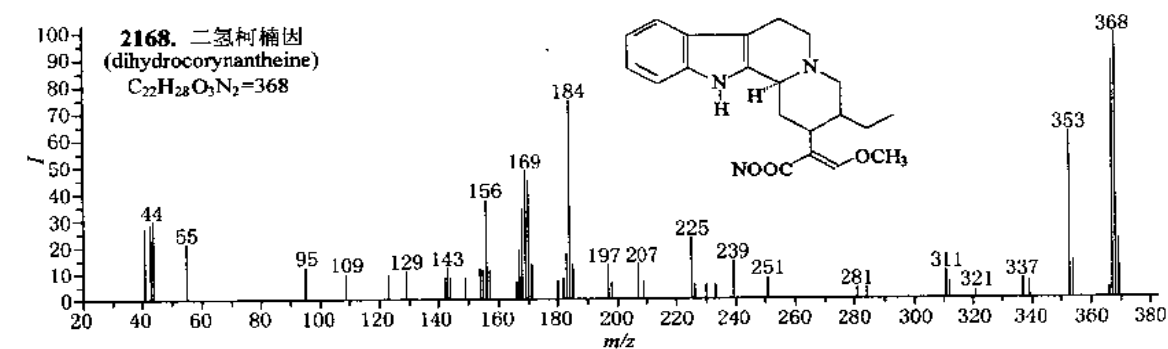
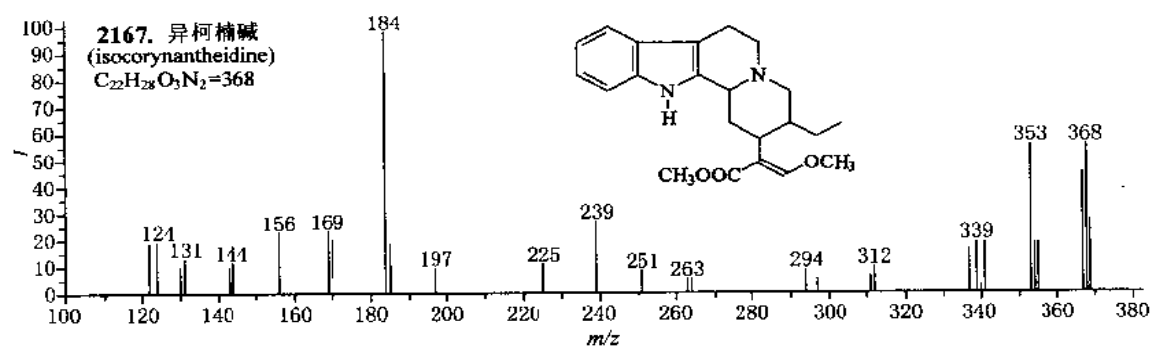
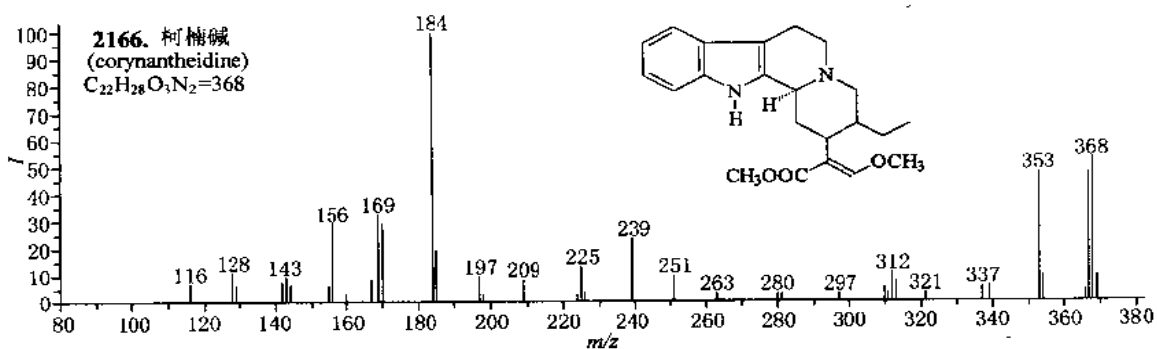
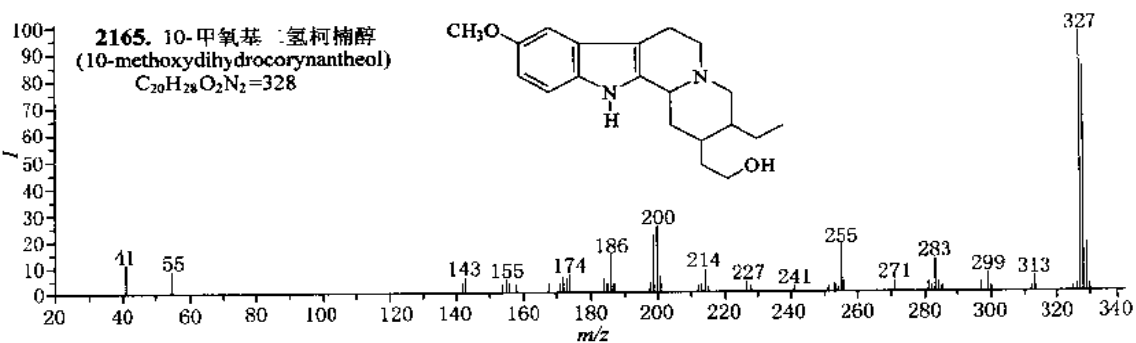
(3) 二氢柯楠碱类 (2164, 2165) 的裂解途径是  $M-CH_2CH_2OH-C_2H_4$ 。

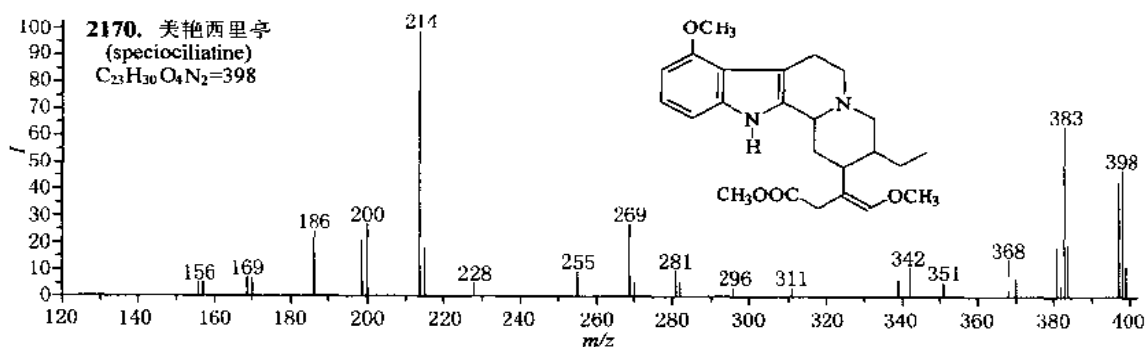
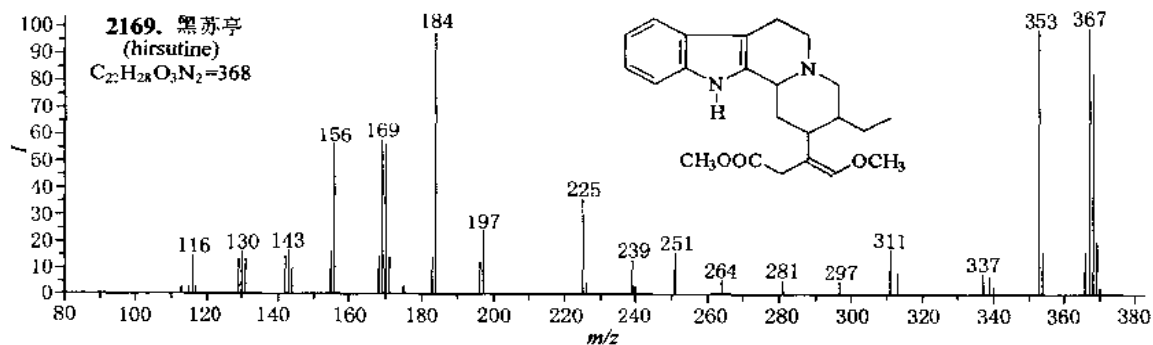
(4) 柯楠碱 (2166)、异柯楠碱 (2167)、二氢柯楠因 (2168)、黑苏亨 (2169) 和美艳西里亭 (2170) 都有强峰  $m/z$  184, 或再加一甲氧基的  $m/z$  214, 这个离子的结构如下:



以上四类化合物都有很强的 M-H 离子, 失去的氢原子主要来自 C<sub>3</sub> 位。

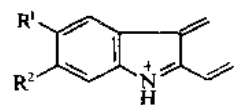




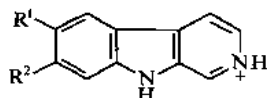


## 二、五环四氢- $\beta$ -咔啉生物碱类

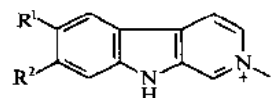
五环四氢- $\beta$ -咔啉生物碱类 (2171~2176) 的  $M-H$  离子也很强, 另有三个重要的碎片离子也来自四氢- $\beta$ -咔啉环:



$R^1=R^2=H$ ,  $m/z$  156  
 $R^1=R^2=OCH_3$ ,  $m/z$  216

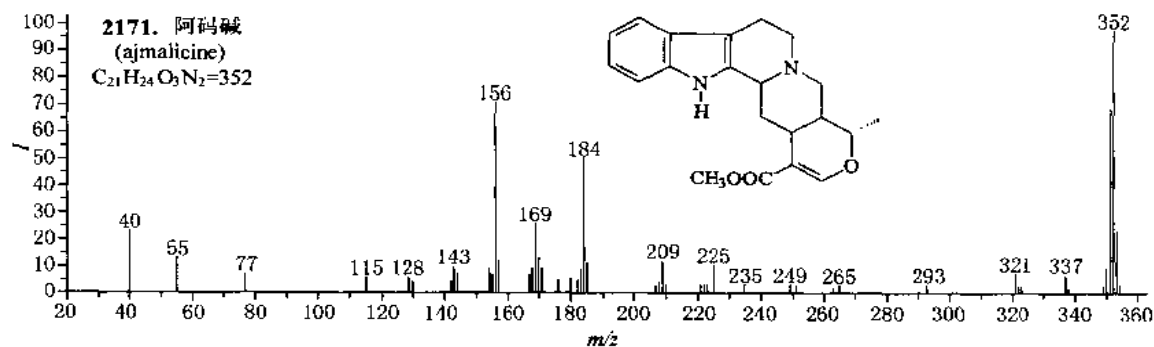


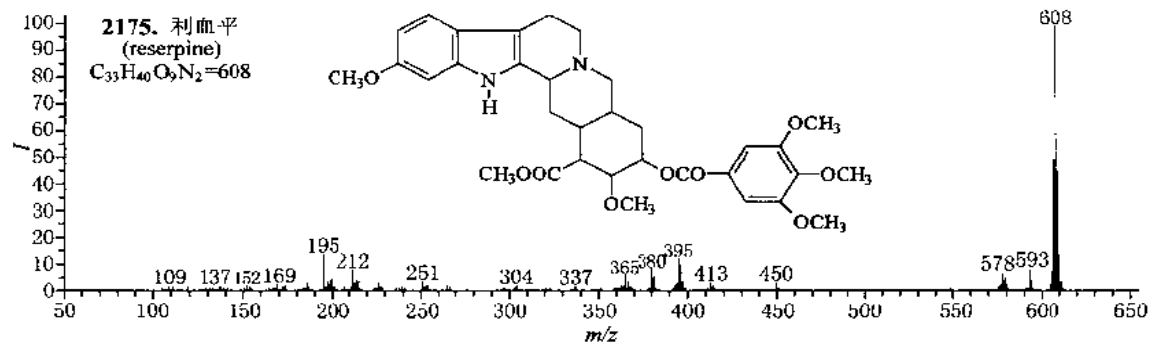
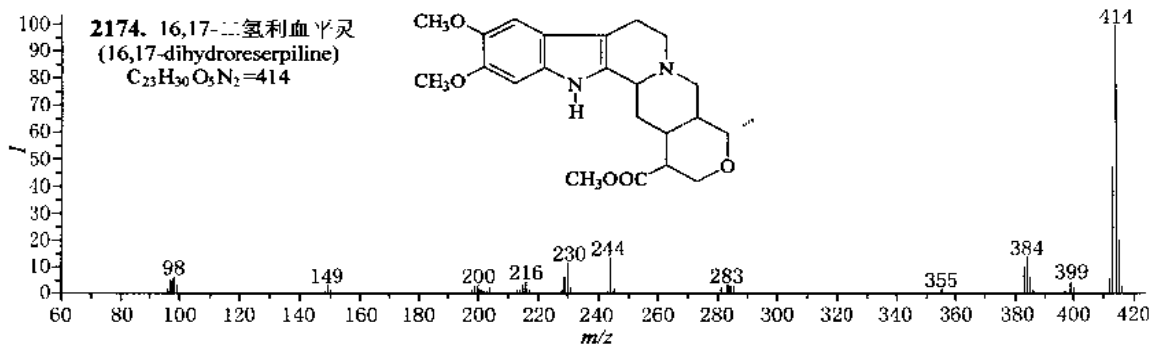
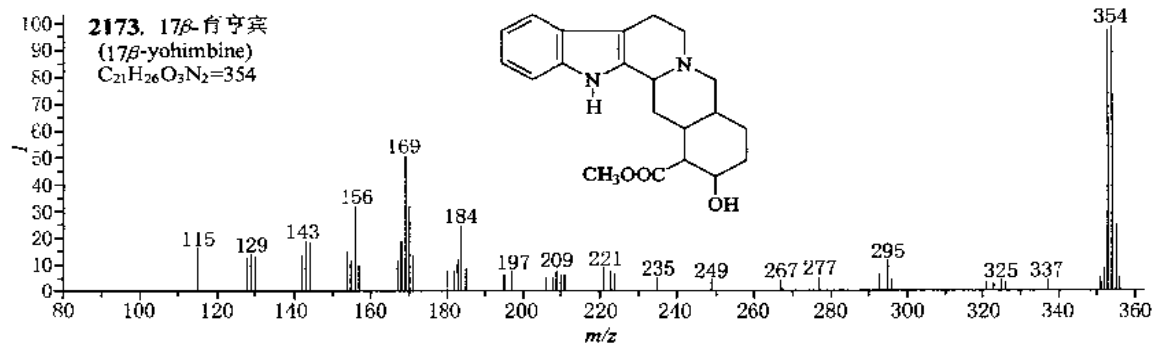
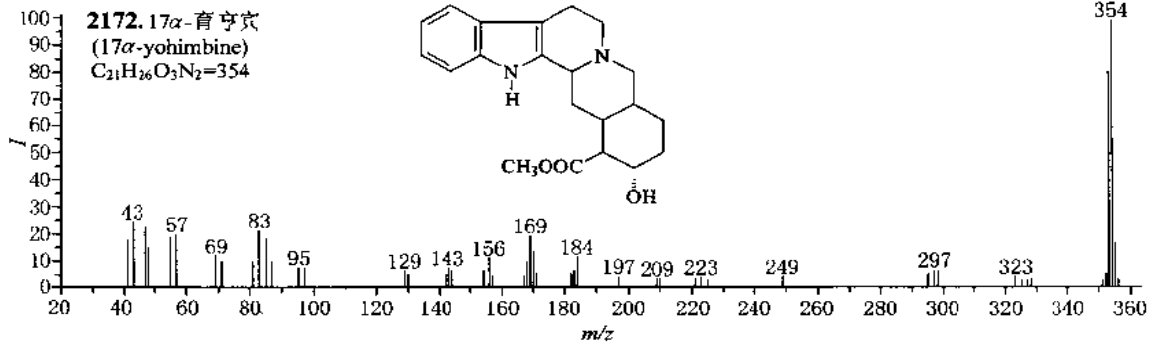
$R^1=R^2=H$ ,  $m/z$  169  
 $R^1=R^2=OCH_3$ ,  $m/z$  229



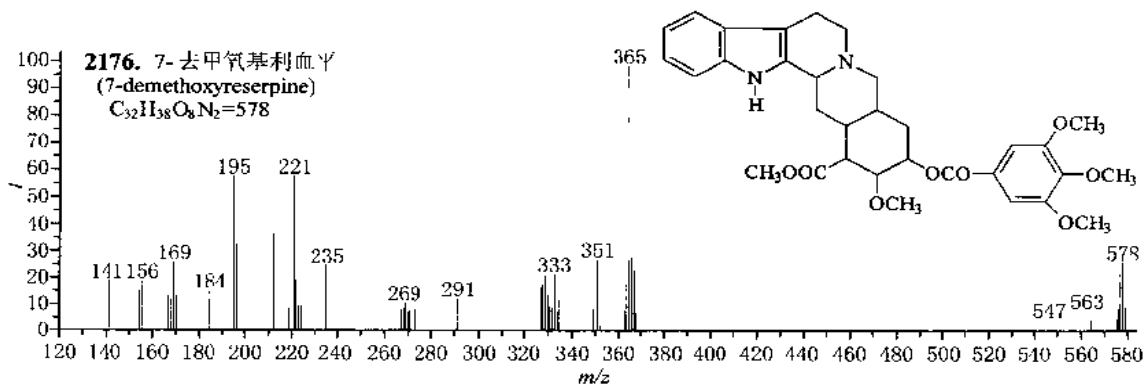
$R^1=R^2=H$ ,  $m/z$  184  
 $R^1=R^2=OCH_3$ ,  $m/z$  244

利血平类 (2175, 2176) 的裂解主要是失去羧酸并再失一个氢。





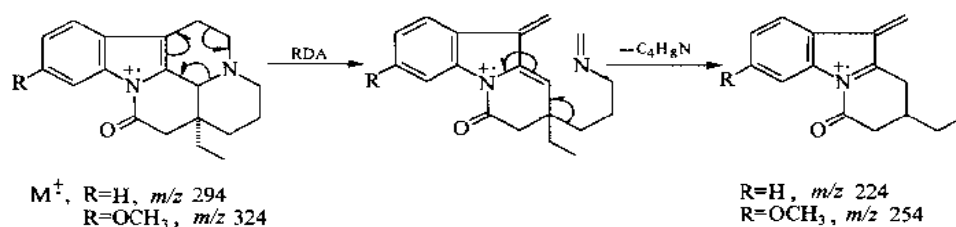




### 三、其他五环四氢- $\beta$ -咔啉生物碱类

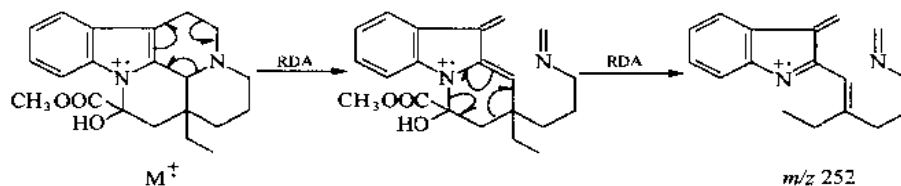
(1) 象牙胺 (2177) 自身的裂解有  $M-H$ ,  $M-H_2O$ ,  $M-C_2H_5$  和  $M-H_2O-C_2H_5$ , 主要是功能基的裂解。

(2) 象牙酮宁类 (2178, 2179) 除有  $M-H$ ,  $M-C_2H_5$  和  $M-C_2H_5-CO$  的功能基裂解外, 尚有骨架的裂解失去  $C_4H_8N$ :

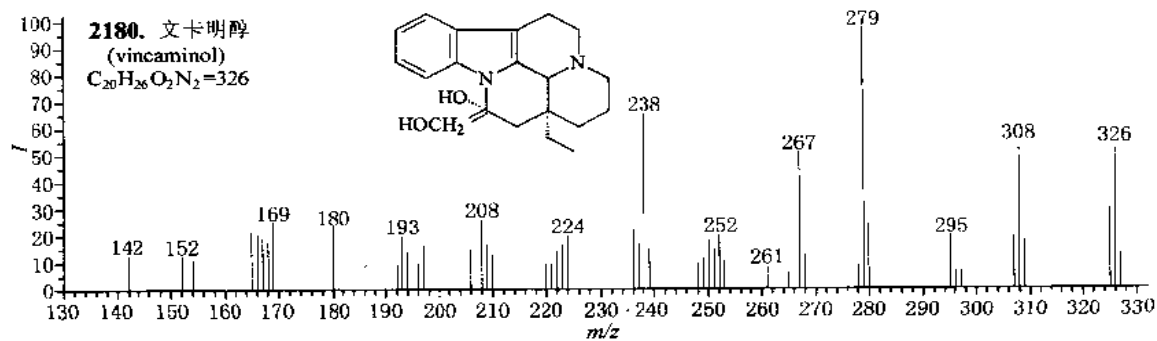
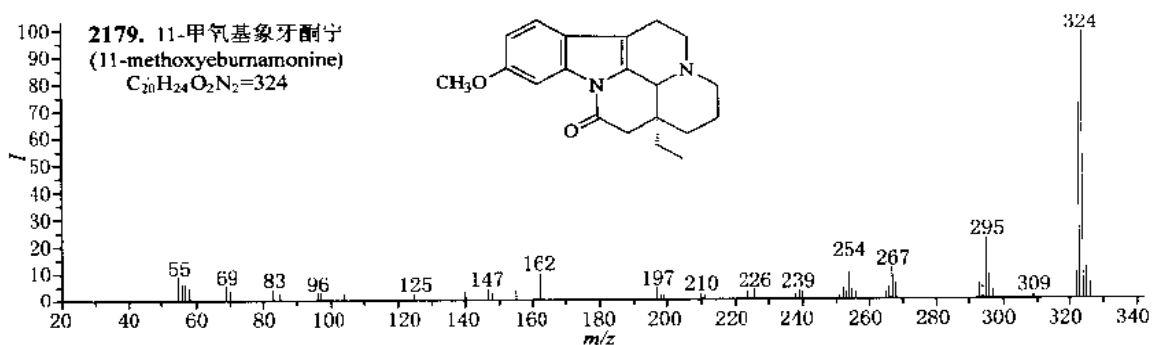
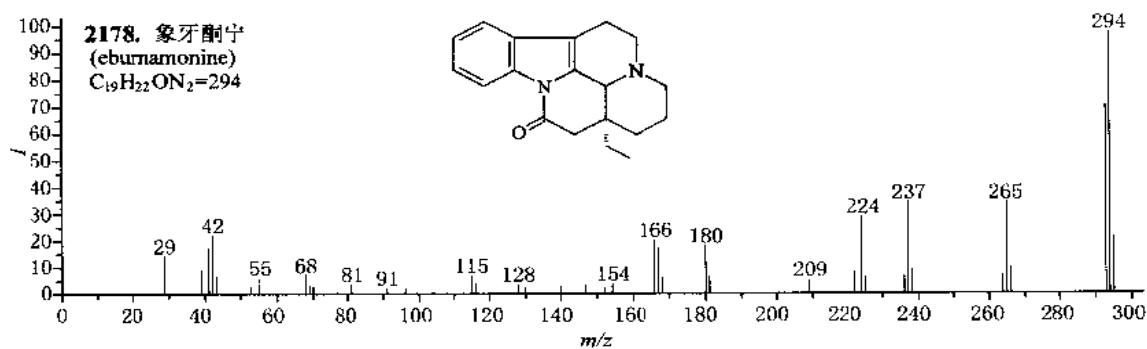
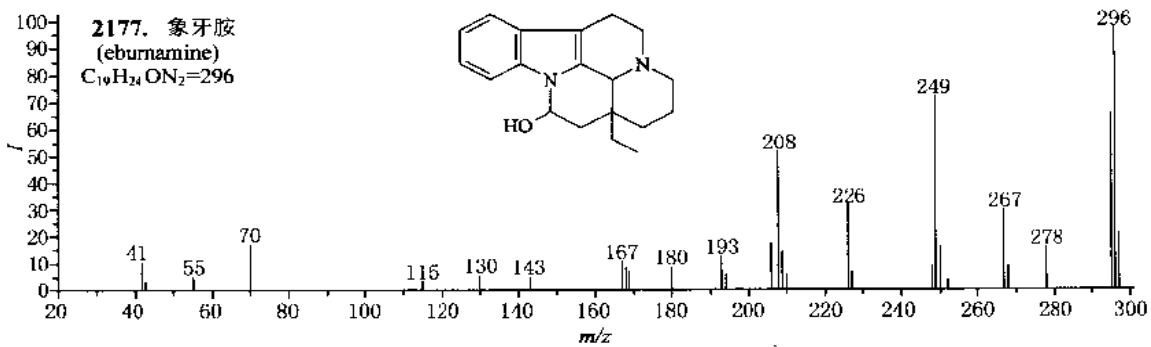


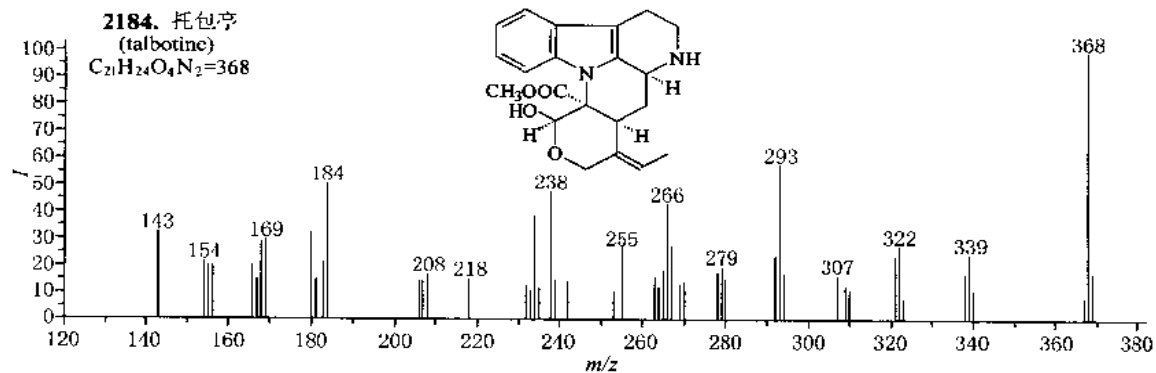
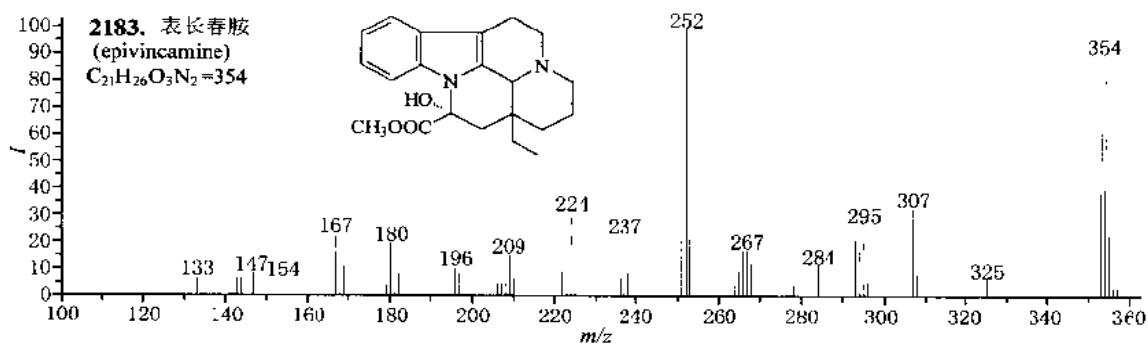
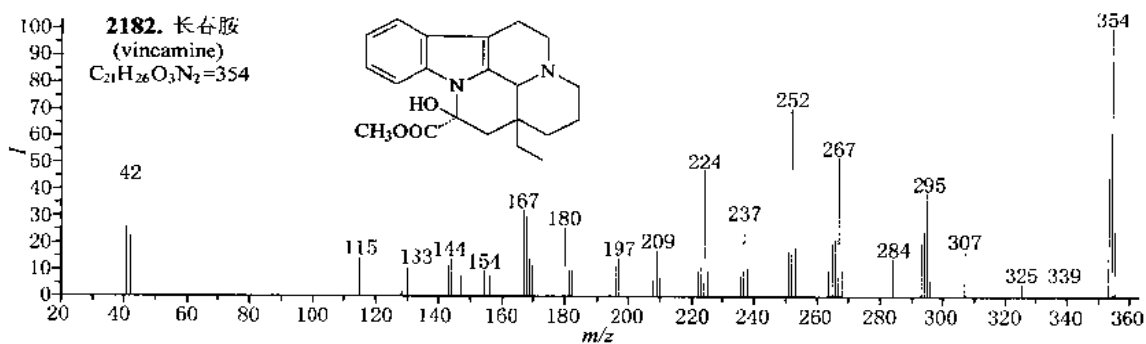
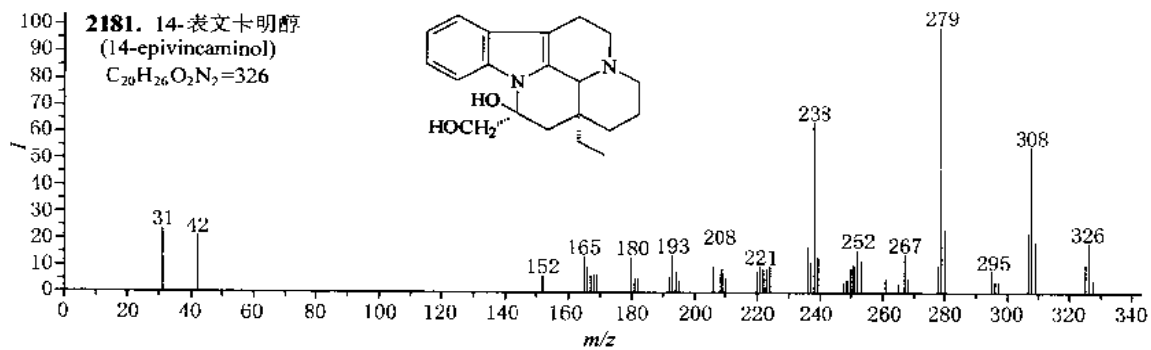
(3) 文卡明醇类 (2180, 2181) 的主要裂解有  $M-H$ ,  $M-H_2O$ ,  $M-CH_2OH$ ,  $M-H_2O-C_2H_5$  和  $M-CH_2OH-C_2H_4$ , 另外还有  $M-H_2O-C_4H_8N$  ( $m/z$  238), 失去  $C_4H_8N$  的裂解方式同上。

(4) 长春胺类 (2182, 2183) 的主要裂解有  $M-H$ ,  $M-H_2O-C_2H_5$ ,  $M-COOCH_3$ ,  $M-C_4H_8N$  和  $M-COOCH_3-C_2H_4$ , 另外有强峰  $m/z$  252, 这是分子离子进行两次 RDA 裂解的产物:



(5) 托包亭 (2184) 的主要裂解是  $M-CH_2NH$  (RDA),  $M-HCOOH$  和  $M-CH_2NH-HCOOH$ 。

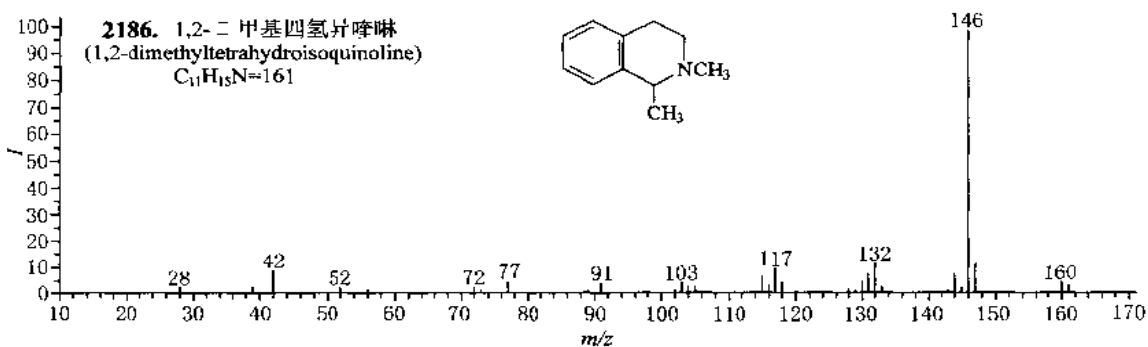
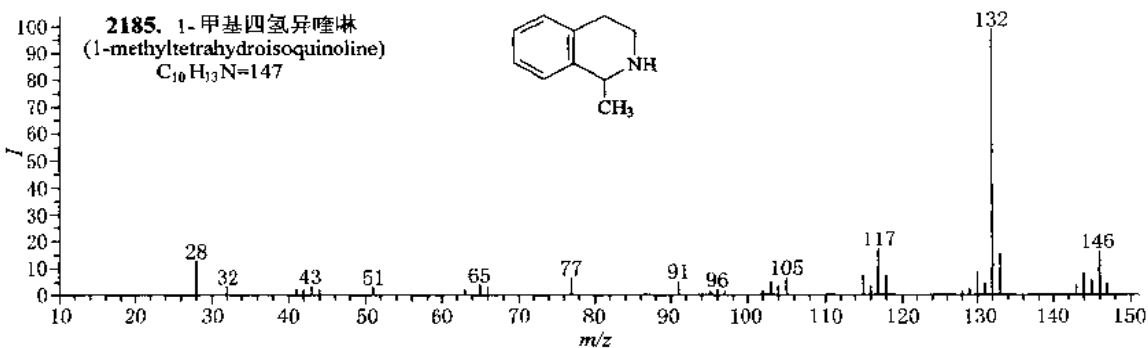




## 第五节 四氢异喹啉生物碱类

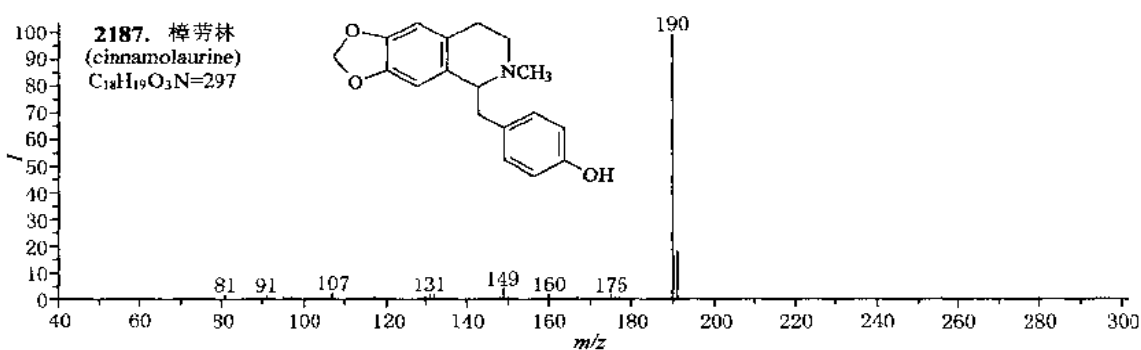
### 一、简单取代的四氢异喹啉生物碱类

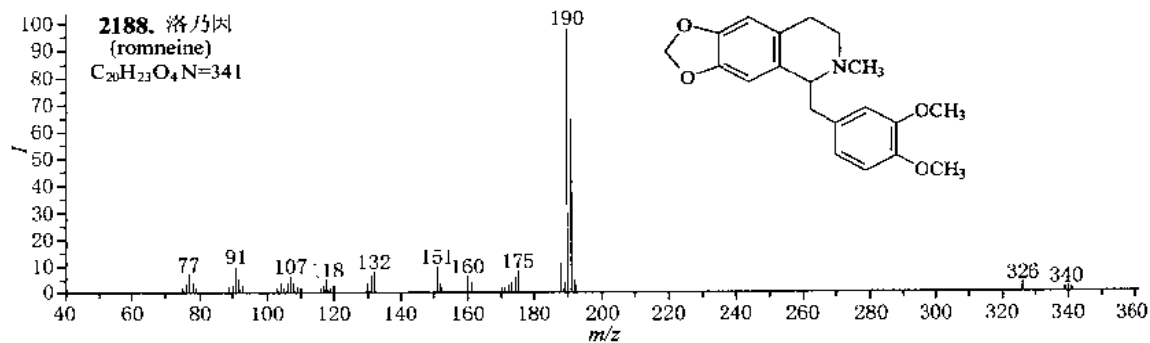
这类生物碱 (2185, 2186) 的主要裂解是  $M-H$  和失去  $C_1$ -烷基。



### 二、苄基四氢异喹啉生物碱类

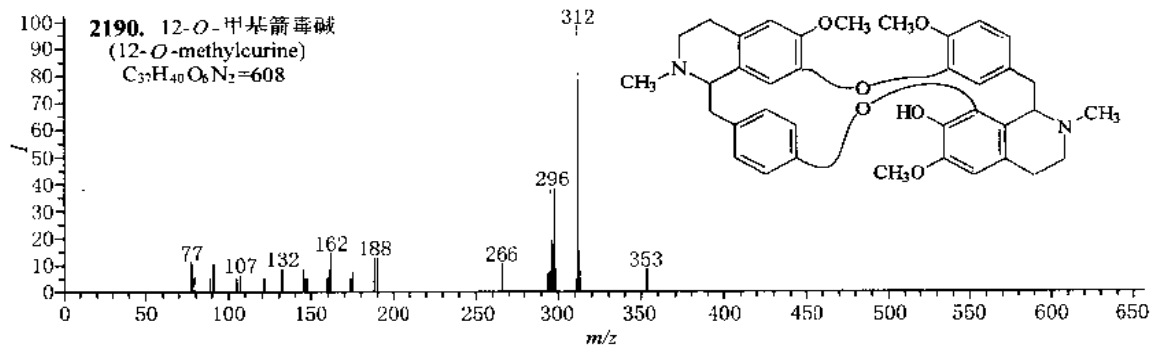
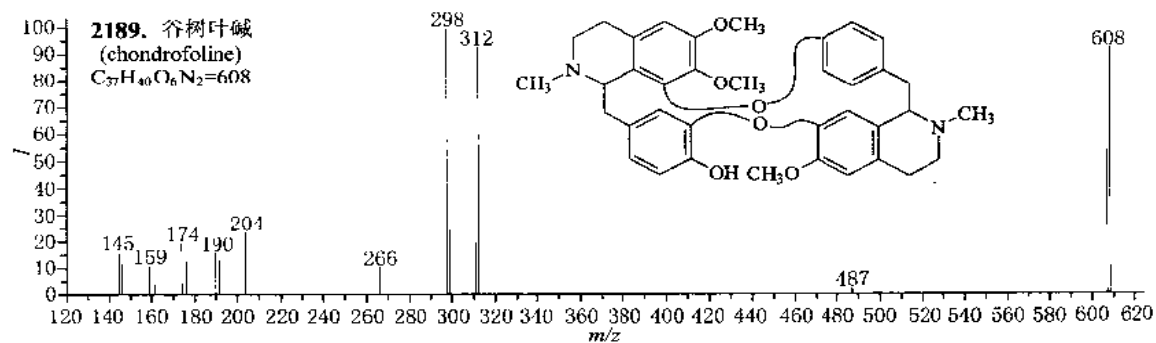
这类生物碱 (2187, 2188) 的主要裂解是进行  $C-N$  系统的  $\alpha$ -裂解和两个苄基裂解, 产物是很强的含四氢异喹啉部分的离子和弱的取代苄基离子, 两个离子互补。

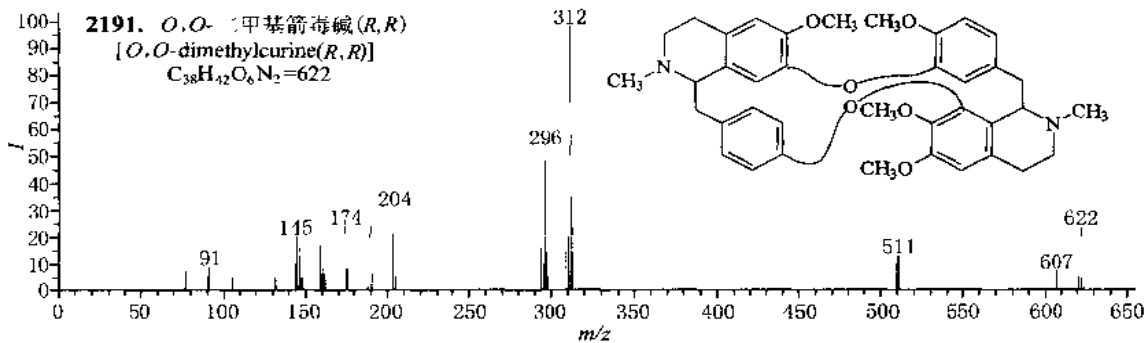




### 三、双苄基四氢异喹啉生物碱类

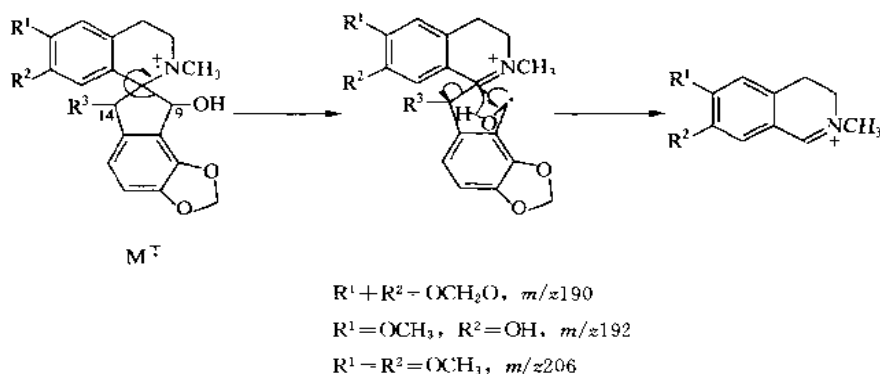
这里收录的只是3个头对尾相互连接的例子(2189~2191),这类生物碱的裂解都主要是进行双苄基裂解并再转移一个氢原子,若裂解出的两部分取代基相同,则只出现一个强的碎片离子;若两部分的取代基不相同,则出现两个强的碎片离子。



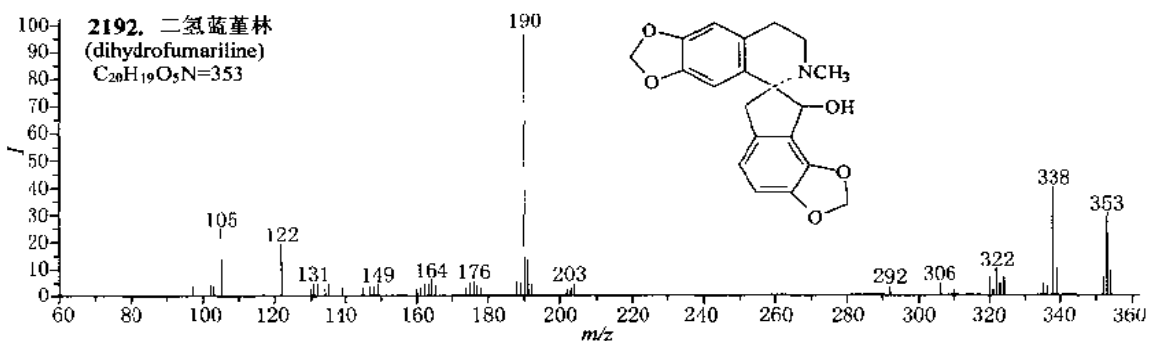


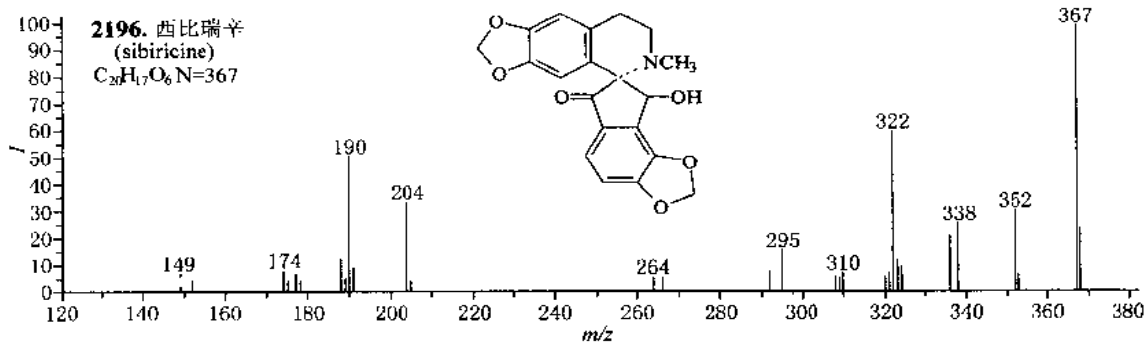
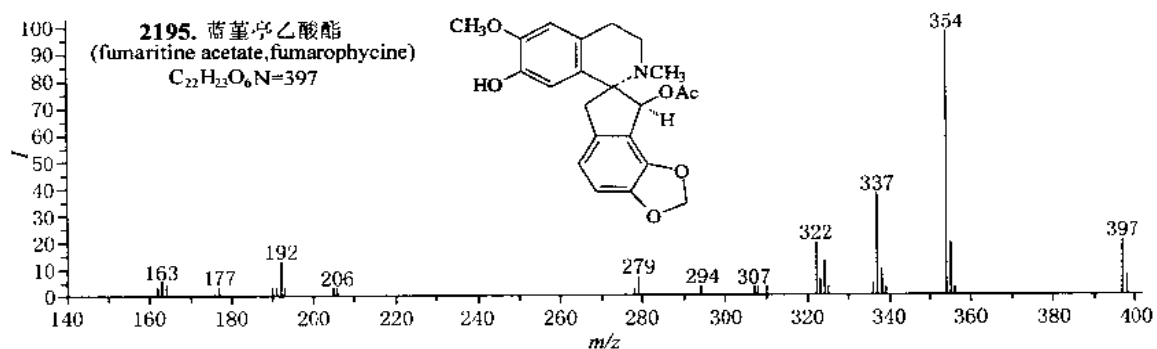
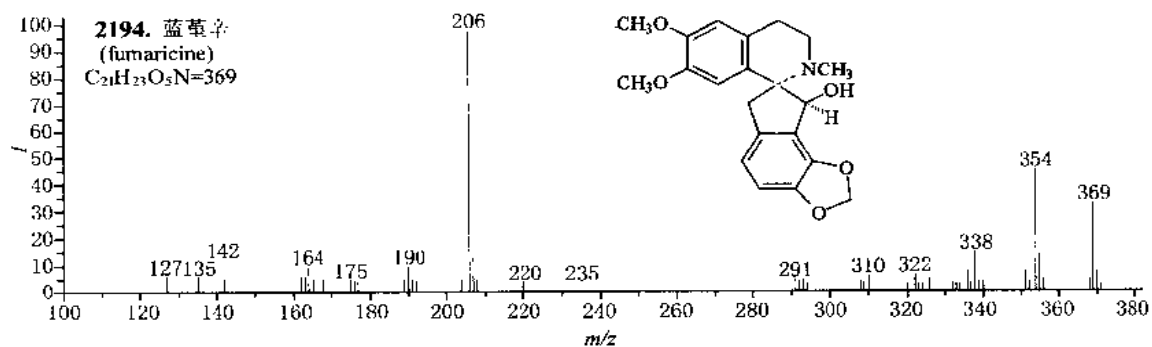
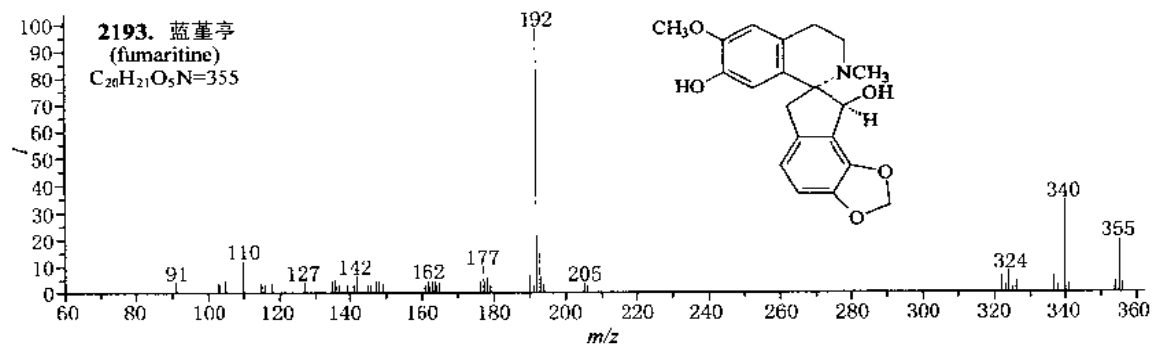
#### 四、螺茛四氢异喹啉生物碱类

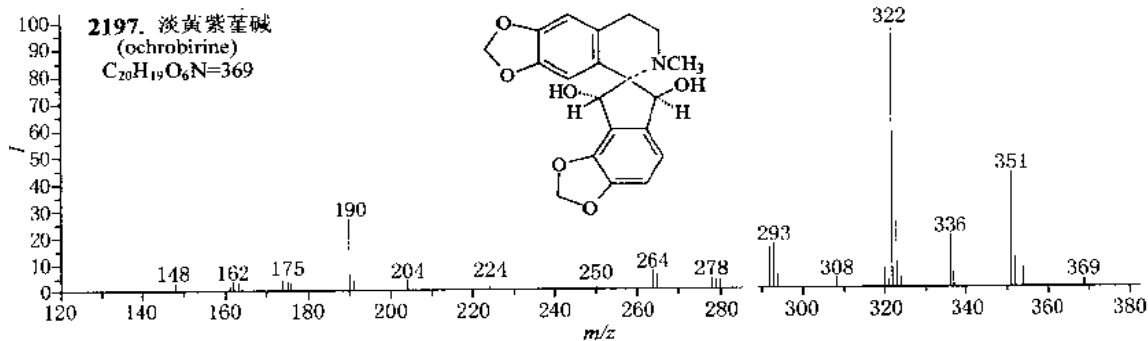
(1) 9-羟基螺茛四氢异喹啉生物碱类 (2192~2194) 的主要裂解是螺五元环的双 $\alpha$ -裂解, 同时转移羟基上的氢原子, 生成含四氢异喹啉环的离子:



$C_9$ -乙酰氧基化合物 (2195) 也有上述离子, 但  $M-COCH_3$  离子为基峰。 $C_{14}$  再多一羰基 ( $R^1=O$ ) 的化合物 (2196), 仍有上述离子。 $C_9$ 、 $C_{14}$  二羟基化合物 (2197) 除有上述离子外, 尚有  $M-H_2O$  及  $M-H_2O-CHO$  的强峰。

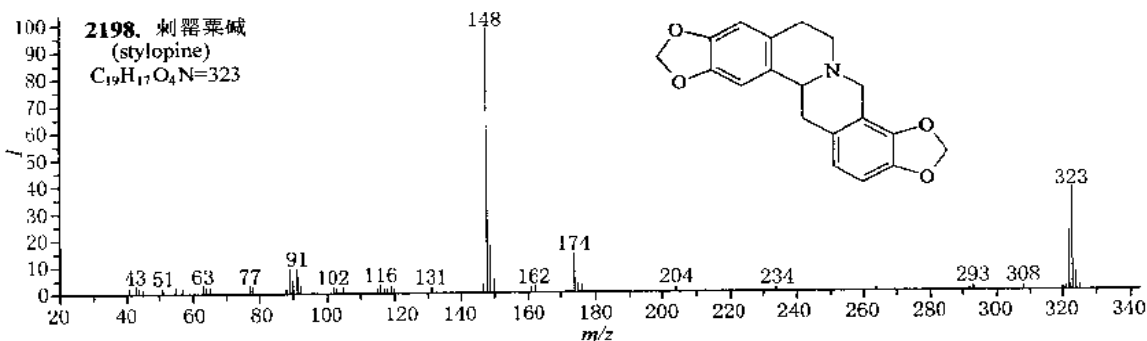
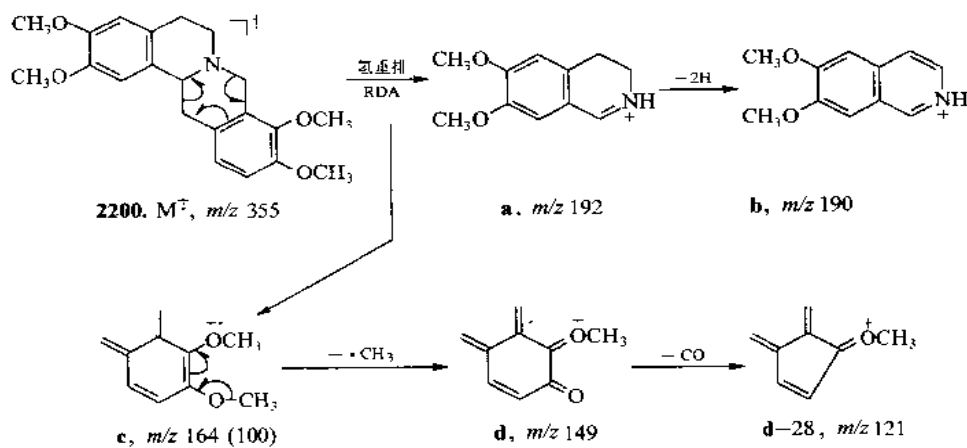




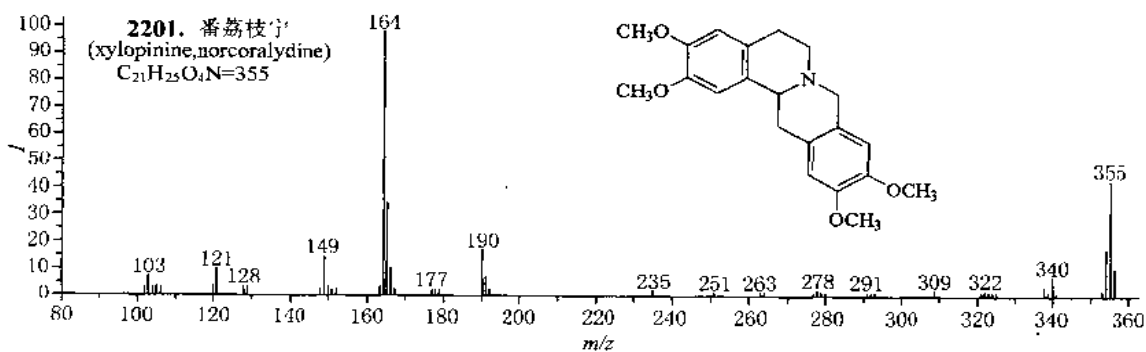
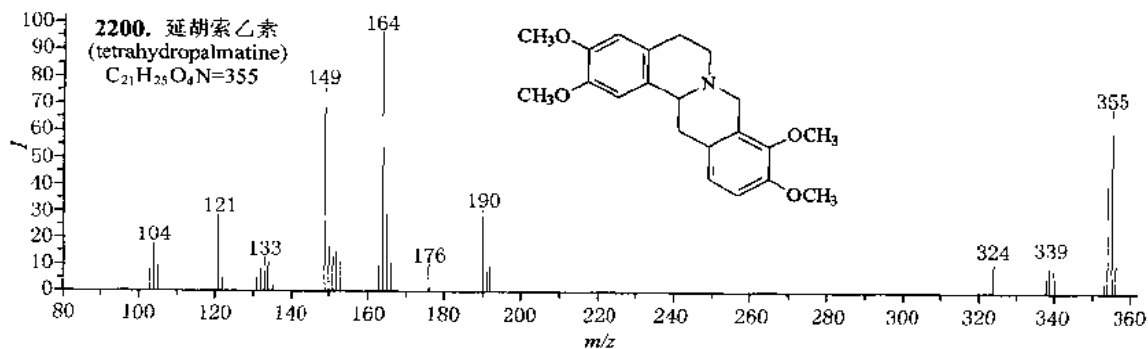
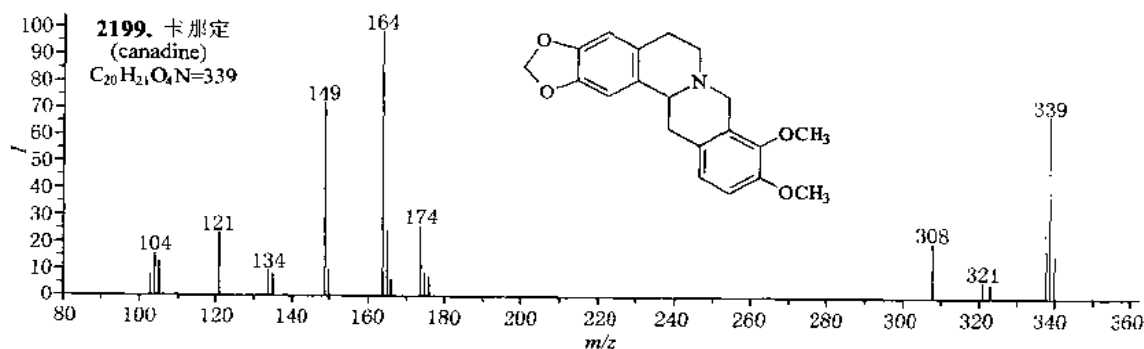


### 五、四氢原小檗碱生物碱类

这类生物碱 (2198~2201) 的主要裂解是 C 环的 RDA 裂解, 生成 a、b、c、d 四个主要离子, 以延胡索乙素 (2200) 为例, 裂解如下:

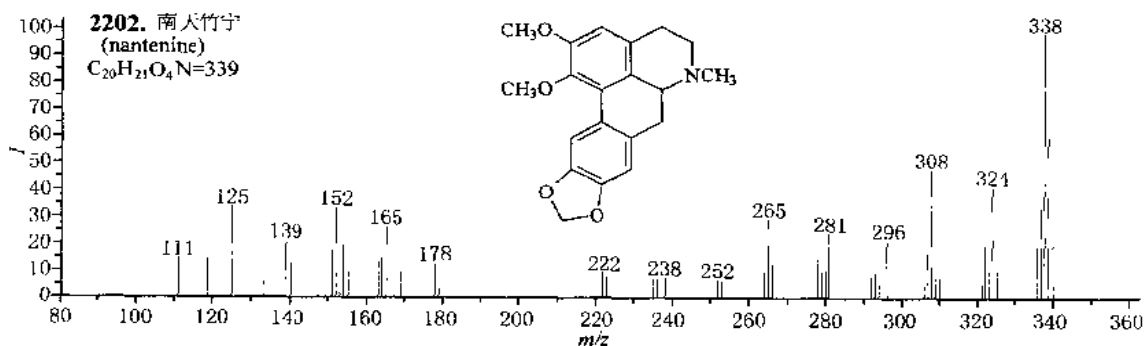


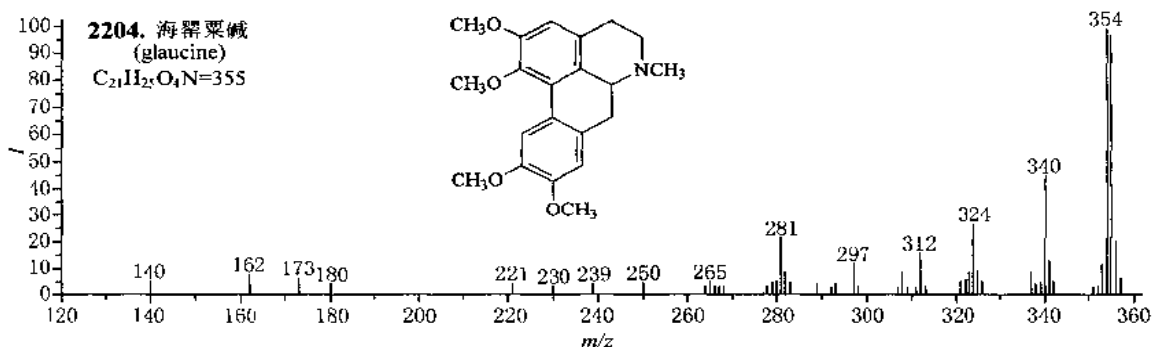
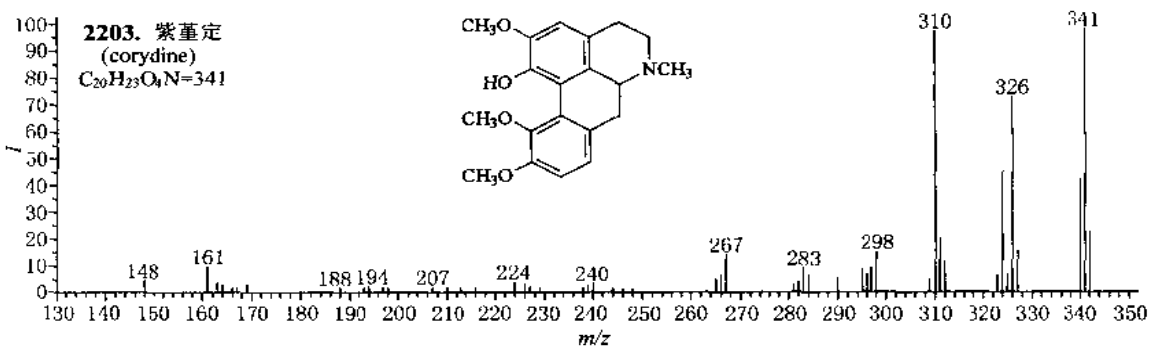




## 六. 阿朴啡生物碱类

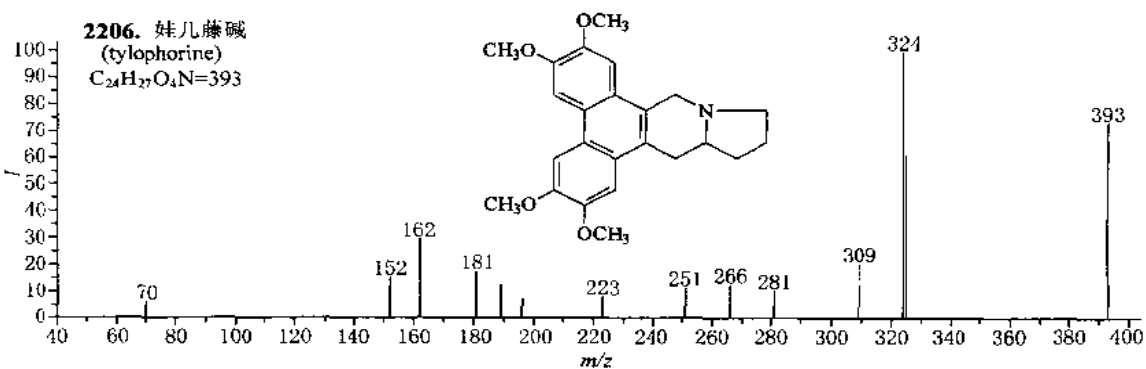
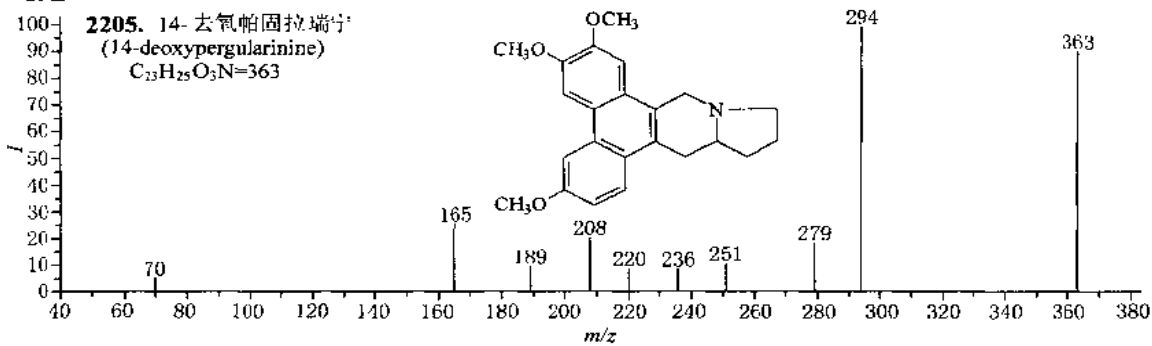
这类生物碱 (2202~2204) 的主要裂解是功能基的裂解, 例如  $M-H$ ,  $M-CH_3$  和  $M-OCH_3$ , 另外有 B 环的 RDA 裂解, 失去的是  $CH_2=NCH_3$ , 得  $M-43$  离子, 继续的裂解也是失甲基和甲氧基, 即有  $M-CH_2NCH_3-CH_3$  和  $M-CH_2NCH_3-OCH_3$  等。





### 七、娃儿藤碱类

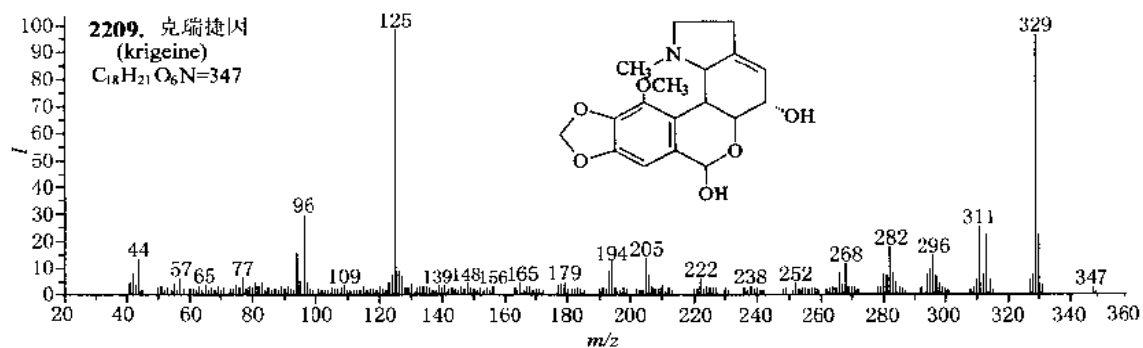
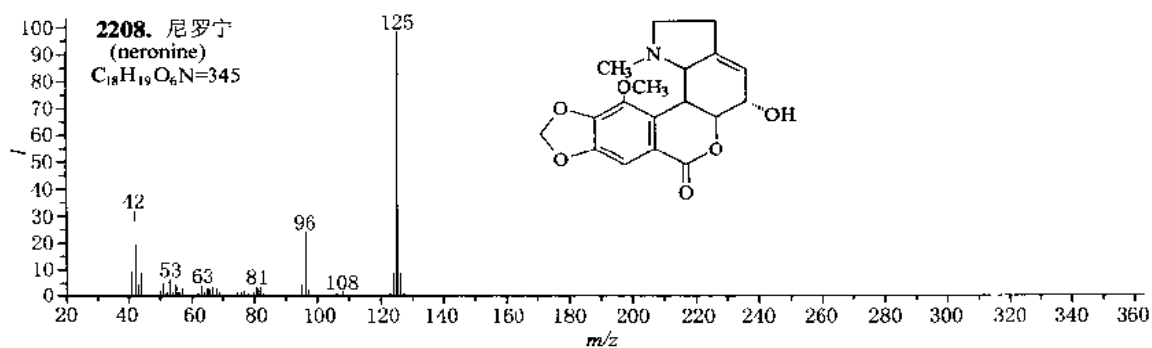
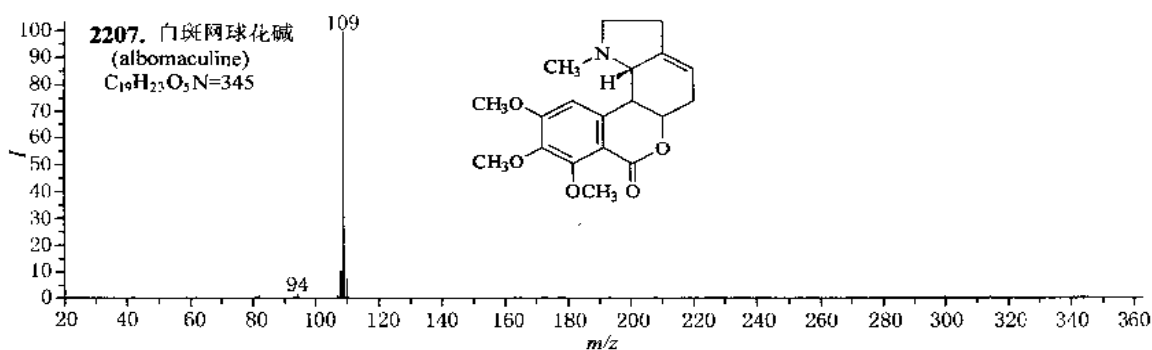
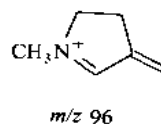
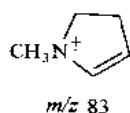
这类生物碱(2205, 2206)也可归于四氢异喹啉类中,其主要裂解是D环的RDA裂解失去  $\left[ \begin{array}{c} N \\ | \\ \text{---} \end{array} \right]$ , 得  $M-69$  离子,其他裂解是  $M-69$  离子再失去功能基的裂解。

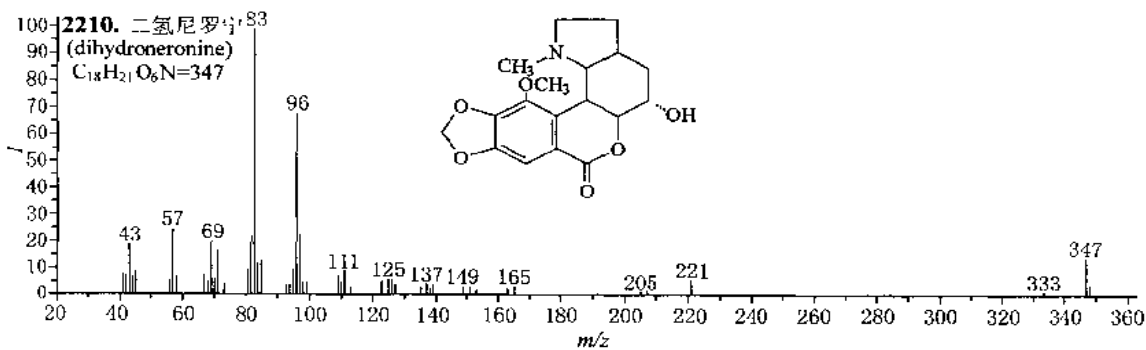


## 第六节 其他生物碱类

### 一、小星蒜碱生物碱类

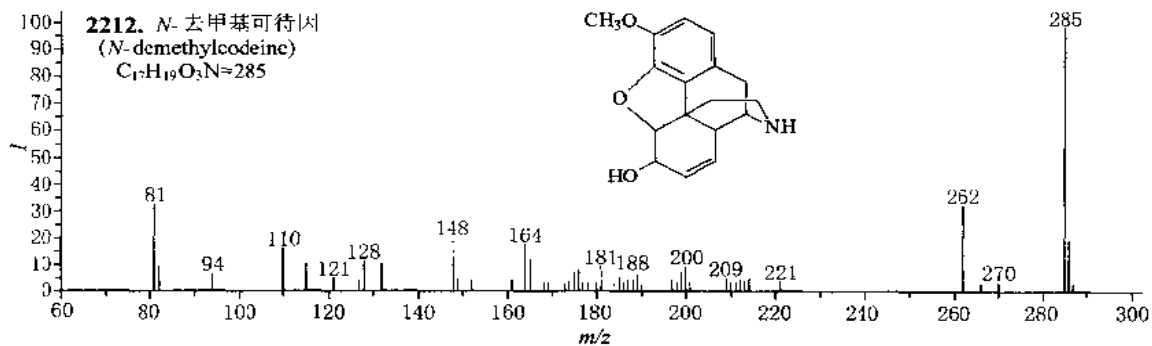
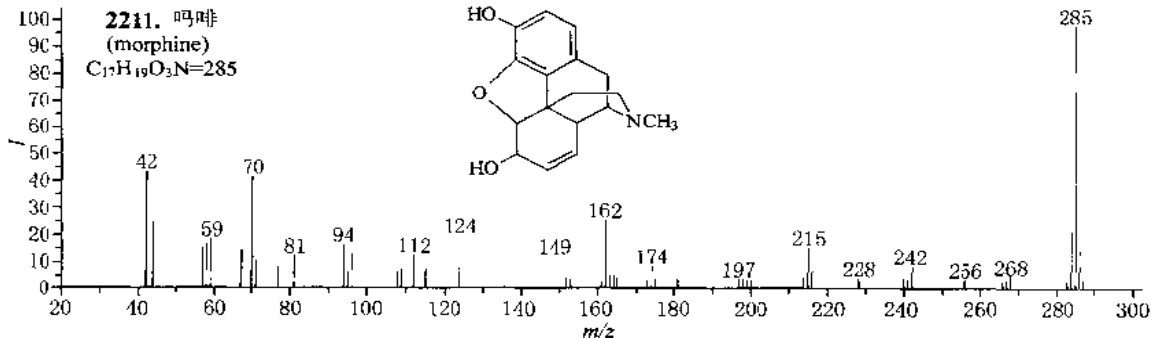
小星蒜碱类化合物(2207~2210)中,凡 $C_4$ 、 $C_5$ 有双键者,C环均能进行强烈的RDA裂解,生成含有四氢吡咯环的基峰离子,或为 $m/z$  109,或为 $m/z$  125( $C_8$ 有羟基取代时); $C_4$ 、 $C_5$ 无双键者,主要有两个重要离子,它们都来自甲基四氢吡咯环:

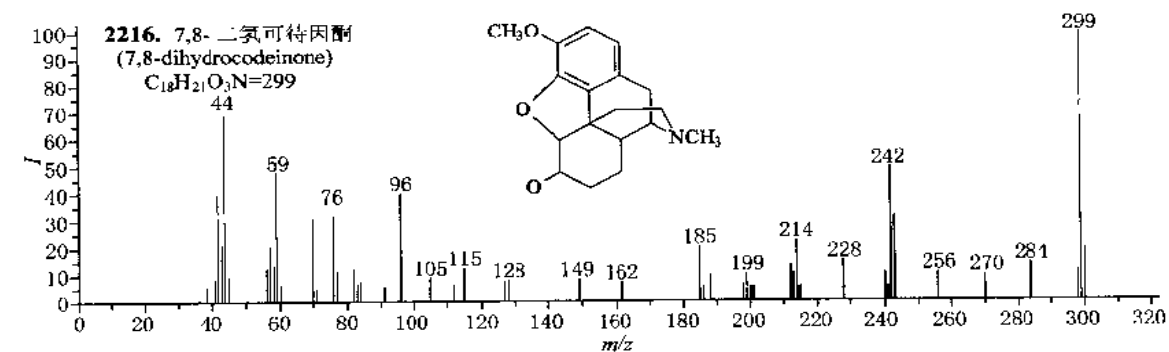
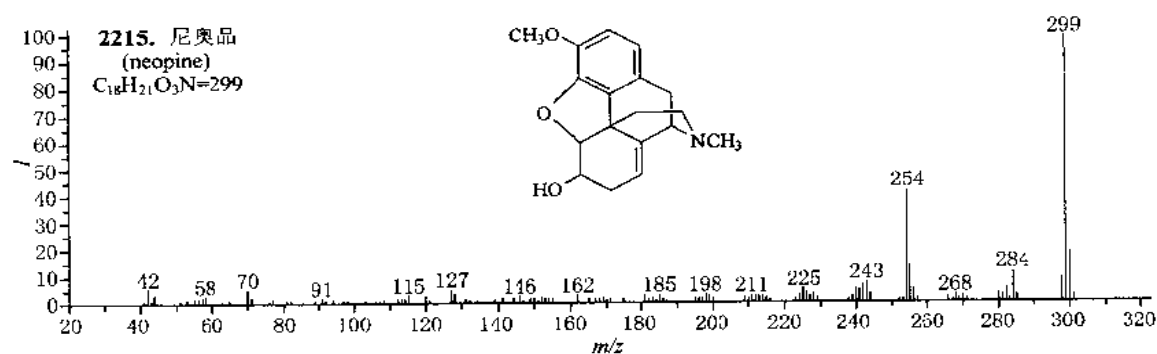
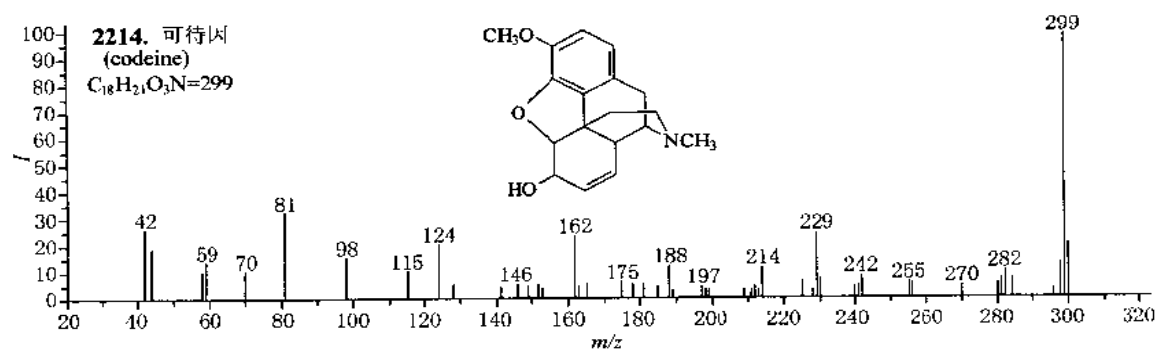
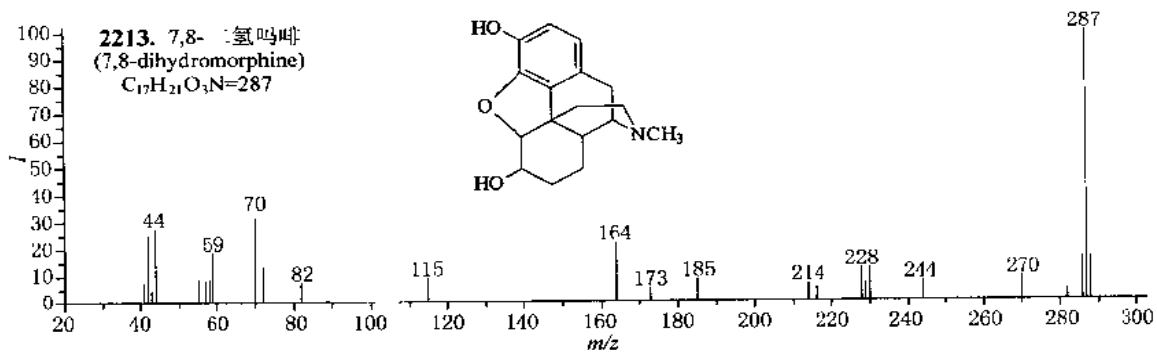


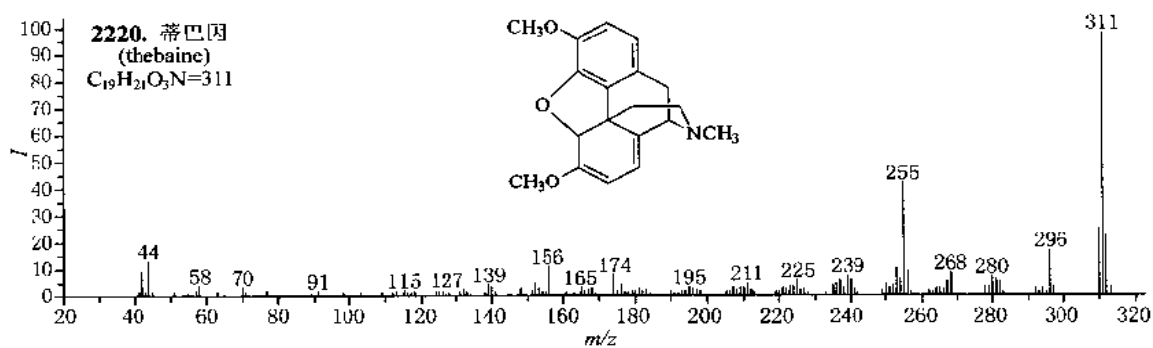
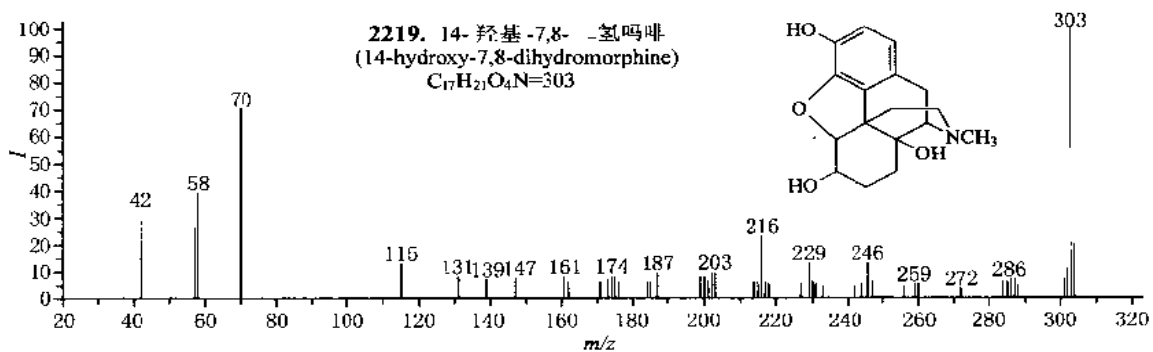
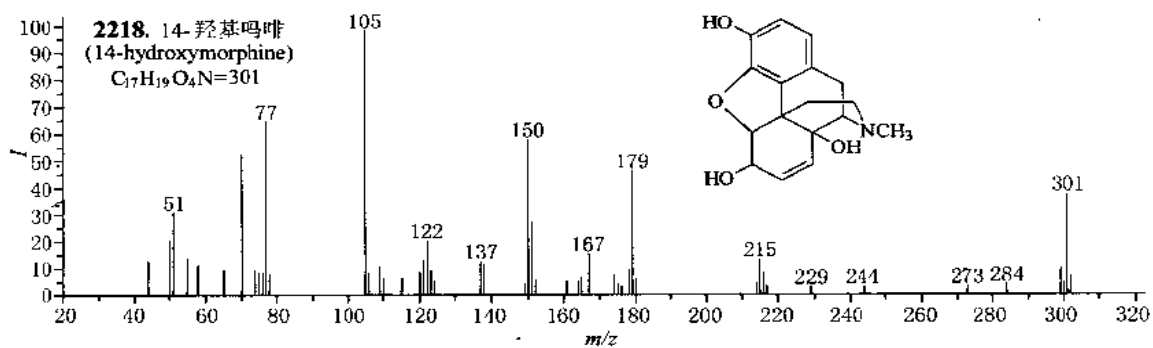
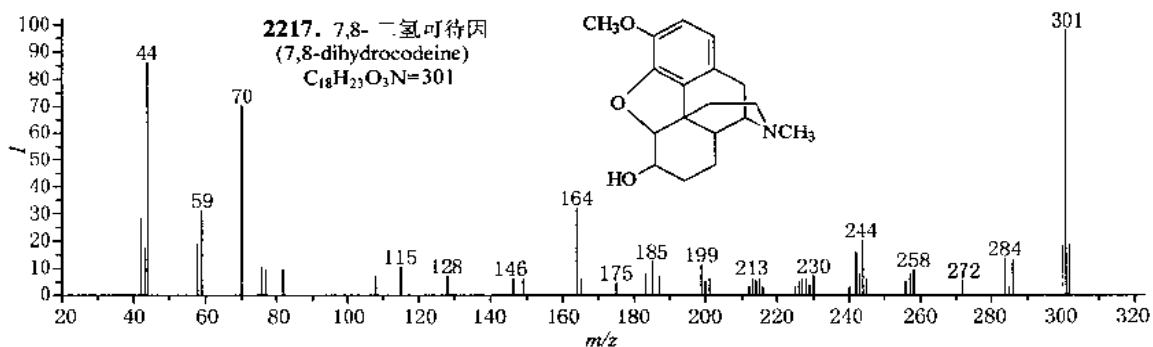


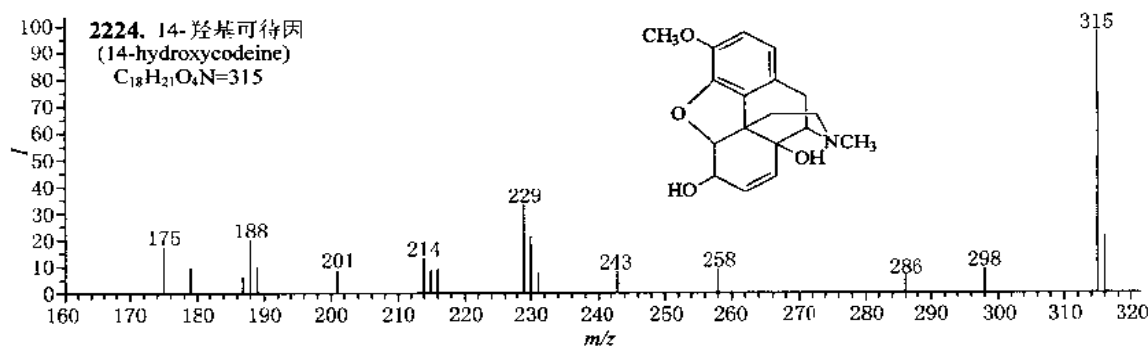
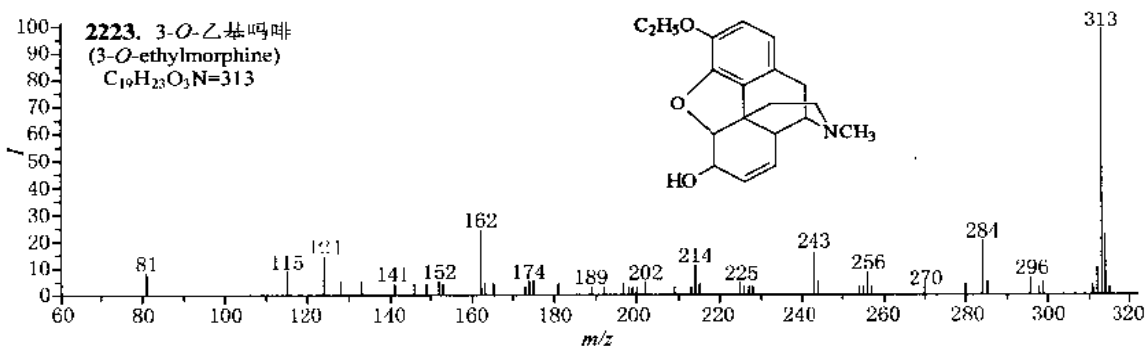
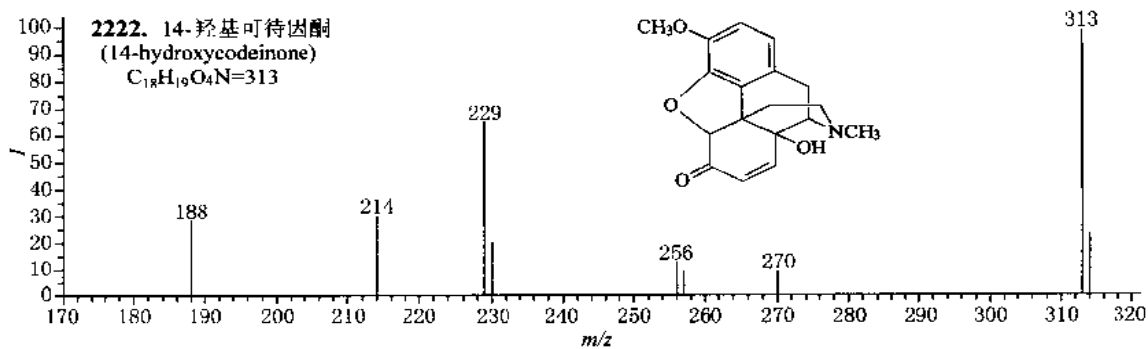
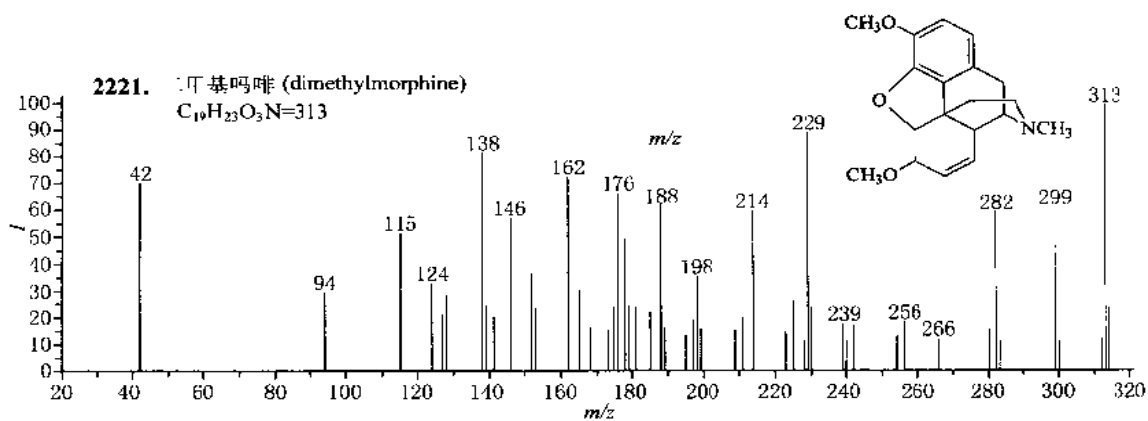
## 二、吗啡烷生物碱类

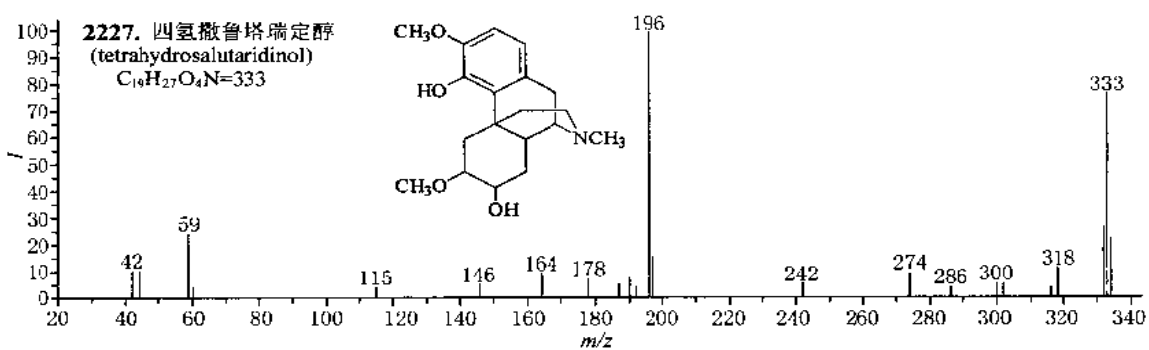
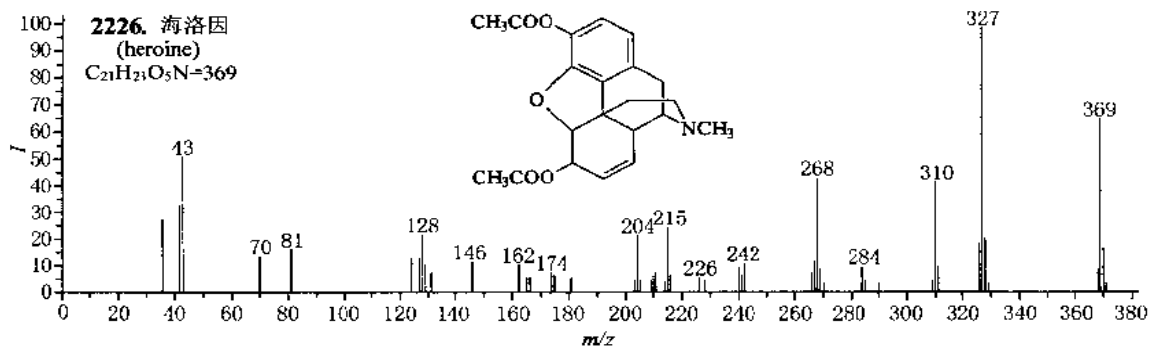
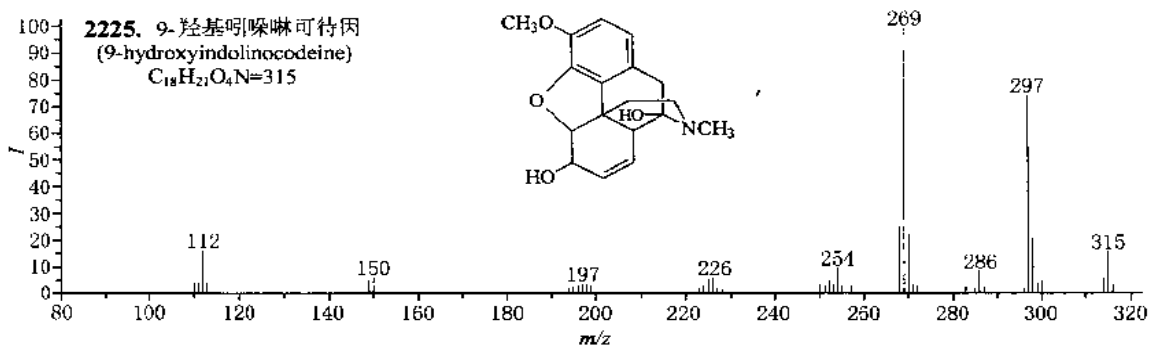
这类生物碱 (2211~2227) 由于结构比较紧凑坚固, 因而大多数的分子离子为基峰, 裂解较少且规律性不明显, 基本上缺乏特征性离子, 有些化合物出现了几个共同性离子, 其结构摘录如下:





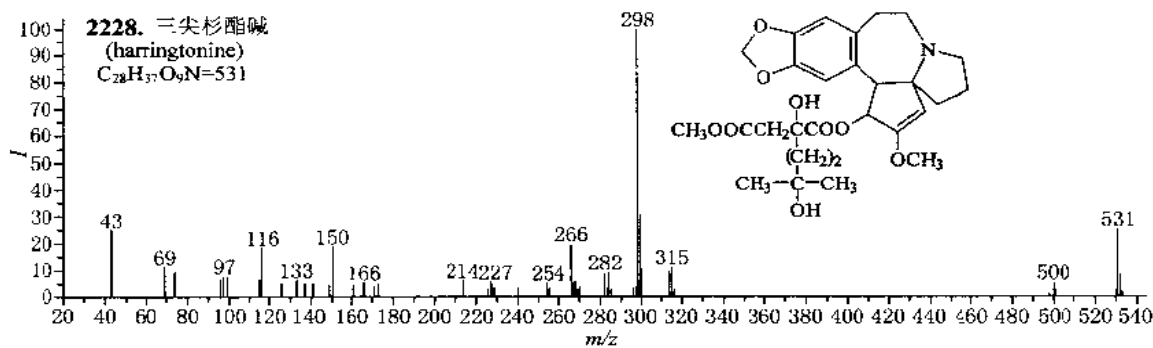




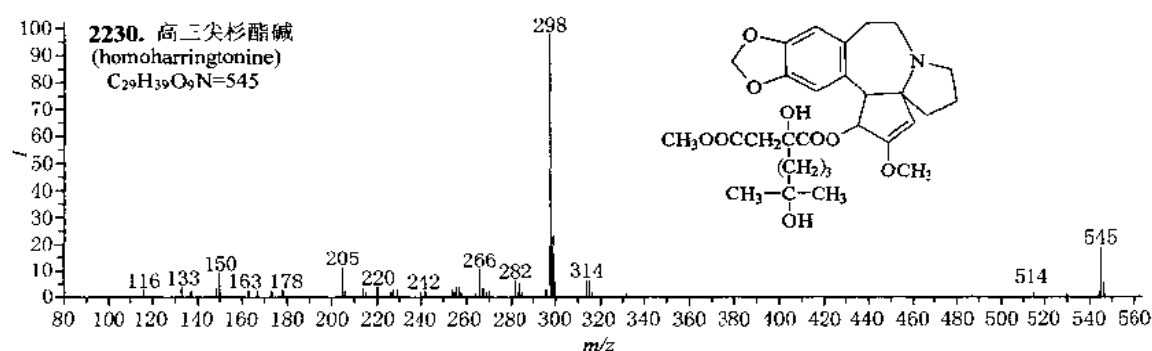
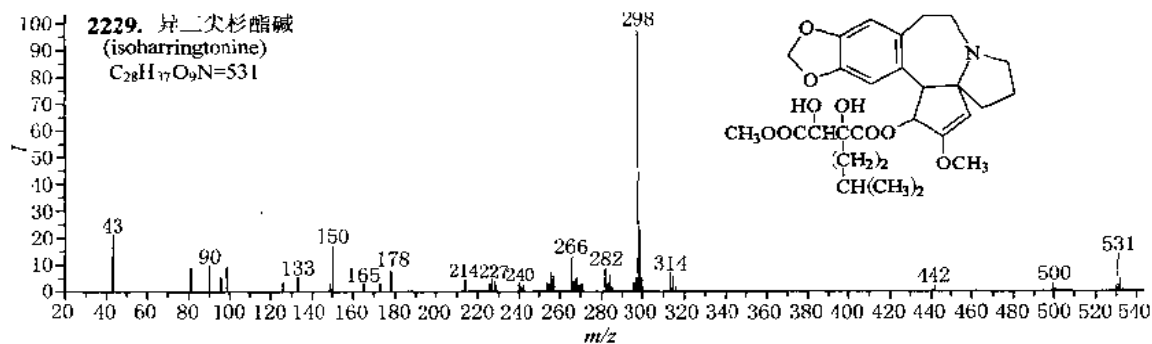


### 三、三尖杉酯碱生物碱类

这类生物碱(2228~2230)由于空间位阻关系,很易失去脂肪性侧链得基峰离子 $m/z$  298,若氮原子旁五元脂环有酰胺性羰基存在时,该离子移位到  $m/z$  312。

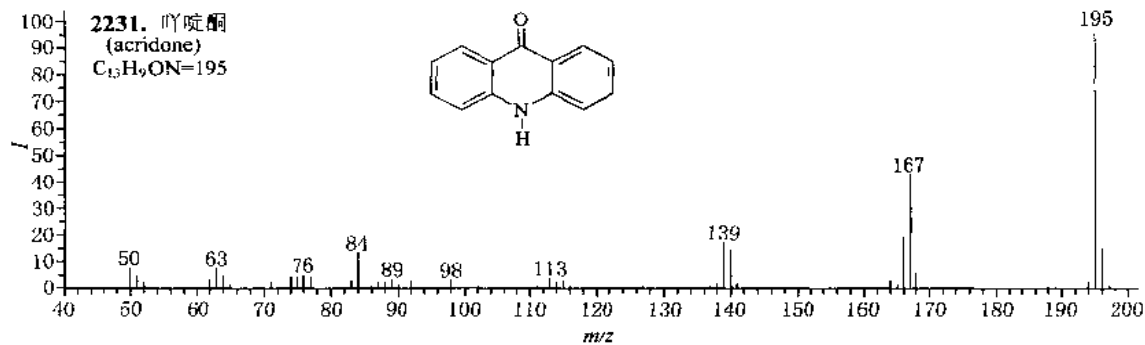


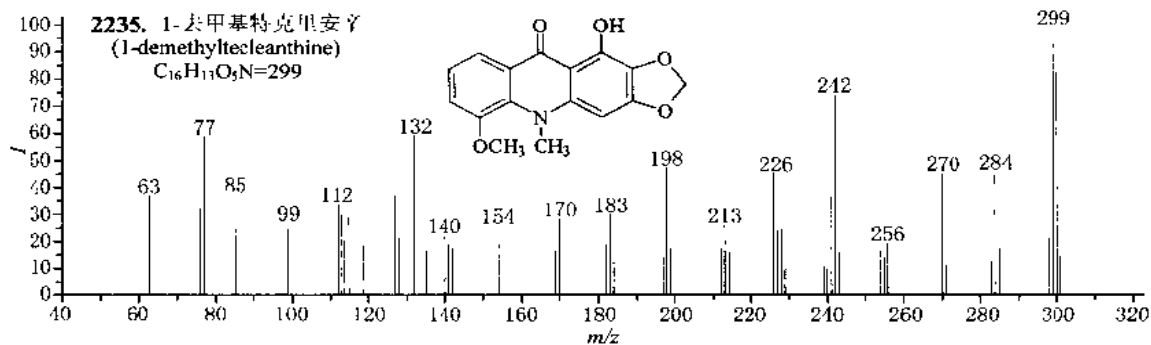
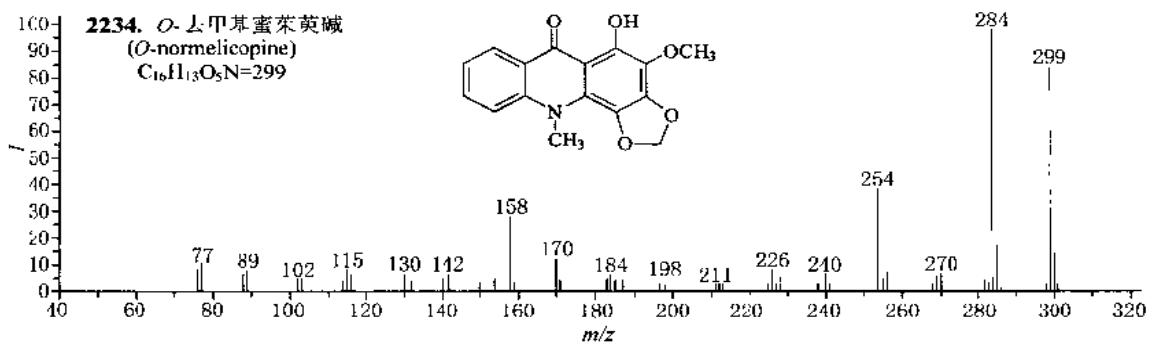
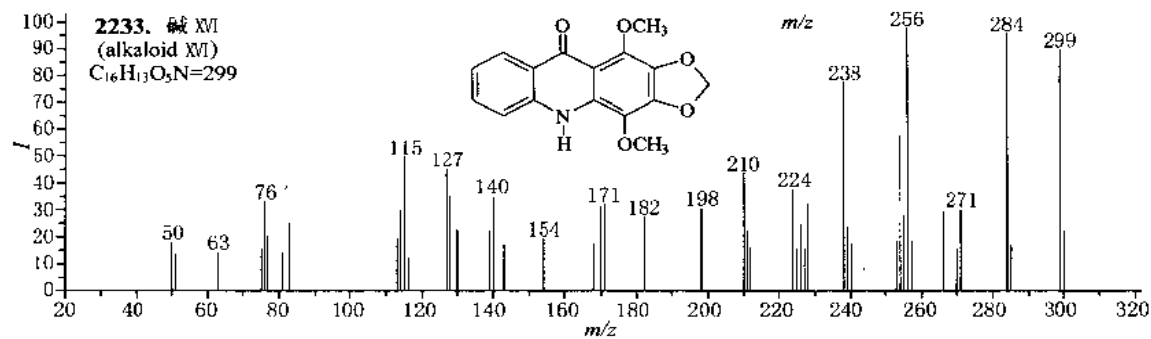
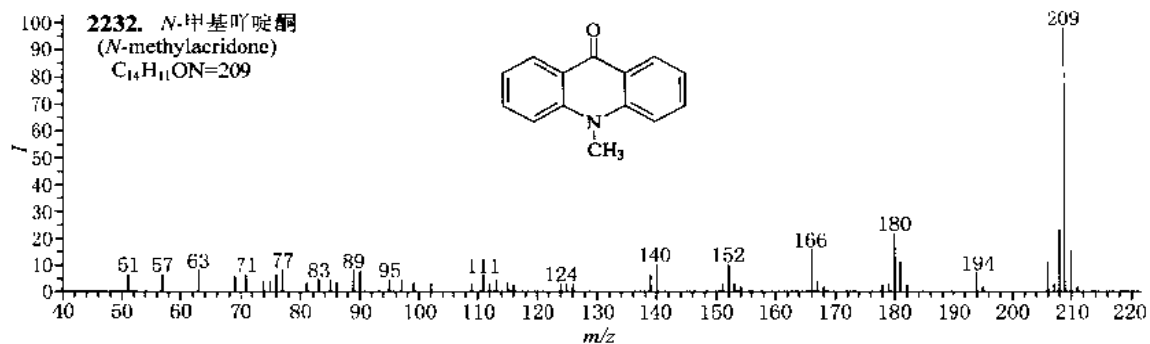


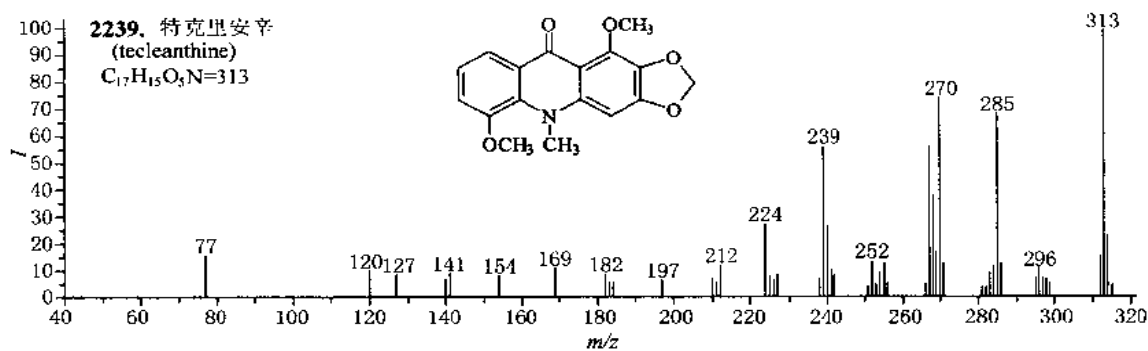
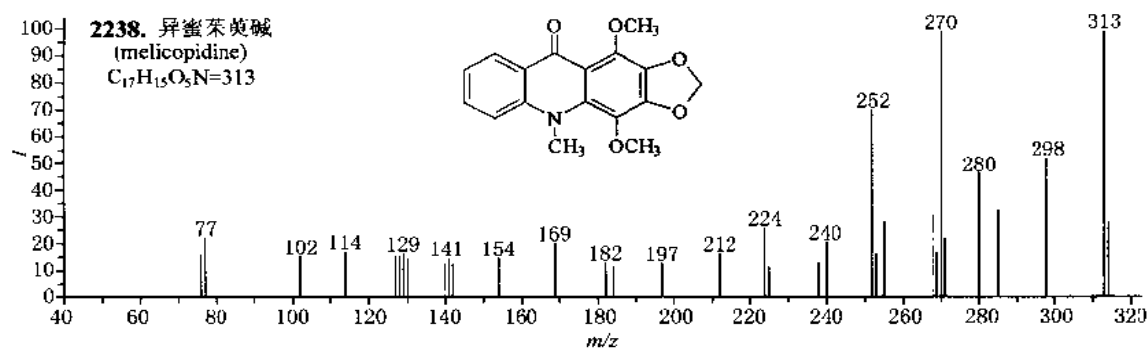
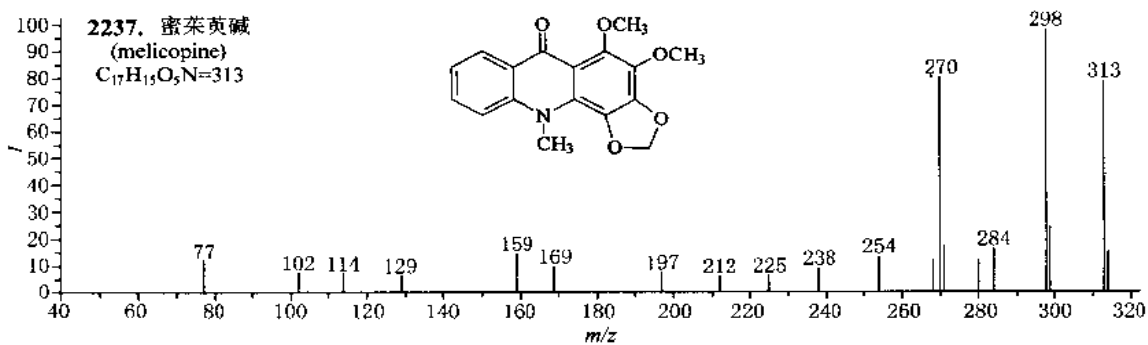
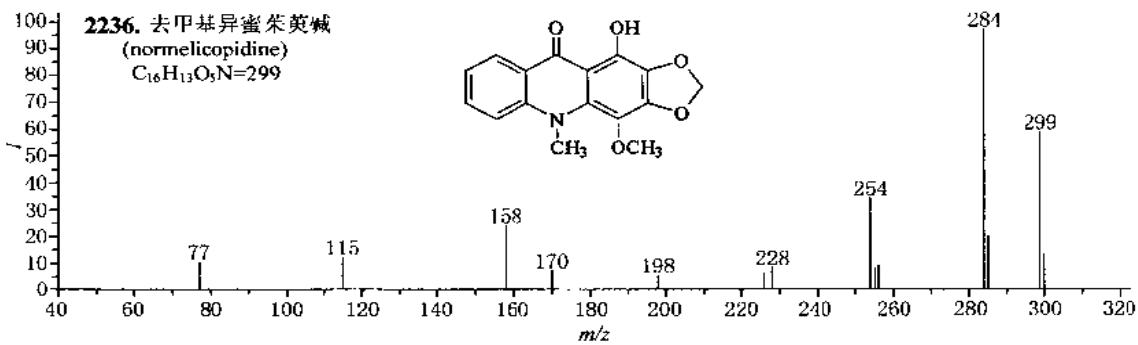


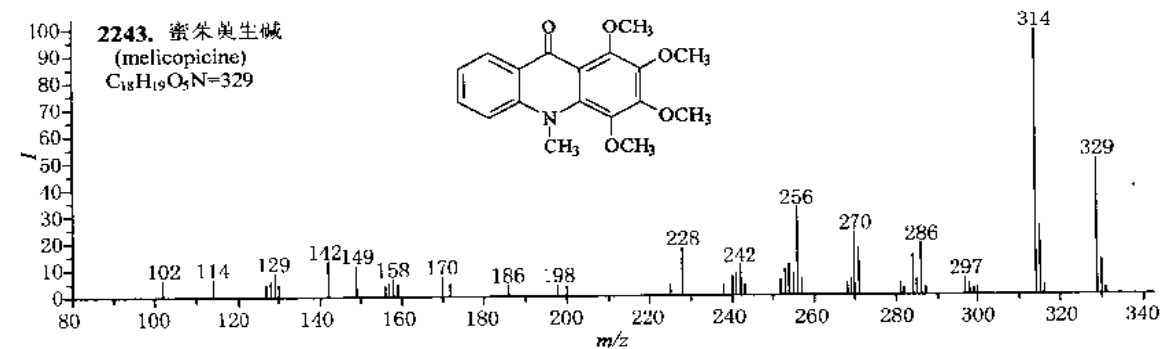
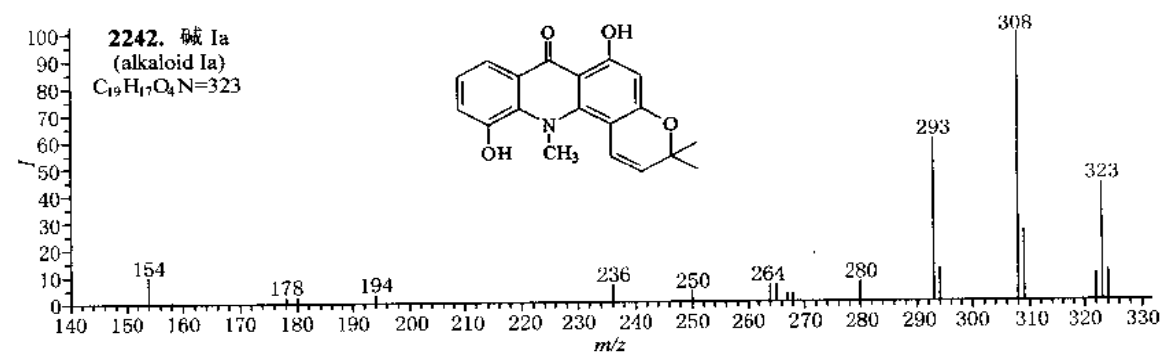
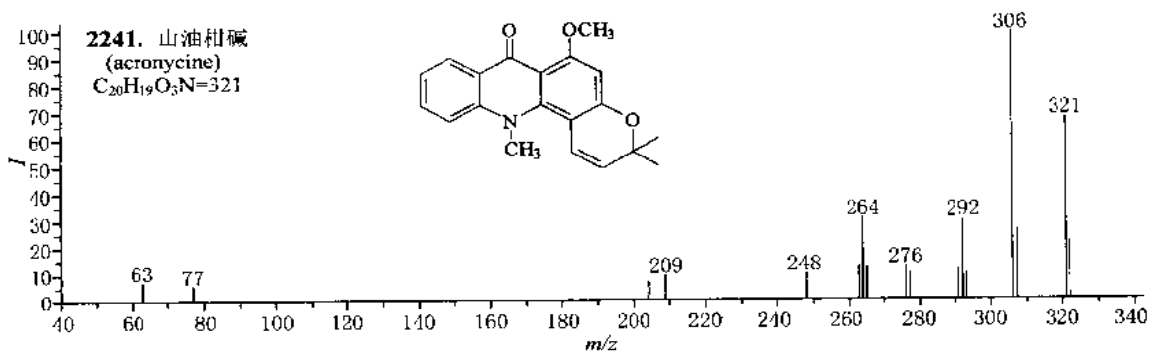
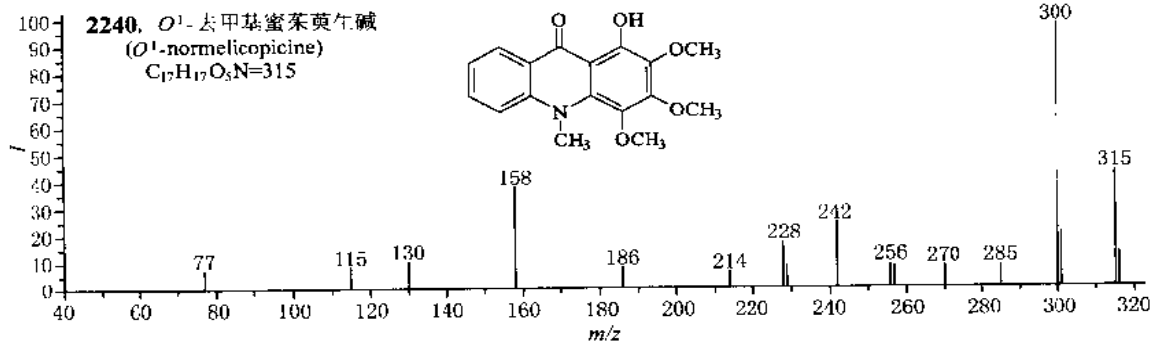
#### 四、吡啶酮生物碱类

- (1) 吡啶酮 (2231) 本身的裂解是失一氧化碳和失 CHN。
- (2) *N*-甲基吡啶酮类 (2232, 2234~2243) 能失甲基, 也能失一氧化碳和 CHN。
- (3) 甲氧基取代的吡啶酮类能失甲基, 并继续失去一氧化碳, 有亚甲二氧基取代者尚能失去甲醛。



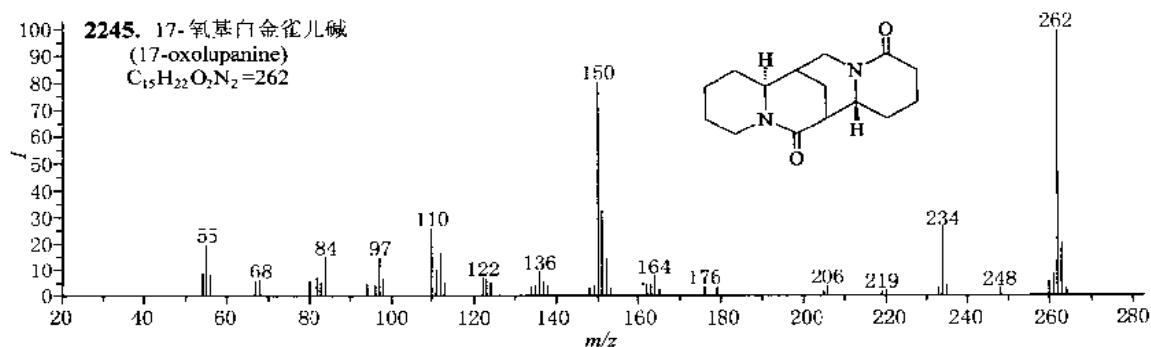
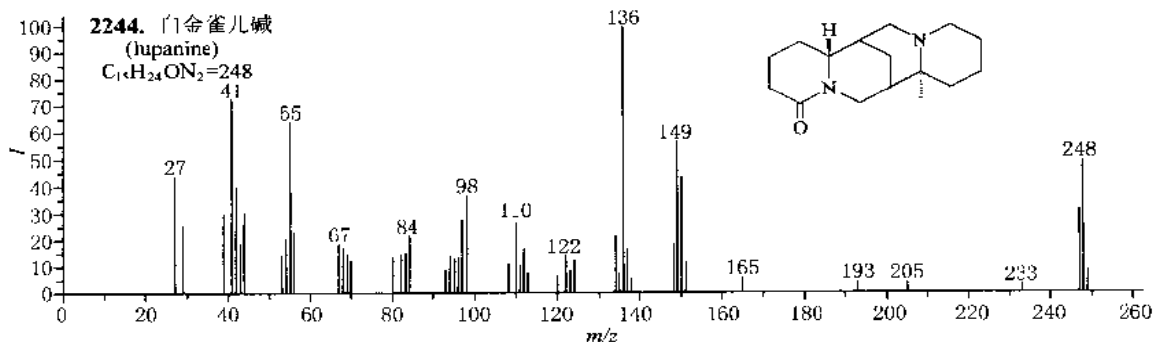
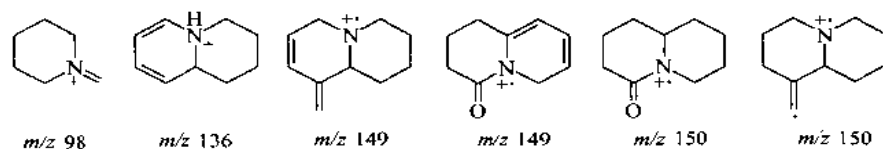






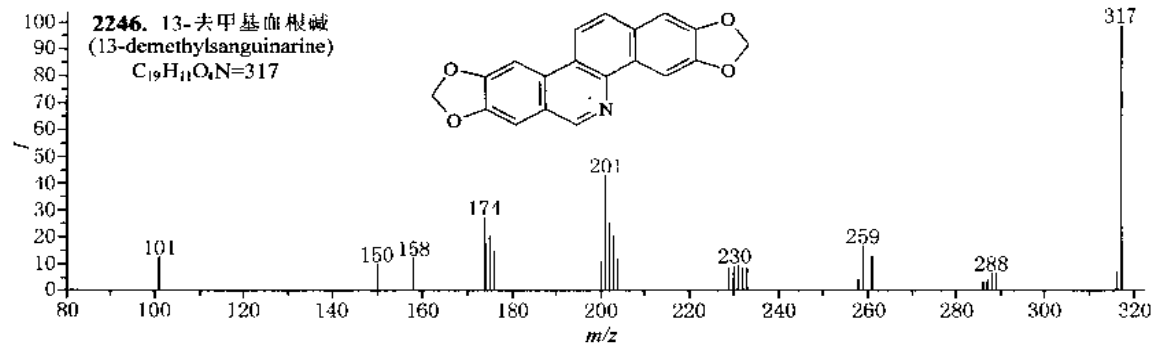
### 五、无叶豆碱生物碱类

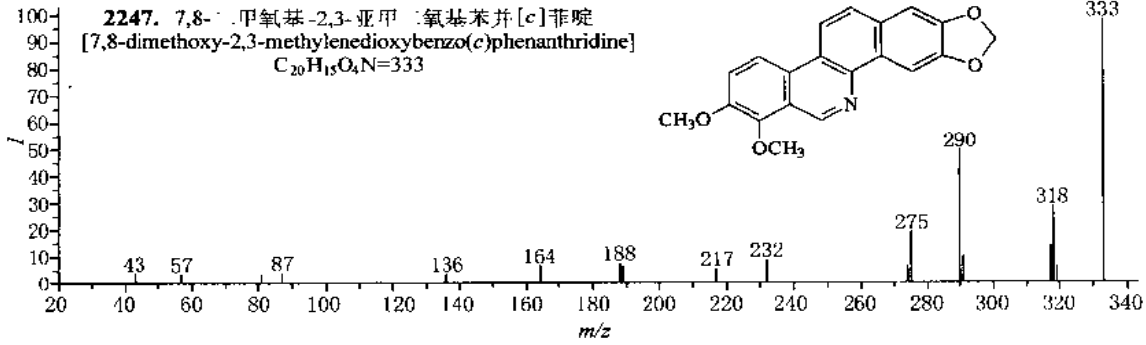
这类生物碱（2244，2245）的常见碎片离子有：



### 六、血根碱生物碱类

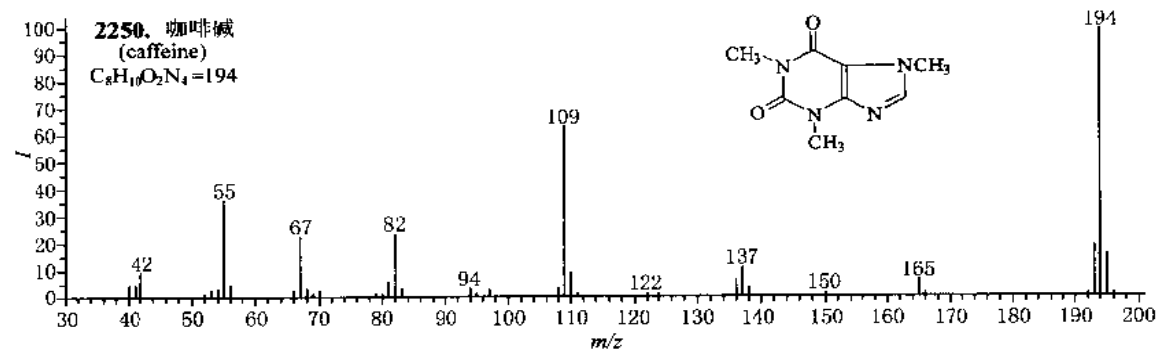
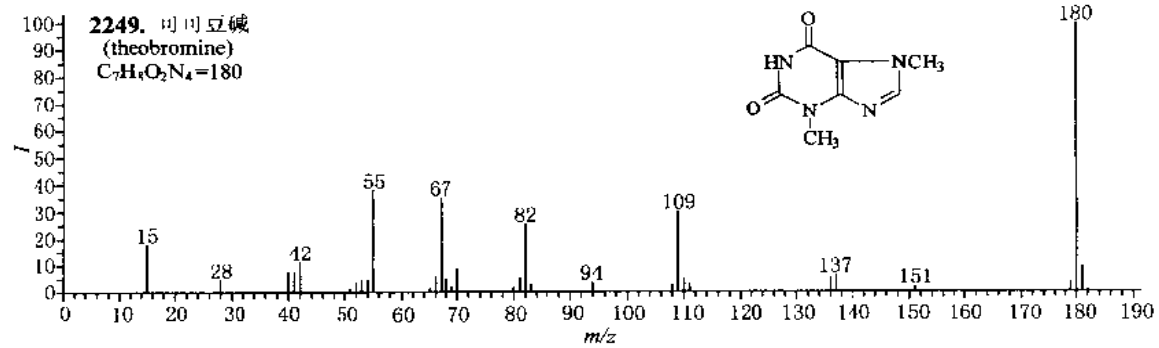
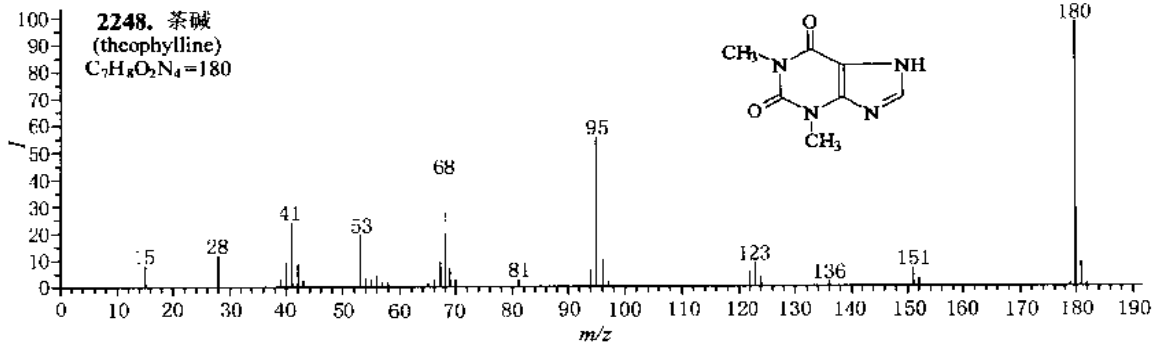
这类生物碱（2246，2247）的分子离子很强，裂解不多，取代多时则主要是失去取代基。





### 七、嘌呤生物碱类

嘌呤生物碱类 (2248~2250) 虽能进行一些裂解, 但缺乏特征性碎片离子。



## 八、甾族生物碱类

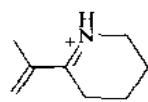
(1) 20-二甲氨基-5 $\alpha$ -孕甾烷 (2251) 主要是进行 C-N 系统的  $\alpha$ -裂解、即 C<sub>17</sub>、C<sub>20</sub> 键的裂解产生二甲氨基亚乙基离子  $m/z$  72 (a, 基峰)。

(2) 3, 20-双二甲氨基-5-孕甾烯 (2252) 除上述裂解外, 尚增加了离子  $m/z$  84 (b), 3, 20-双二甲氨基-5 $\alpha$ -孕甾烷 (2253) 除此二离子外, 又增加了离子  $m/z$  110 (c)。3, 20-双二甲氨基-5-孕甾烯 (2254) 的两个氨基各少 1 个甲基, 离子 a 和 b 移到  $m/z$  58 和  $m/z$  70。

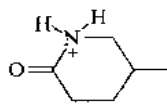
(3) 3 $\alpha$ -乙酰氨基-20-乙酰甲氨基-5-孕甾烯 (2255) 的离子 a 移到  $m/z$  100, 离子 b 未出现。另有 M-CH<sub>2</sub>CONH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>CONHCH<sub>3</sub> 及 a-CH<sub>2</sub>CO 的裂解。3, 20-双乙酰氨基-18-羟基-5-孕甾烯 (2256) 的离子 a 是  $m/z$  86, 离子 b 未出现, 另外出现了 M-CH<sub>2</sub>CONH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>O-CH<sub>2</sub>CONH<sub>2</sub> 等离子, 失去酰胺都是麦氏重排裂解的结果。

(4) 3, 20-双异丙亚氨基-18-羟基-5 $\alpha$ -孕甾烷 (2257) 在 C<sub>17</sub> 侧链上能进行麦氏重排裂解得离子  $m/z$  85, 离子 a、b 和 c 均未出现。高质量端的离子是 M-CH<sub>3</sub>, M-CH<sub>2</sub>O 和 M-CH<sub>2</sub>O-CH<sub>2</sub>CHN=C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>。

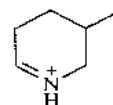
(5) 番茄次碱 (2258) 的离子  $m/z$  138 和  $m/z$  114 是特征性离子, 结构如下:



$m/z$  138

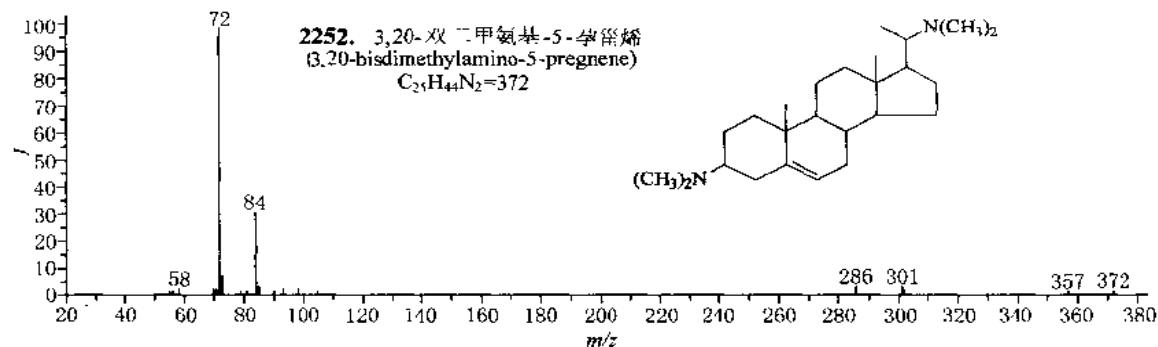
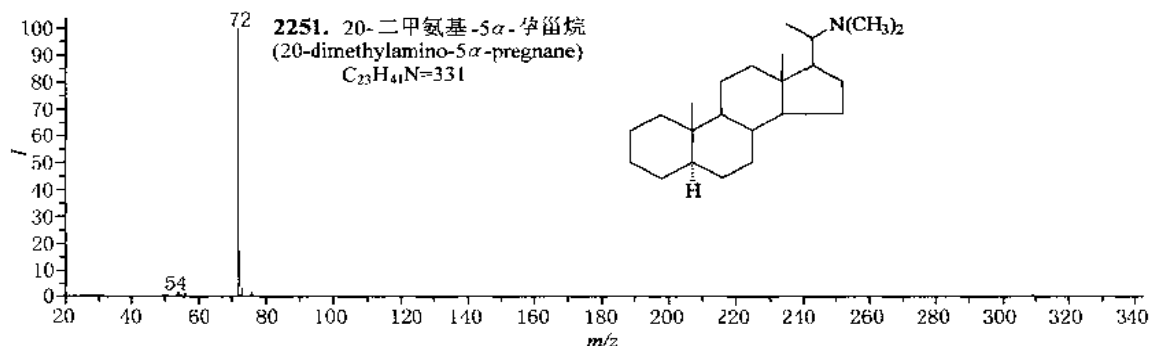


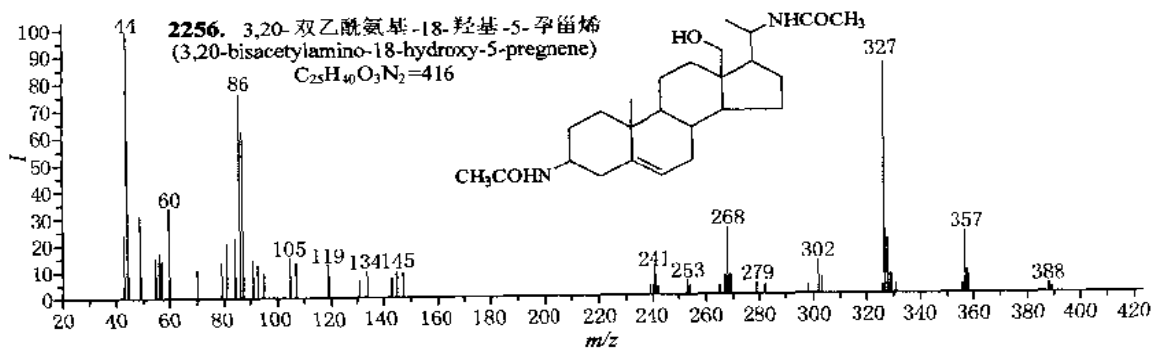
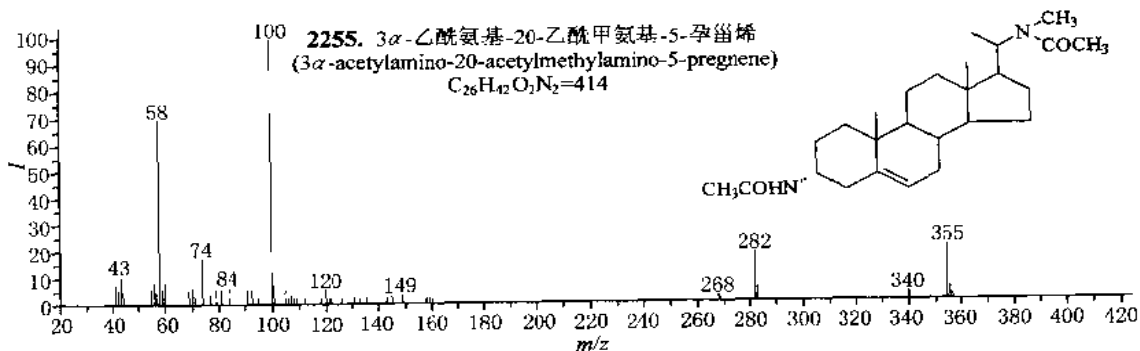
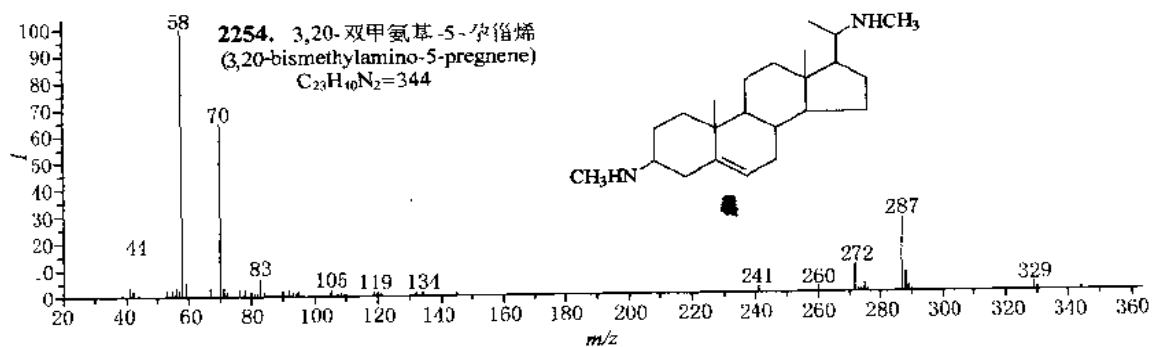
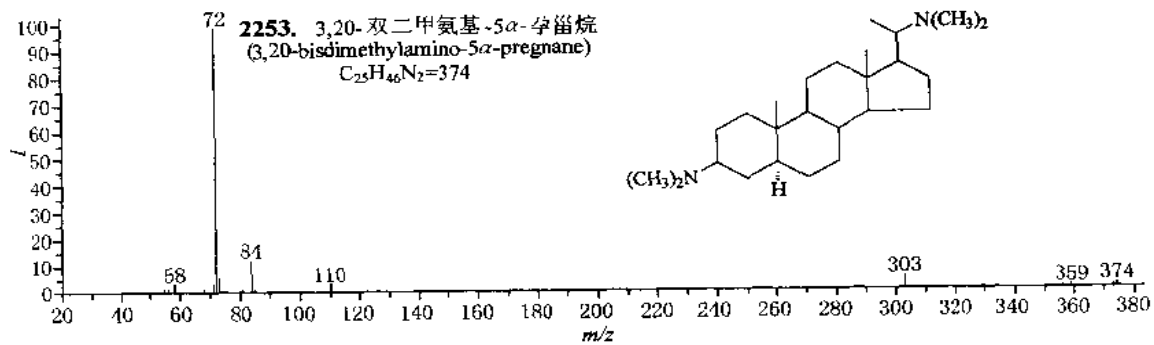
$m/z$  114



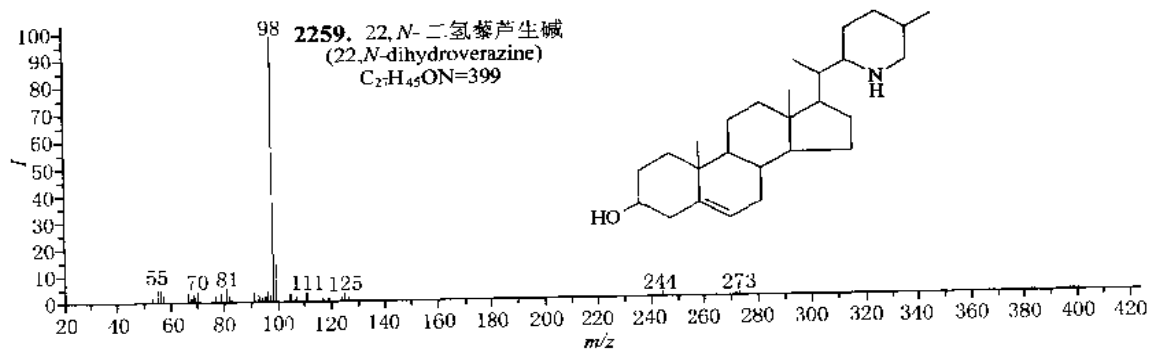
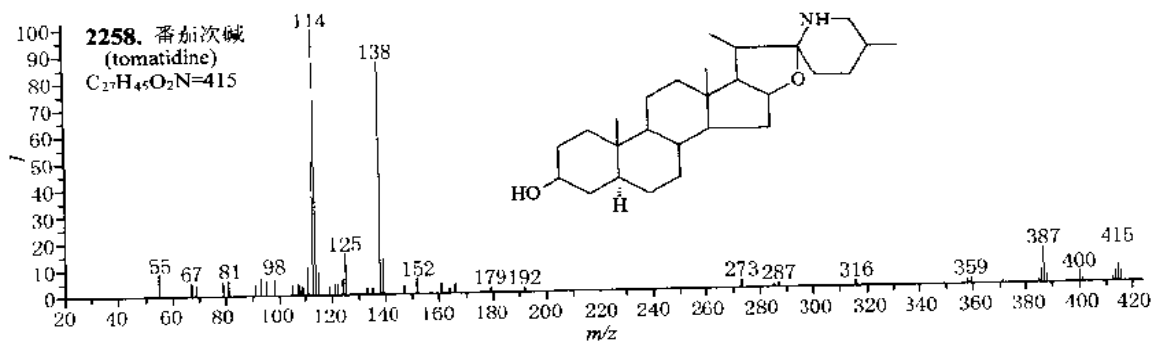
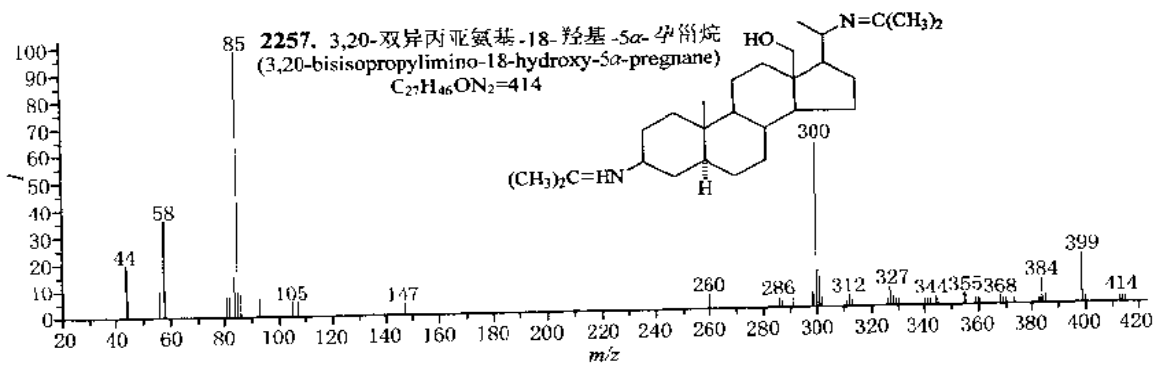
$m/z$  98

22. N-二氢藜芦生碱 (2259) 的基峰是  $m/z$  98, 这也是一个特征性离子。





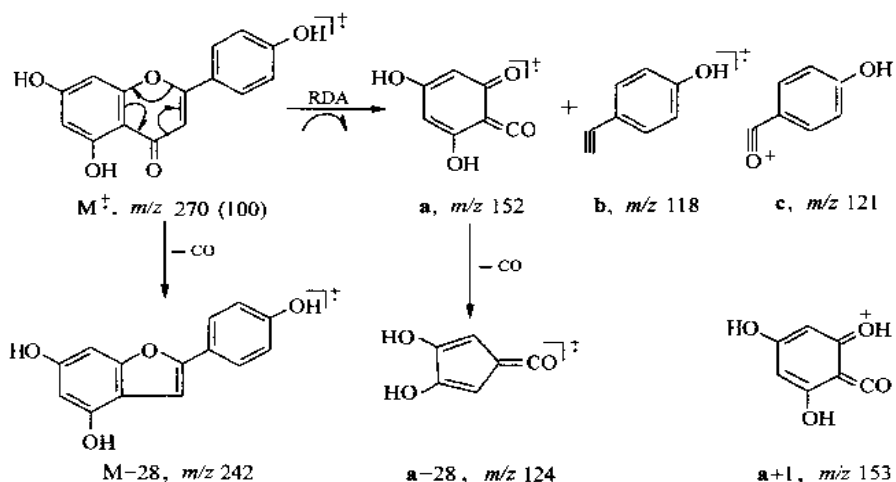




## 第十七章 黄酮、黄烷和查耳酮类

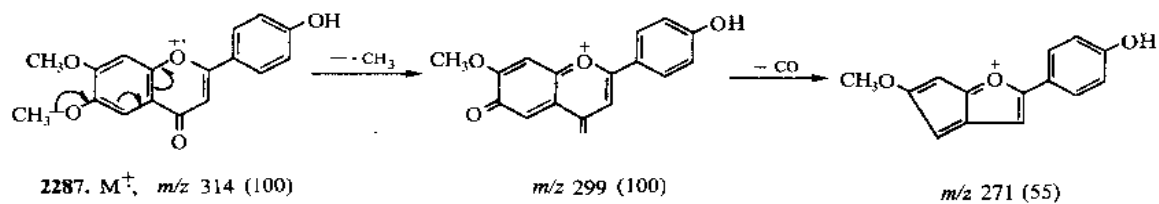
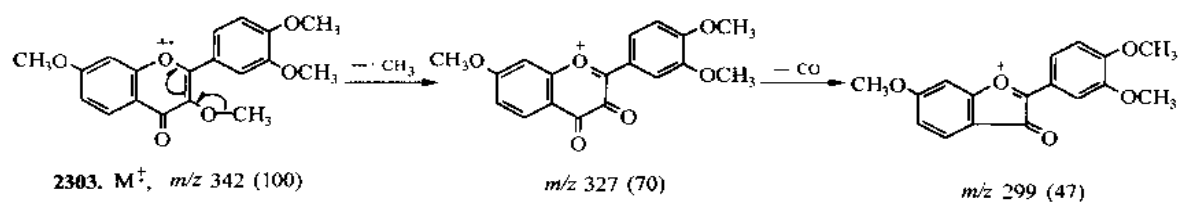
### 第一节 黄酮类

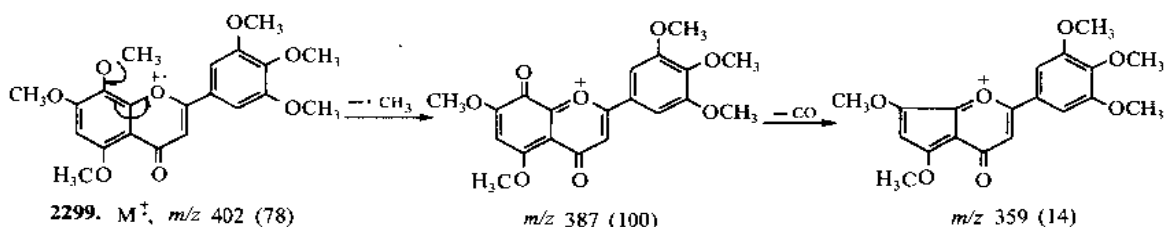
(1) 黄酮 (2260) 和羟基黄酮类 (2261~2267) 的主要裂解是 C 环的 RDA 裂解, 生成含 A 环的离子 **a** 和含 B 环的离子 **b**, 另有离子  $M-CO$ ,  $a+1$ ,  $a-CO$  和离子 **c**, 举例:



(2)  $C_3$ 、 $C_6$ 、 $C_8$  无甲氧基取代的羟基和甲氧基黄酮类 (2268~2282), 裂解基本同上, 但随取代基的增多, 离子 **a**、**b** 和 **c** 随之减弱, 甚至不出现。

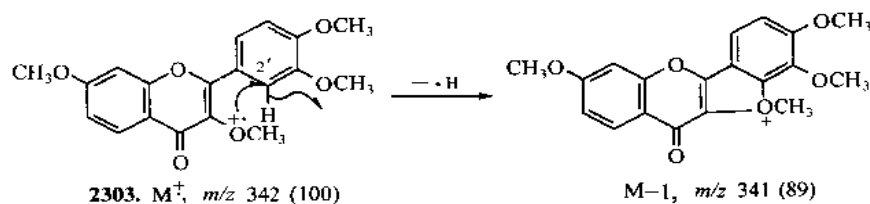
(3)  $C_3$ 、 $C_6$  和  $C_8$  有甲氧基取代的黄酮类 (2283~2311), 多数有很强的  $M-CH_3$  和  $M-CH_3-CO$  离子。例:



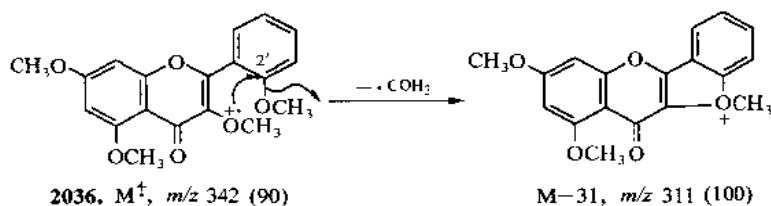


另外, 这类化合物的离子  $a$  常不出现, 而是出现  $a-15$  和  $a-28$  离子。

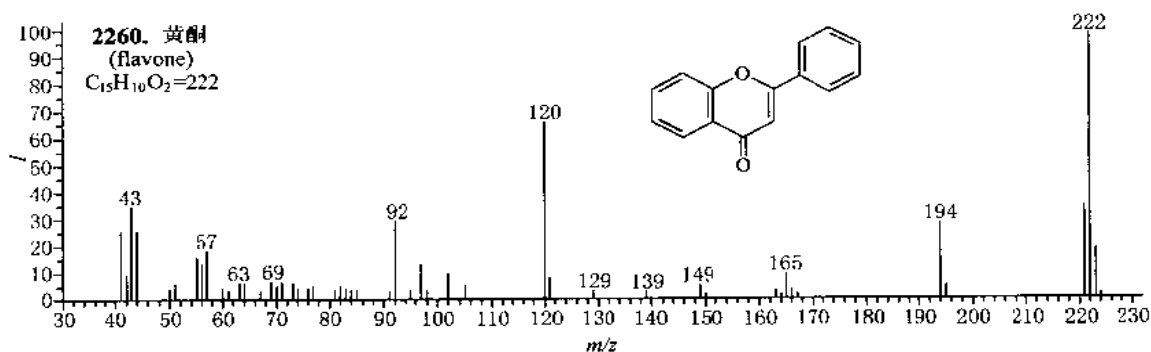
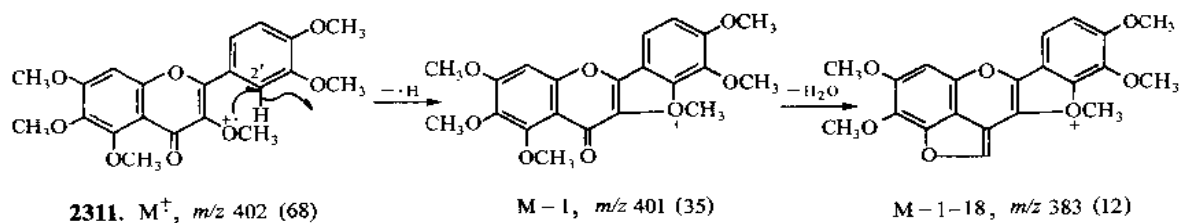
(4)  $C_4$  甲氧基黄酮类除了有较强的  $M-CH_3$  和  $M-CH_3-CO$  离子外, 大多数的  $M-H$  离子很强, 失去的氢原子主要来自  $C_2'$ 。例:

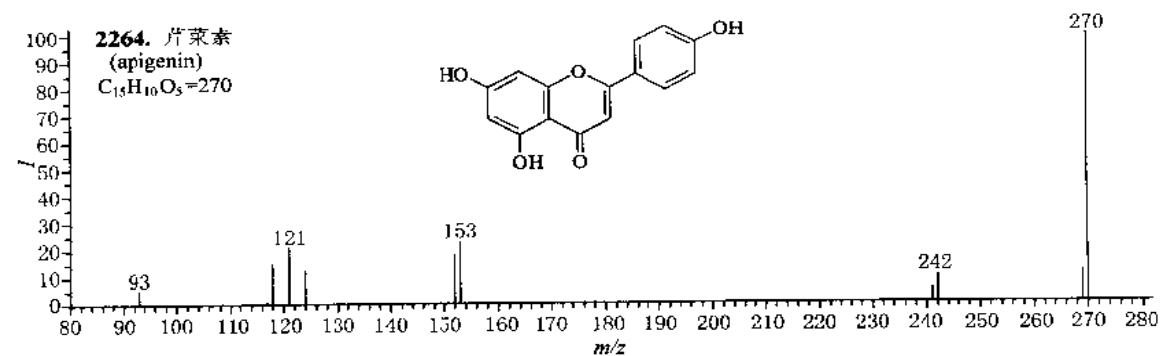
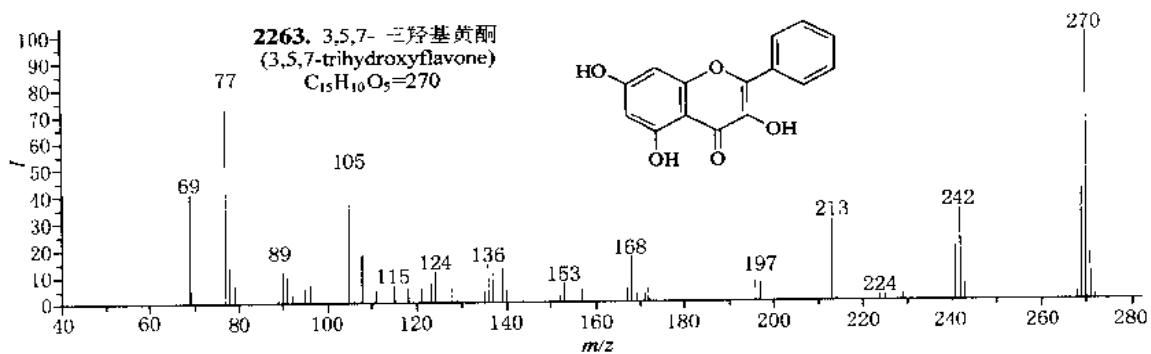
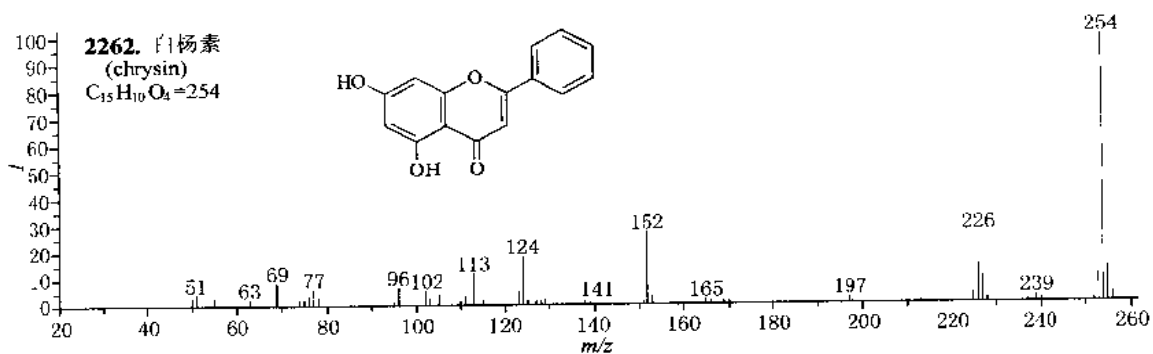
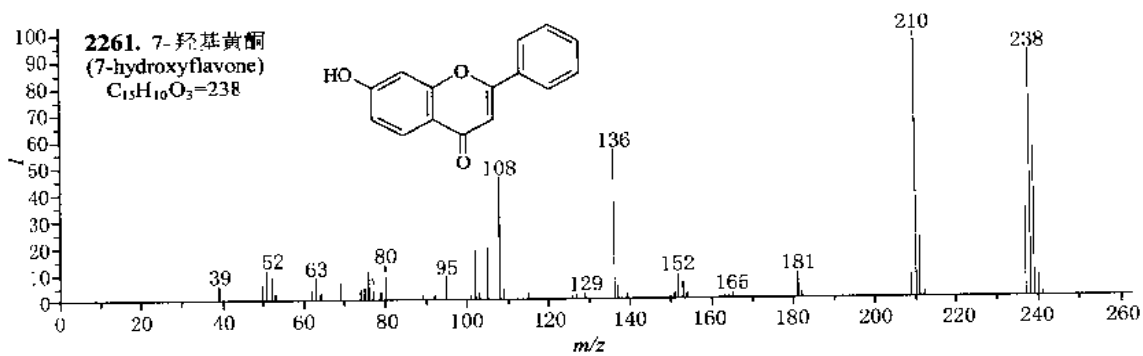


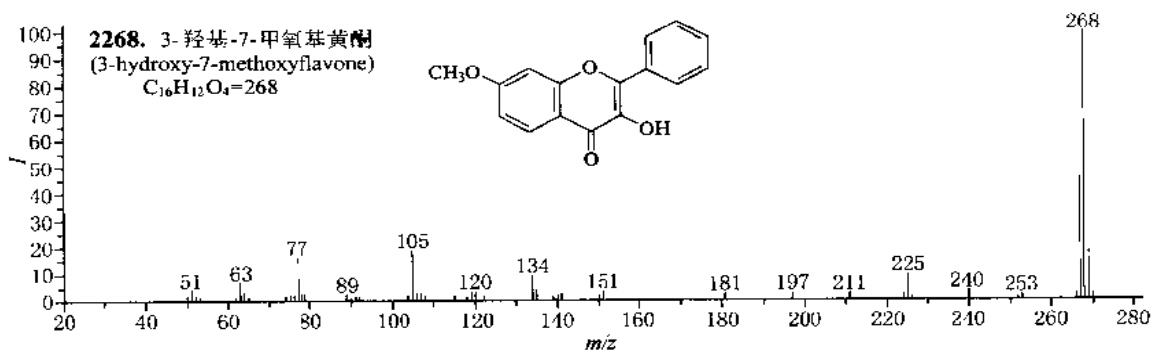
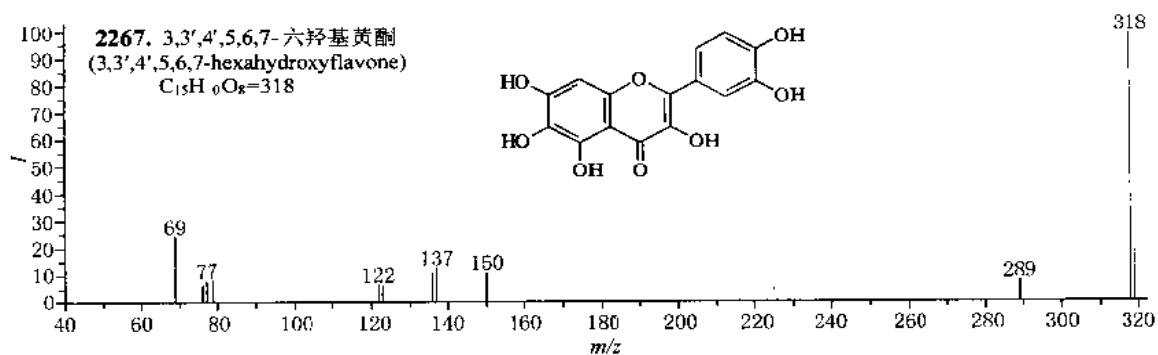
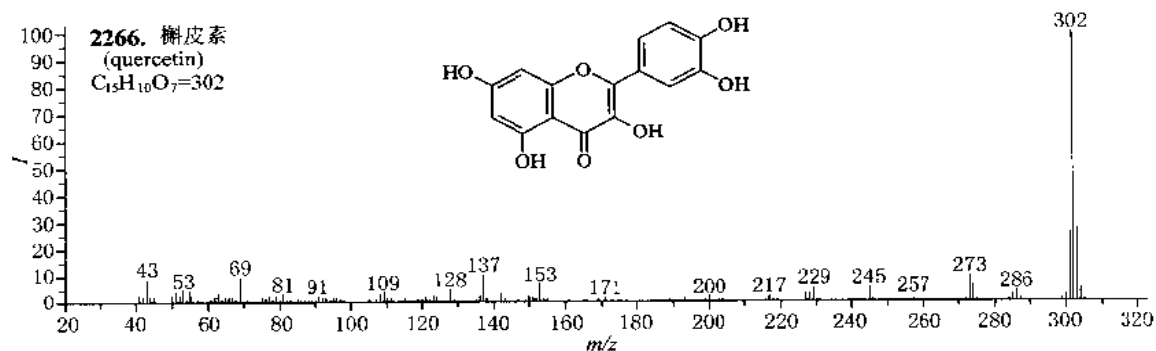
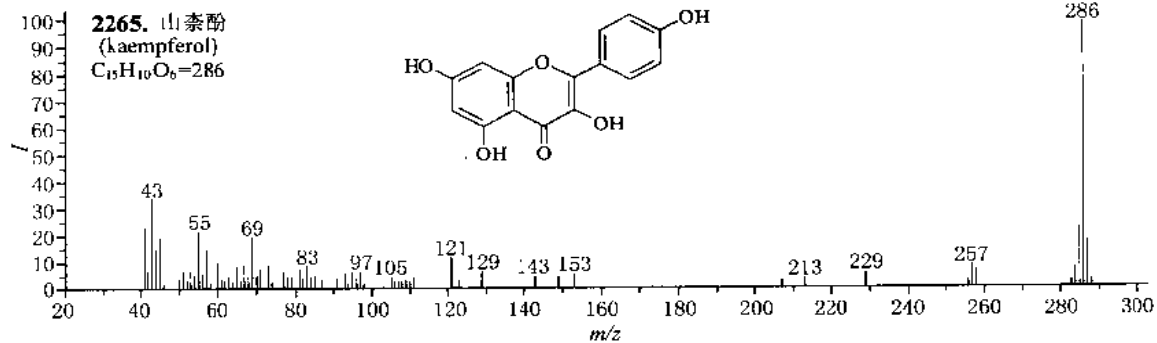
(5)  $C_2'$ 、 $C_3$  二甲氧基取代的黄酮类,  $M-OCH_3$  离子很强, 失去的甲氧基也是来自  $C_2'$ 。例:

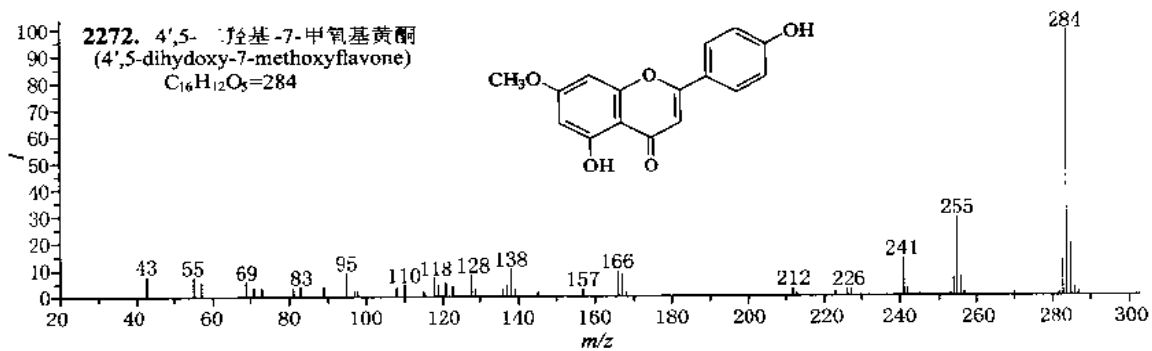
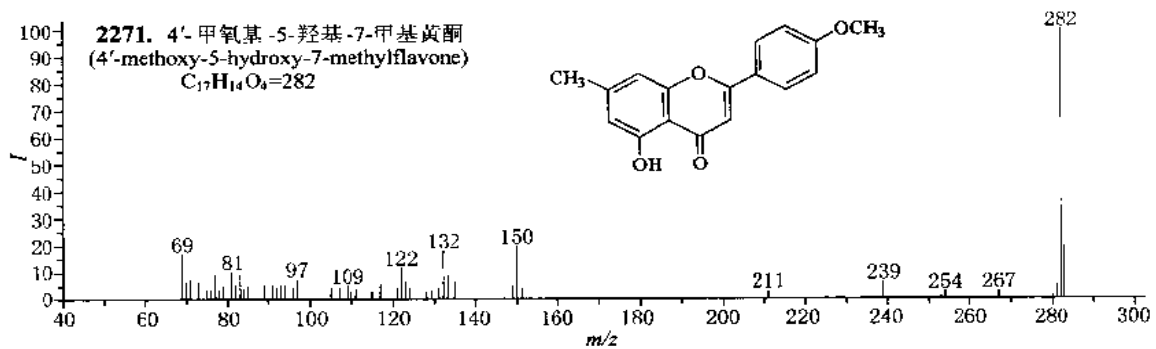
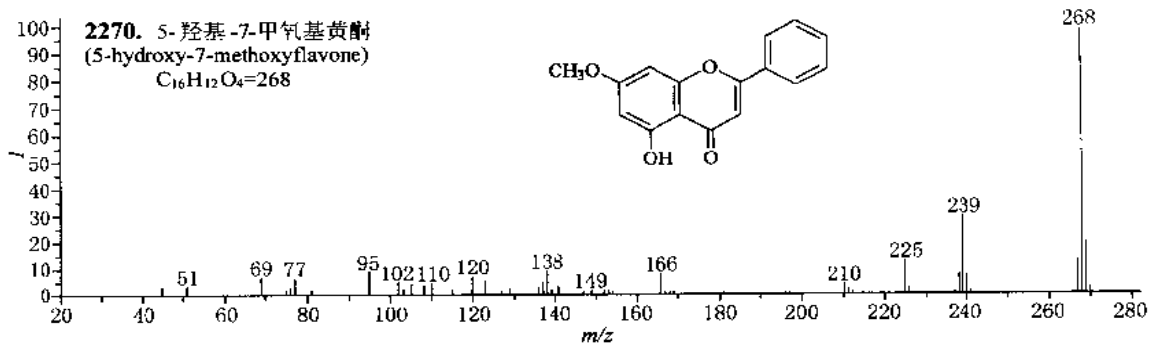
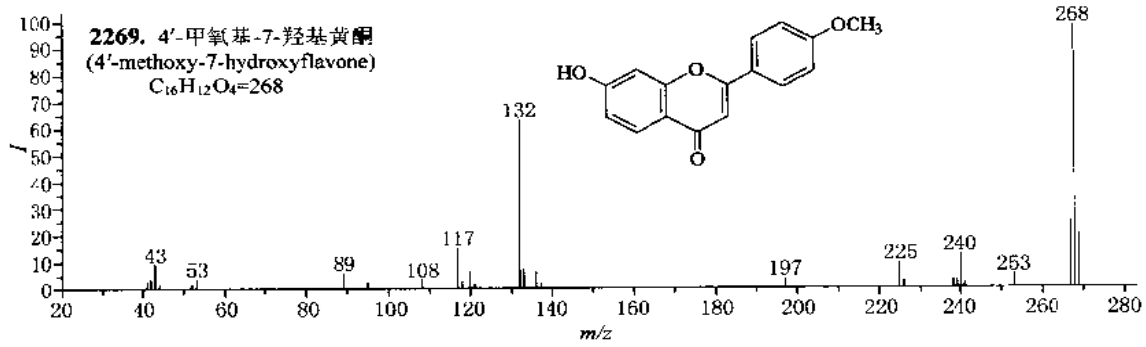


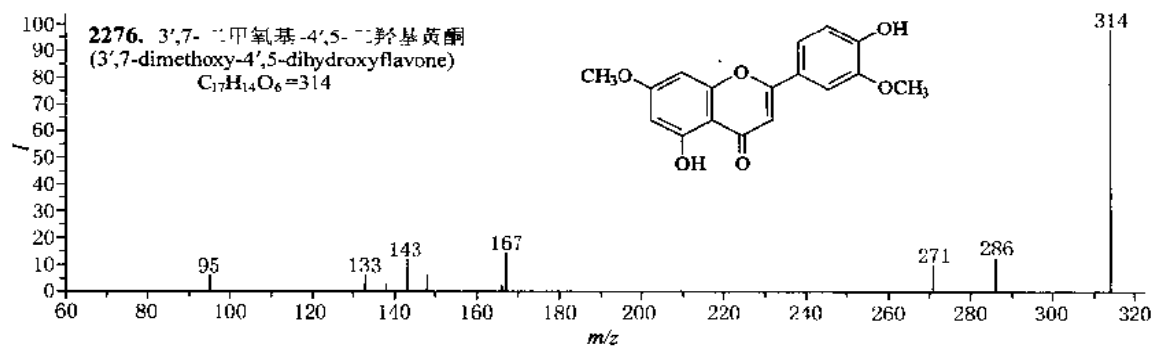
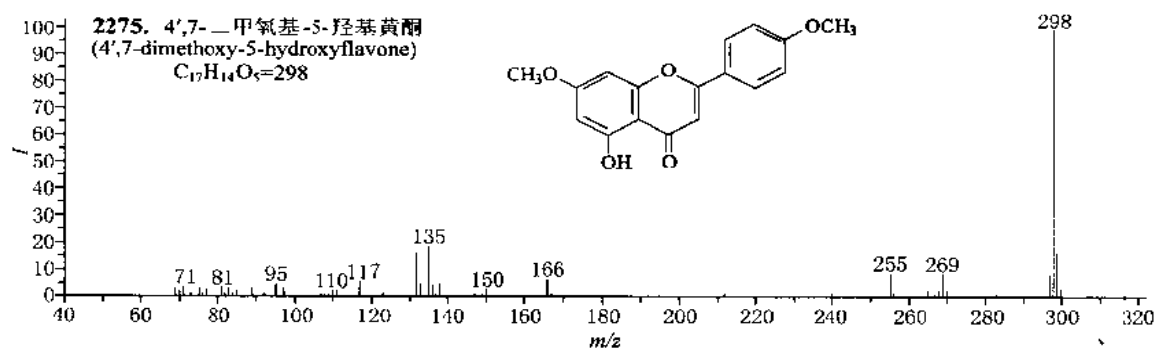
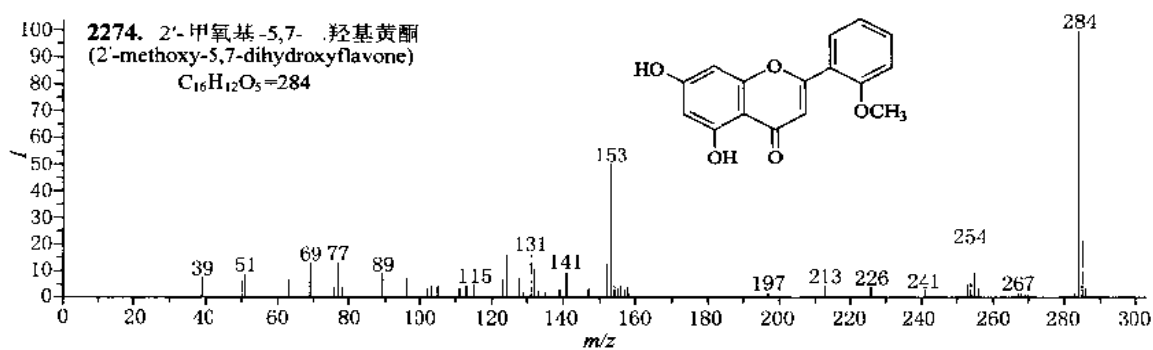
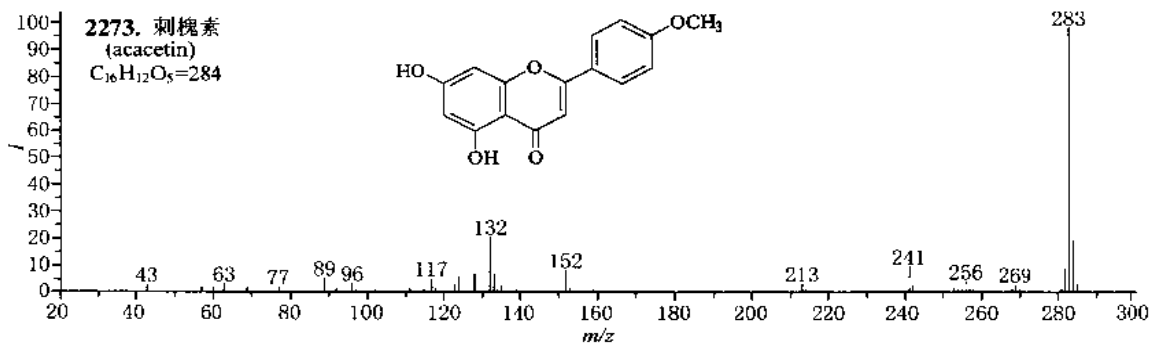
(6) 具有  $C_3$ 、 $C_5$  二甲氧基取代的黄酮类, 除了  $M-H$ ,  $M-CH_3$  和  $M-CH_3-CO$  的强离子外, 尚有弱离子  $M-H-H_2O$ , 失去的水多来自  $C_5$  甲氧基和  $C_4$  羰基。例:

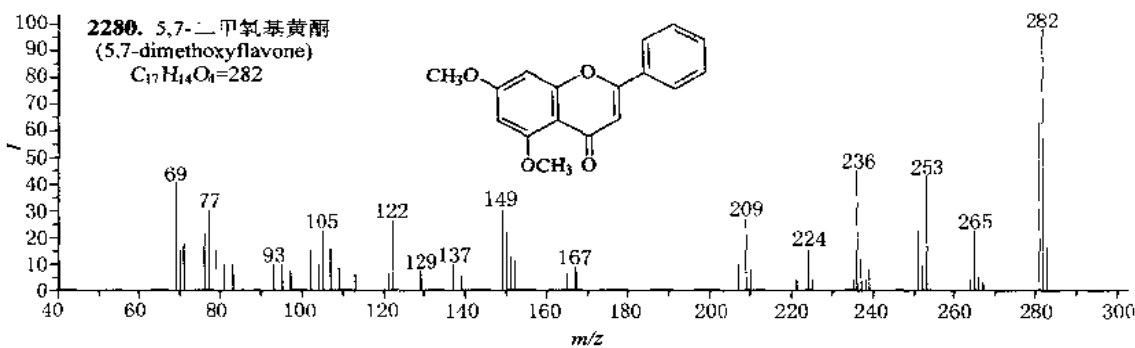
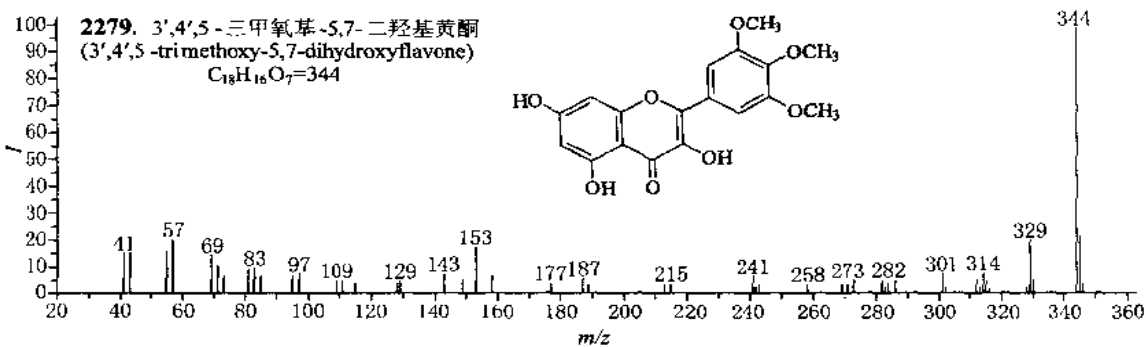
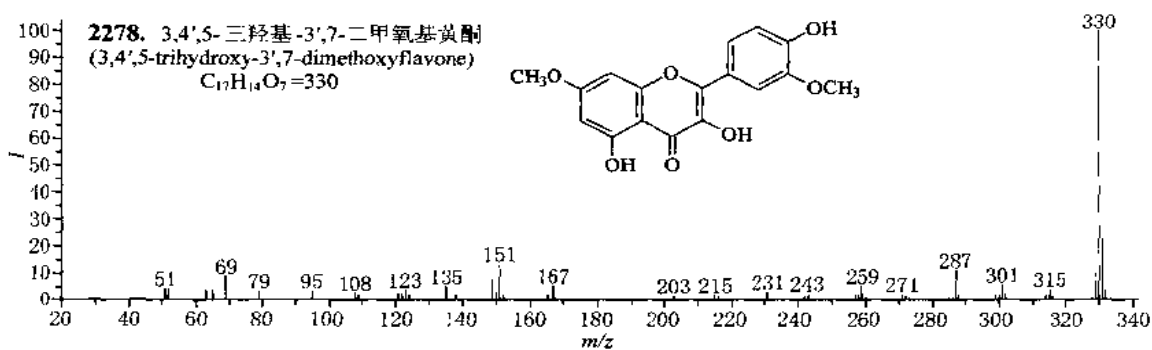
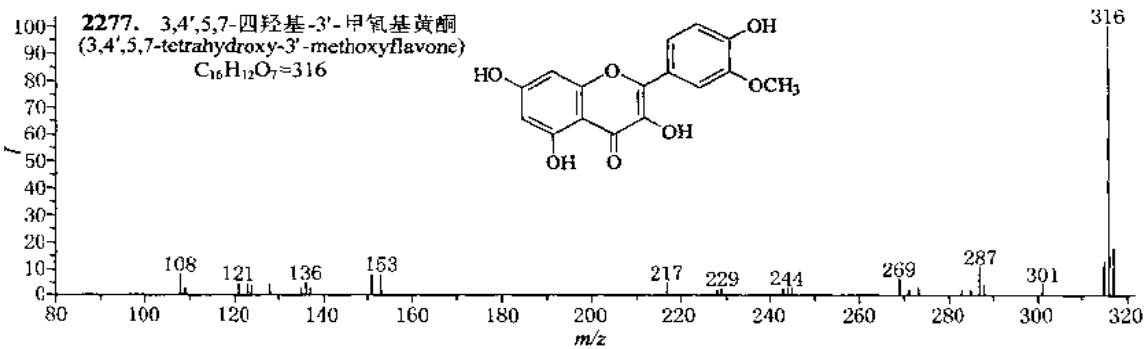




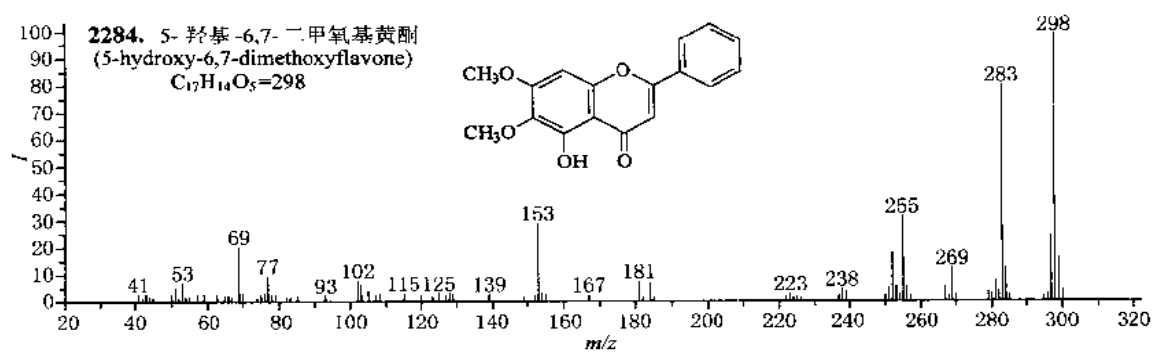
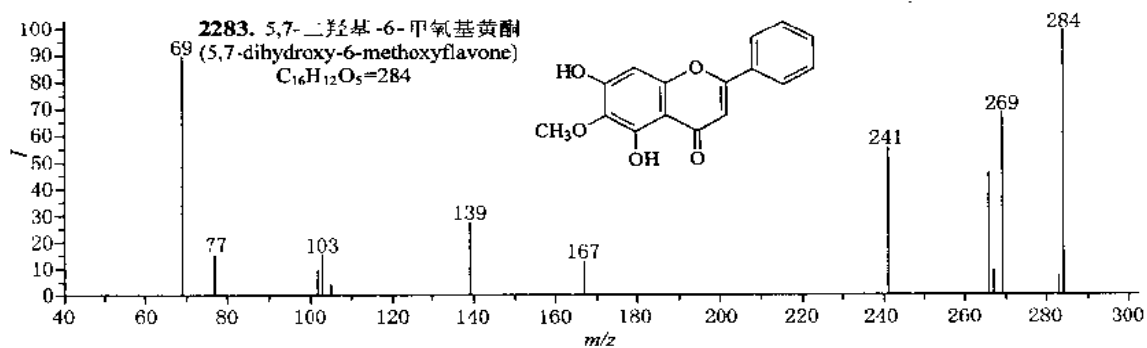
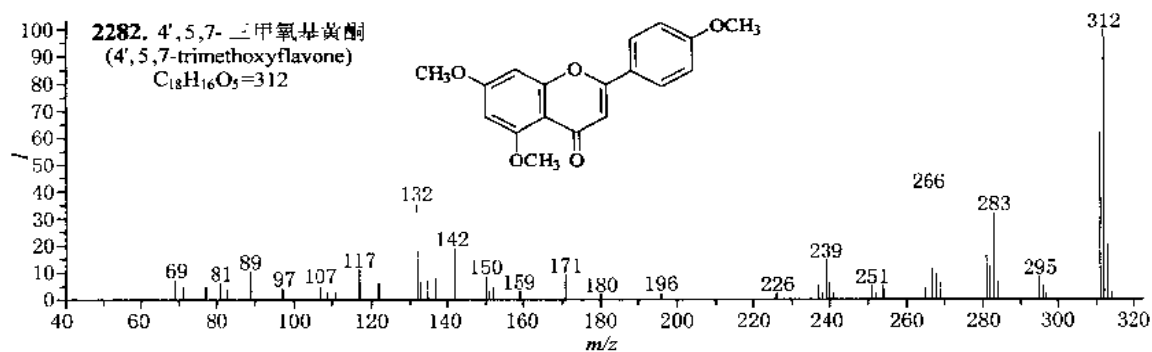
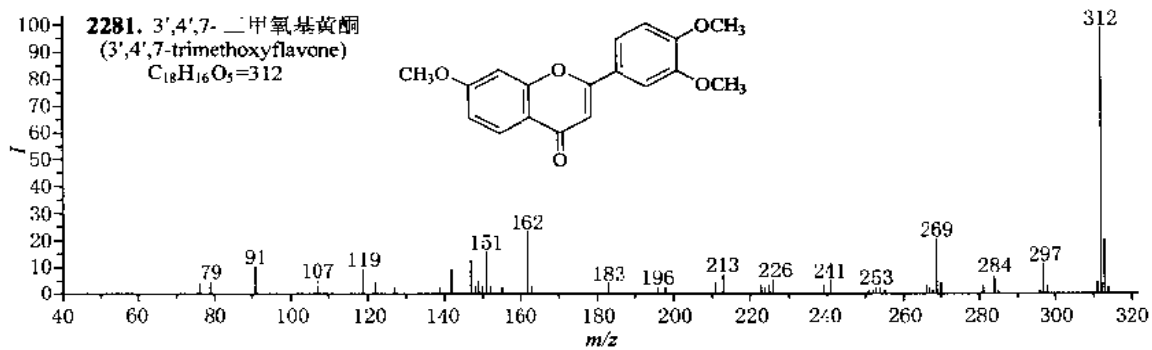


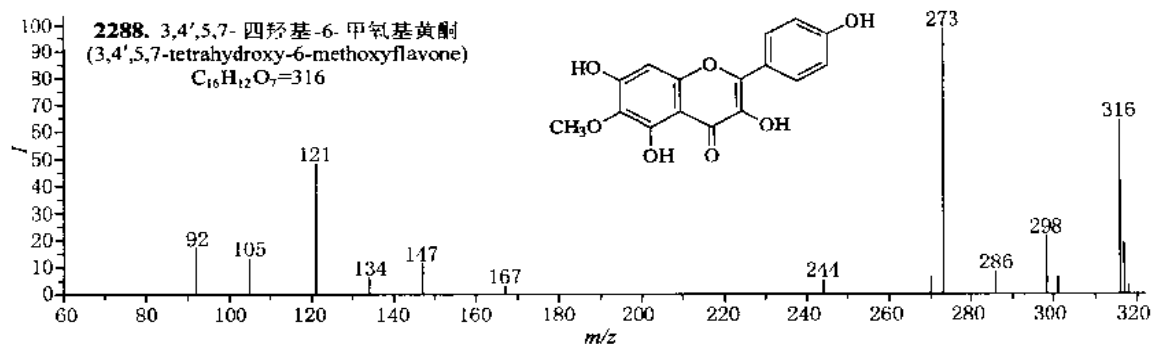
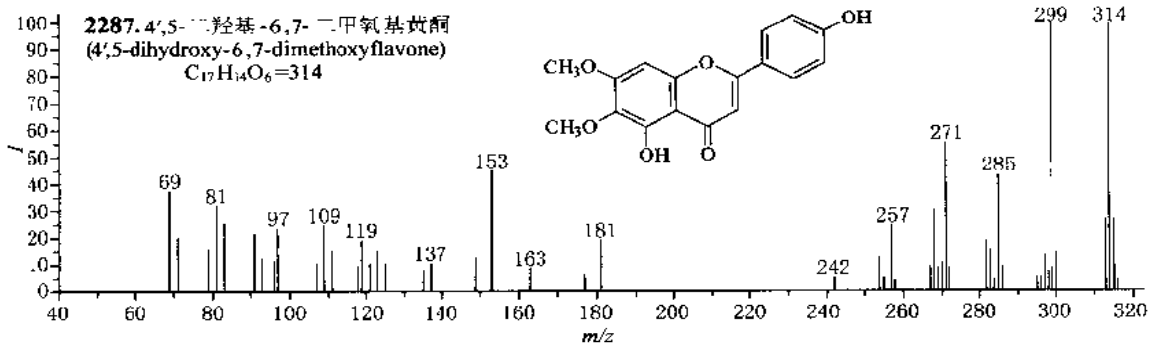
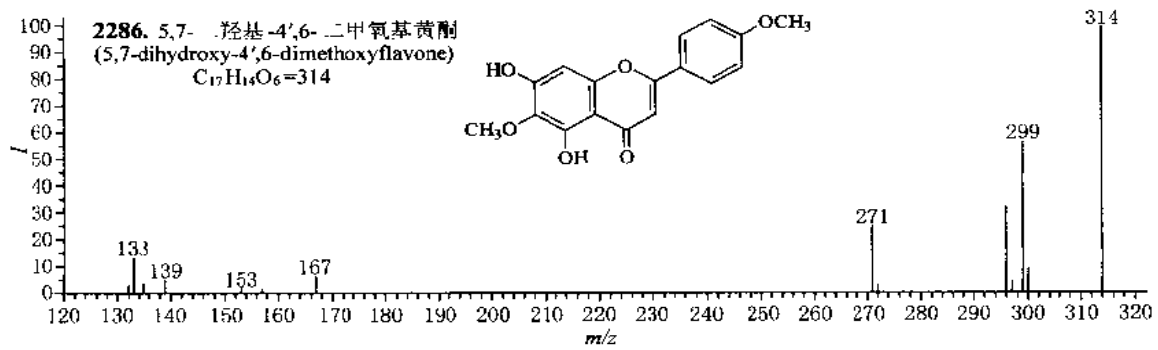
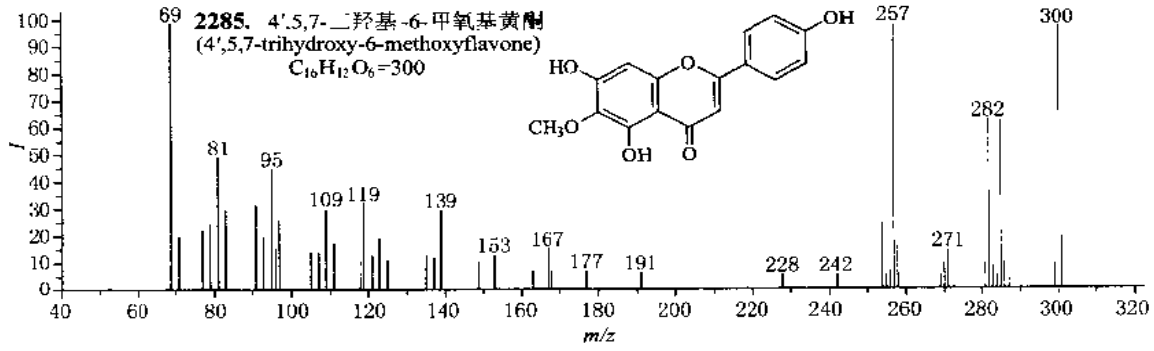


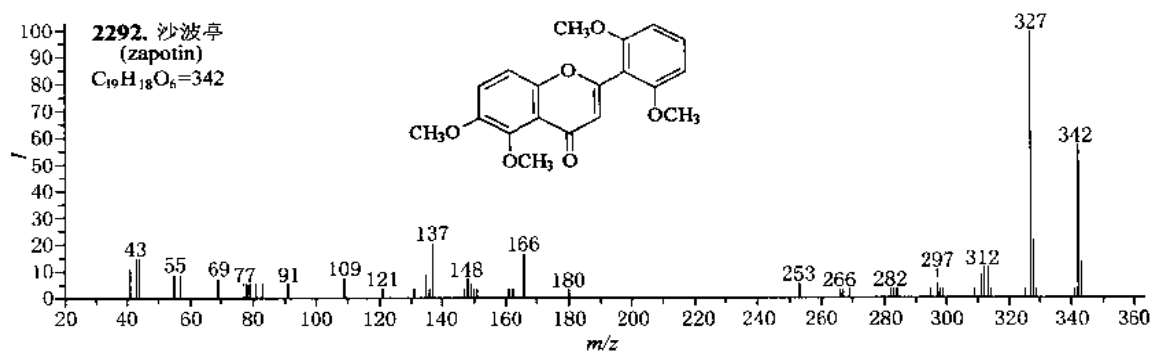
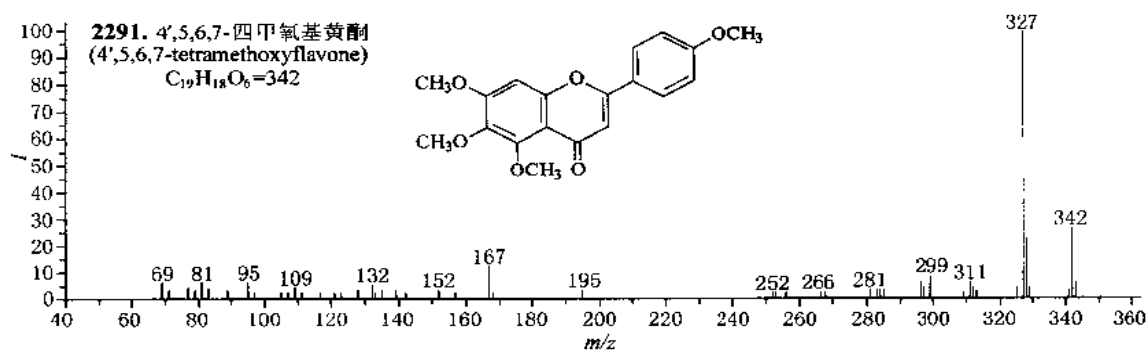
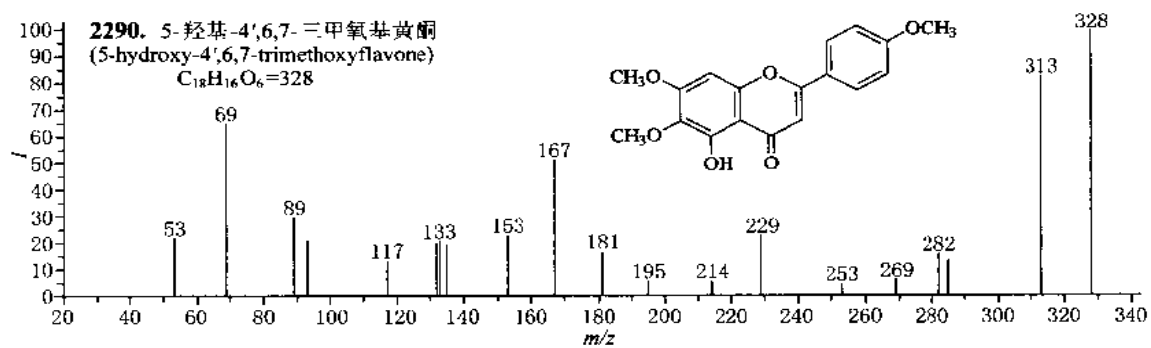
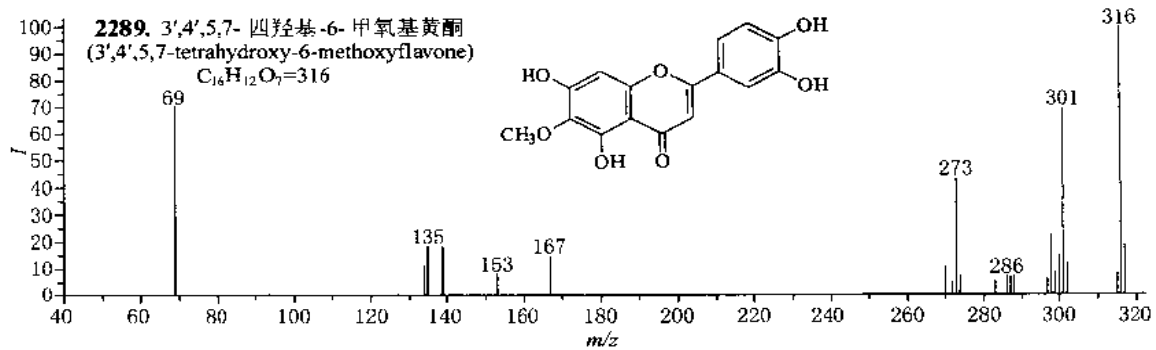


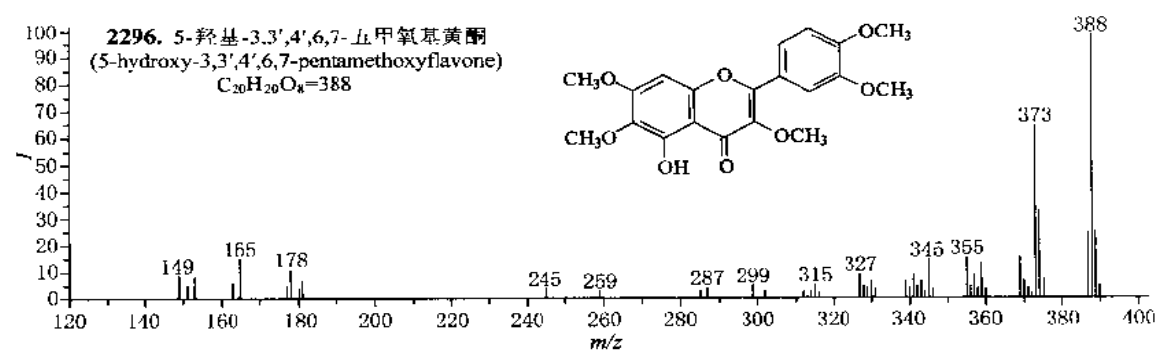
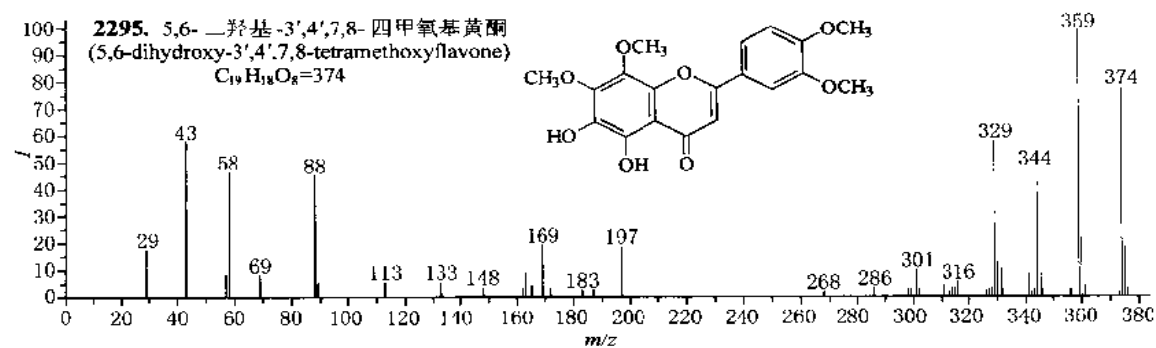
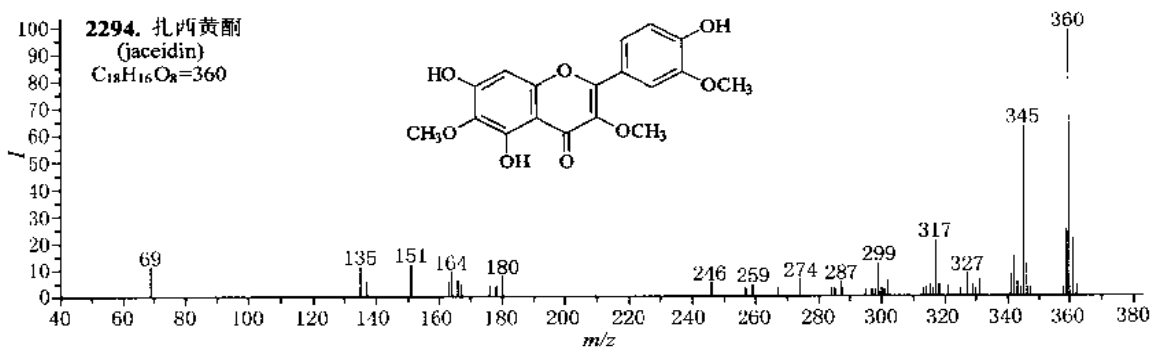
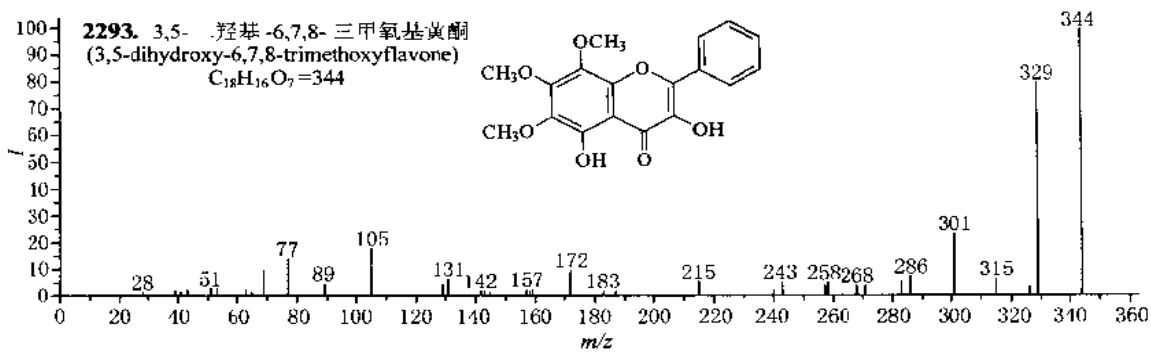


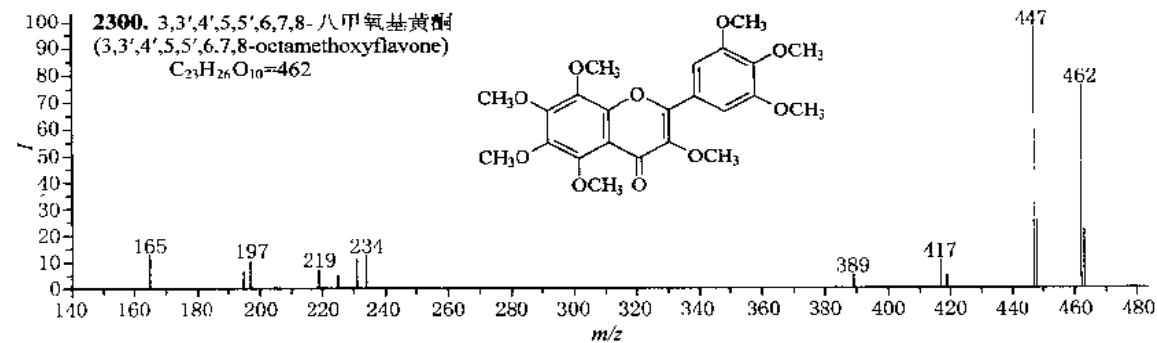
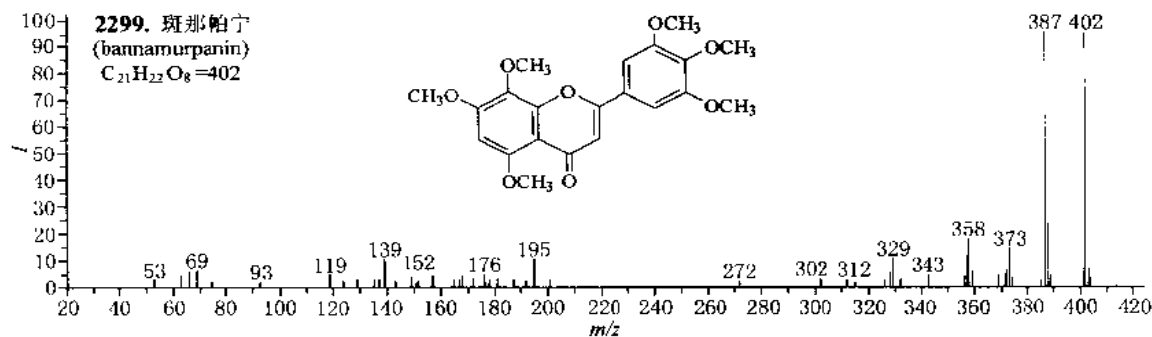
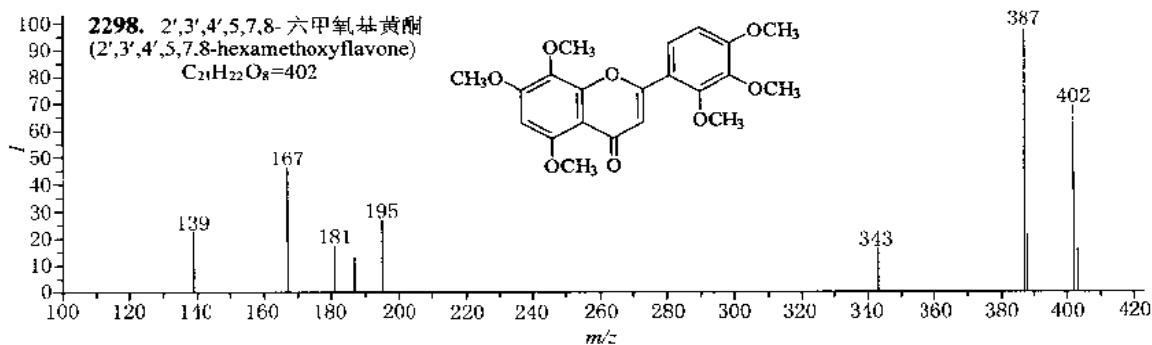
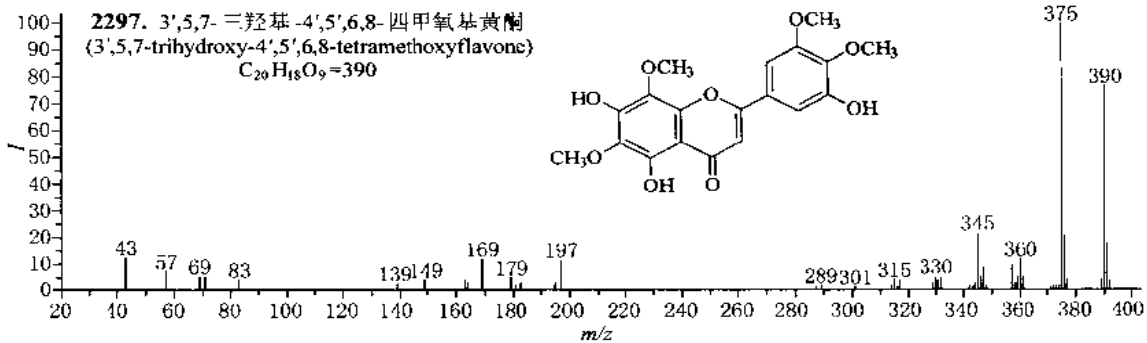


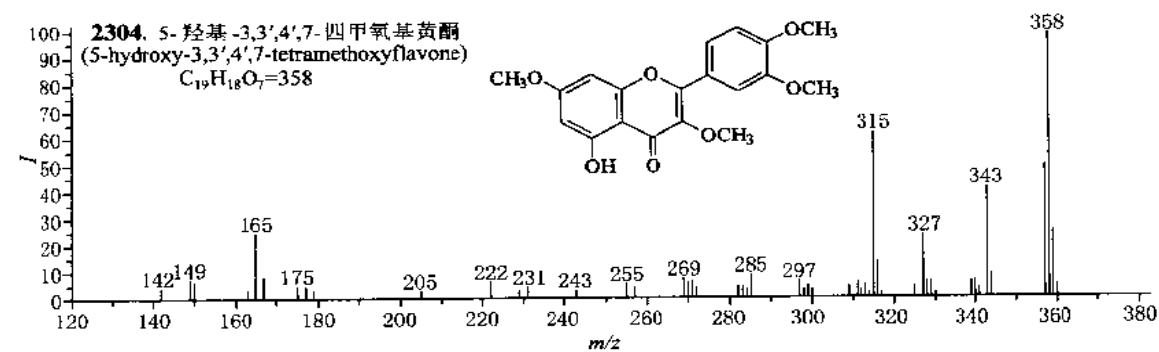
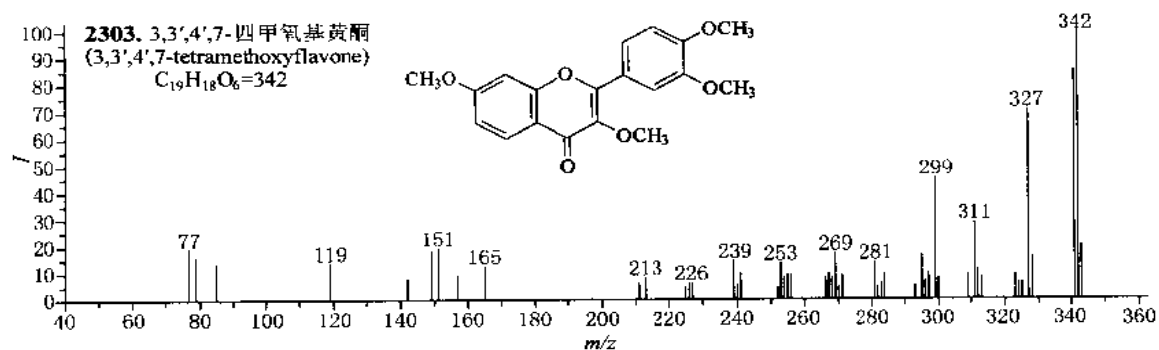
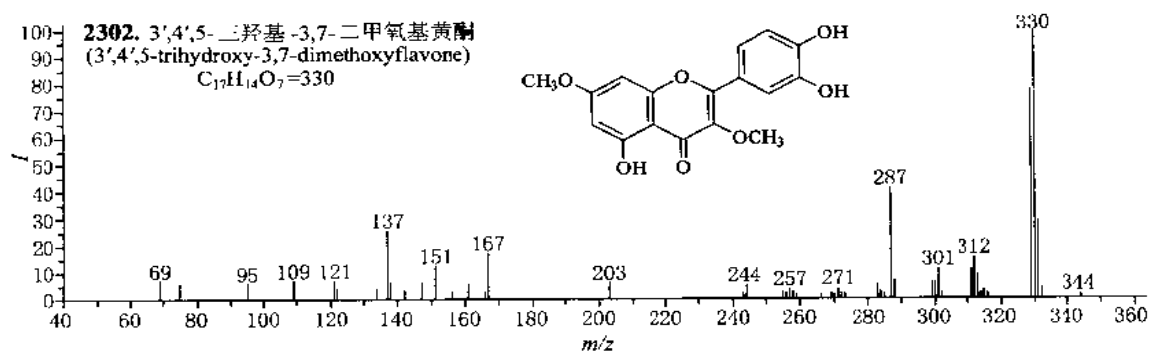
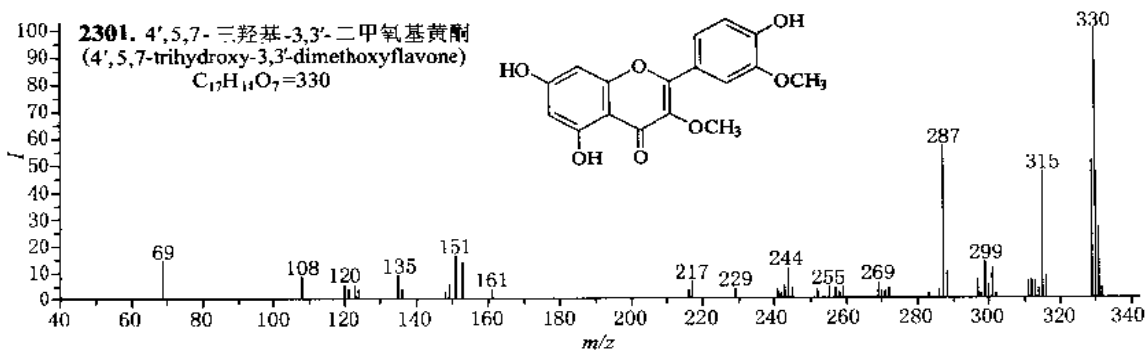


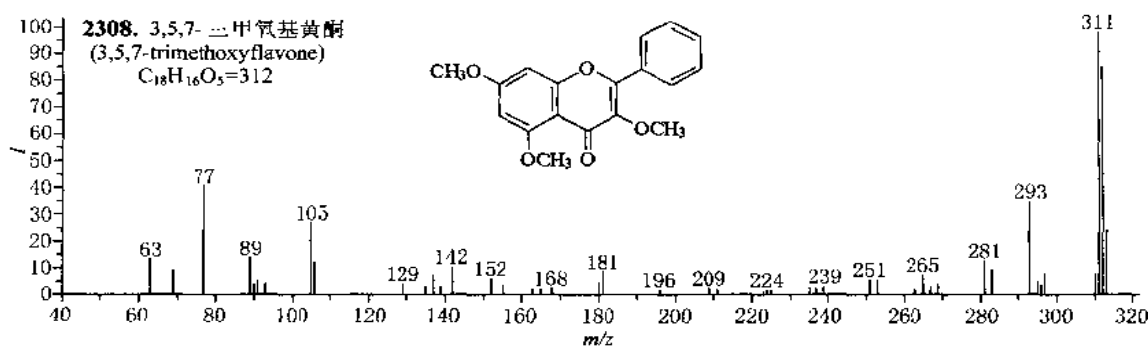
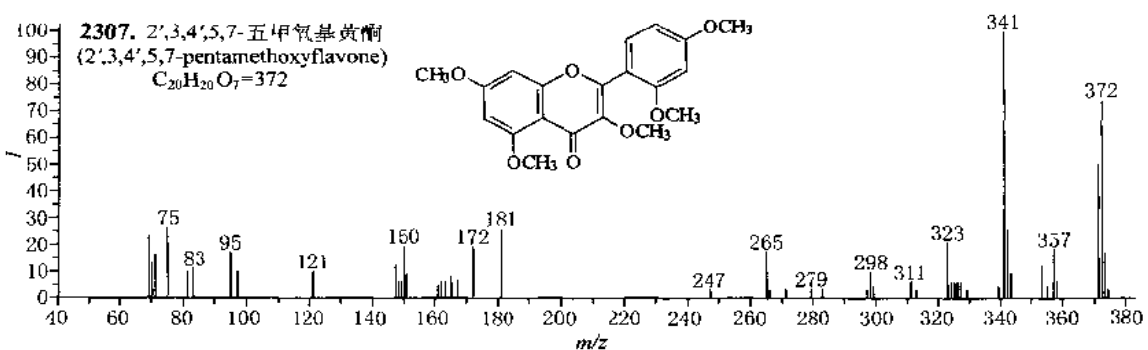
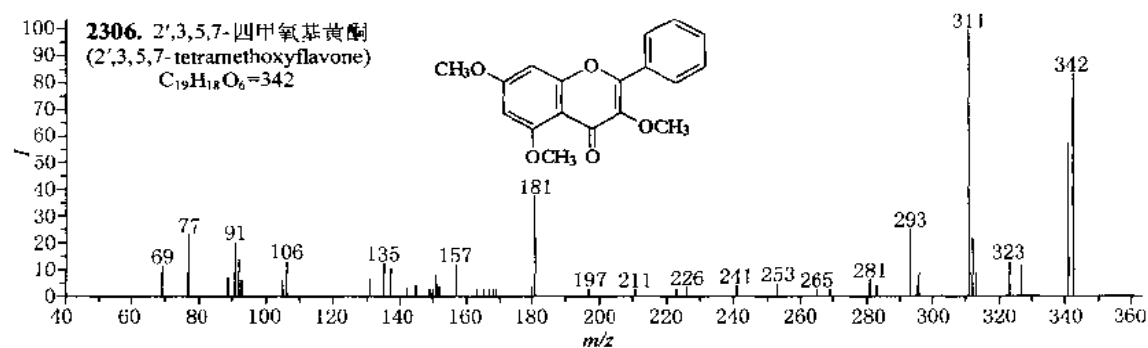
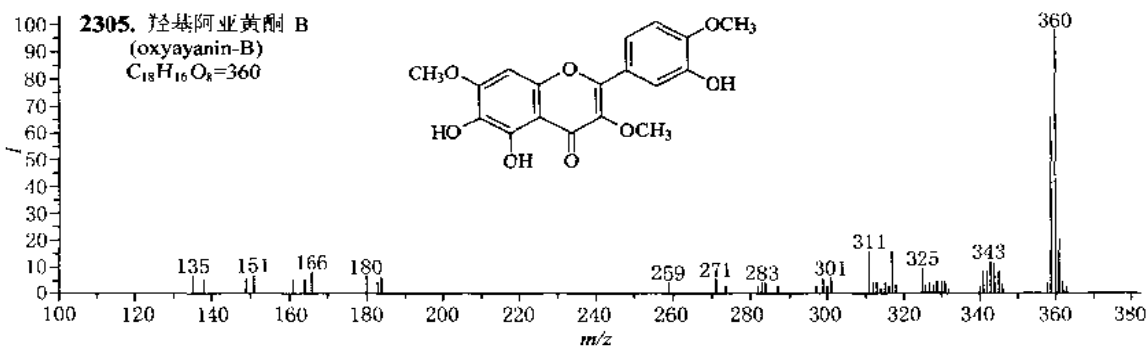


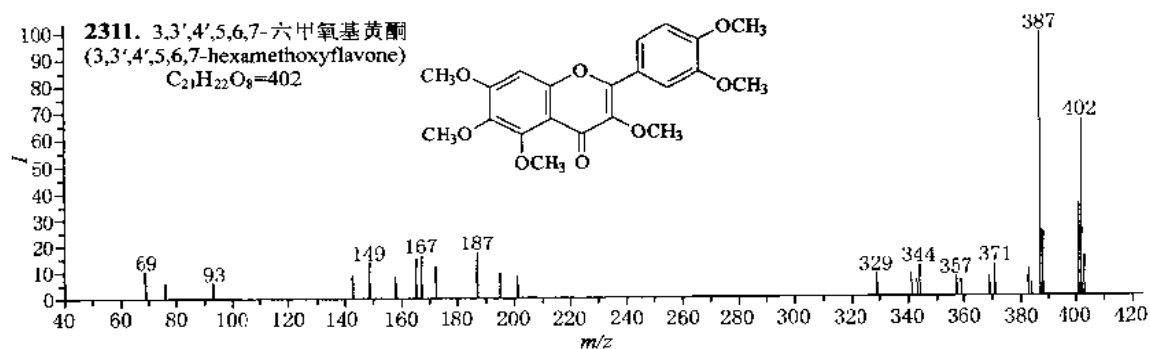
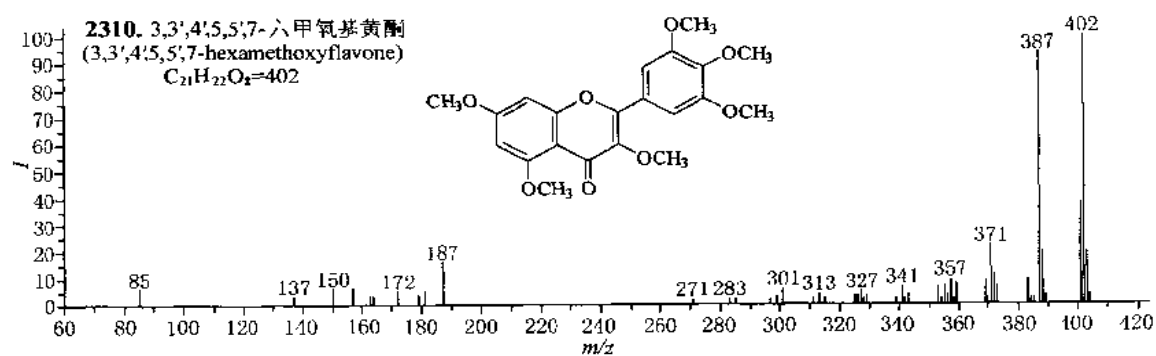
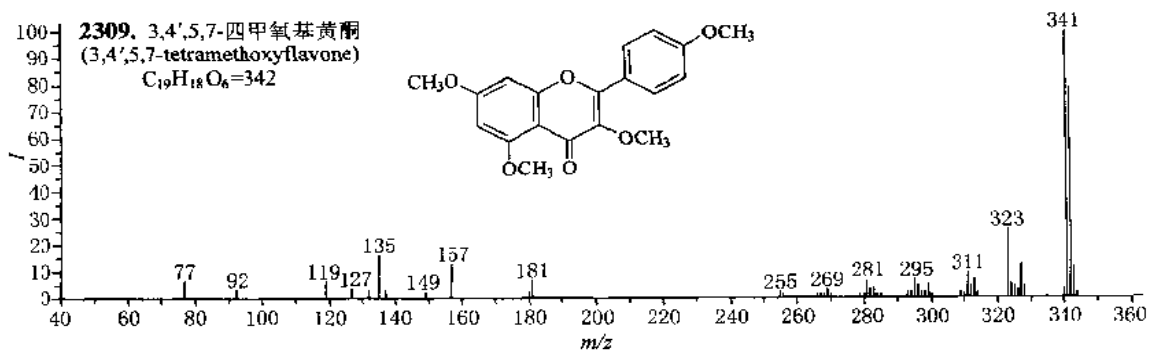








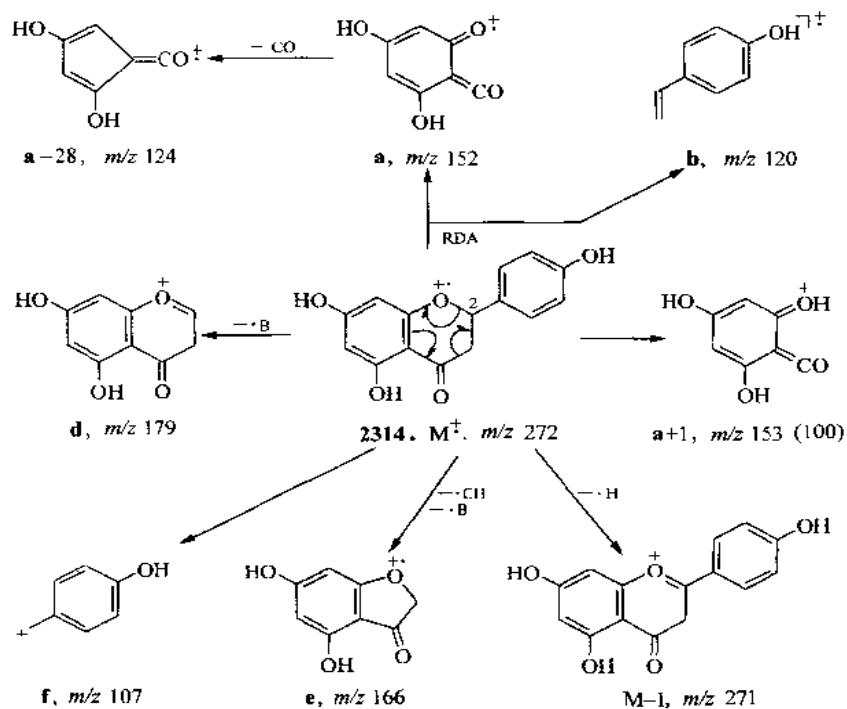




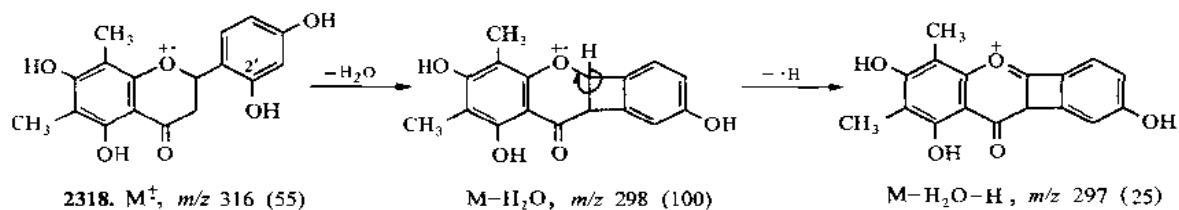
## 第二节 黄烷酮类

(1) 黄烷酮 (2312) 本身和羟基取代的黄烷酮 (2313~2316) 的  $M-H$  离子较强, 失去的氢原子应来自  $C_2$ , 离子  $a$ ,  $a+1$ ,  $b$  和  $a-28$  一般较强, 离子  $b$  比相应的黄酮类的离子  $b$  多两个质量数。区别于黄酮类, 黄烷酮尚有自己的特征裂解, 即能失去 B 环得离子  $d$ , 失去 B 环加一次甲基得离子  $e$ , 和存在着重排离子  $f$ 。以那灵黄烷酮 (2314) 为例, 其裂解如下:

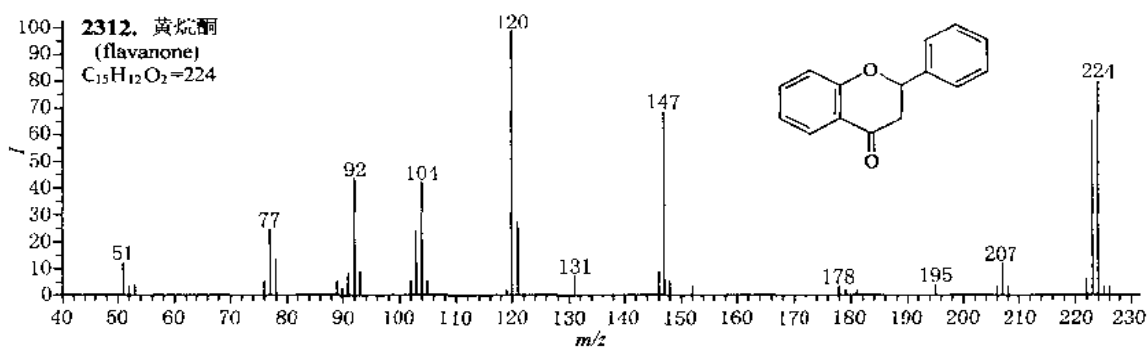


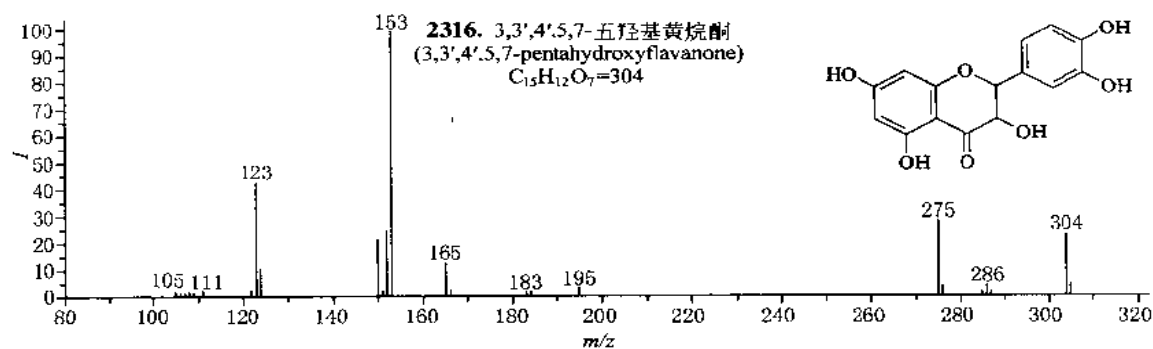
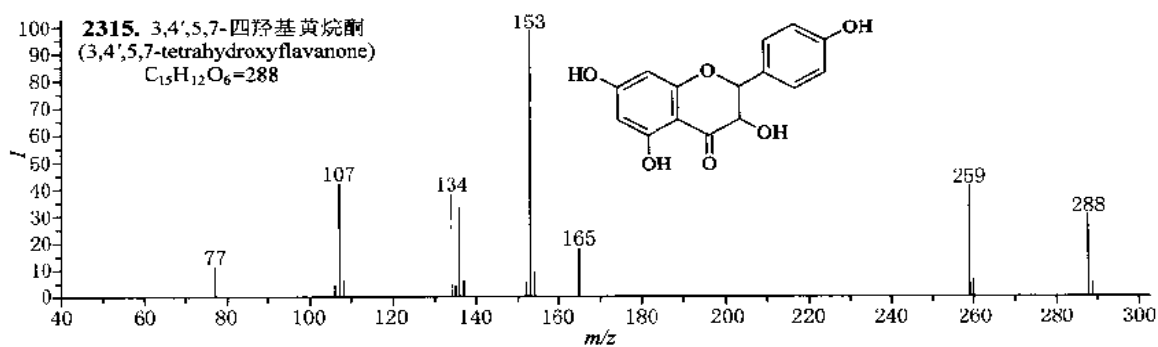
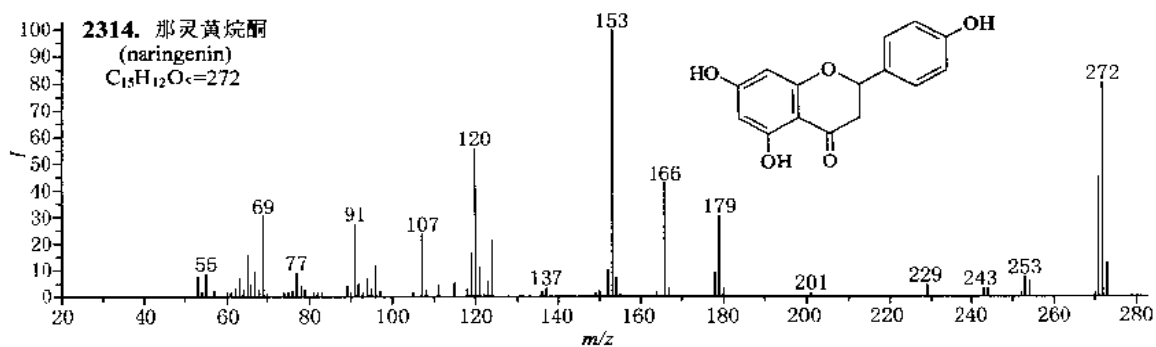
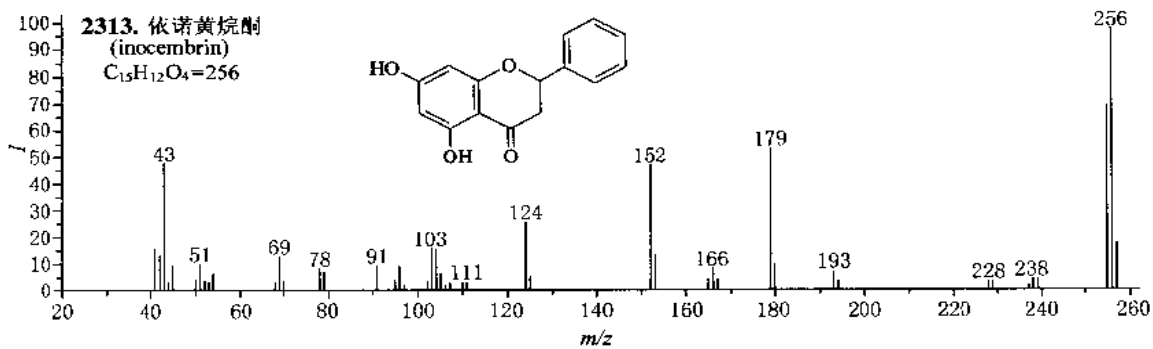


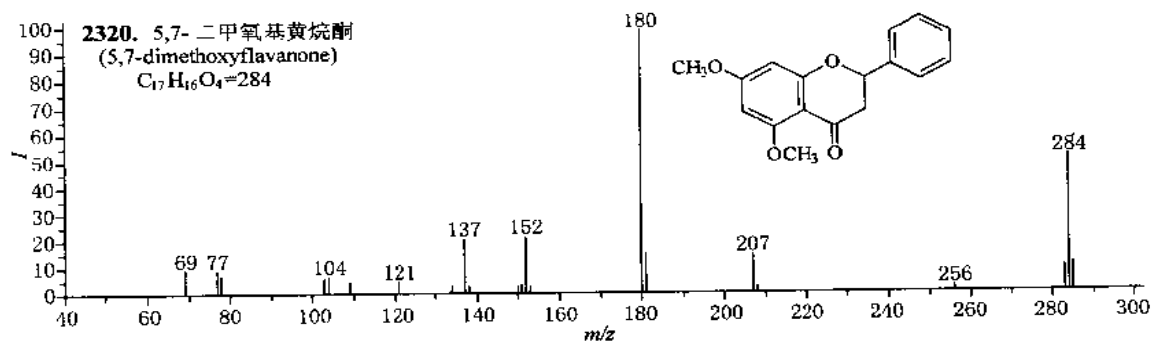
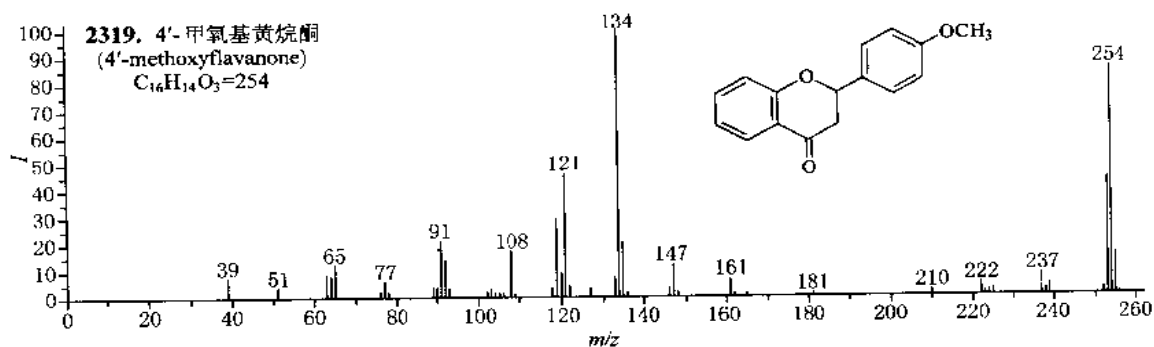
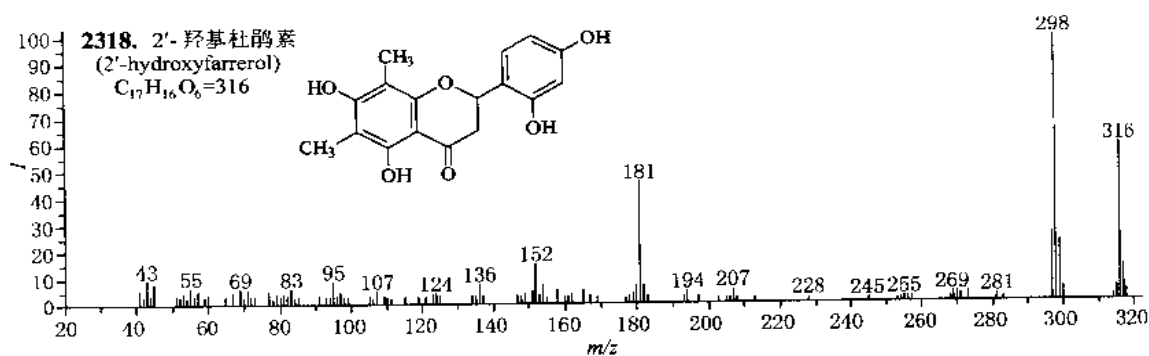
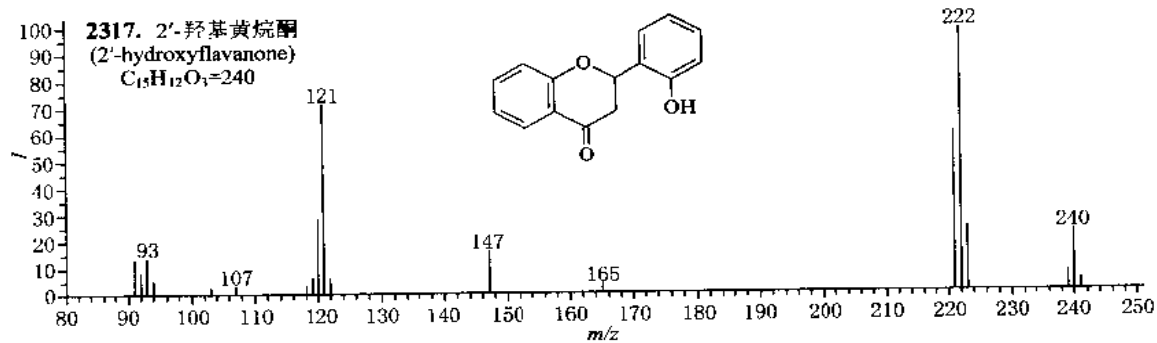
(2)  $C_2$ 羟基黄酮酮类 (2317, 2318) 除上述裂解外, 更有自己的特征裂解方式, 即失水和再失氢原子所得离子很强, 以 2'-羟基杜鹃素 (2318) 为例:

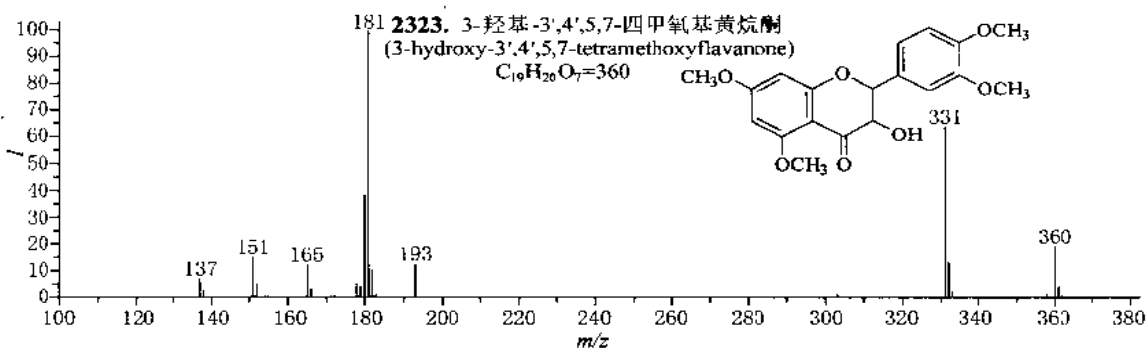
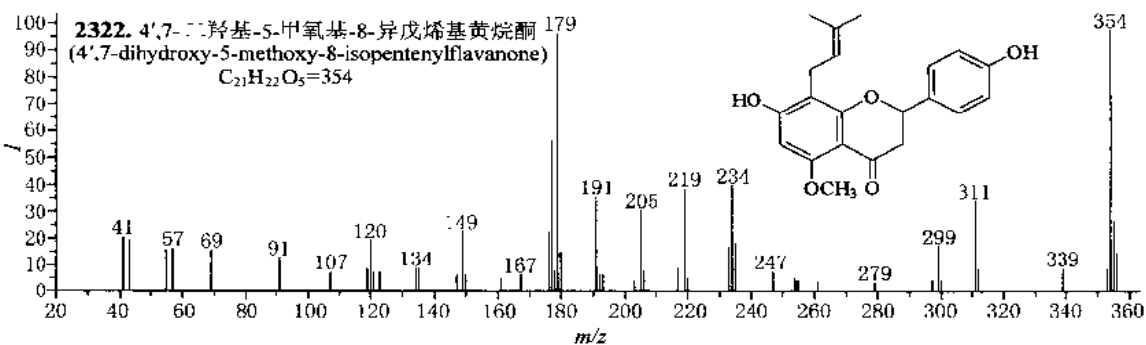
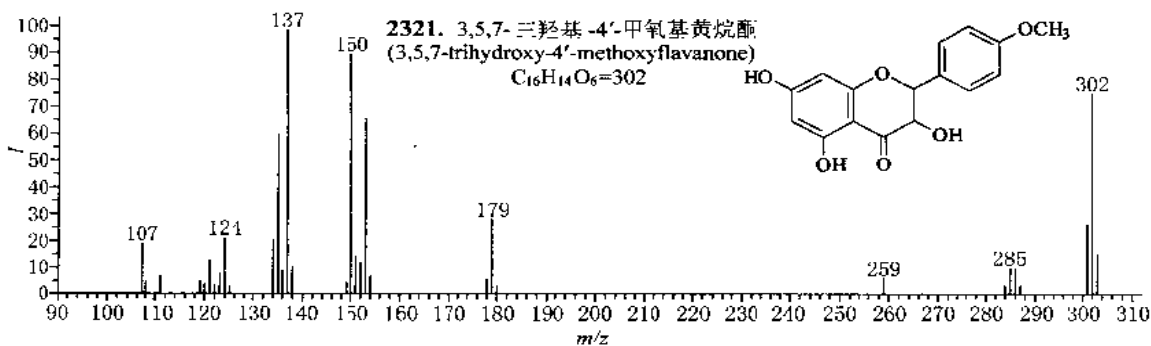


(3) 甲氧基取代的黄烷酮类 (2319~2323) 一般 RDA 裂解增强, B 环有甲氧基取代者, 离子 **b** 加强。







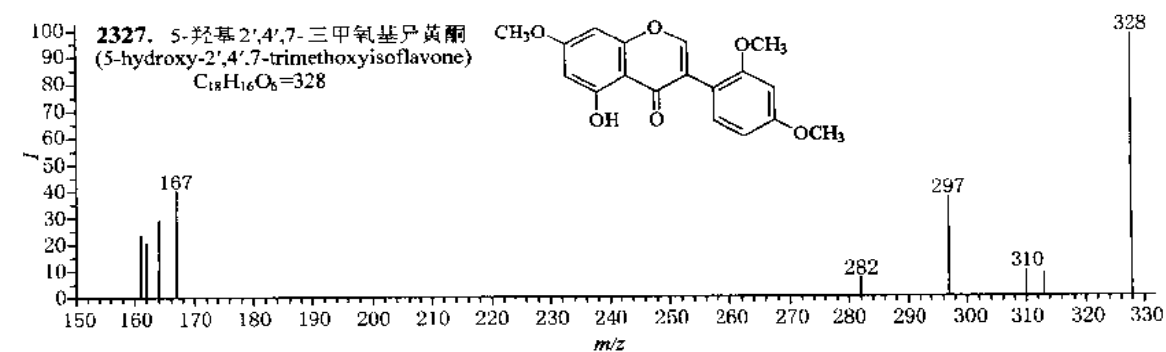
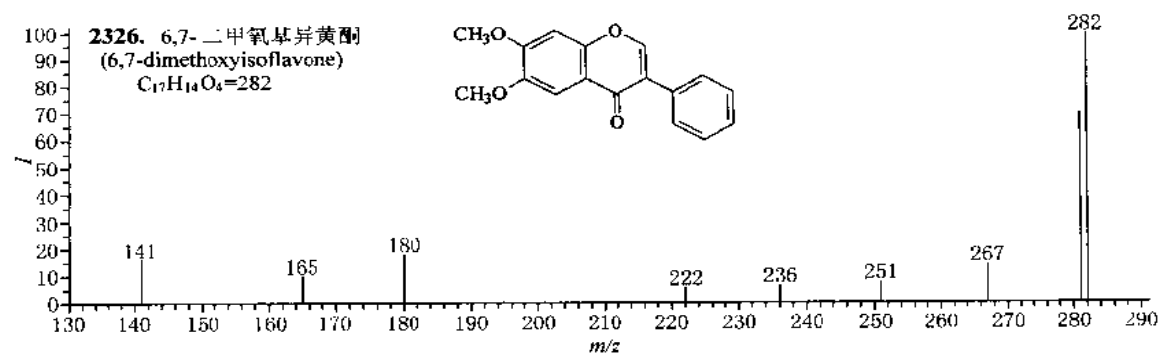
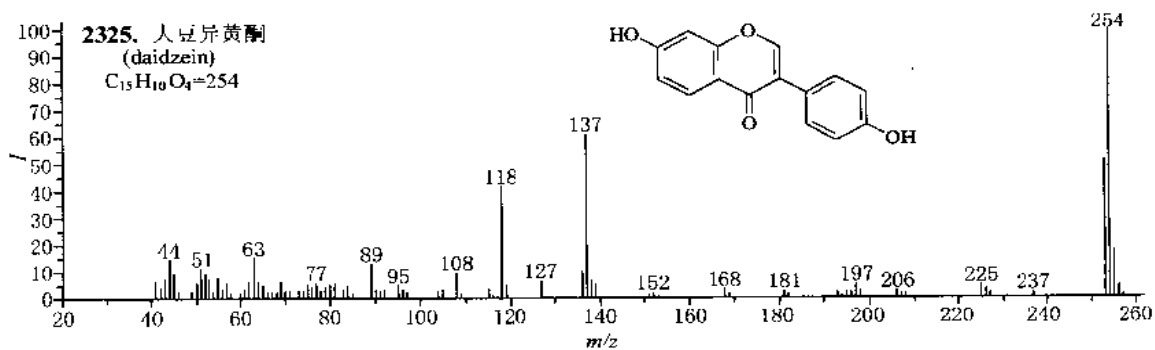
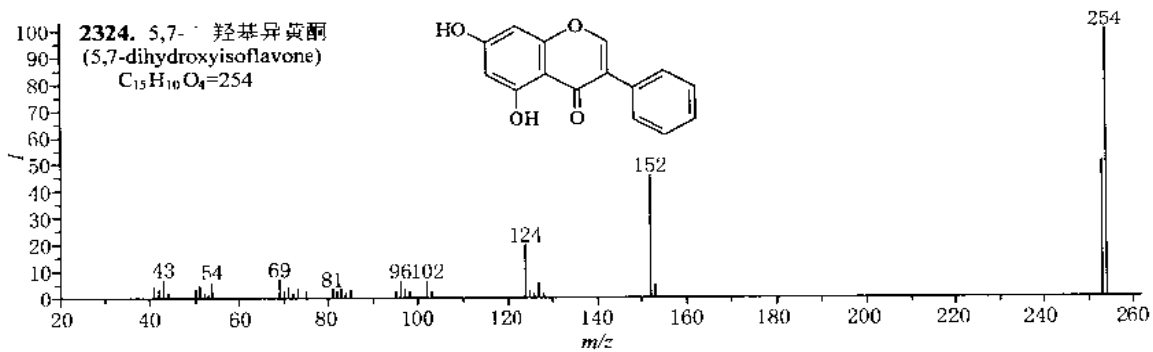


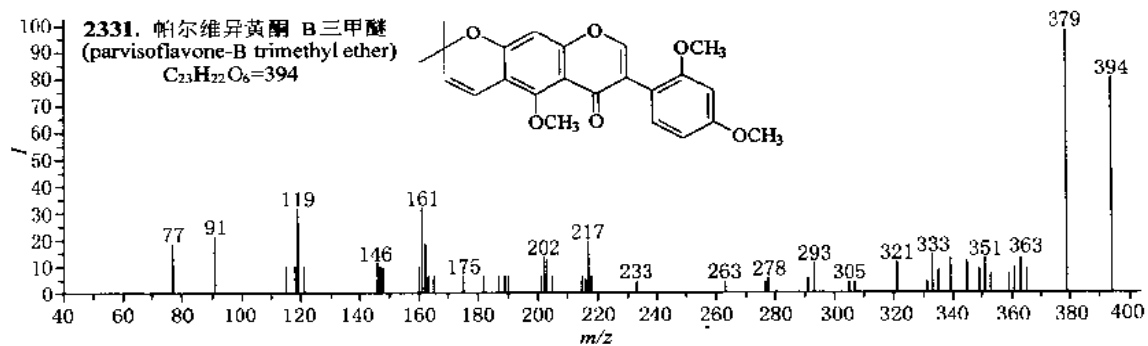
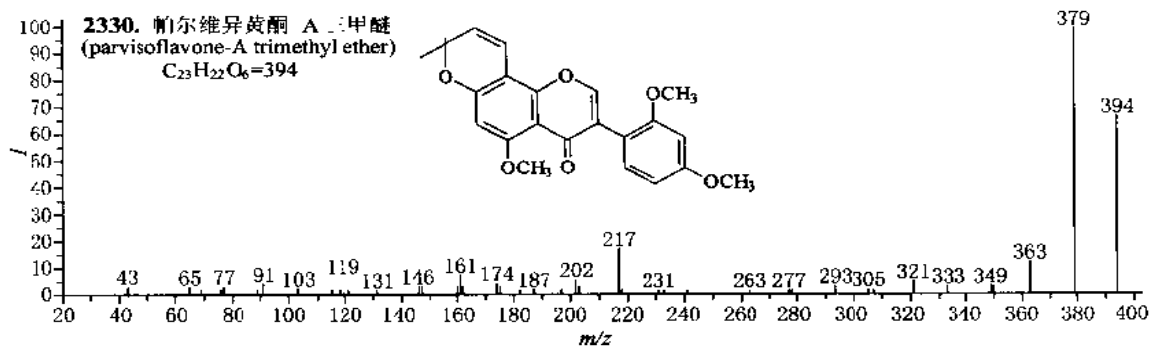
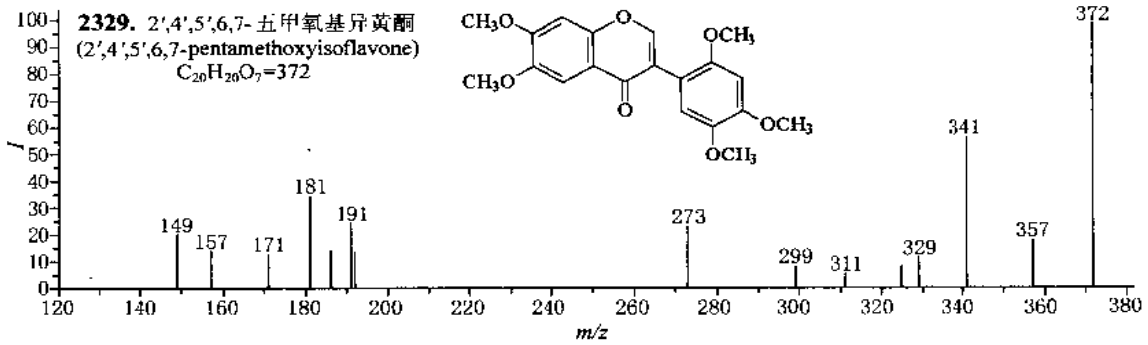
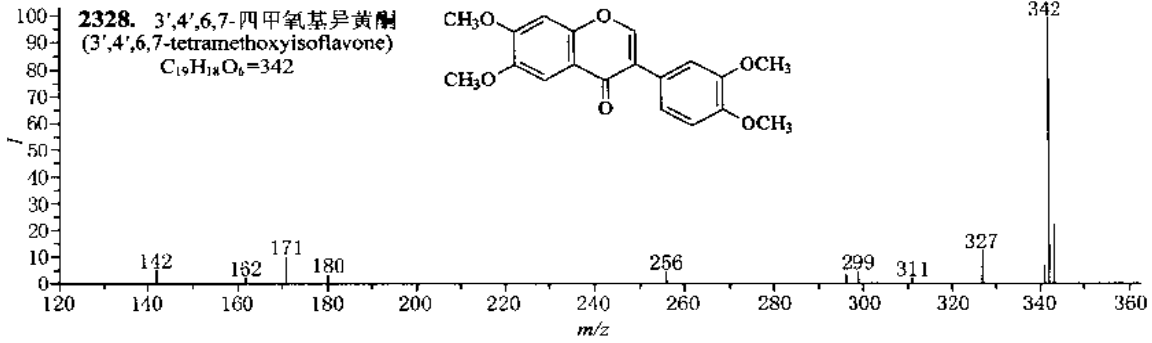
### 第三节 异黄酮、双黄酮类

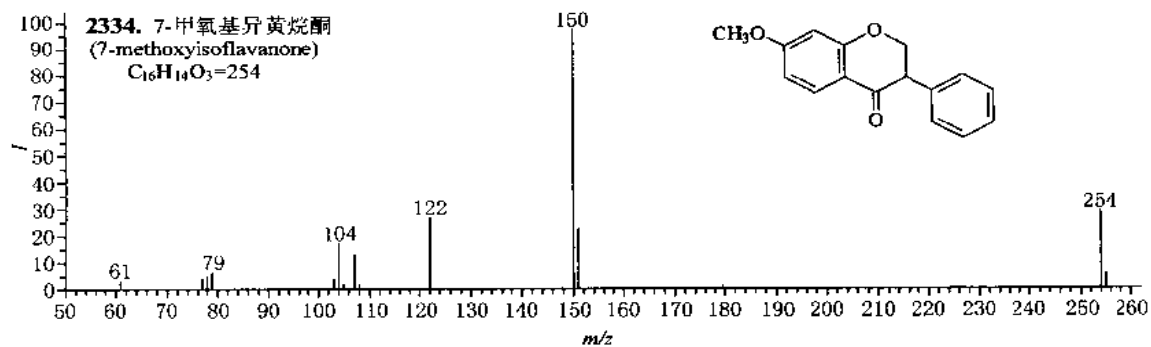
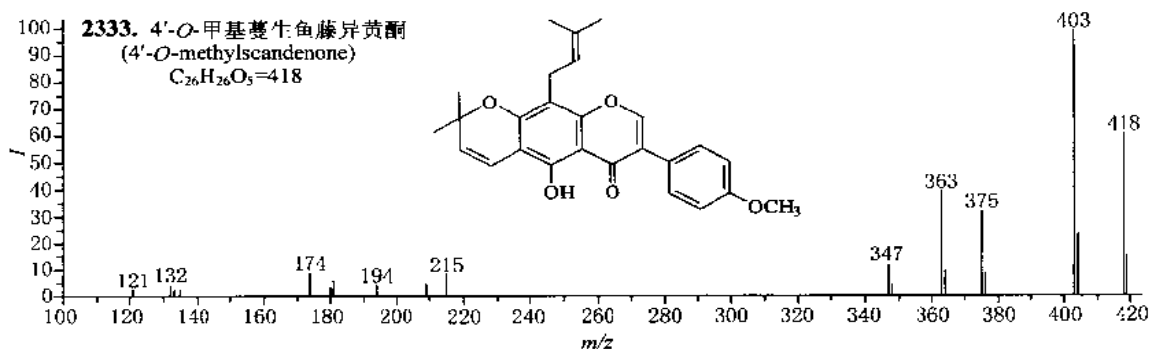
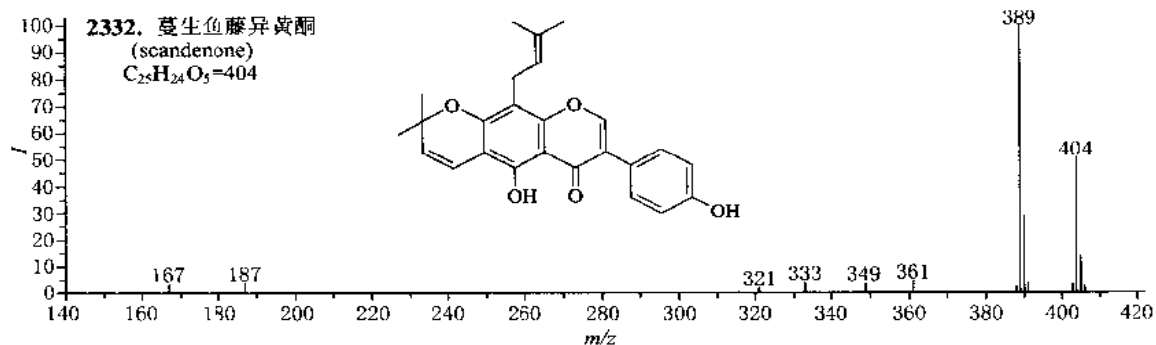
#### 一、异黄酮类

异黄酮类 (2324~2332) 的裂解方式与黄酮类的基本相同, 离子  $M-H$ ,  $a$ ,  $a+1$ ,  $a-28$  和  $b$  都存在; 有二甲基取代的色烯环时,  $M-CH_3$  离子特别强; 有异戊烯基取代时, 有强的  $M-C_3H_7$  和  $M-C_4H_9$  离子; 有  $C_2$  甲氧基取代时,  $M-OCH_3$  离子较强。

异黄酮酮 (2334) 的裂解方式基本与异黄酮的一致。



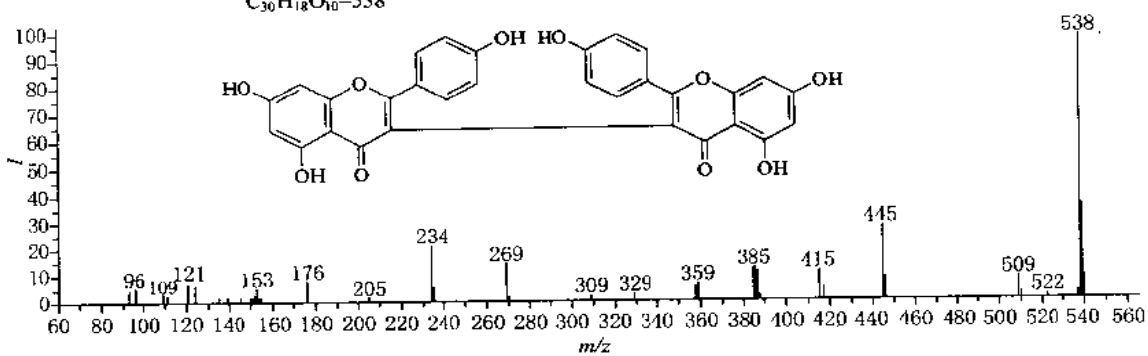




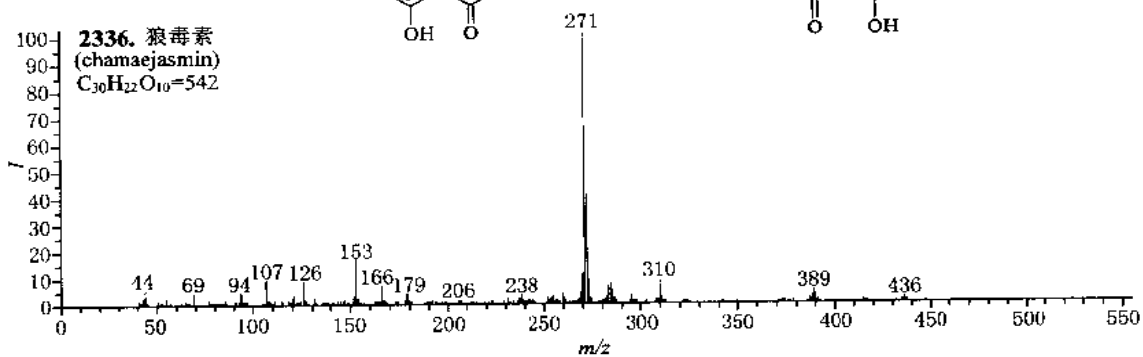
## 二、双黄酮类

双黄酮类(2335~2338)的裂解方式主要是依次进行两个单元C环的RDA裂解,分别得离子 $a^1$ 、 $b^1$ 和 $a^2$ 、 $b^2$ ,根据这些离子可以判断两个单元大致的连接位置。另外,具有5,7-二羟基取代的黄烷酮单元者(2336~2338)常能见到失去B环或含有B环的离子,也能见到间苯三酚离子 $m/z$  126,若B环为对位单羟基取代时,还能出现苯酚离子 $m/z$  94。

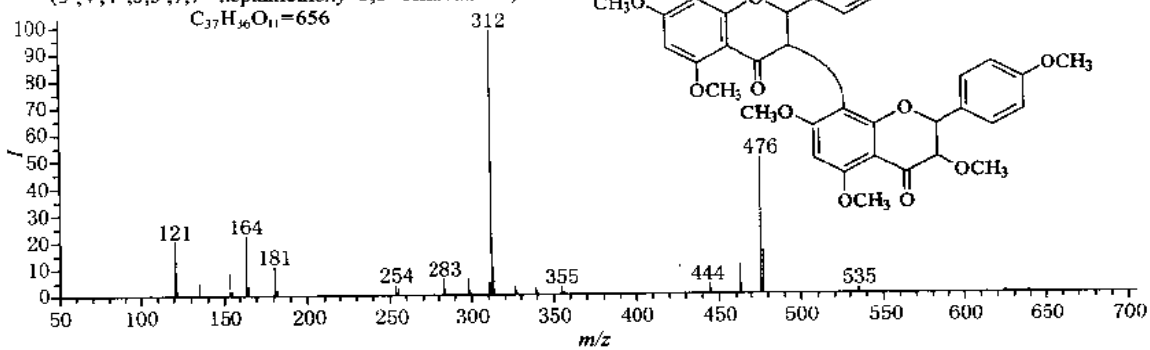
**2335.** 4',4'',5,5'',7,7''-六羟基-3,3''-双黄酮 (4',4'',5,5'',7,7''-hexahydroxy-3,3''-biflavone)  
 $C_{30}H_{18}O_{10}=538$



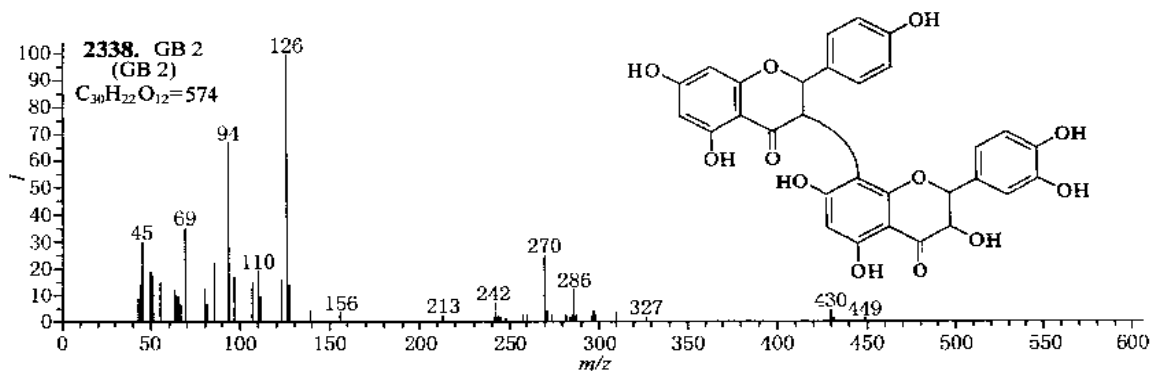
**2336.** 猴毒素  
(chamaejasmin)  
 $C_{30}H_{22}O_{10}=542$



**2337.** 3',4',4'',5,5'',7,7''-七甲氧基-3,8''-双黄酮  
(3',4',4'',5,5'',7,7''-heptamethoxy-3,8''-biflavanone)  
 $C_{37}H_{36}O_{11}=656$



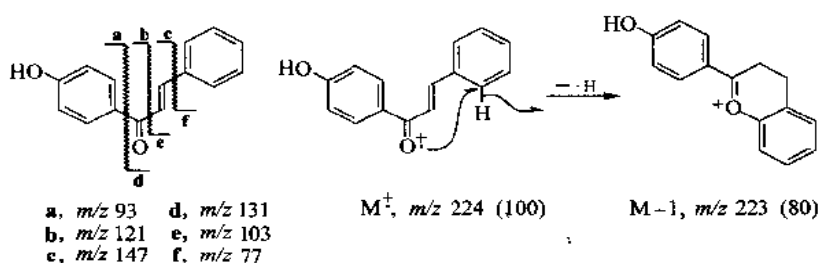




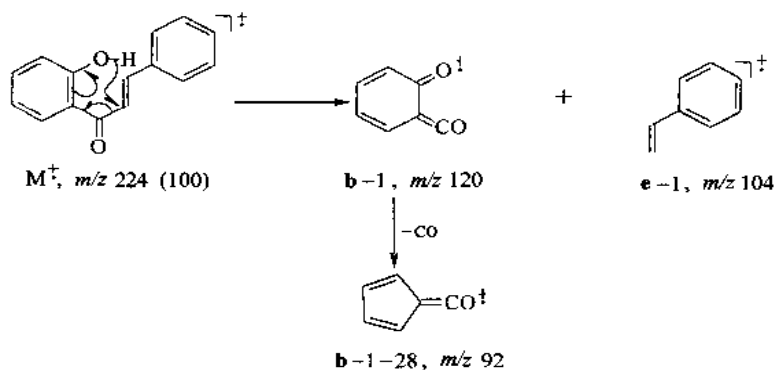
## 第四节 查耳酮、鱼藤酮类

### 一、查耳酮类

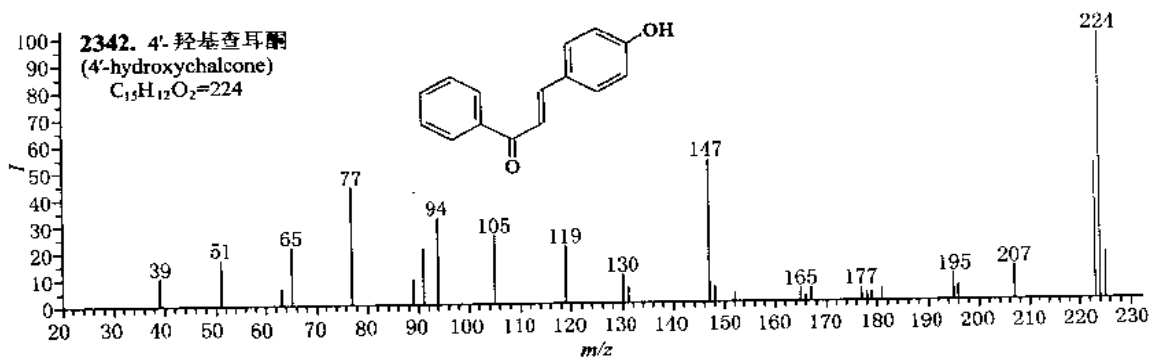
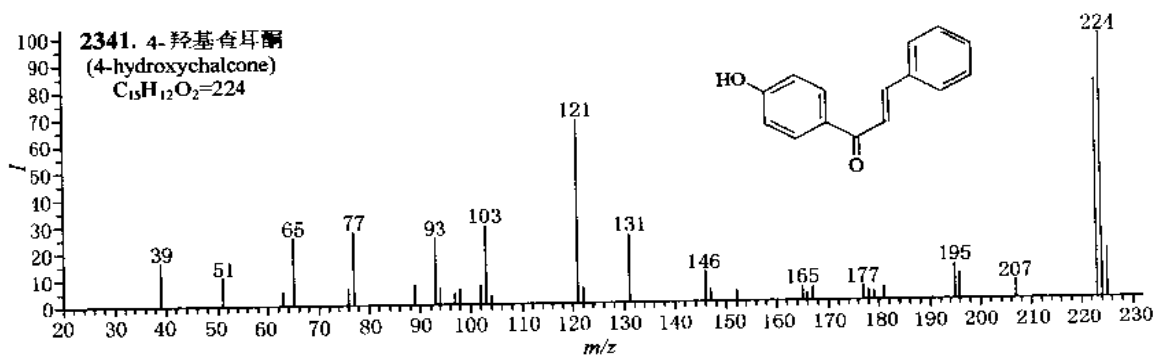
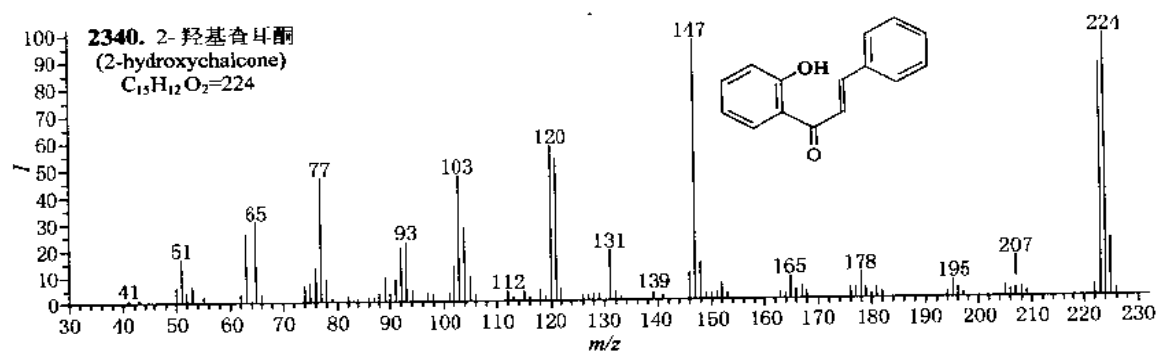
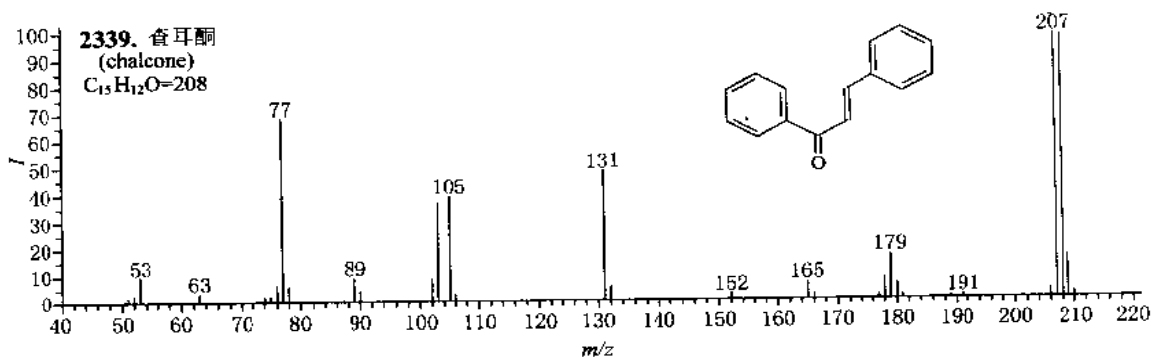
查耳酮类 (2339~2351) 在 EI 质谱中连接两个苯环的三个单键都能裂解, 生成三对互补离子, 即 **a** 和 **d**, **b** 和 **e** 以及 **c** 和 **f**。另外, 查耳酮类的  $M-H$  离子很强, 失去的氢原子来自  $C_2$ , 生成的离子是一个很大的共轭体系, 举例:

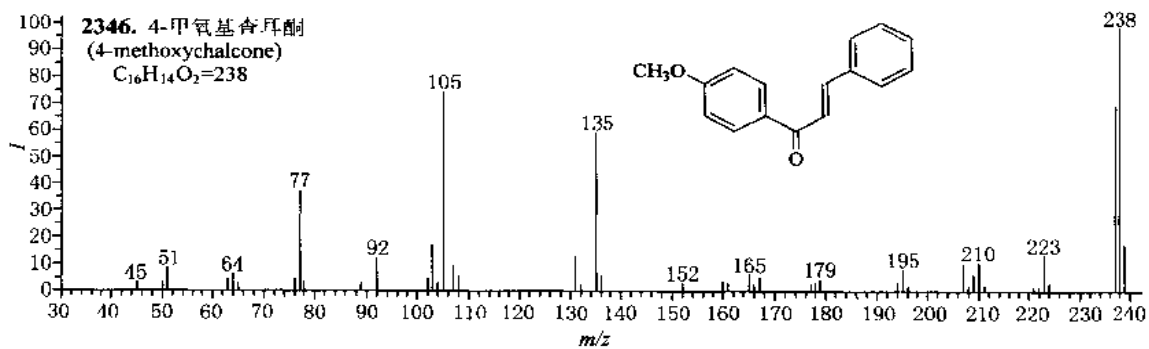
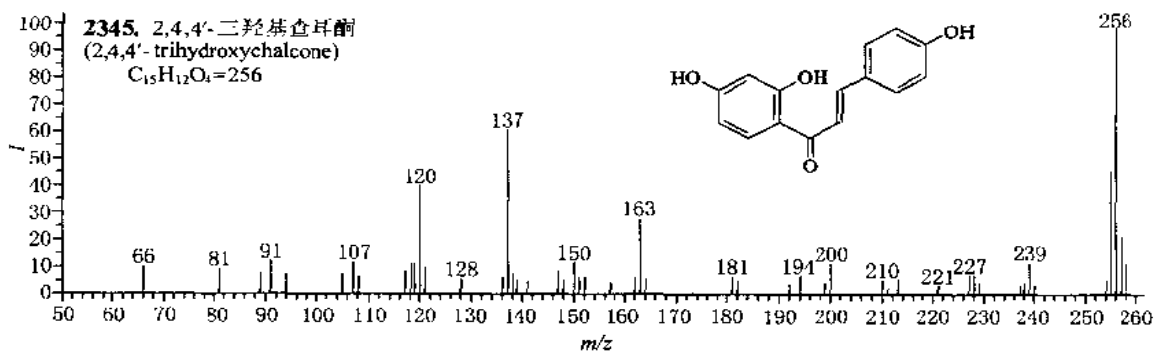
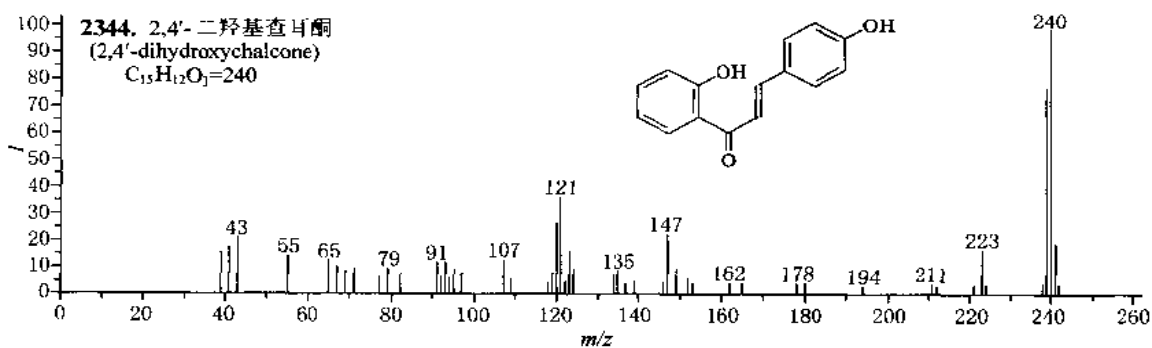
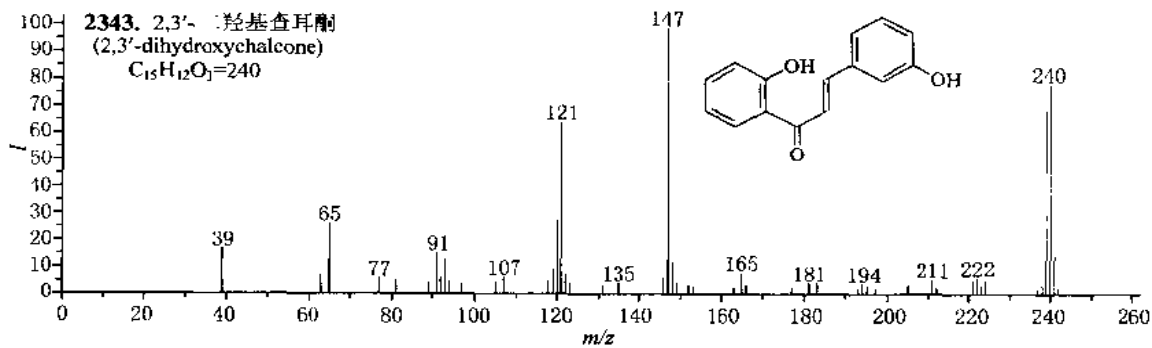


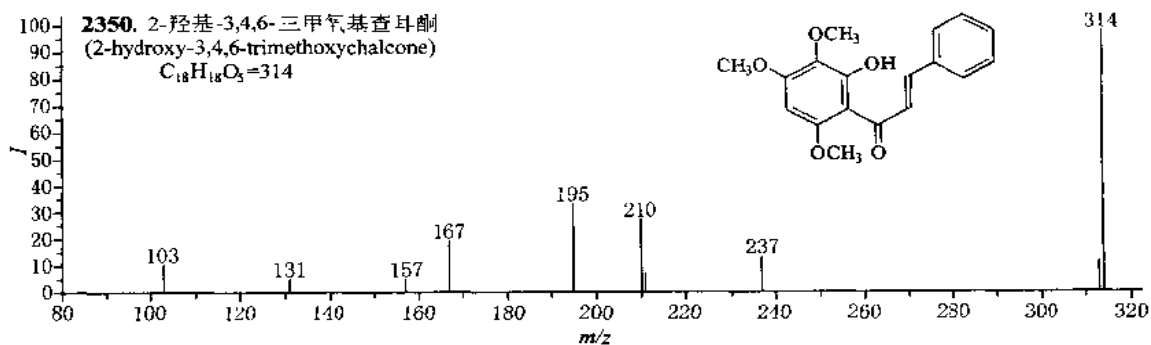
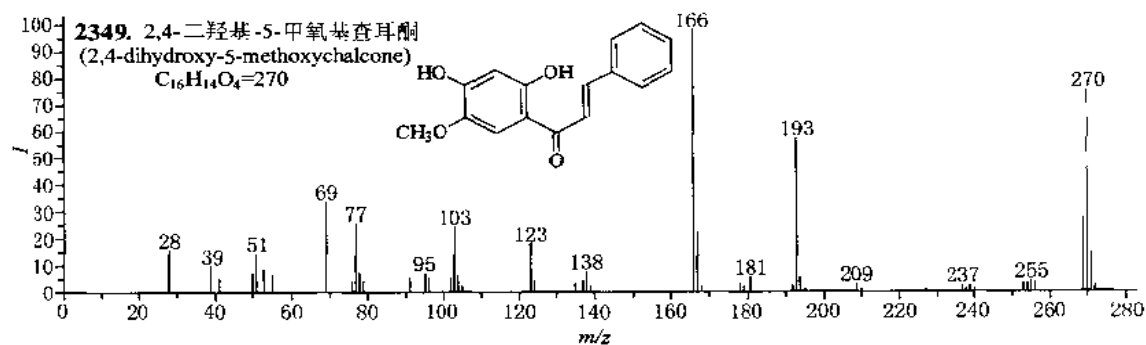
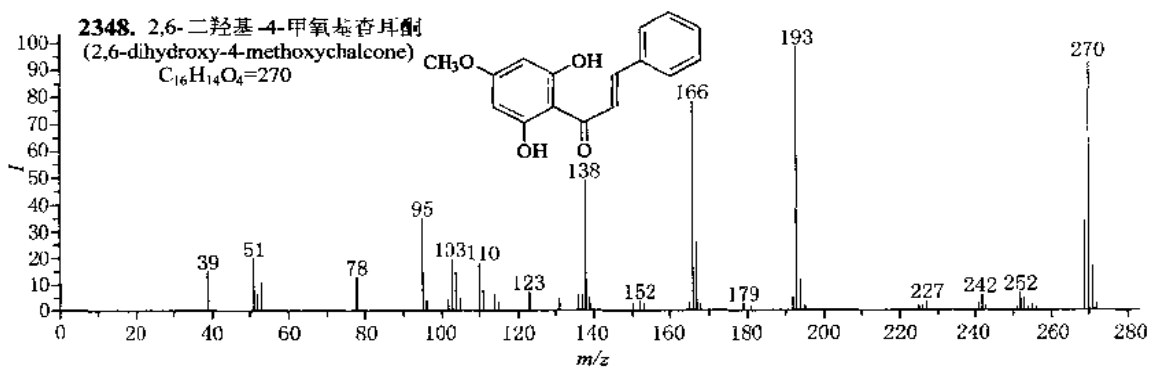
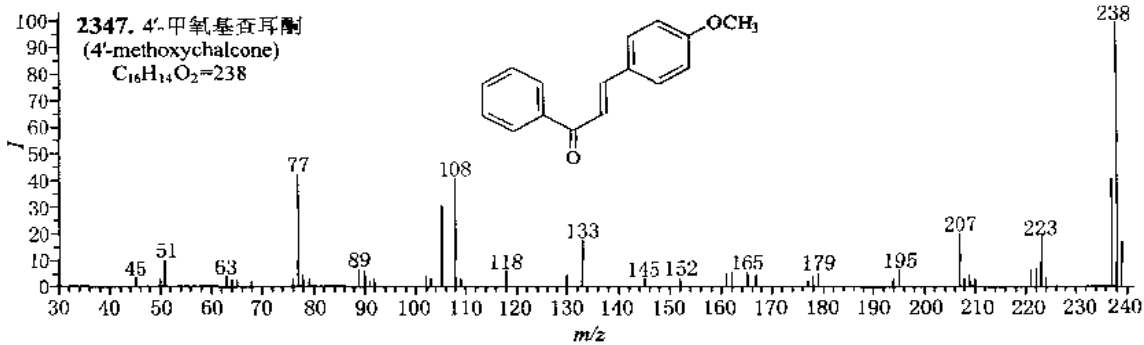
具有  $C_2$  羟基的化合物还有 **b-1** 和 **e+1** 离子, 这里发生了氢重排。生成的离子 **b-1** 还能失去一氧化碳。例:

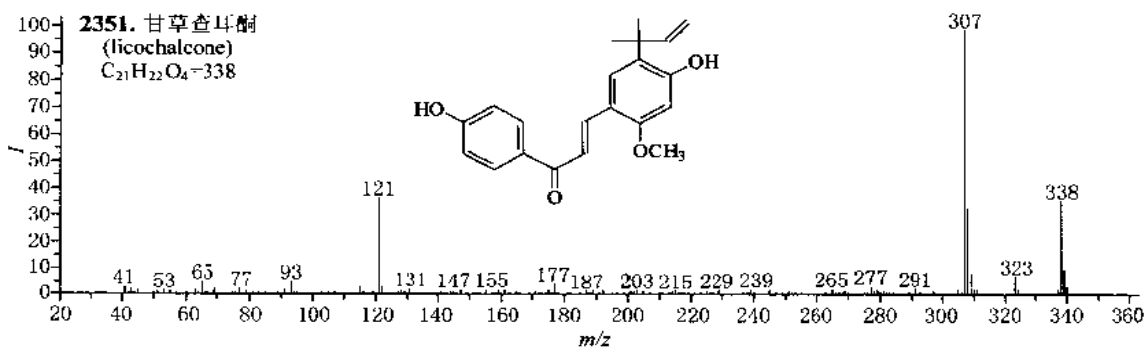


有的化合物生成的离子 **f** 还能加 1 个氢, 以满足芳香体系的需要。



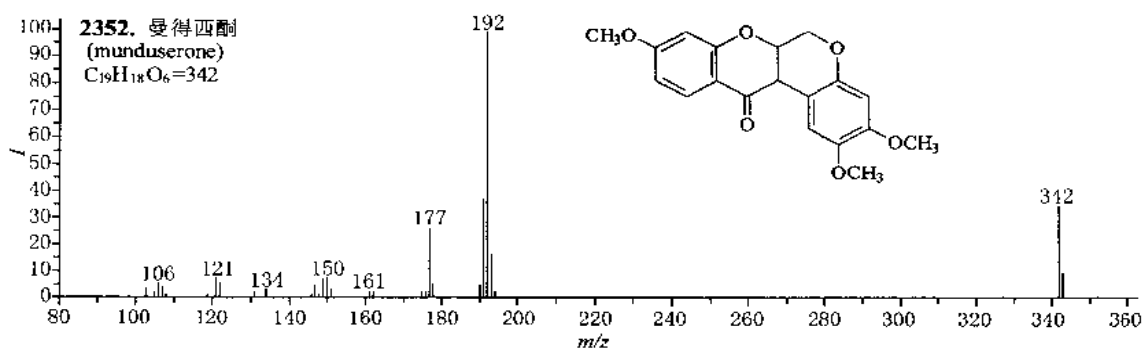
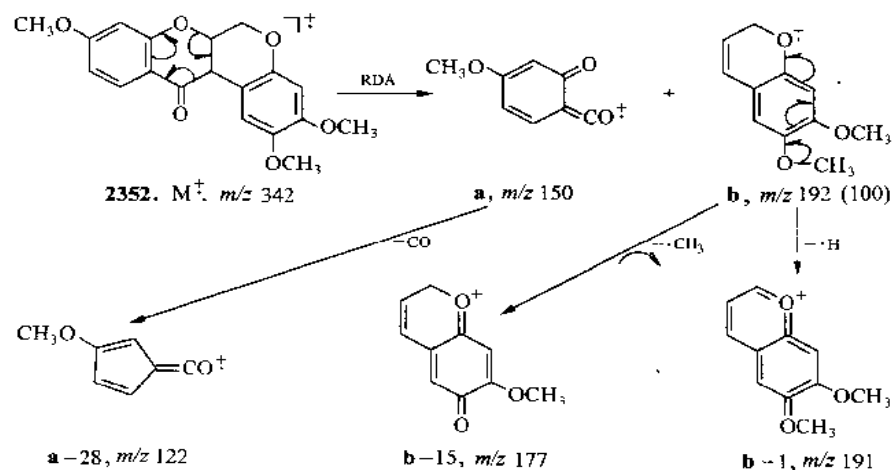


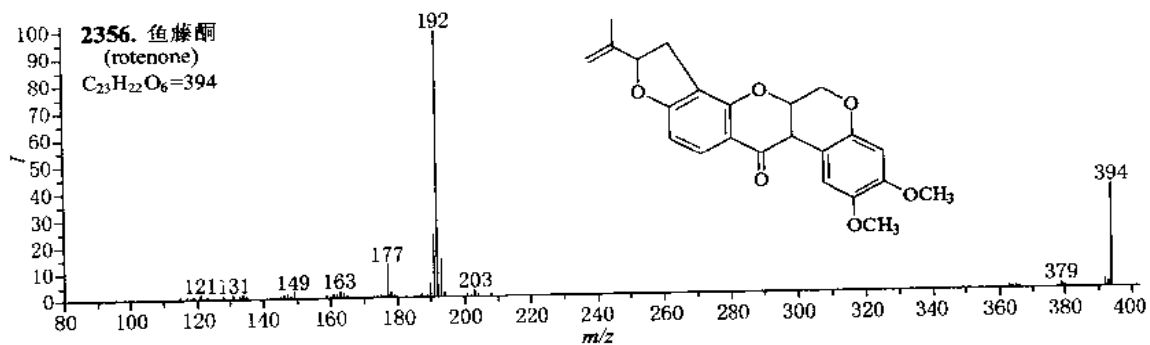
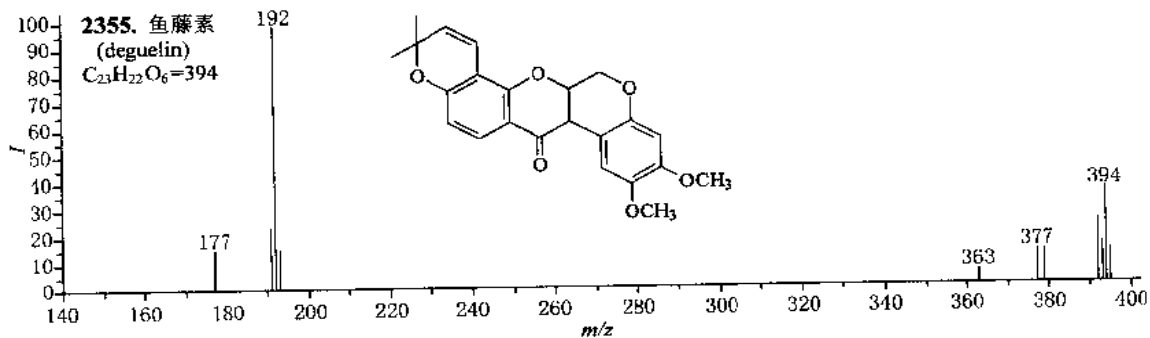
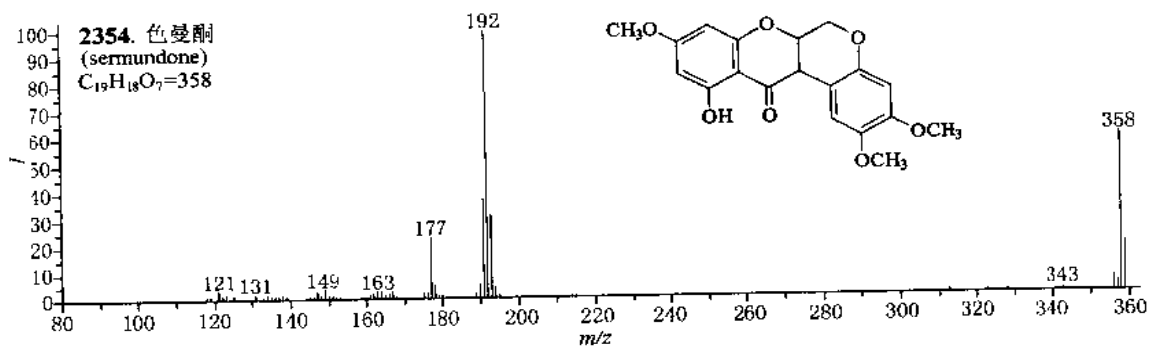
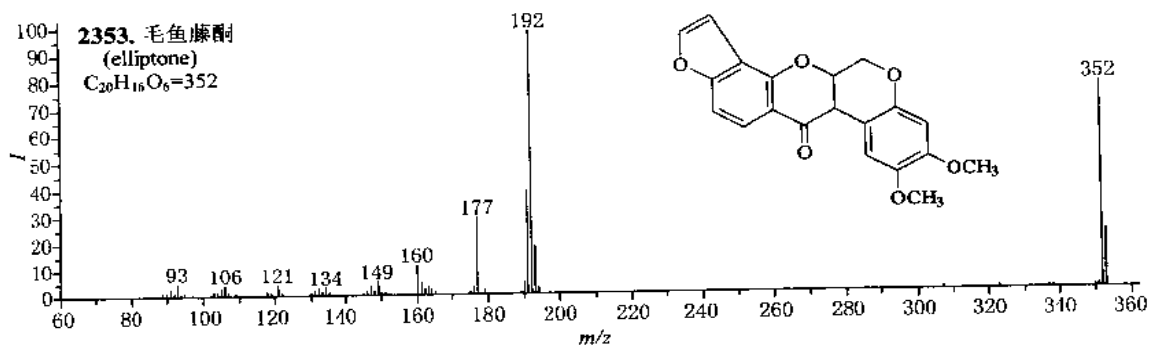




## 二、鱼藤酮类

鱼藤酮类 (2352~2356) 的裂解方式类似于黄酮、黄烷酮或异黄酮, 例如:

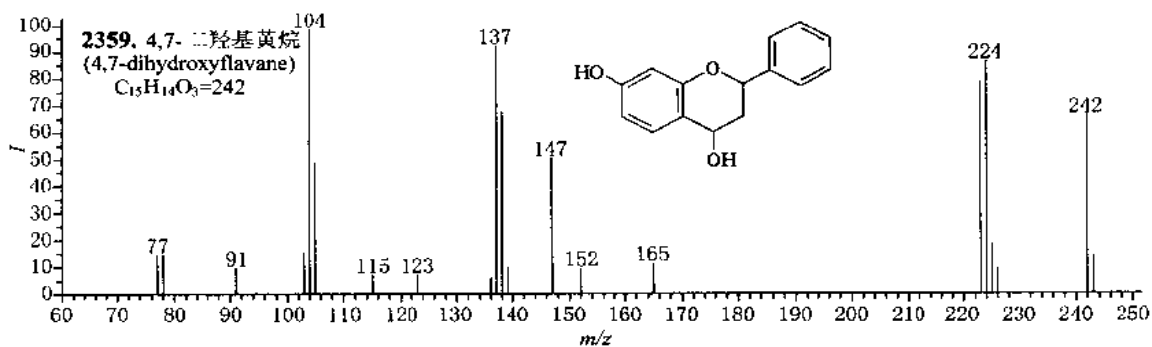
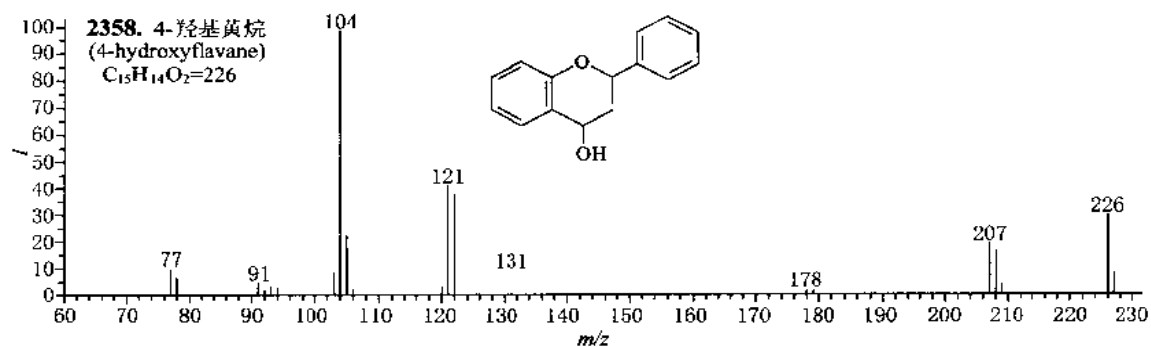
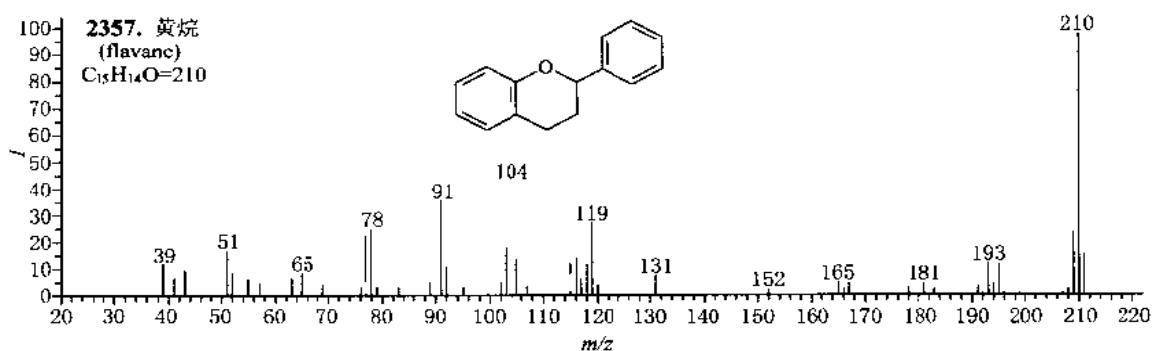


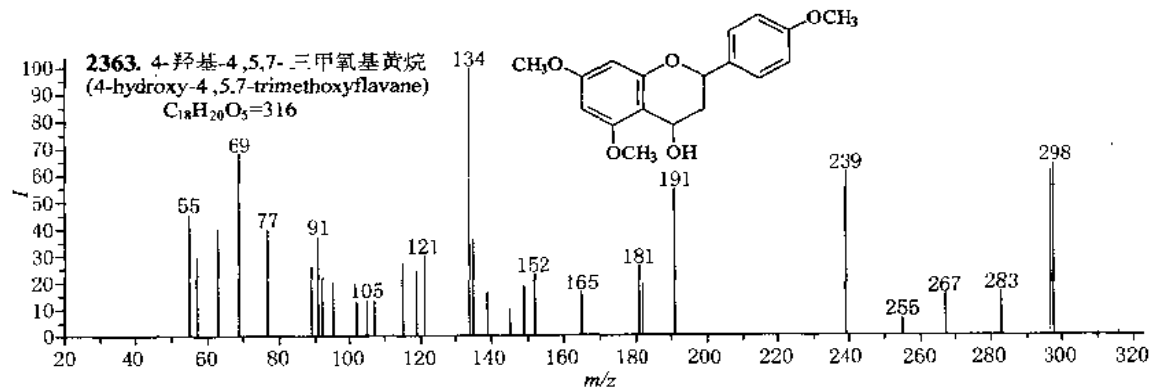
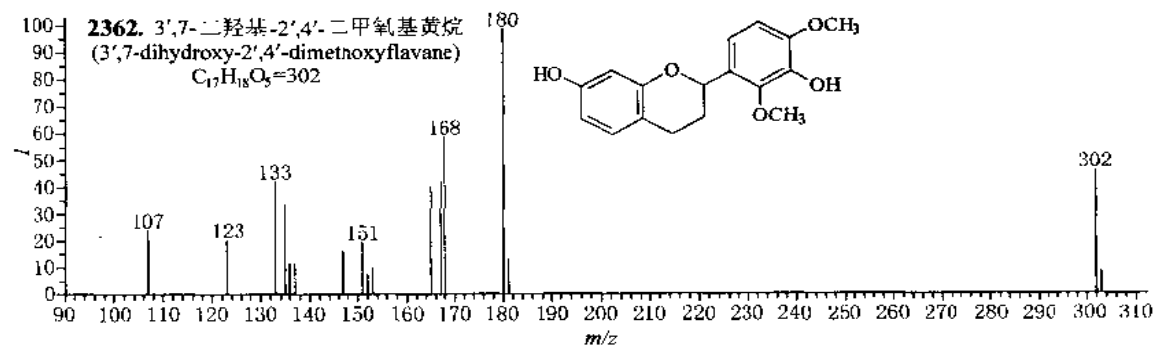
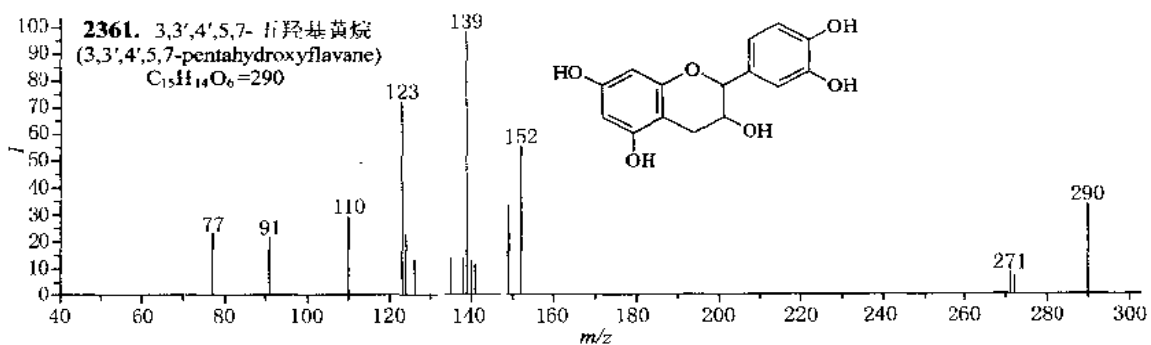
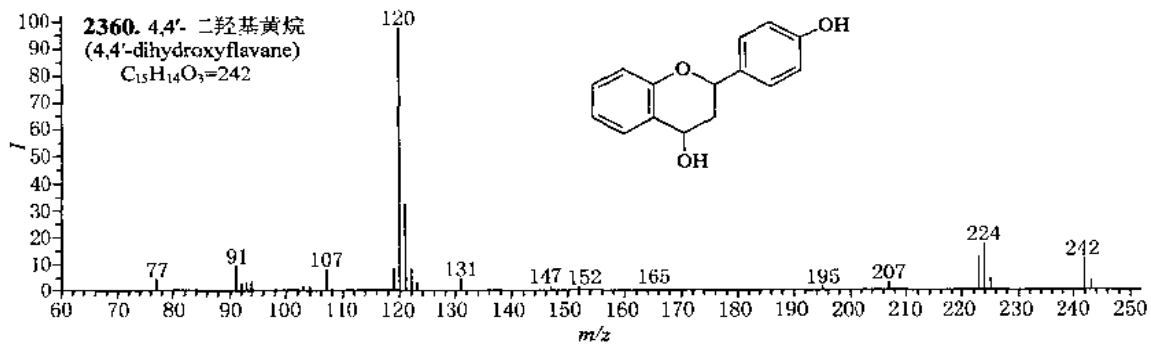


## 第五节 黄烷及黄酮甙类

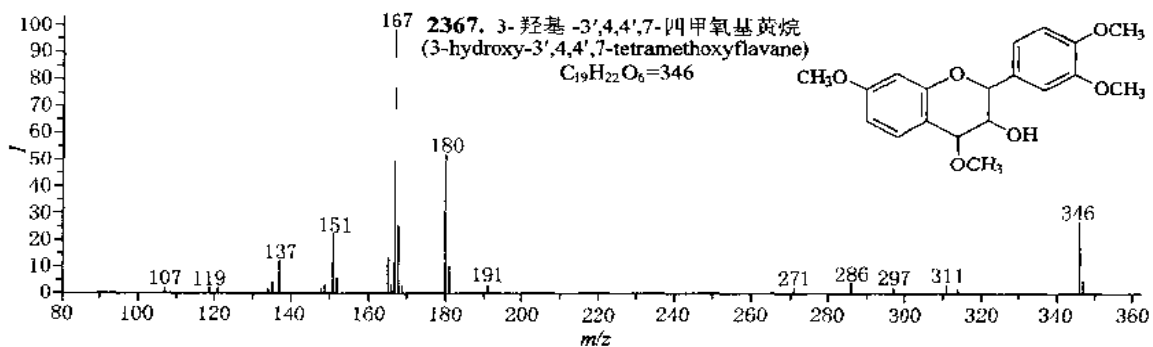
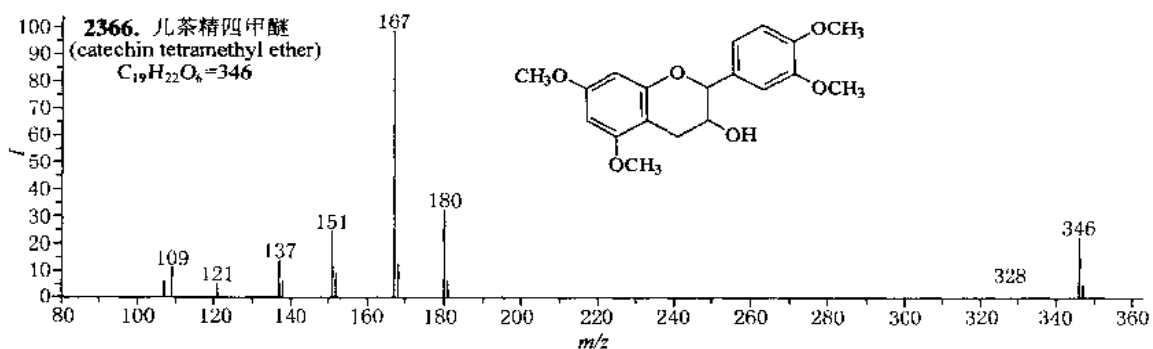
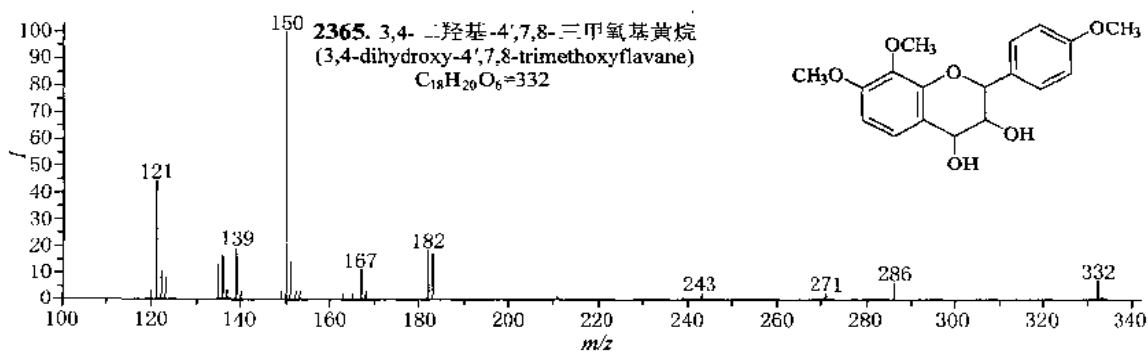
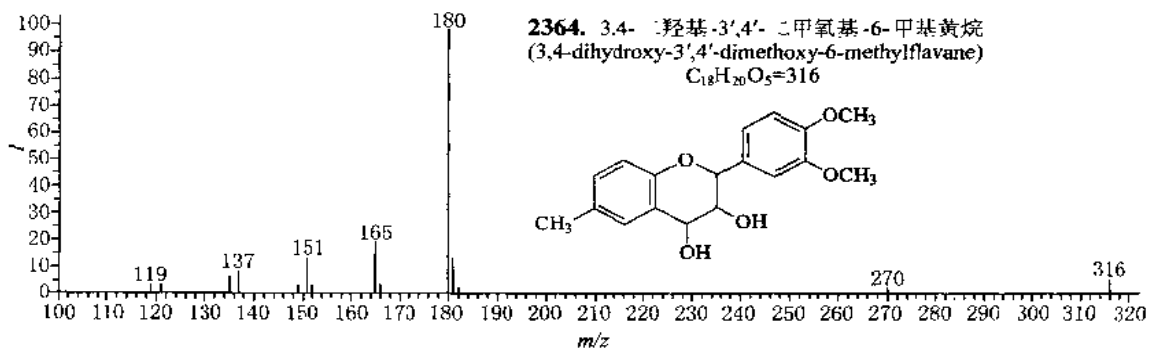
### 一、黄烷类

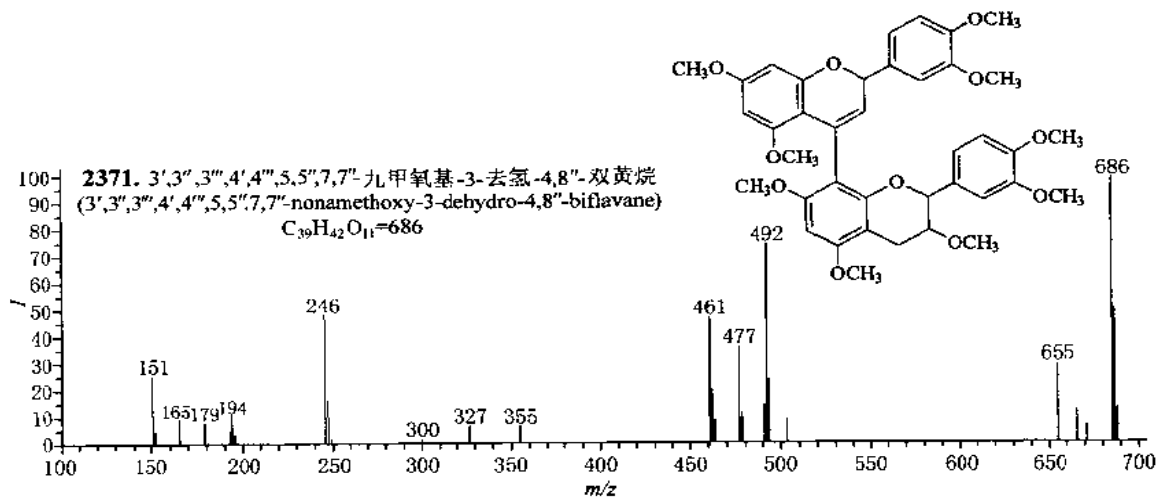
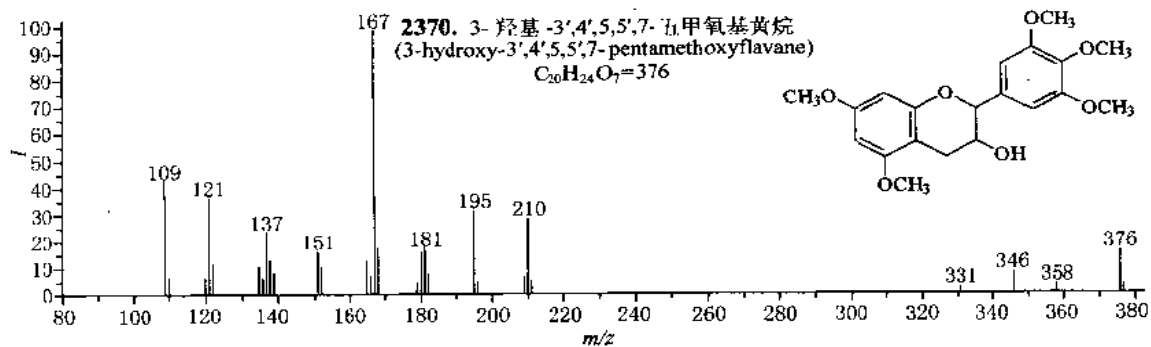
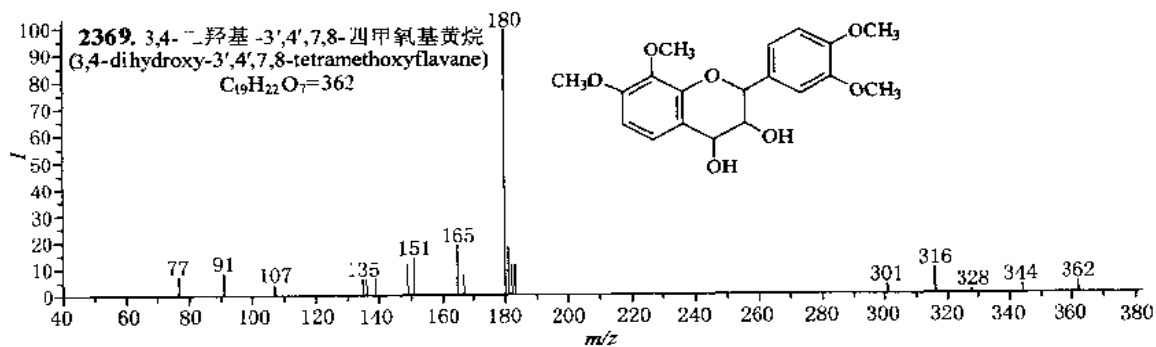
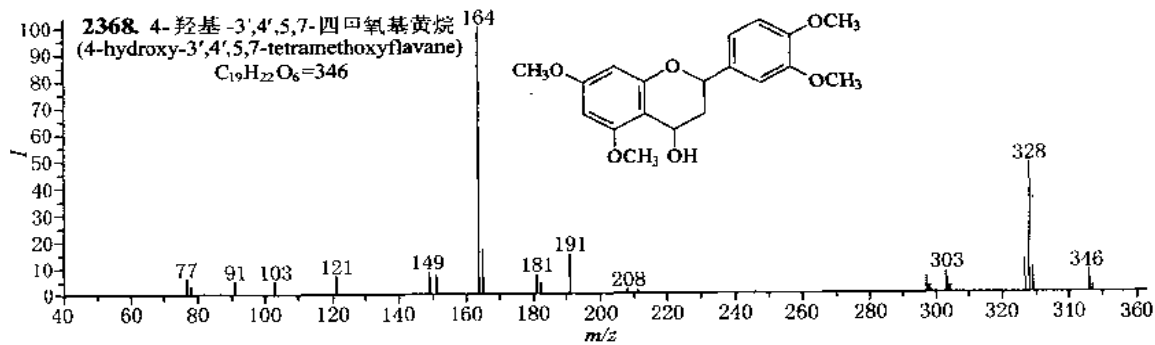
黄烷类 (2357~2371) 的裂解方式类似黄酮。C 环 RDA 裂解生成离子 **a**, **a+1**, **b** 和 **c**, 但大多数是离子 **b** 很强。另外, 具有 C<sub>3</sub>、C<sub>4</sub> 羟基取代者, 常能失水, 失水离子 M-18 还能失去 B 环及其取代基。双黄烷类在 C 或 C' 环中无第二个双键时, 也能进行两次 RDA 裂解, 产生的离子依两个单元的连接方式而定。







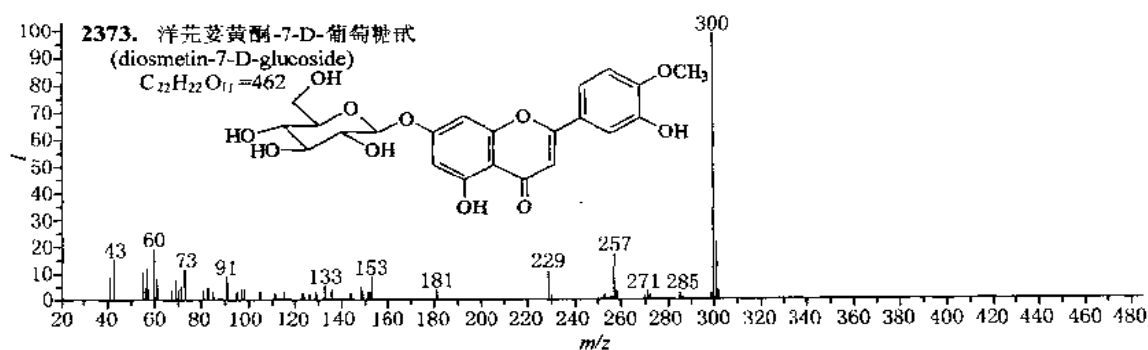
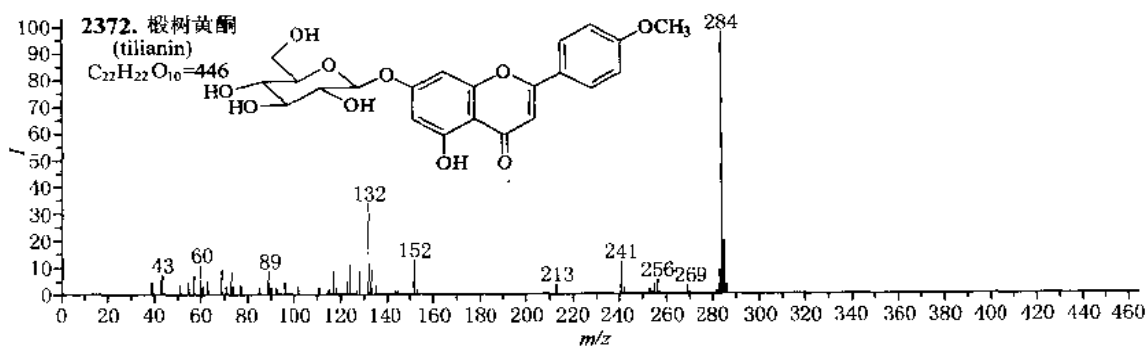
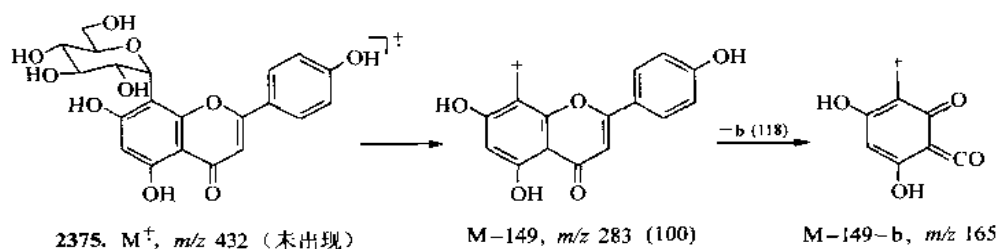


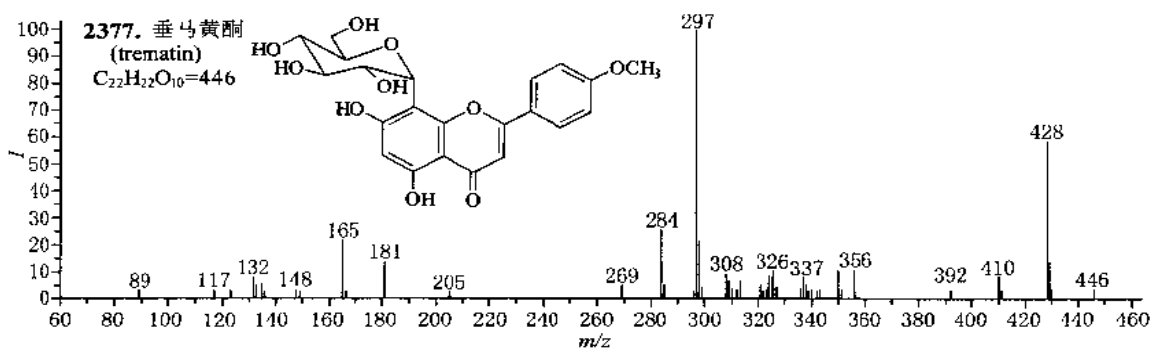
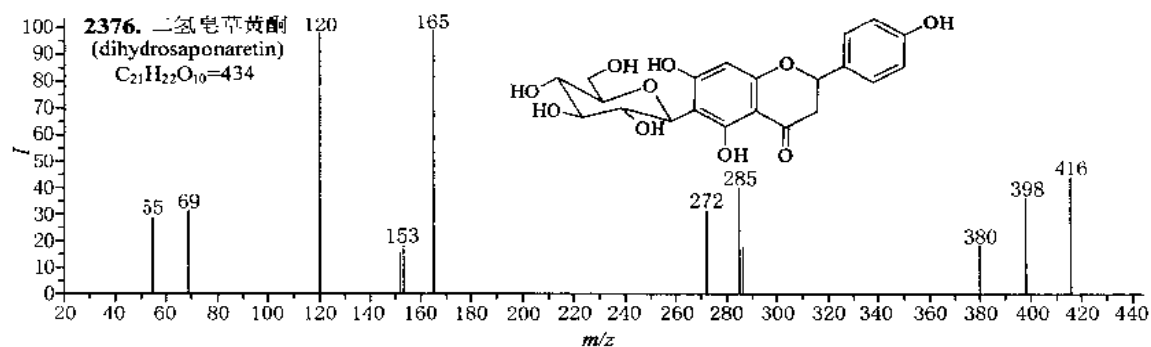
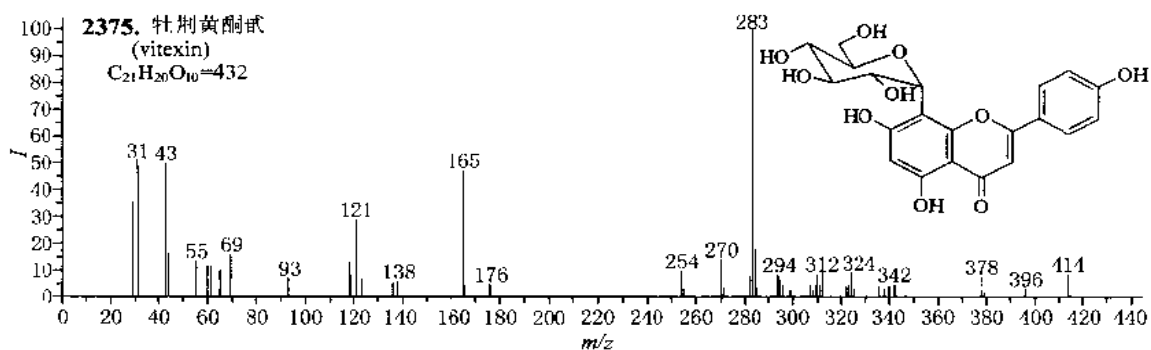
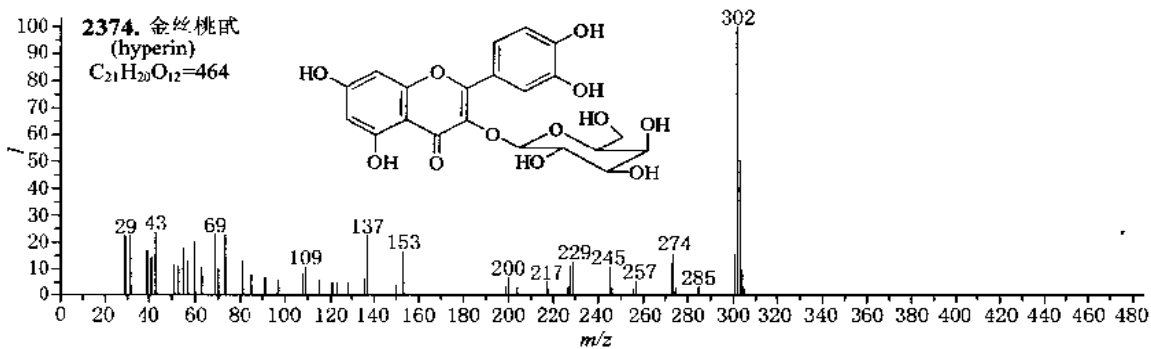


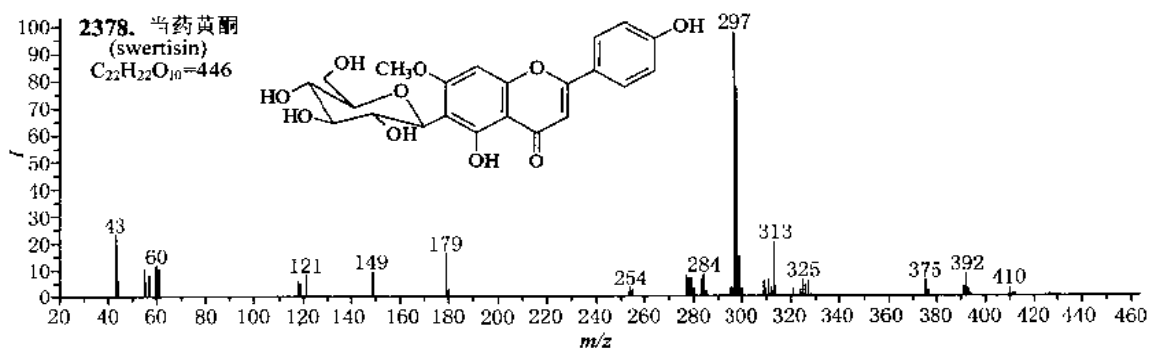
## 二、黄酮甙类

(1) 黄酮氧甙类 (2372~2374) 的分子离子在 EI 谱中很难出现, 重要离子常为失去糖的甙元离子。

(2) 黄酮碳甙类 (2375~2378) 的分子离子比黄酮氧甙类的稍微稳定些, 因而有时能够出现。黄酮碳甙类的主要裂解是失糖的除去 C<sub>1</sub> 的部分, C<sub>1</sub> 重排氢原子与甙元一起形成苜基离子, 若是葡萄糖或半乳糖失去的部分为 149u, 生成的强峰 M-149 离子是单糖碳甙的特征离子。继续的裂解是苜基离子 (M-149) 的 RDA 裂解, 失去含 B 环的离子 b, 得到 M-149-b 离子。以牡荆黄酮 (2375) 为例, 其裂解如下:







# 第十八章 香豆精、吡酮、色烯和色酮类

## 第一节 香豆精类

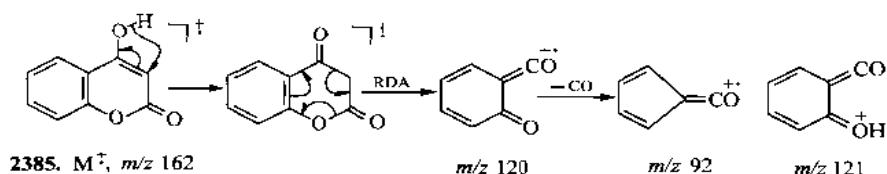
### 一、简单取代的香豆精类

(1) 香豆精 (2379) 本身的主要裂解是连续失去一氧化碳, 再失去氢和乙炔, 因此其裂解途径是  $M-CO-CO-H-C_2H_2$ 。

(2) 二氢香豆精 (2380) 有两条裂解途径, 即  $M-CO-CO-H-C_2H_2$  和  $M-CH_2CO-CO-C_2H_2$ , 前一条途径与香豆精的一样, 后一条裂解途径中的  $M-CH_2CO$  是 RDA 裂解反应。

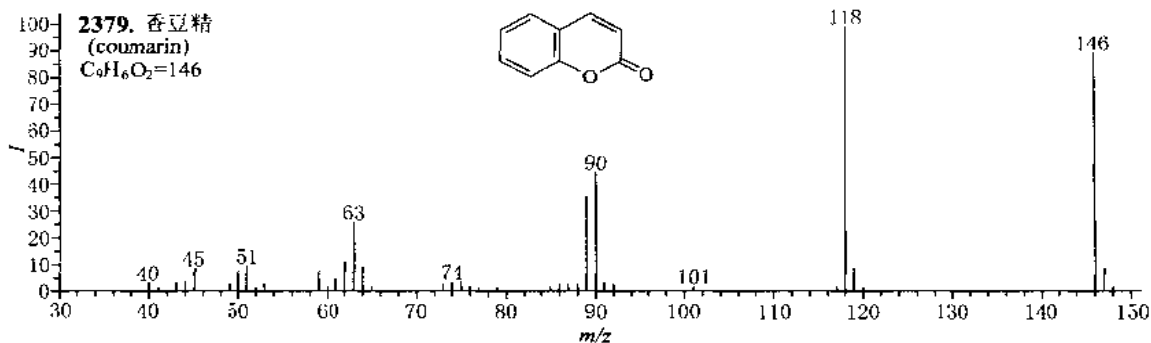
(3) 甲基取代的香豆精类 (2381~2384) 有两条裂解途径, 即  $M-CO-CO-C_2H_2-C_2H_2$  和  $M-CO-H-CO-C_2H_2-C_2H_2$ , 在第二条裂解途径中的失氢是由于甲基进行苜基裂解所致。

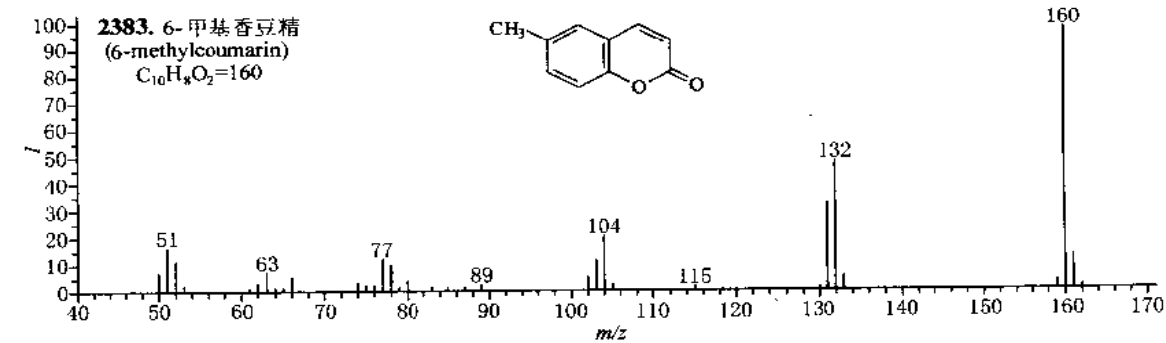
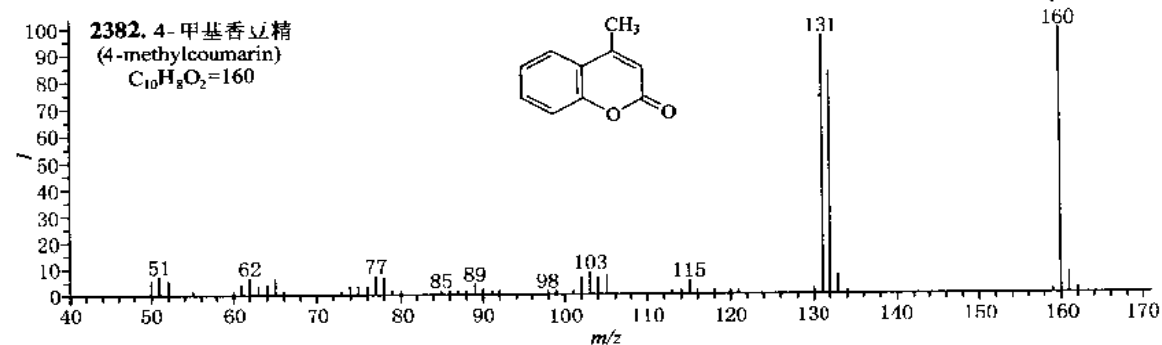
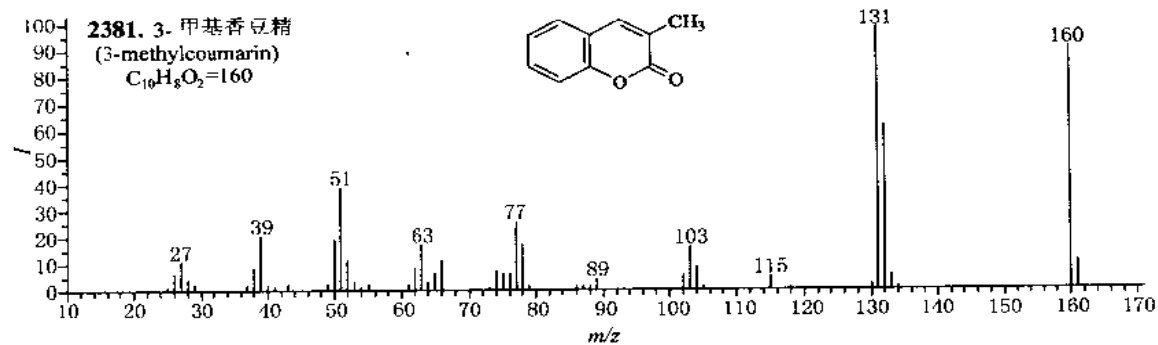
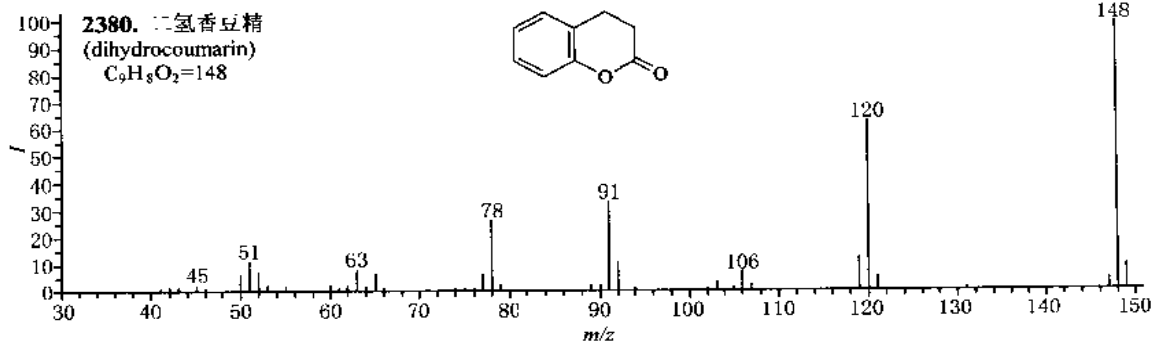
(4) 羟基取代的香豆精类 (2385, 2386) 中的 4-羟基取代者 (2385), 可能首先由烯醇式转变为酮式, 然后进行 RDA 裂解失去乙烯酮和一氧化碳, 失去 41u 的裂解机制尚不清楚, 该离子的结构很可能与黄酮类质谱中的  $a+1$  离子相同 (见第十七章第一节)。

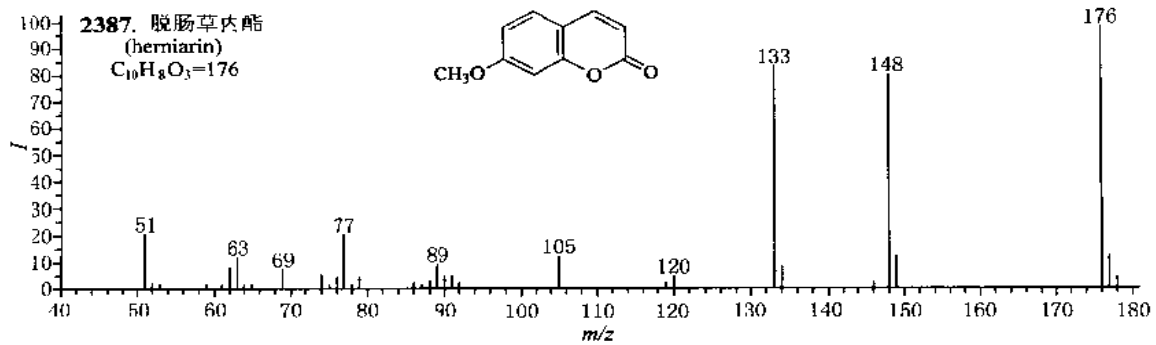
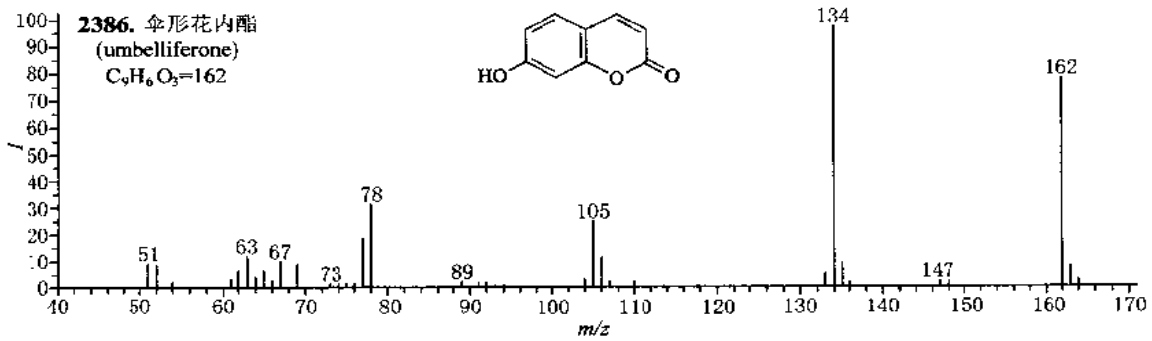
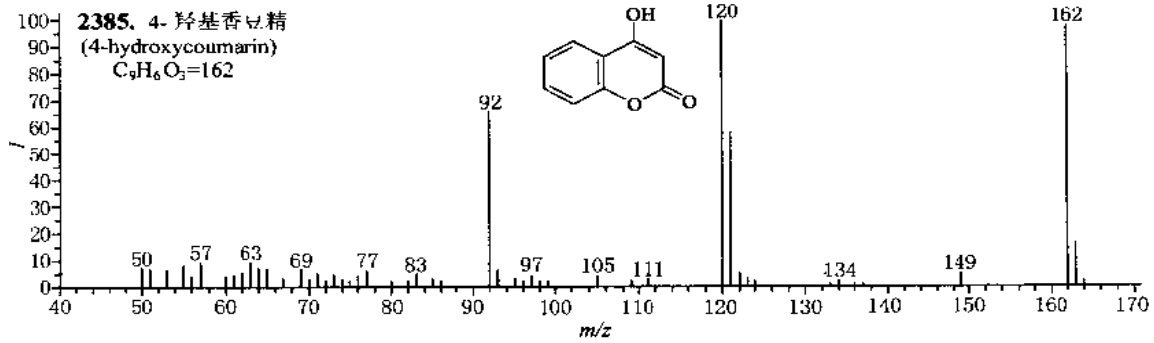
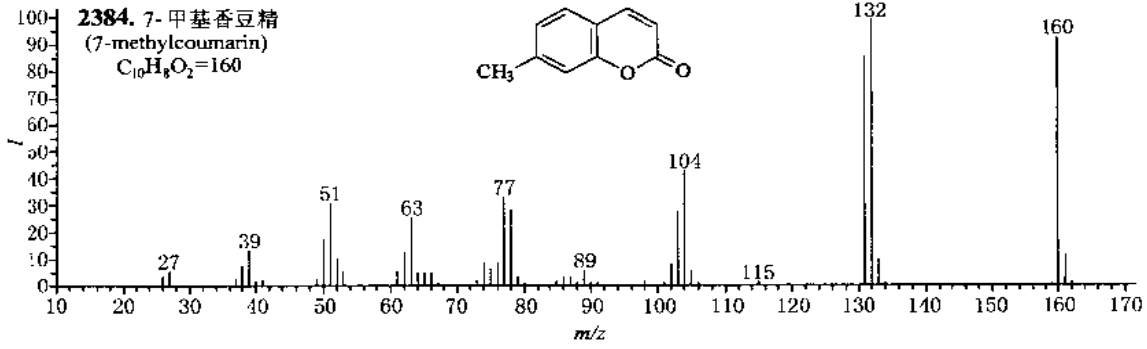


伞形花内酯 (2386) 有两条裂解途径, 即  $M-CO-CO-CO-C_2H_2$  和  $M-CO-CO-H-CO-C_2H_2$ 。

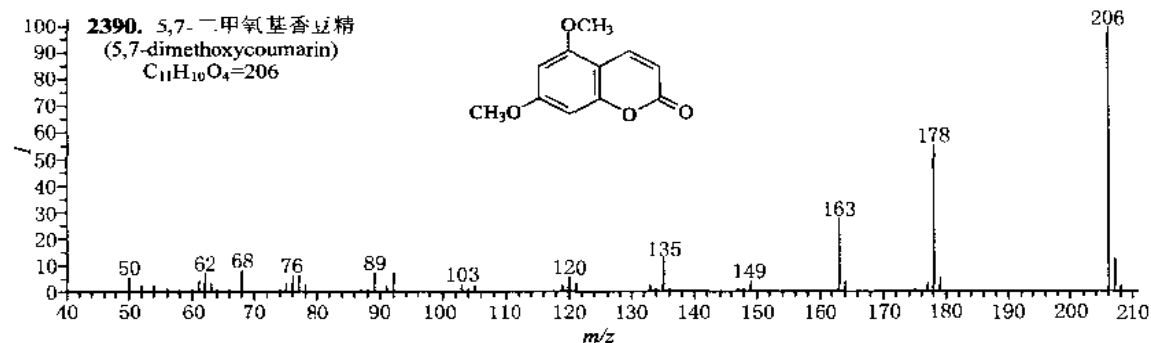
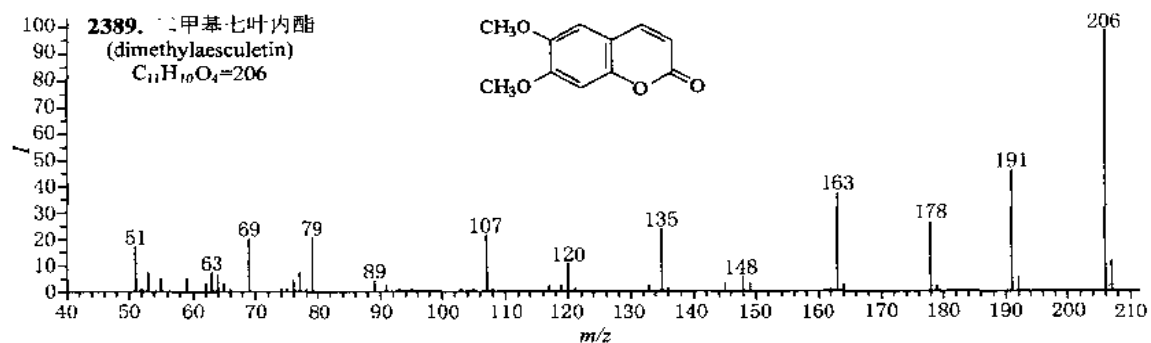
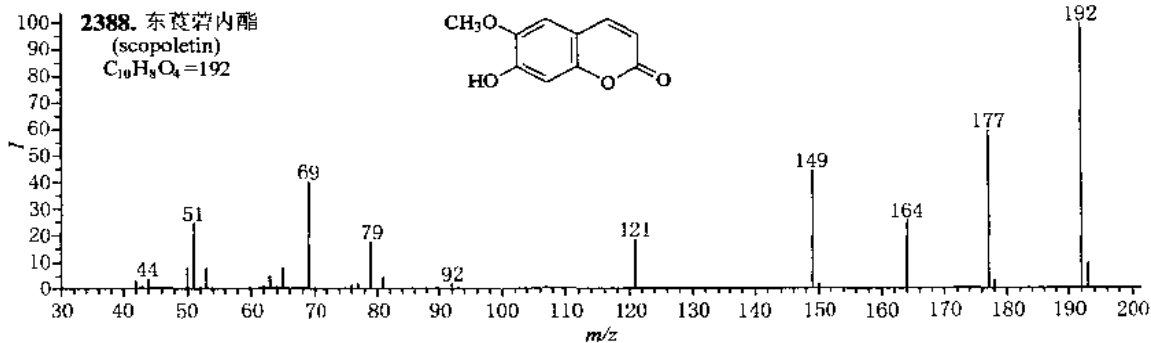
(5) 甲氧香豆精类 (2387~2390) 中没有 6-甲氧基者, 第一步裂解不能失去甲基, 而只能先失一氧化碳; 有 6-甲氧基者, 第一步裂解既能失去甲基, 又能失去一氧化碳。











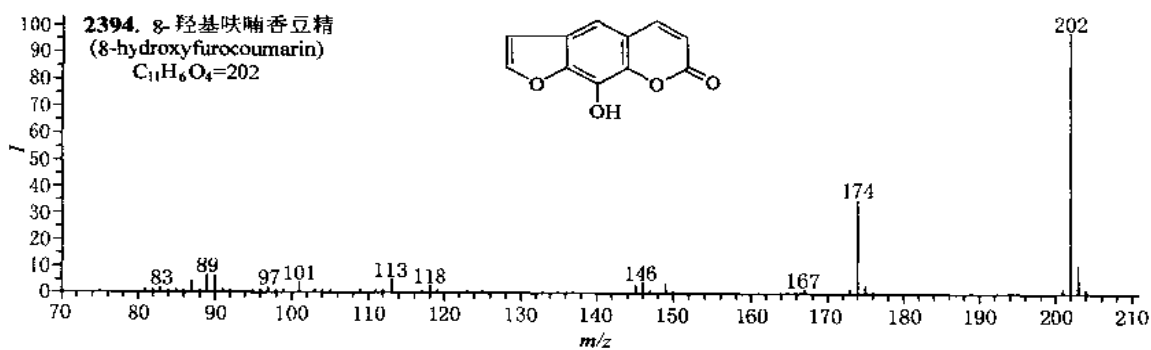
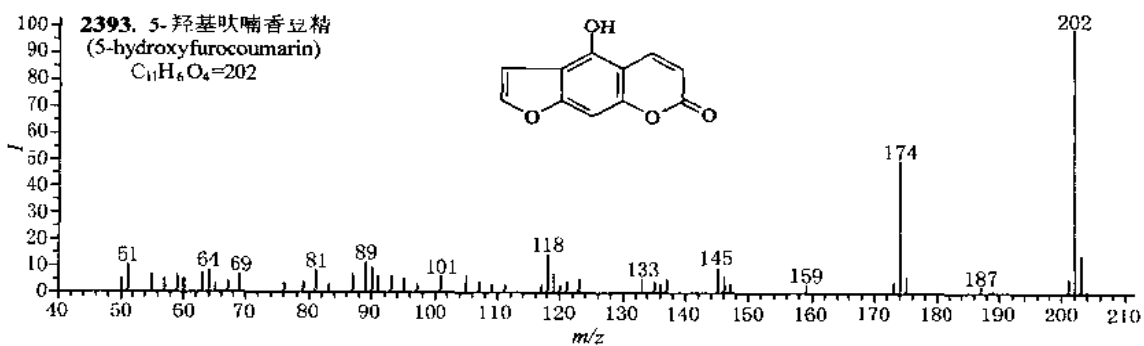
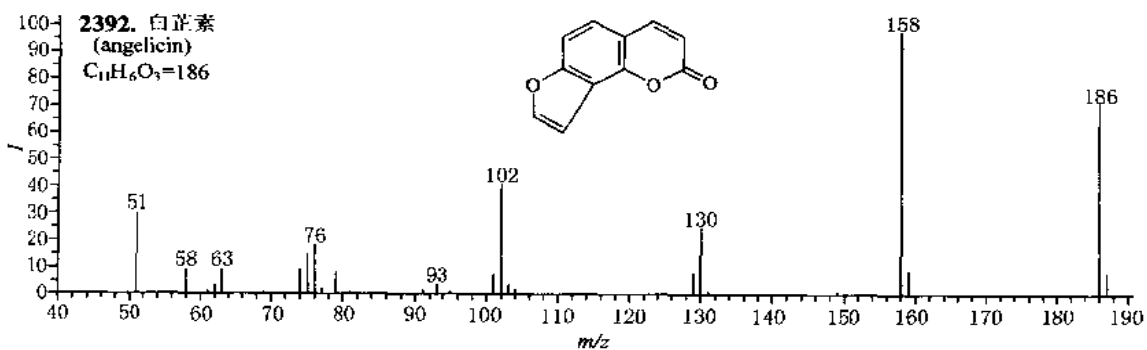
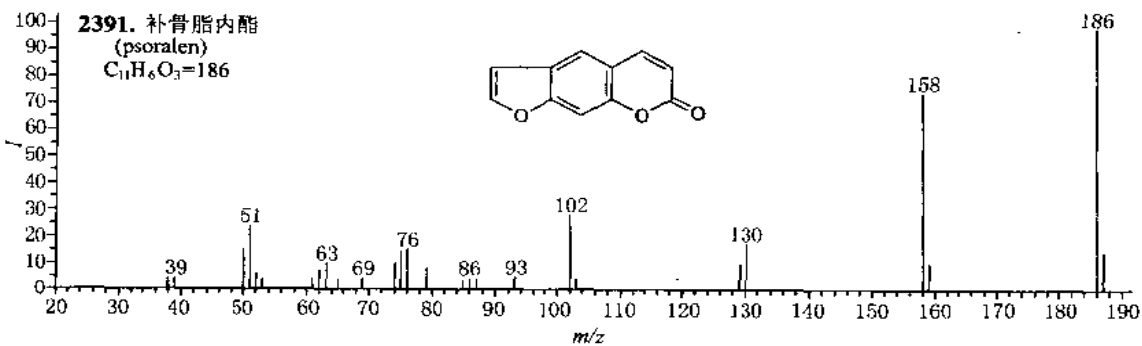
## 二、呋喃香豆精类

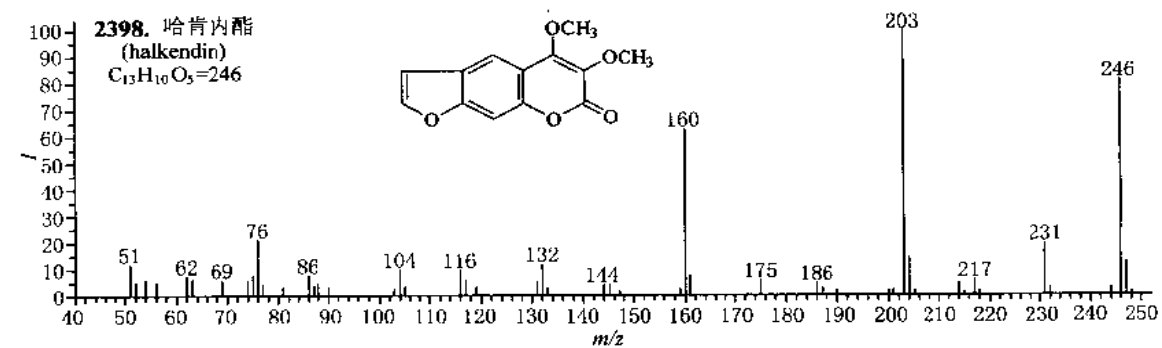
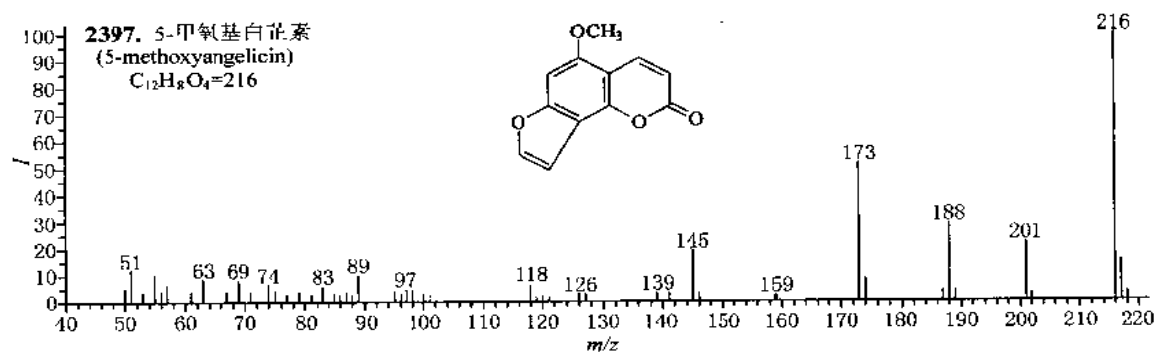
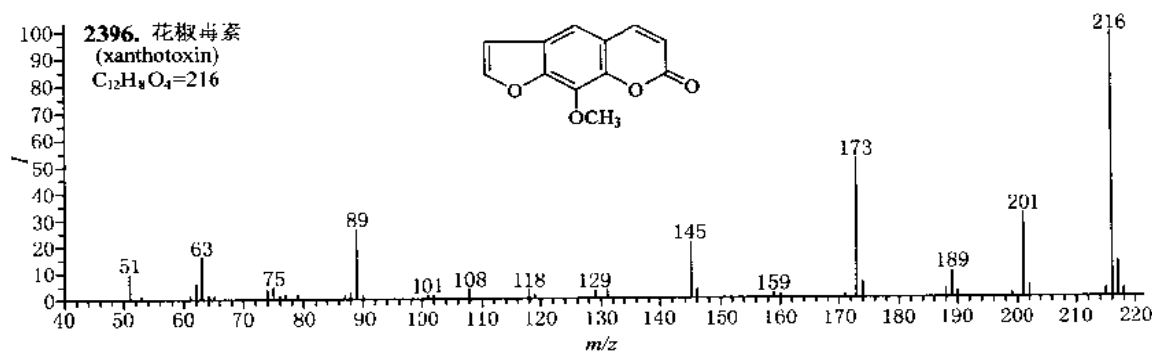
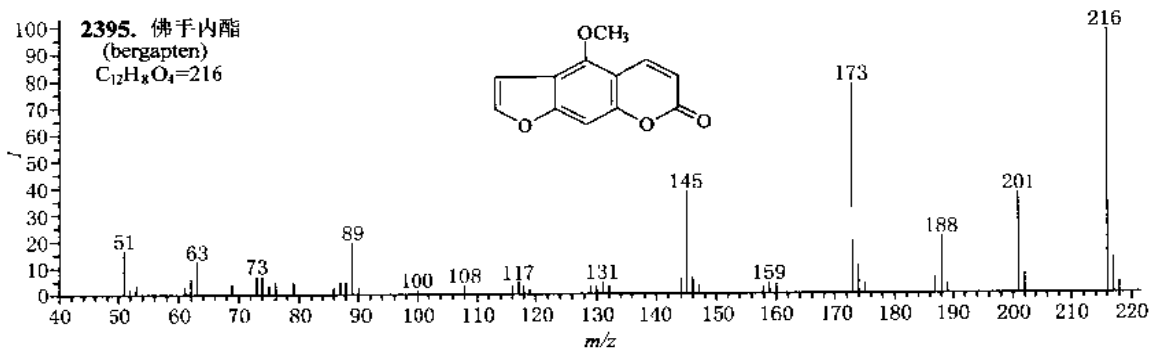
(1) 无取代的呋喃香豆精类 (2391, 2392), 也是连续失去一氧化碳, 直至把氧原子全部失尽为止, 最后再失去乙炔。

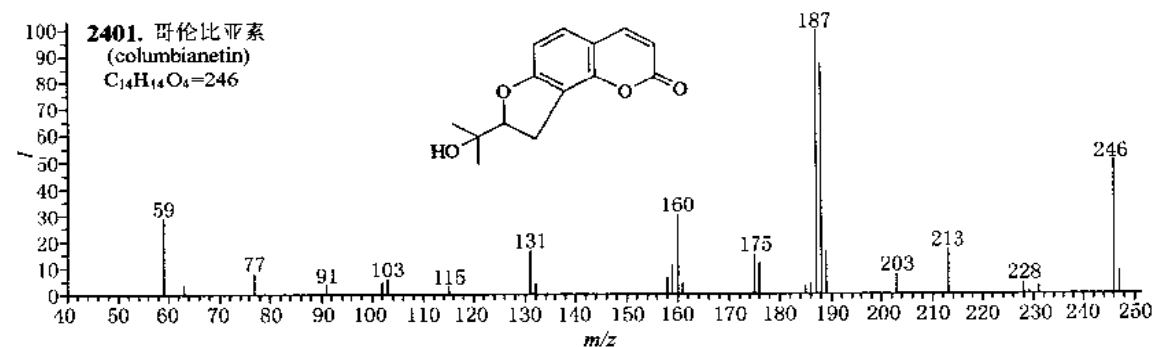
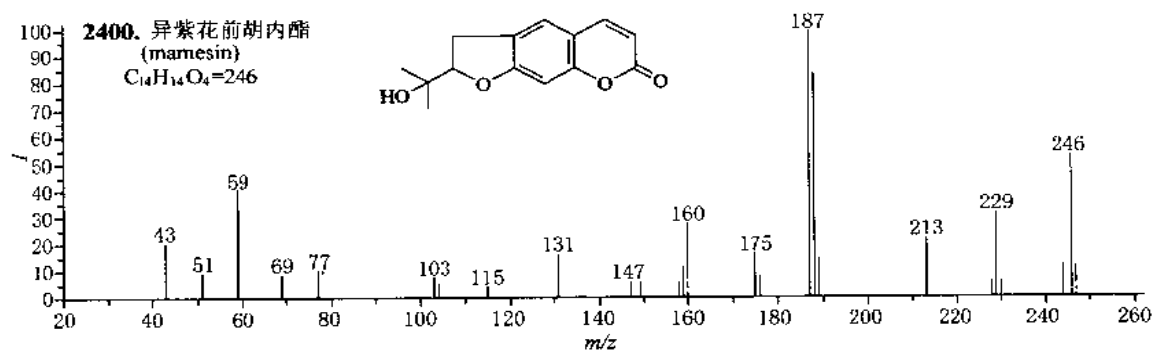
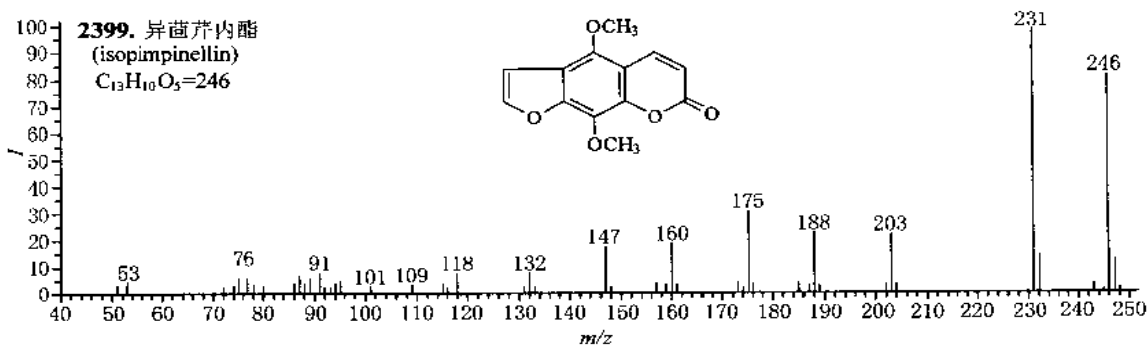
(2) 5-和 8-单羟基取代的呋喃香豆精类 (2393, 2394) 的裂解是连续失去 4 个一氧化碳分子, 直至氧原子全部失尽为止。

(3) 5-和 8-单甲氧基取代的呋喃香豆精类 (2395~2397), 裂解途径是  $M-CH_3$  或  $M-CO$ , 然后分别失去一氧化碳和甲基, 最后再失一分子一氧化碳。二甲氧基取代者 (2398, 2399) 主要是  $M-CH_3-CO$  的裂解途径。

(4) 有羟异丙基取代的二氢呋喃香豆精 (2400, 2401), 主要裂解是失去丙酮和羟异丙基。

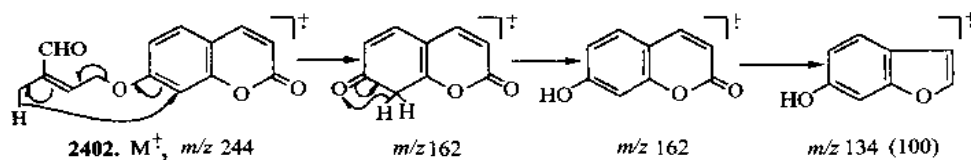




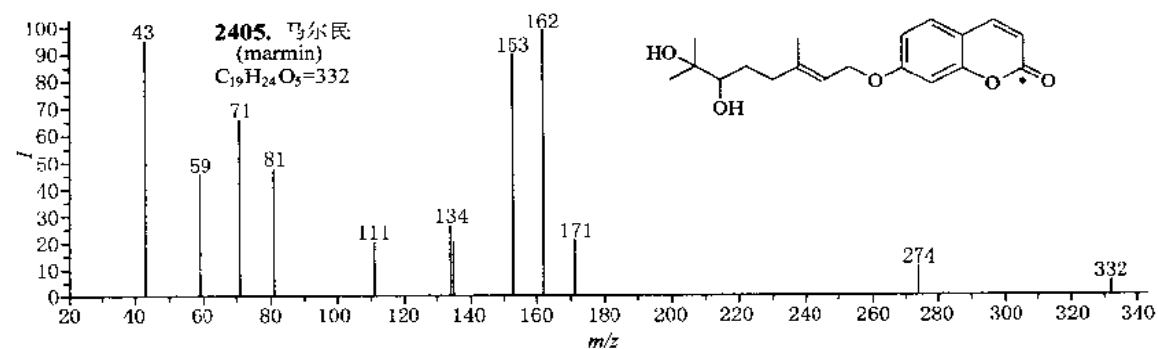
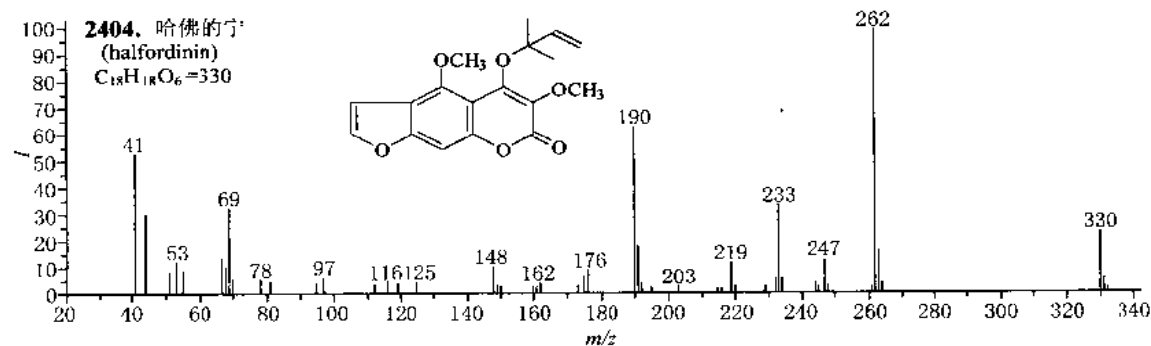
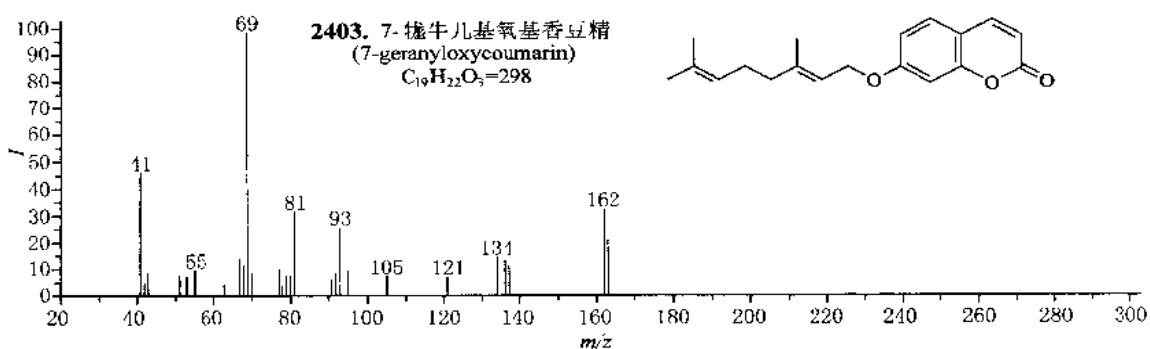
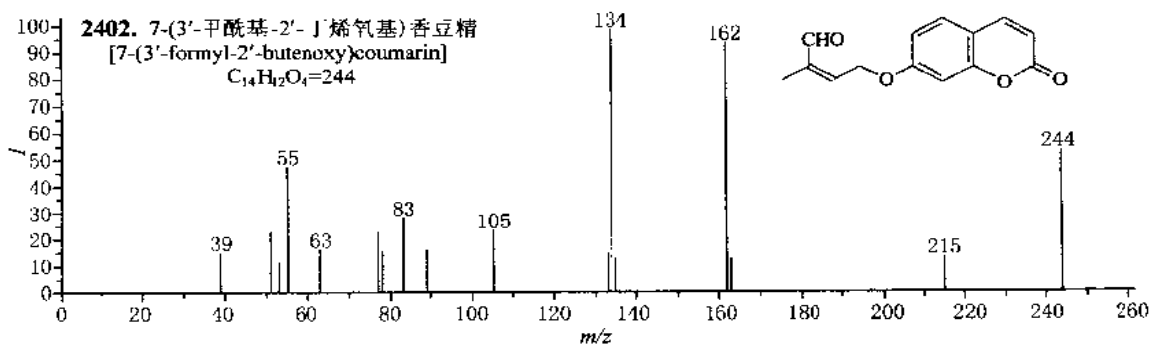


### 三、异戊烯氧基香豆精类

这类化合物 (2402~2405) 的主要裂解是失去侧链并转移一个氢原子生成香豆精母核离子, 氢转移可利用八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解来解释。例:



侧链在质谱中也有反映，可以据此测定结构。

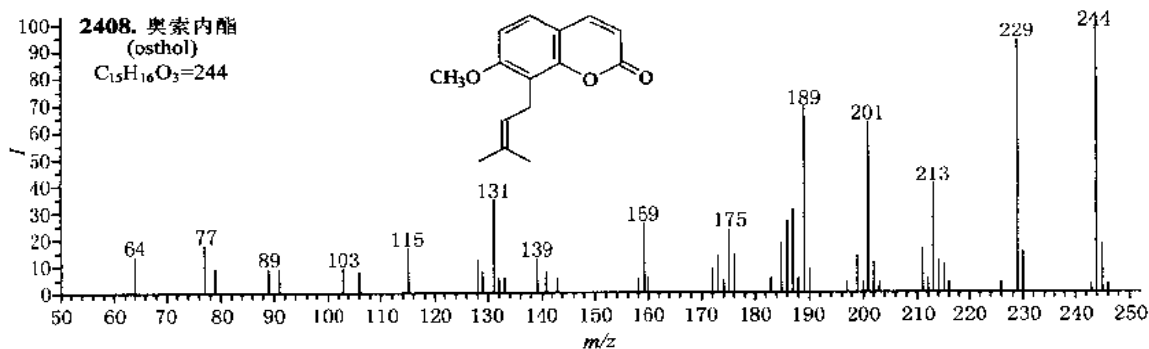
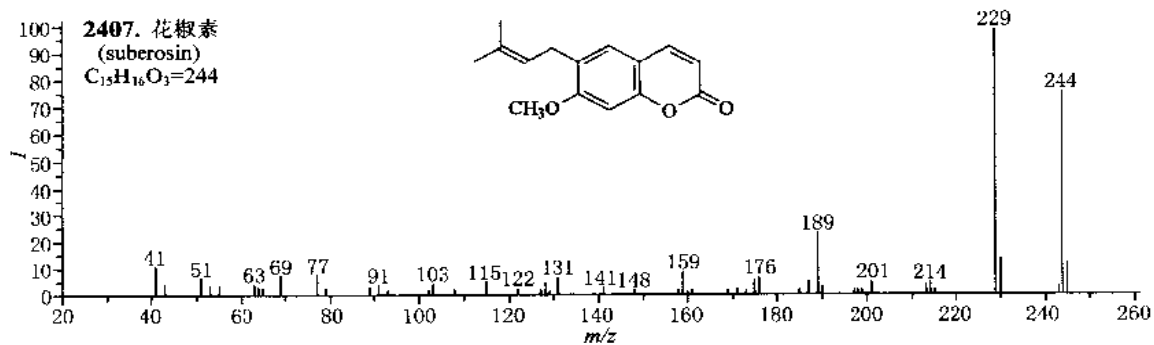
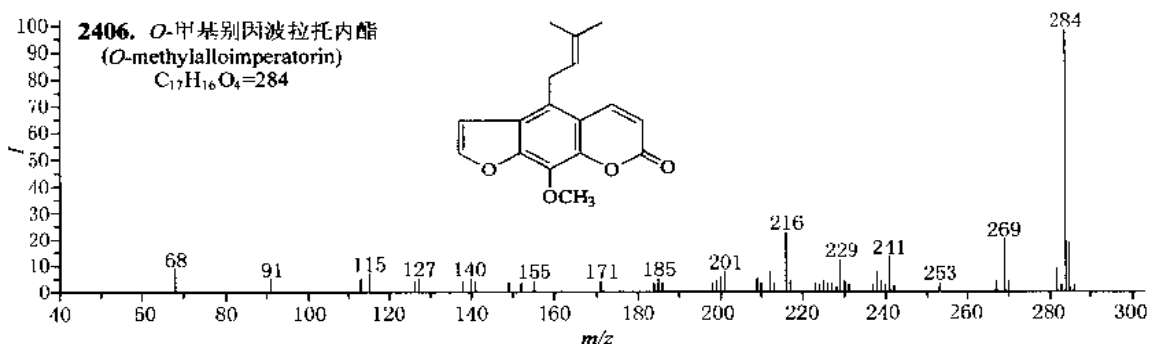


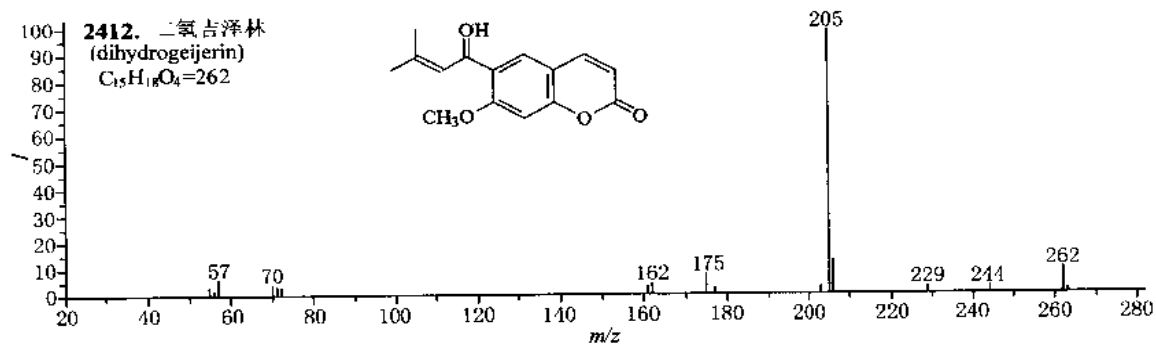
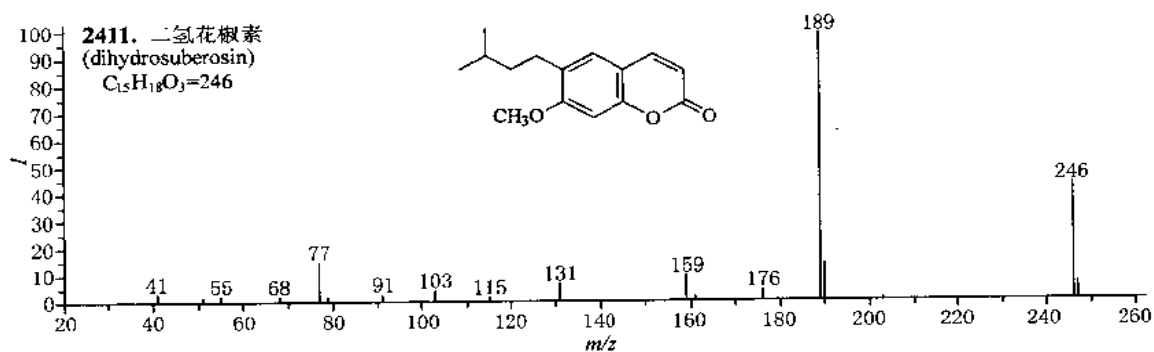
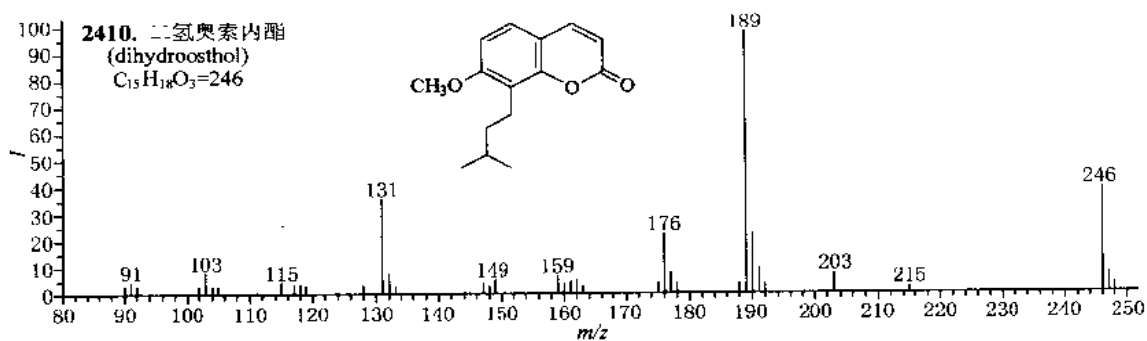
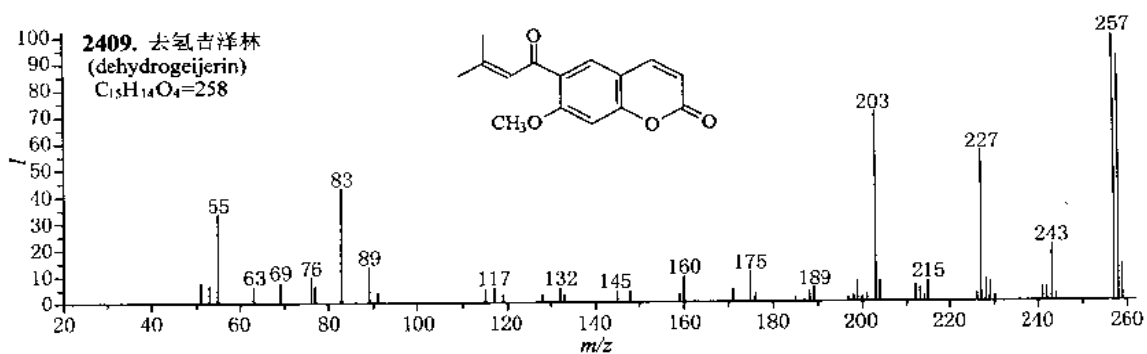
## 四、异戊烯基香豆精类

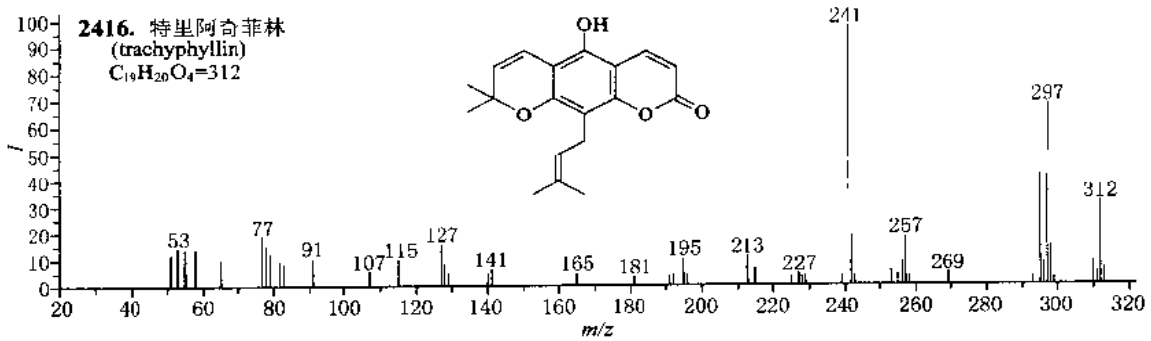
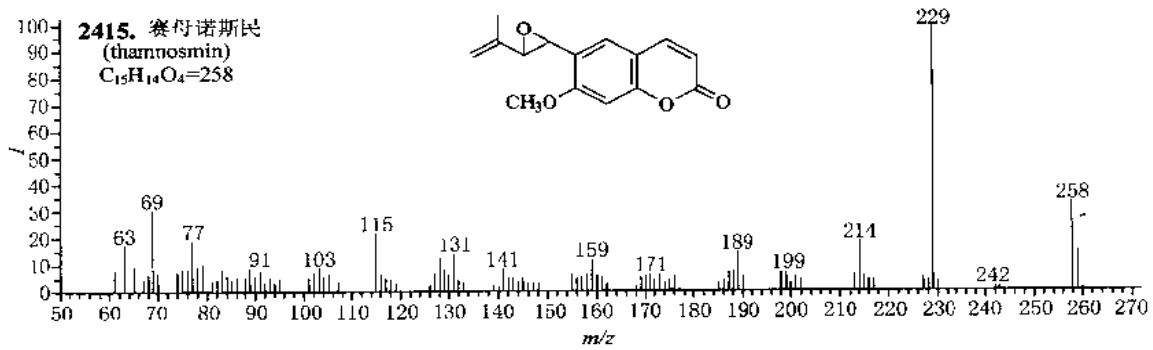
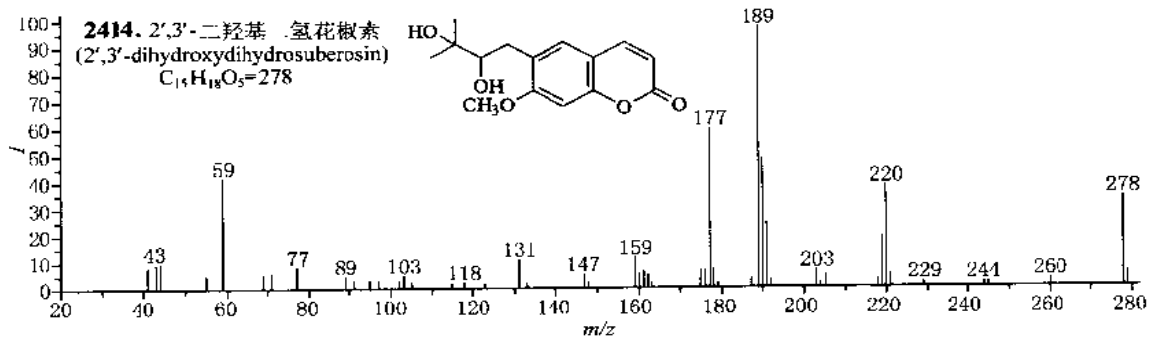
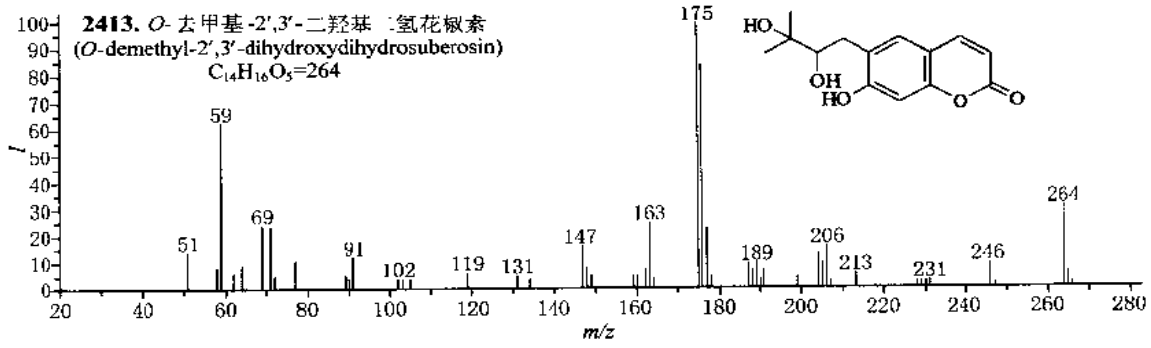
(1) 异戊烯基香豆精类 (2406~2409) 的主要裂解是由侧链失去甲基、异丙基和异丁烯基, 分别得主要离子  $M-CH_3$ ,  $M-C_3H_7$  和  $M-C_4H_7$ 。

(2) 二氢异戊烯基香豆精 (2410~2415) 的主要裂解是一步失去  $C_4H_9$  得强峰  $M-57$ , 侧链上有羟基者, 仍然进行苄基裂解。

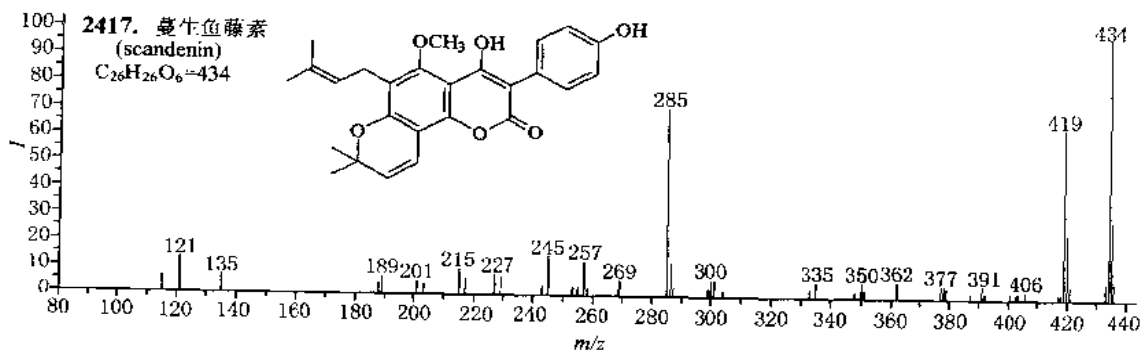
(3) 具有二甲基色烯结构的香豆精类 (2416, 2417) 主要是失去甲基。





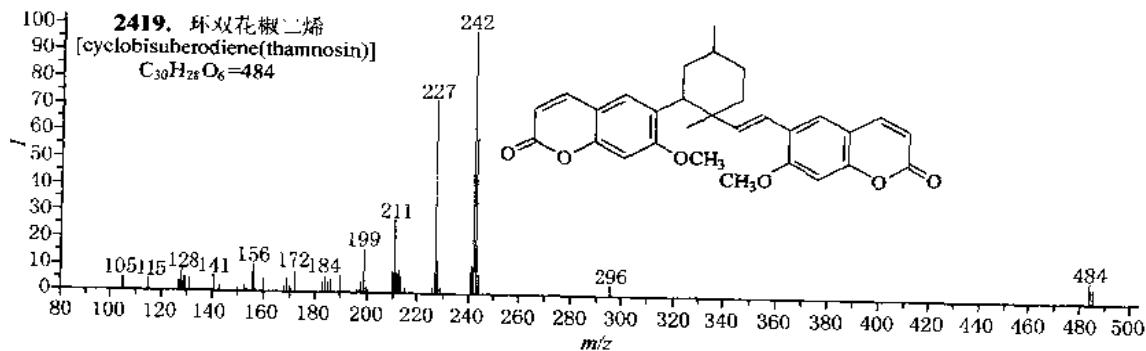
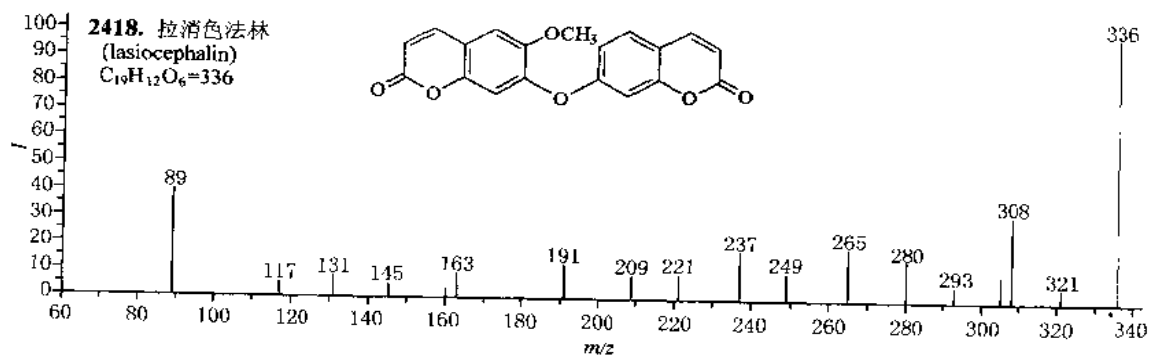


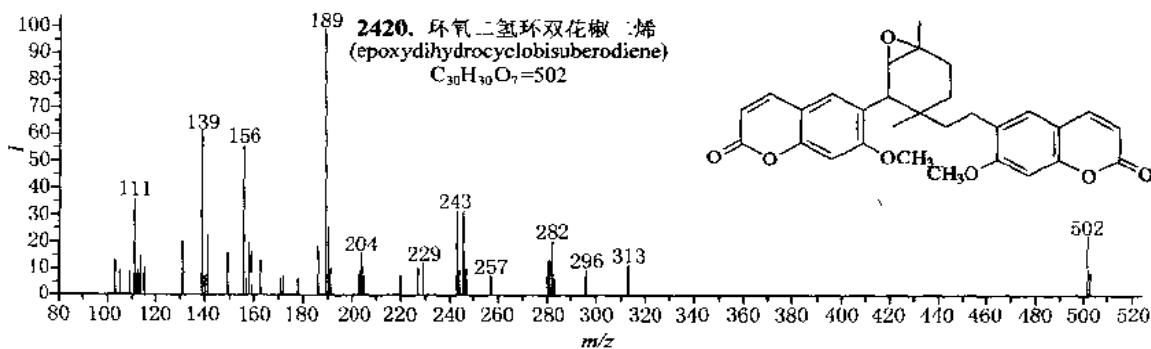




### 五、双香豆精类

- (1) 二香豆精醚类 (2418) 的裂解同香豆精，即能连续失去一氧化碳。
- (2) 环双花椒二烯 (2419) 的主要裂解是环己烯环的 RDA 裂解，把分子离子分成质量相同的两部分。
- (3) 环氧二氢环双花椒二烯 (2420) 的主要裂解是苄基裂解得甲氧基香豆精苄基离子， $m/z$  189。

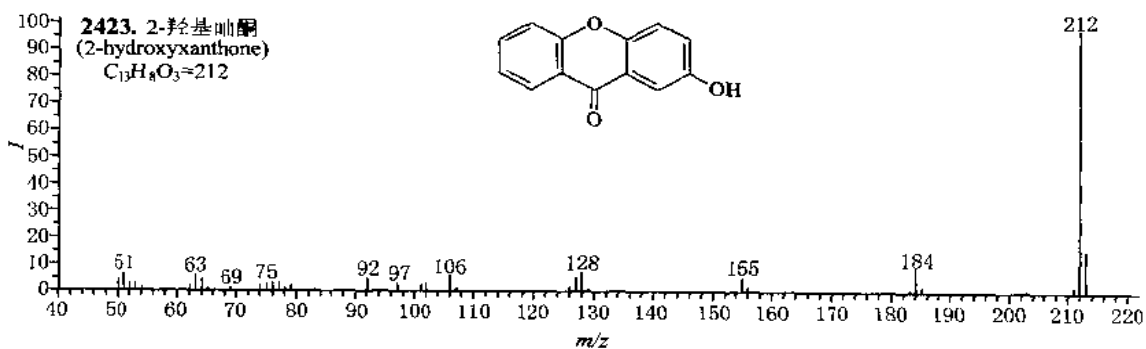
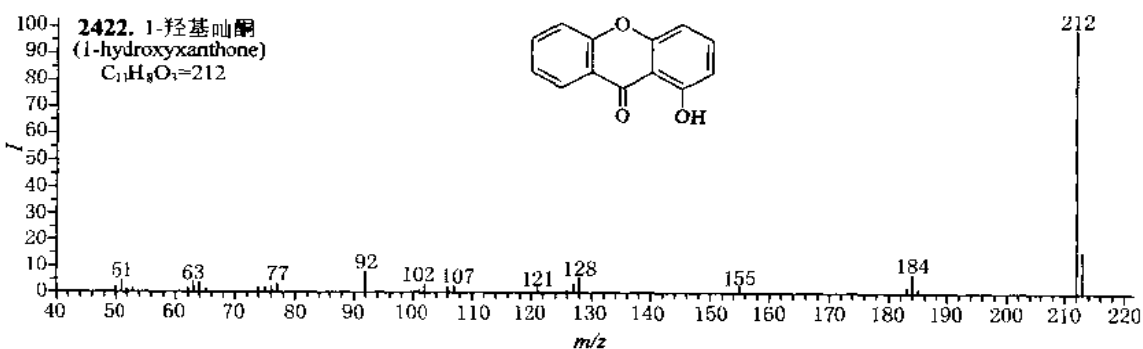
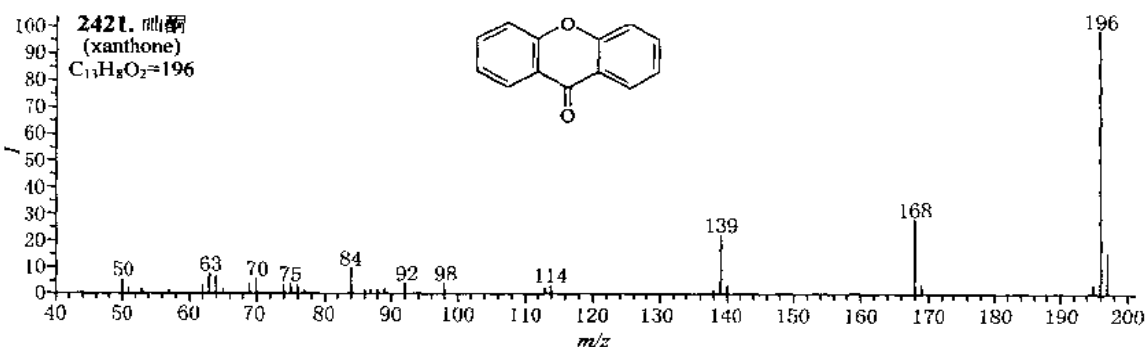


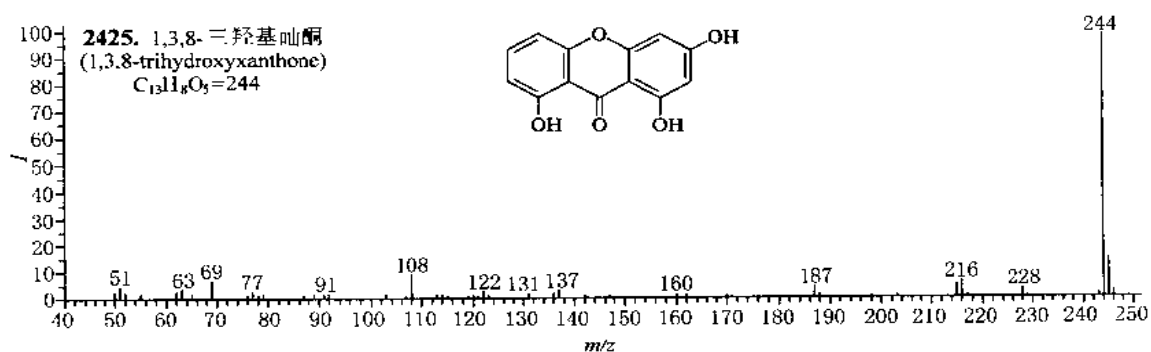
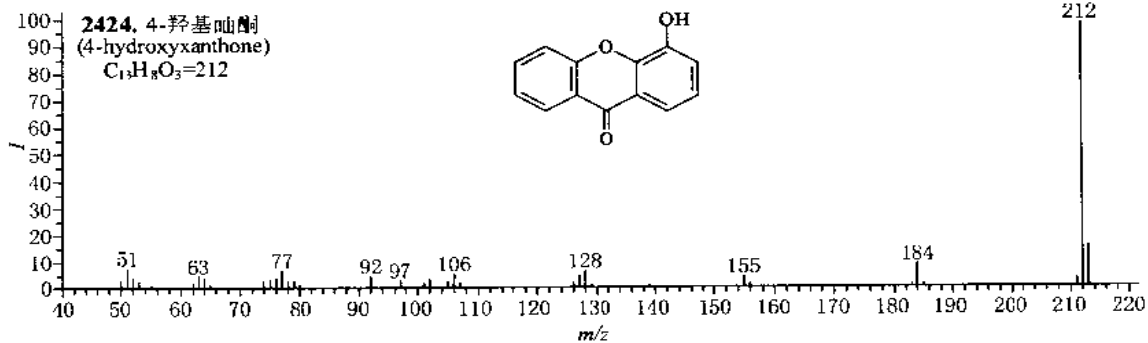


## 第二节 吡 酮 类

### 一、吡酮和羟基吡酮类

这类化合物 (2421~2425) 的主要裂解途径是  $M-CO-CHO$ 。

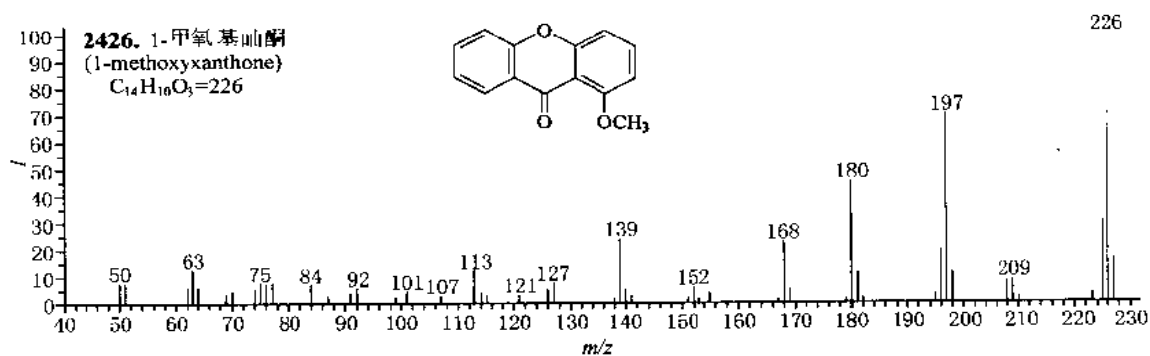


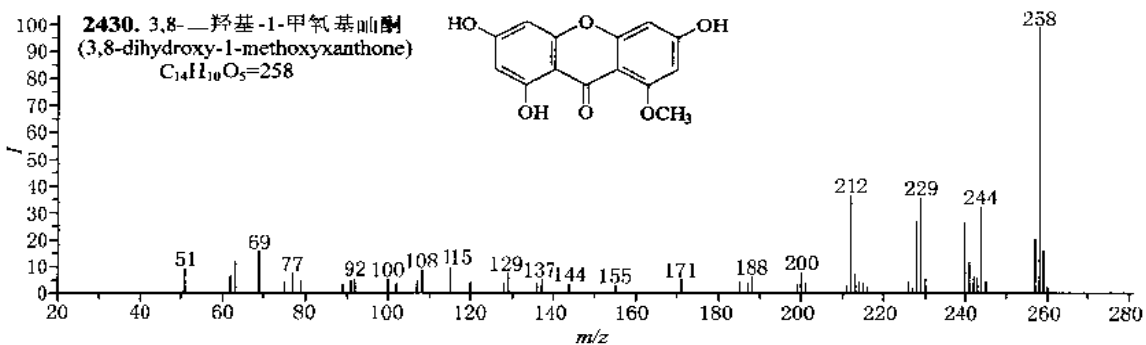
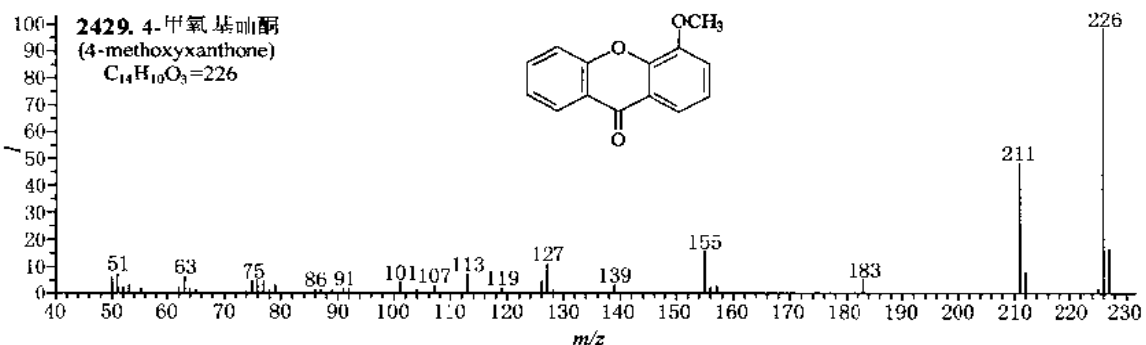
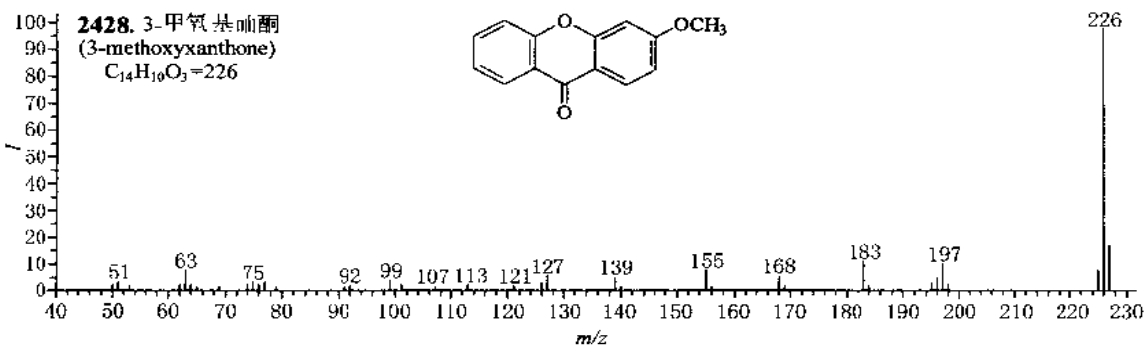
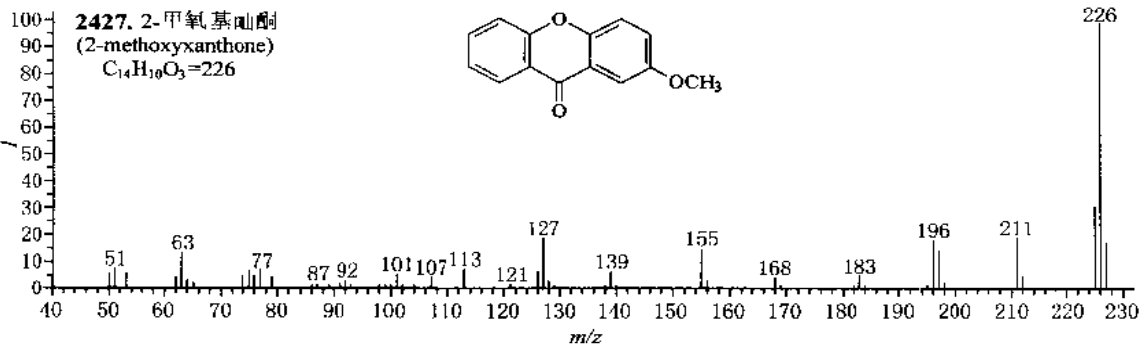


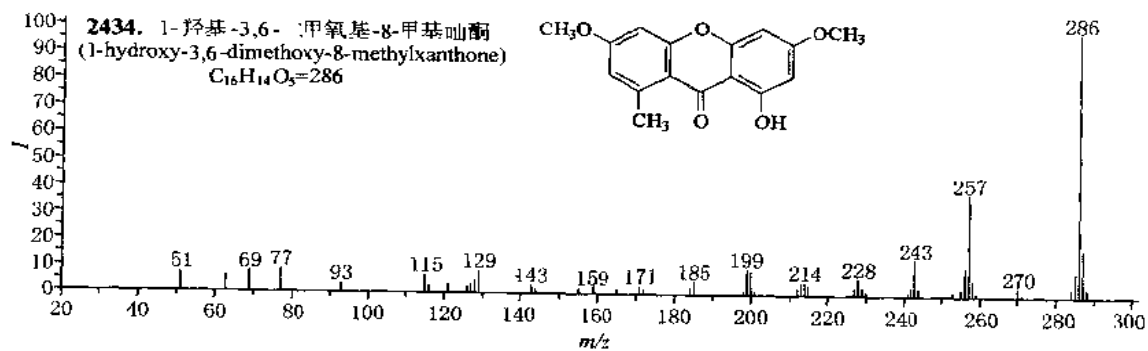
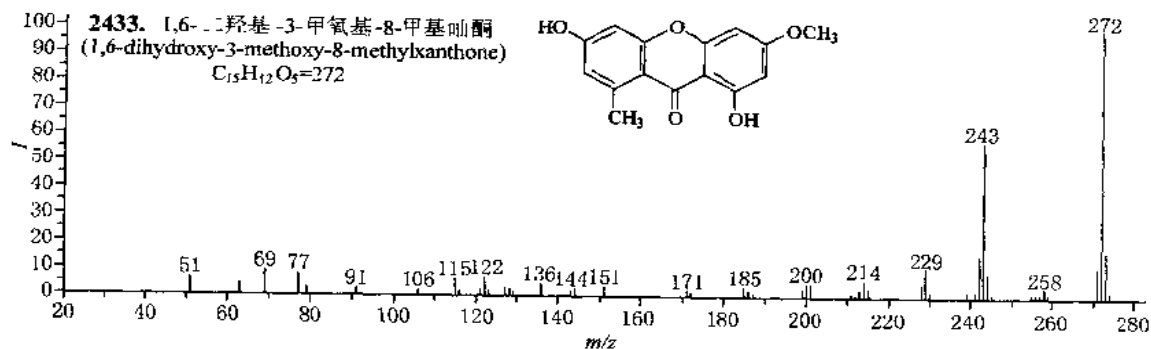
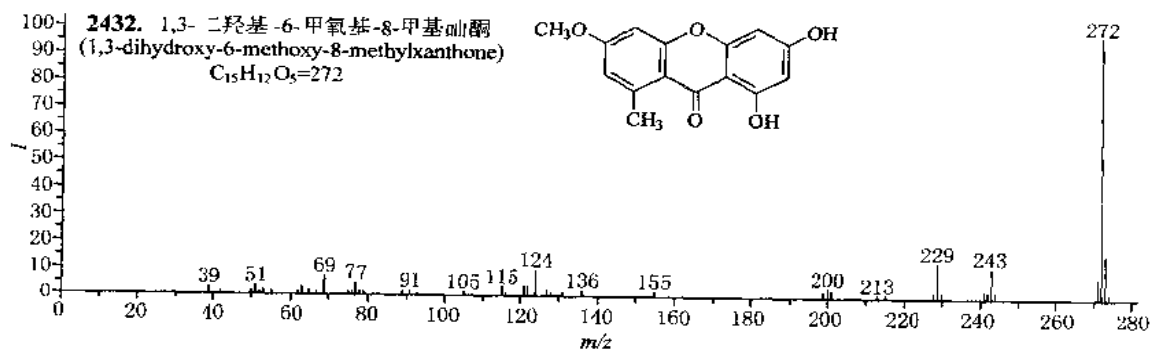
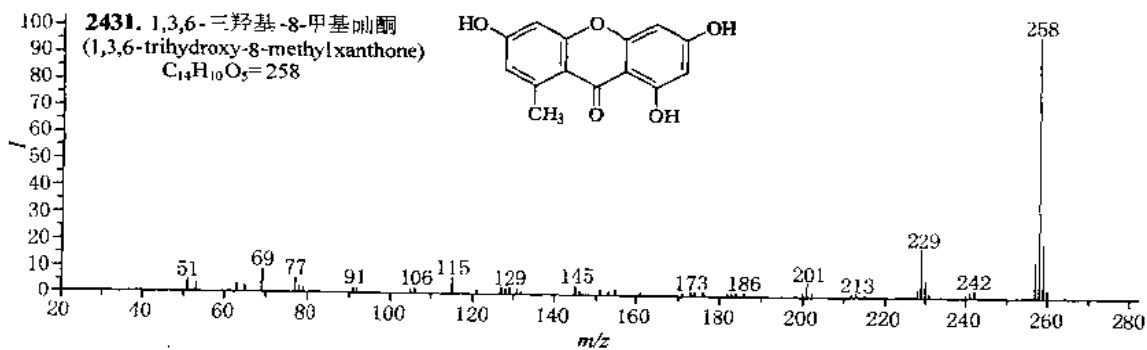
## 二、甲氧基吡酮类

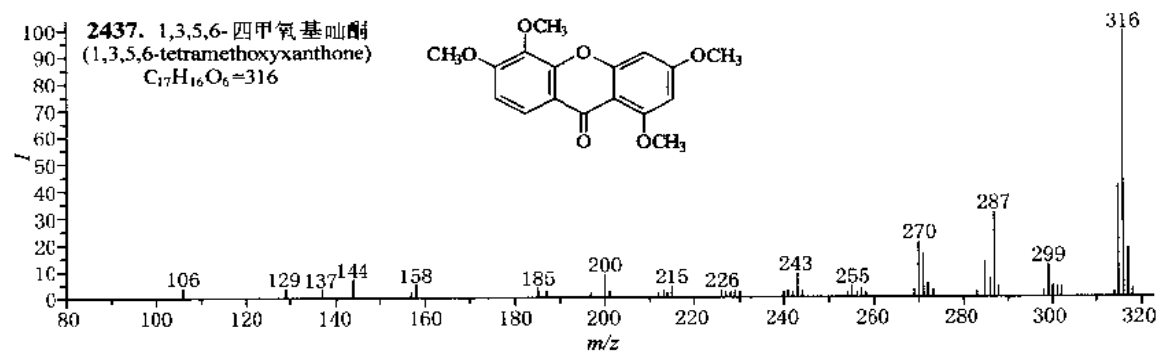
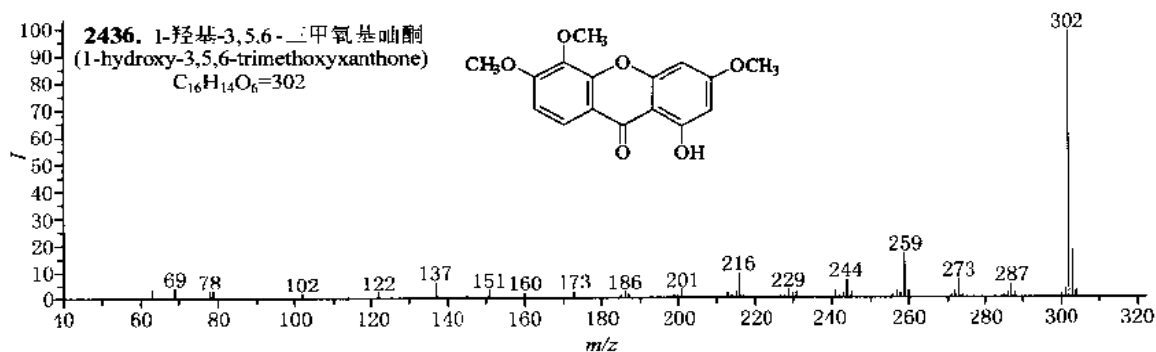
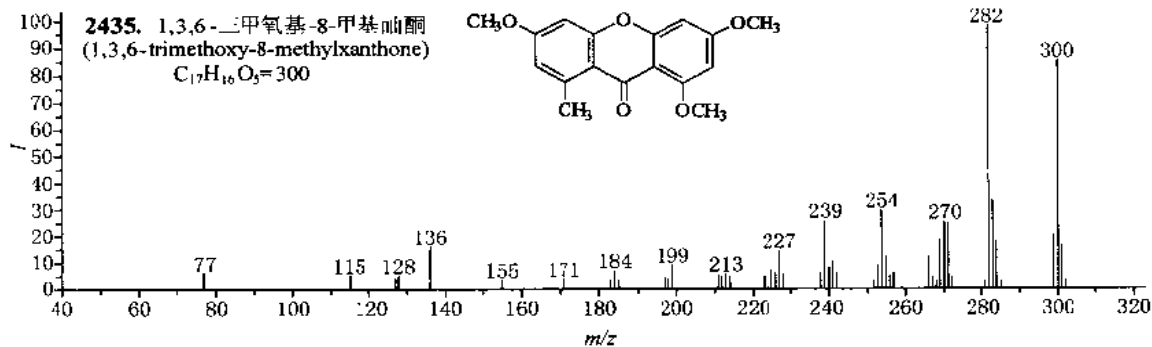
(1) 1-甲氧基吡酮 (2426) 的特征裂解是  $M-H_2O-CO$ ，其他裂解是  $M-CHO-CHO-CHO$ 。

(2) 2-甲氧基 (2427) 和 4-甲氧基 (2429) 吡酮类易失甲基，因失甲基后能形成对醌和邻醌结构，这与  $C_3$ 、 $C_6$  和  $C_8$  甲氧基黄酮的情形相似 (见第十七章第一节)。







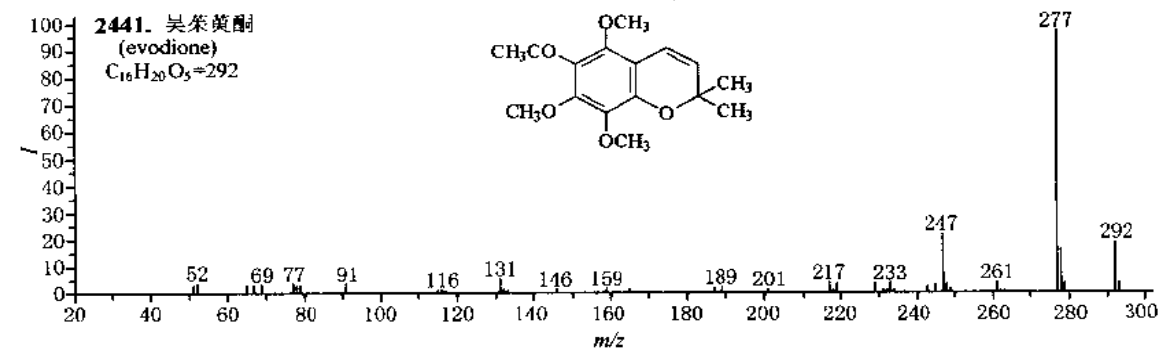
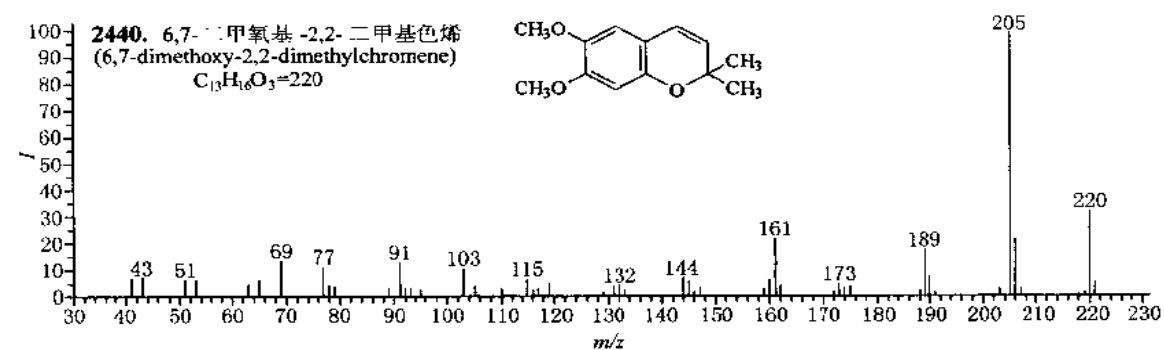
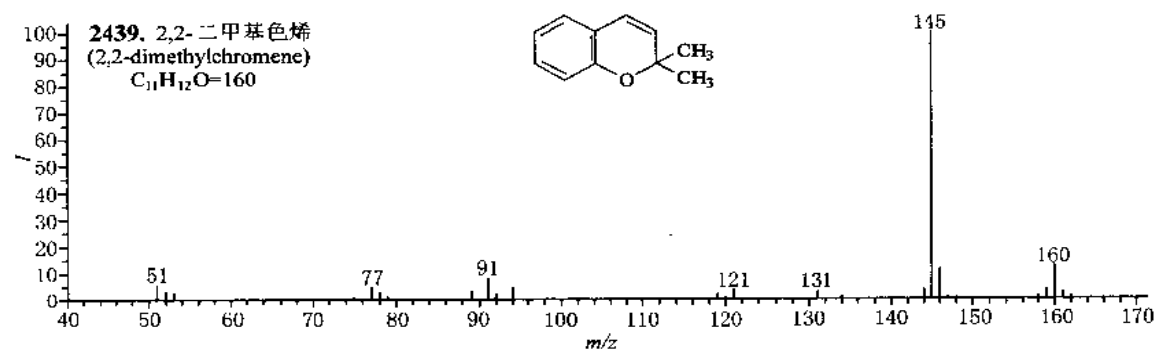
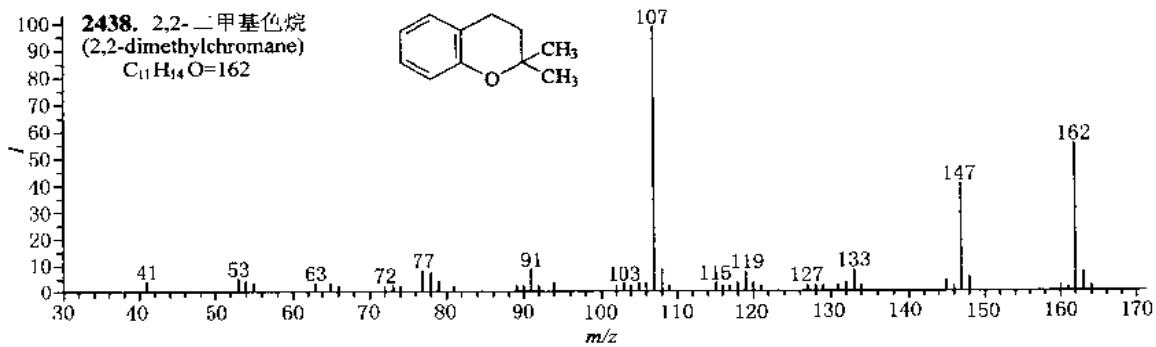


### 第三节 色烷、色烯和色酮类

#### 一、色烷和色烯类

(1) 2,2-二甲基色烷 (2438) 的主要裂解是  $M-CH_3$  和  $M-C_4H_7$ , 后者要转移甲基上的氢原子, 生成的离子具有邻羟基苯基结构。

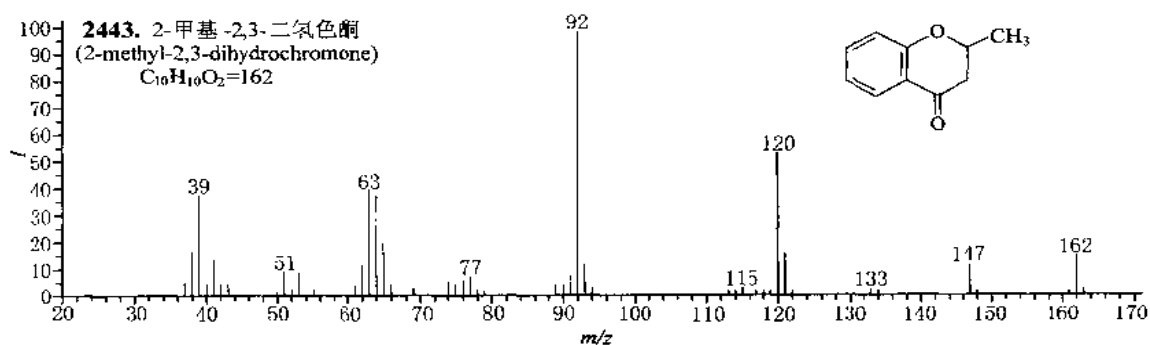
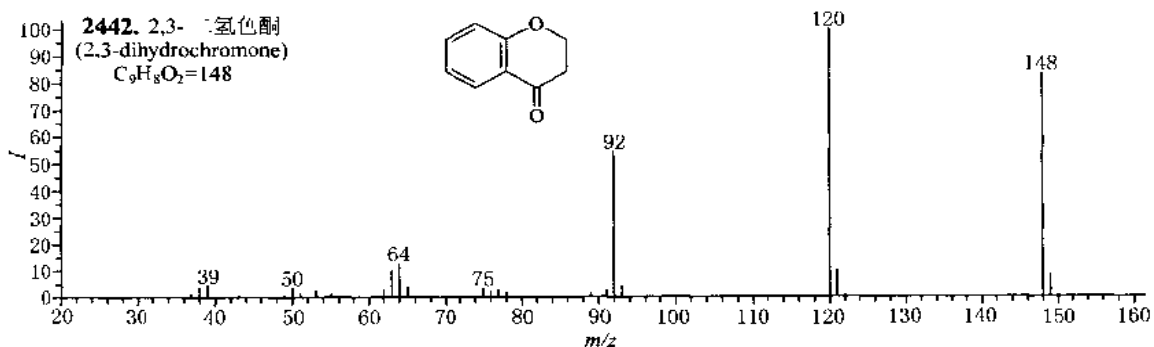
(2) 2,2-二甲基色烯类 (2439~2441) 的主要裂解是强烈地失去甲基, 生成的离子具有完全芳香化的结构。



## 二、二氢色酮类

(1) 2,3-二氢色酮 (2442) 的裂解途径是  $M-C_2H_4-CO-CO$ 。

(2) 2-甲基-2,3-二氢色酮 (2443) 的裂解途径有  $M-CH_3$  和  $M-CH_3CHCH_2-CO-CO$ 。

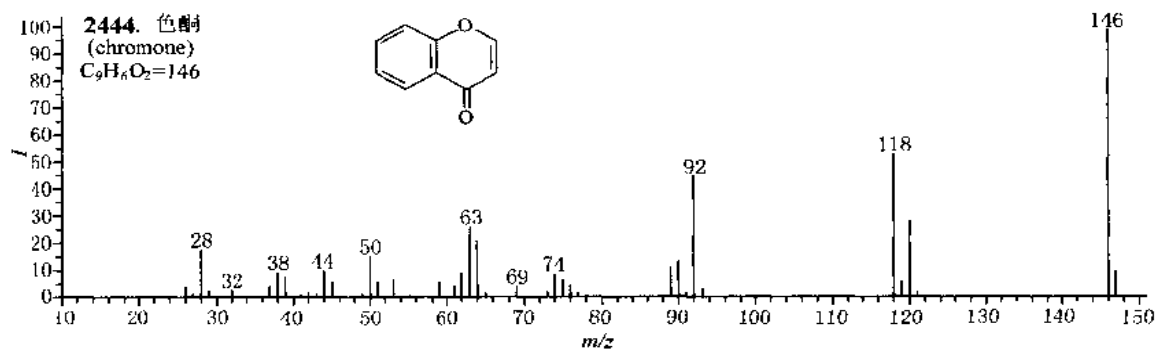


## 三、色酮类

(1) 色酮 (2444) 本身的裂解途径是  $M-C_2H_2-CO-CO$  或  $M-CO-C_2H_2-CO$ 。

(2) 2-甲基色酮 (2445) 的裂解途径有  $M-CO-H$  和  $M-CH_3CCH-CO-CO$ , 失去的乙炔和甲基乙炔来自  $C_2$  和  $C_3$ , 可用 RDA 裂解来解释。

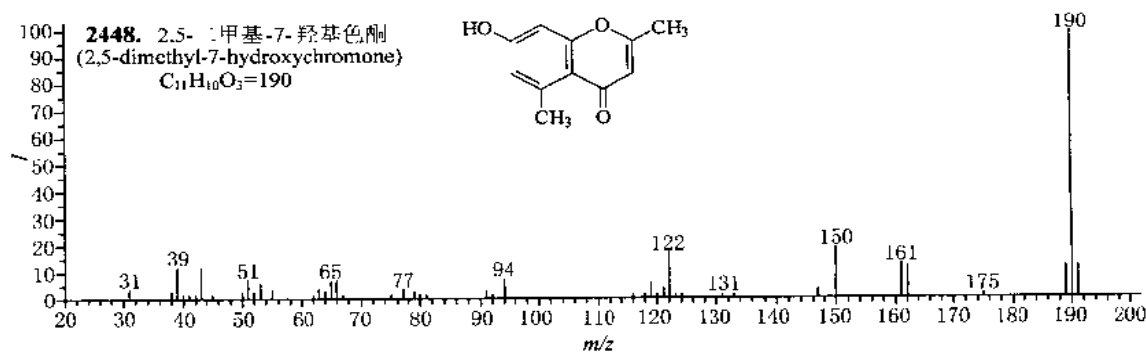
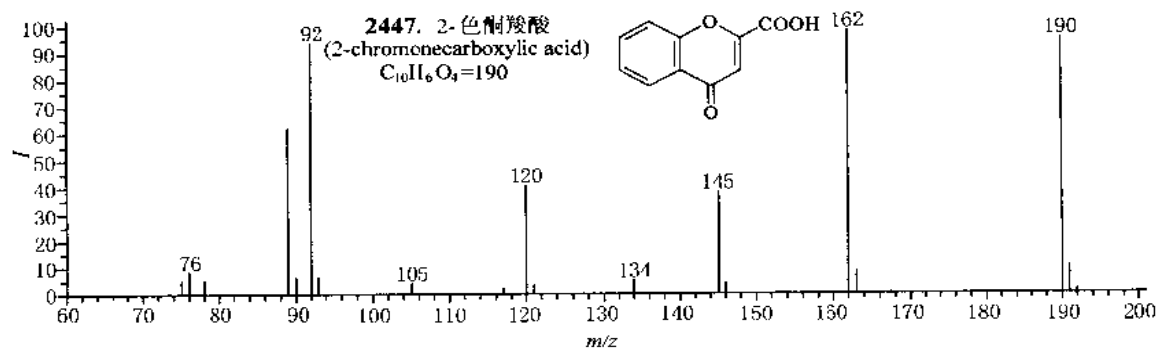
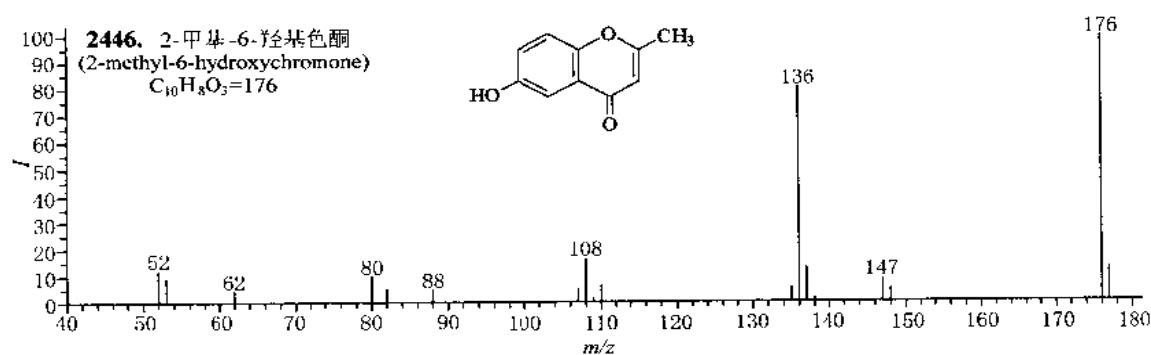
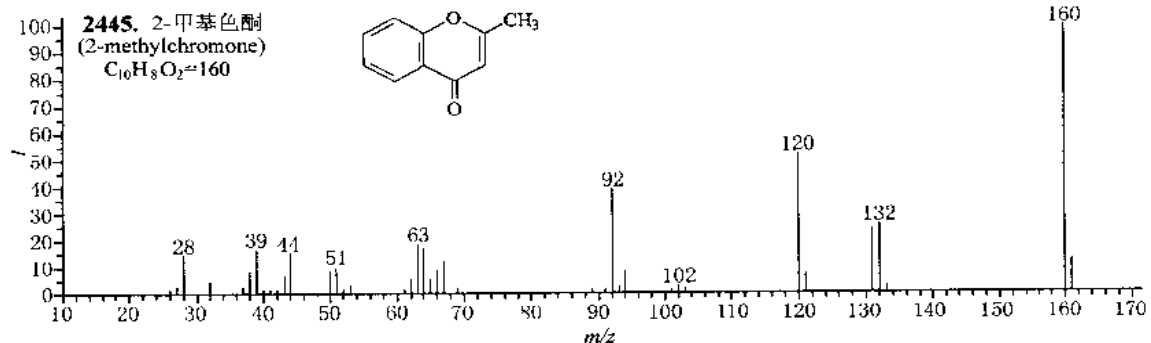
(3) 2-色酮羧酸 (2447) 的裂解途径有  $M-CO-OH$  和  $M-CHCCOOH-CO$ , 失去的  $CHCCOOH$  基团仍然来自 RDA 裂解。

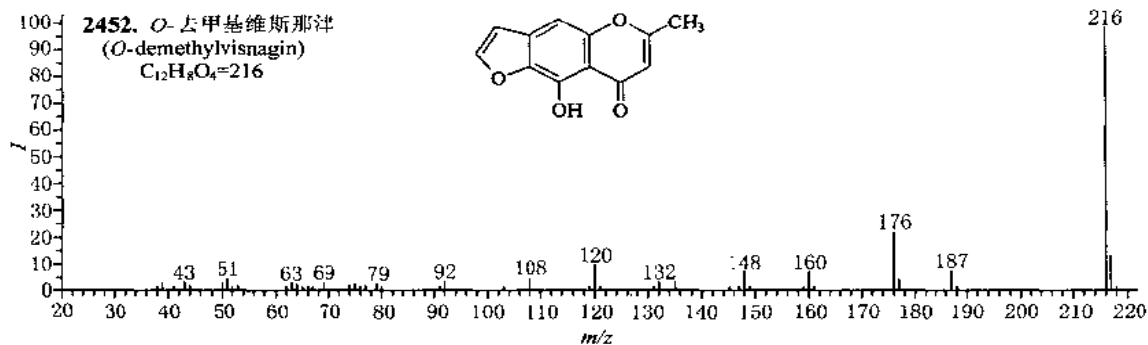
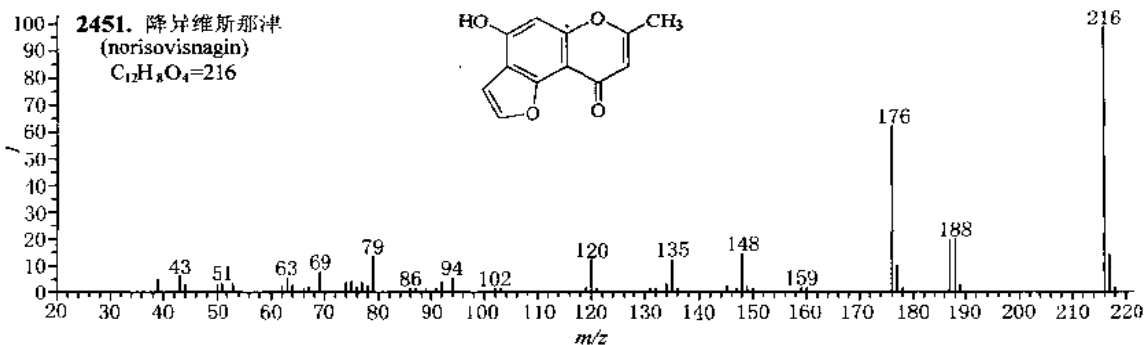
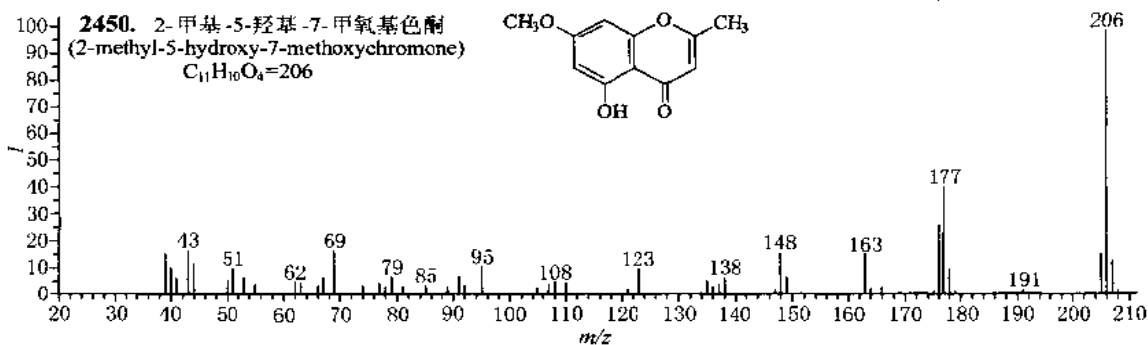
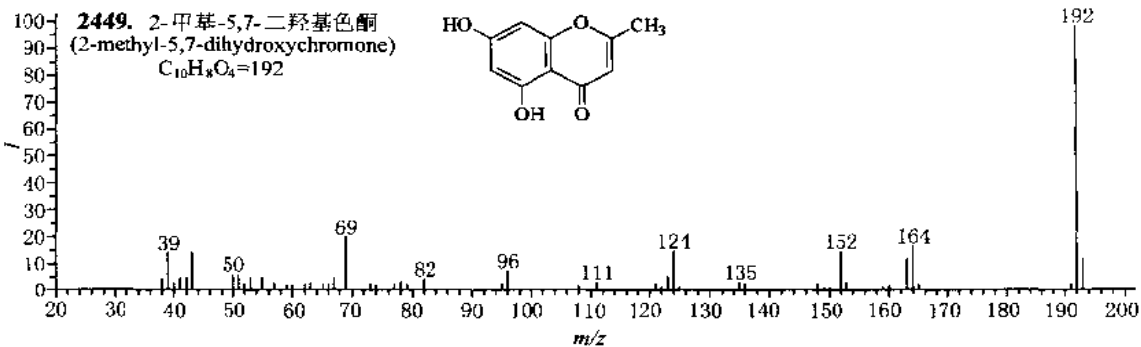


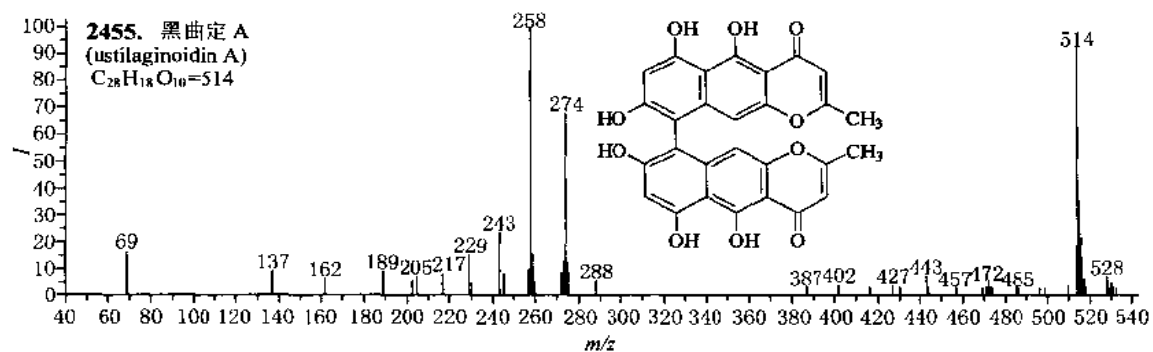
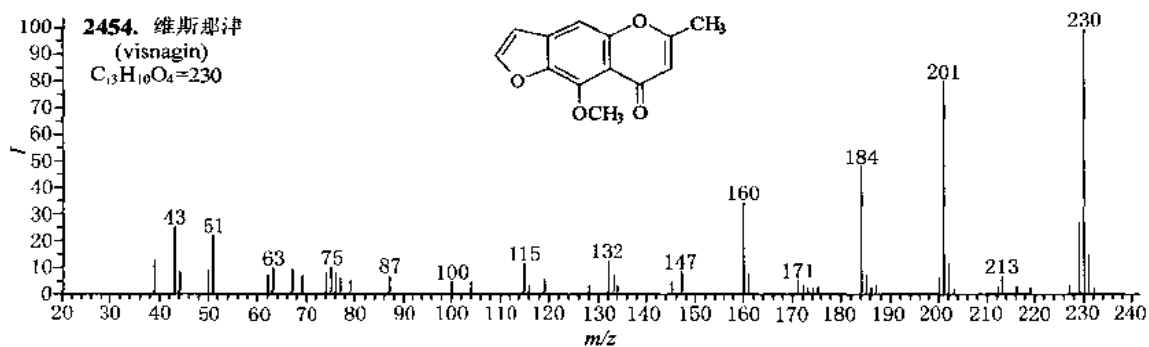
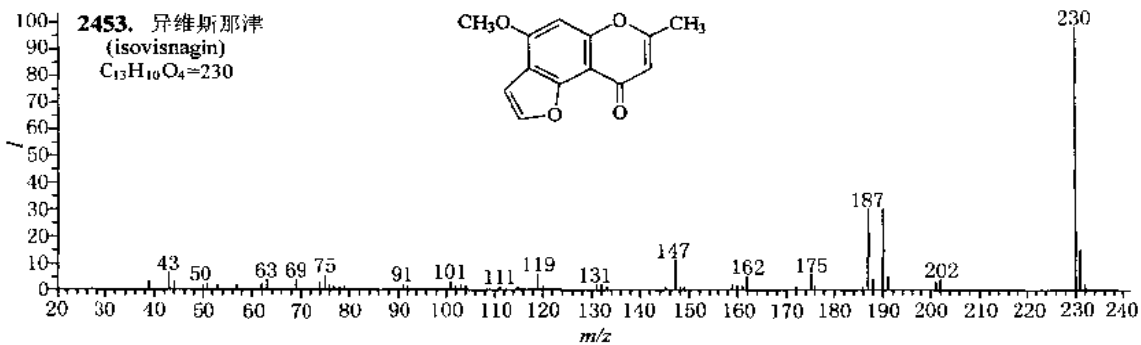


(4) 具有  $C_5$  甲氧基的色酮类化合物, 如维斯那律 (2454), 有明显的失一氧化碳后再失水的离子, 这与  $C_5$  甲氧基黄酮类化合物的情形一致 (见第十七章第一节)。

(5) 黑曲定 (2455) 的基峰来自分子离子的一半再加一氢原子, 离子  $m/z$  274 尚不能解释。







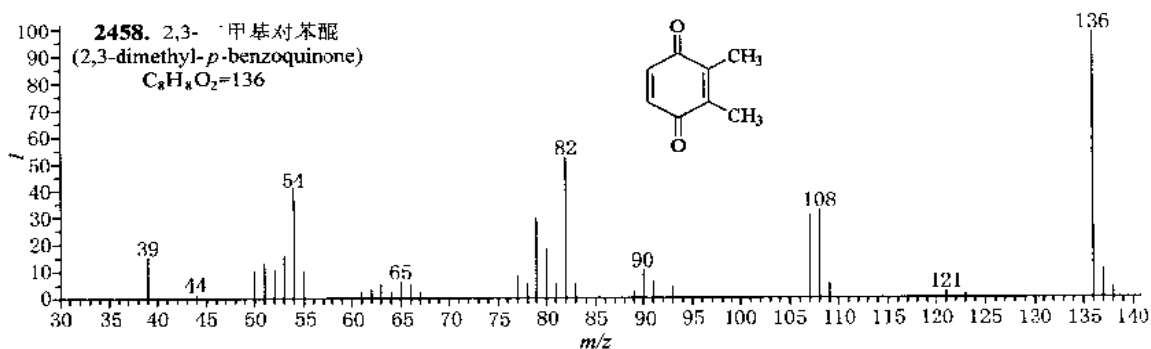
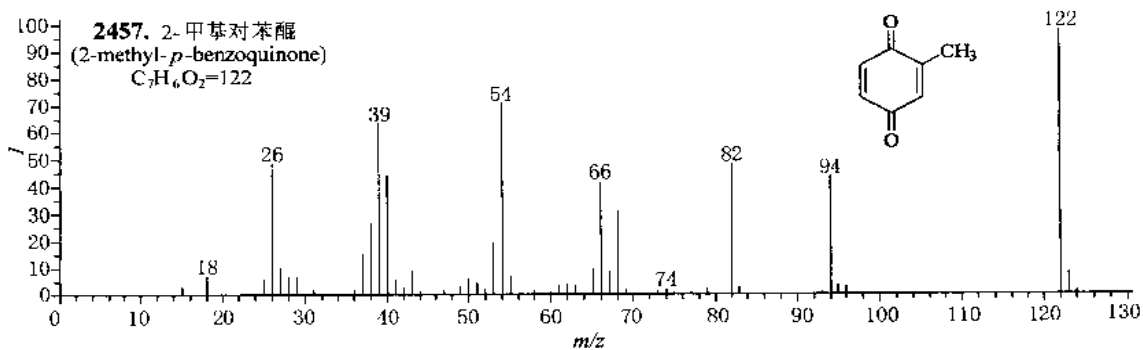
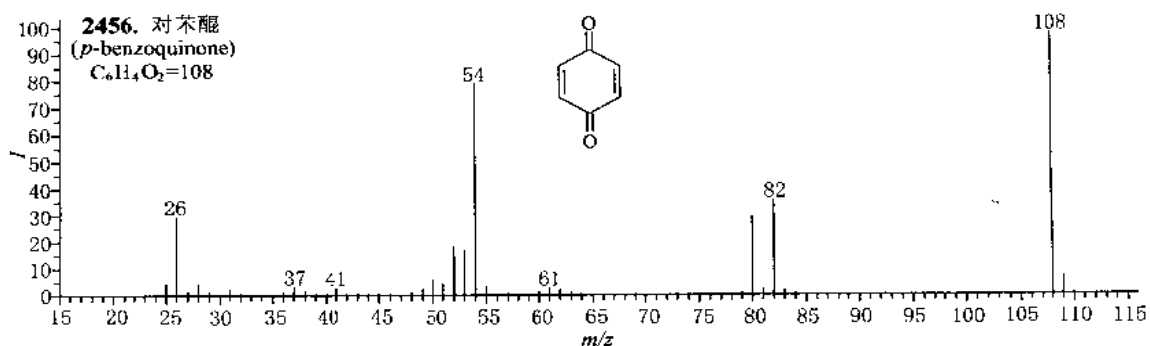
# 第十九章 醌 类

## 第一节 苯 醌 类

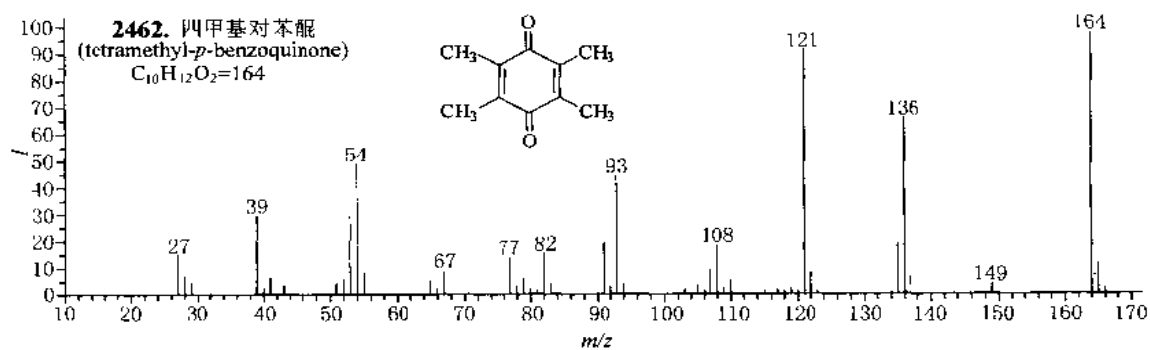
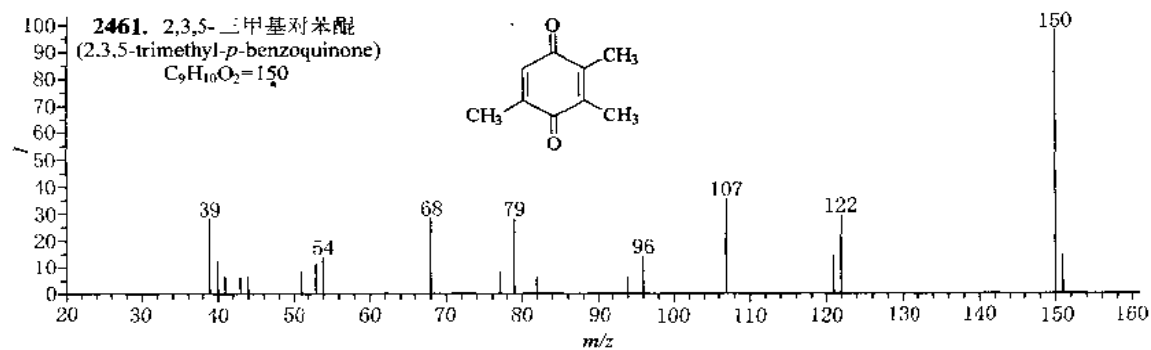
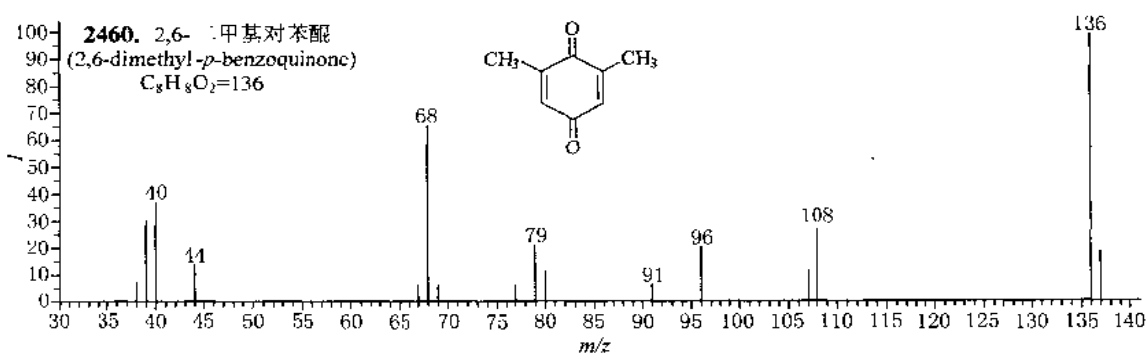
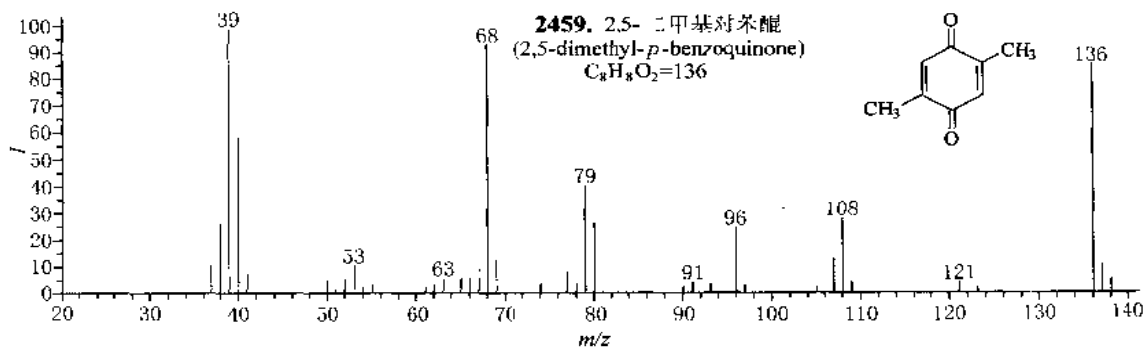
### 一、对苯醌和甲基对苯醌类

(1) 对苯醌 (2456) 的主要裂解途径是  $M-C_2H_2-CO-CO$  和  $M-CO-C_2H_2-CO$ 。

(2) 2-甲基对苯醌 (2457) 的裂解途径是  $M-CO-C_2H_2-CO$ ,  $M-CO-CO-C_2H_2$  和  $M-CH_3CCH-CO-CO$ 。



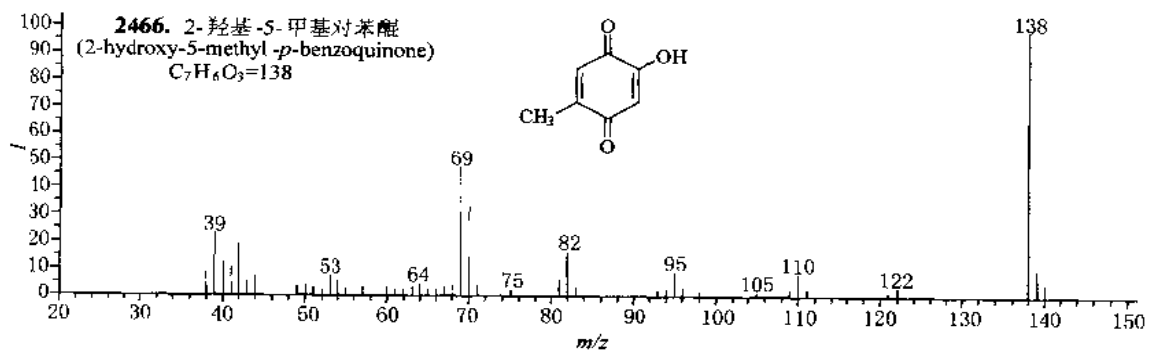
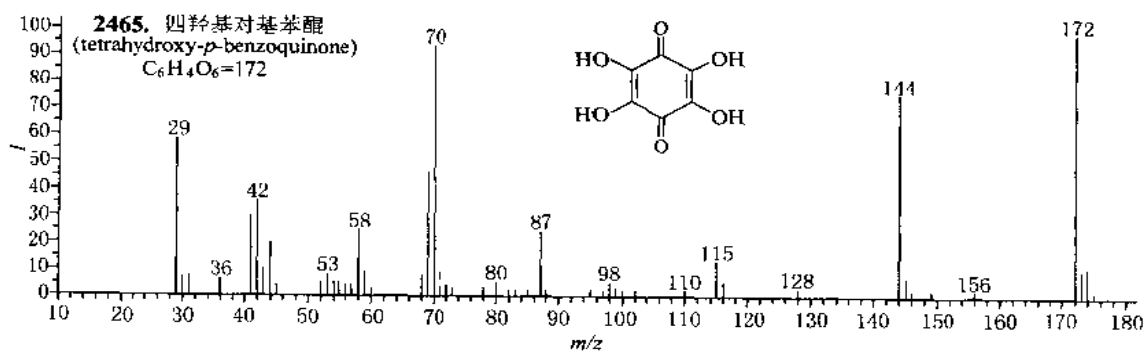
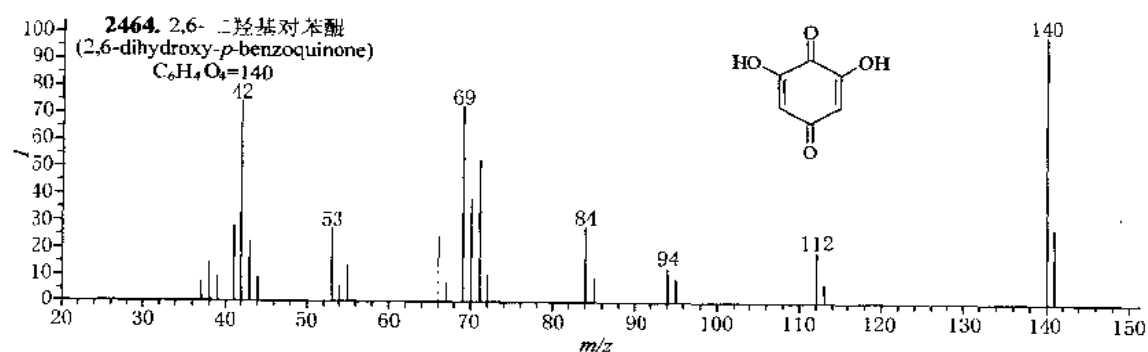
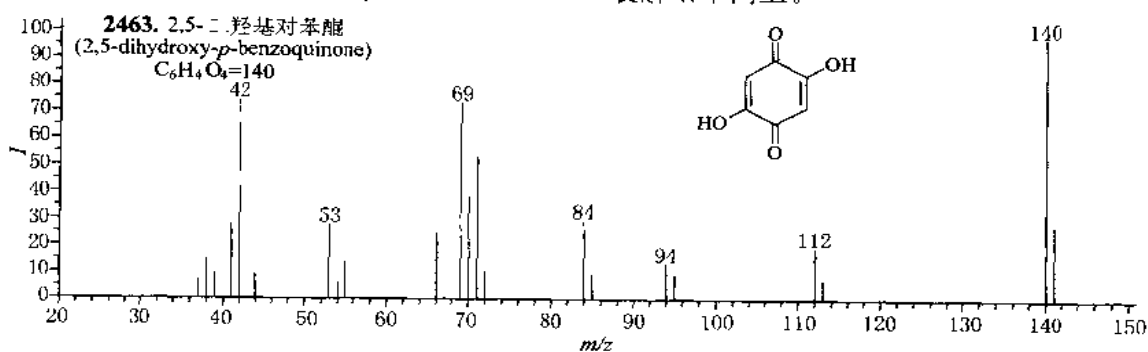
(3) 多甲基对苯醌类 (2458~2462) 的裂解也是失一氧化碳, 失乙炔时总是失带有多个甲基的乙炔, 许多离子还能失氢。

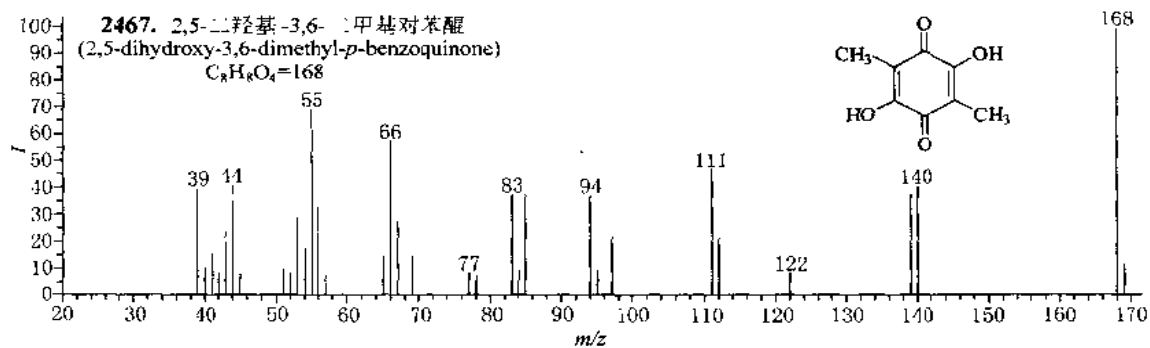


## 二、羟基对苯醌类

(1) 羟基取代的对苯醌类 (2463~2465) 主要是失一氧化碳, 失去乙炔或取代乙炔的裂解较少。

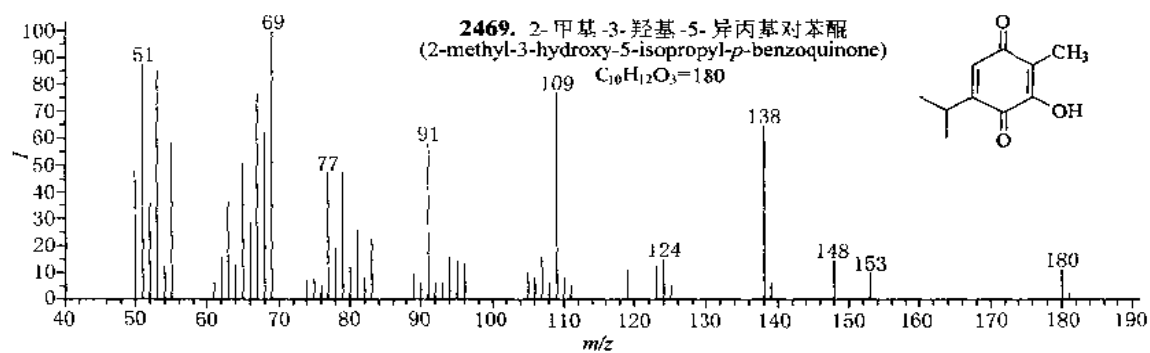
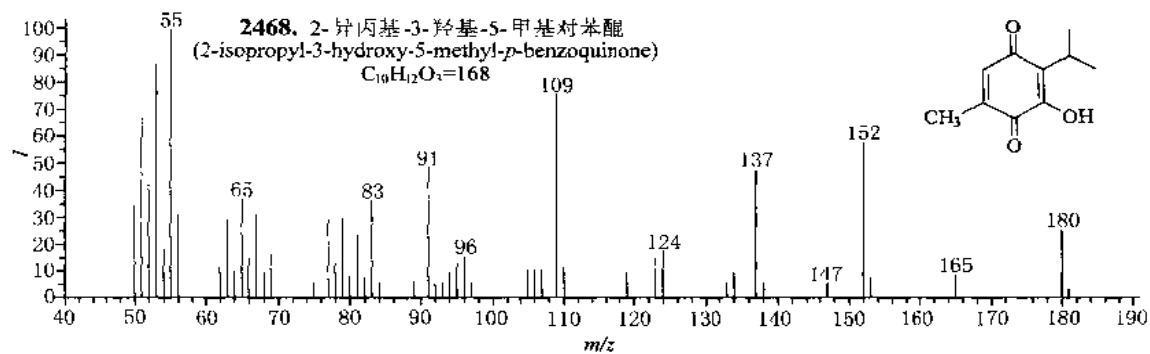
(2) 甲基和羟基混合取代者 (2466, 2467) 裂解基本同上。





### 三、异丙基对苯醌类

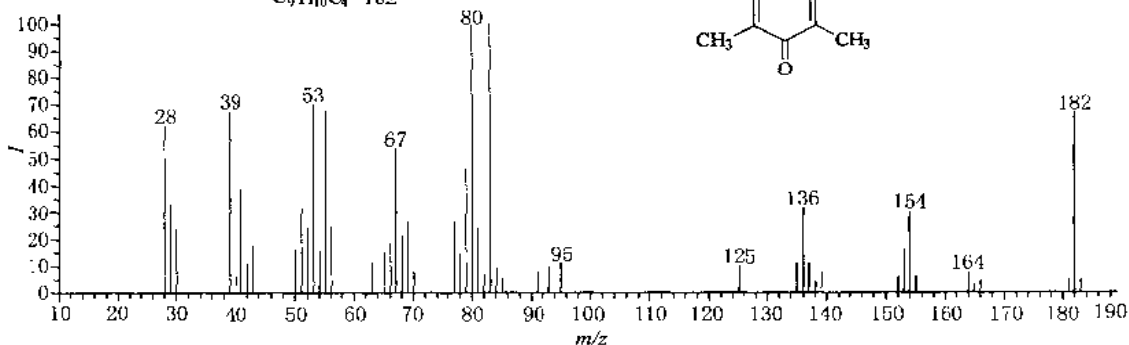
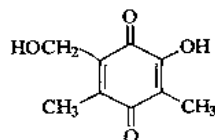
这类化合物 (2468, 2469) 易失甲基。



### 四、羟甲基对苯醌类

这类化合物 (2470) 能失水和失甲醛。

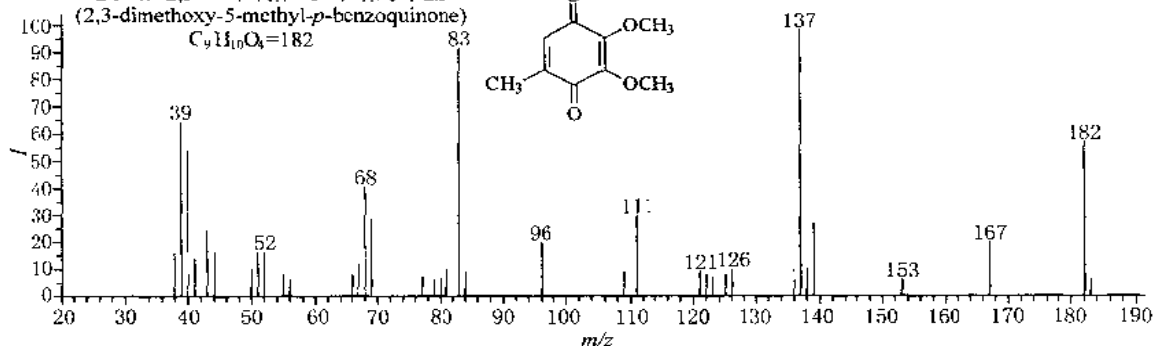
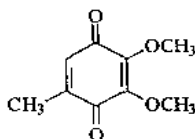
**2470.** 2-羟基-3,5-二甲基-6-羟甲基对苯醌  
(2-hydroxy-3,5-dimethyl-6-hydroxymethyl-*p*-benzoquinone)  
 $C_9H_{10}O_4=182$



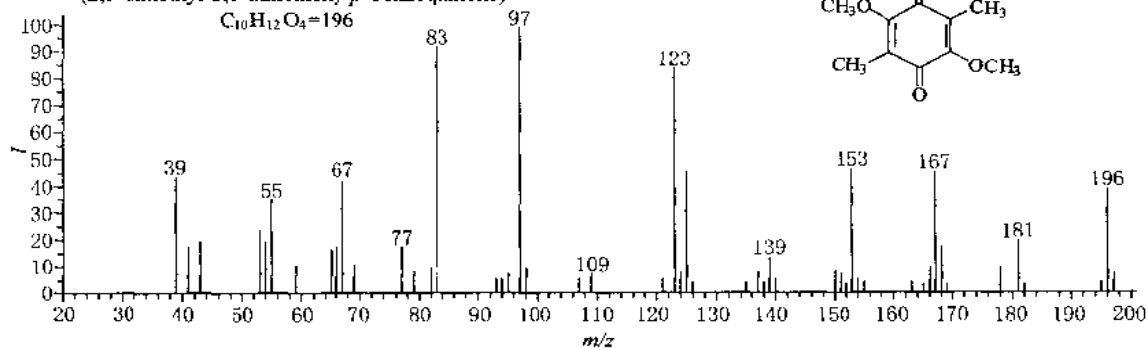
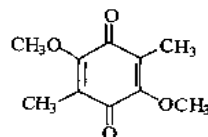
### 五、甲氧基对苯醌类

有甲氧基取代者 (2471, 2472) 能失去甲醛。

**2471.** 2,3-二甲氧基-5-甲基对苯醌  
(2,3-dimethoxy-5-methyl-*p*-benzoquinone)  
 $C_9H_{10}O_4=182$



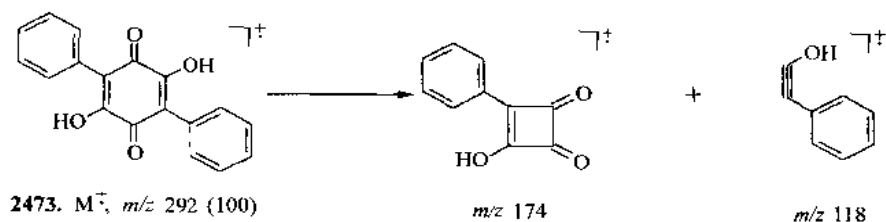
**2472.** 2,5-二甲基-3,6-二甲氧基对苯醌  
(2,5-dimethyl-3,6-dimethoxy-*p*-benzoquinone)  
 $C_{10}H_{12}O_4=196$



### 六、其他苯醌类化合物

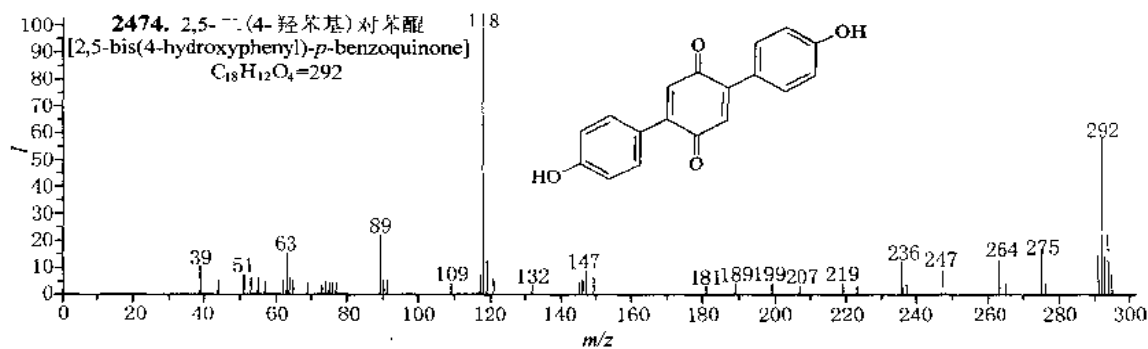
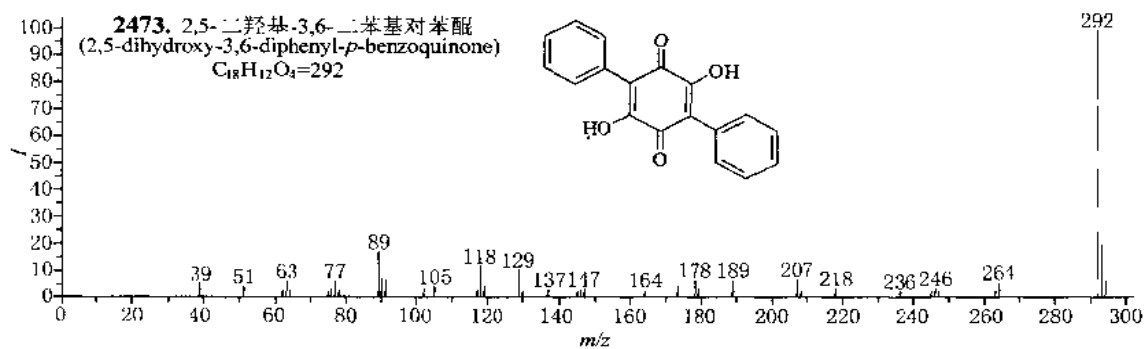
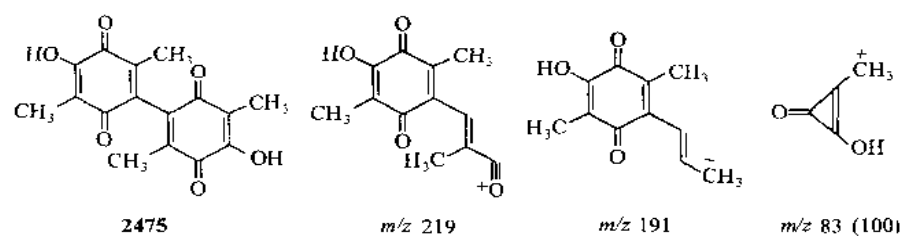
(1) 2,5-二羟基-3,6-二苯基对苯醌 (2473) 除了能连续失去一氧化碳外, 尚可失去取代乙炔的一对互补离子  $m/z$  174 ( $M-118$ ) 和 118 ( $M-174$ );



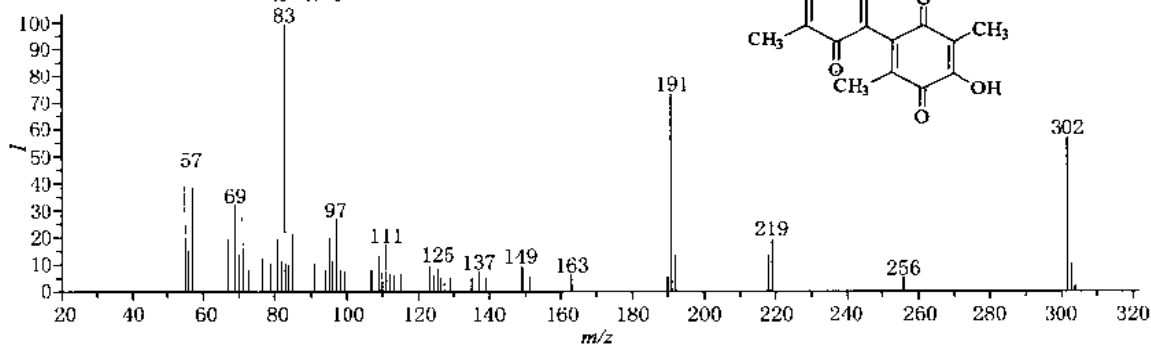


(2) 2,5-二(4-羟基苯基)对苯醌(2474)只出现了  $m/z$  118, 且为基峰, 这是对羟基苯基乙炔离子。

(3) 5, 5'-双(2-羟基-3, 6-二甲基)对苯醌(2475)主要有三个碎片离子, 即  $m/z$  219、191 和  $m/z$  83 (100)



**2475.** 5,5'-双(2-羟基-3,6-二甲基)对苯醌  
[5,5'-bis(2-hydroxy-3,6-dimethyl)-*p*-benzoquinone]  
 $C_{16}H_{14}O_6=302$



## 第二节 其他醌类

### 一、萘醌类

萘醌类裂解方式与苯醌类的大致相同，也有三种，即失去一氧化碳；失去乙炔和交叉裂解失去环丙烯酮  $\text{O} \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array}$ 。

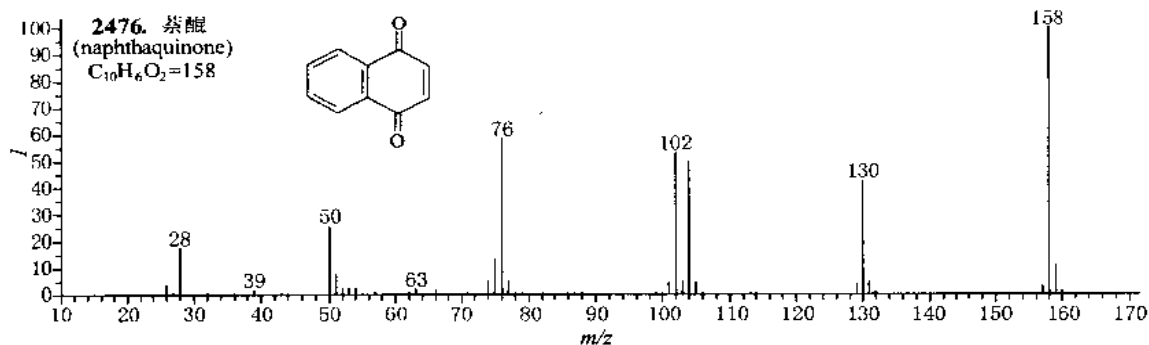
(1) 萘醌 (2476) 有两条裂解途径，即  $\text{M}-\text{CO}-\text{CO}-\text{C}_2\text{H}_2-\text{C}_2\text{H}_2$  和  $\text{M}-\text{O} \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} -\text{C}_2\text{H}_2-\text{CO}-\text{C}_2\text{H}_2$

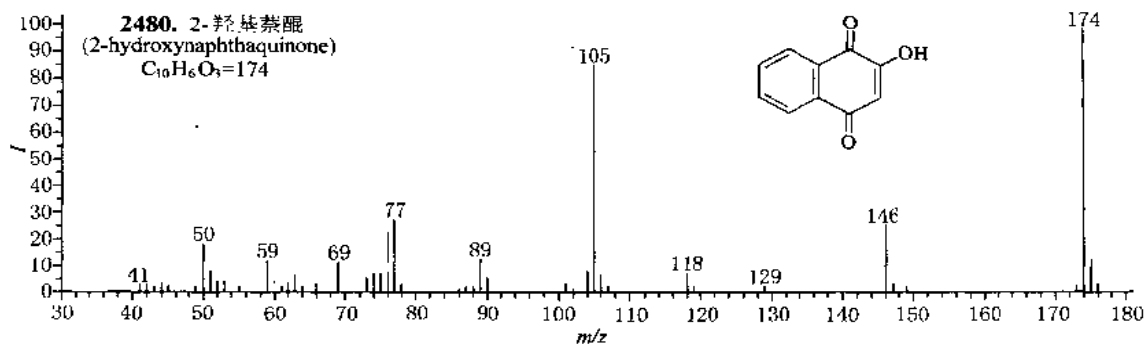
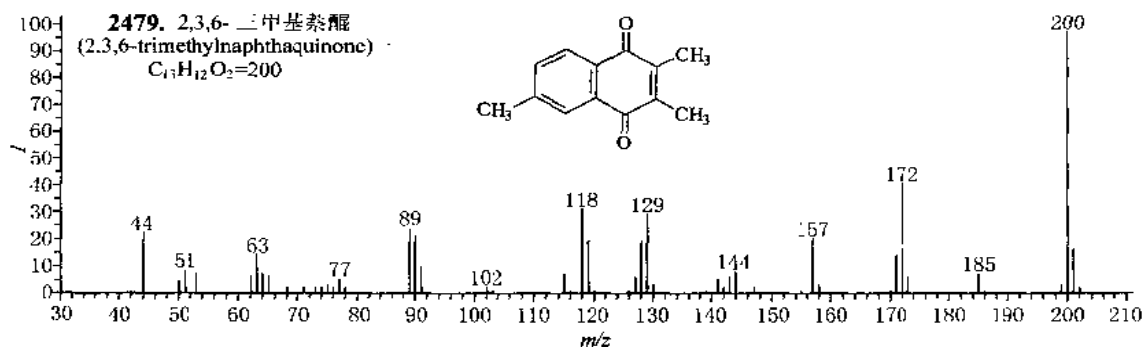
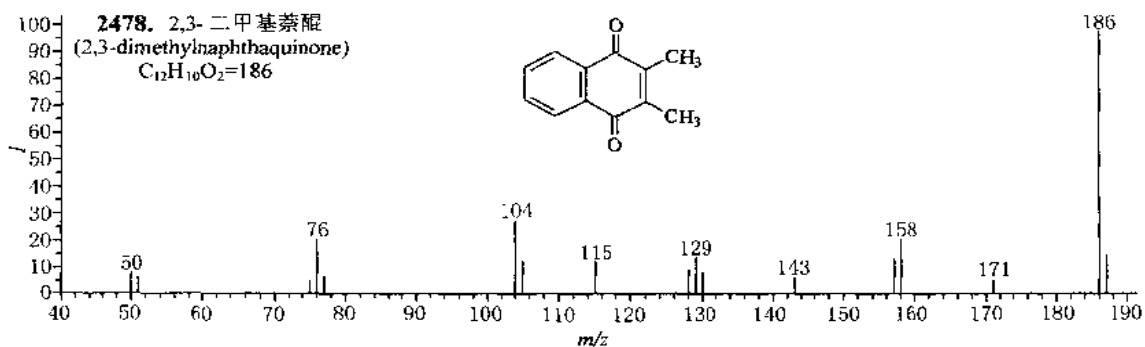
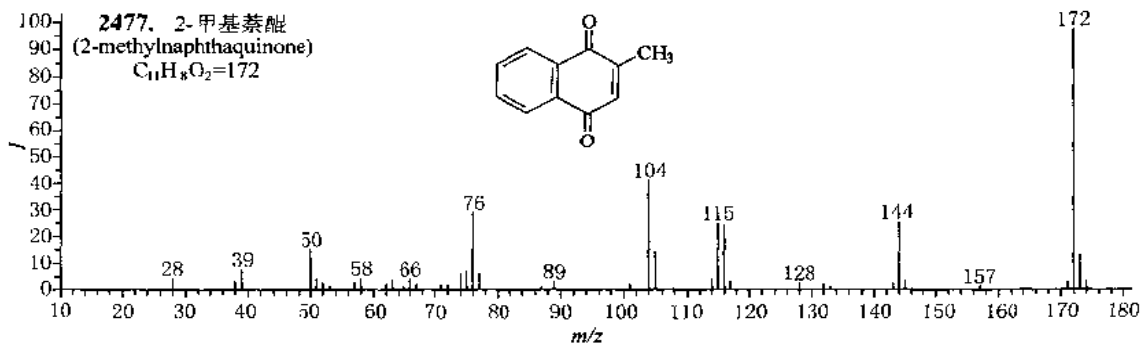
(2) 甲基萘醌类 (2477~2479) 的裂解方式同萘醌的，失环丙烯酮要加进甲基，即失  $\text{O} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \diagup \\ \diagdown \end{array}$  或  $\text{O} \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$ 。另外增加了各种离子再失一氢原子的离子和  $\text{M}-\text{CH}_3$  离子。

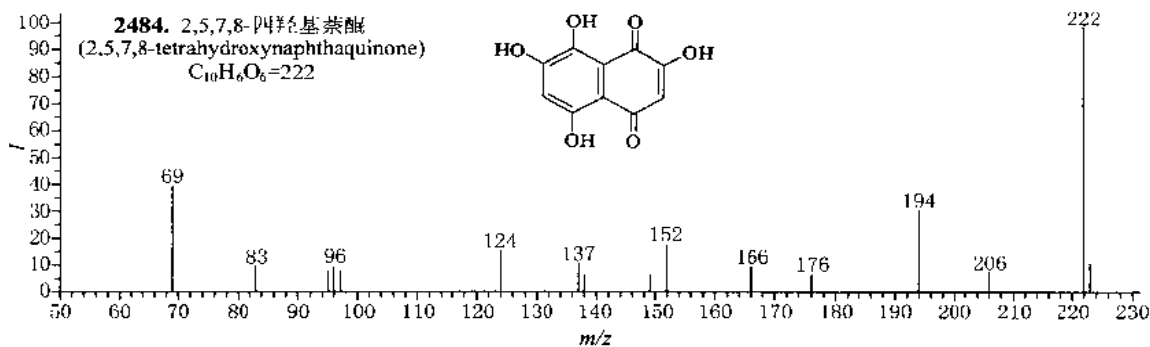
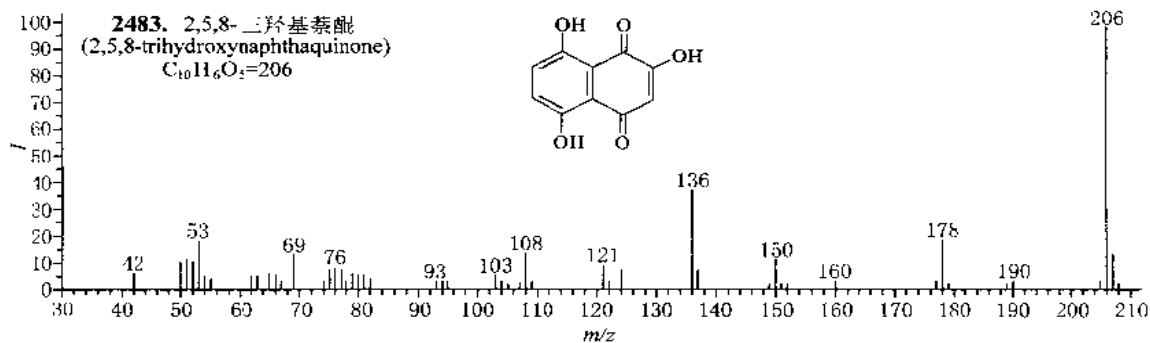
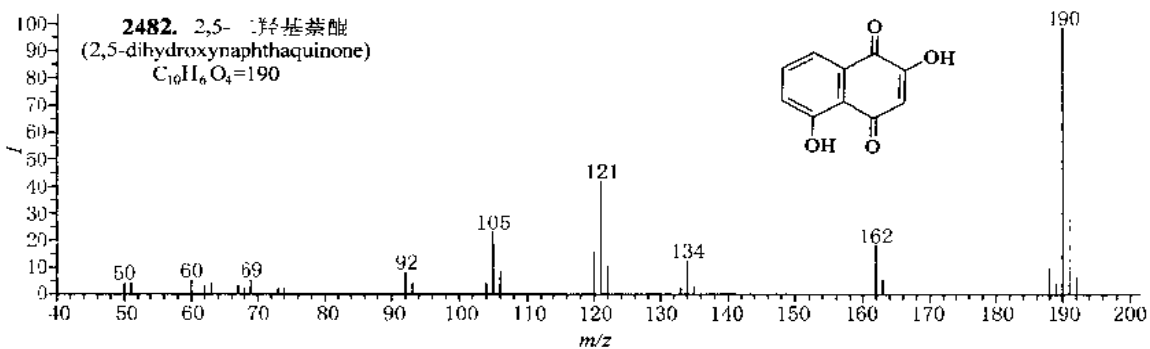
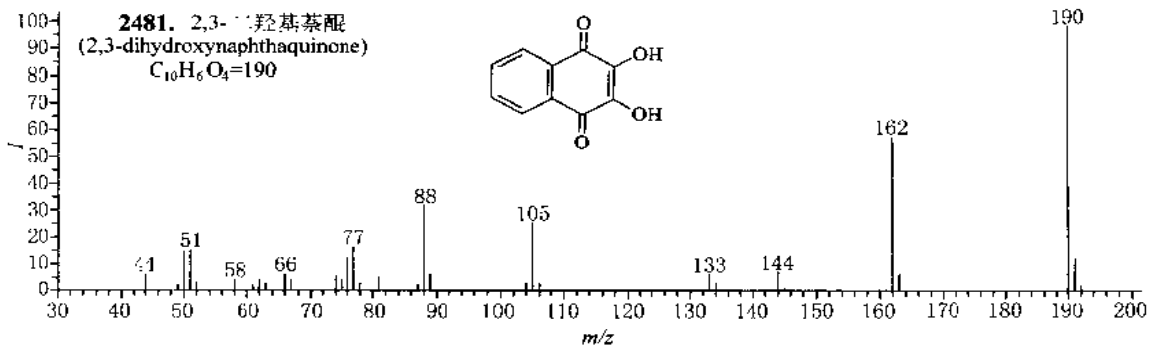
(3)  $\text{C}_2$  或  $\text{C}_3$  有羟基取代的萘醌类 (2480~2484)，失乙炔和交叉裂解减弱，而增加了失 69u 和 85u 的离子，失去的 69u 是  $\text{O} \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array}$ ，失去的 85u 是  $\text{O} \begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \\ \text{OH} \end{array}$ 。苯环上有羟基取代的萘醌 (2482~2487) 与萘醌的裂解相似。

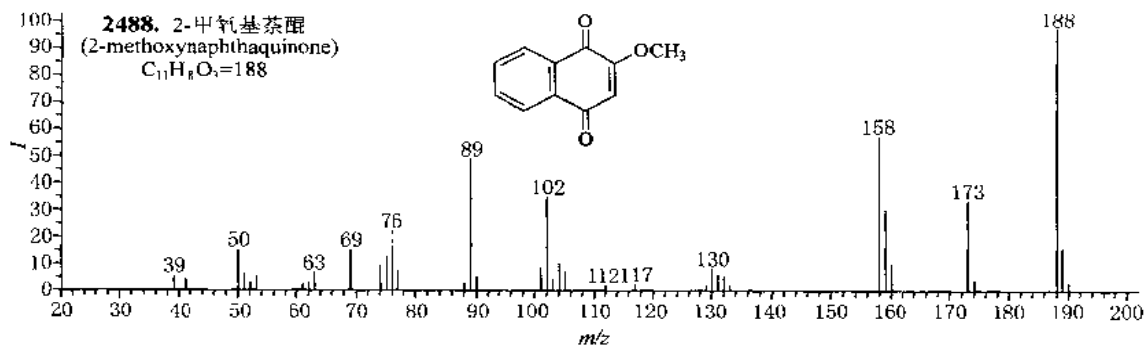
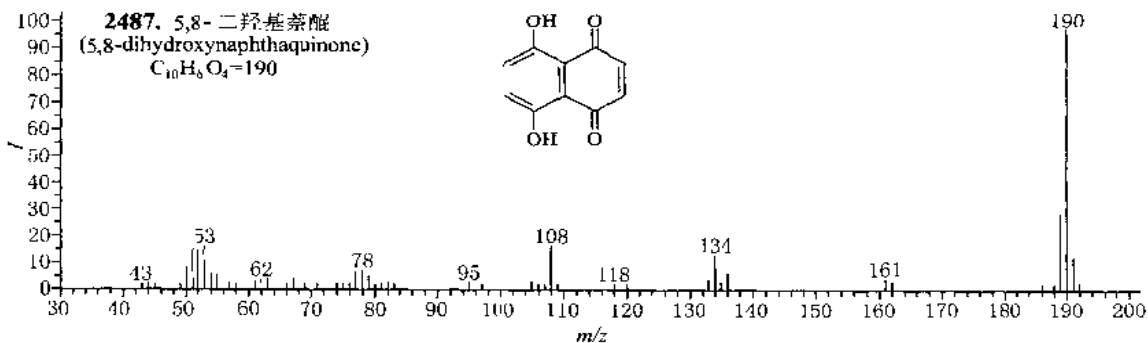
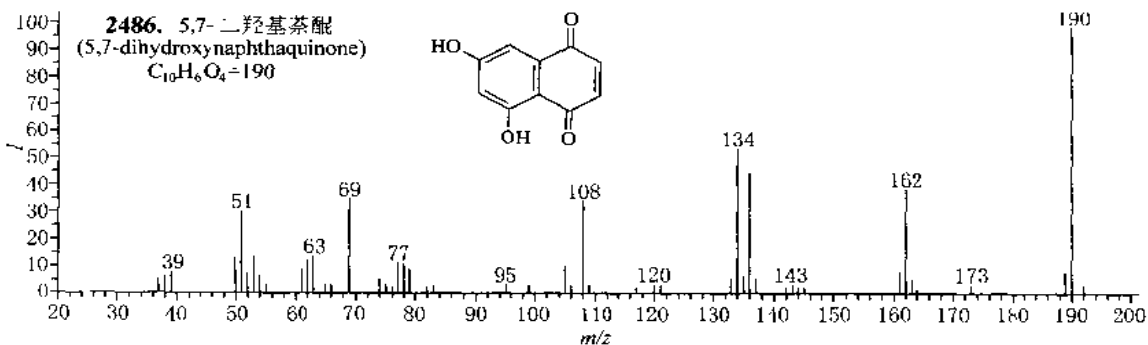
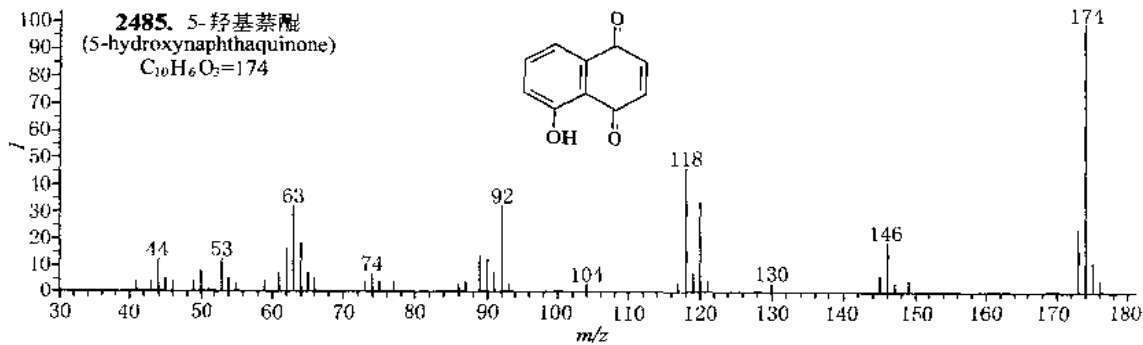
(4) 甲氧基取代者 (2488~2494) 增加了失去甲醛的离子，其他裂解同前述。

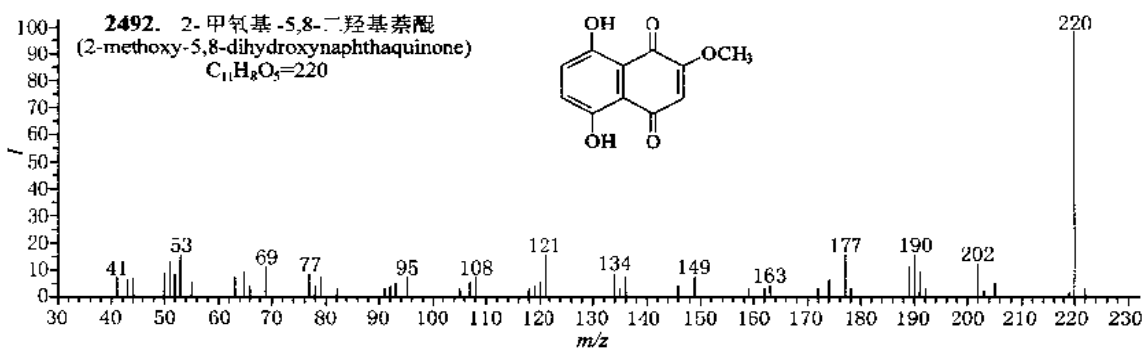
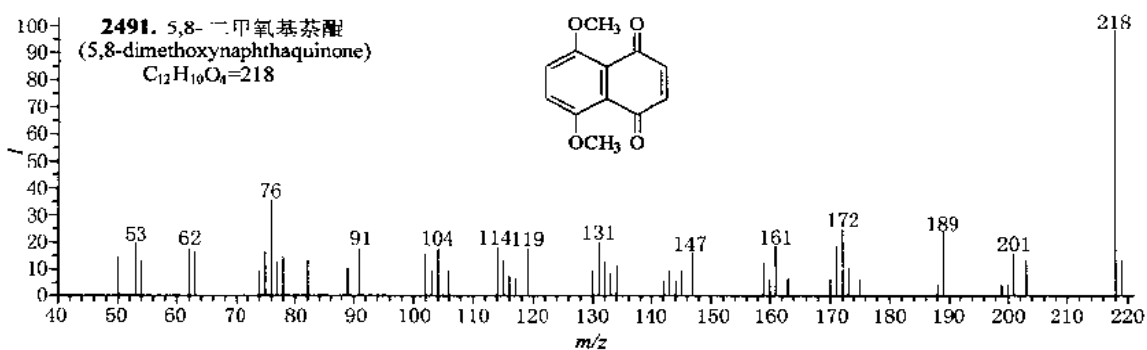
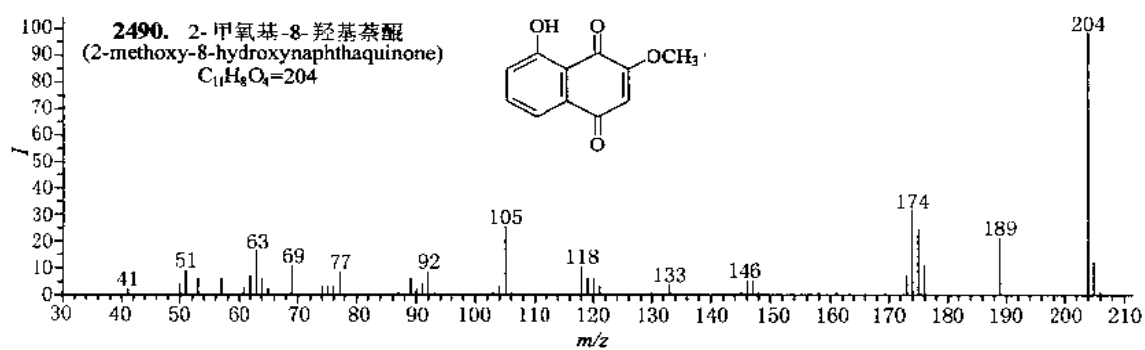
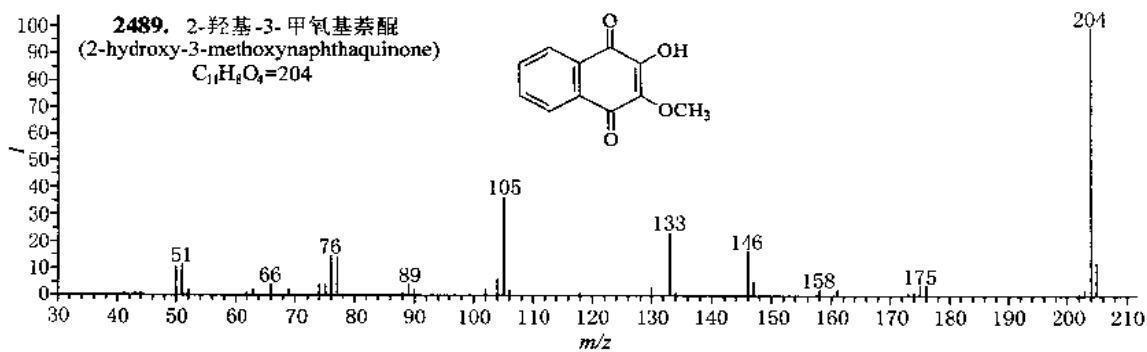
(5) 2-乙酰基萘醌 (2498) 增加了失去乙烯酮的离子。

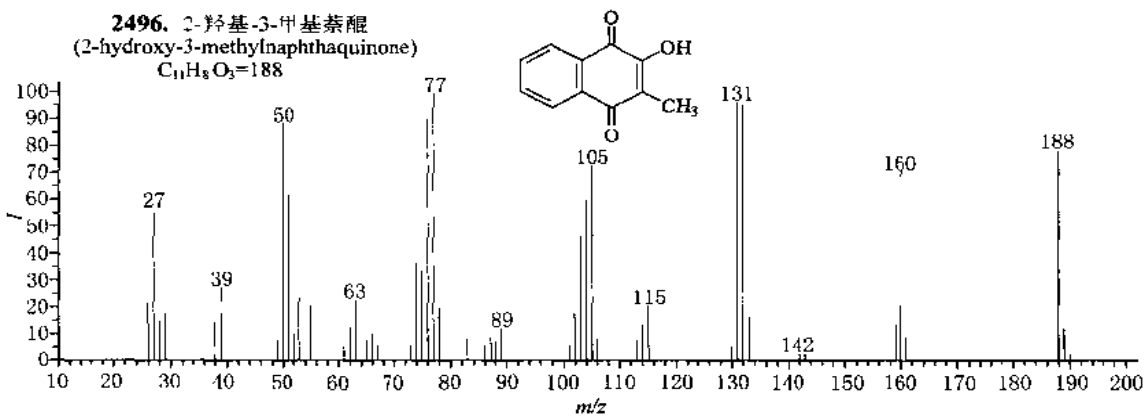
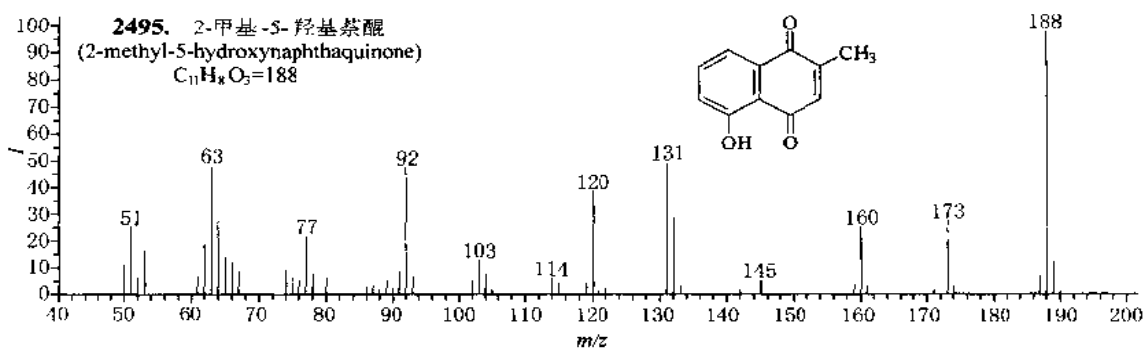
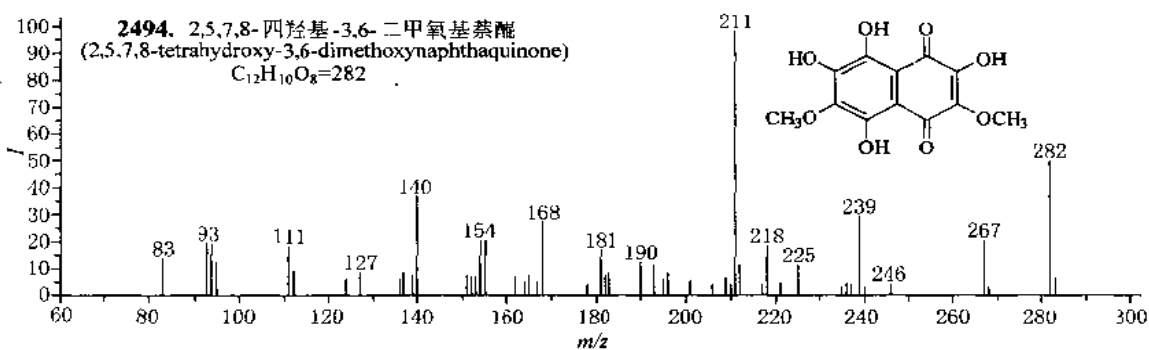
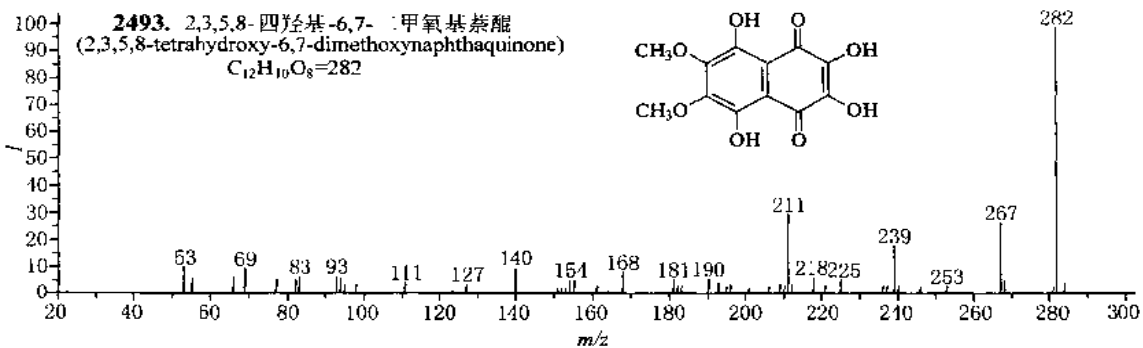


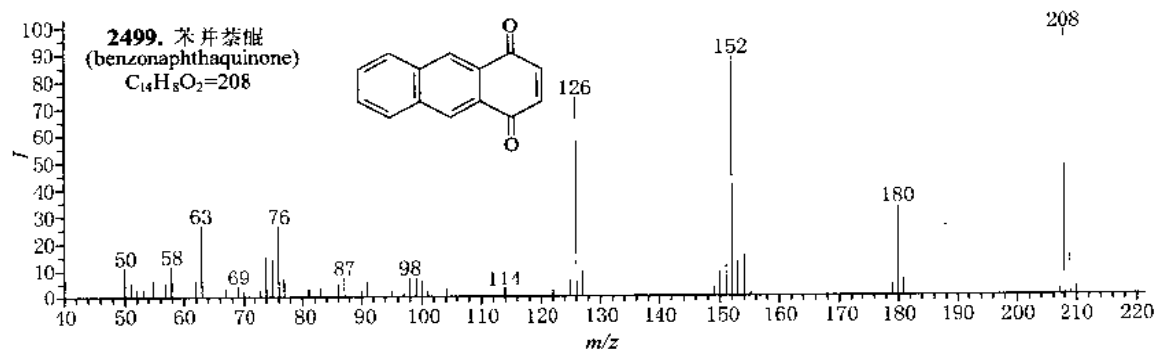
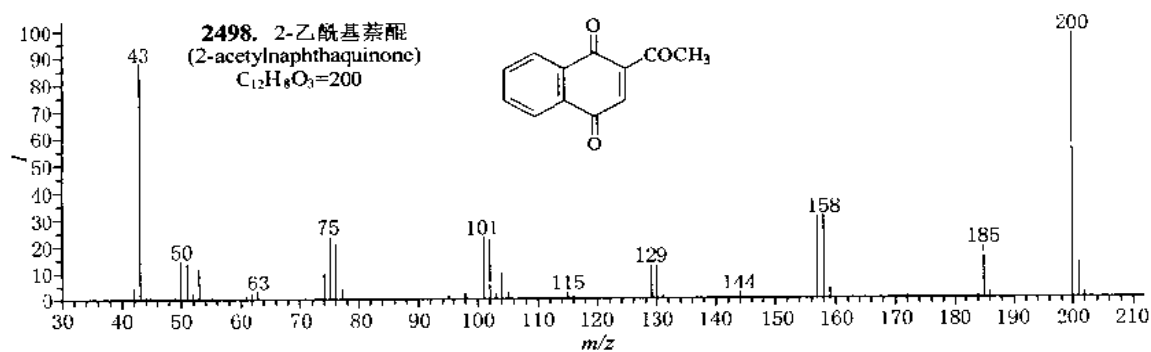
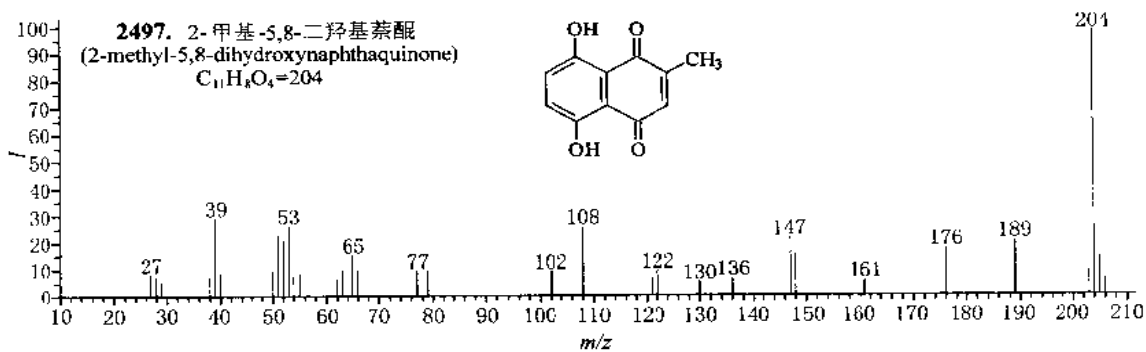












## 二、萘醌类

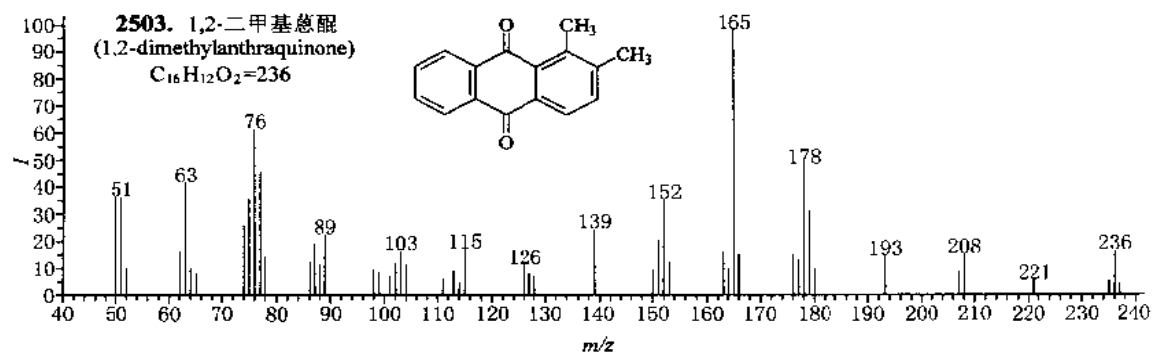
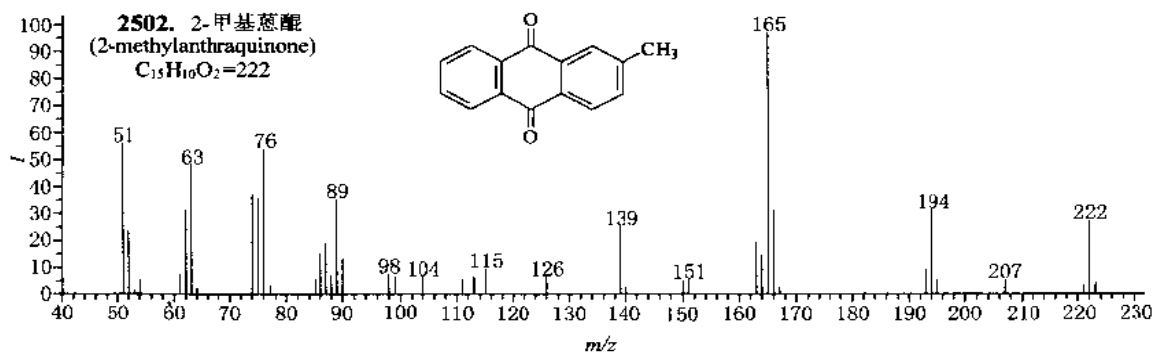
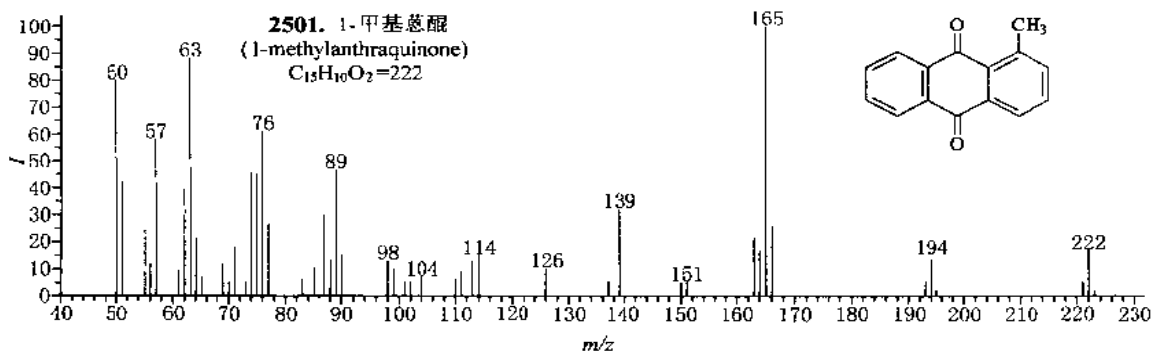
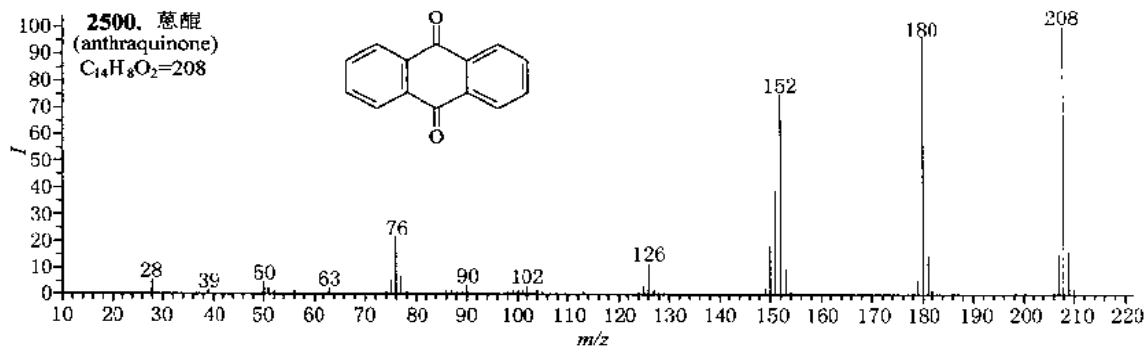
(1) 萘醌 (2500) 本身的裂解途径是  $M-CO-CO-C_2H_2$ , 这些离子都有双电荷离子, 即  $m/z$  104、90、76 和  $m/z$  63。

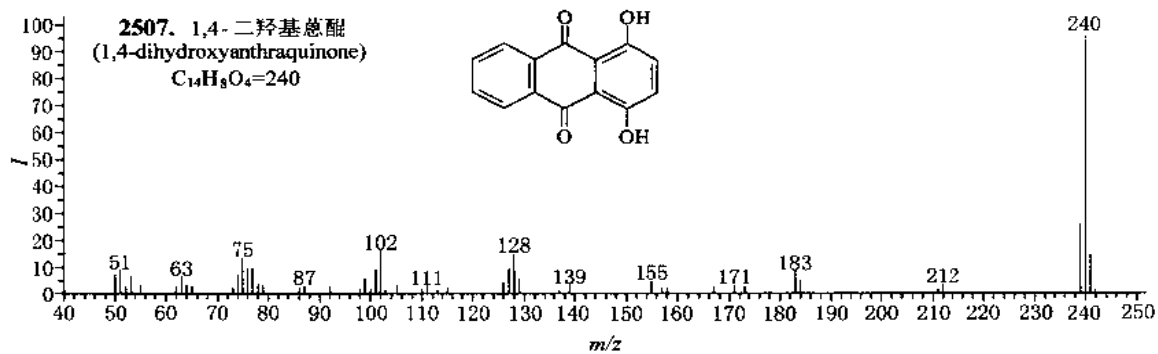
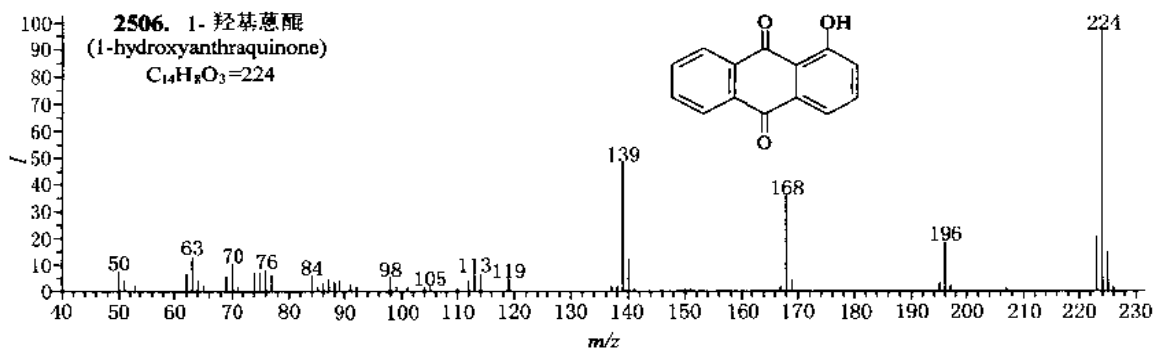
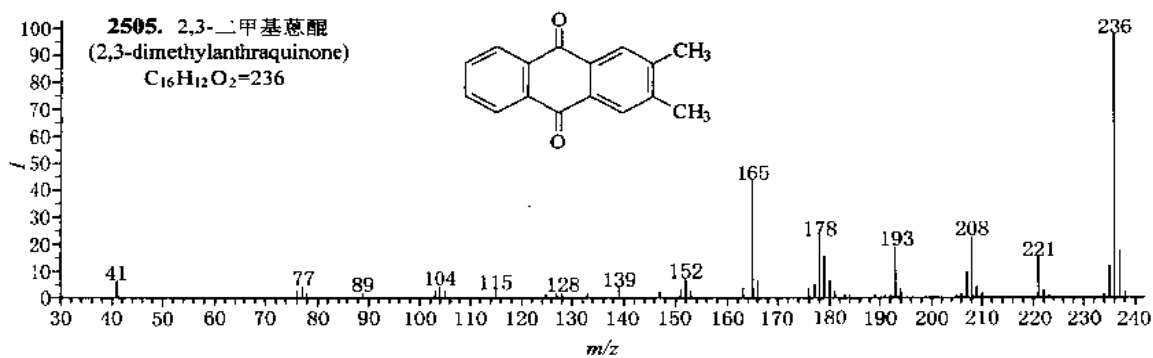
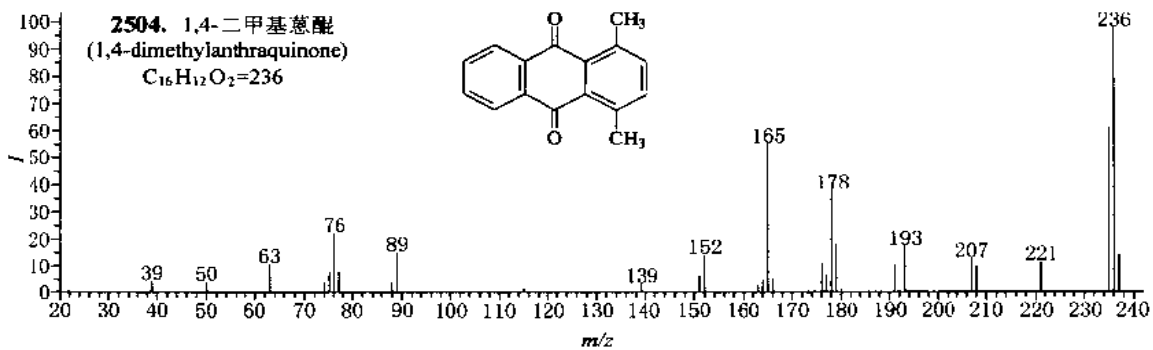
(2) 甲基萘醌类 (2501~2505) 除上述裂解外, 又多了一些失氢的离子, 失氢是苊基裂解。

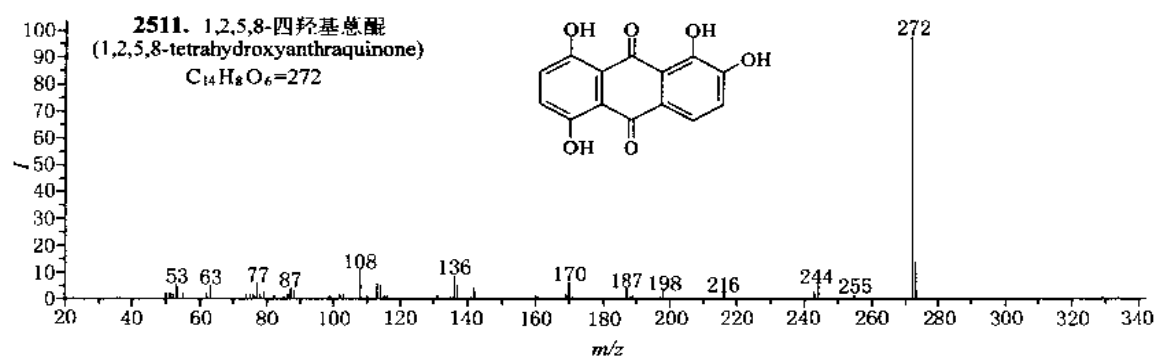
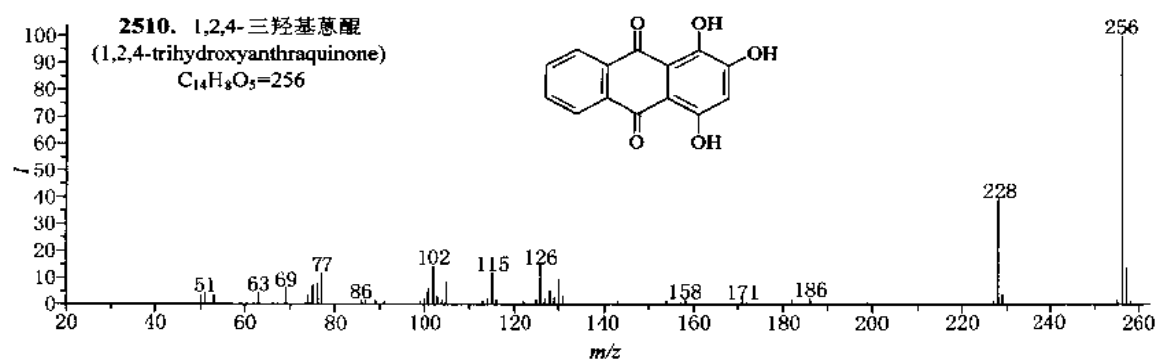
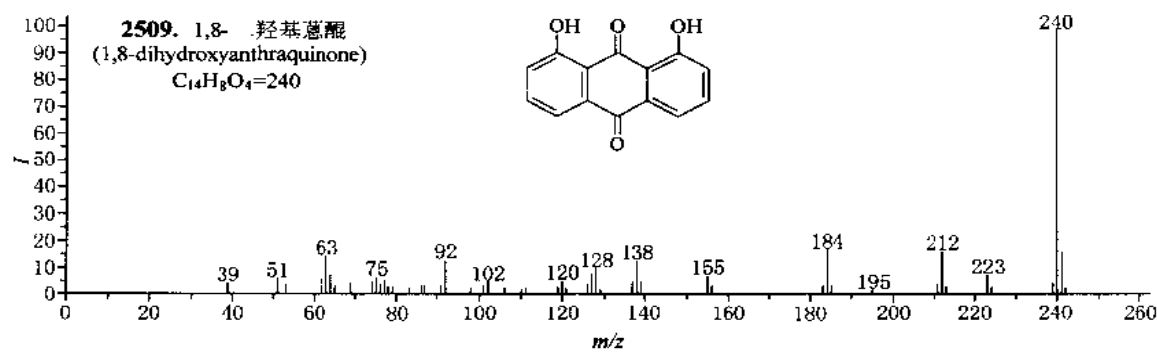
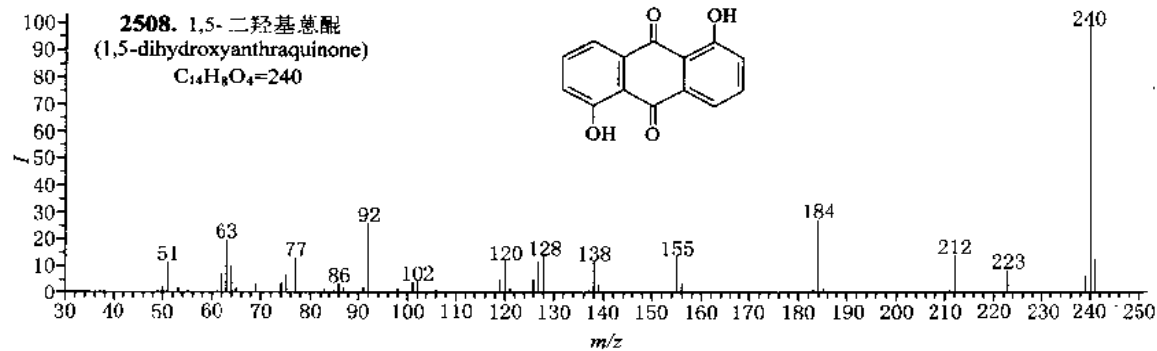
(3) 羟基取代的萘醌类 (2506~2512) 也是连续失去一氧化碳。

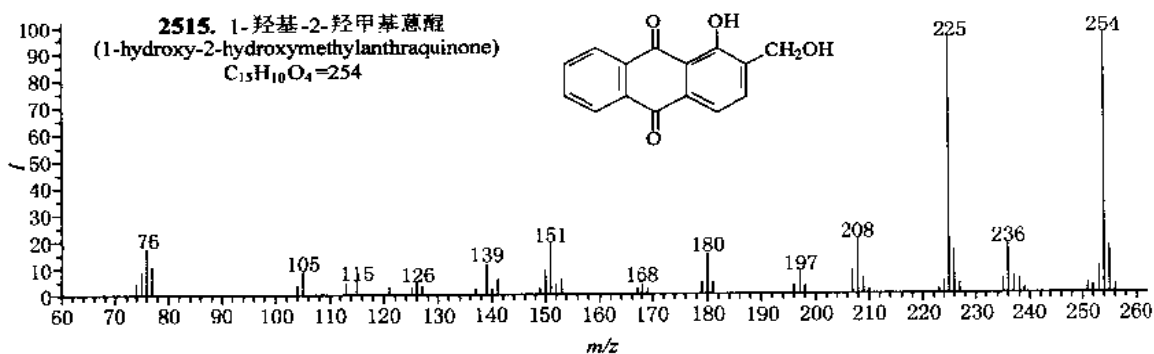
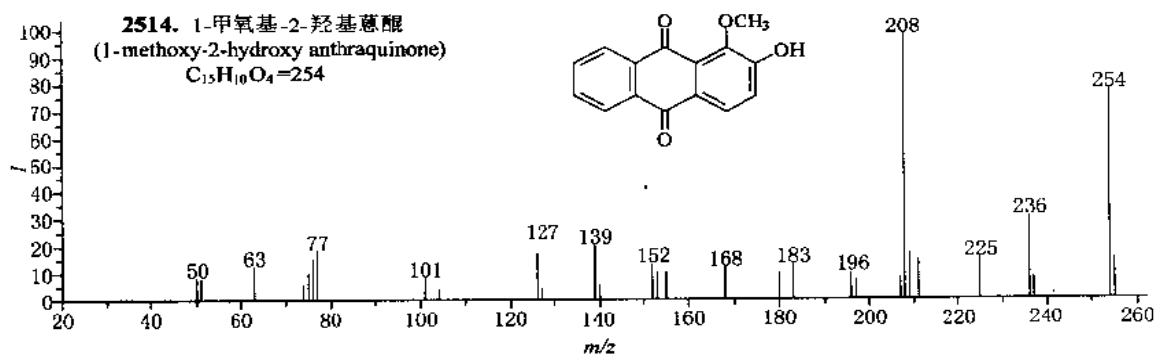
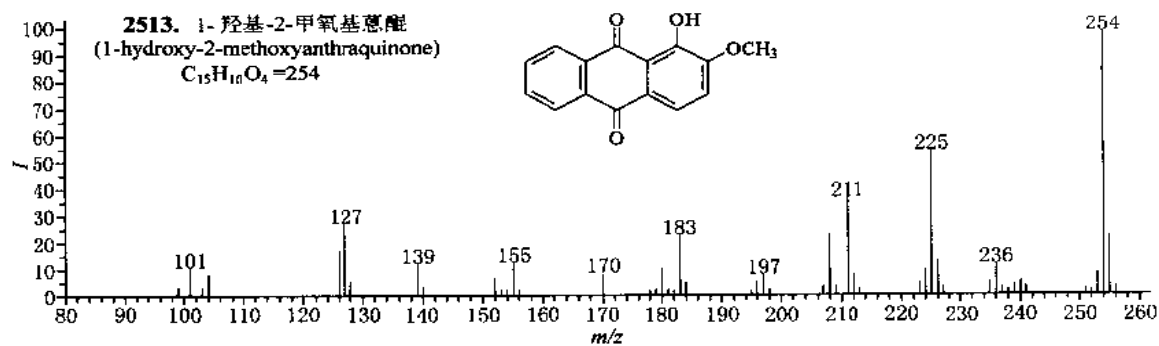
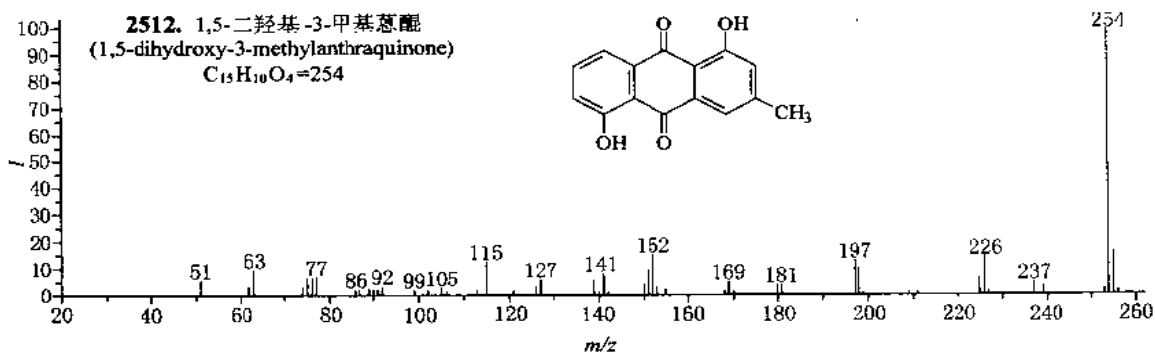
(4) 有1-甲氧基取代的化合物 (2514, 2516, 2517, 2520 和 2521) 多能失水, 然后再失一氧化碳, 其他甲氧基取代者 (2513, 2519) 能够失去甲醛。

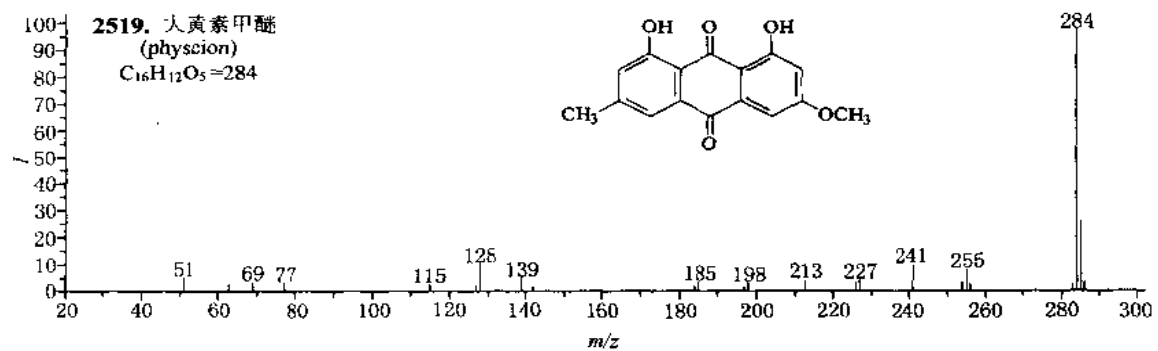
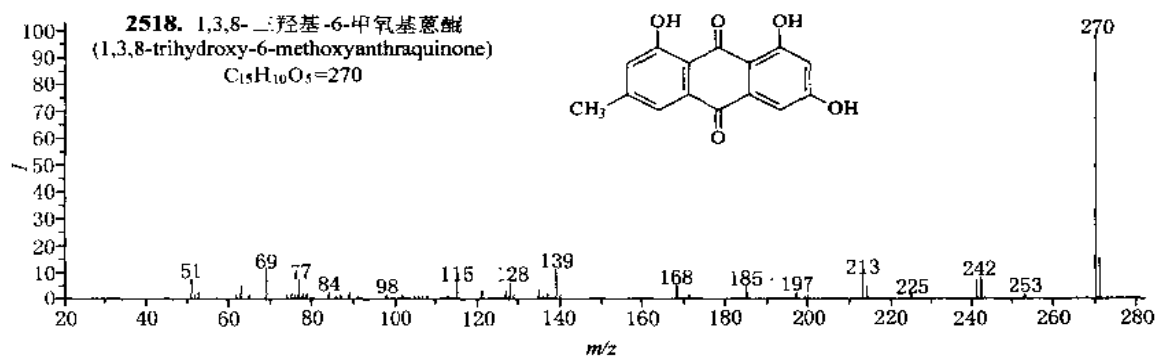
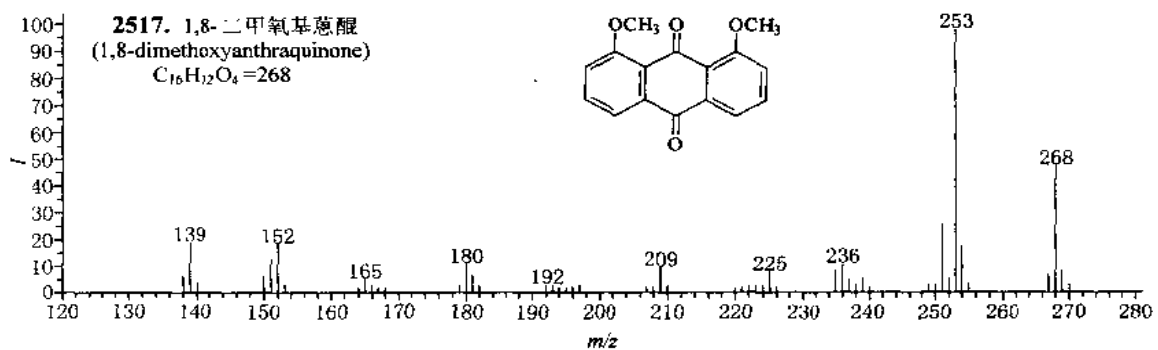
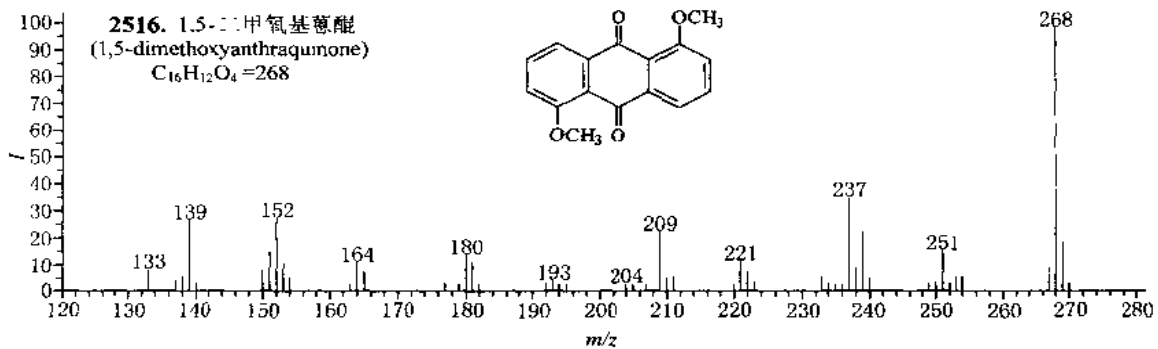


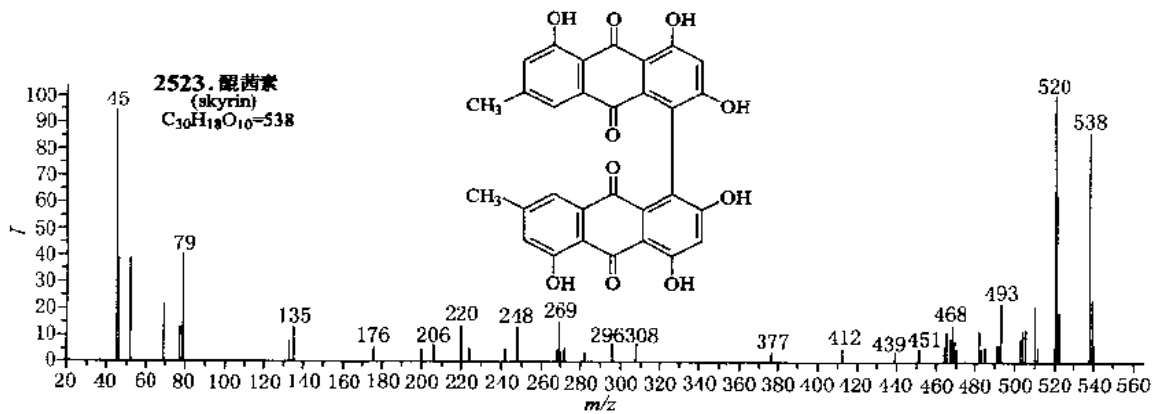
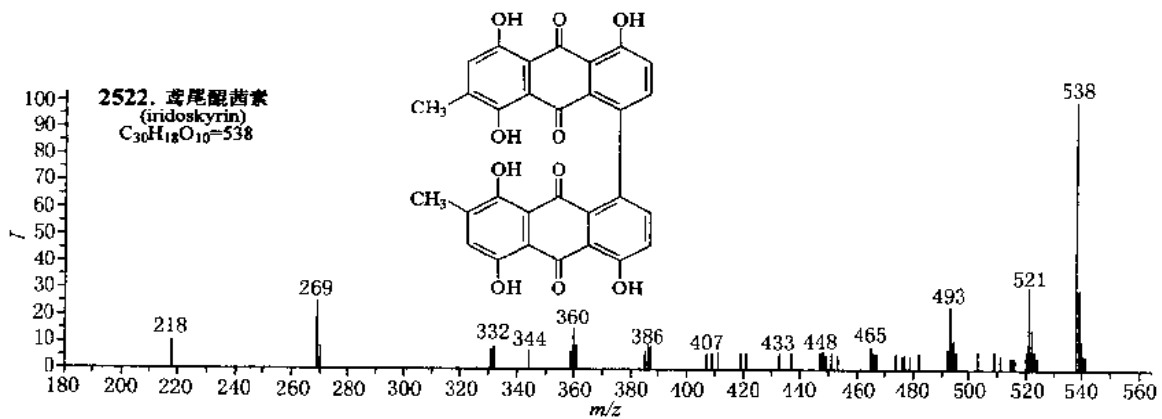
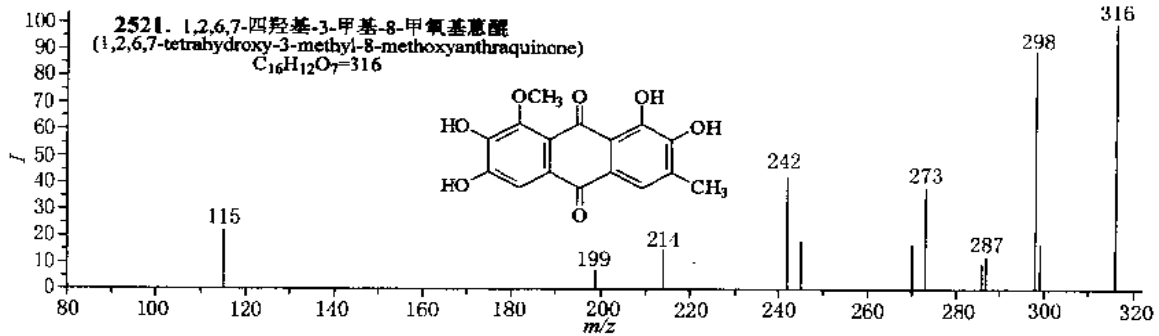
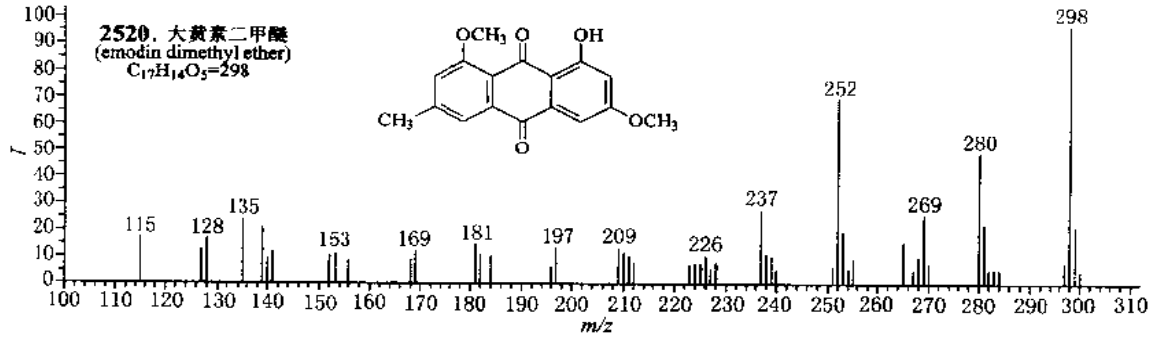






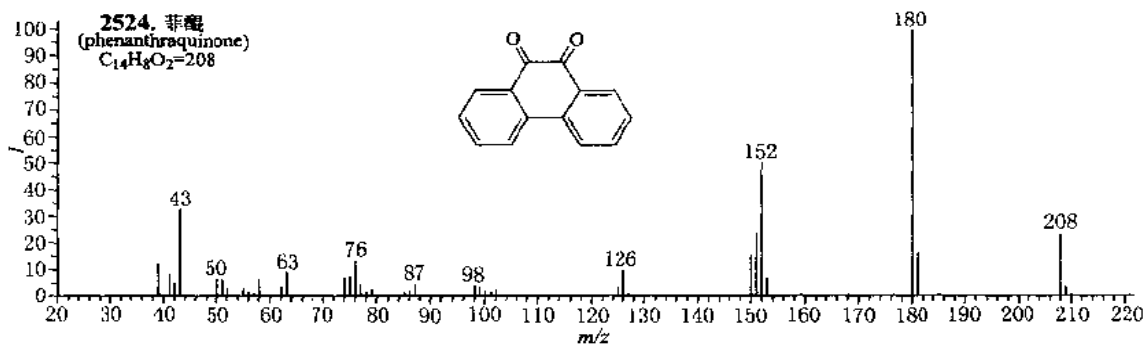






### 三、菲醌类

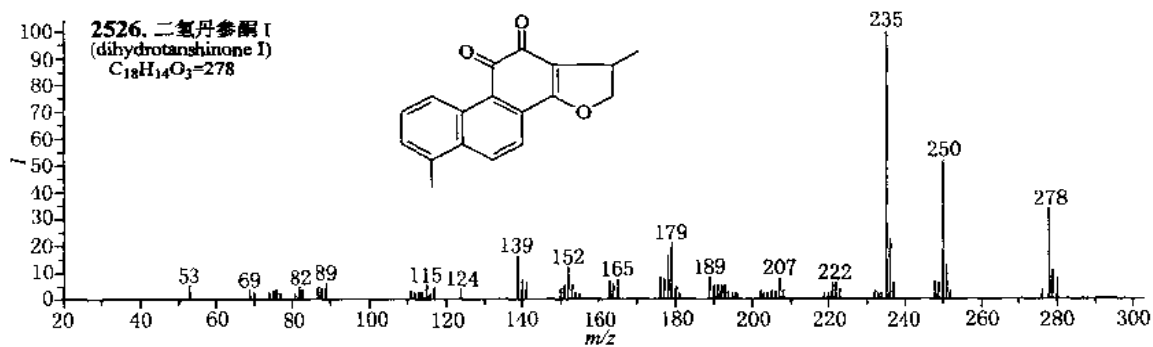
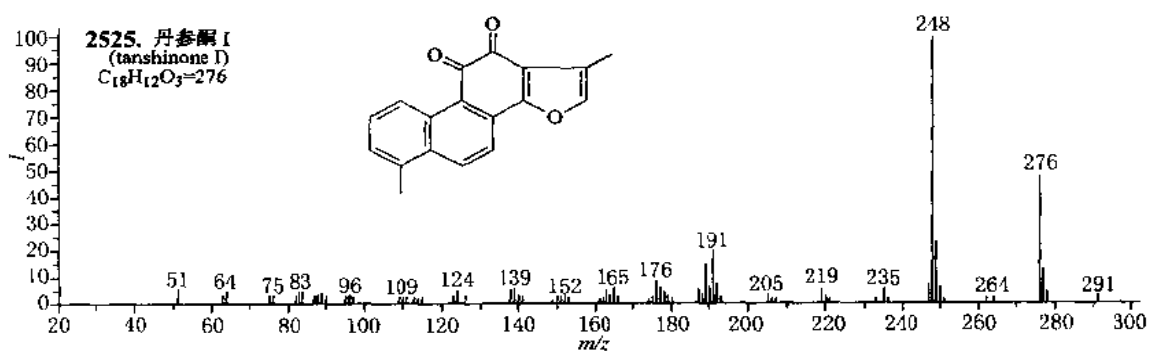
菲醌 (2524) 与蒽醌有相似的裂解, 但分子离子 ( $m/z$  208) 要弱得多



### 四、丹参醌类

(1) 丹参酮 I (2525) 的主要裂解是失去一氧化碳。

(2) 二氢丹参酮 I (2526) 的主要裂解是失去一氧化碳后还能再失甲基。

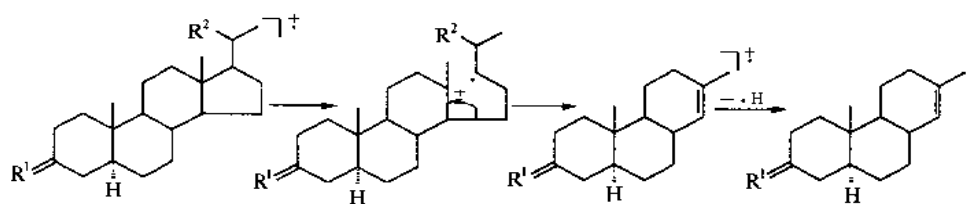


## 第二十章 甾族化合物<sup>[4]</sup>

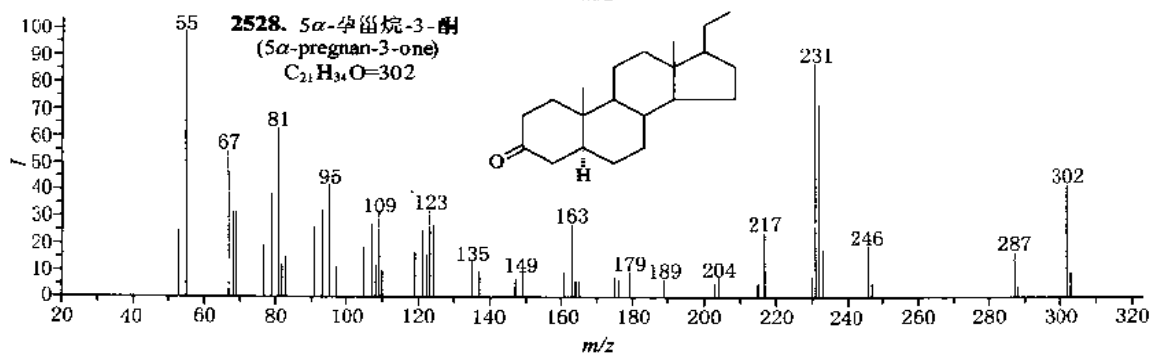
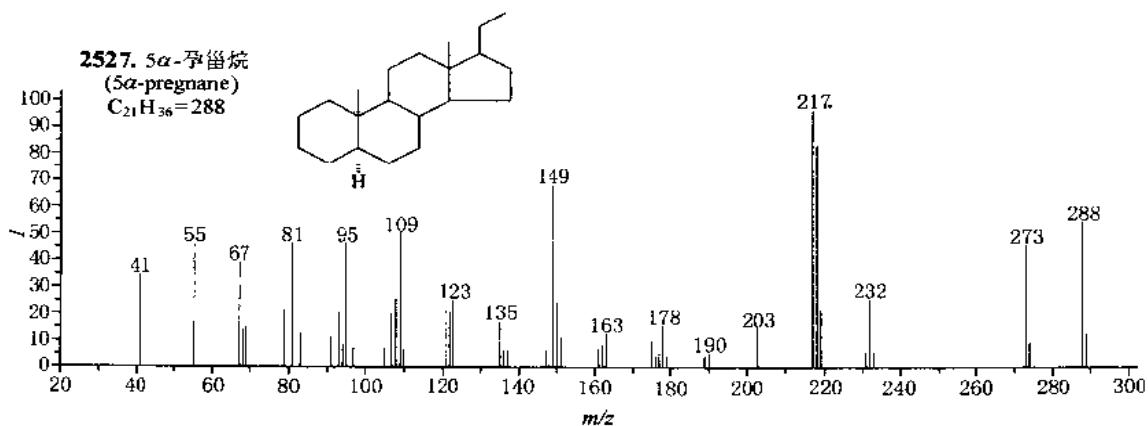
### 第一节 孕甾烷类

#### 一、C<sub>17</sub>为乙基和羟乙基的孕甾烷类

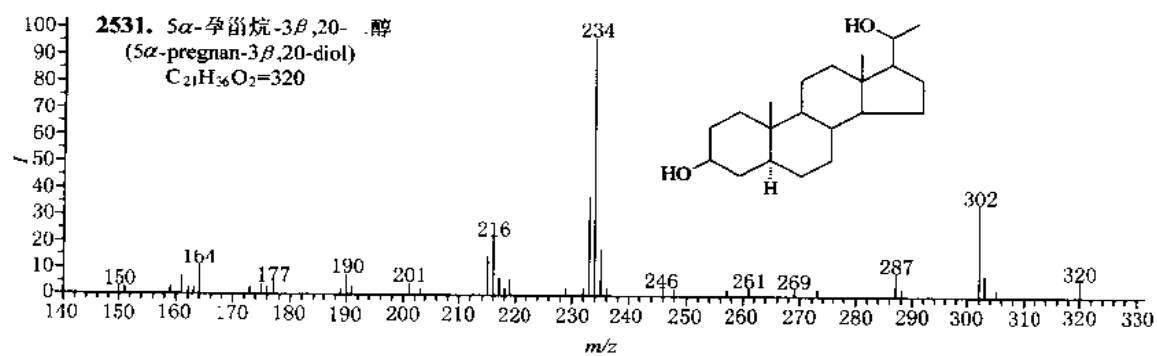
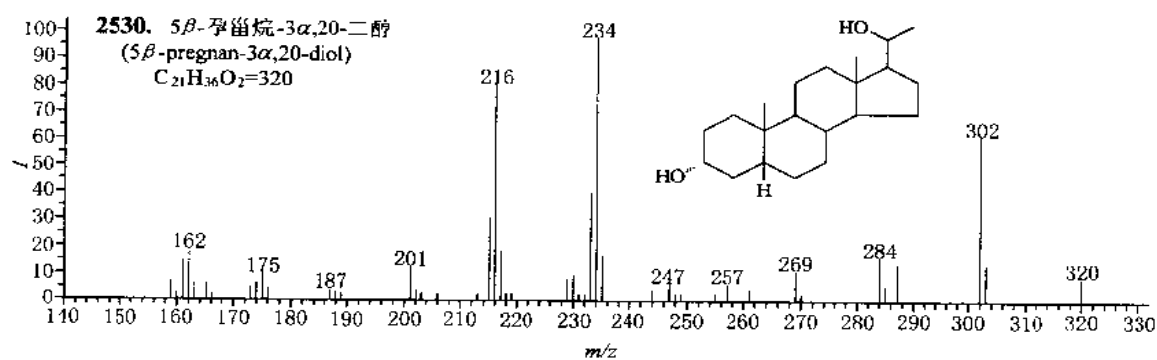
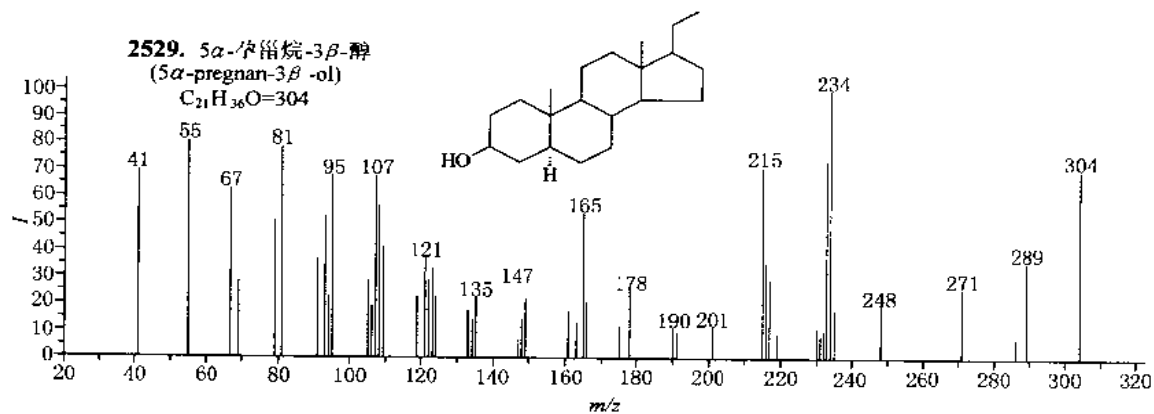
这类化合物 (2527~2531) 有两个特征离子 **a** 和 **b**, 其来源为五元环的裂解, 失去的是侧链 (简作 SC) 和五元环的 3 个碳原子:



2527. M <sup>+</sup> ·, m/z288 (R <sup>1</sup> =H, R <sup>2</sup> =H)	<b>a</b> , m/z218	<b>b</b> , m/z217
2528. M <sup>+</sup> ·, m/z302 (R <sup>1</sup> =O, R <sup>2</sup> =H)	m/z232	m/z231
2529. M <sup>+</sup> ·, m/z304 (R <sup>1</sup> =α-H, β-OH, R <sup>2</sup> =H)	m/z234	m/z233
2530. M <sup>+</sup> ·, m/z320 (R <sup>1</sup> =β-H, α-OH, R <sup>2</sup> =OH)	m/z234	m/z233
2531. M <sup>+</sup> ·, m/z320 (R <sup>1</sup> =α-H, β-OH, R <sup>2</sup> =OH)	m/z234	m/z233

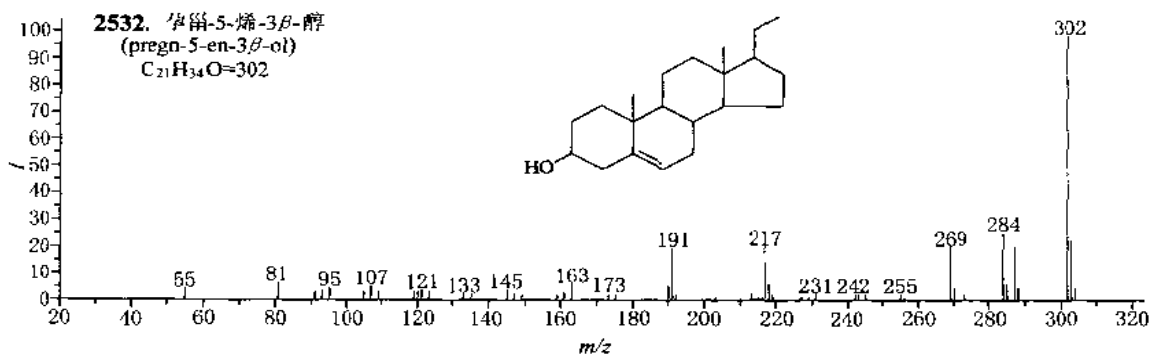






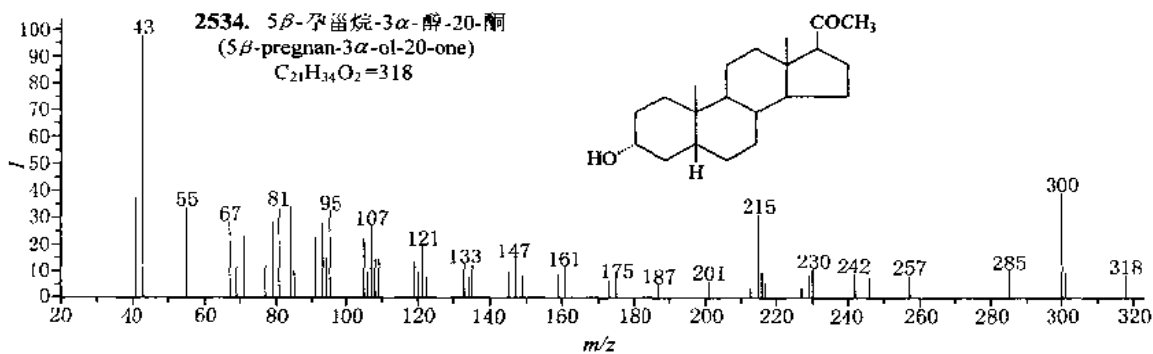
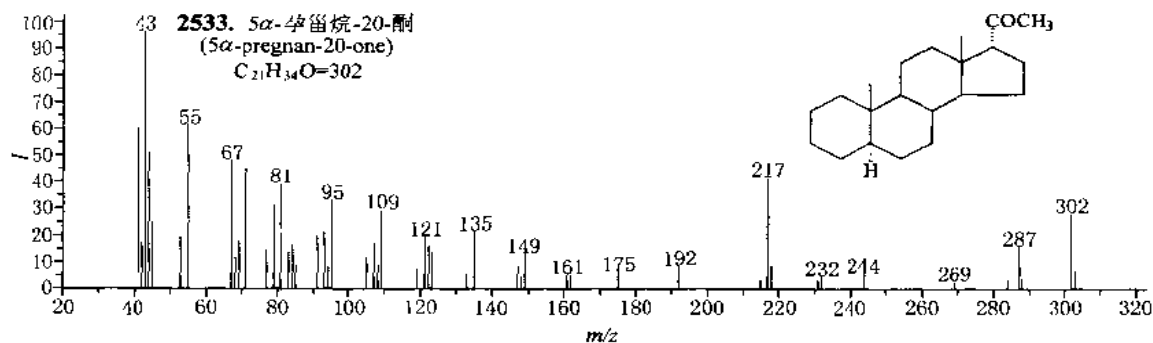
## 二、C<sub>5</sub> 有双键的孕甾烯类

这类化合物 (2532) 没有什么特征裂解, 离子 a 和 b 均不明显, 但出现了 a-CH<sub>3</sub> 离子  $m/z$  217。



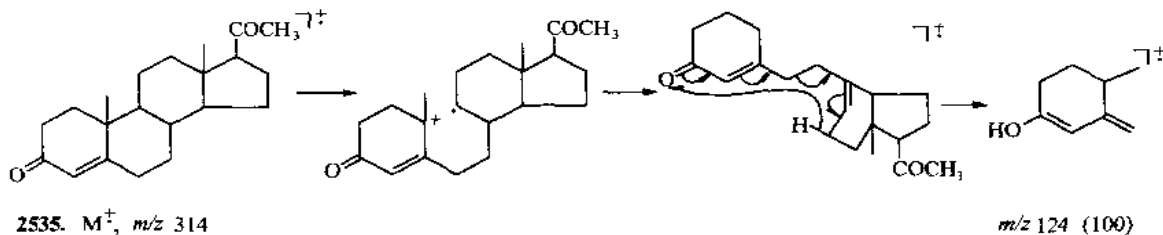
### 三、 $C_{17}$ 乙酰基取代物

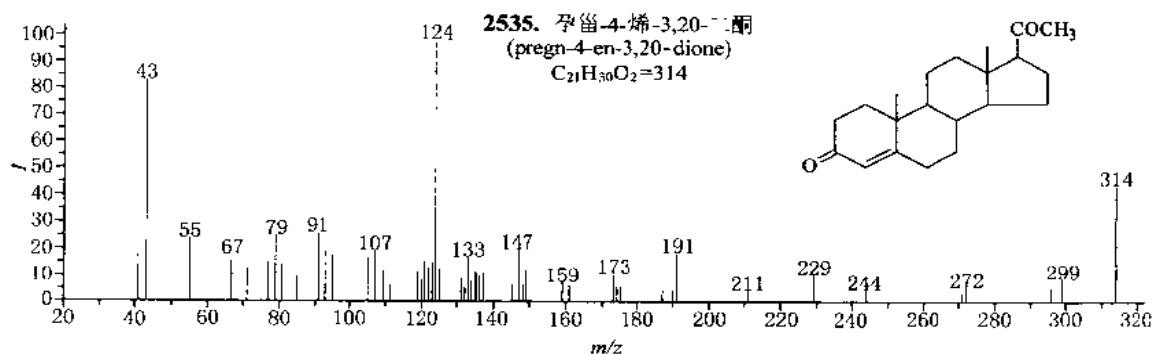
这类化合物 (2533~2534) 的离子  $m/z$  43 是基峰, 其他无特征性裂解。



### 四、4-烯-3-酮孕甾烷类

这类化合物 (2535) 有特征离子  $m/z$  124, 其产生方式如下:



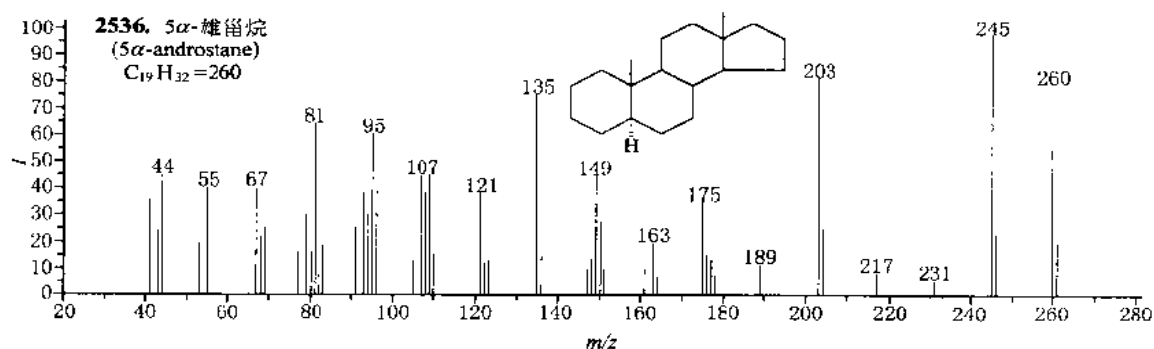
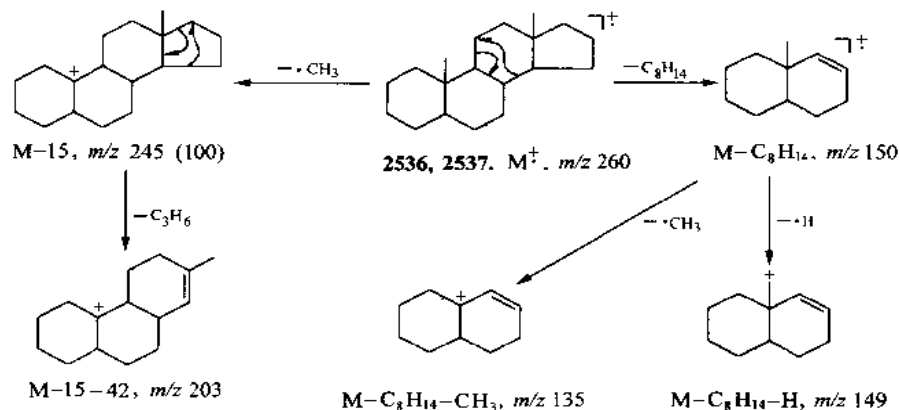


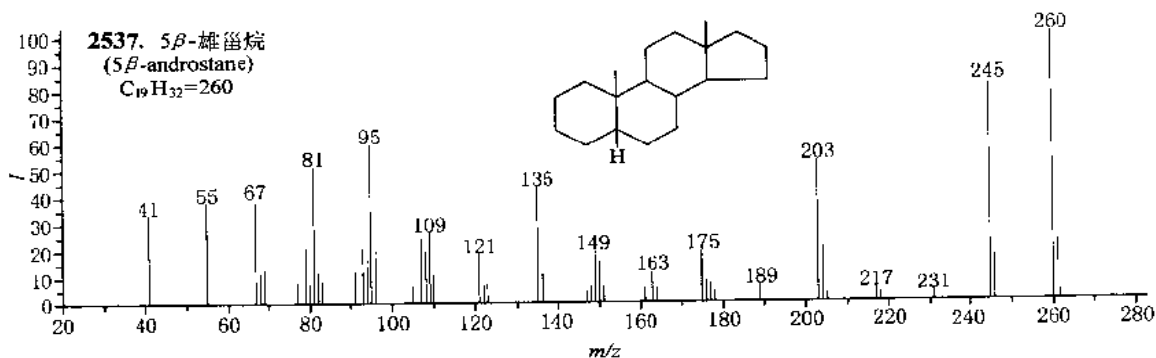
## 第二节 雄甾烷类

雄甾烷类没有什么特征裂解方式，因为它们几乎缺乏定向和非定向裂解中心，有的只是五元D环的张力较大，因此一些离子多由于这个环的裂解而产生的，但由于 $C_{17}$ 缺乏乙基，所以张力不及孕甾烷类的大。

### 一、雄甾烷类

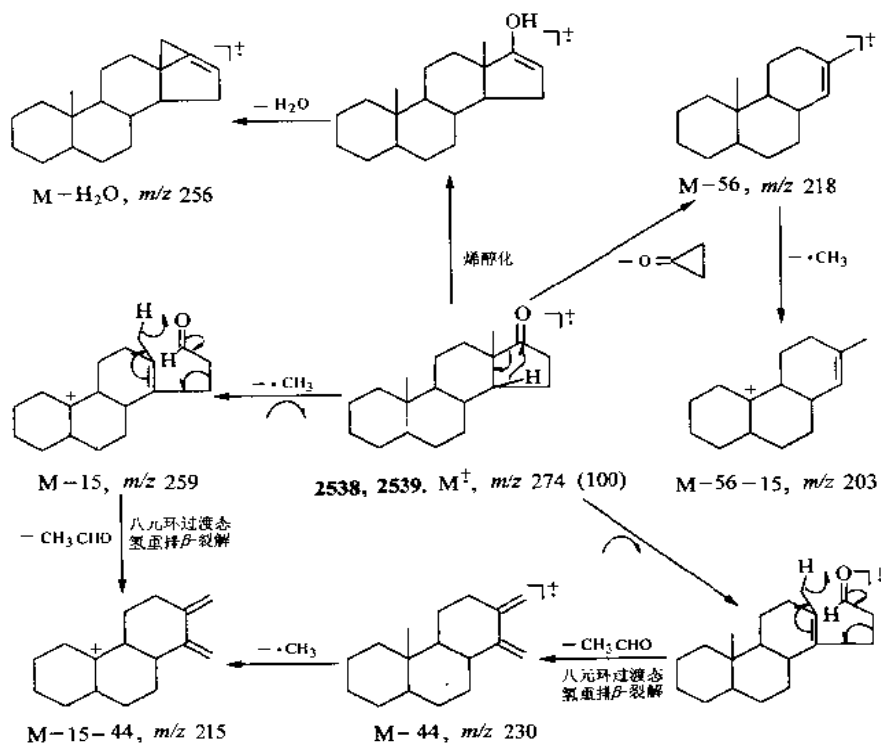
$5\alpha$ -和 $5\beta$ -雄甾烷 (2536, 2537) 的主要裂解是  $M-CH_3$ ,  $M-CH_3-C_3H_6$ ,  $M-C_8H_{14}$ ,  $M-C_8H_{14}-H$  和  $M-C_8H_{14}-CH_3$ , 这些离子的产生过程可能如下:

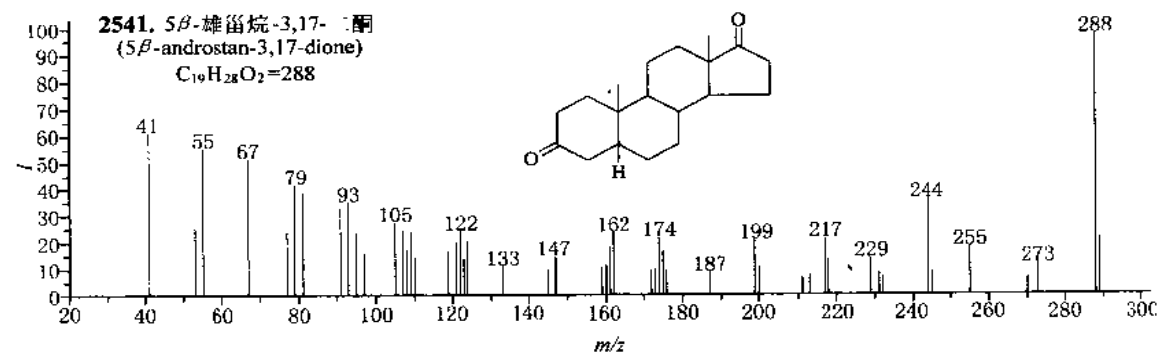
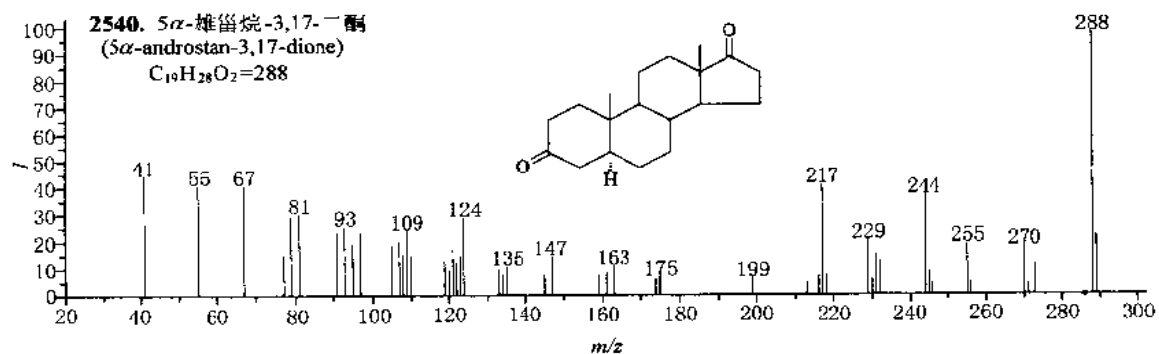
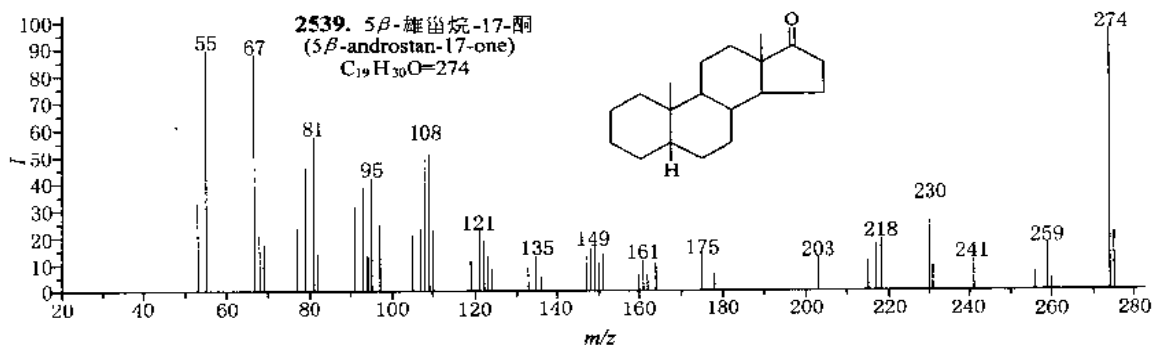
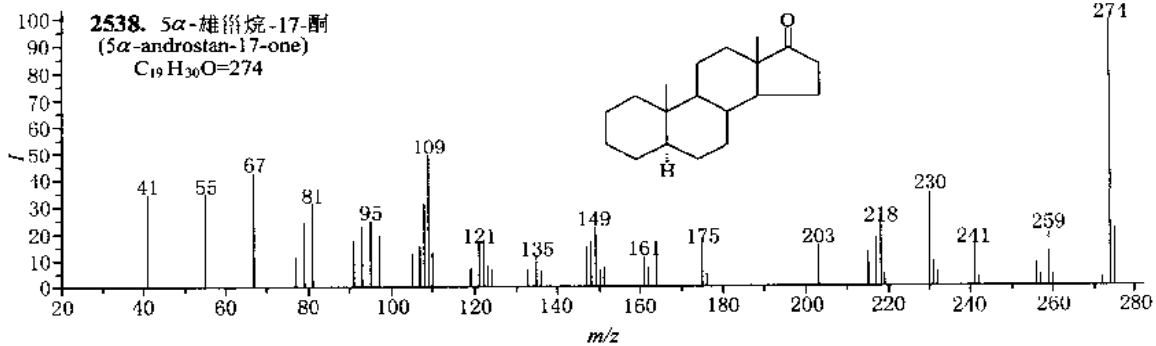


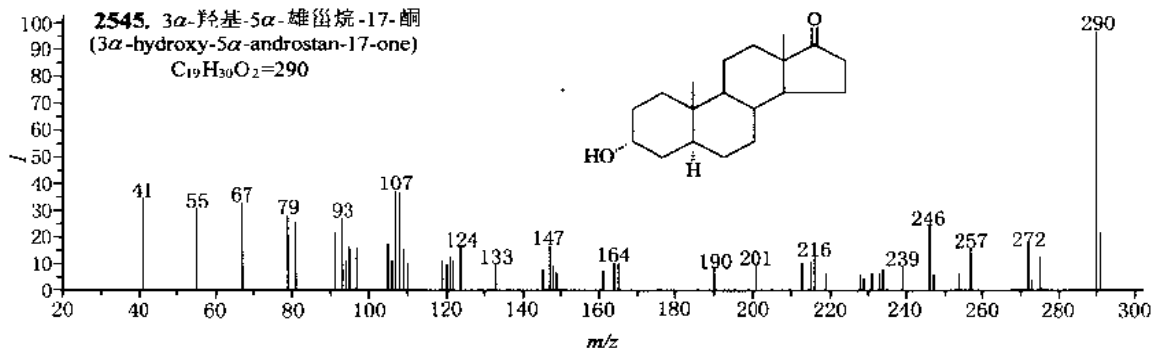
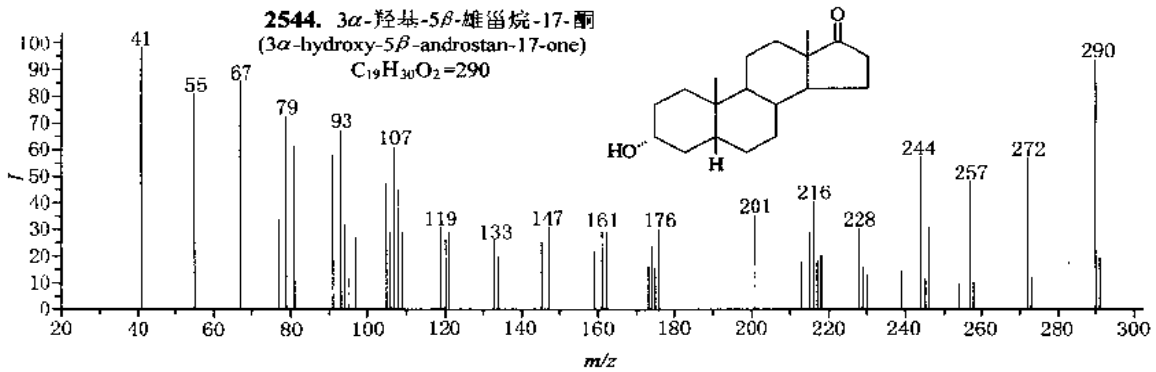
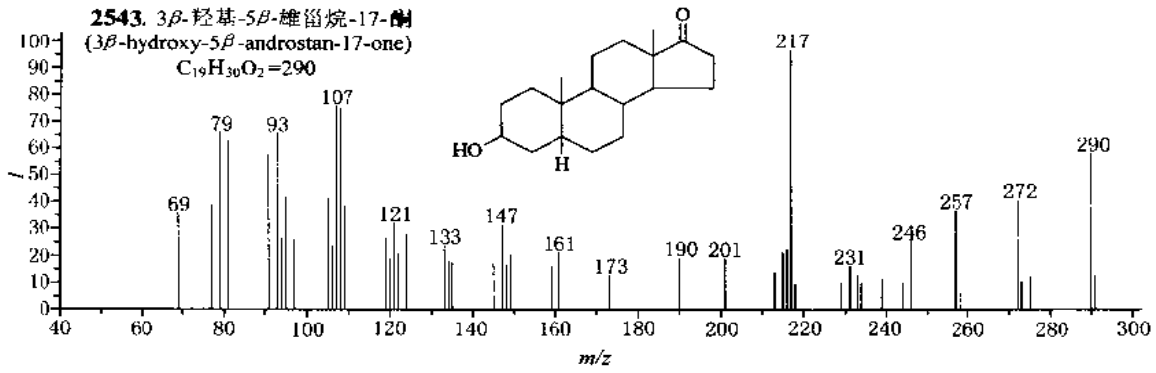
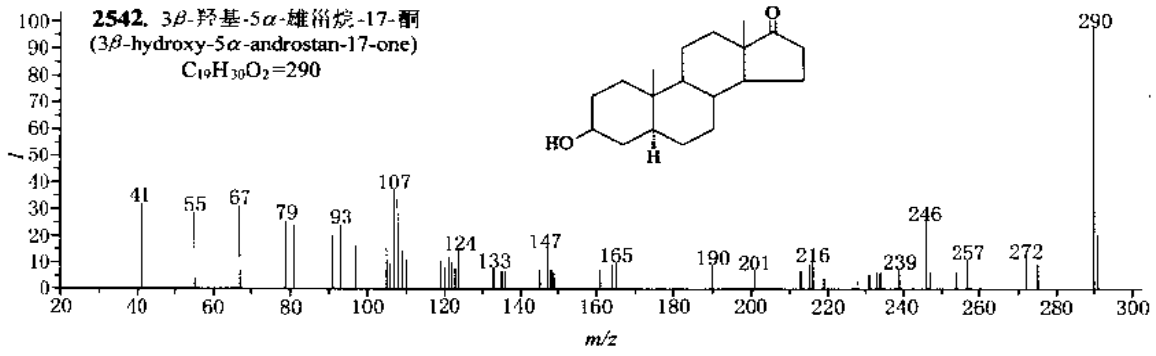


## 二、雄甾烷-17-酮类

这类化合物 (2538, 2539, 2541~2546) 有  $M-CH_3$ ,  $M-H_2O$ ,  $M-44$ ,  $M-15-44$  和  $M-56-15$  等重要离子, 失水是羰基先重排成烯醇, 有了羟基再与别的氢原子一起失掉。 $M-44$  可能是失去乙醛,  $M-56$  是失去环丙酮, 可能的裂解如下:

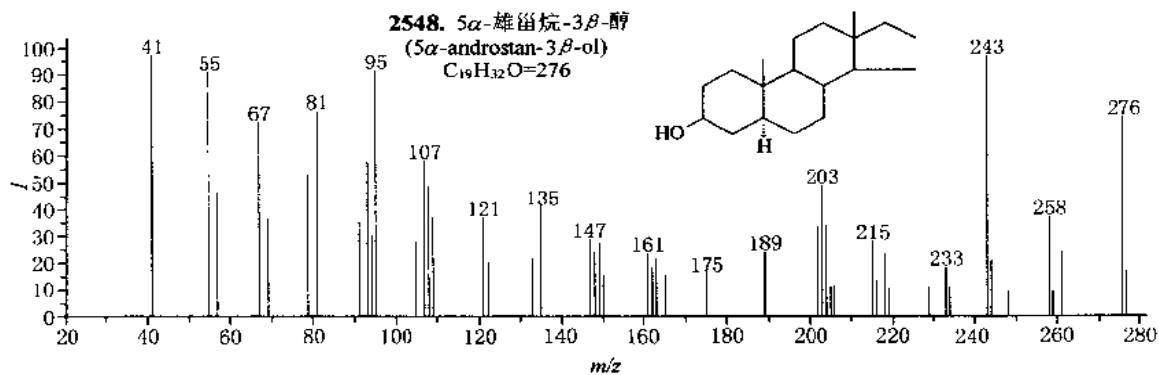
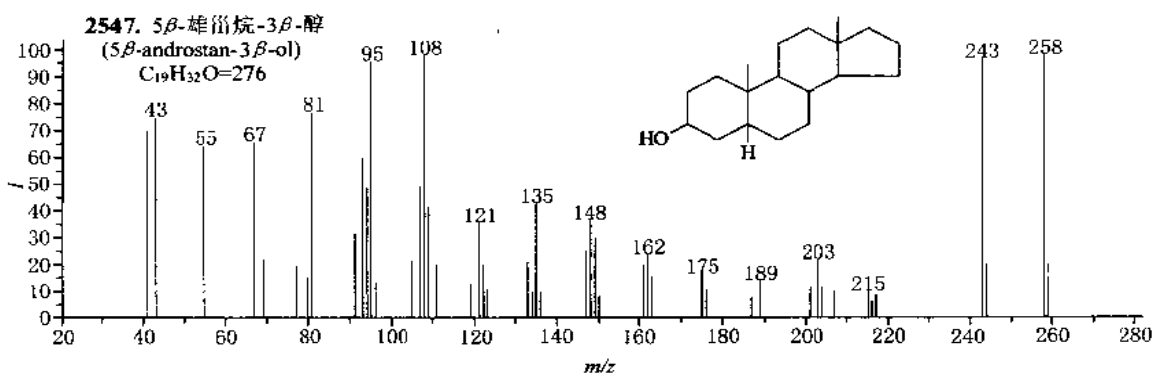
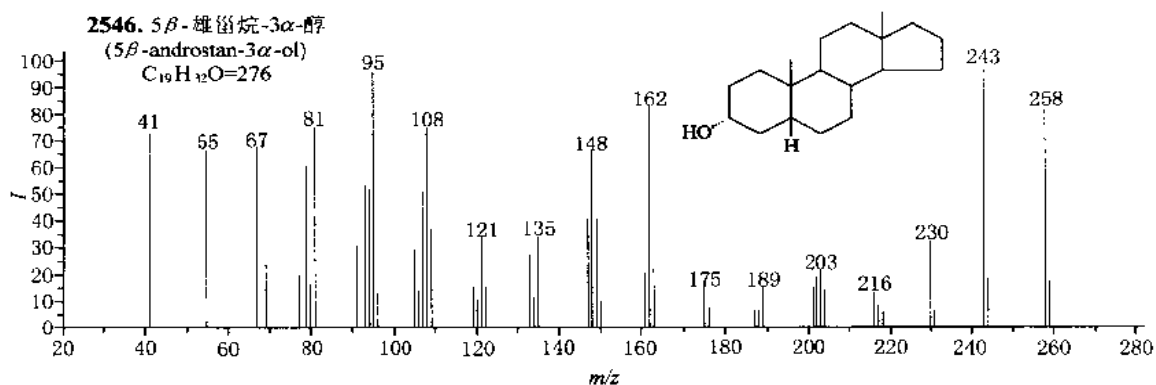


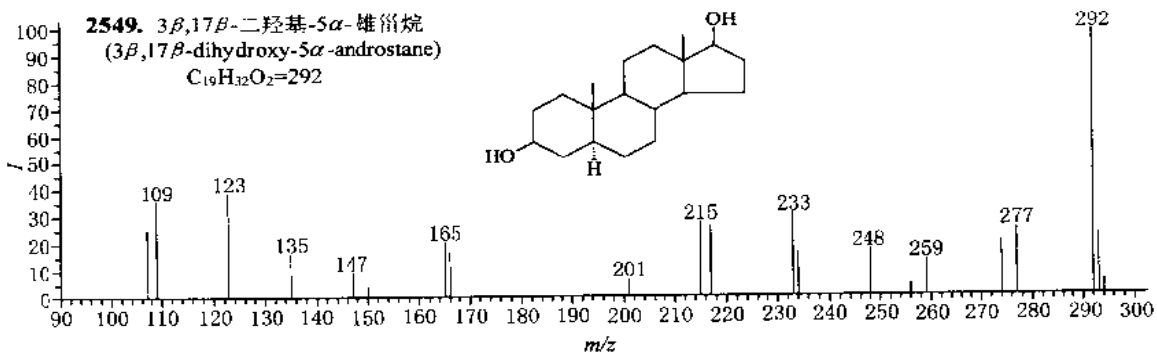




三、C<sub>3</sub> 羟基雄甾烷类

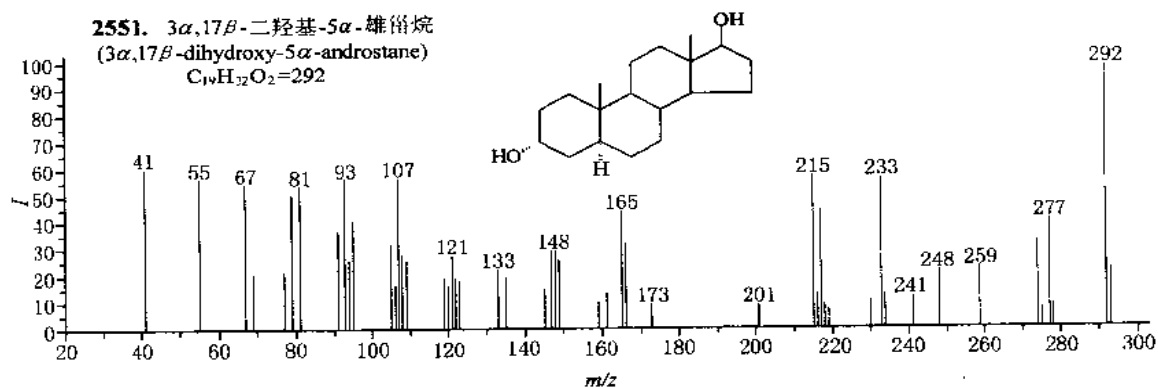
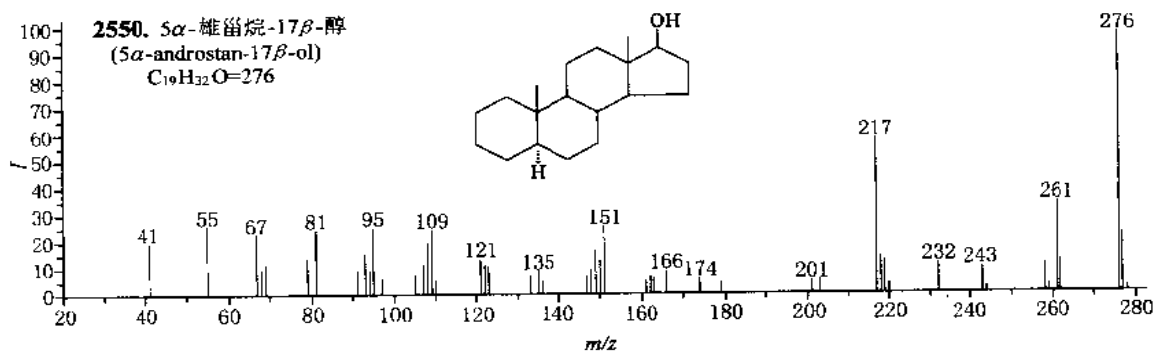
这类化合物 (2542~2549) 除了能由 D 环失去 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 外, 还有几个重要离子, 即 M-CH<sub>3</sub>, M-H<sub>2</sub>O, M-CH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O, M-C<sub>7</sub>H<sub>14</sub>O, M-C<sub>8</sub>H<sub>16</sub>O 和 M-C<sub>11</sub>H<sub>20</sub>O, 后三个离子可能都是来自 M-H<sub>2</sub>O 离子的再裂解, 其结构可能如下:



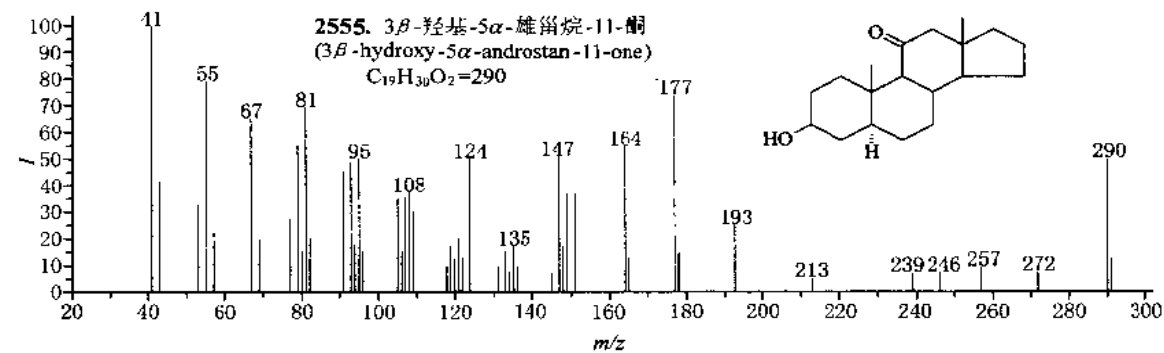
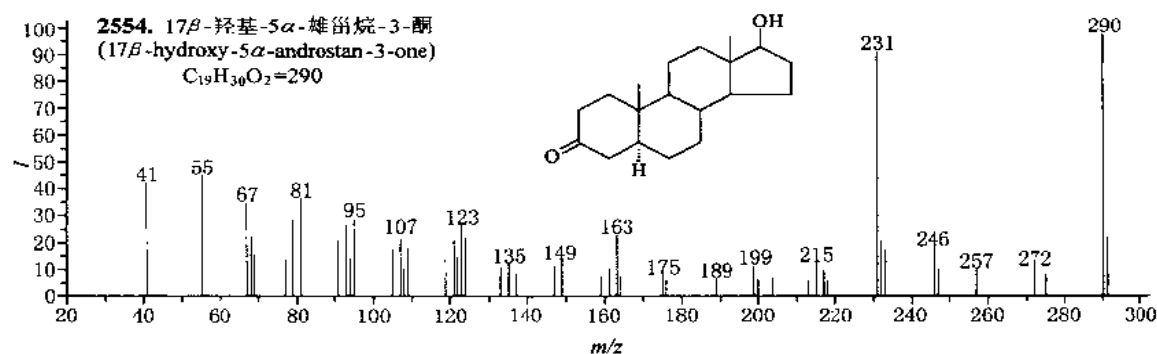
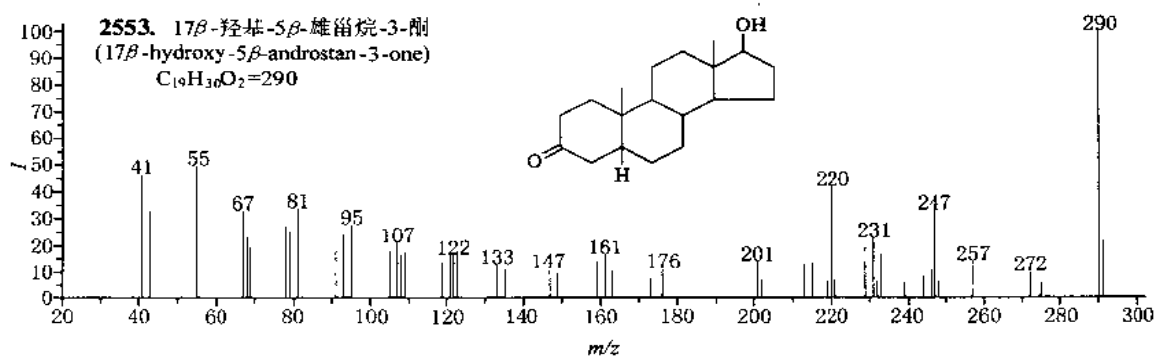
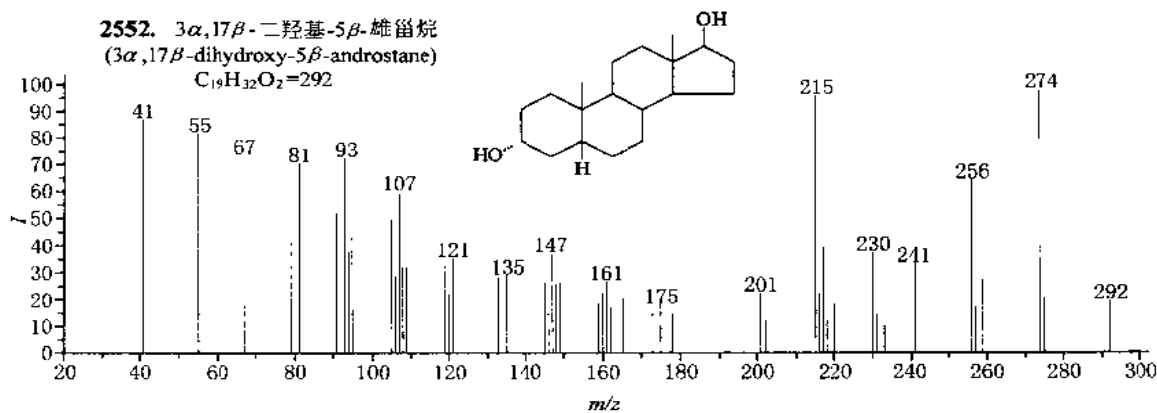


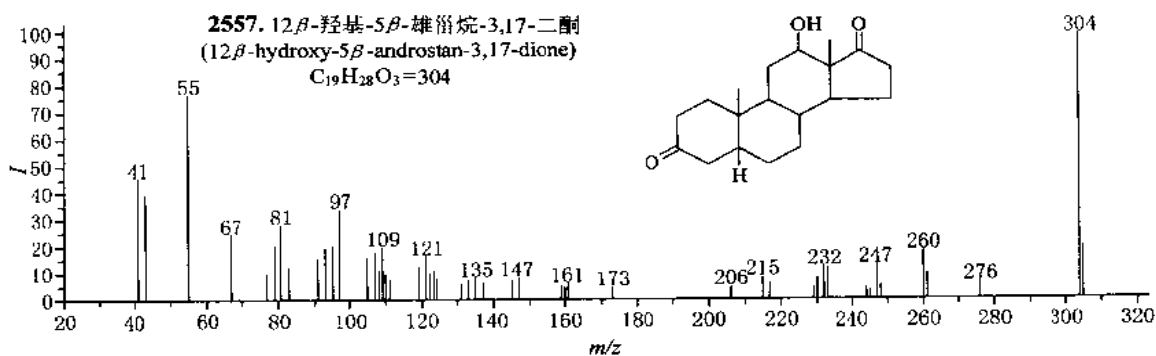
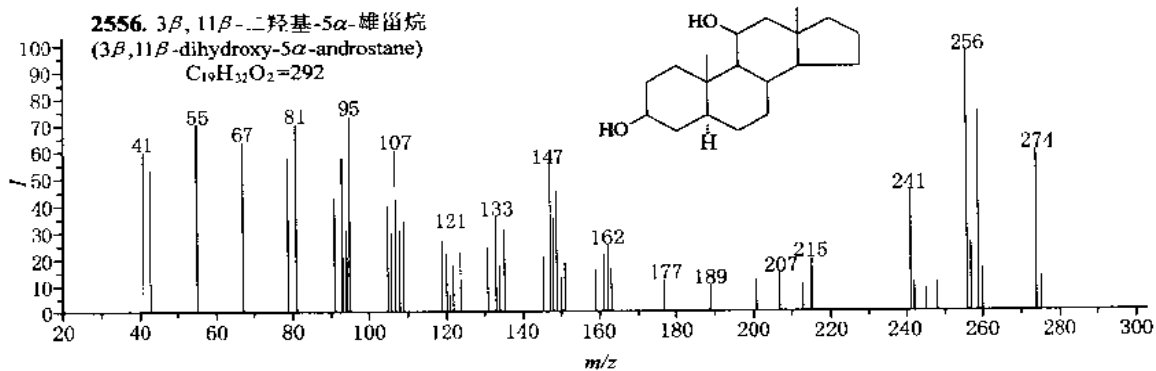
#### 四、 $C_{17}$ 羟基雄甾烷类

这类化合物 (2550~2554) 的特征离子是  $M-44$  和  $M-58$ , 失去的 44u 是乙烯醇, 失去的 58u 是环丙醇, 都来自五元 D 环。失去 58u 后还能再失 1 个氢原子。同时存在的  $C_3$  羰基一般对裂解影响不大,  $C_{11}$  和  $C_{12}$  含氧化合物 (2555~2557) 的特征裂解不明显。



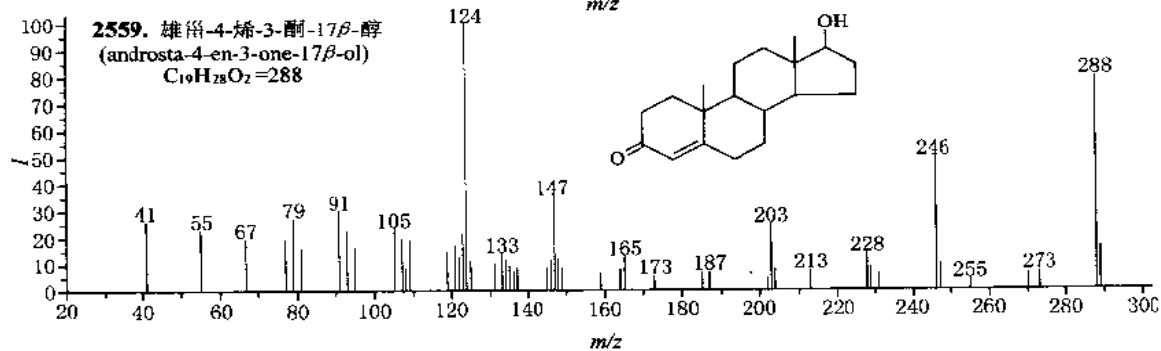
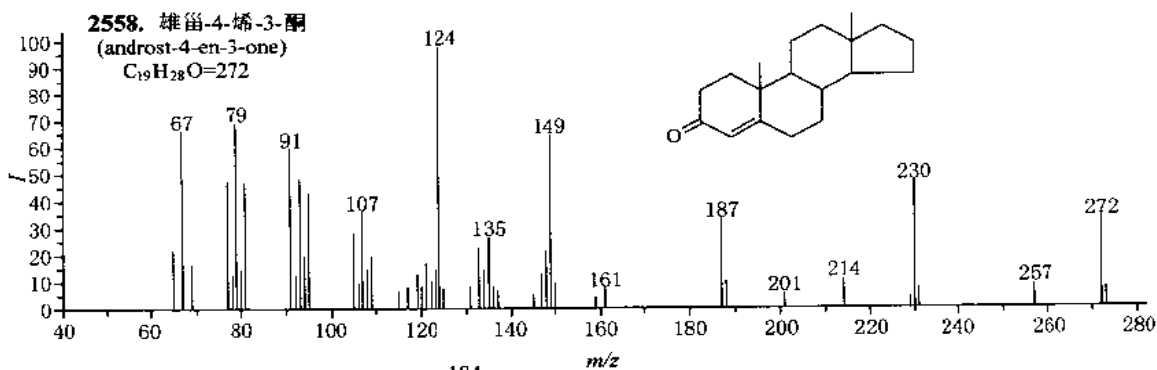


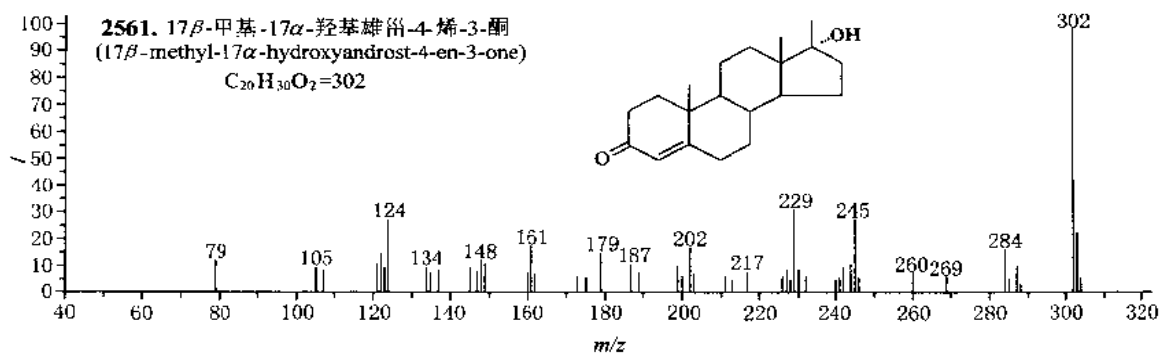
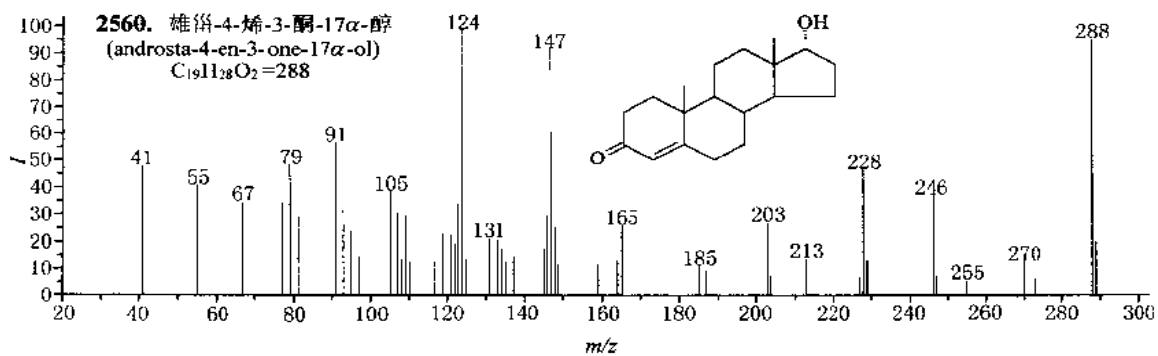




### 五、4-烯-3-酮雄甾烷类

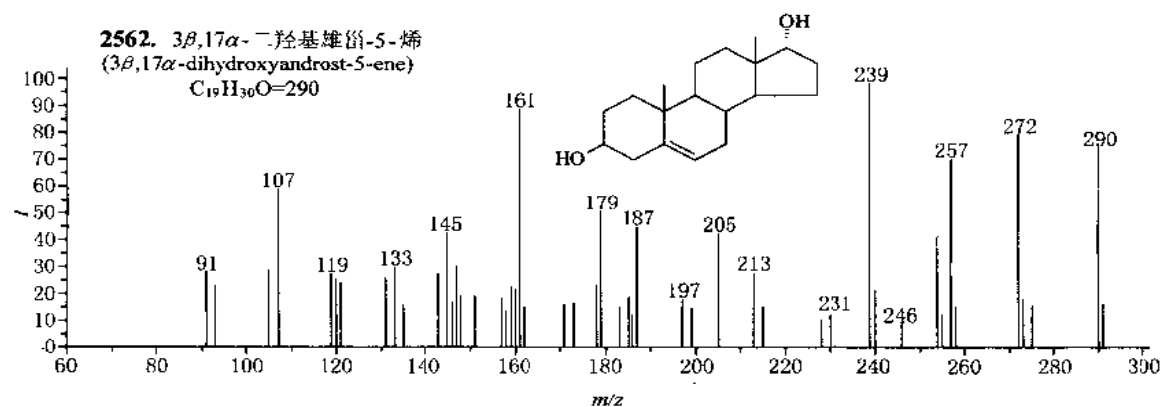
这类化合物 (2558~2561) 都有强峰  $m/z$  124, 这与 4-烯-3-酮孕甾烷的情形相同。





## 六、 $\Delta^5$ -雄甾烯类

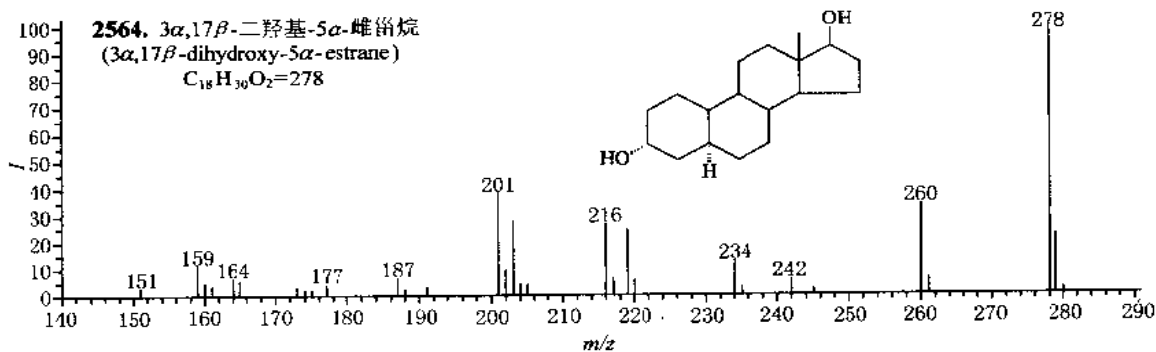
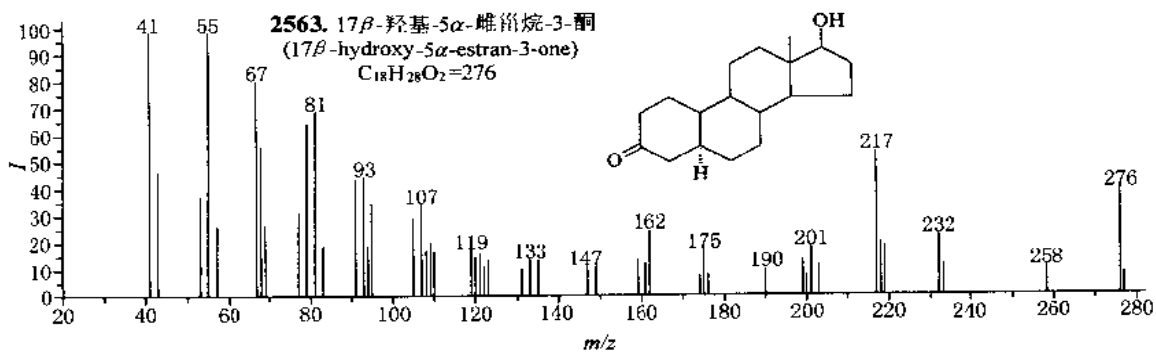
这类化合物 (2562) 能因 B 环的双键引起 RDA 裂解, 但产生的离子不强。



## 第三节 雌甾烷类

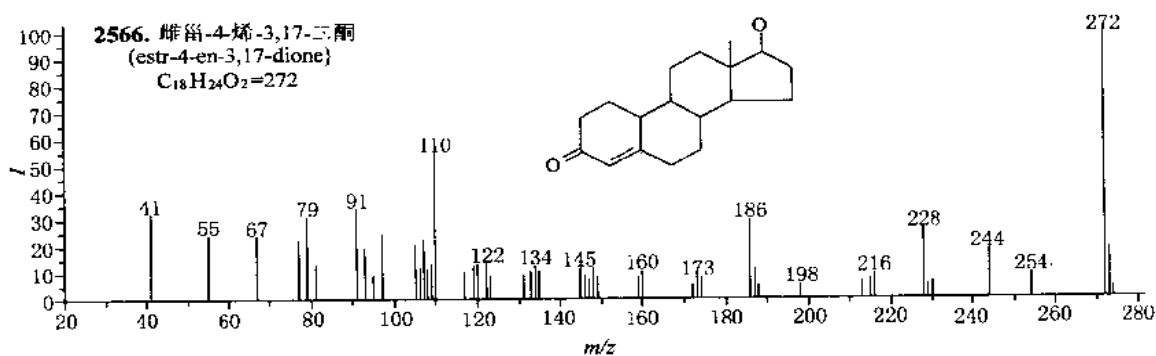
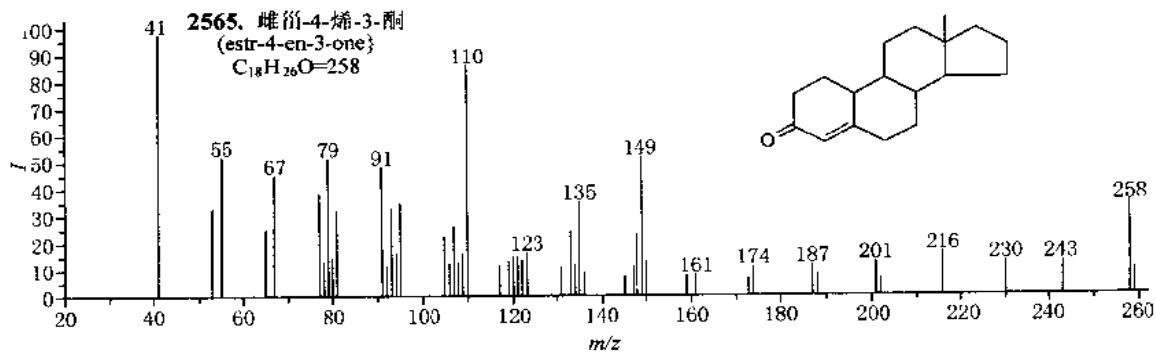
### 一、 $C_{17}$ 羟基雌甾烷类

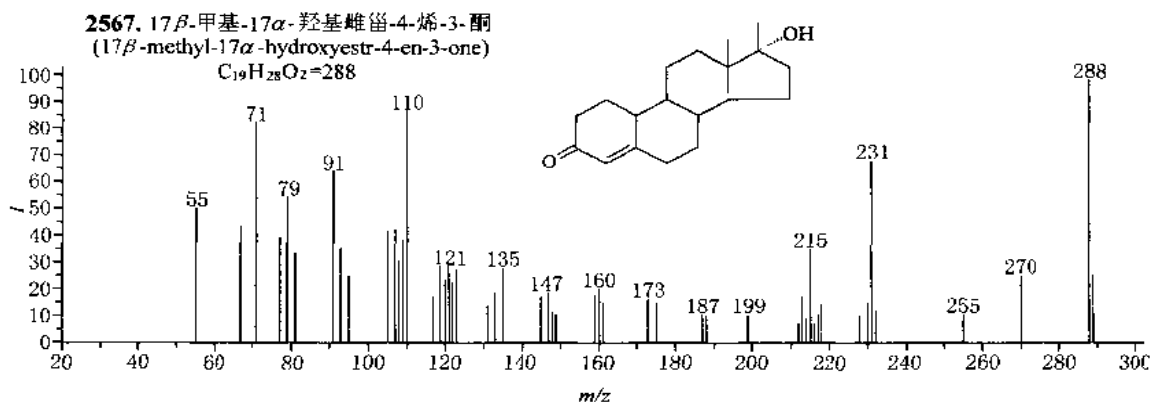
这类化合物 (2563, 2564) 的特征离子是  $M-HO-\langle-H$  以及  $M-CH_2CHOH$ , 这与雄甾烷的情形相同。



## 二、4-烯-3-酮类

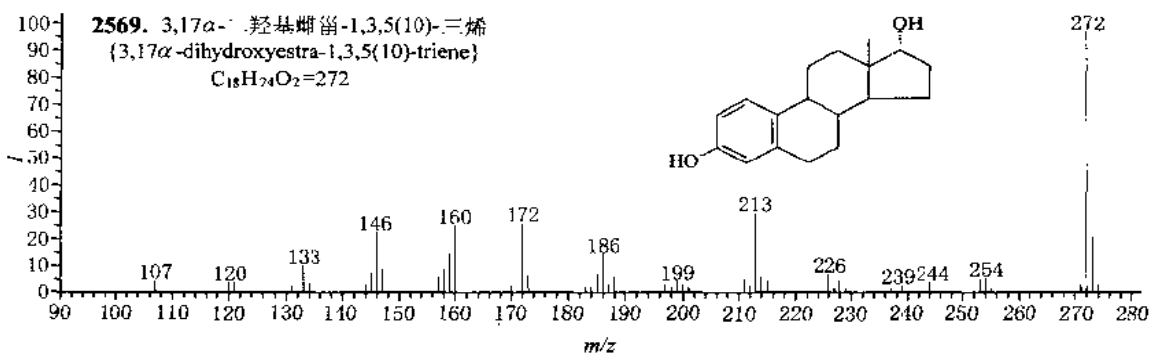
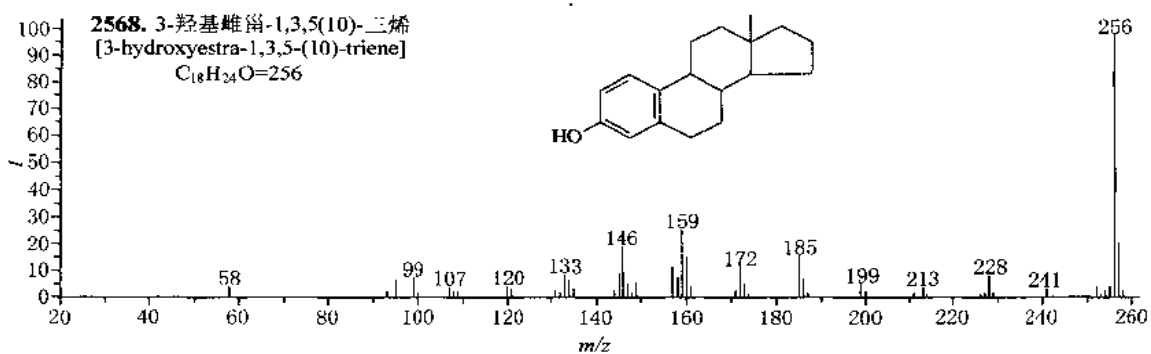
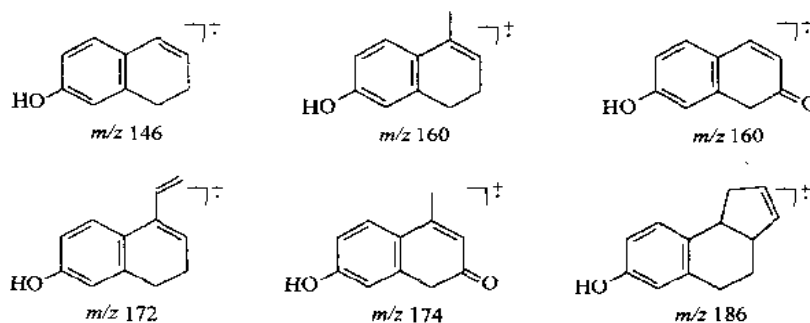
这类化合物 (2565~2567) 除有 D 环的裂解外, 另有特征离子  $m/z$  110, 这个离子与前述的离子  $m/z$  124 有同样的产生方式, 但结构中少 1 个甲基。

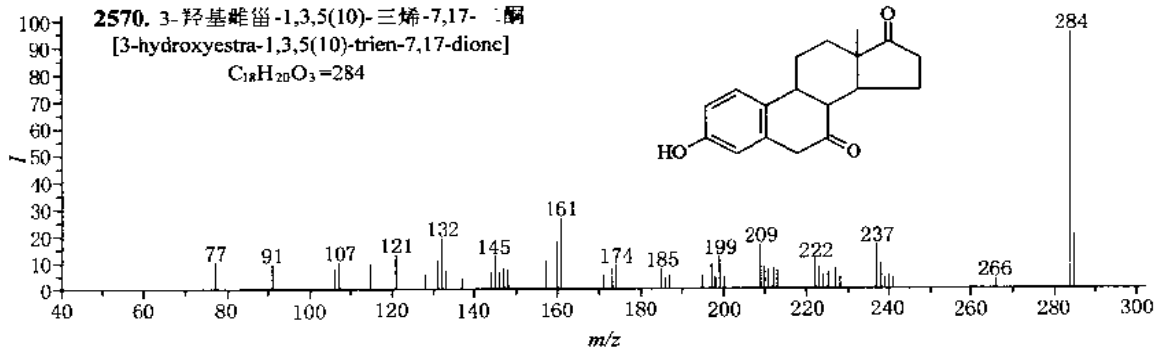




### 三、雌甾-1,3,5-三烯类

这类化合物 (2568~2570) 除 D 环的裂解外, 还有些围绕着 A 环生成的离子, 例如:

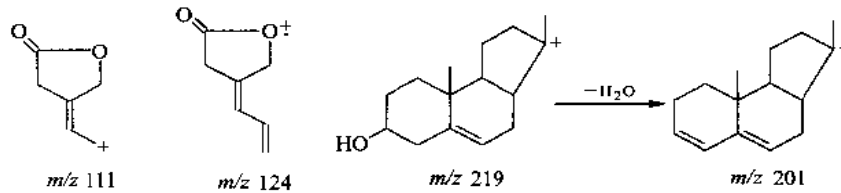




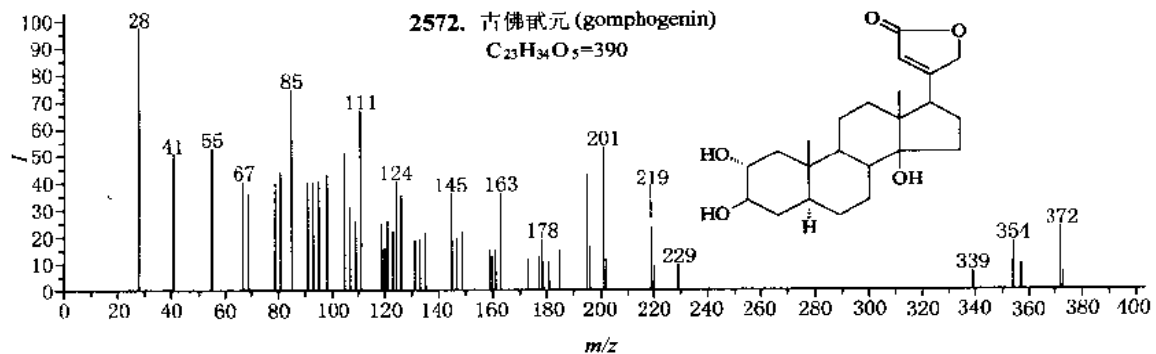
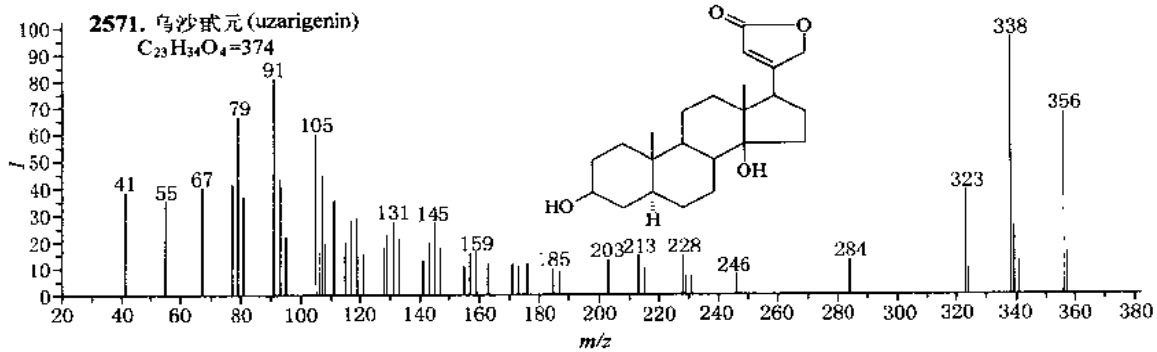
## 第四节 强心甙元类

### 一、五元环内酯强心甙元类

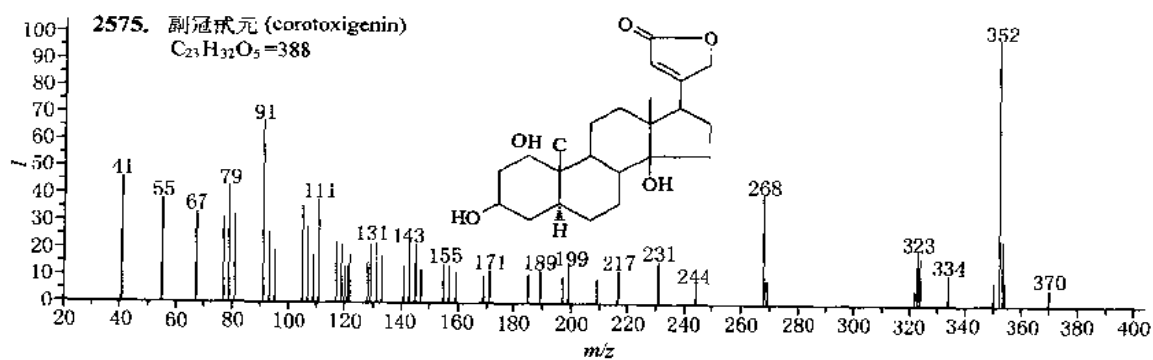
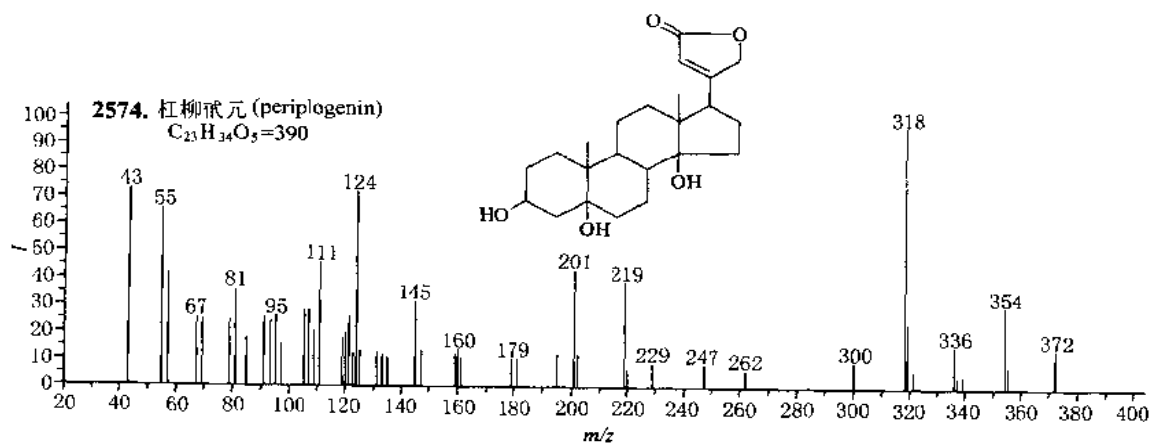
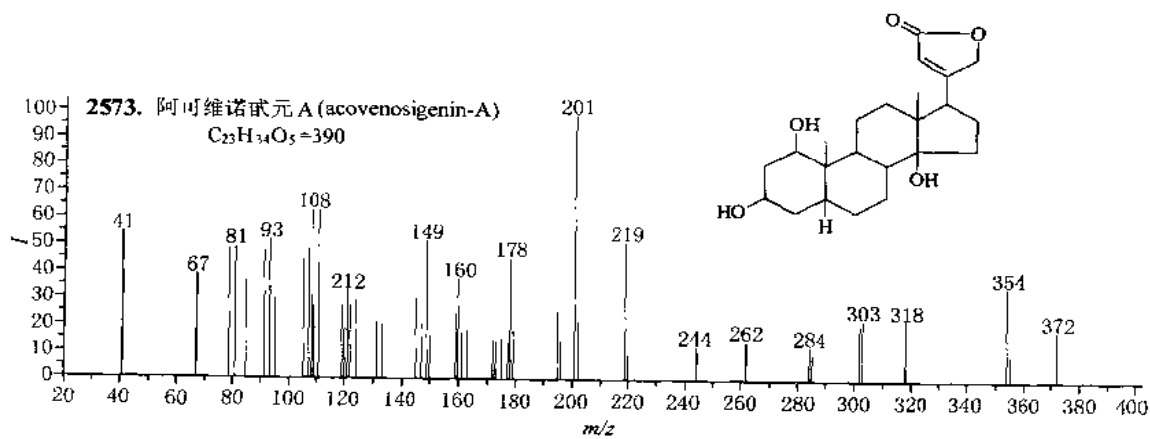
(1) 五元环内酯强心甙元类 (2571~2579) 有几个重要离子, 其结构如下:

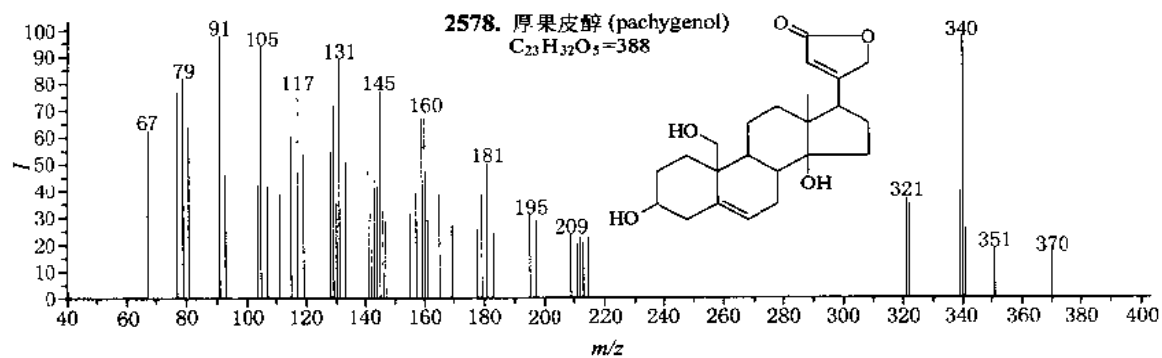
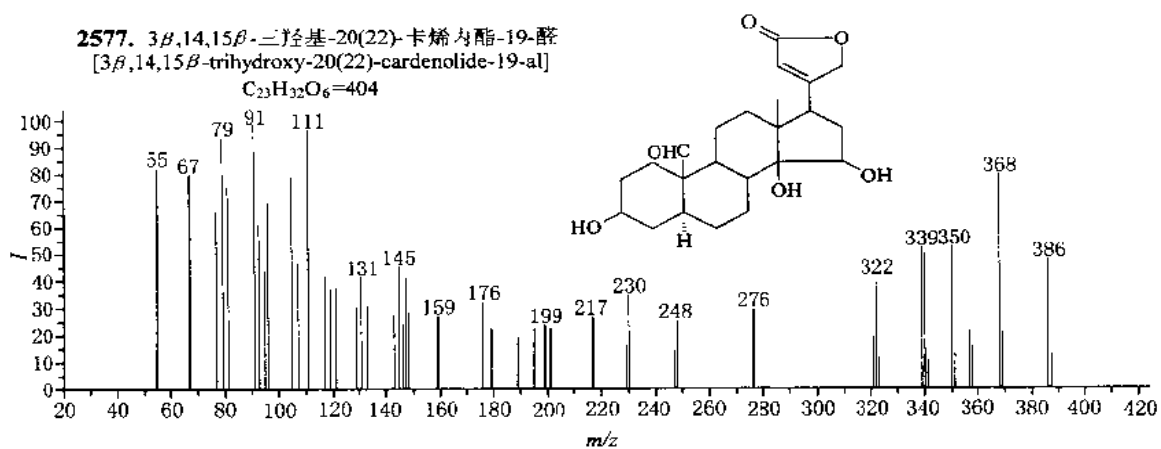
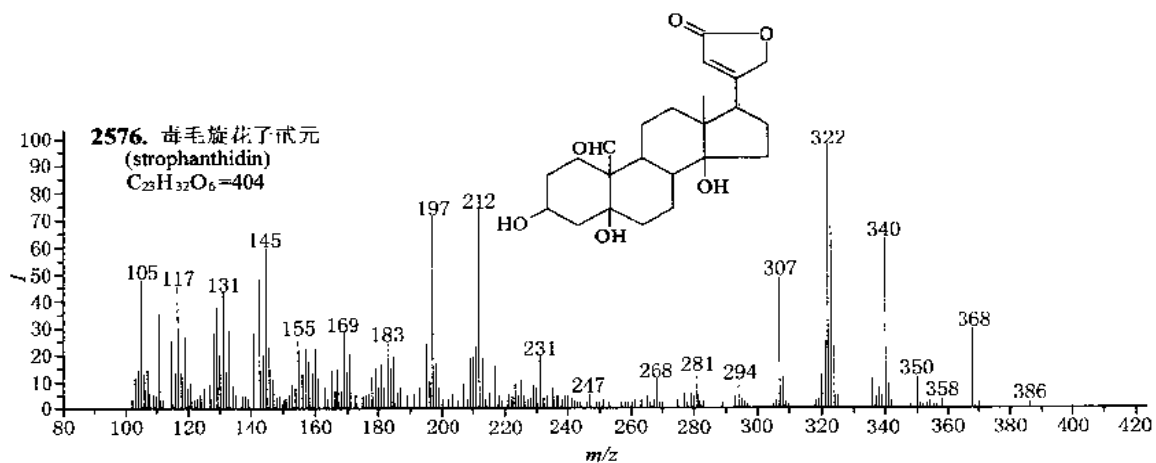


(2) 具有 19-醛基的化合物 (2575~2577) 有  $M-H_2O-H_2O-CO$  (或  $CHO$ ) 的裂解途径。

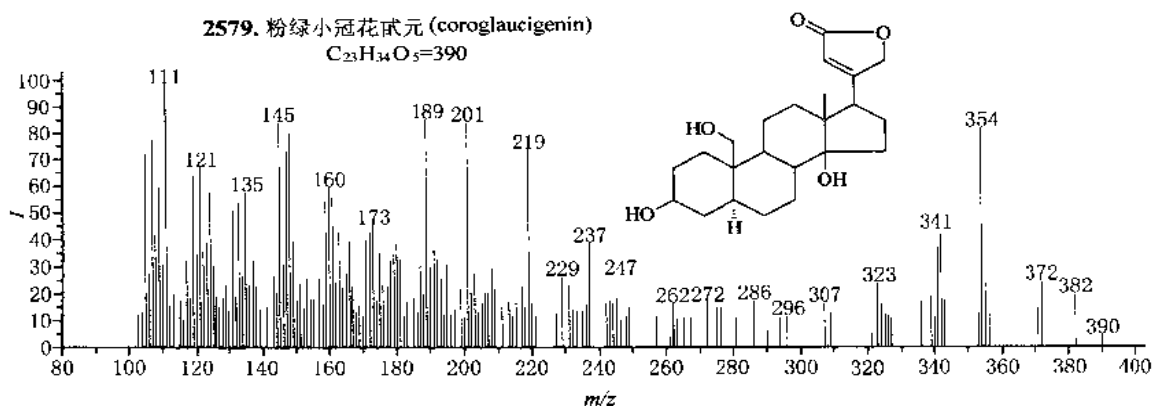


(3) 具有 19-羟甲基的化合物 (2578, 2579) 有  $M-H_2O-CH_2O$  (或  $CH_2OH$ ) 的裂解途径。



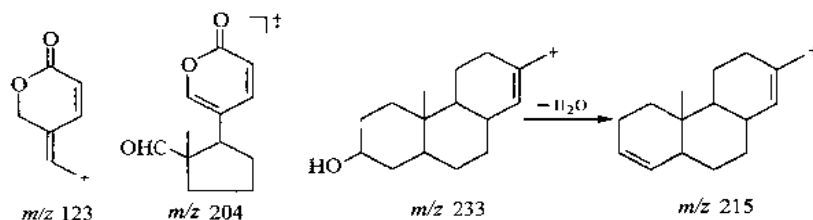






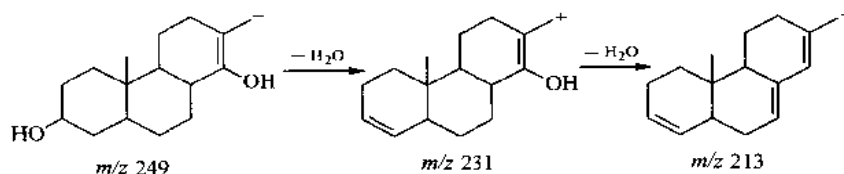
## 二、六元环内酯强心甙元类

(1) 这类化合物(2580~2591)一般都有离子  $m/z$  123, 这相当于上面的离子  $m/z$  111。

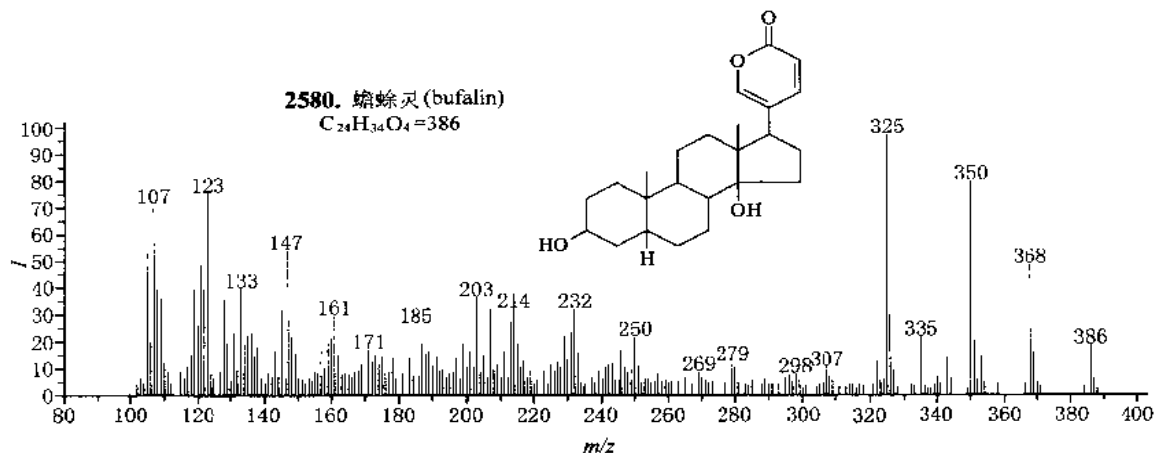


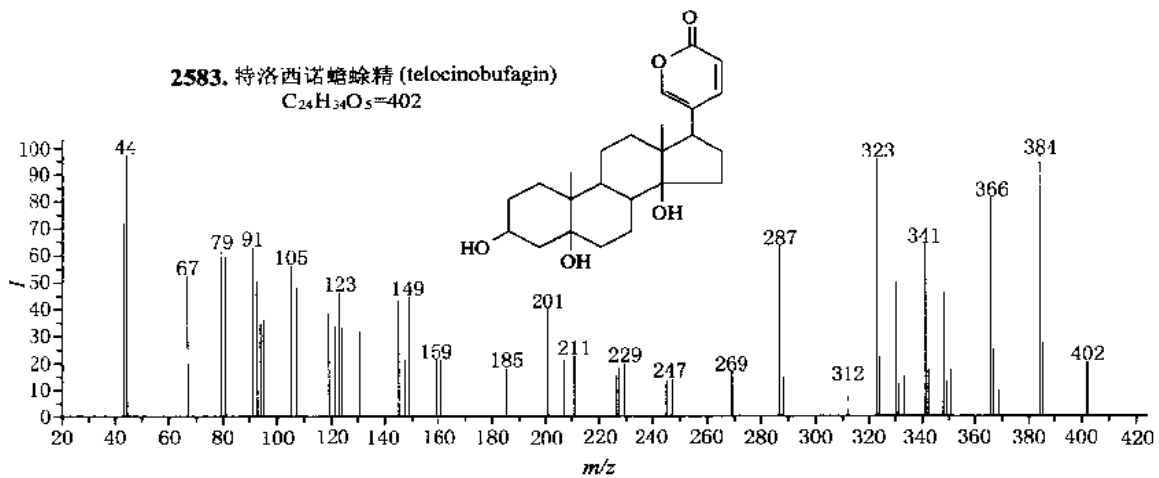
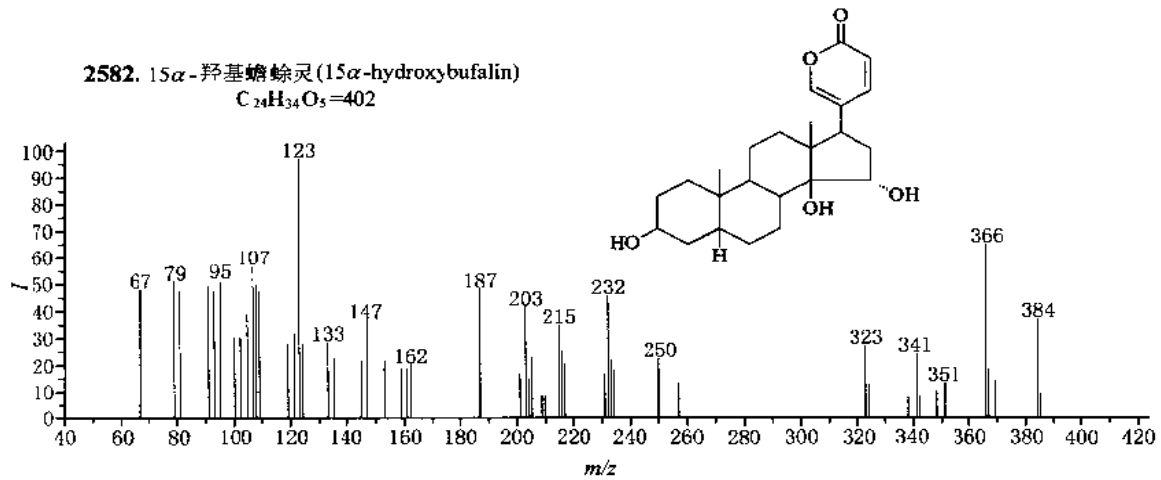
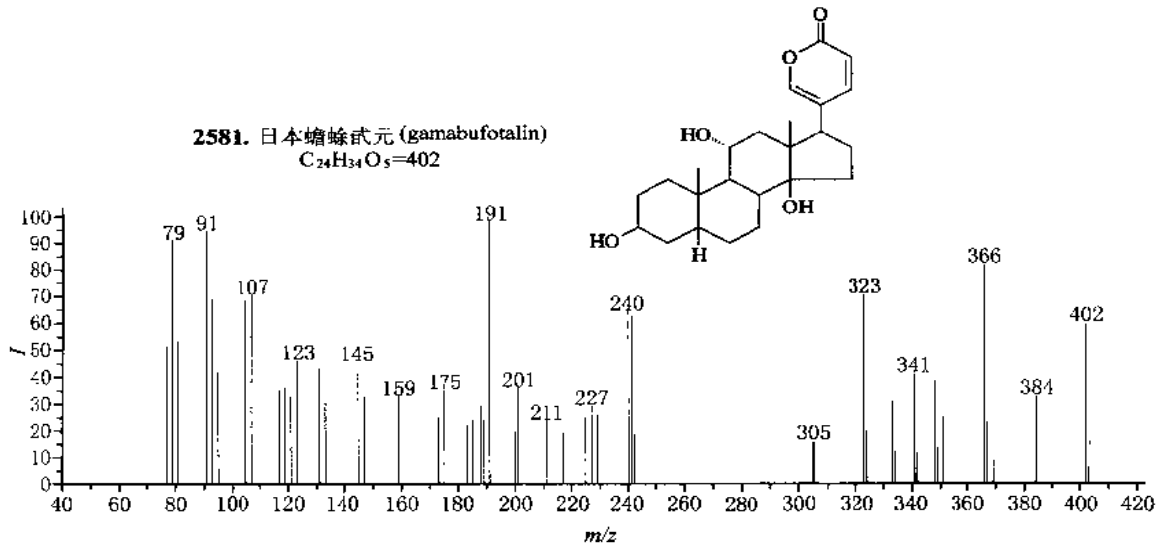
(2) 具有  $C_{11}$  羟基的化合物 (2584) 离子  $m/z$  204 很强。

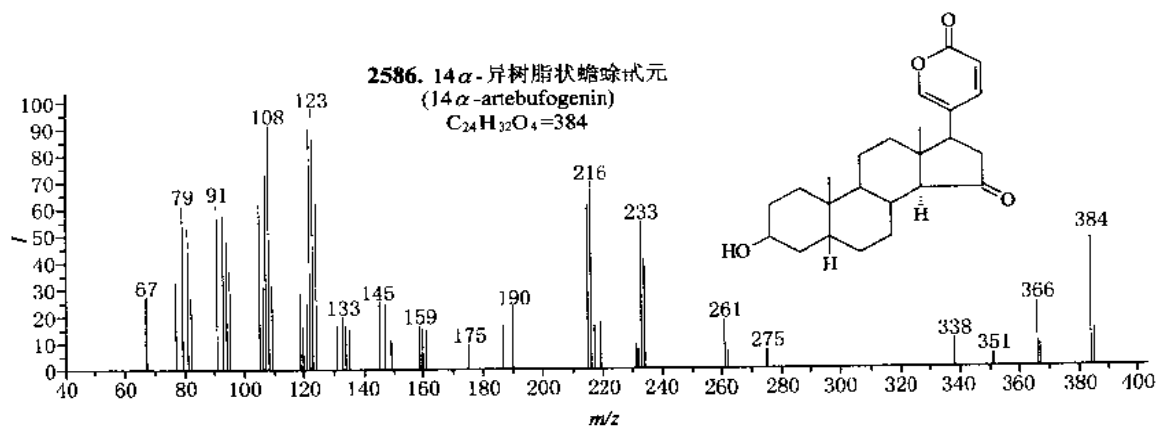
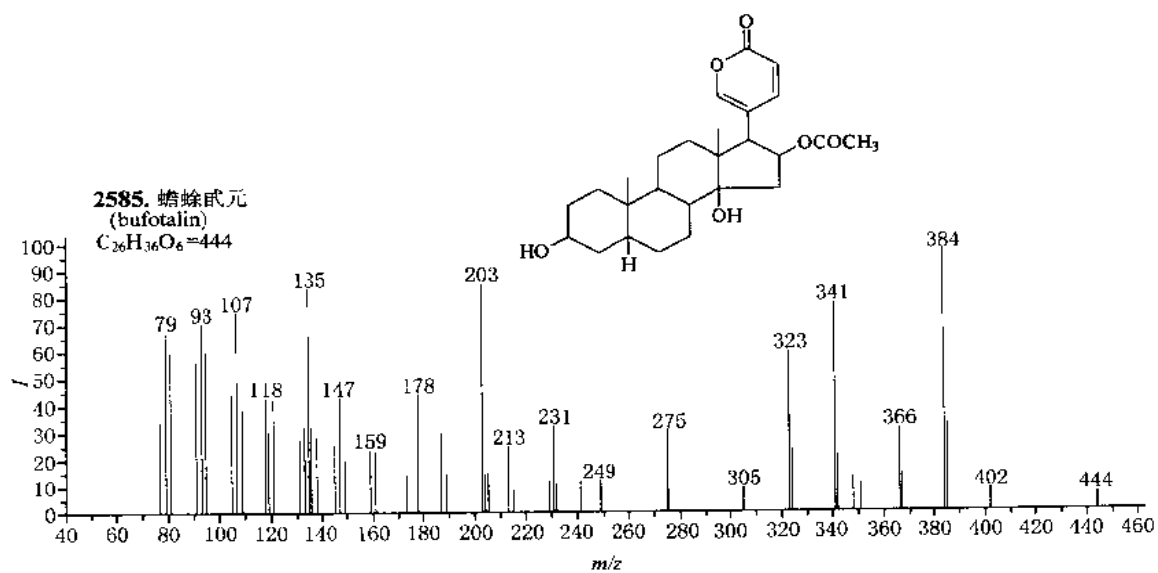
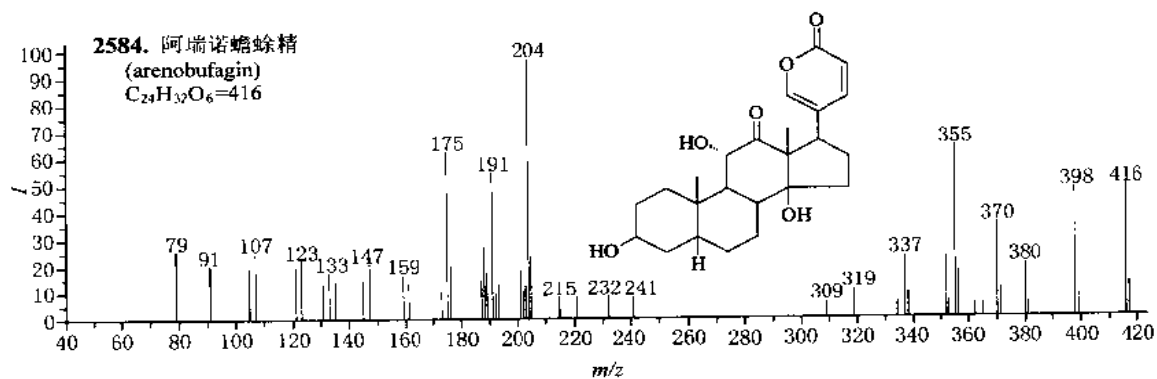
(3) 具有  $C_{14}$ 、 $C_{15}$  三元氧环、且 A、B、C 环有一个羟基取代 (2587, 2589) 时, 有强峰  $m/z$  233 和  $m/z$  215; A、B、C 环有两个羟基取代 (2588, 2590, 2591) 时, 有强峰  $m/z$  249、231 和  $m/z$  213。

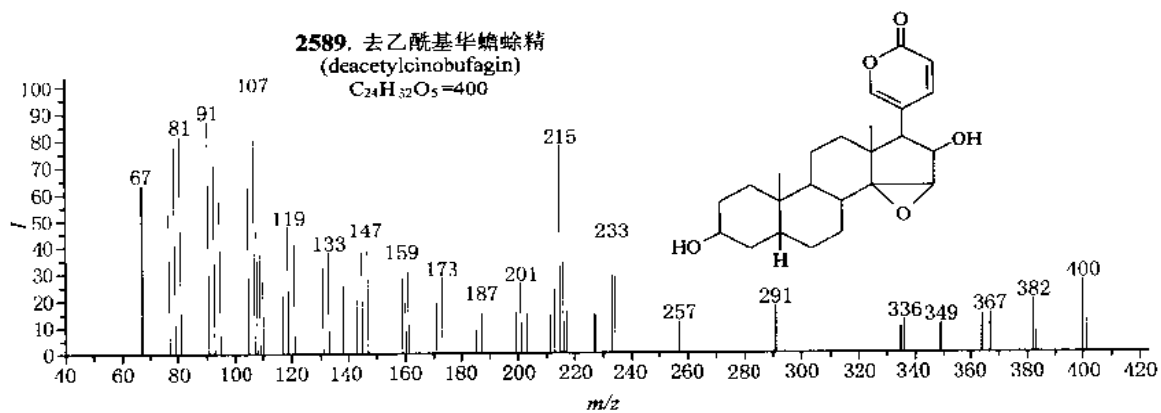
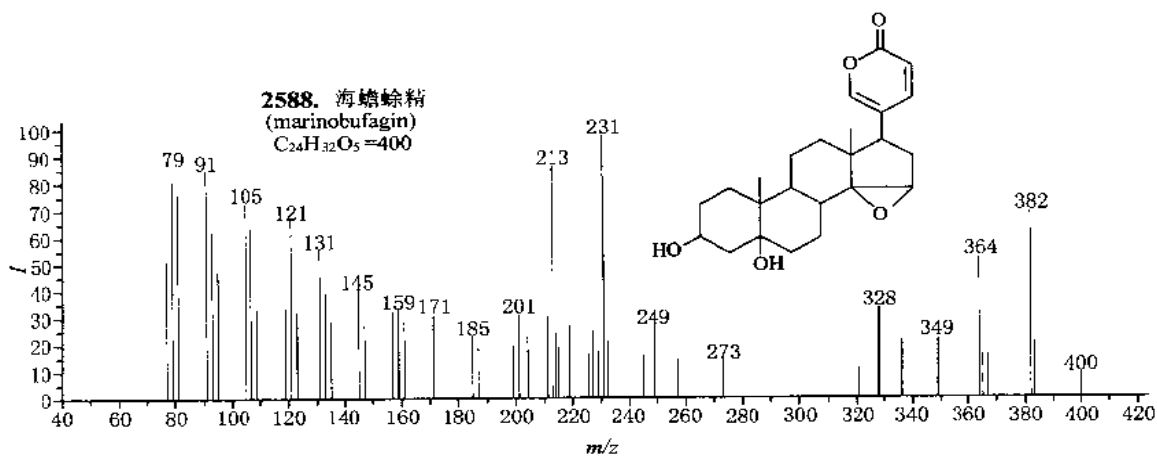
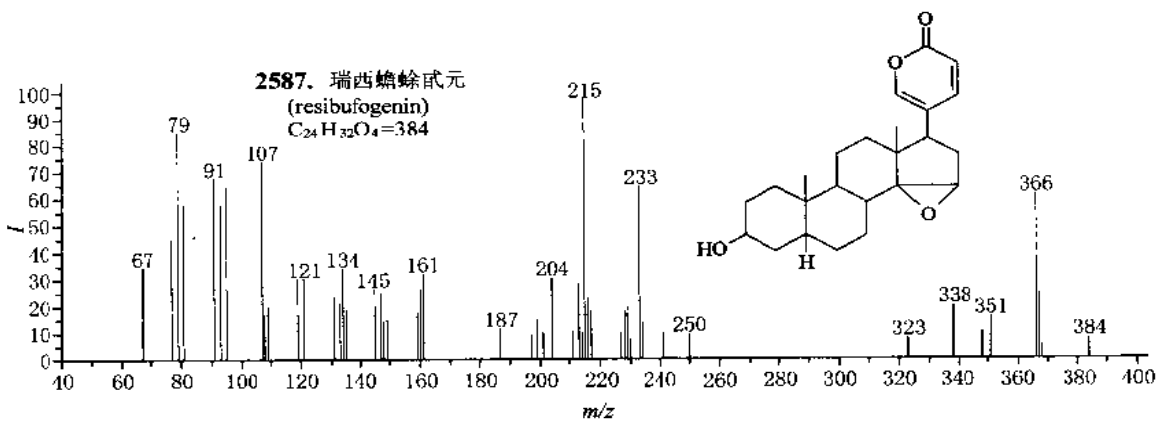


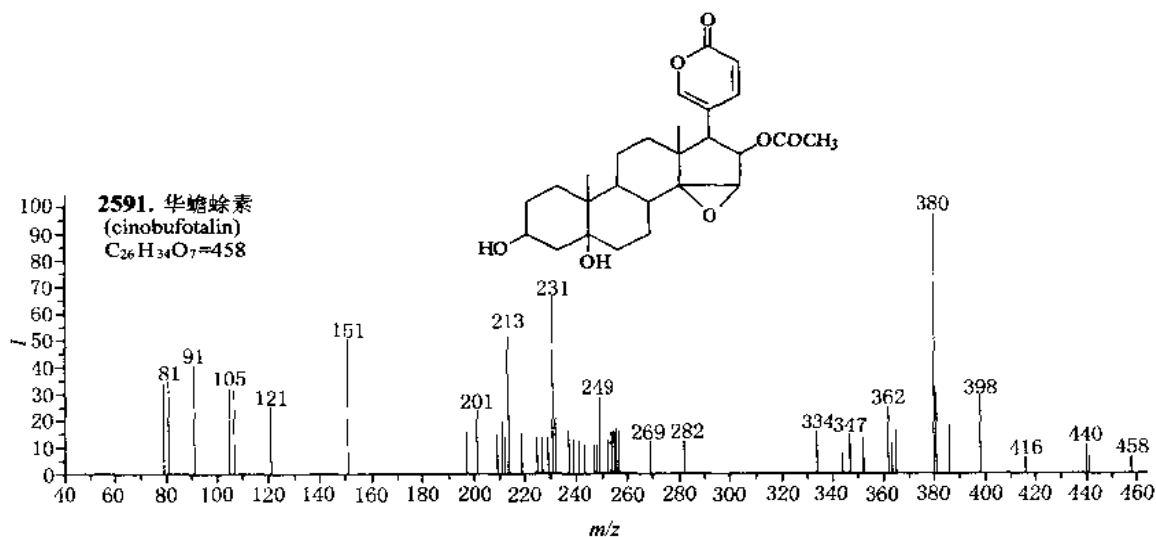
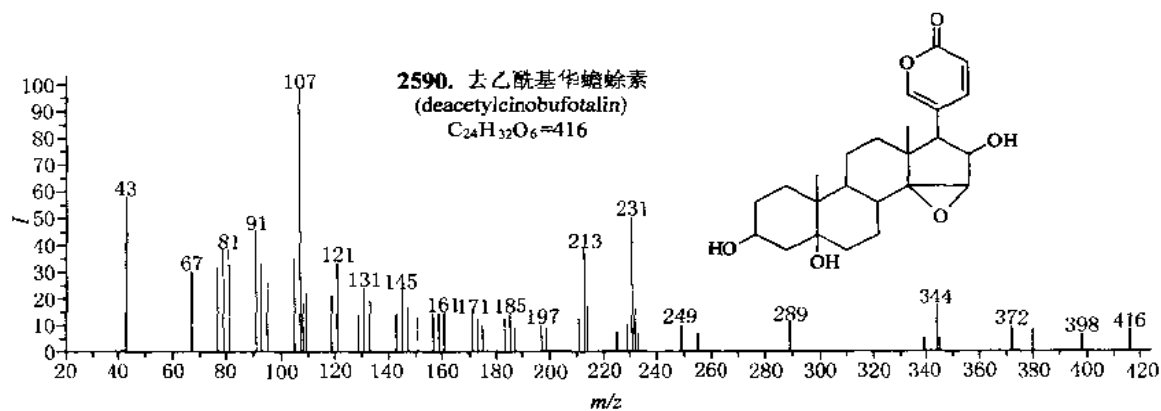
(4)  $C_{16}$  乙酰氧基取代 (2591) 时, M-HOAc 离子很强。







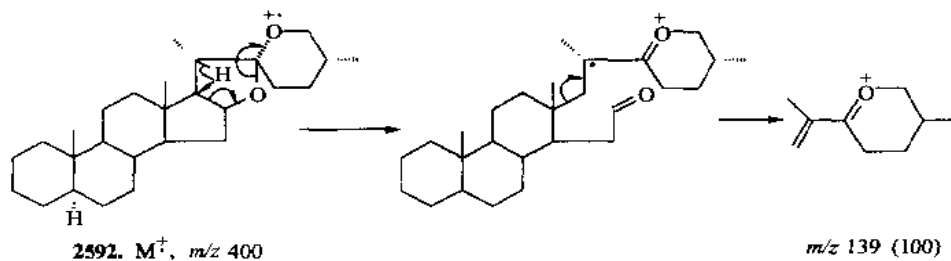




## 第五节 甾族皂甙元类

### 一、 $C_{23}$ 无羟基取代的甾族皂甙元类

(1)  $C_{27}$ 无羟基取代的甾族皂甙元 (2592~2600) 在该类化合物中居多, 低质量区出现基峰  $m/z$  139, 它来自五元 E 环的裂解, 为这类化合物的典型特征离子, 以 3-去氧替告皂甙元 (2592) 为例, 其产生方式如下:

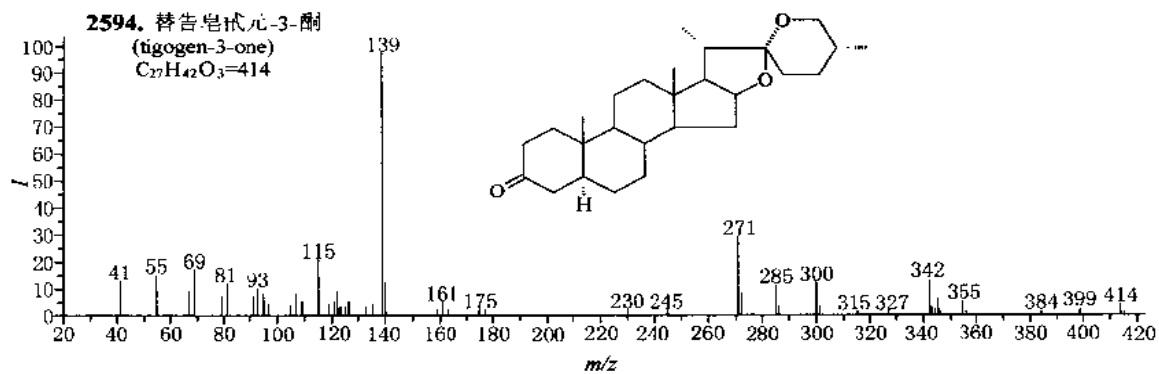
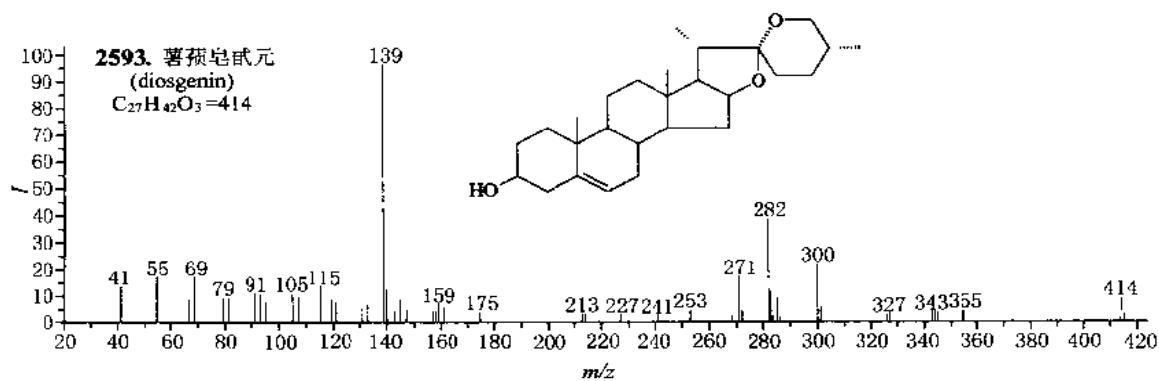
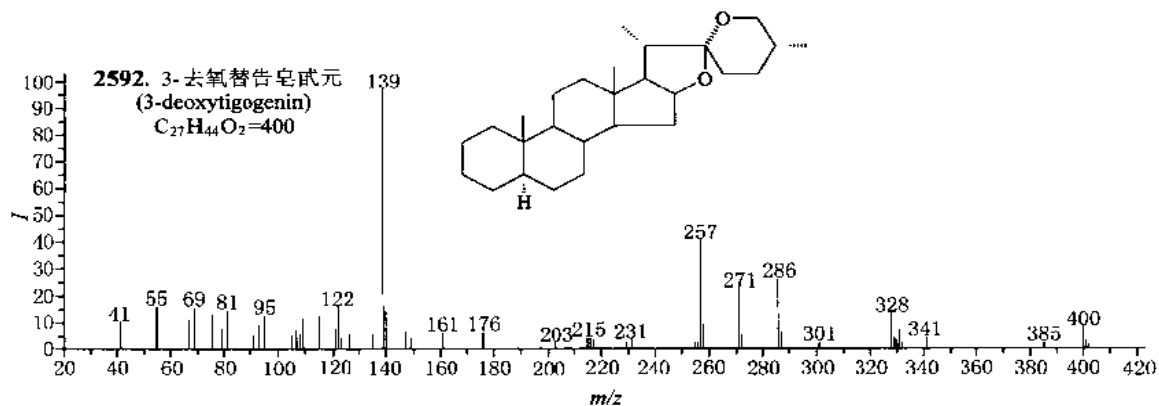


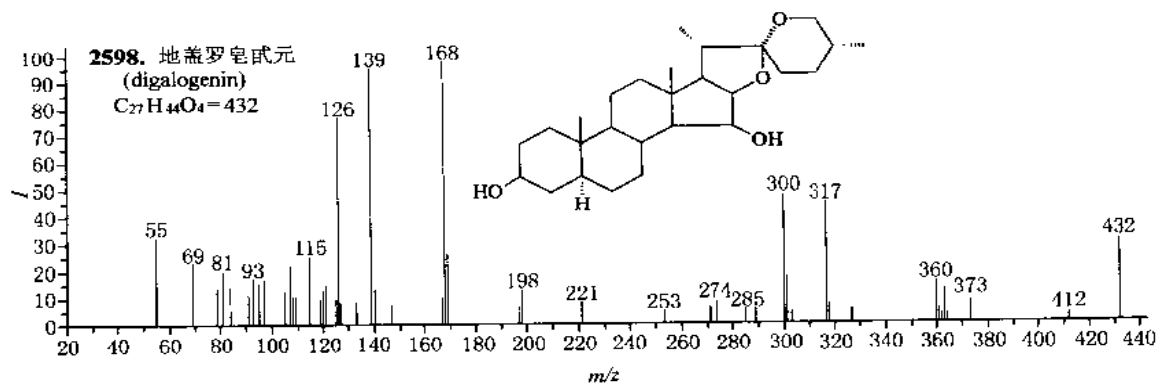
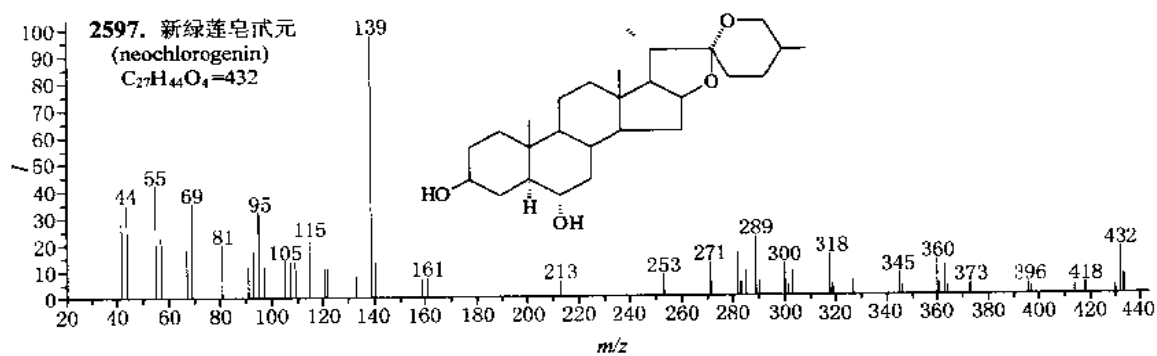
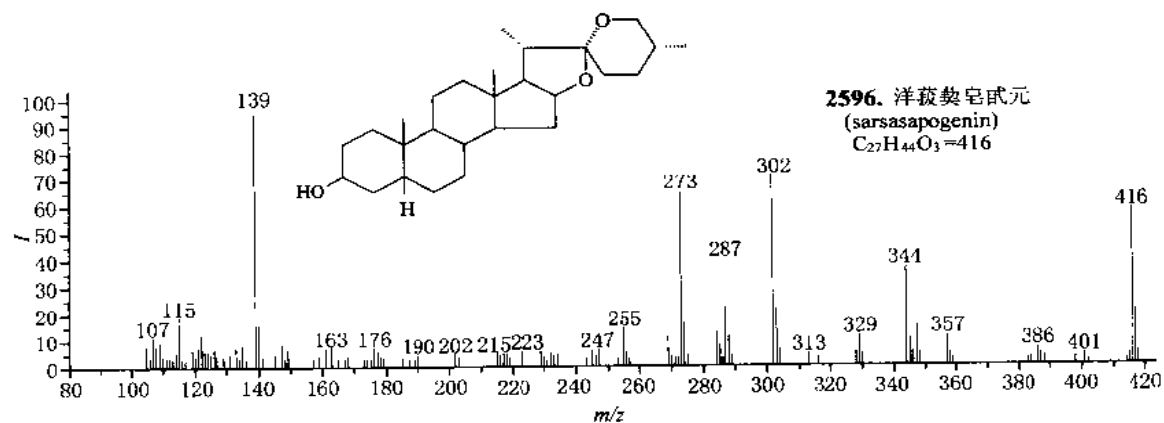
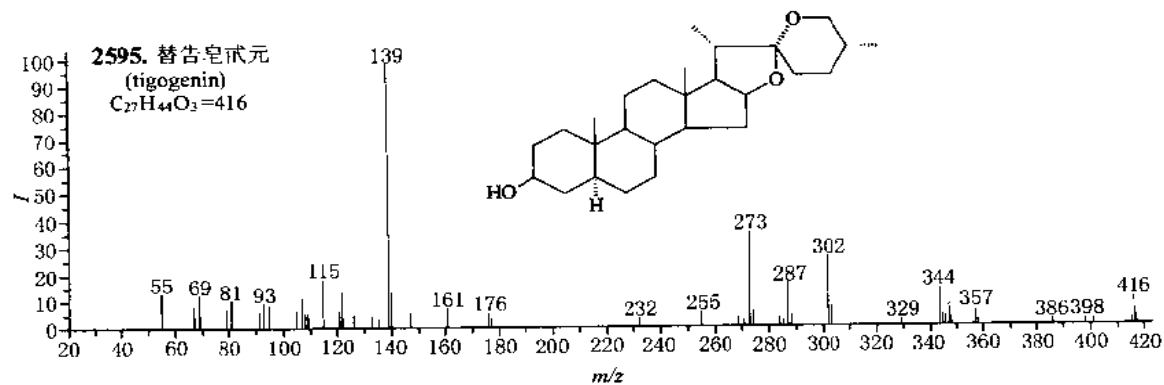
(2)  $C_{27}$ 有羟基取代的甾族皂甙元 (2601, 2602), 离子  $m/z$  139 增加 16u, 移到  $m/z$  155,

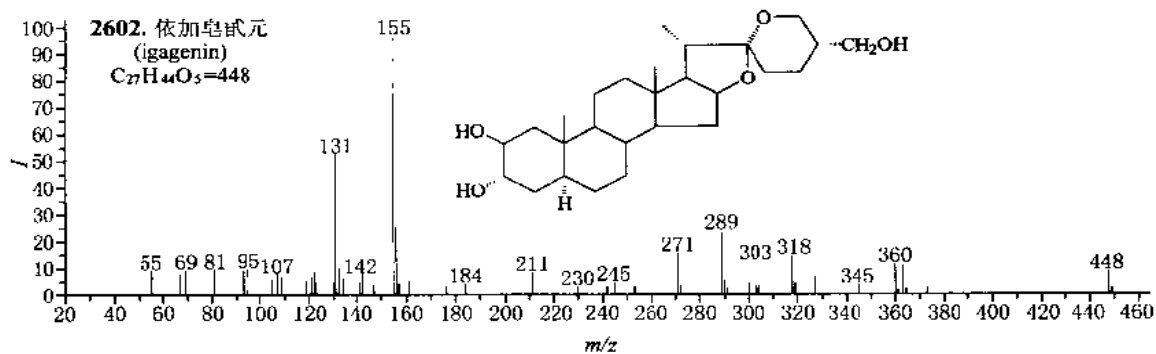
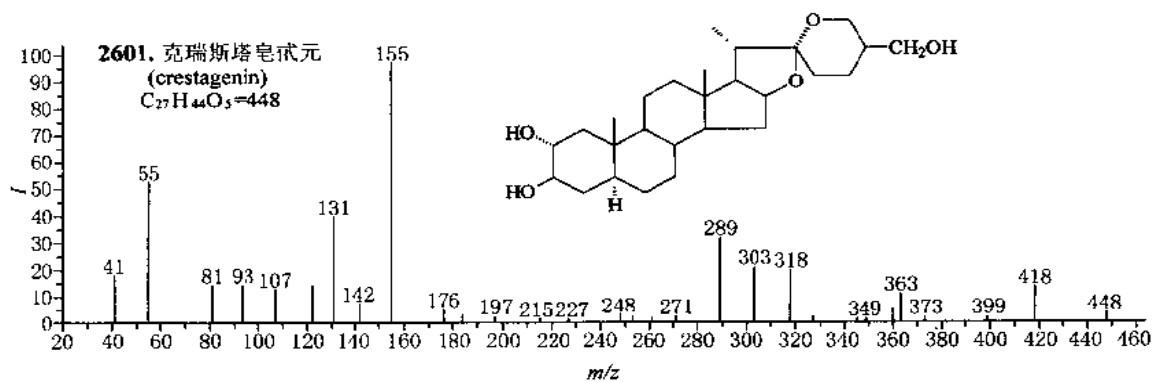
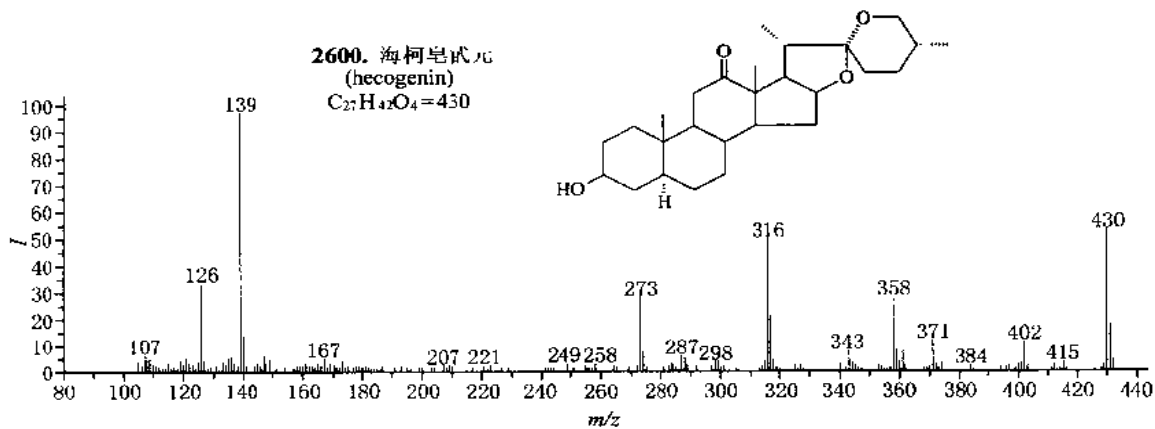
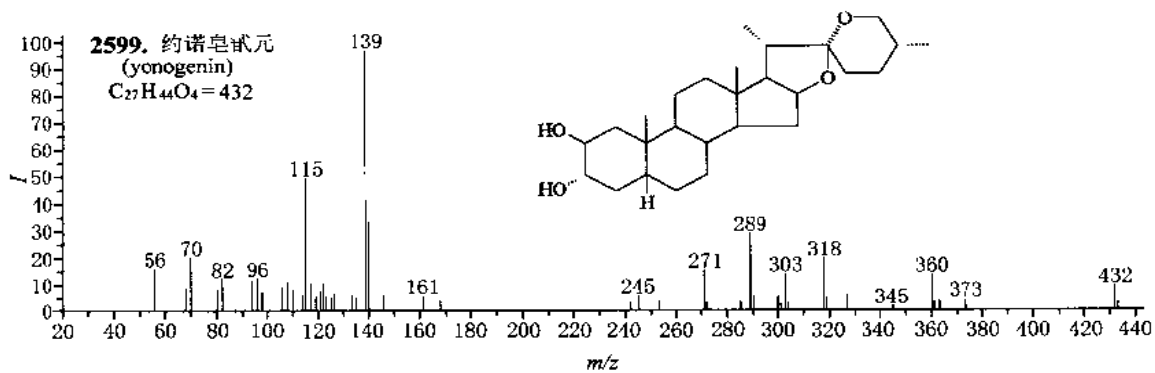
且仍然是基峰。

以上化合物的中质量区都有些较强离子，但裂解复杂，特征性不强，在此略去不谈。

(3)  $C_{12}$ 有羰基的甾族皂甙元(2600)都有  $M-CO$  离子，丰度在10%以上。 $C_3$ 羰基者失去一氧化碳的丰度不大。



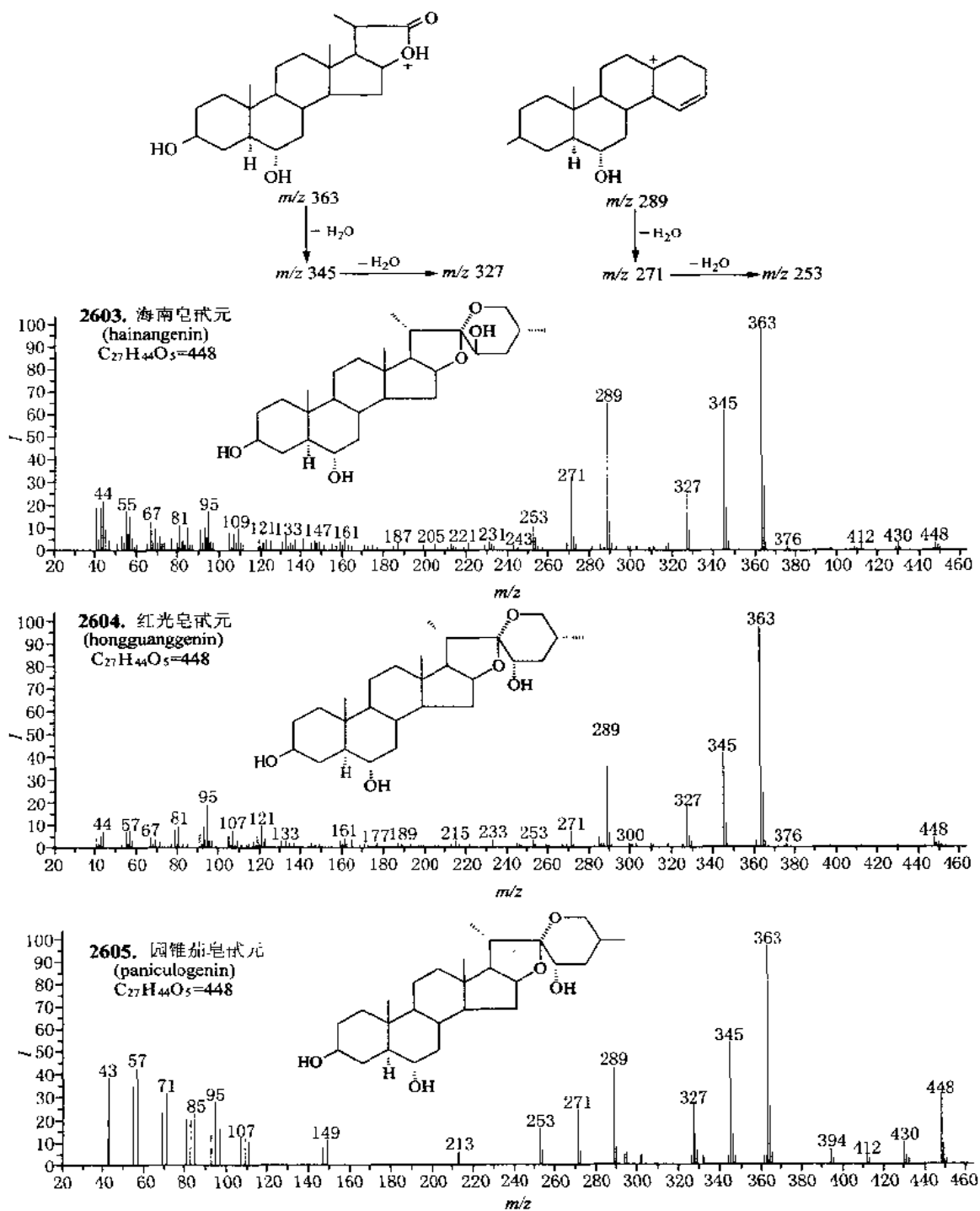






二、 $C_{23}$ 羟基甾族皂甙元类

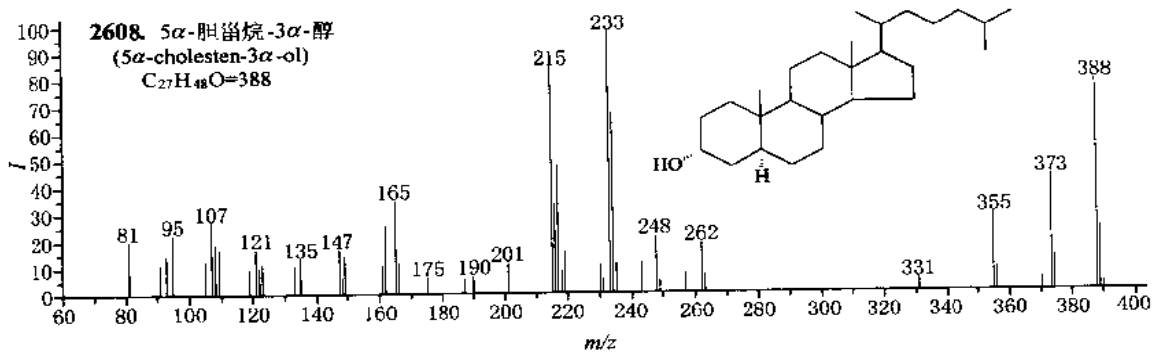
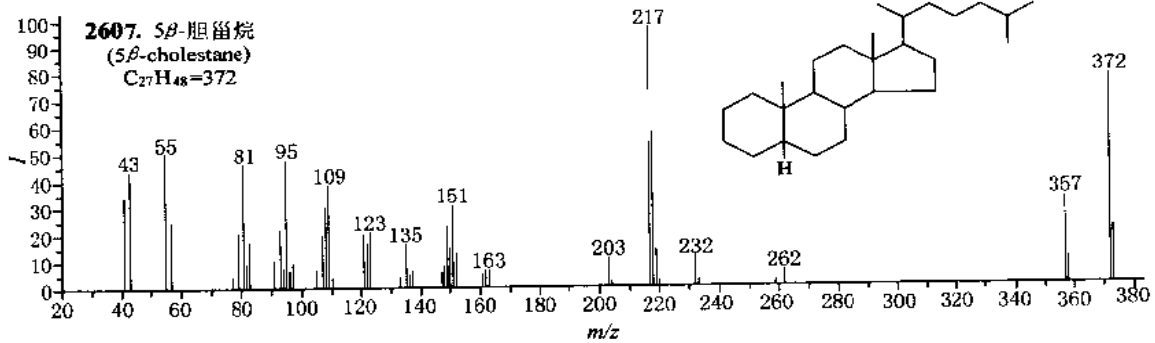
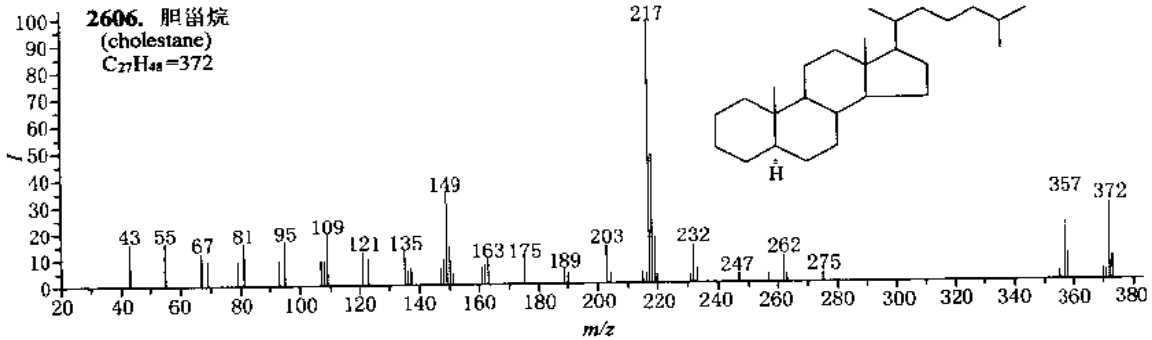
这类化合物 (2603~2605) 由于  $C_{23}$  羟基的存在, 裂解完全不同, 它们有两套离子, 即  $m/z$  363、345、327 和  $m/z$  289、271、253。

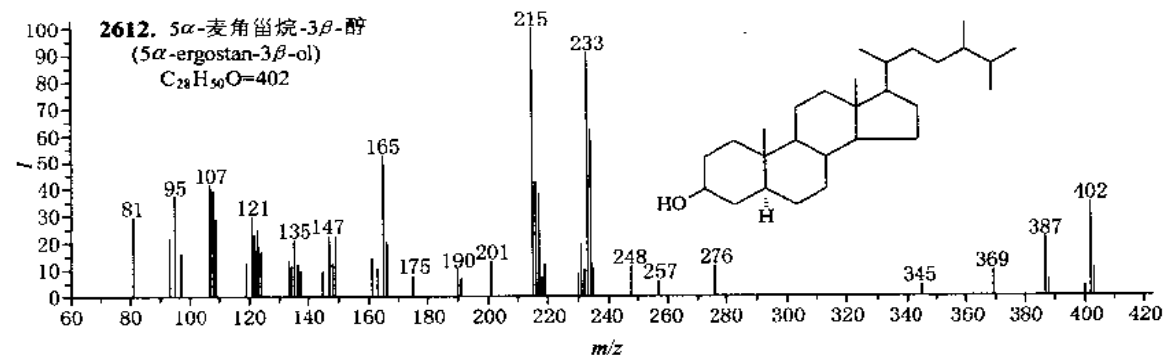
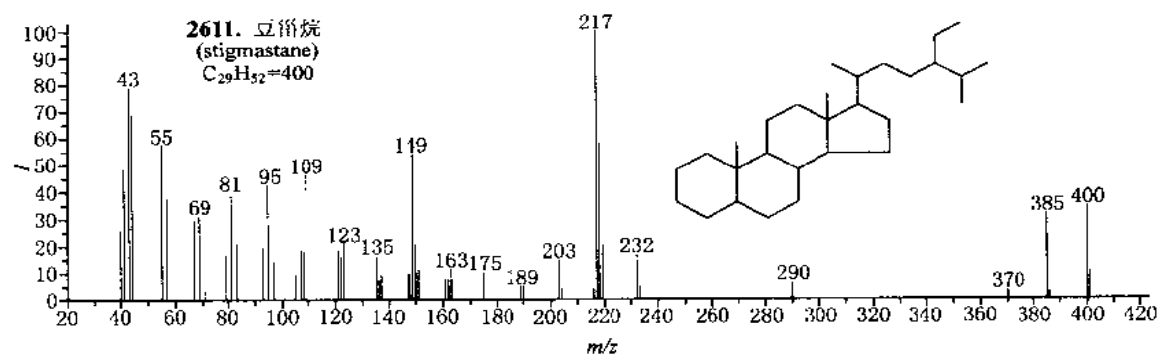
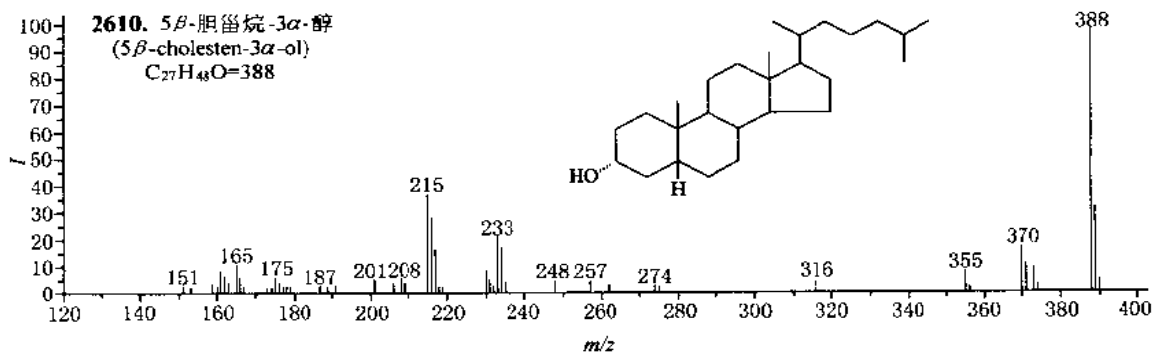
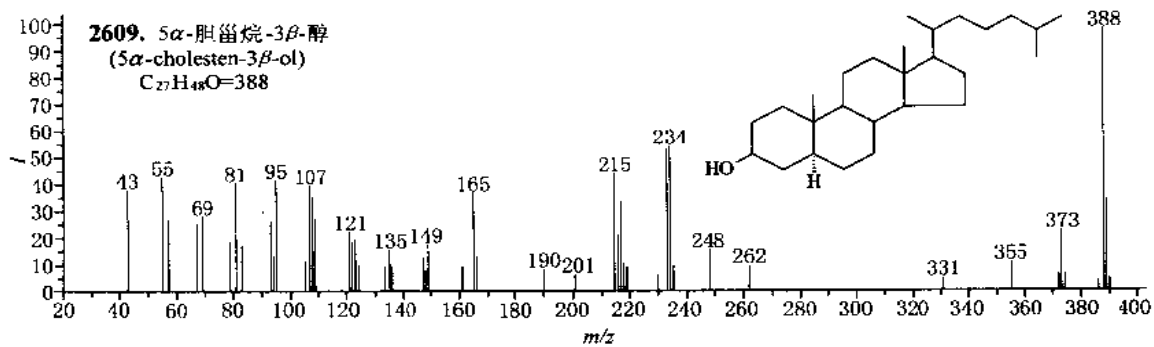


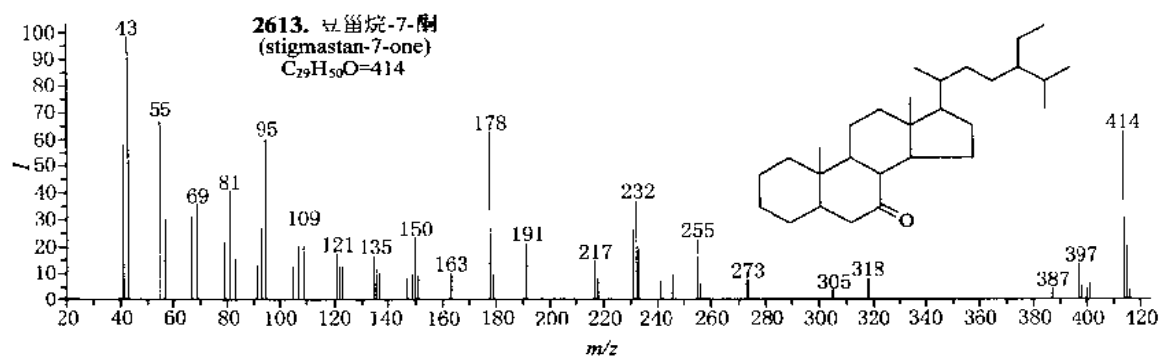
## 第六节 甾醇类

## 一、甾烷类

这类化合物 (2606~2613) 的主要特征离子来自失去侧链和 D 环的 3 个碳原子, 基本产物是  $m/z$  218 和  $m/z$  217。若  $C_3$  有羟基取代则移位到  $m/z$  234 和  $m/z$  233,  $C_7$  羰基化合物移到  $m/z$  232 和  $m/z$  231。这些裂解与孕甾烷类的裂解一致。

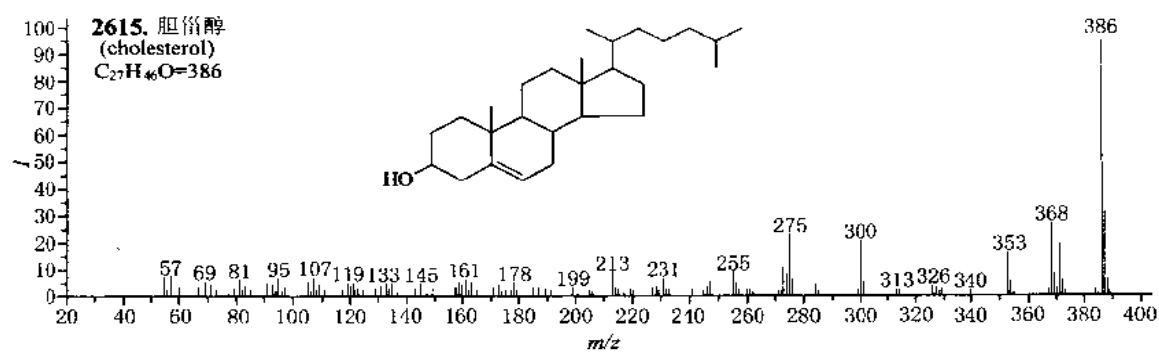
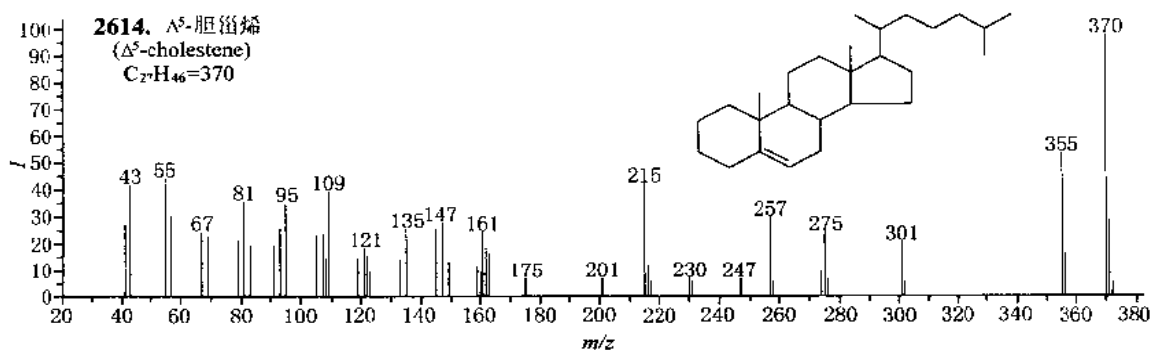


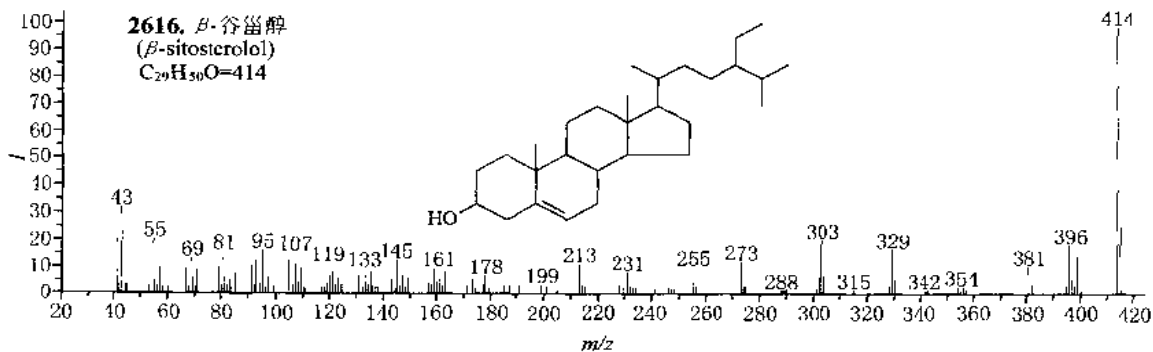




## 二、 $\Delta^5$ -甾烯类

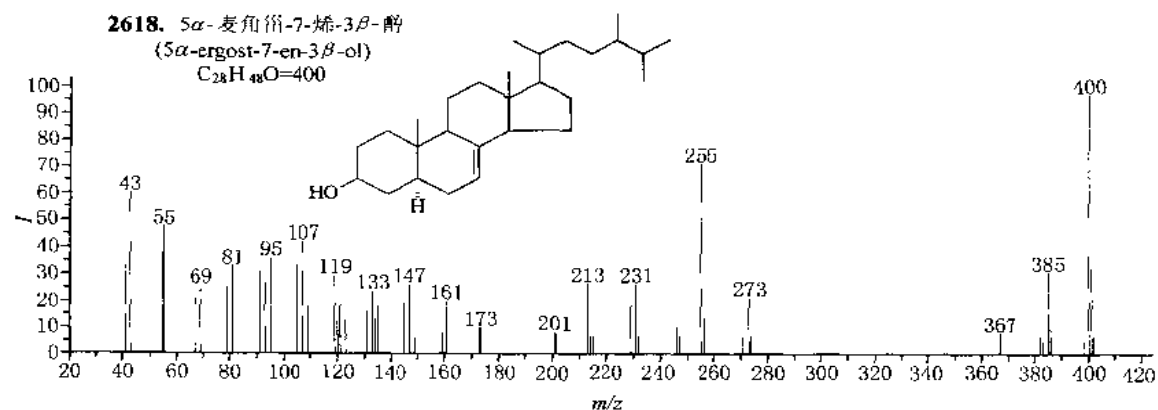
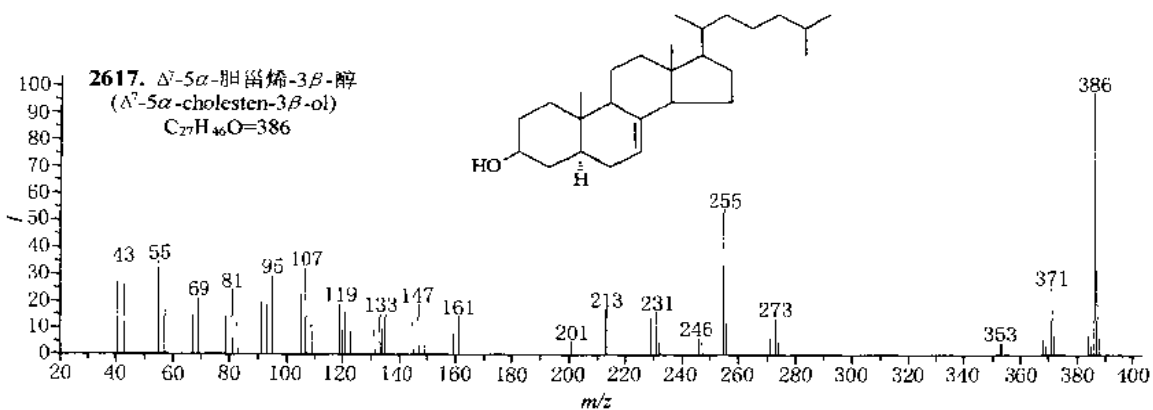
这类化合物 (2614~2616) 的上述离子移位到  $m/z$  216 和  $m/z$  215,  $C_3$  有羟基取代者虽然移到  $m/z$  232 和  $m/z$  231, 但大多太弱, 以致只能看到  $m/z$  231 的小峰。这类化合物失去侧链的离子多数较强。





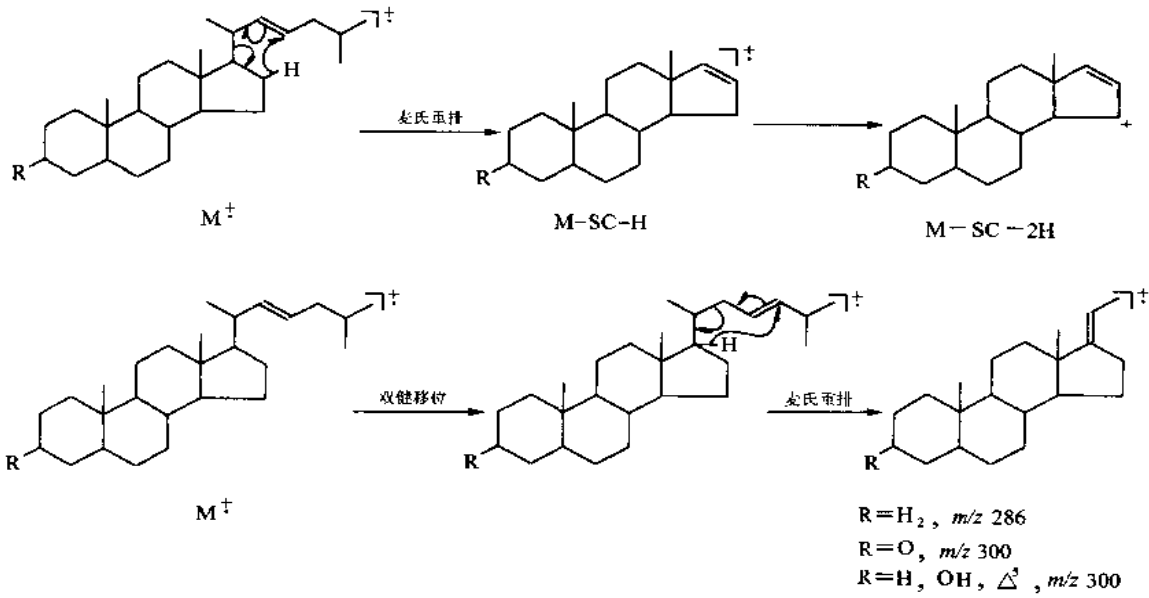
### 三、 $\Delta^7$ -3-羟基甾醇类

$\Delta^7$ -3-羟基甾醇类 (2617, 2618) 的  $M-SC$  (侧链) 和  $M-SC-H_2O$  离子较强。

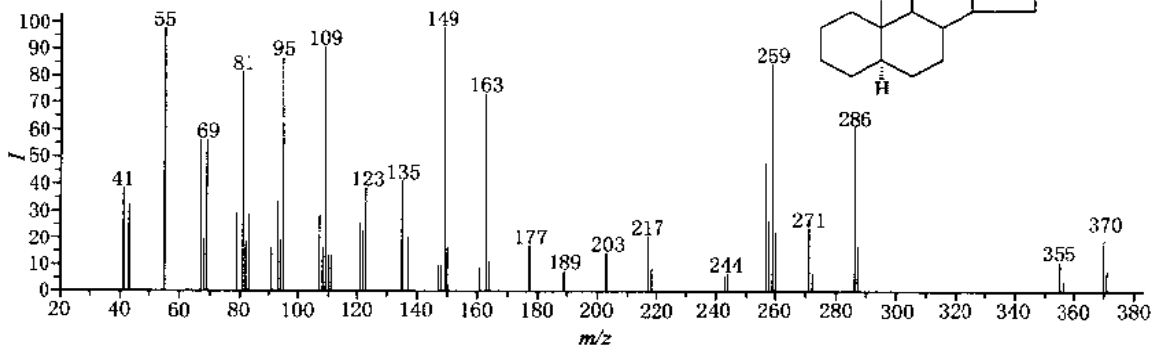


### 四、 $\Delta^{22}$ -甾烯类

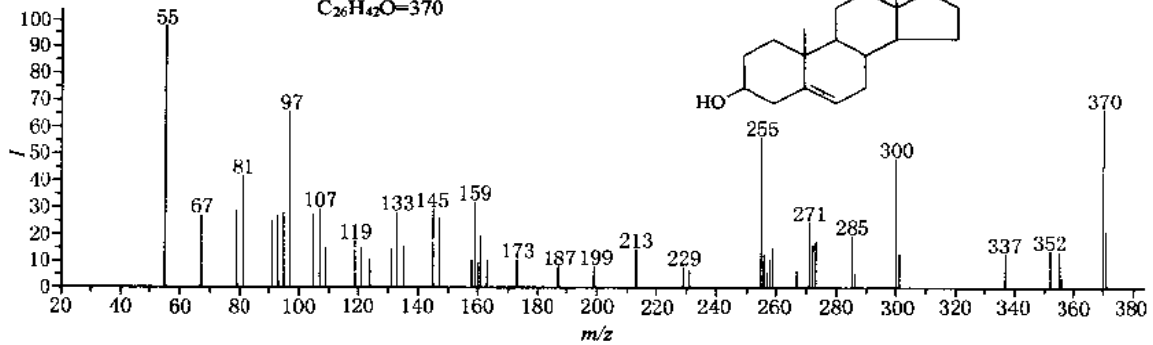
这类化合物 (2619~2625) 都有  $M-SC$ ,  $M-SC-H$ ,  $M-SC-2H$  和  $M-SC-H_2O$  离子。 $M-SC-H$  离子是  $C_{22}$  双键直接进行麦氏重排的产物。另一特征离子来自  $C_{22}$  双键先移到  $C_{23}$  和  $C_{24}$  之间, 然后进行麦氏重排产生的:

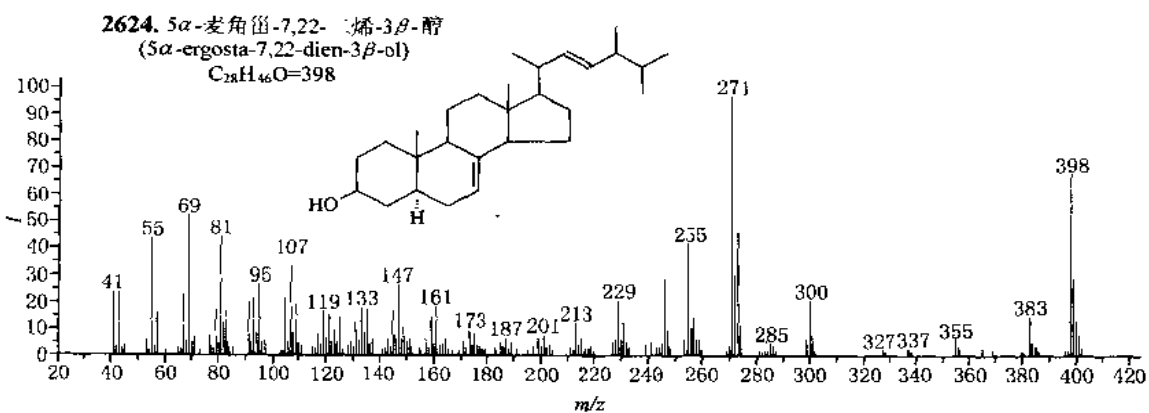
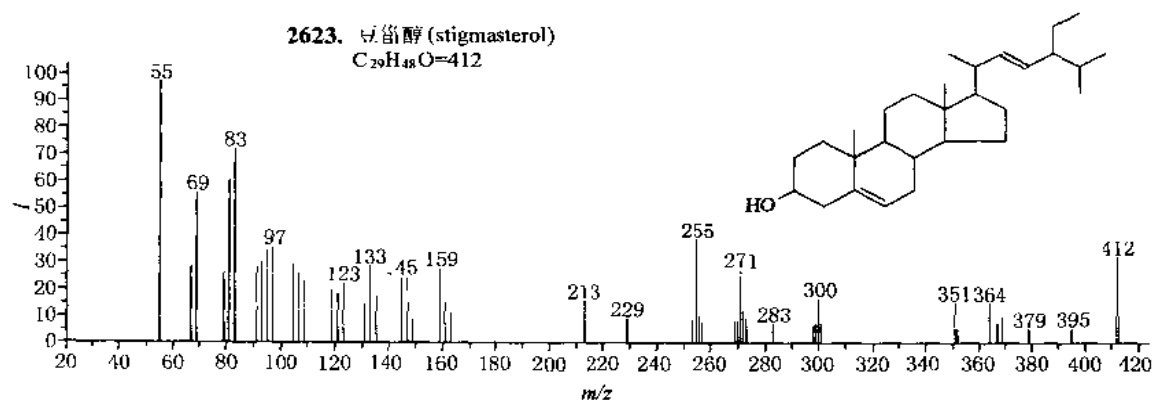
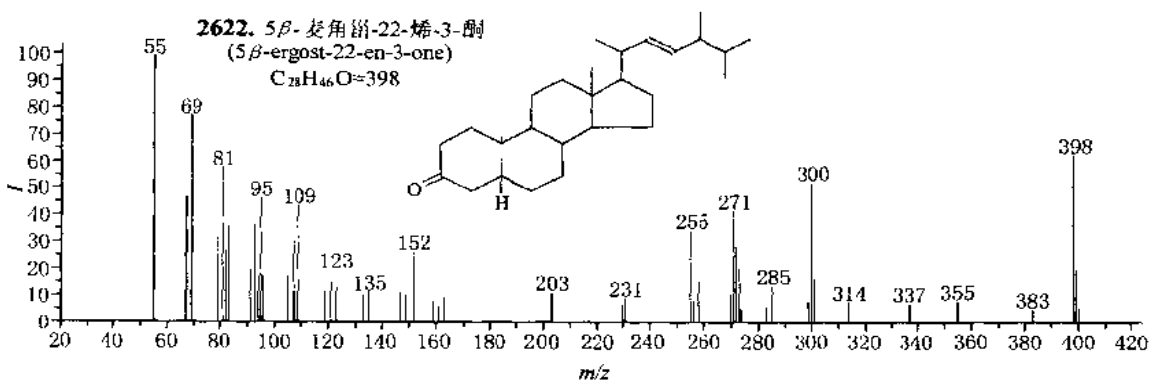
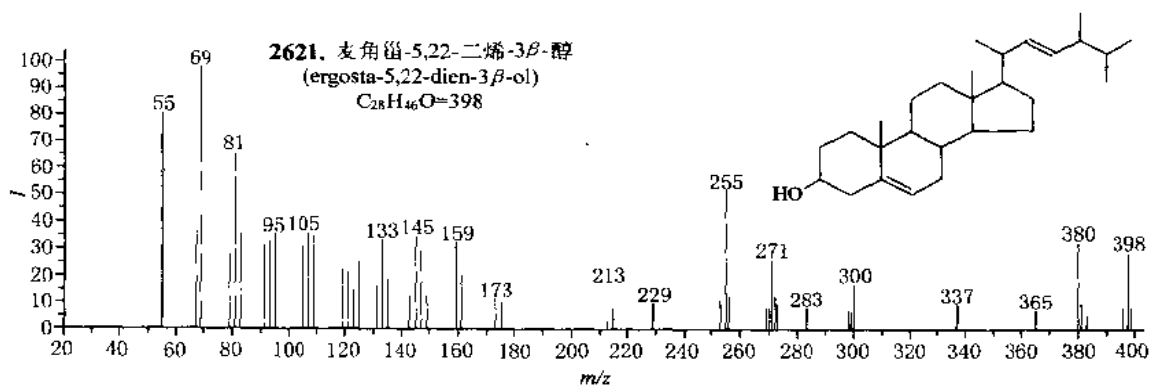


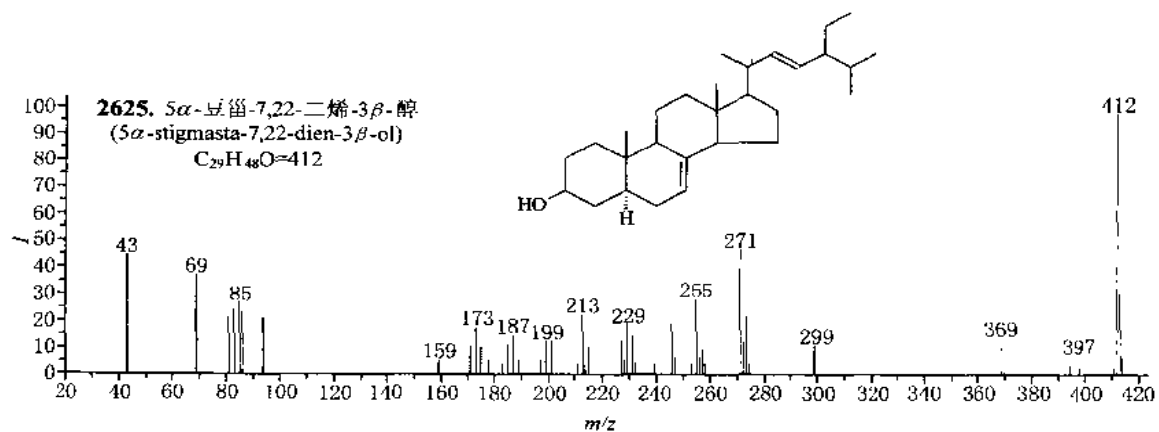
2619.  $\Delta^{22}$ -5 $\alpha$ -胆甾烯 ( $\Delta^{22}$ -5 $\alpha$ -cholestene)  
 $C_{27}H_{46}=370$



2620. 24-降胆甾-5,22-二烯-3 $\beta$ -醇  
 (24-norcholesta-5,22-dien-3 $\beta$ -ol)  
 $C_{26}H_{42}O=370$

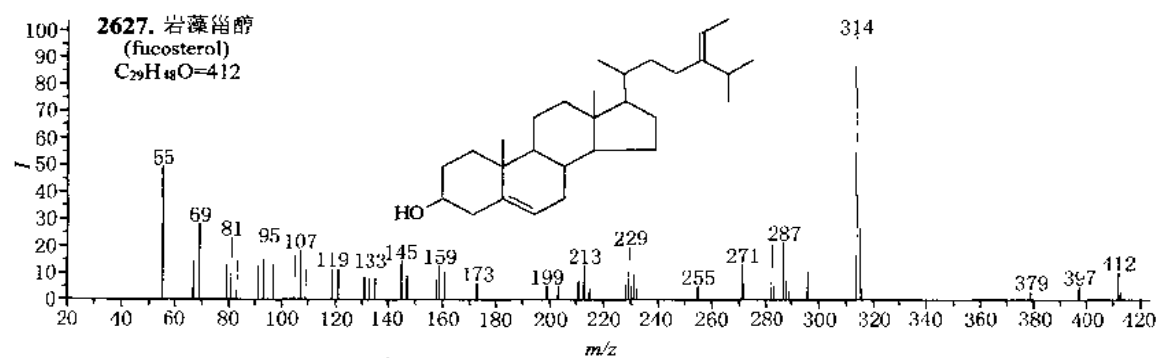
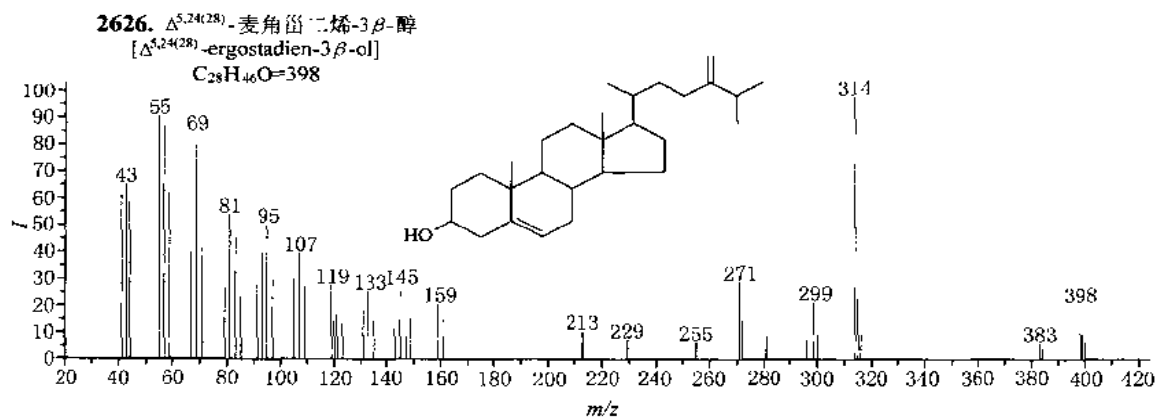






### 五、 $\Delta^{24(28)}$ -甾烯类

这类化合物 (2626, 2627) 的侧链双键可直接进行麦氏重排裂解失去部分侧链得基峰  $m/z$  314。

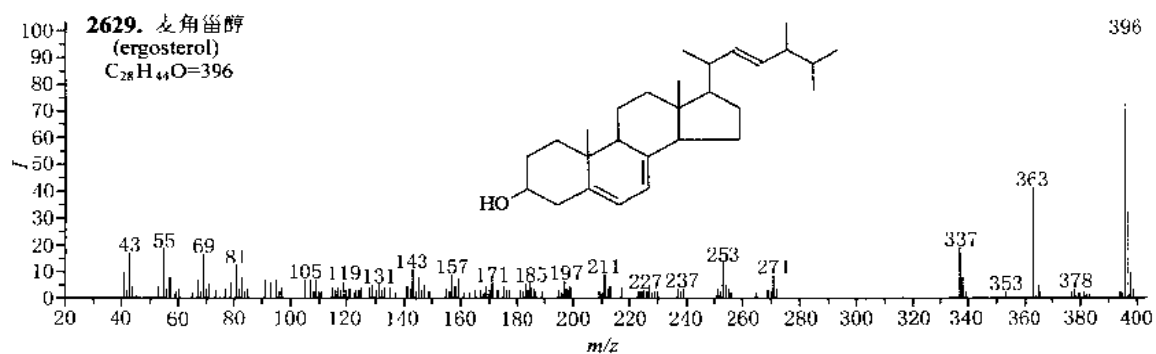
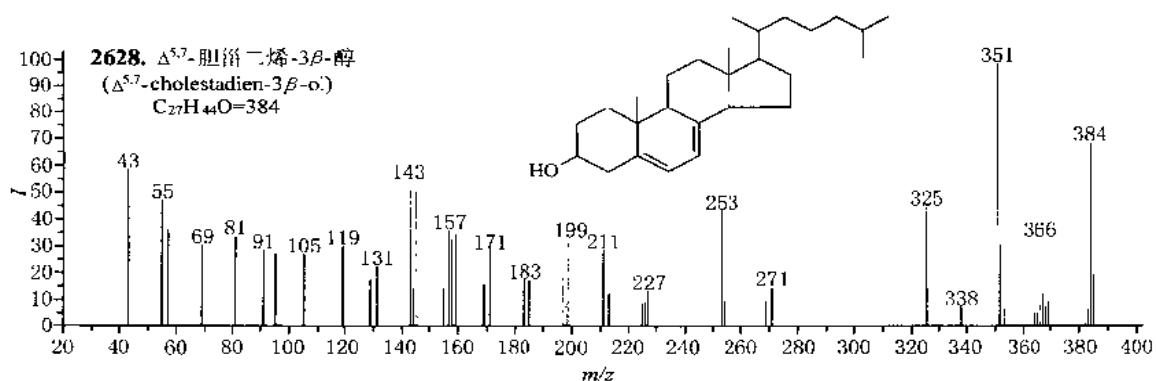


### 六、 $\Delta^{5,7}$ -甾二烯类

这类化合物 (2628, 2629) 有两组重要离子, 即  $M-H_2O$ ,  $M-H_2O-CH_3$  和  $M-SC$ ,

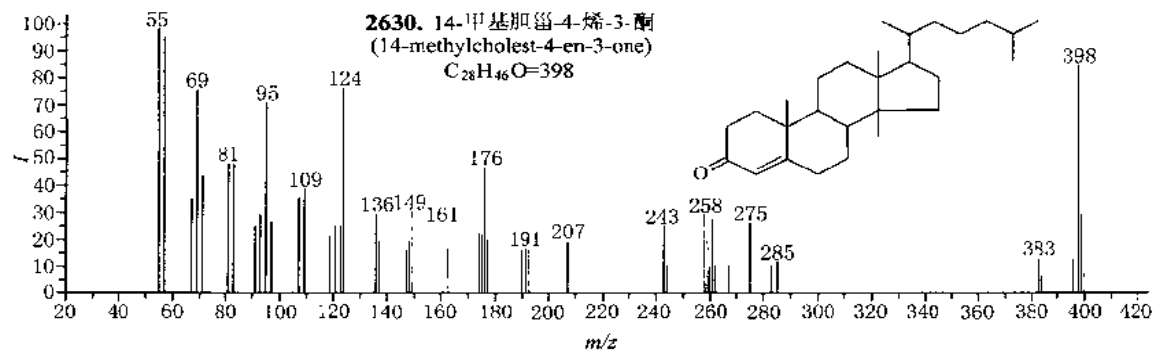


M-SC-H<sub>2</sub>O, 另有一离子 M-59, 裂解机制尚不清楚。



### 七、 $\Delta^4$ -3-酮类

这类化合物 (2630) 仍有强峰  $m/z$ 124, 已于前述。

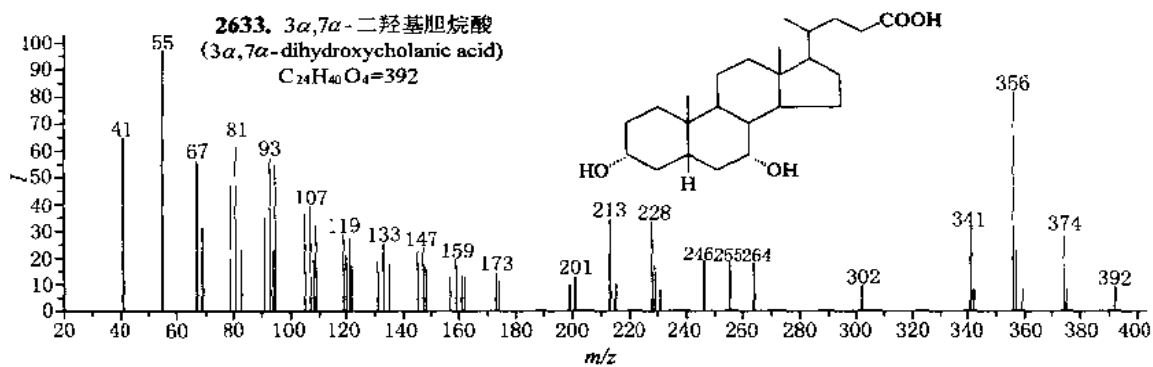
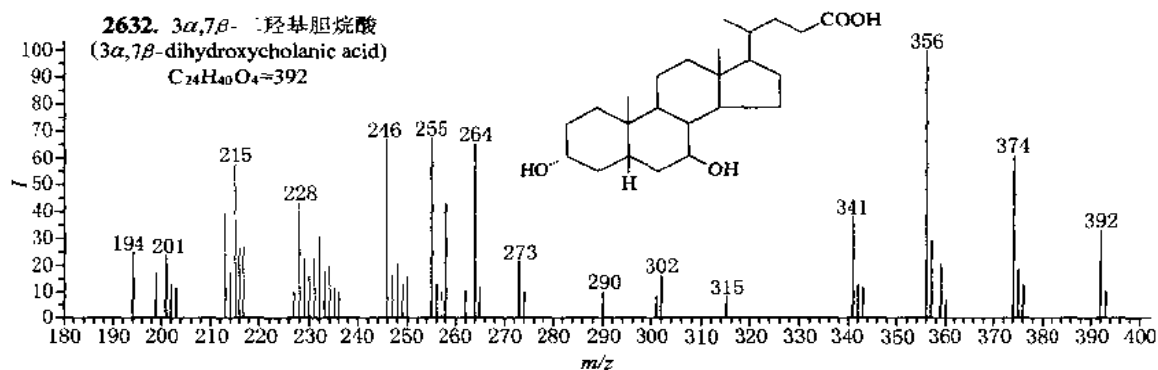
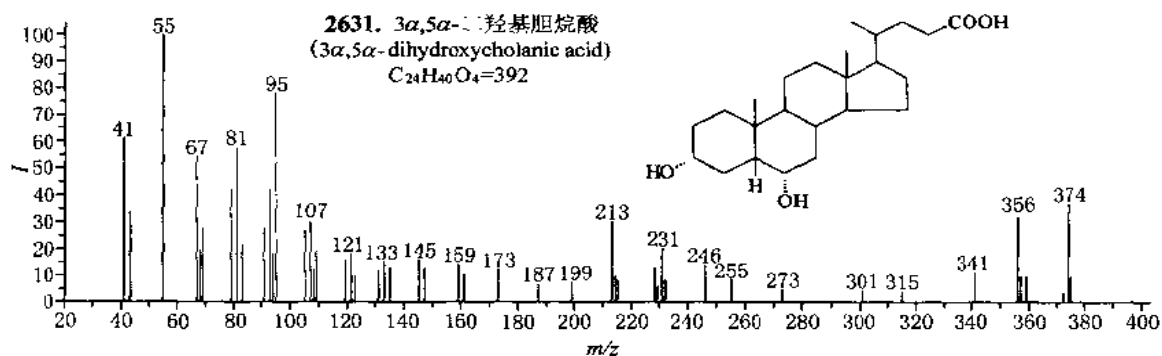


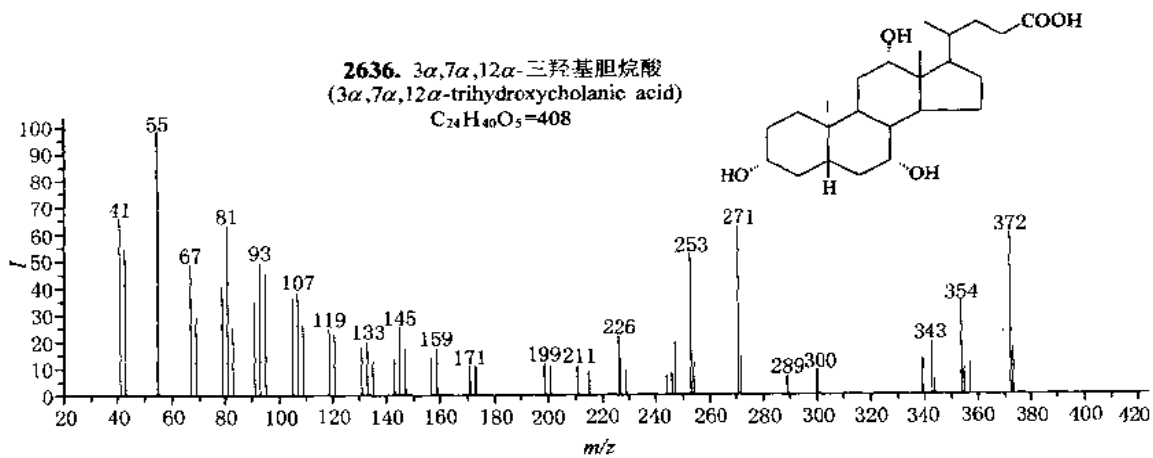
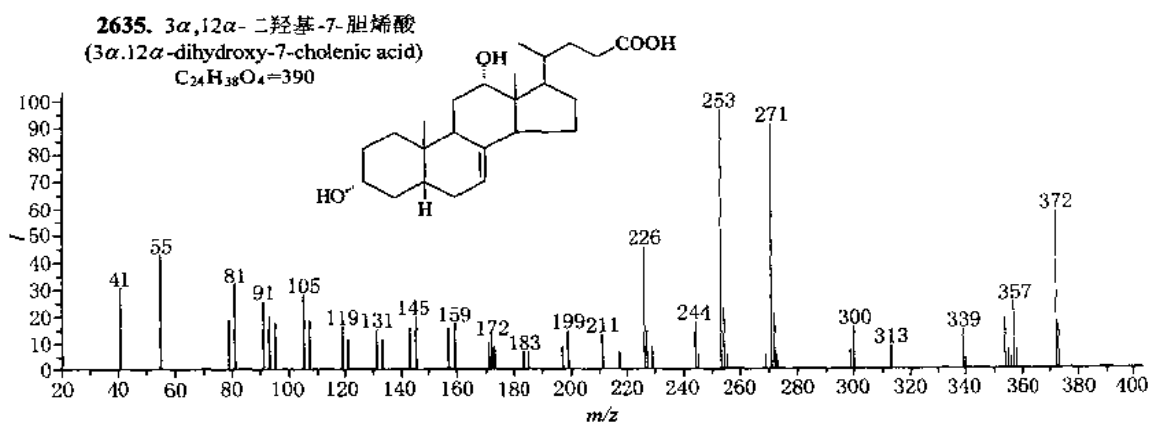
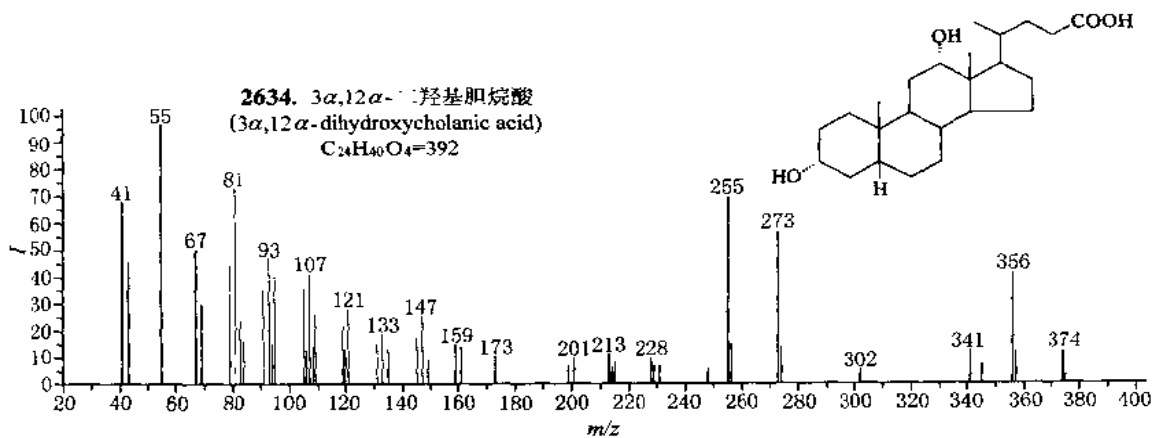
## 第七节 胆酸类

(1) C<sub>3</sub>、C<sub>6</sub> 或 C<sub>3</sub>、C<sub>7</sub> 二羟基胆酸类 (2631~2633) 主要裂解途径是 M-H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O-SC-C<sub>3</sub>H<sub>5</sub> (或 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>), 另有 3 个离子  $m/z$  264、246 和  $m/z$  228, 离子  $m/z$  264 是分子离子失去侧链和 C<sub>16</sub>、C<sub>17</sub>, 再依次失去两分子水即得后者。

(2) C<sub>3</sub>、C<sub>12</sub> 二羟基胆酸类 (2634, 2635) 的主要裂解途径是 M-H<sub>2</sub>O-SC-H<sub>2</sub>O。

(3)  $C_3$ 、 $C_7$ 、 $C_{12}$ 三羟基胆酸类 (2636) 的主要裂解途径是  $M-H_2O-H_2O-SC$  和  $M-H_2O-H_2O-SC-H_2O$ 。



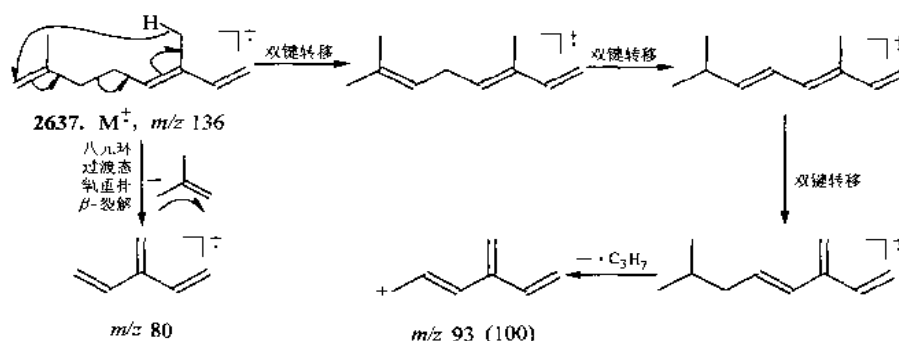


## 第二十一章 萜类化合物

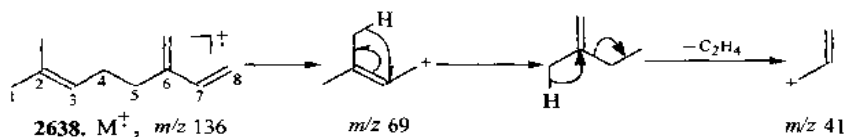
### 第一节 单萜类

#### 一、无环单萜类

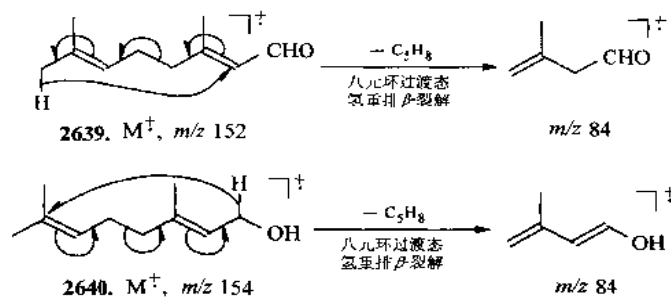
(1) 反式罗勒烯 (2637) 的基峰是离子  $m/z$  93, 这是分子离子的 1,2-双键向分子内部重排转移后失去  $C_3H_7$  的产物。另有一离子  $m/z$  80, 是个偶数质量的离子 (偶数质量的离子总是要引起人们的注意), 可用八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解未解释:



(2) 月桂烯 (2638)、香橙醛 (2639)、香橙醇 (2640)、异牻牛儿醇 (2641)、 $\gamma$ -异牻牛儿醇 (2642)、香茅醛 (2643) 和香茅醇 (2644) 的离子  $m/z$  69 和  $m/z$  41 很强, 前者包括  $C_1 \sim C_4$  及 1 个取代甲基, 为直接烯丙裂解的产物, 后者来自前者重排失去乙烯, 从化合物 2638 为例:

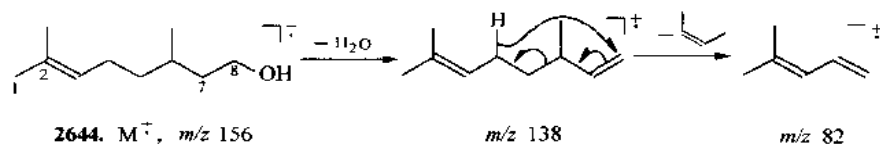


(3) 香橙醛 (2639) 和香橙醇 (2640) 中的离子  $m/z$  84 都来自八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解, 但前者的氢是由左向右转移的, 后者的氢是由右向左转移的:

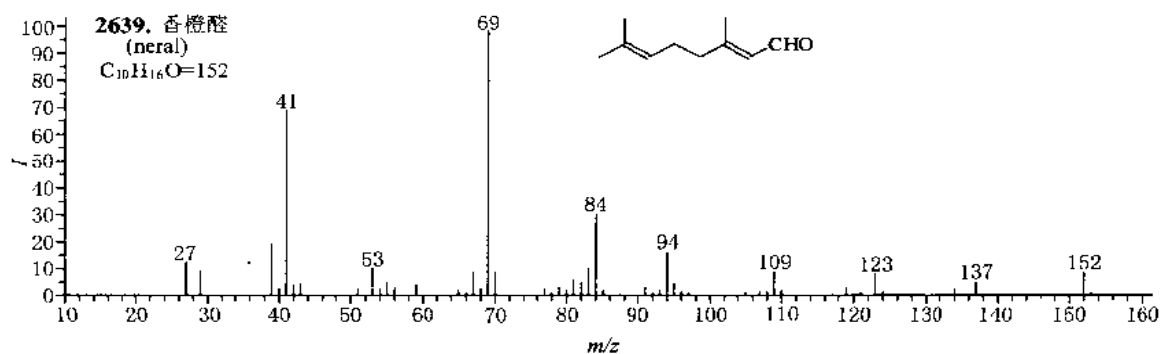
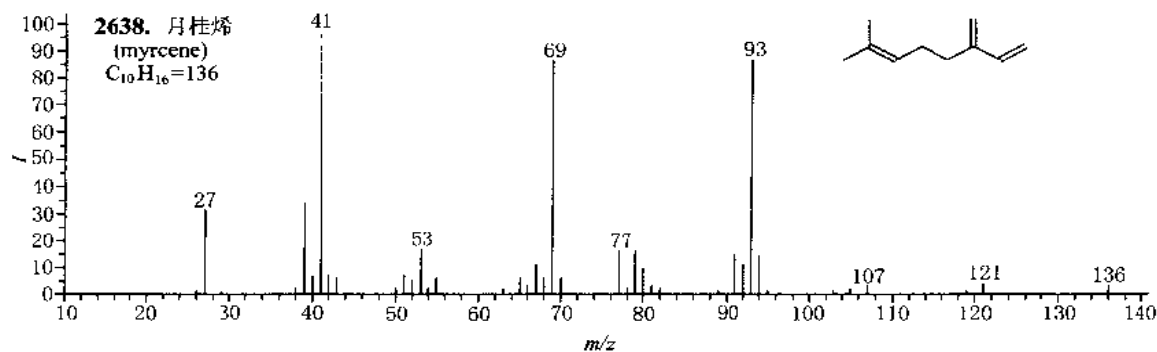
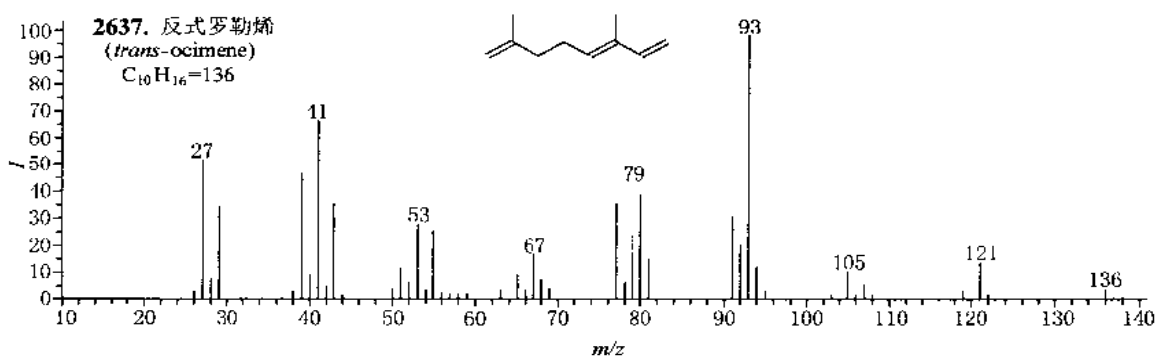


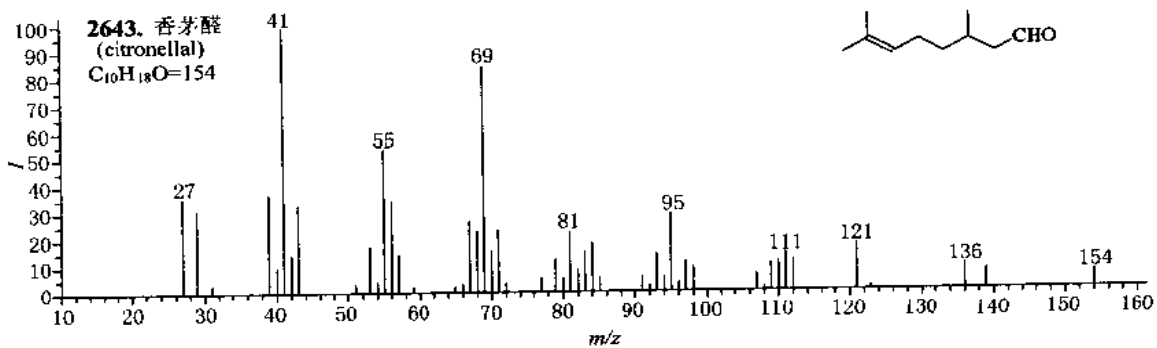
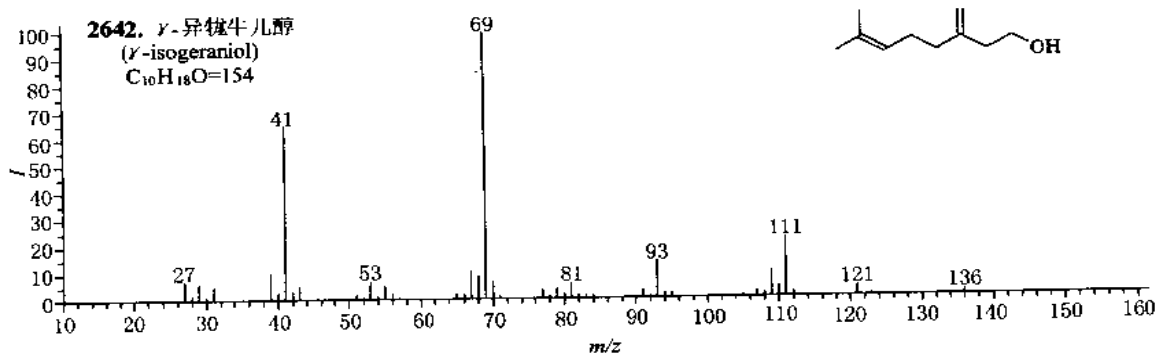
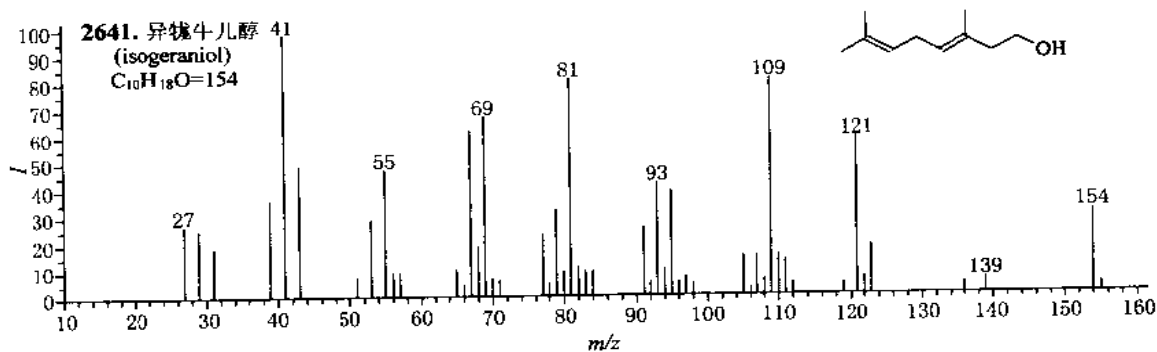
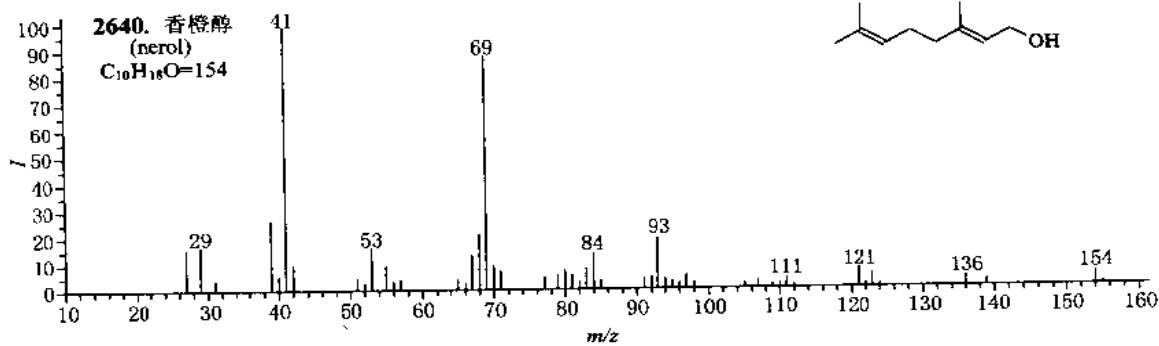
(4) 异牻牛儿醇 (2641) 和  $\gamma$ -异牻牛儿醇 (2642), 结构上差别不大, 但质谱差别很大, 前者有  $M-CH_2CH_2OH$  离子为其特征, 后者则没有什么特征离子, 差别的原因尚不清楚。

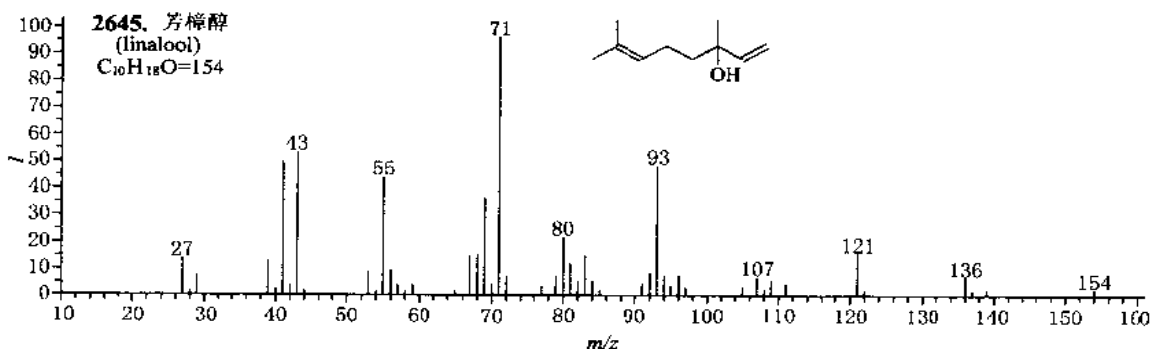
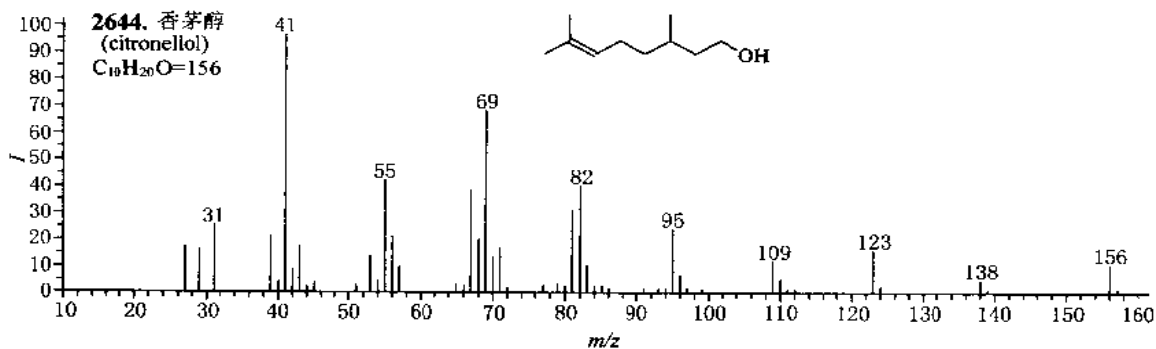
(5) 香茅醛 (2643) 和香茅醇 (2644) 都有几个偶数质量的离子, 前者有离子  $m/z$  110 ( $M-44$ ), 84 ( $M-70$ ) 和 56 ( $M-70-CO$ )。离子  $m/z$  110 来自醛羰基的麦氏重排裂解,  $m/z$  84 来自  $C_2$ 、 $C_3$  双键的麦氏重排裂解, 然后失去  $-CO$  得离子  $m/z$  56; 后者的离子  $m/z$  82 来自  $M-H_2O$  离子  $m/z$  138 形成  $C_7$ 、 $C_8$  双键后进行麦氏重排失去  $C_4H_8$  后产生:



(6) 芳樟醇 (2645) 的离子  $m/z$  71 为基峰, 这是羟基的  $\alpha$ -裂解、双键的烯丙裂解及多分支裂解的产物, 这个离子含有  $C_6$ 、 $C_7$ 、 $C_8$  及其羟基和甲基取代基。





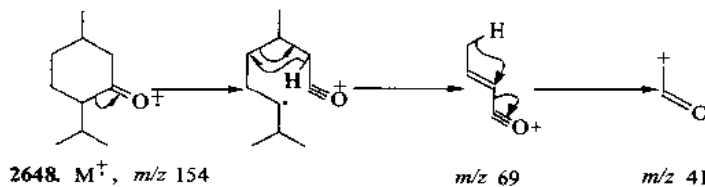


## 二、单环单萜类

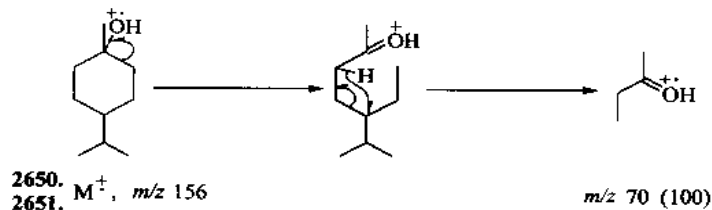
### 1. 薄荷烷类

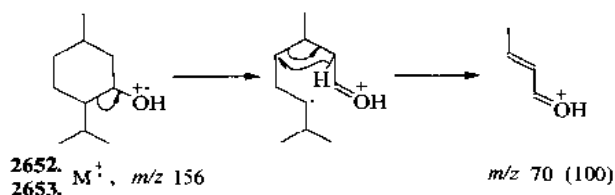
薄荷烷 (2646) 类的主要裂解是  $M-C_3H_7-H$  和  $M-C_3H_7-C_3H_6$ 。

薄荷酮类 (2647~2649) 的裂解是  $M-C_3H_7$  或  $M-CH_2CO$ ，离子  $m/z$  69 可能具有  $CH_3CH=CHC=O^+$  的结构，再失一氧化碳即得离子  $m/z$  41，例：



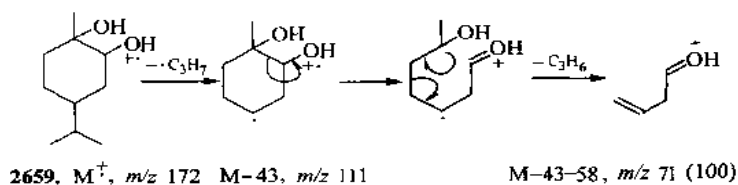
$C_1$  或  $C_3$  薄荷单元醇类 (2650~2653) 除了  $M-CH_3$ ,  $M-H_2O$ ,  $M-CH_3-H_2O$  等离子外，都有离子  $m/z$  95、81 和  $m/z$  71，离子  $m/z$  95 可解释为  $M-H_2O-C_3H_7$ ， $m/z$  81 可解释为  $M-H_2O-CH_2-C_3H_6$ ，离子  $m/z$  71 为  $C_4H_7O$ ，产生方式可能为：



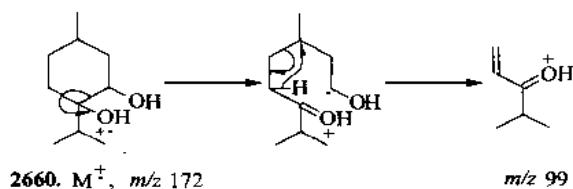


薄荷烷-4-醇 (2654) 很易失去异丙基, 因为  $C_4$ 、 $C_8$  键是非常活泼的化学键, 再进一步裂解才是  $M-43$  失水。薄荷烷-7-醇 (2655) 的主要裂解是  $M-H-C_3H_7$ , 薄荷烷-8-醇 (2656) 只有一个强峰  $m/z$  59, 这是个羟异丙基离子。两个薄荷烷-9-醇 (2657 和 2658) 有一特征离子  $m/z$  96, 它来自  $M-CH_3\dot{C}HCH_2OH$  失氢, 若再失氢又得离子  $m/z$  95。

$C_1$ 、 $C_2$  薄荷二元醇 (2659) 的主要离子是  $M-C_3H_7$  和  $M-C_3H_7-C_3H_6O$ , 失去的  $C_3H_6O$  具有丙酮结构, 包括了  $C_1$ 、 $C_6$  和  $C_7$ :



$C_3$ 、 $C_4$  薄荷二醇 (2660) 的主要裂解是  $M-C_3H_7$  和  $M-C_4H_9O$ , 后者的产生过程可能是:



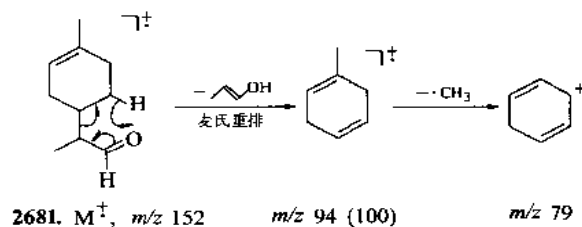
## 2. 薄荷单烯类

薄荷单烯类 (2661~2665) 的  $M-C_3H_7$  离子都很强, 双键在环内有适当位置时, 可进行 RDA 裂解, 有的则进行双键向环内转移后进行 RDA 裂解。

薄荷单烯醇类 (2666~2680) 的裂解取决于双键和羟基的位置, 具有  $C_1$ 、 $C_2$  和  $C_1$ 、 $C_6$  双键的化合物易进行六元环的 RDA 裂解, 生成的离子大多含有羟基 (图 2666~2670)。化合物 2669 因而形成羟异丙基离子  $m/z$  59, 所以 RDA 裂解只能生成离子  $m/z$  68。具有羟甲基的化合物 (图 2671~2676) 都有强度不大的  $M-CH_2OH$  离子, 要区别羟基究竟是在  $C_7$  还是在  $C_9$  上, 后者有  $M-CH_2CHCH_2OH$  或  $M-CH_2=C\dot{C}H_2OH$  离子, 即失去  $C_8$ 、 $C_9$ 、 $C_{10}$  和羟基; 前者则没有这样的离子。羟基在  $C_1$  位时, 离子  $m/z$  71 是基峰, 这个离子的结构在上述的化合物 2650 和 2651 中已经见到。羟基在  $C_2$  或  $C_3$ 、双键在  $C_8$ 、 $C_9$  之间的化合物, 没有特征性裂解, 许多离子的产生多经过重排 (图 2679, 2680)。

薄荷单烯醛酮类 (2681~2688) 与薄荷单烯醇类 2666~2680 的情形相似, 1-薄荷烯-9-醛 (2681) 的主要裂解是醛羰基的麦氏重排裂解, 而不是环己烯的 RDA 裂解:





辣薄荷酮 (2682) 的两个重要离子是  $M-C_3H_6$  和  $M-C_5H_{10}$ , 前者是失去异丙基但要转移 1 个氢原子, 后者为 RDA 裂解失去异戊烯。香芹烯酮 (2683) 和薄荷-4-烯-3-酮 (2684) 都是 RDA 裂解失去丙烯, 得基峰  $m/z 110$ , 然后失去甲基产生离子  $m/z 95$ , 两者的区别仅在于后者的  $M-CH_3$  离子更强些。其他化合物 (2685~2689) 都没有甚么有意义的裂解。

### 3. 薄荷二烯类

这类化合物 (2690~2697) 除柠檬烯 (2690) 能进行 RDA 裂解生成基峰  $m/z 68$  外, 其他化合物基本上没有特征性裂解, 主要离子都是失去或重排失去异丙基得离子  $m/z 93$ , 只是  $\alpha$ -松油烯 (2691) 的  $M-CH_3$  离子是基峰, 这是由于烯丙裂解所致。

薄荷二烯醛酮类 (2698~2701) 有  $C_1$ 、 $C_2$  或  $C_1$ 、 $C_6$  双键者一般都能进行 RDA 裂解失去  $C_5H_8$ , 生成离子  $m/z 82$ , 然后再失一氧化碳得离子  $m/z 54$ 。紫苏醛 (2700) 的 RDA 裂解则生成基峰  $m/z 68$  ( $C_5H_8$ ), 化合物 2701 因另外双键的影响, 这些离子较弱。

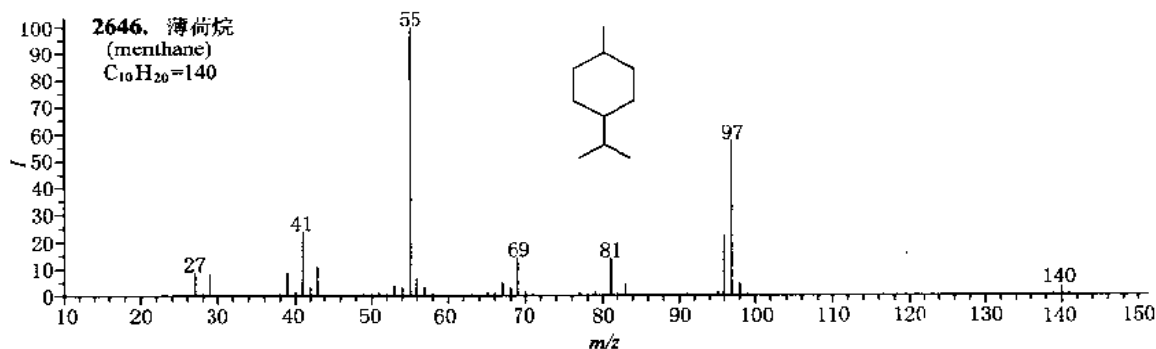
薄荷二烯醇类 (2702~2710) 的情形同上, 失去  $C_5H_8$  后生成的离子是  $m/z 84$ , 但  $C_7$  羟基者 (2704) 生成的是离子  $m/z 68$ 。两个双键都在环内、且有  $C_7$  羟基者, 都有弱离子  $M-CH_2OH$ , 并再失去  $C_3H_6$  得基峰  $m/z 79$ , 其结构与上述化合物 2681 中的  $m/z 79$  离子的相同或类似。1,8(10)-薄荷二烯-9-醇 (2709) 没有甚么特征性裂解。

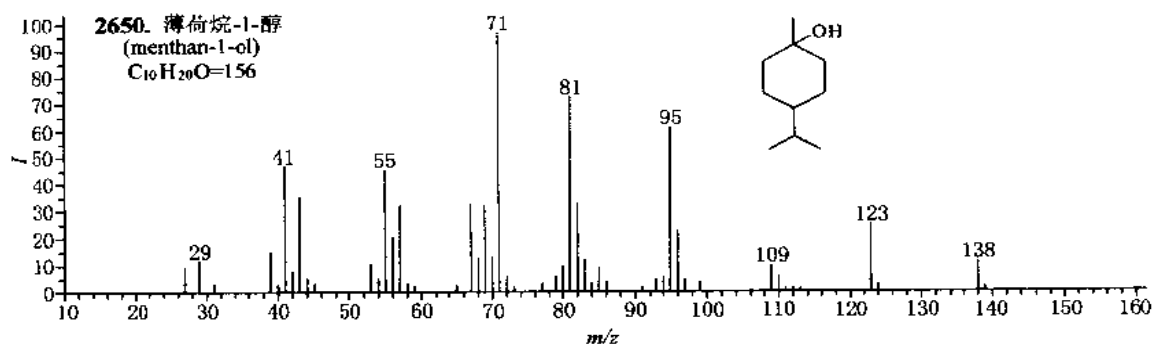
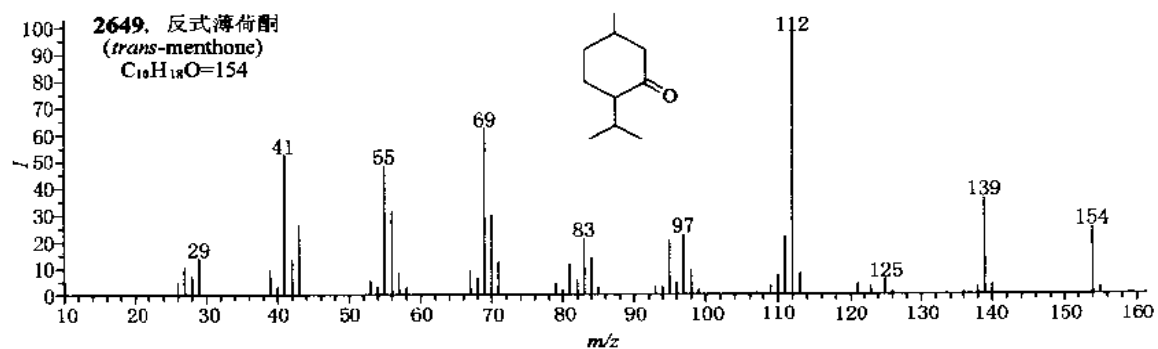
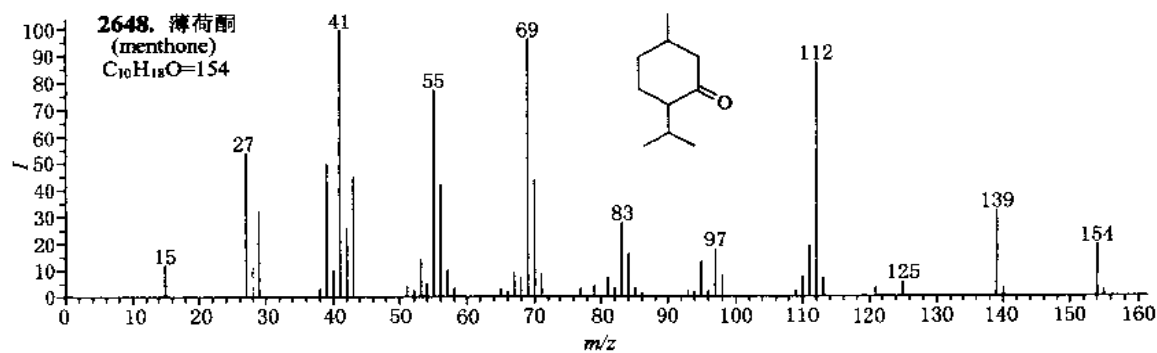
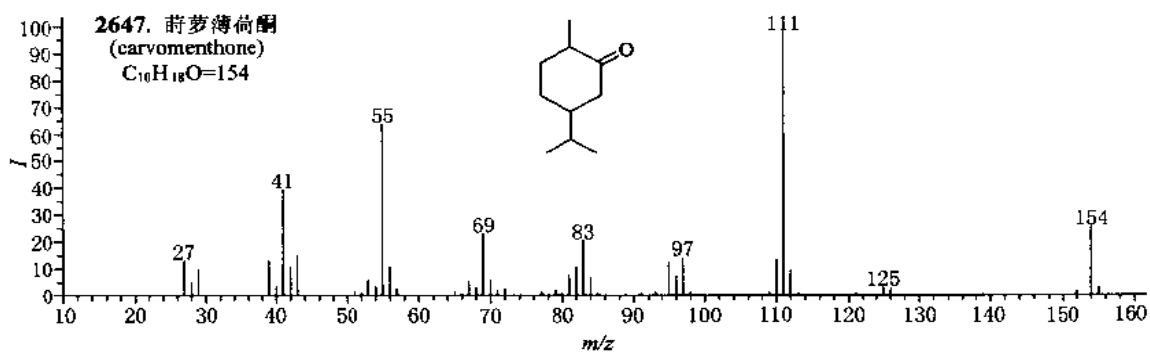
### 4. 薄荷多烯类

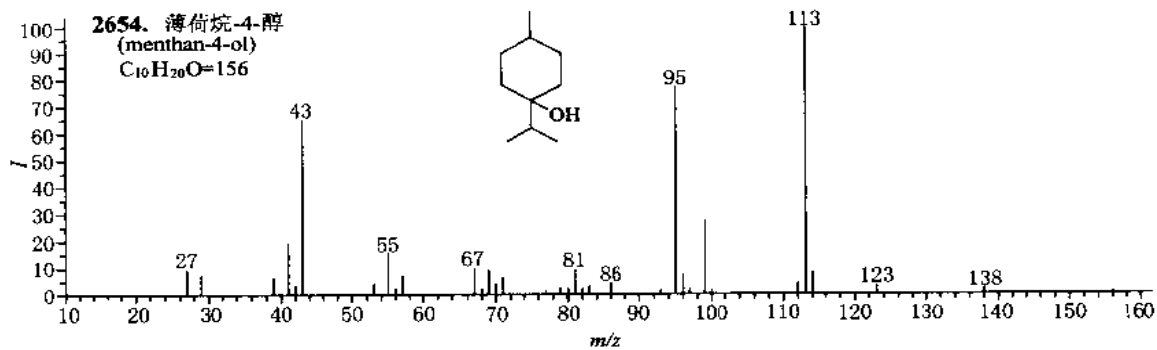
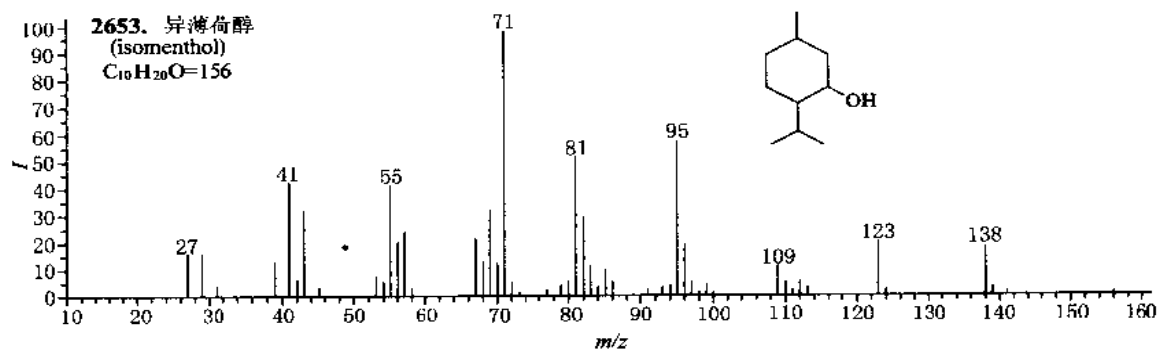
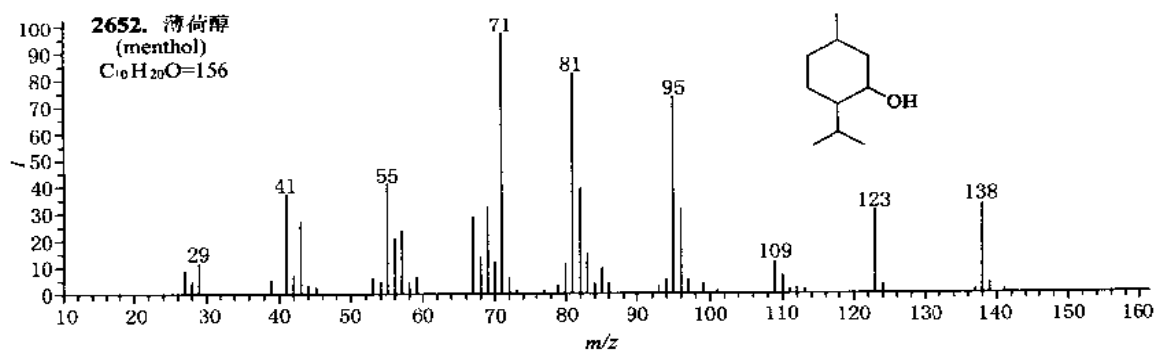
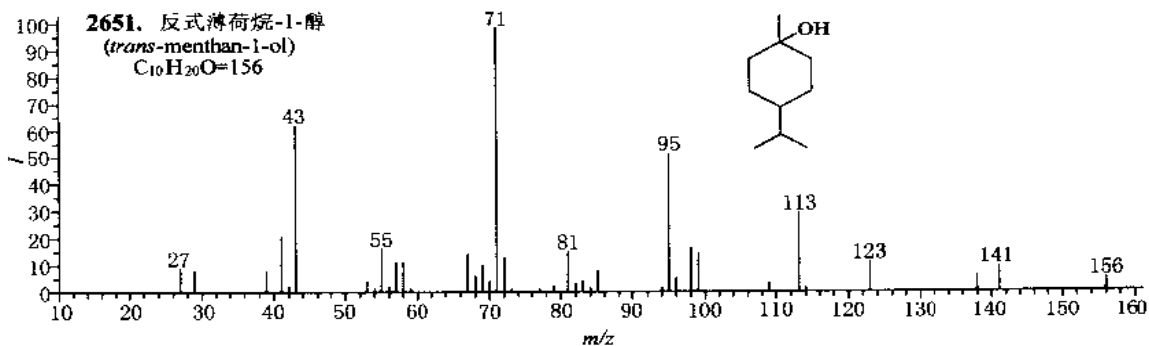
这类化合物 (2711~2715) 都有一个苯环, 因此其裂解是按照芳香化合物的裂解方式进行的, 例如都能进行苜基裂解自异丙基上失去甲基, 生成很强的  $M-CH_3$  离子, 然后进行其他裂解。

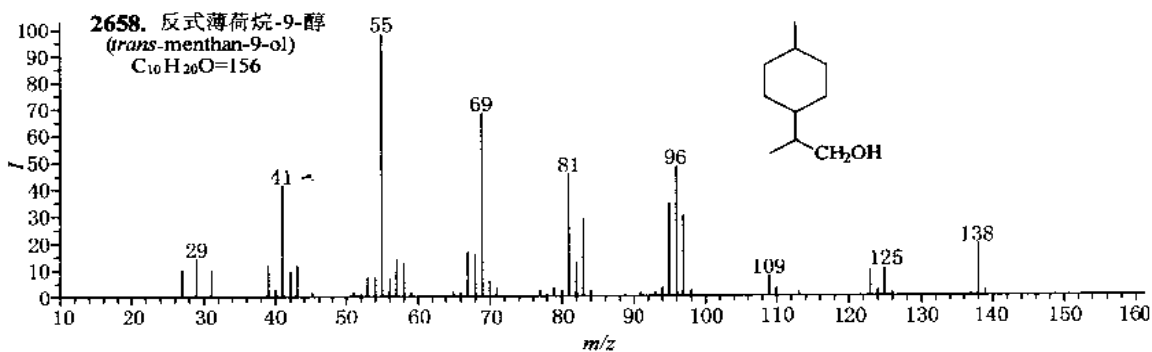
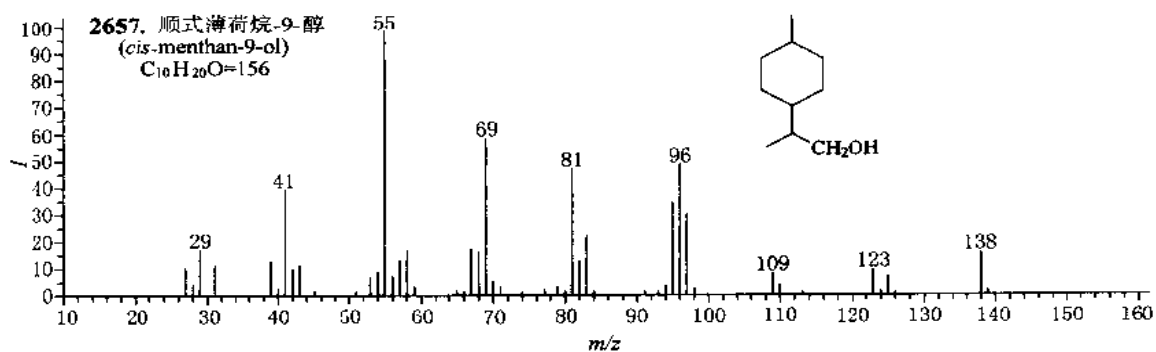
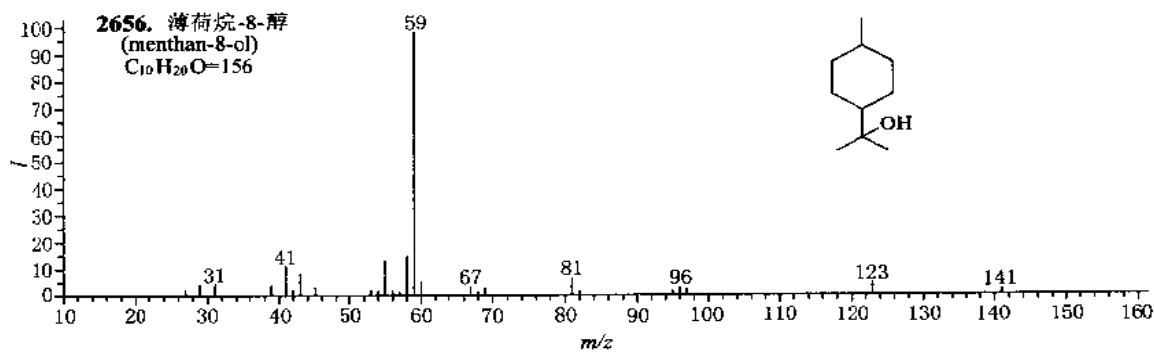
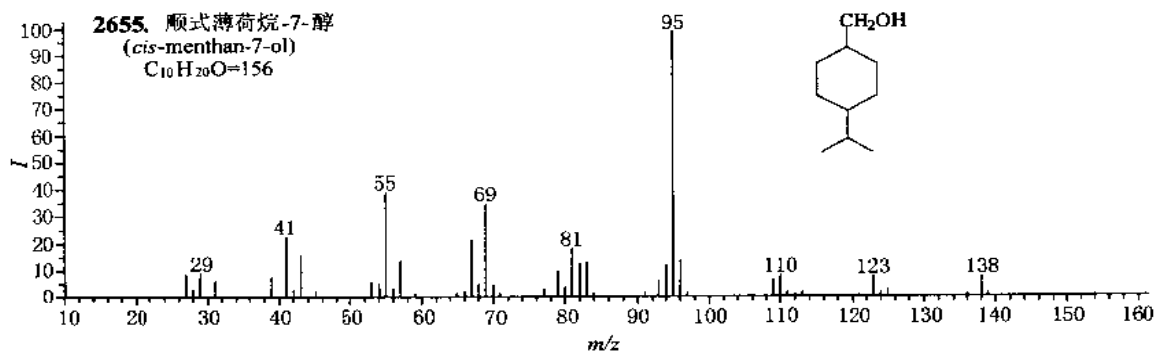
### 5. 薄荷内醚类

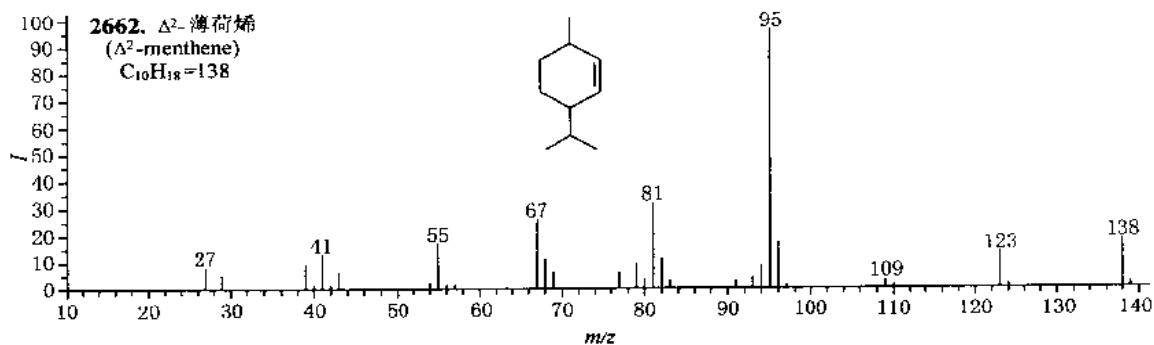
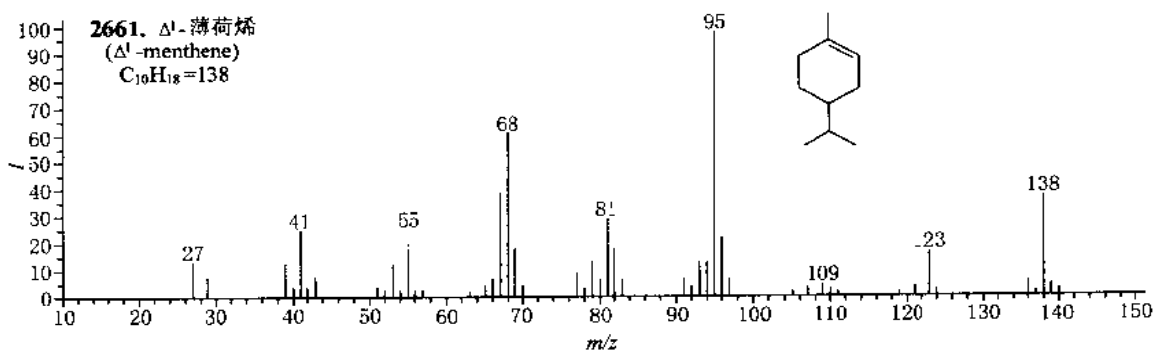
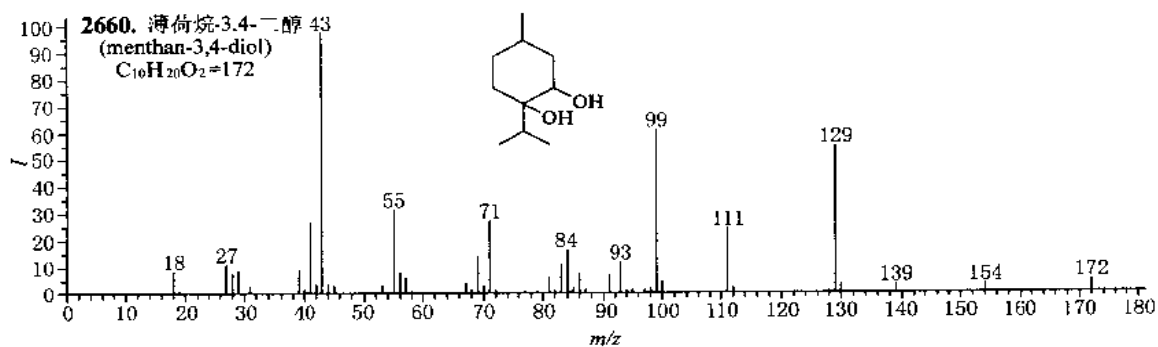
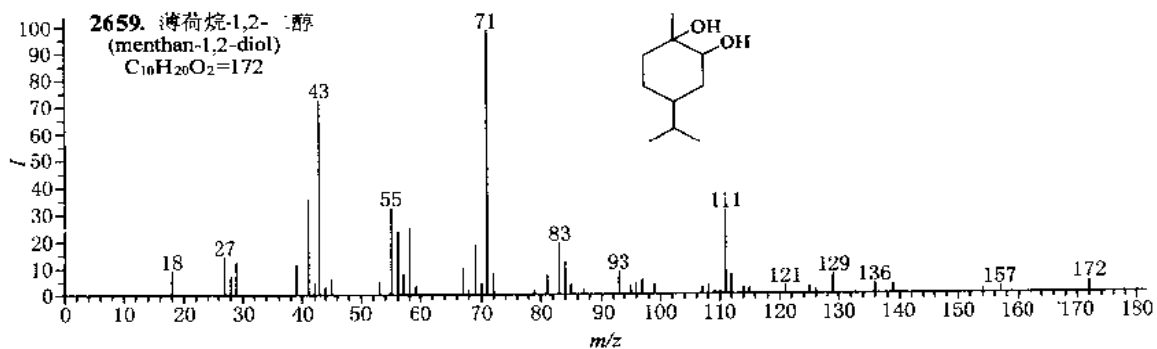
这类化合物只收集到 1,4-桉油精 (2716), 其主要裂解是失去异丙基。

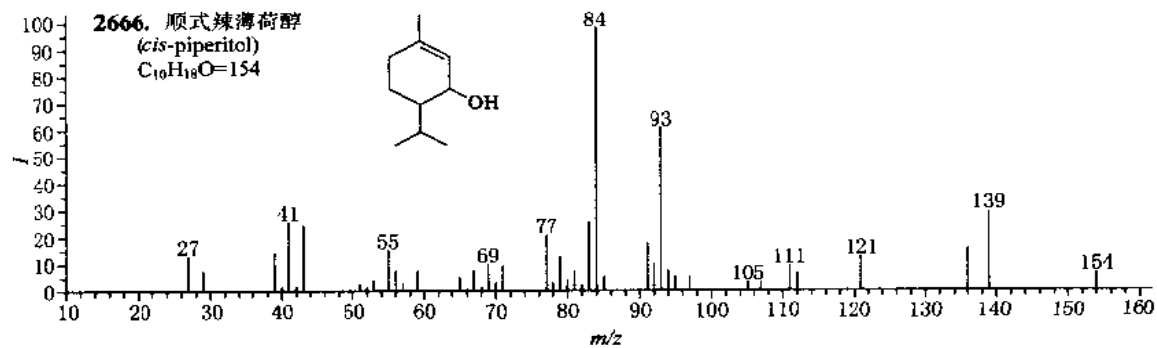
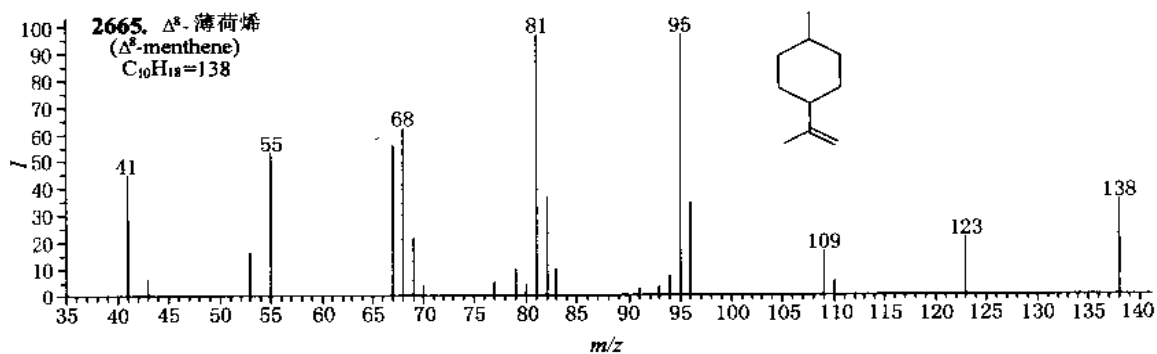
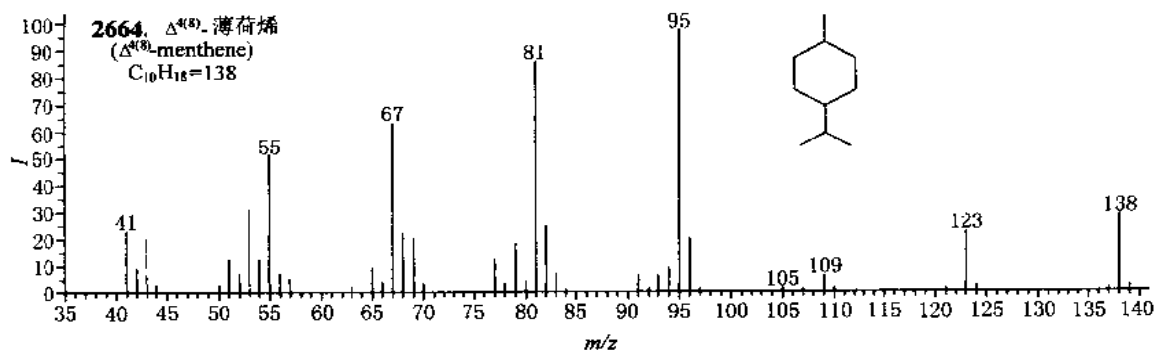
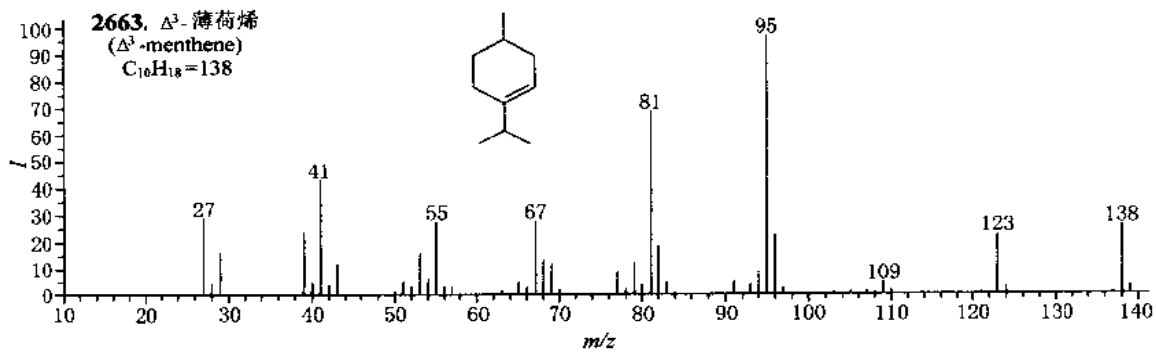


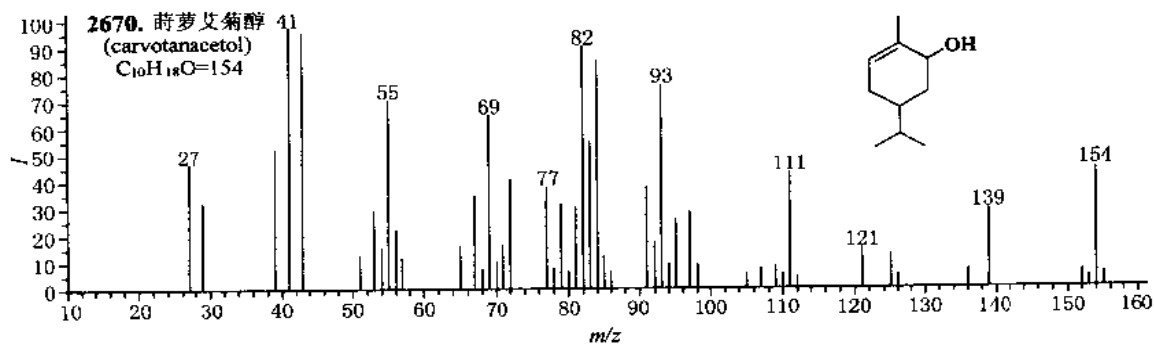
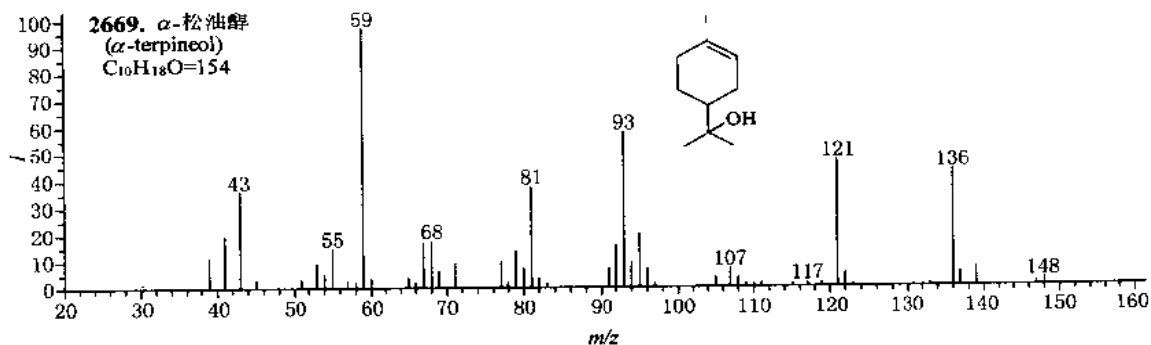
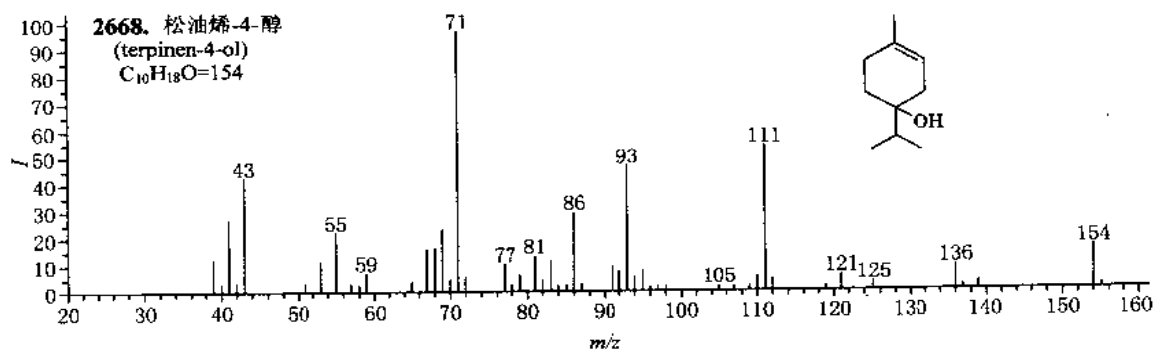
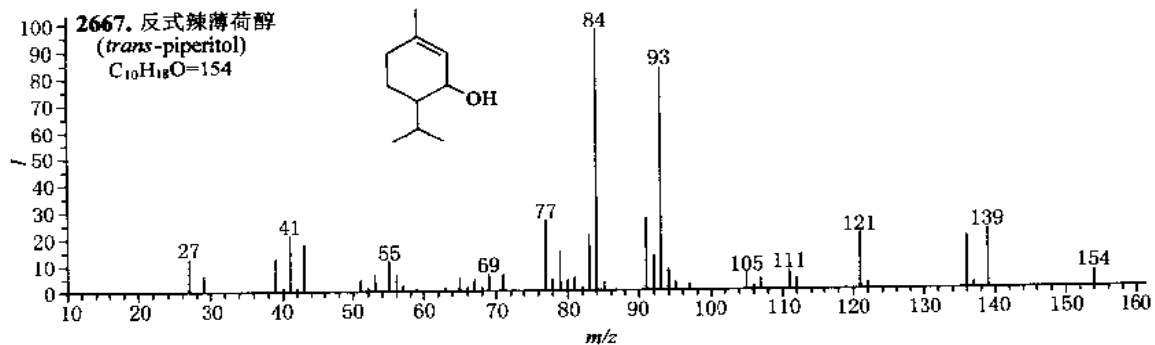


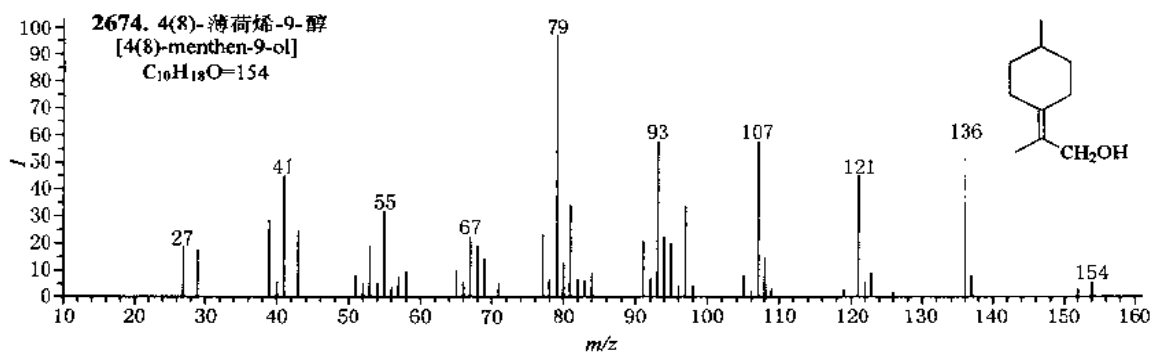
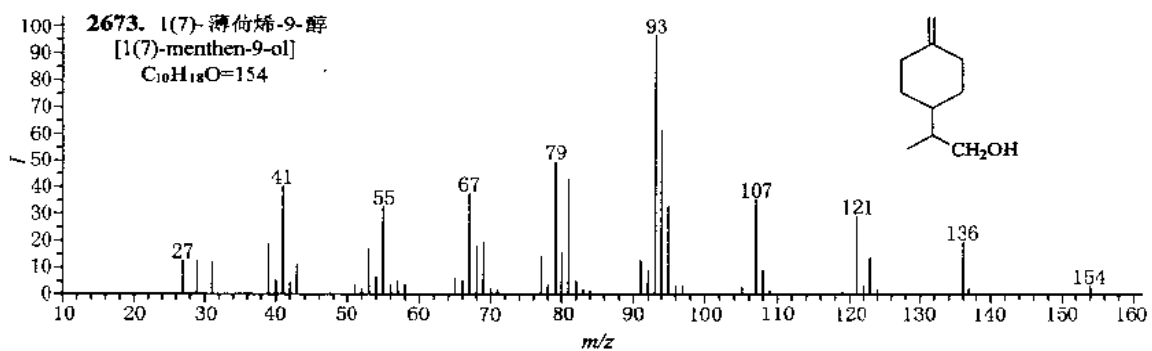
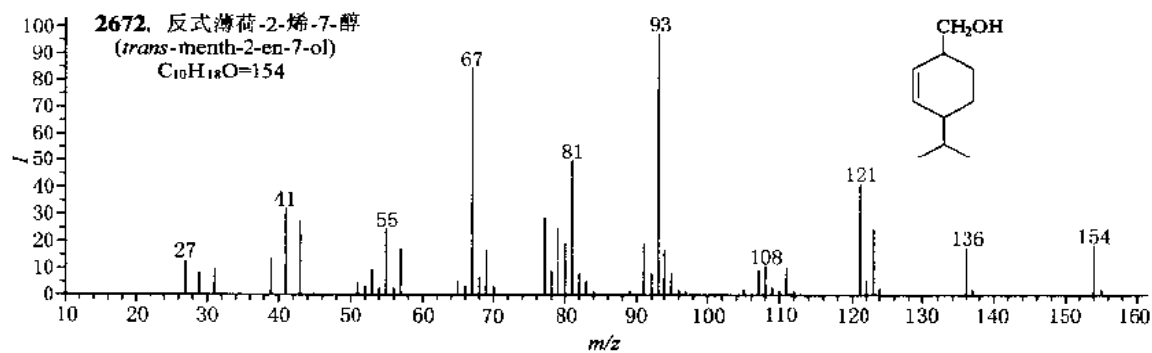
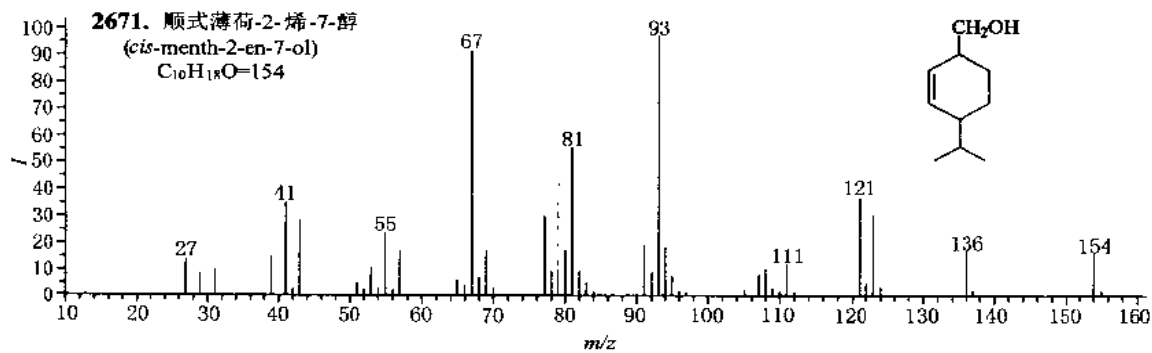




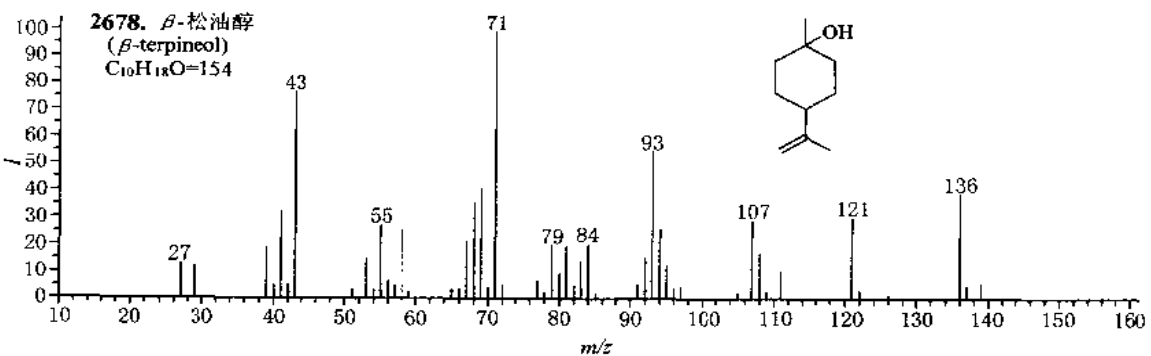
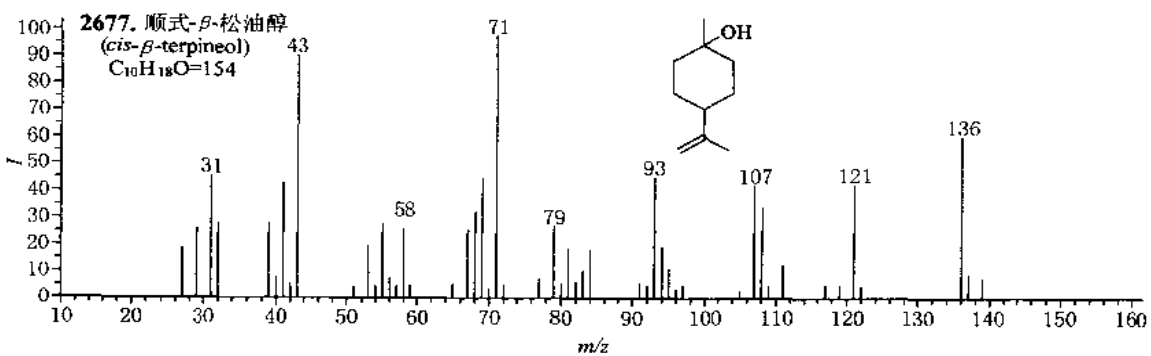
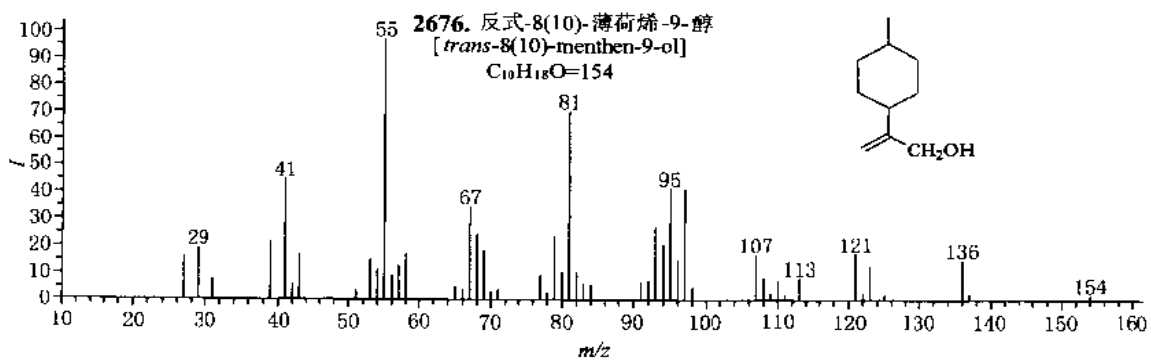
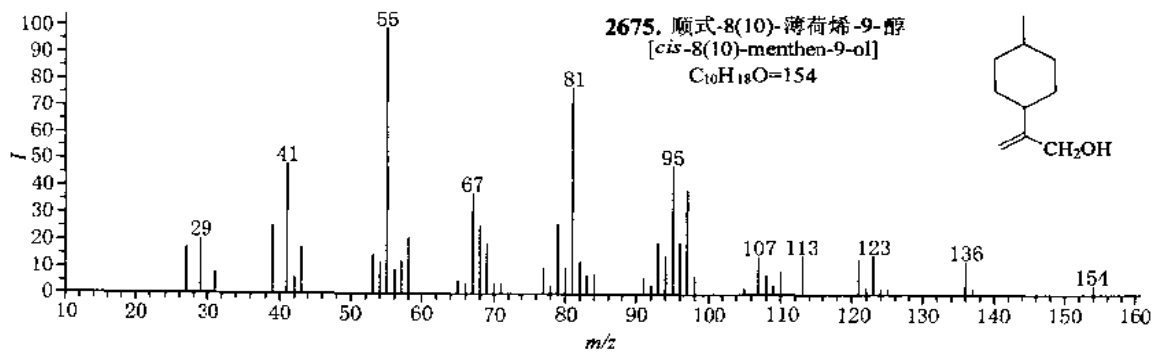


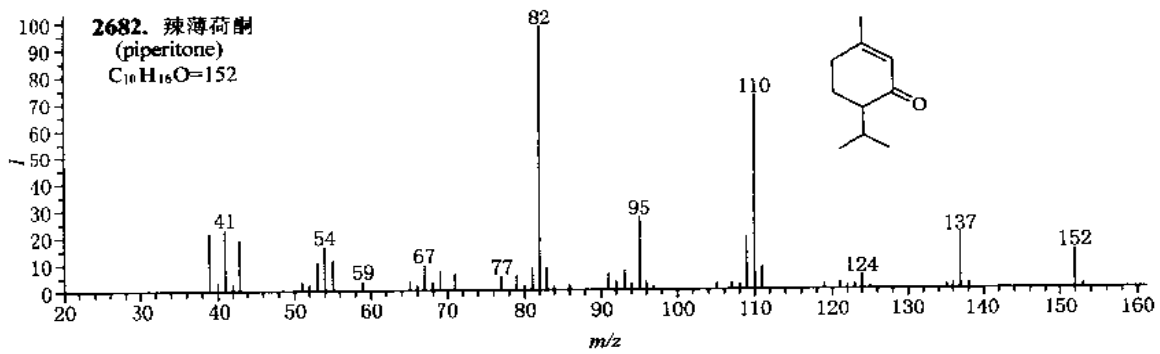
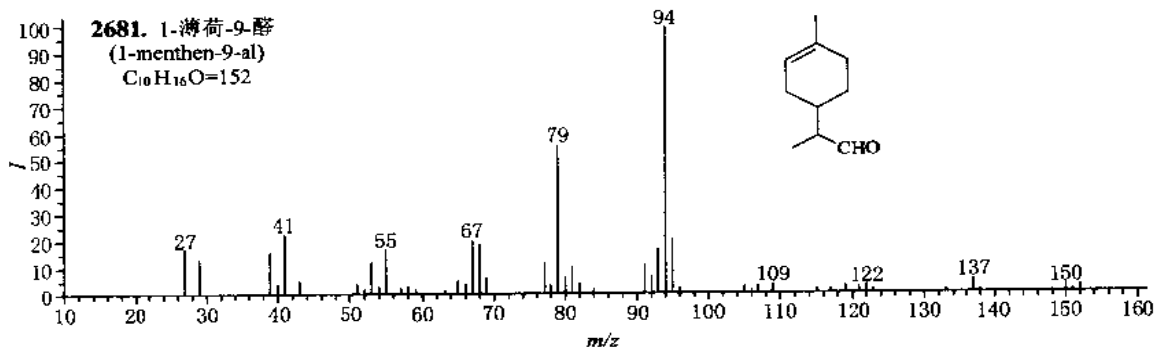
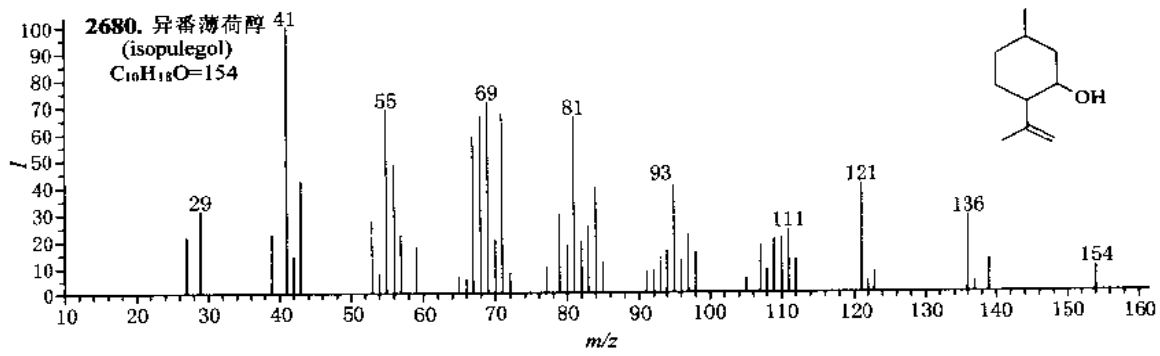
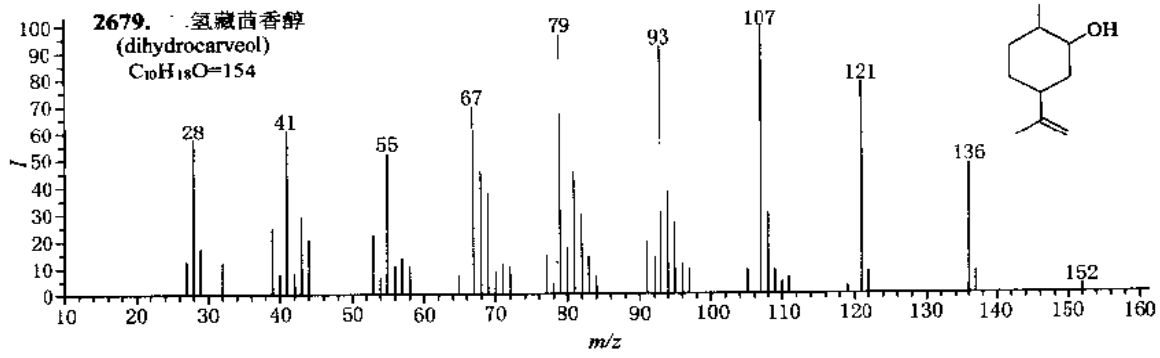


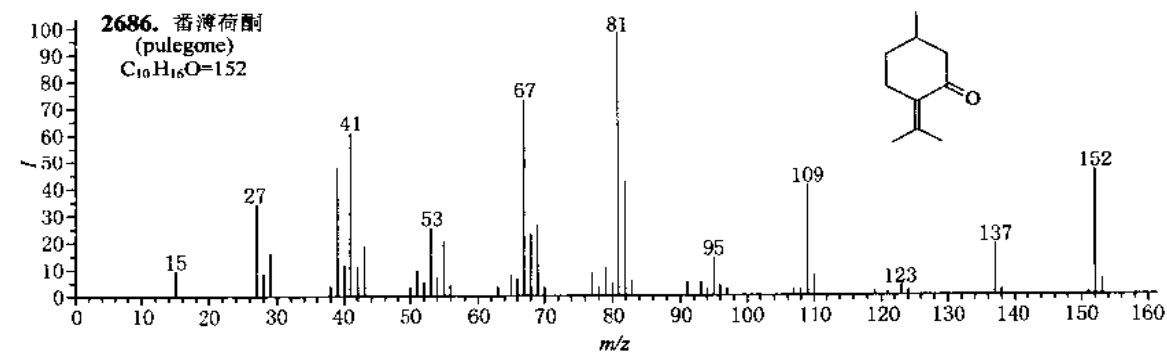
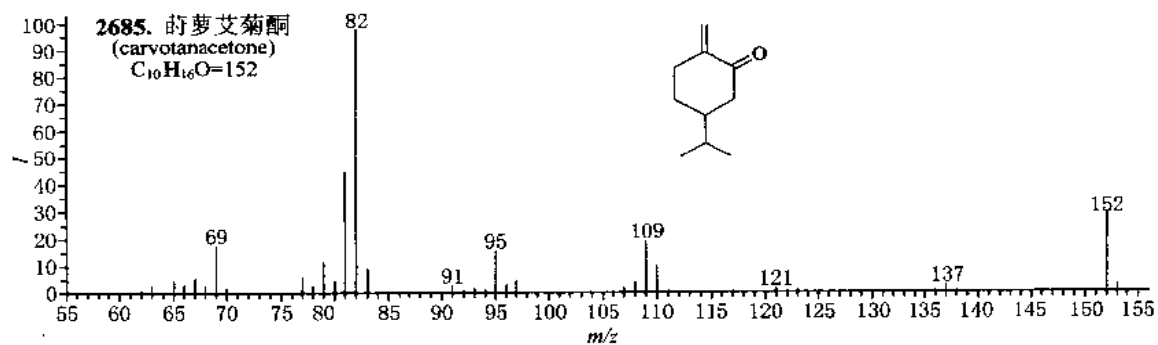
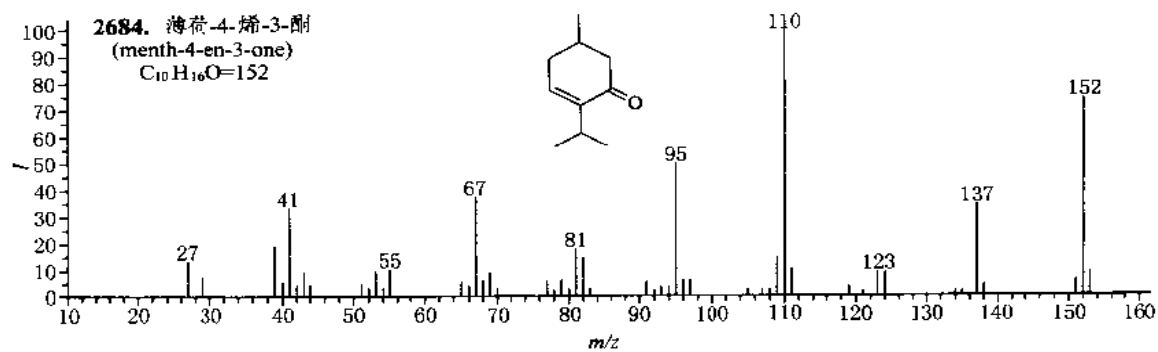
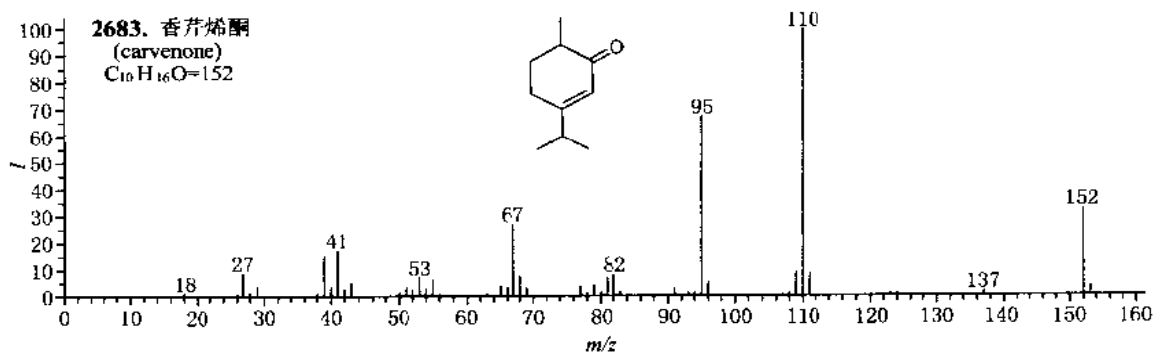


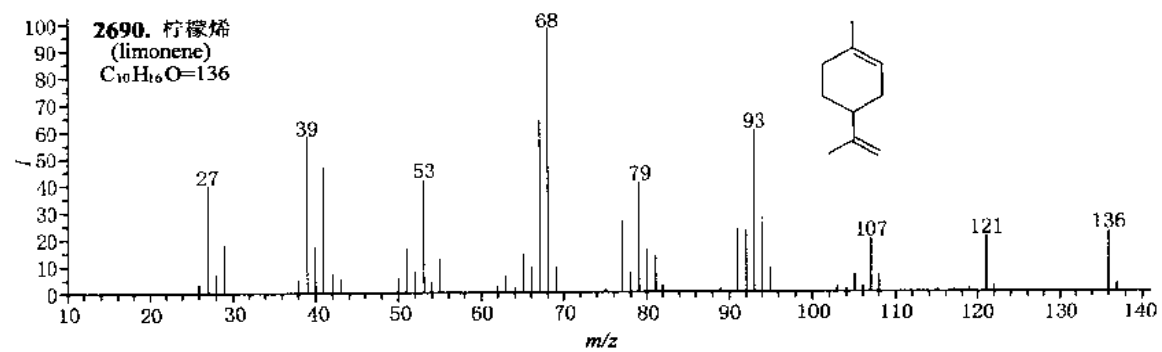
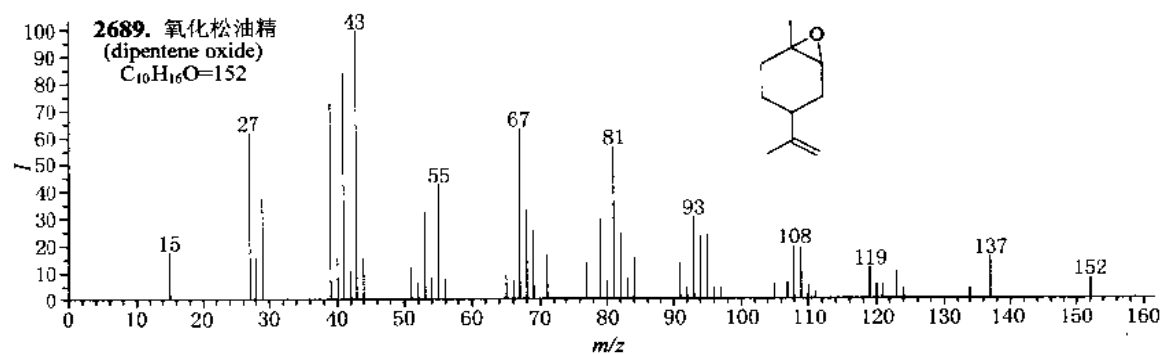
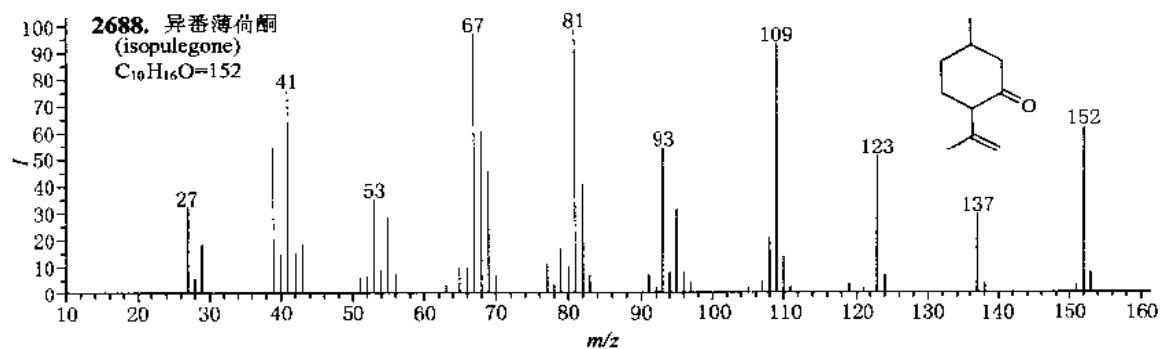
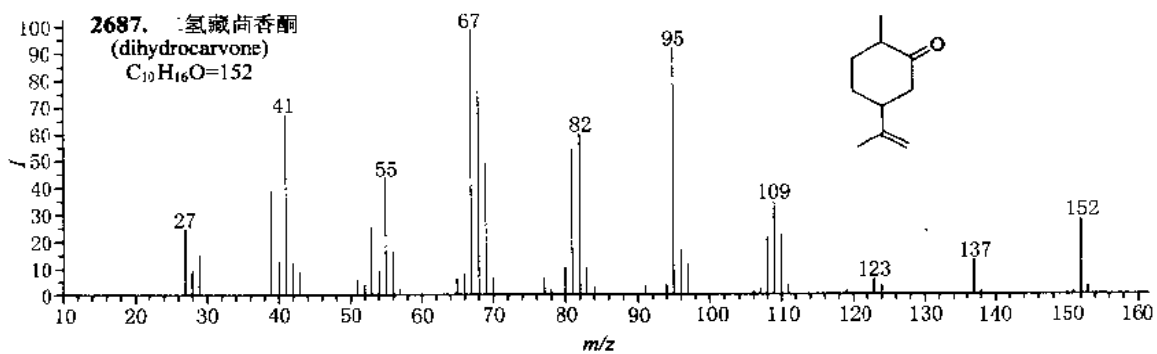


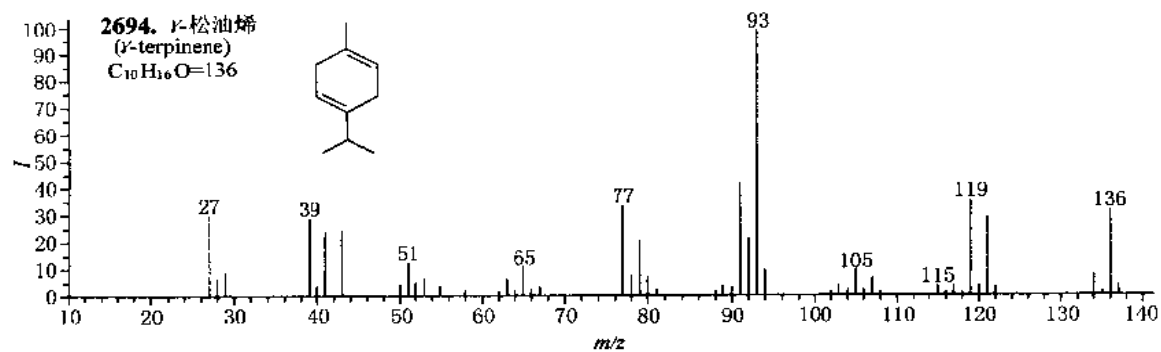
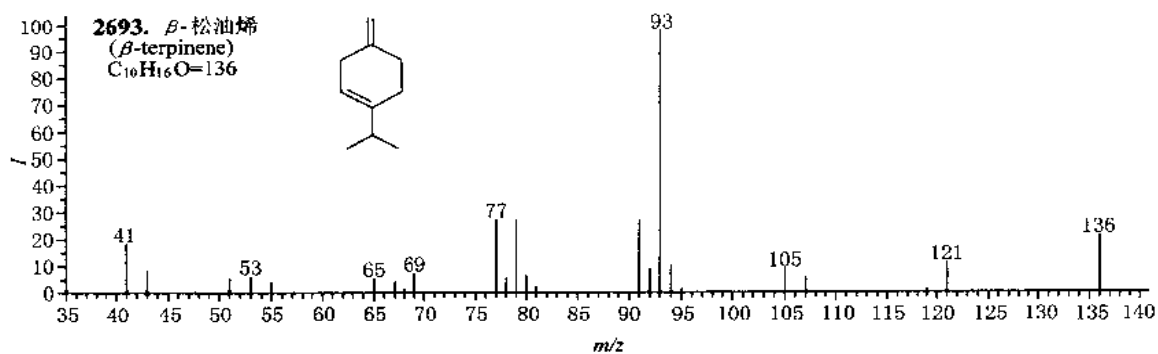
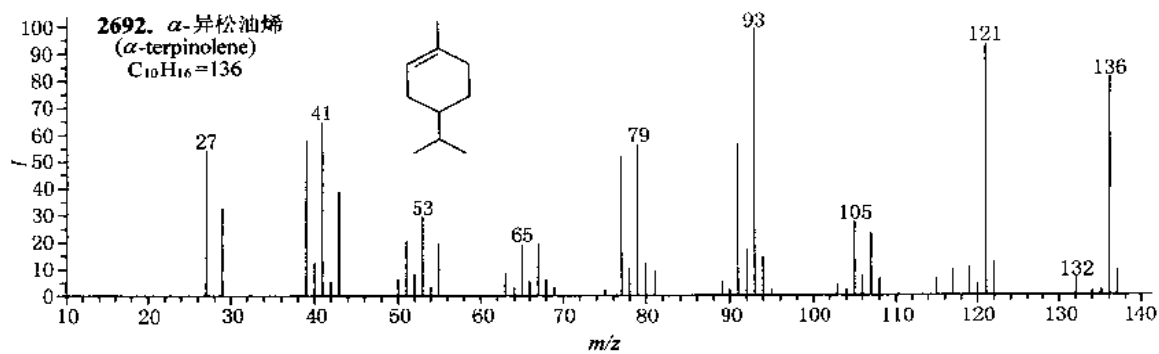
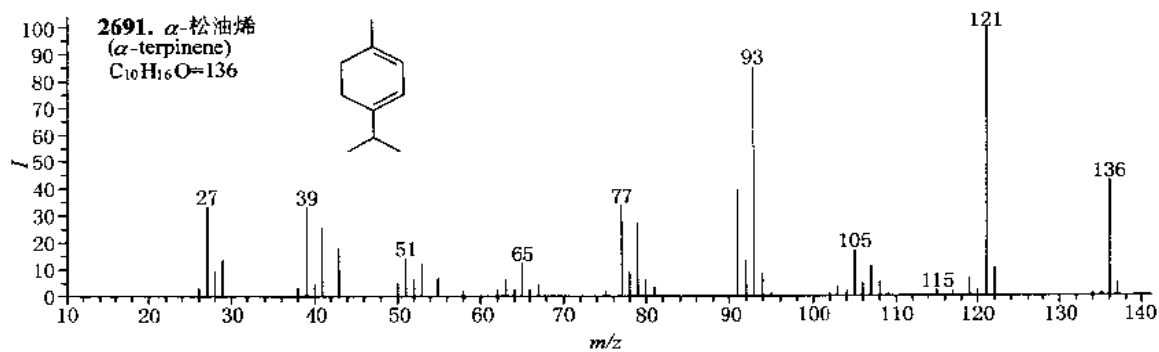


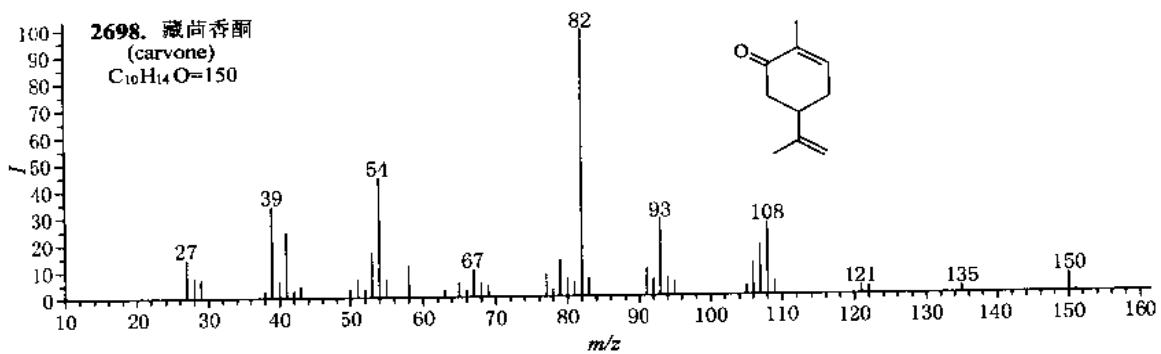
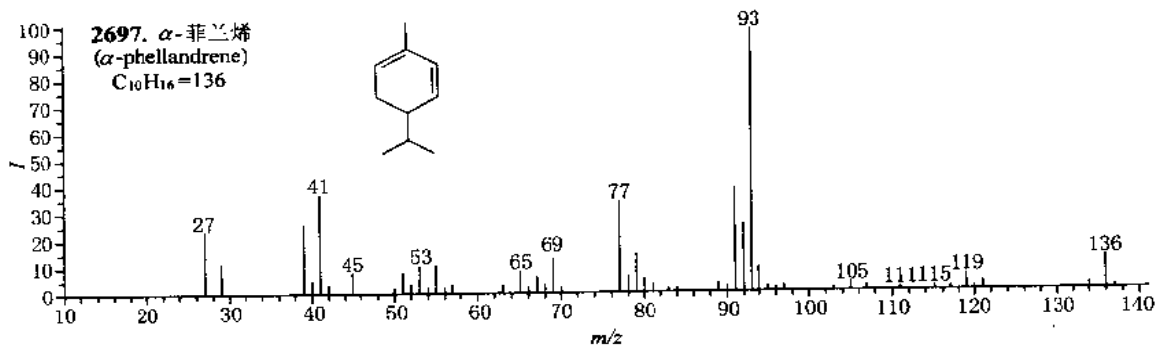
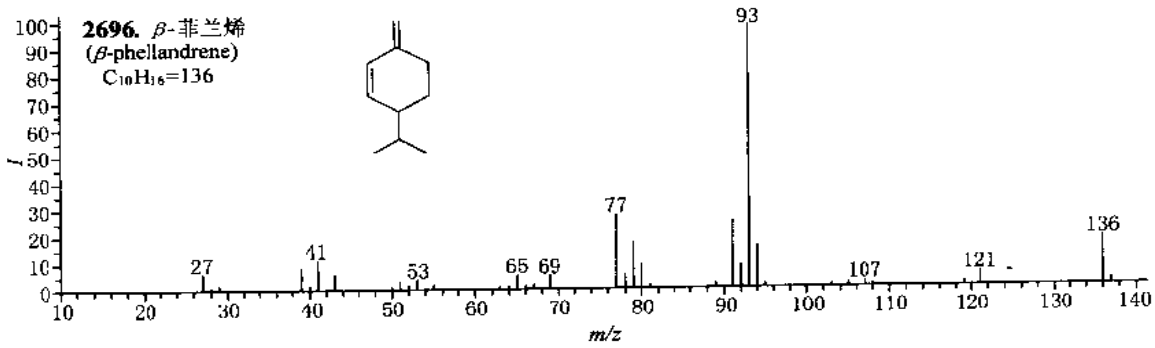
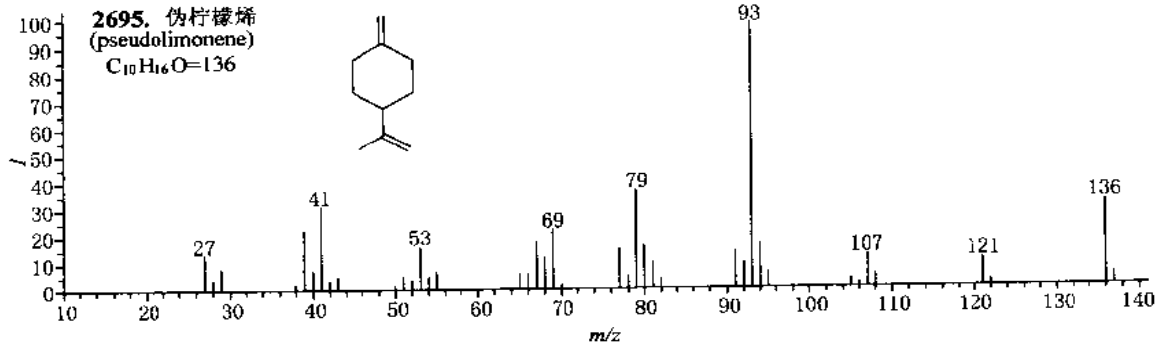


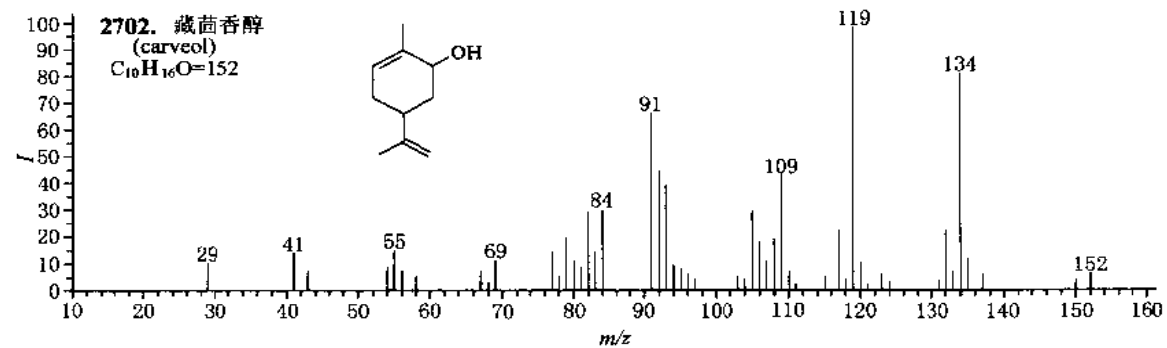
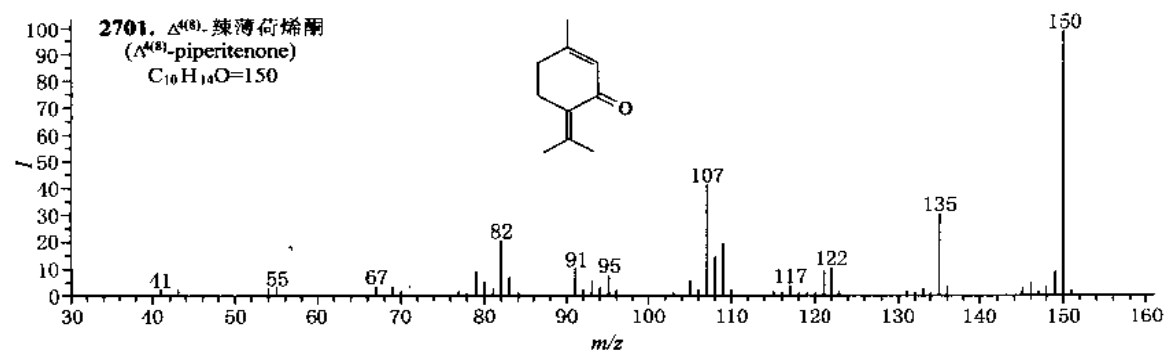
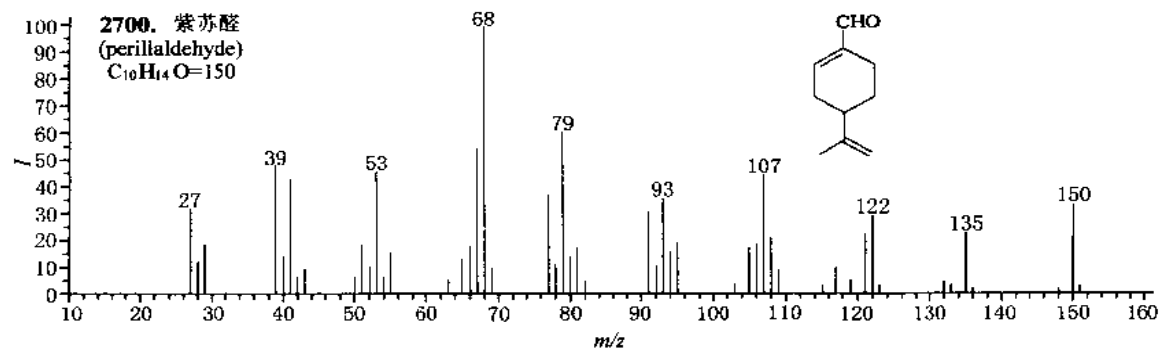
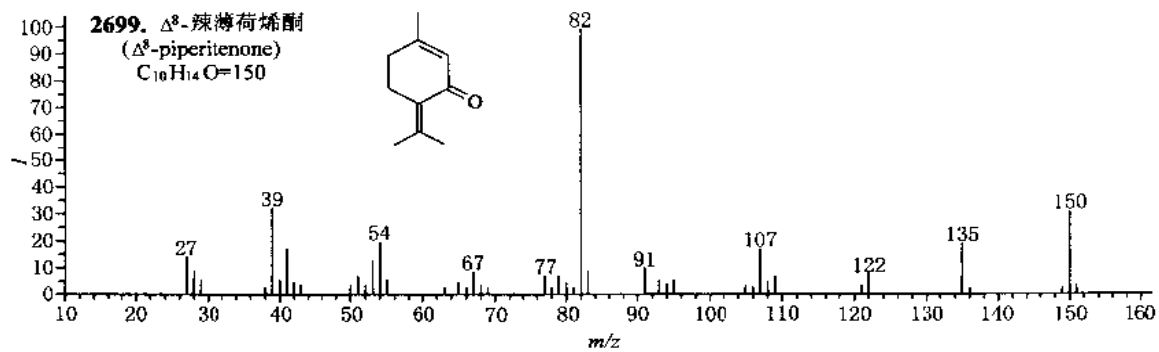


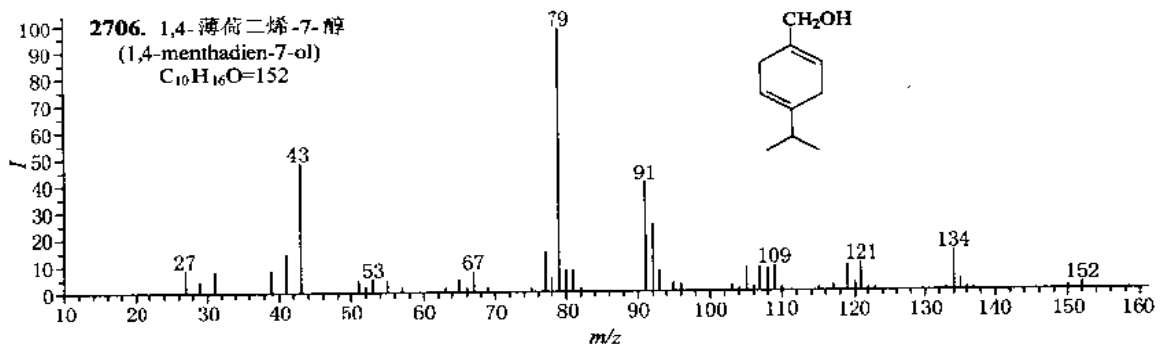
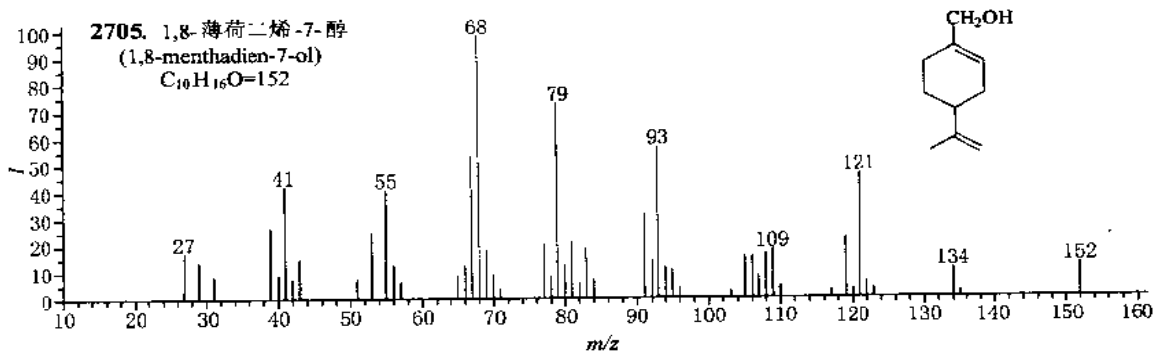
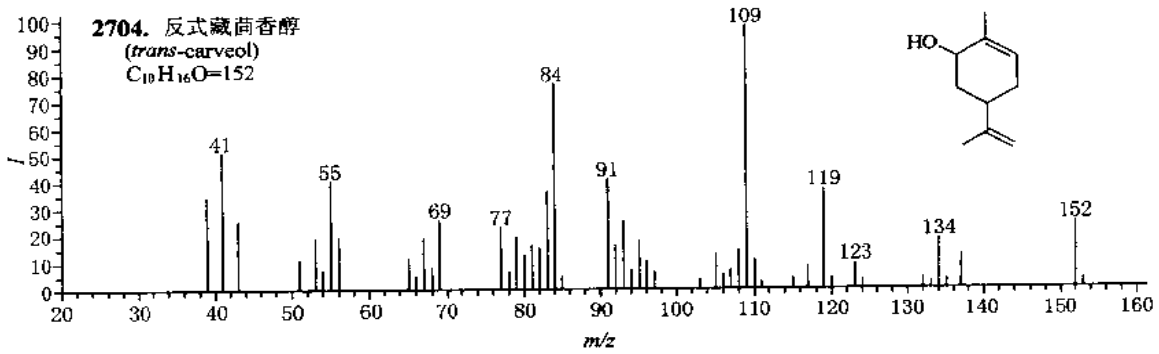
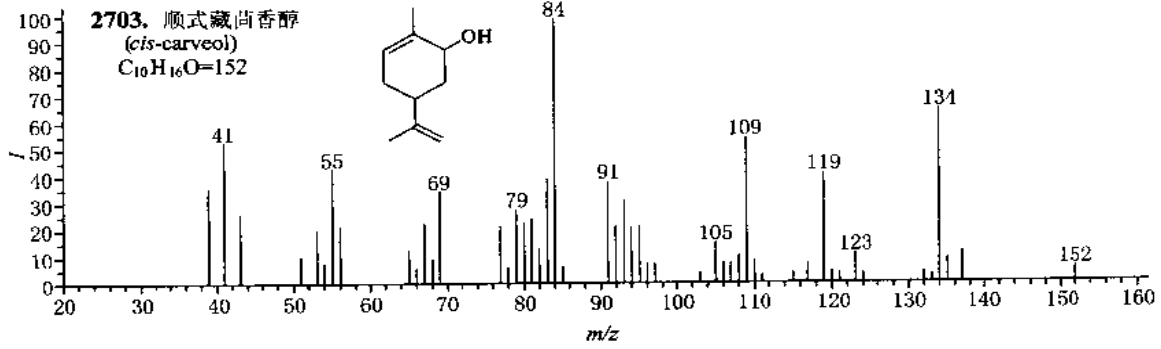




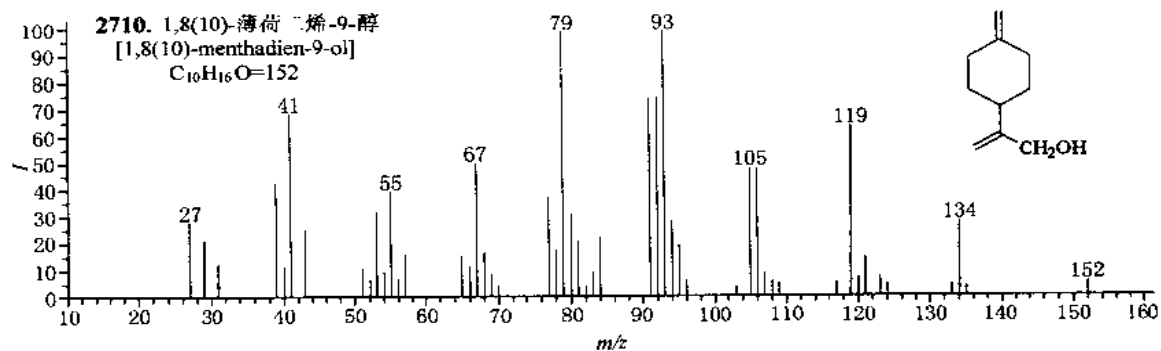
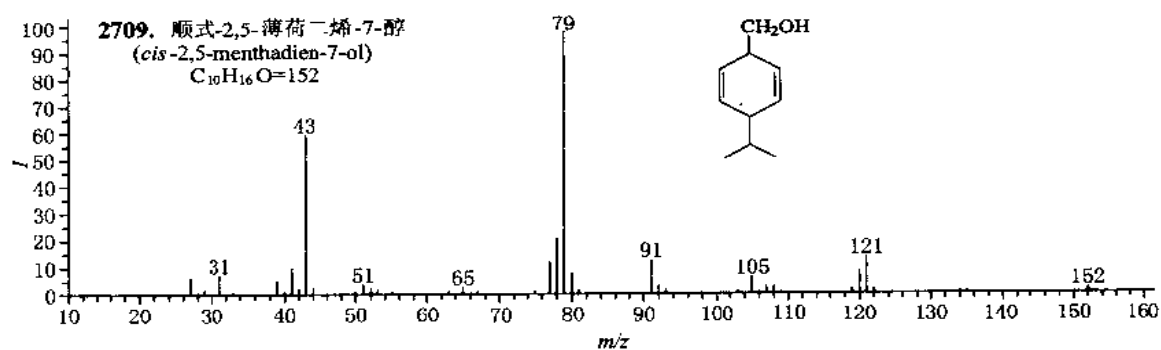
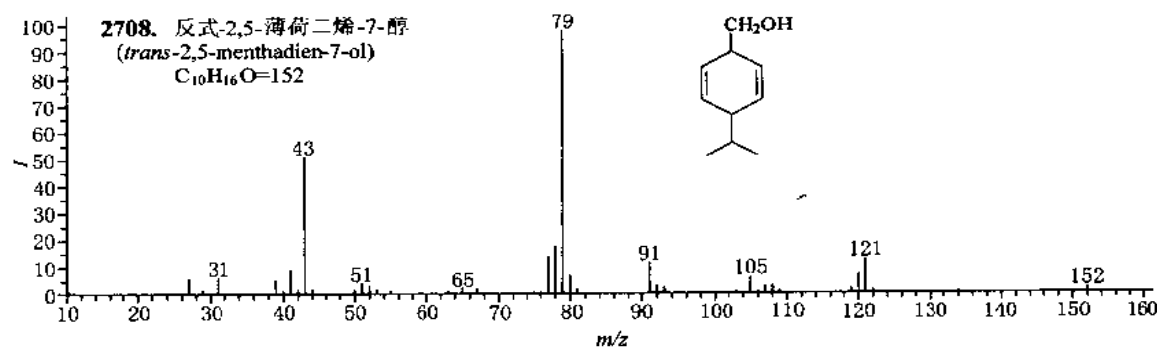
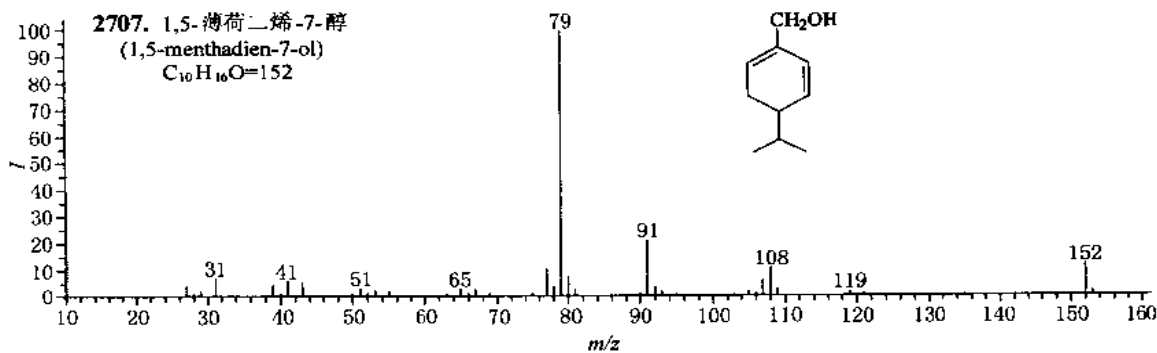


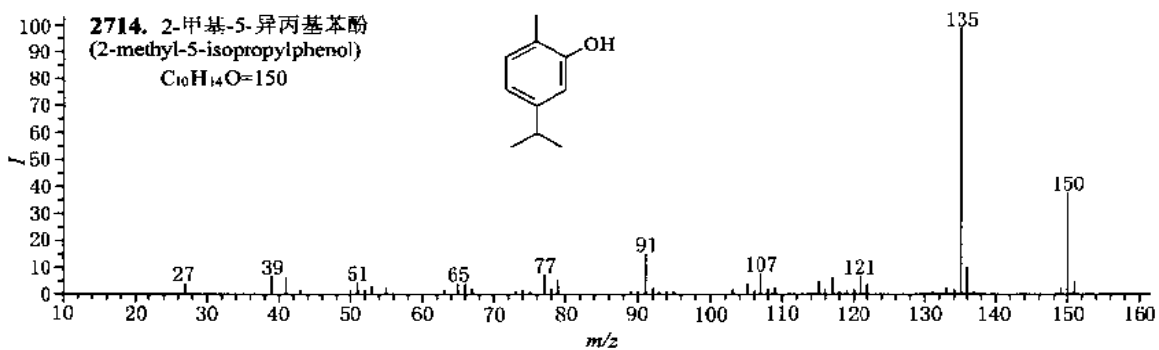
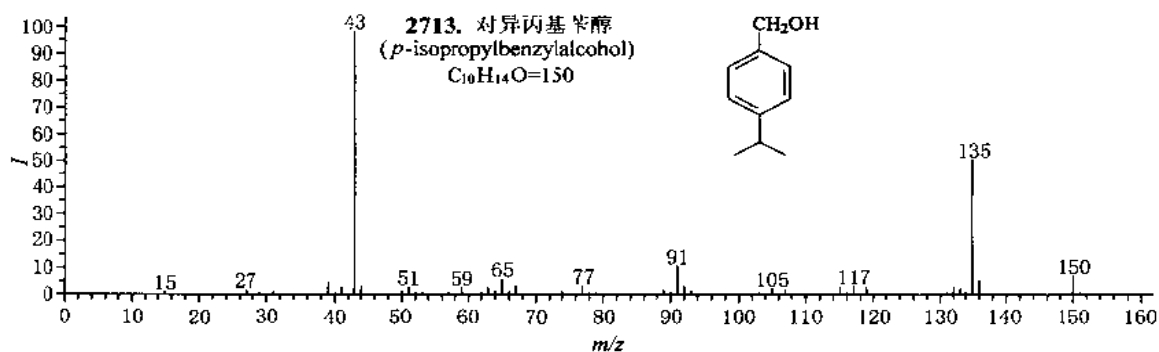
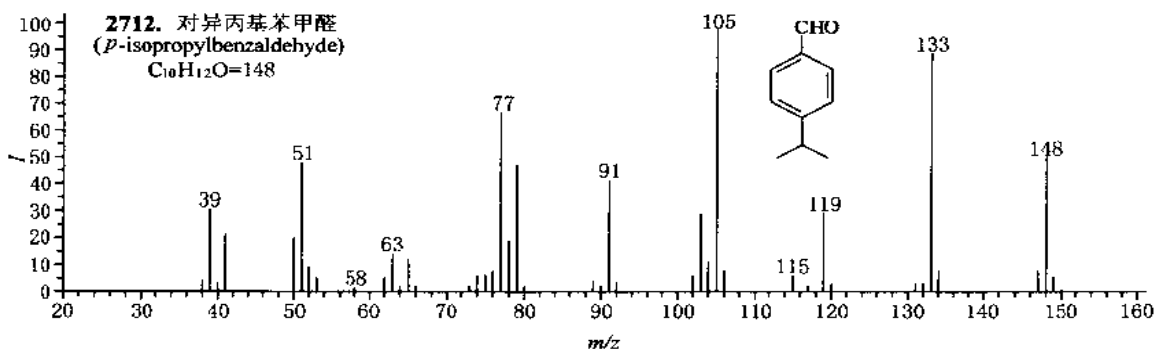
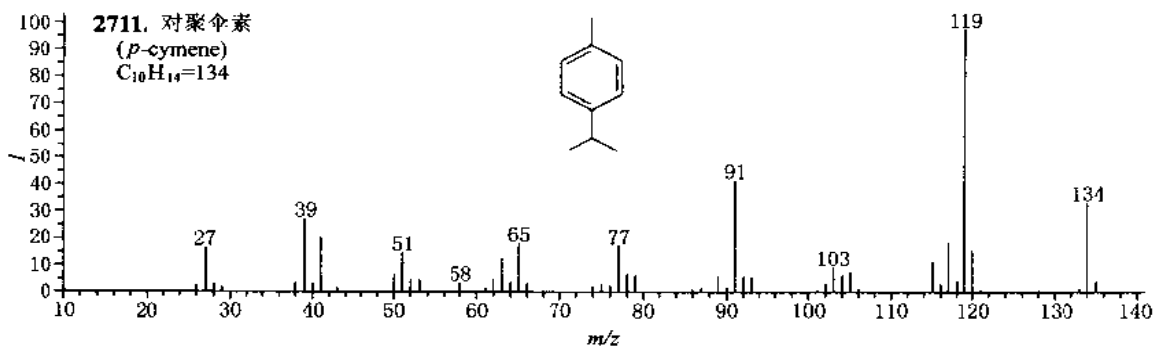


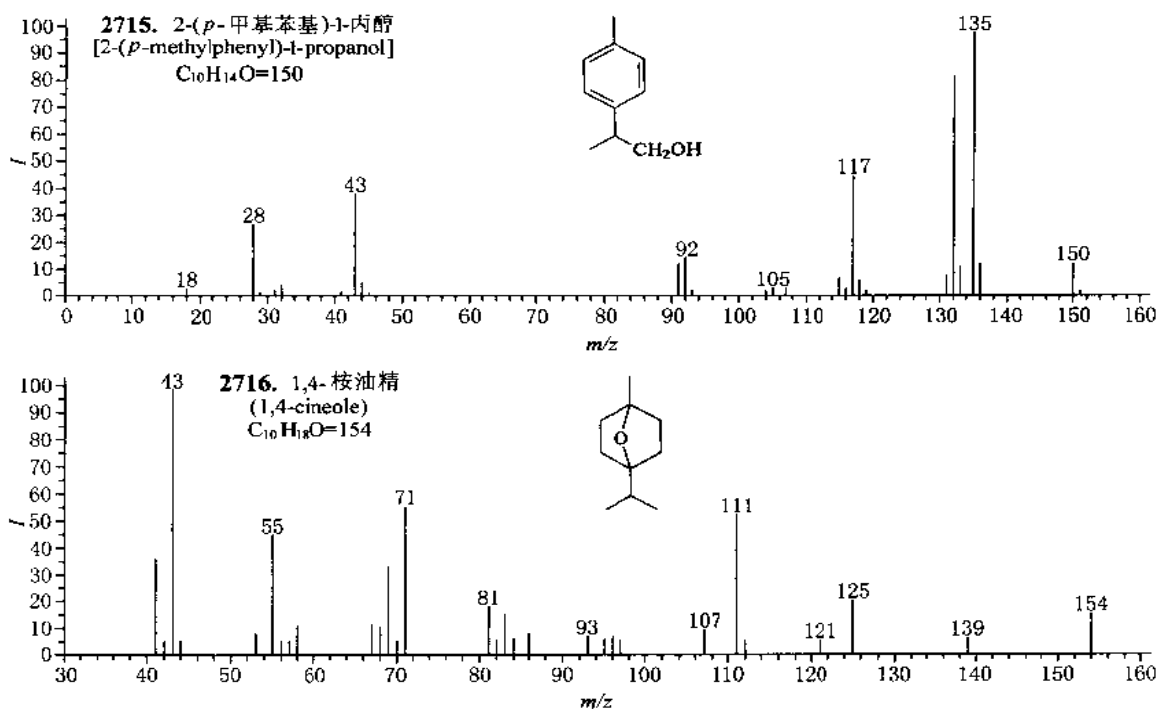








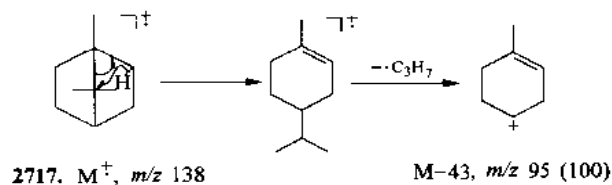




### 三、双环单萜类

#### 1. 樟烷类

樟烷(2717)的主要离子是  $M-CH_3$  和  $M-C_3H_7$ , 失去异丙基前要先重排氢原子, 可能的裂解如下:



樟脑类(2718~2721)的裂解太复杂, 大致都有强峰  $M-CH_2CO$ ,  $M-C_3H_7$ ,  $M-CH_2CHOH$ ,  $M-CH_2CO-CH_3$  和  $M-C_3H_7-CO$  等离子。龙脑类(2722, 2723)的强峰  $m/z 95$  来自离子  $m/z 110$  再失甲基, 而离子  $m/z 110$  是分子离子失去  $CH_2CHOH$ 。樟烷-2,3-二醇类(2724~2727)很易失水, 失水后的裂解类似樟脑类的, 基峰都是离子  $m/z 95$ 。有羟亚甲基的樟烷二醇类(2728, 2729)都有明显的  $M-CH_2OH$  离子。

樟烯类中的  $\delta$ -蒎烯(2730), 基峰是  $m/z 68$ , 这个离子的来源尚不清楚。

#### 2. 蒎烷类

蒎烷醛(2733)和蒎烷酮(2731, 2732)类的质谱很难解释,  $\alpha$ -蒎烯(2736)主要是失去  $C_3H_7$ , 蒎烯醛(2737)和蒎烯酮(2738)的主要裂解是  $M-C_3H_7$  和  $M-C_3H_7-CO$ , 蒎烯醇类(2739~2742)的裂解亦不易解释。

#### 3. 昔烷类

昔烷酮类(2743~2745)的基本裂解途径是  $M-C_3H_6-CH_3$  和  $M-C_3H_6-CO-CH_3$ 。

5-萜醇 (2750) 和 6-萜醇类 (2746~2749) 的主要裂解途径是  $M-H_2O-CH_3$ , 1-萜醇类 (2751, 2752) 除  $M-H_2O-CH_3$  的裂解途径外, 还有强峰  $m/z$  96, 它来自分子离子重排失去丙酮。

萜烯类 (2753, 2754) 的主要裂解是  $M-CH_3$  和  $M-C_3H_7$ 。

#### 4. 侧柏烷类

侧柏烷酮类 (2755~2757) 的主要裂解途径是  $M-CH_2CO-CH_3$ 。

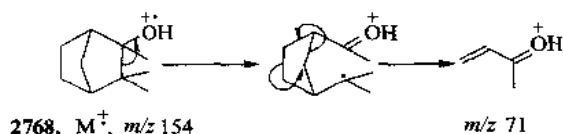
侧柏烷醇类 (2758~2759) 的主要裂解途径是  $M-H_2O-CH_3$  和  $M-H_2O-C_3H_7$ 。

侧柏烯类 (2760, 2762) 主要是失去异丙基, 侧柏烯醇类 (2763~2765) 都有强的离子  $m/z$  92 和  $m/z$  91, 前者可能来自  $M-H_2O$  再失去  $C_3H_6$ , 后者来自  $M-H_2O$  再直接失去异丙基。

#### 5. 蒎烷类

蒎烷酮类 (2766, 2767) 的主要裂解是  $M-CH_2CO-CH_3$ , 失去  $44u$  可能是重排失去乙醛。

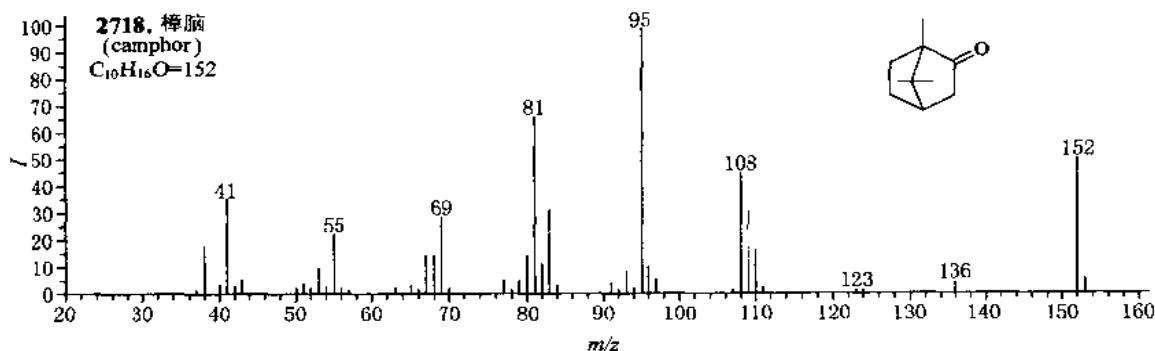
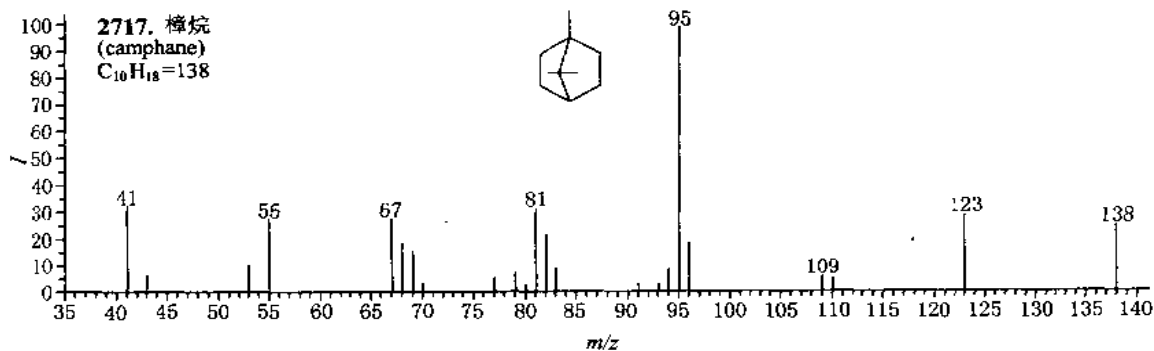
蒎烷醇 (2768) 的离子  $m/z$  71 可能如下生成:

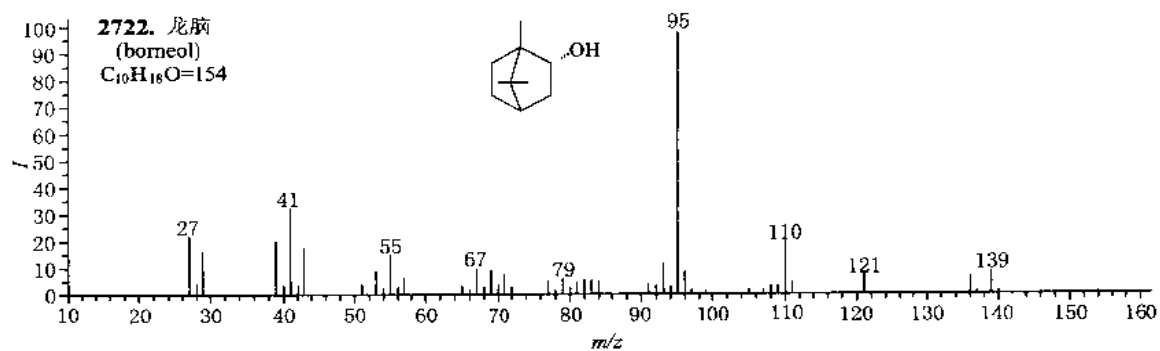
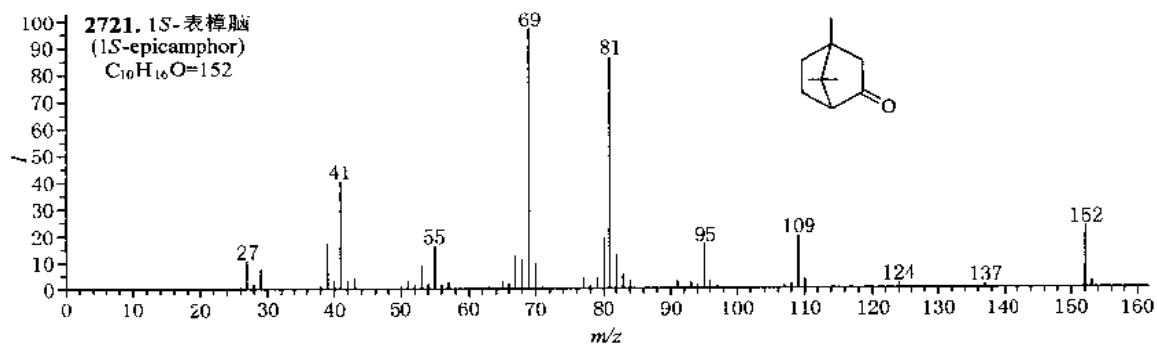
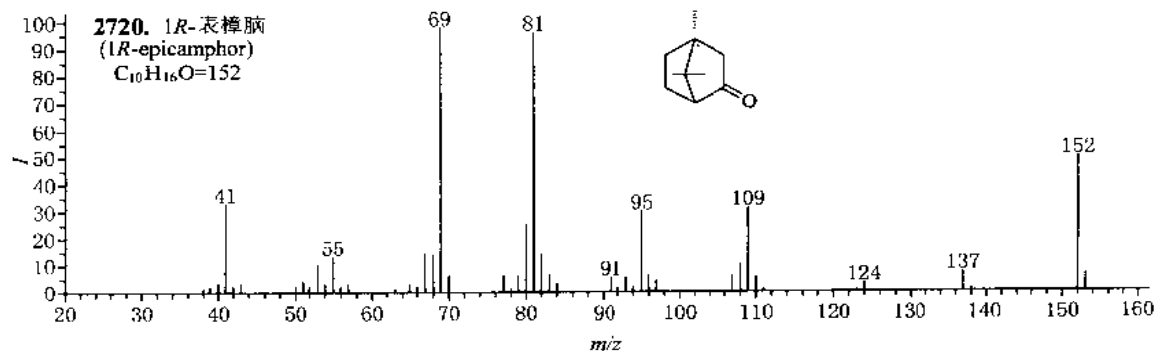
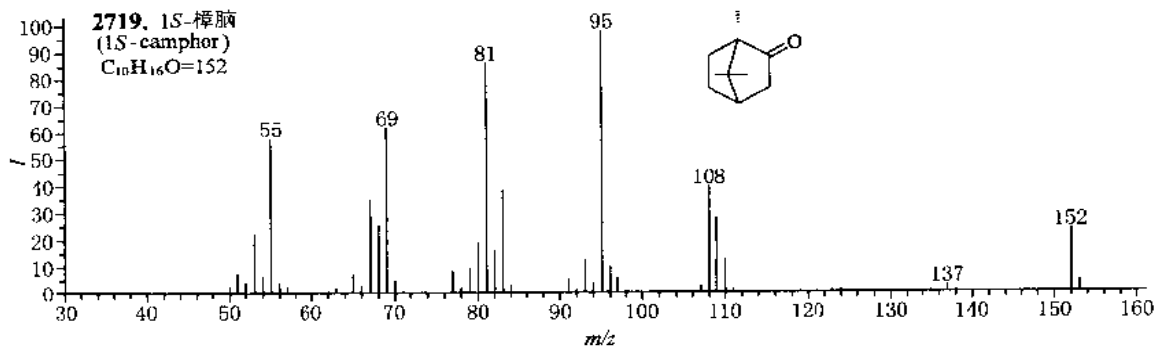


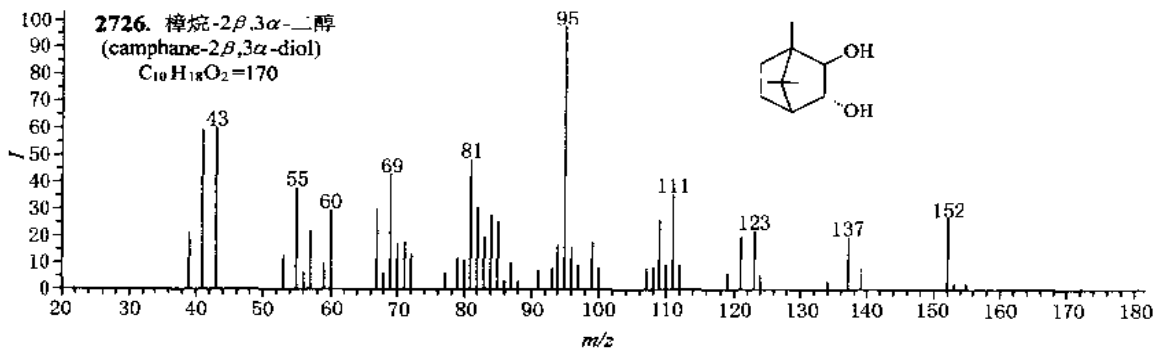
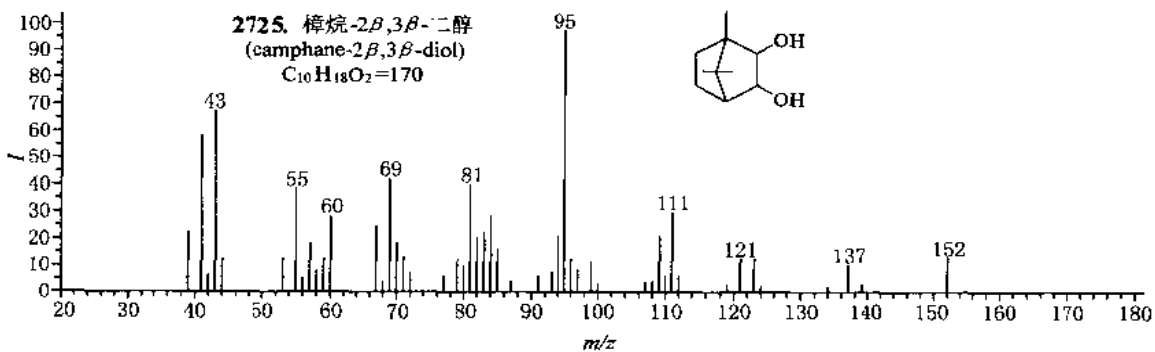
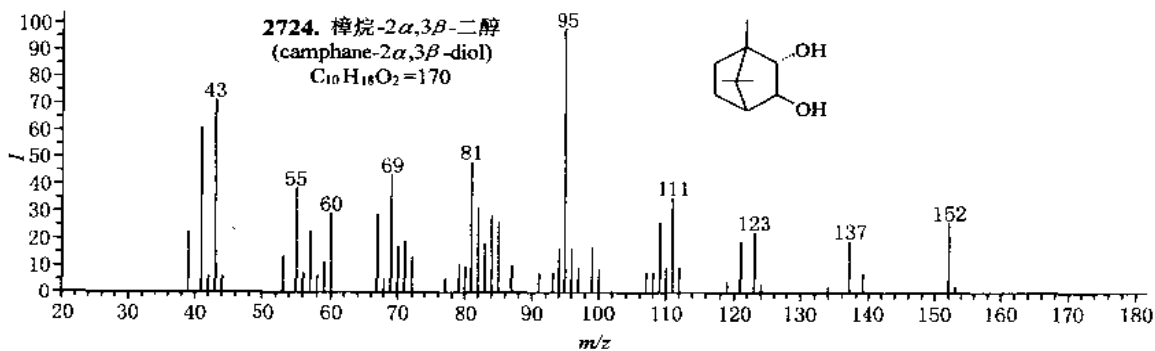
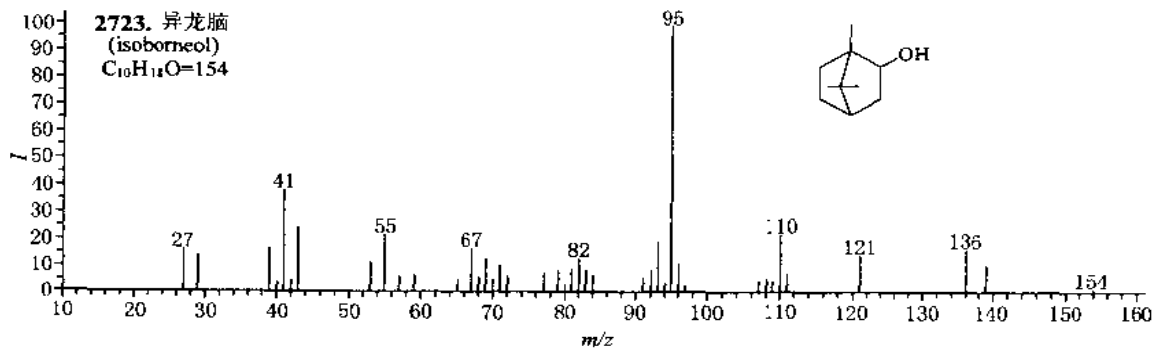
蒎烯 (2769) 的离子  $m/z$  93 应当是氢重排后失去异丙基。

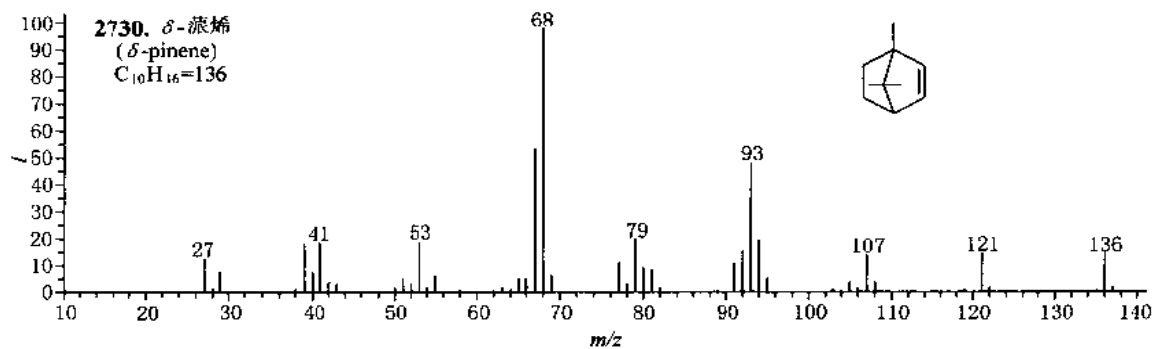
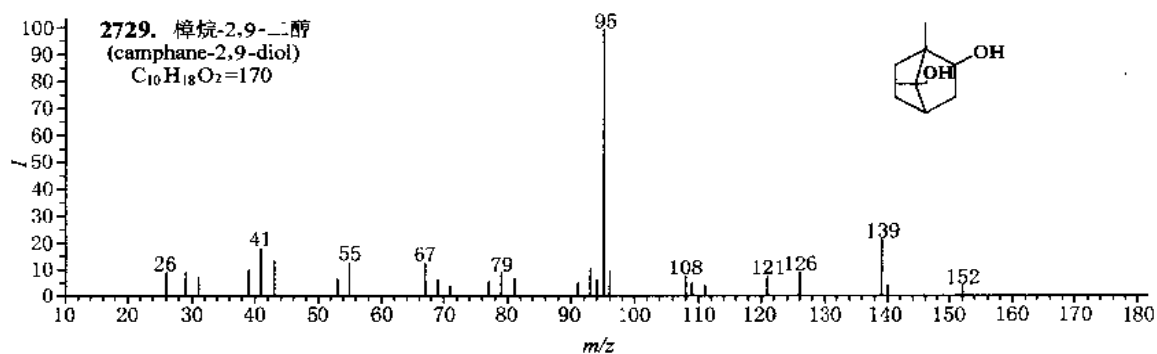
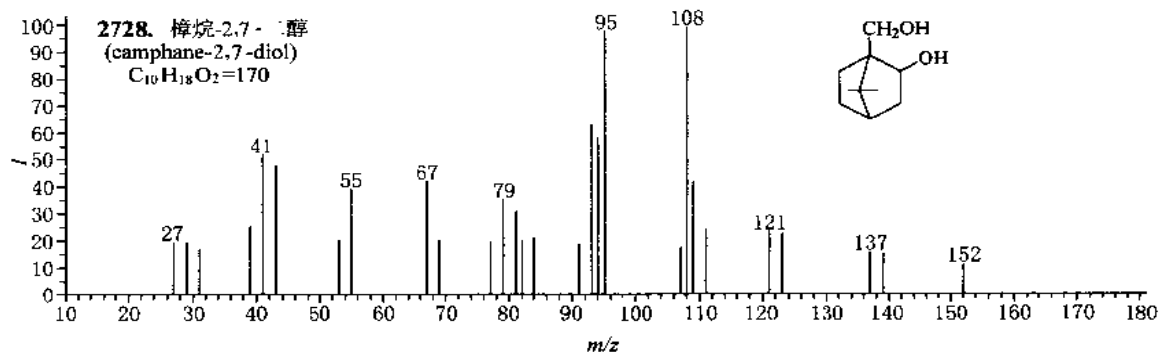
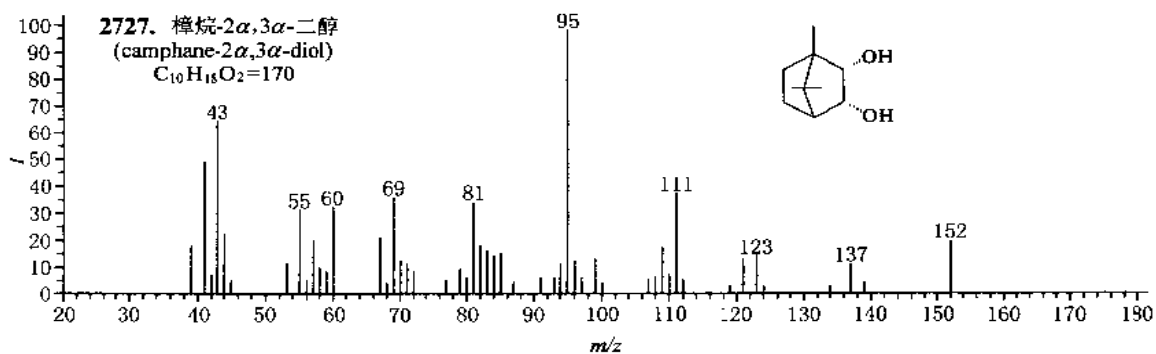
#### 6. 其他

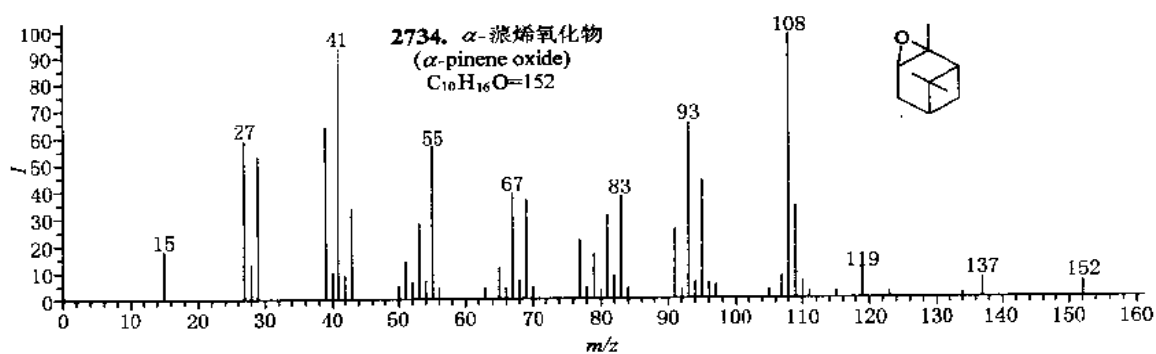
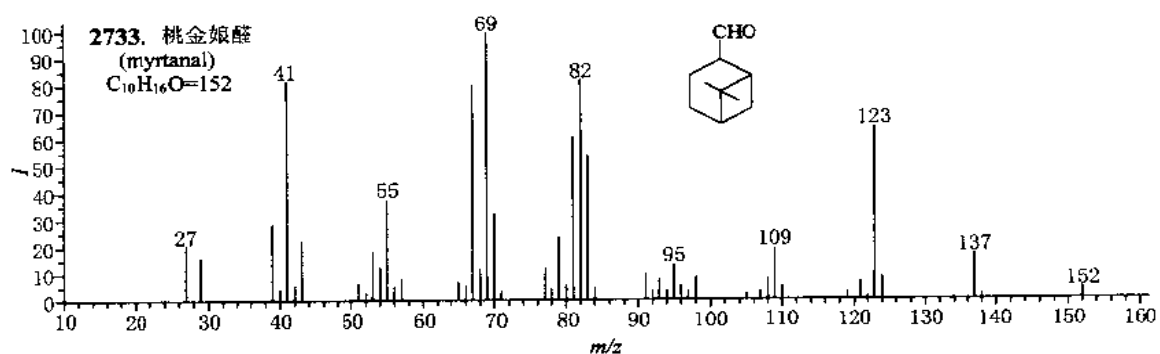
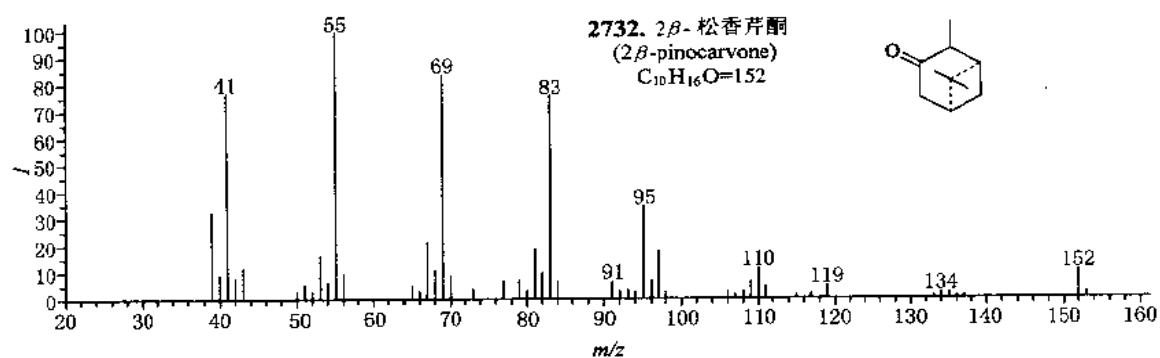
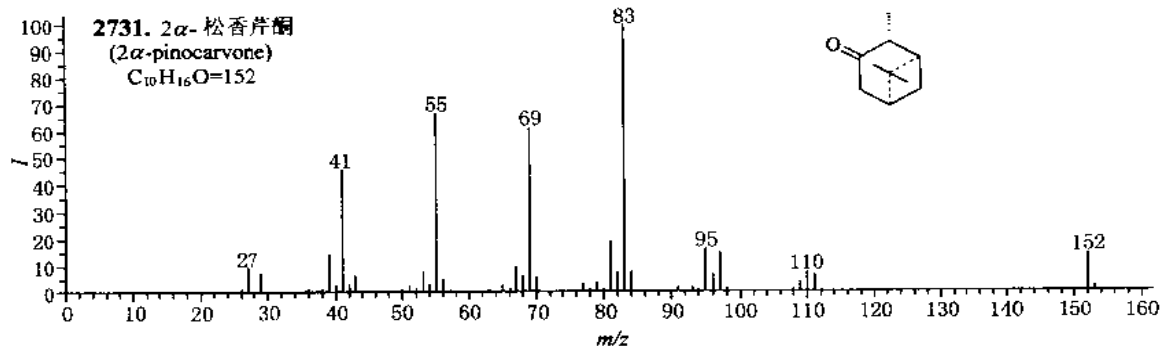
双环庚烷类没有甚么特征裂解, 2,6,6-三甲基环己烯-1-甲醛 (2773) 和 2,6,6-三甲基环己二烯-1-甲醛类 (2775) 都有特征离子  $M-CHO$ , 四氢呋喃类 (2776 和 2777) 都有失去乙烯基的小峰, 组成为  $C_5H_8$  的强峰和强弱不等的羟异丙基离子  $m/z$  59 都存在, 离子  $m/z$  71 仍然是  $C_4H_7O^+$  的组成。



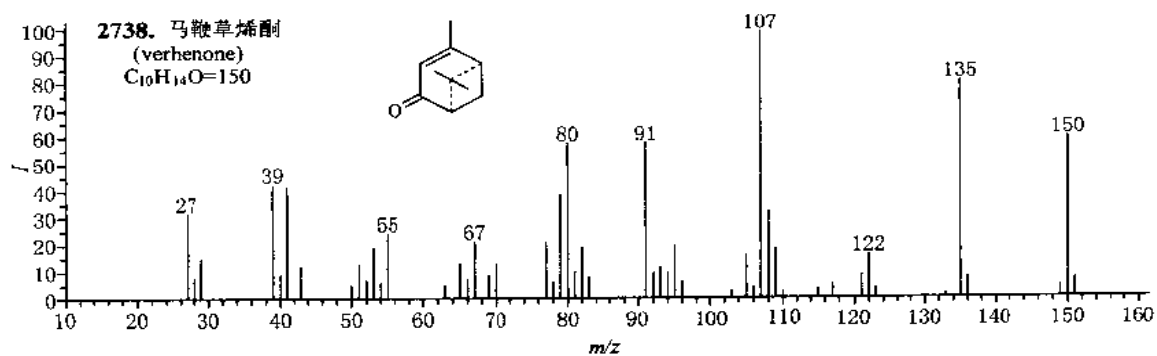
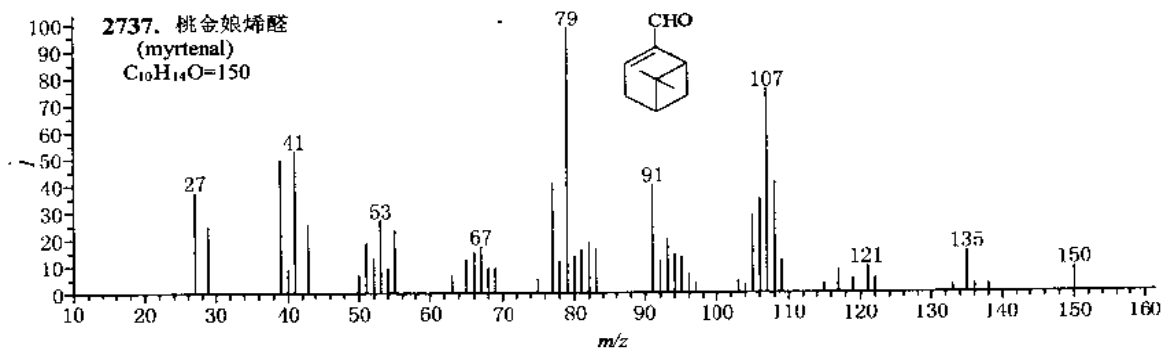
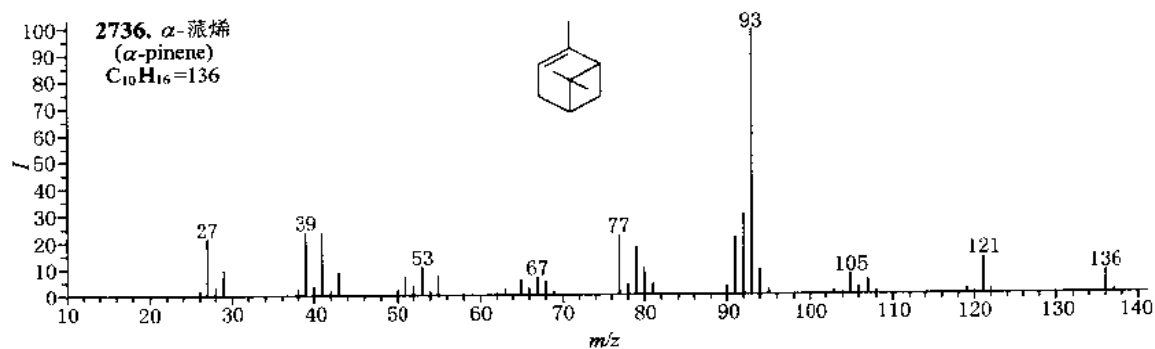
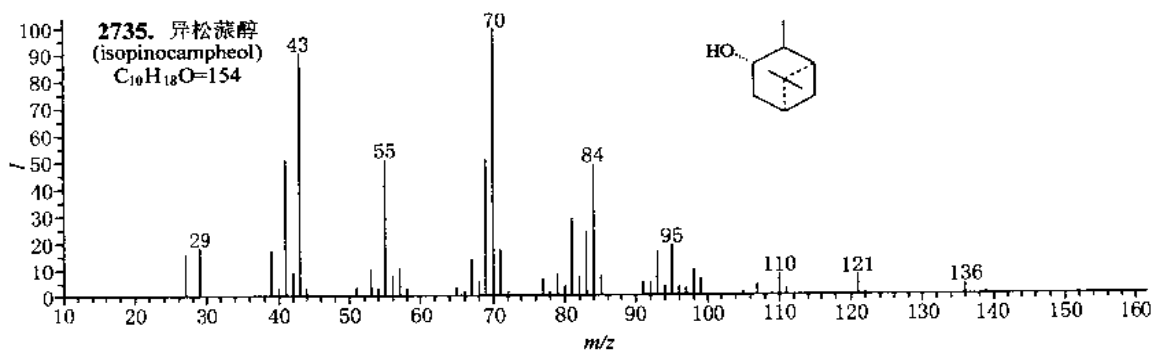


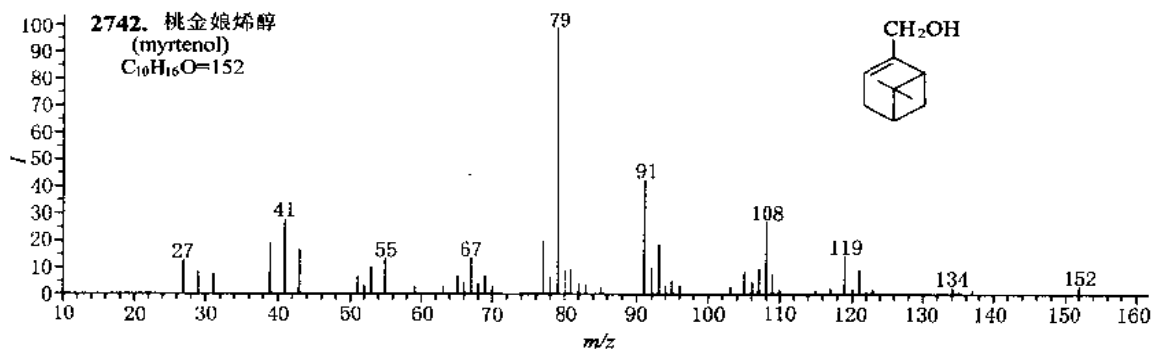
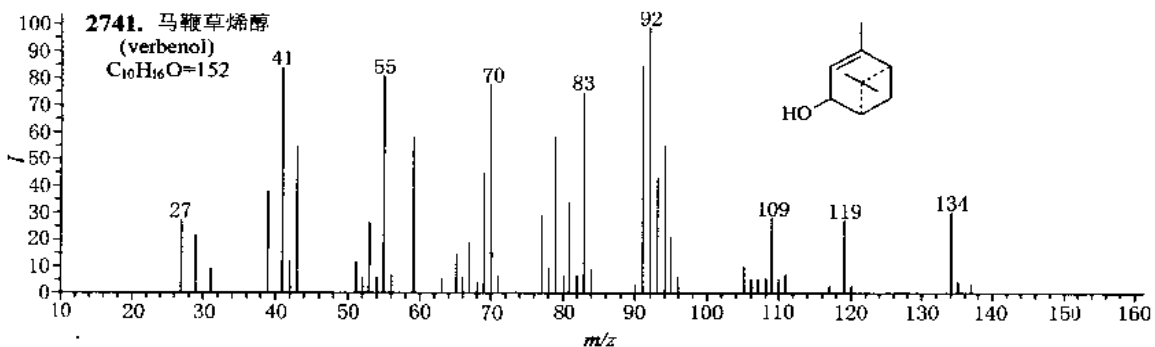
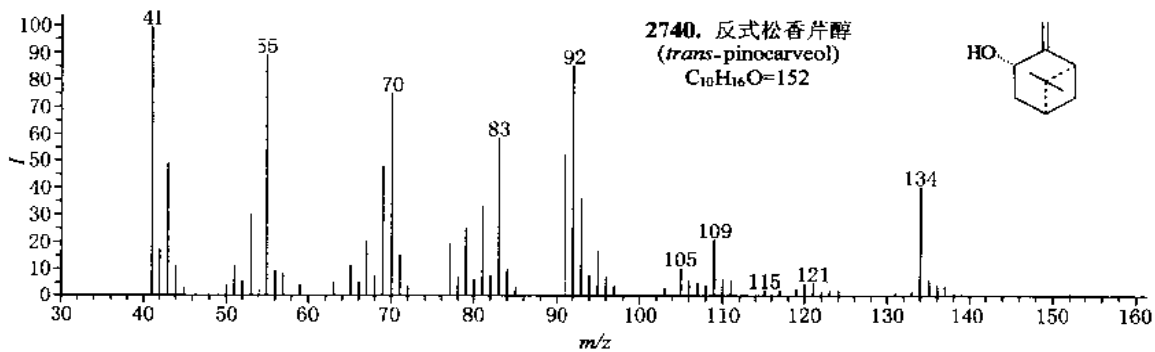
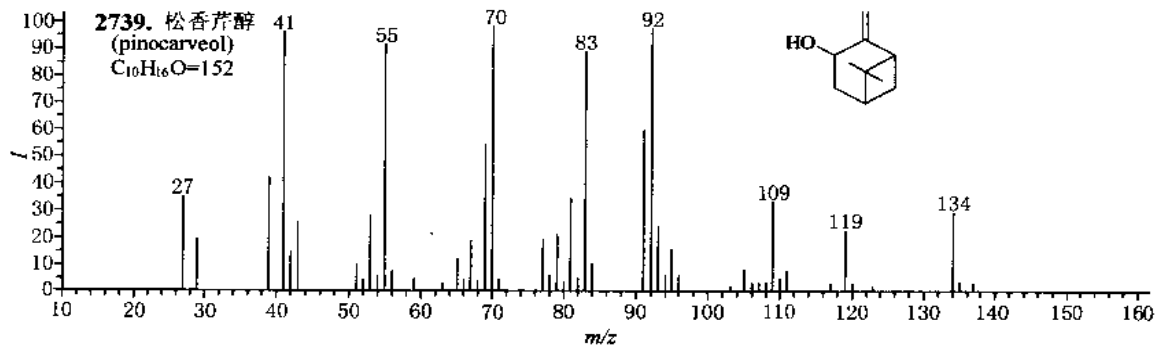


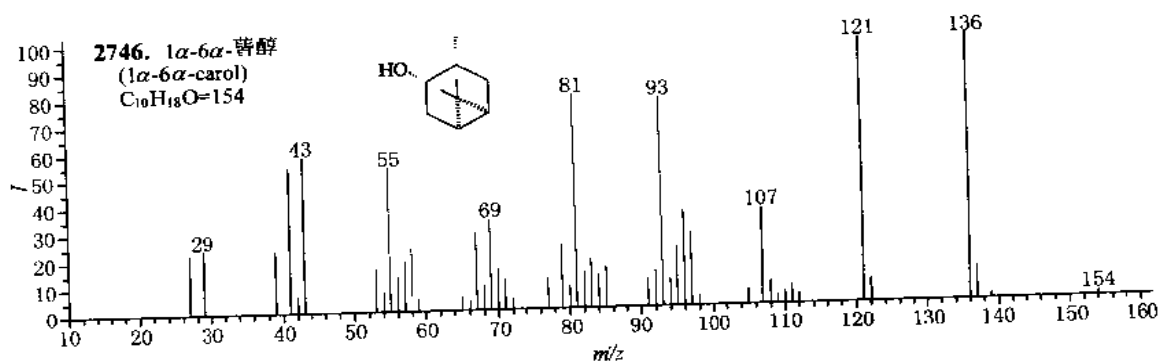
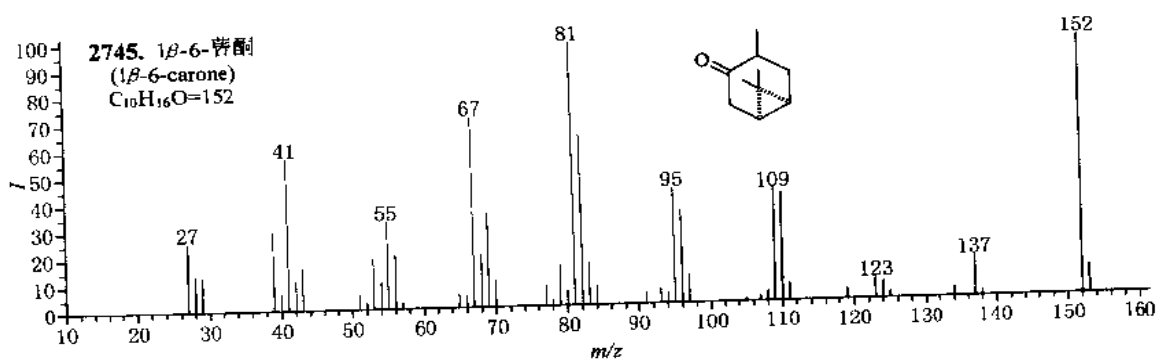
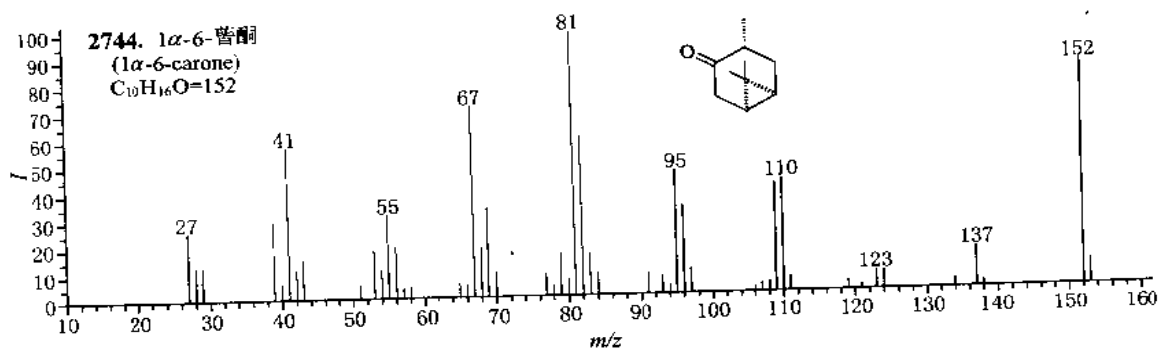
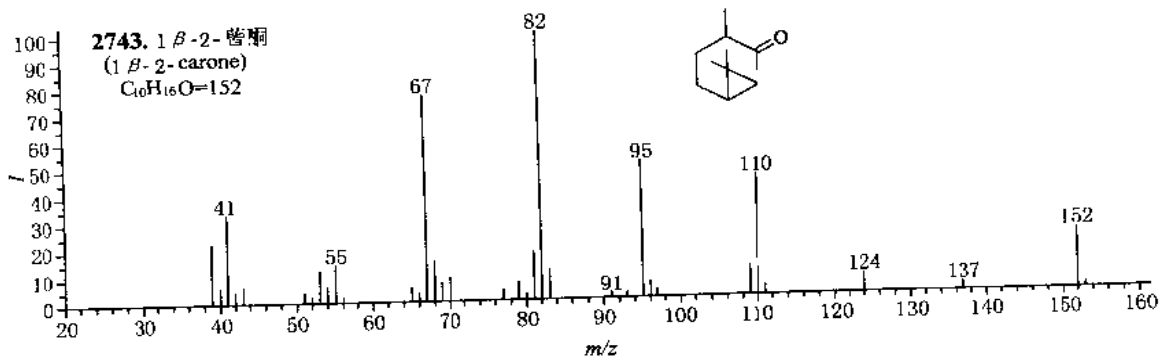


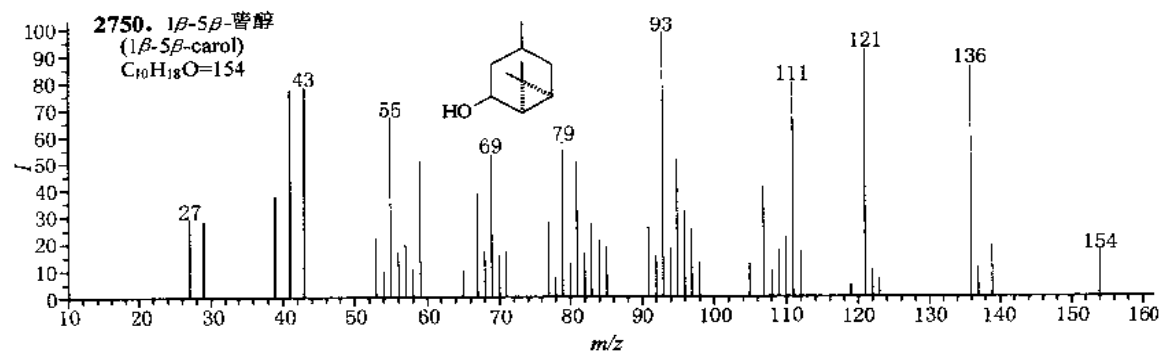
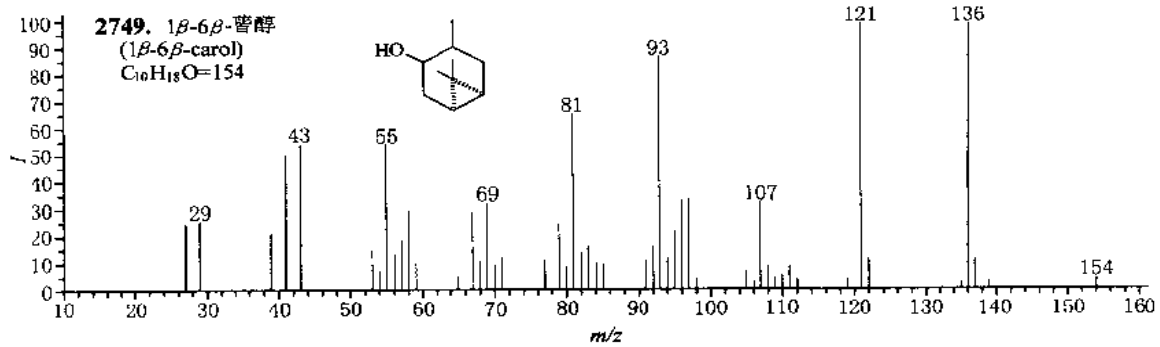
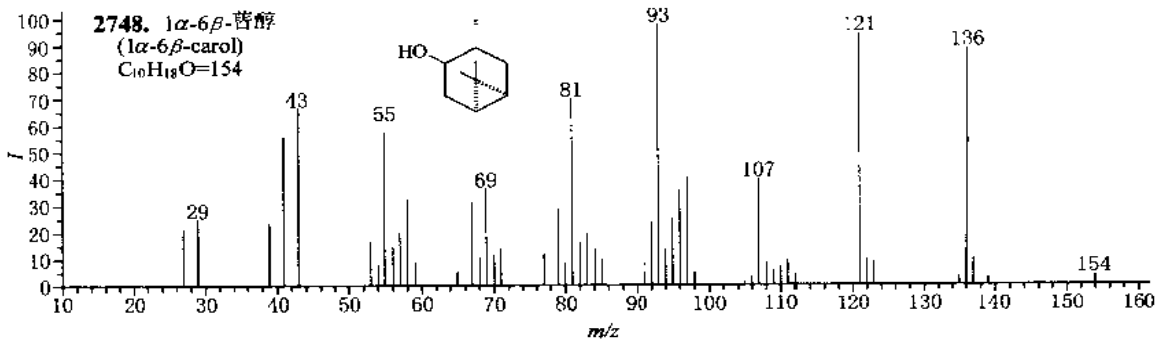
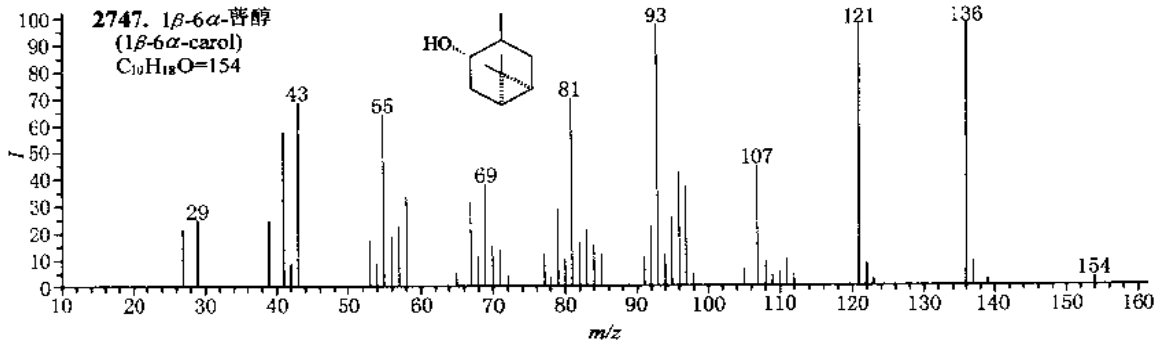


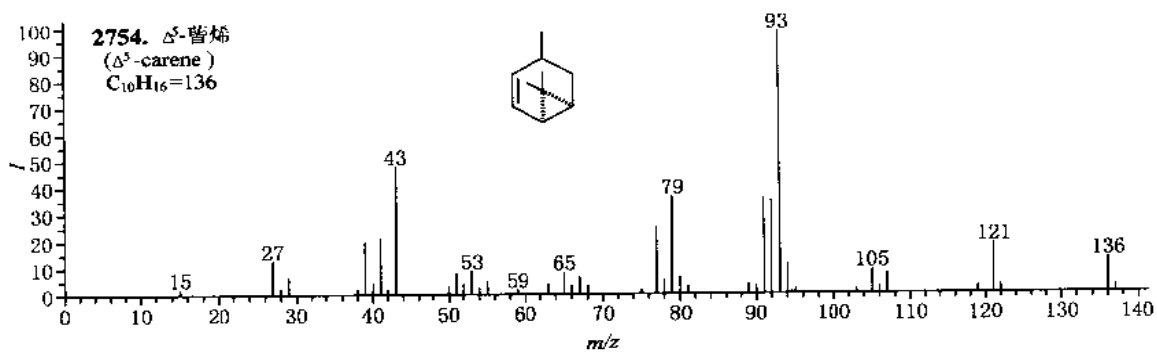
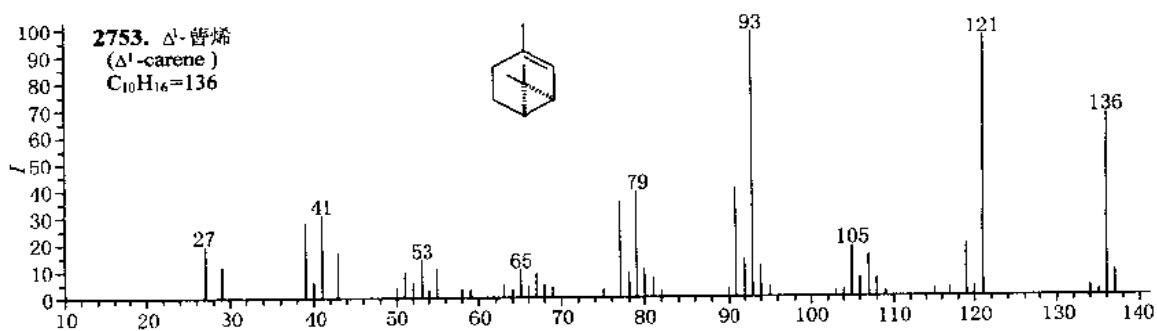
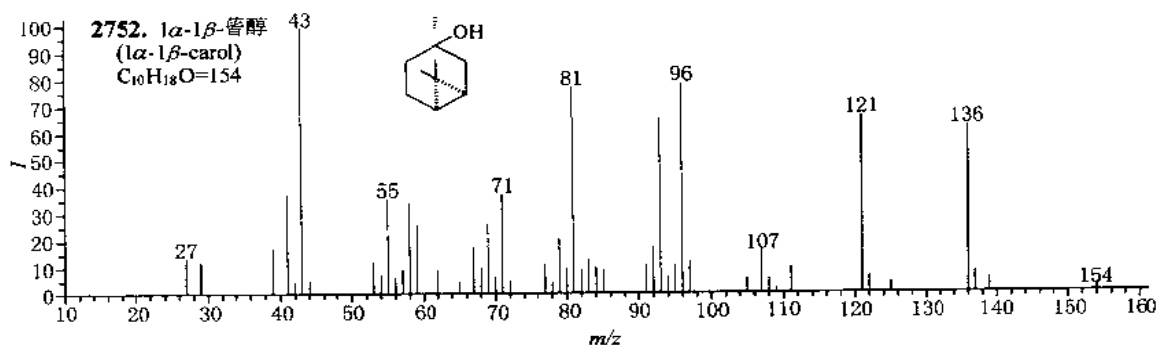
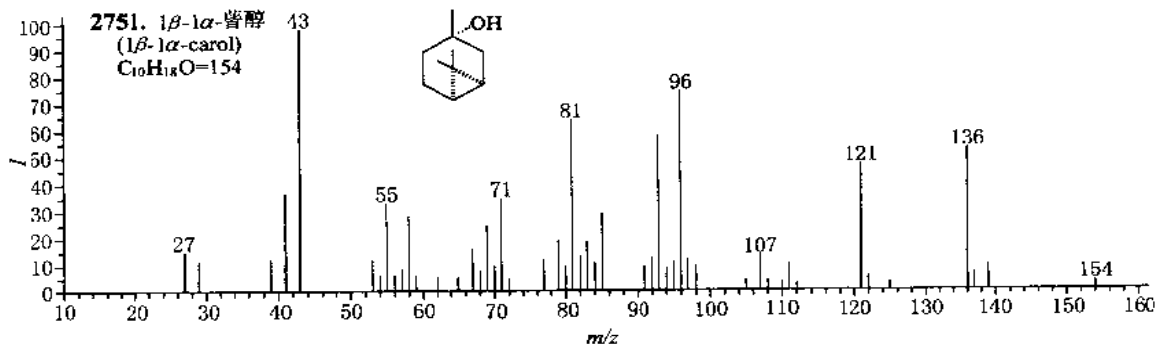


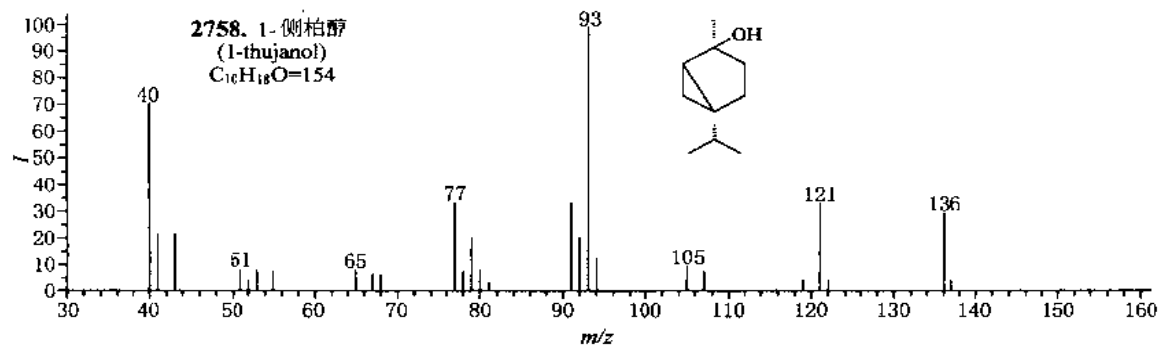
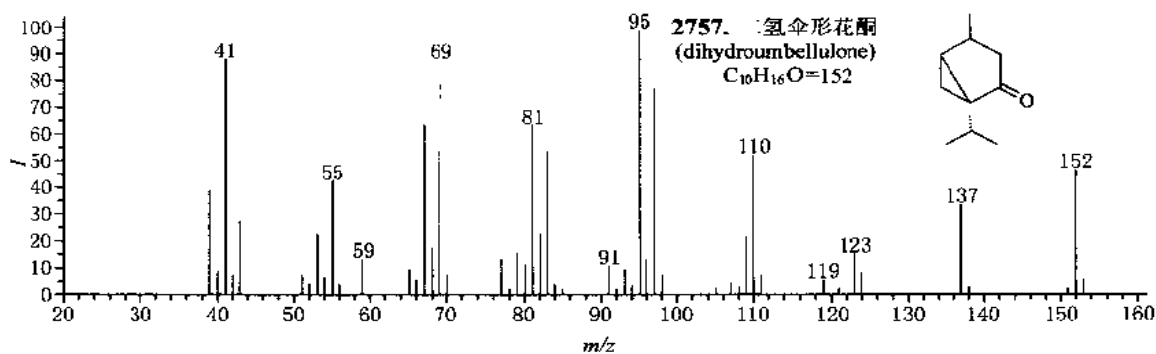
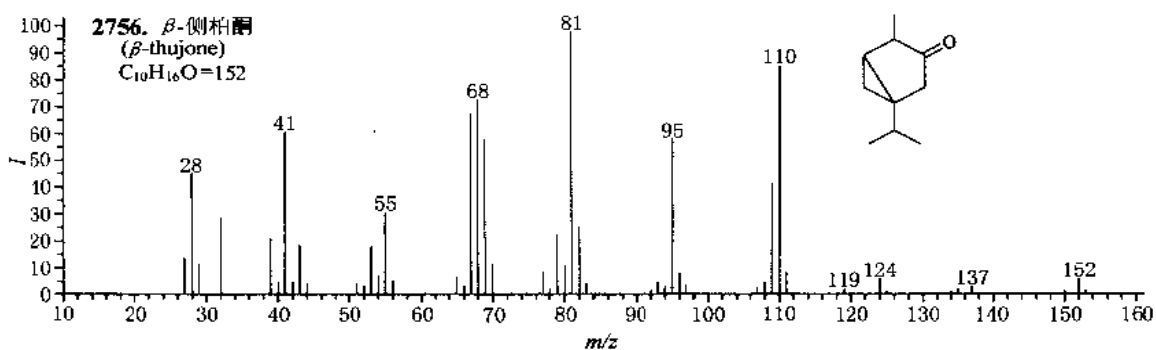
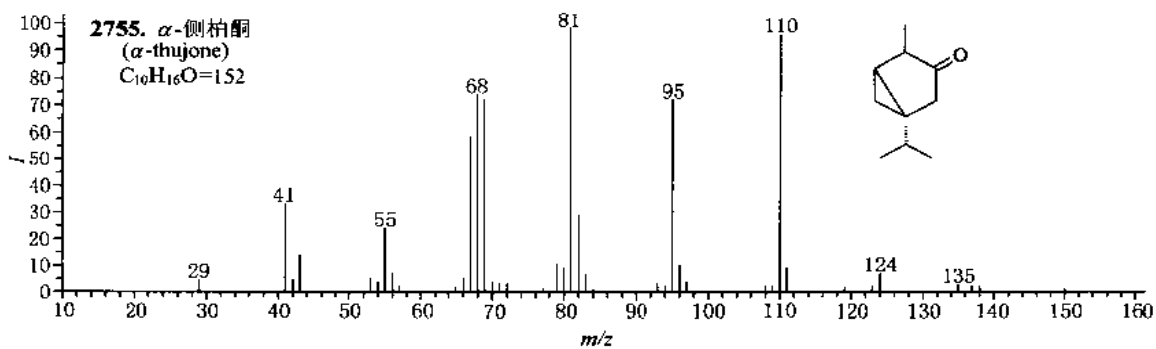


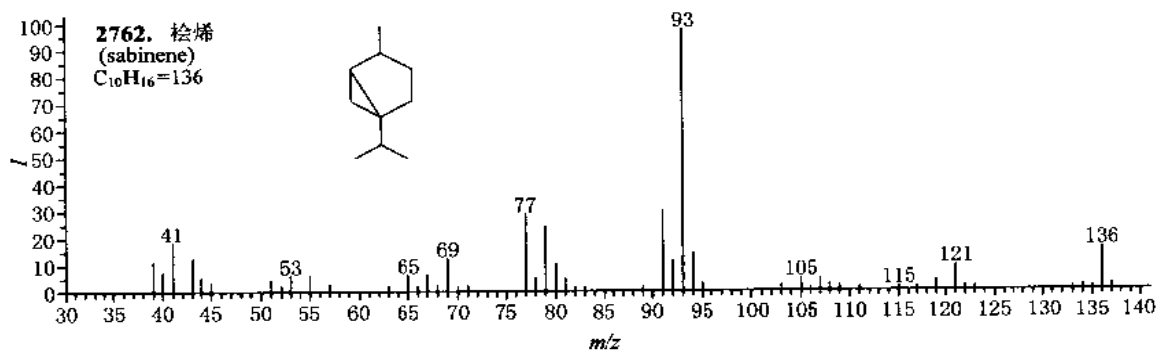
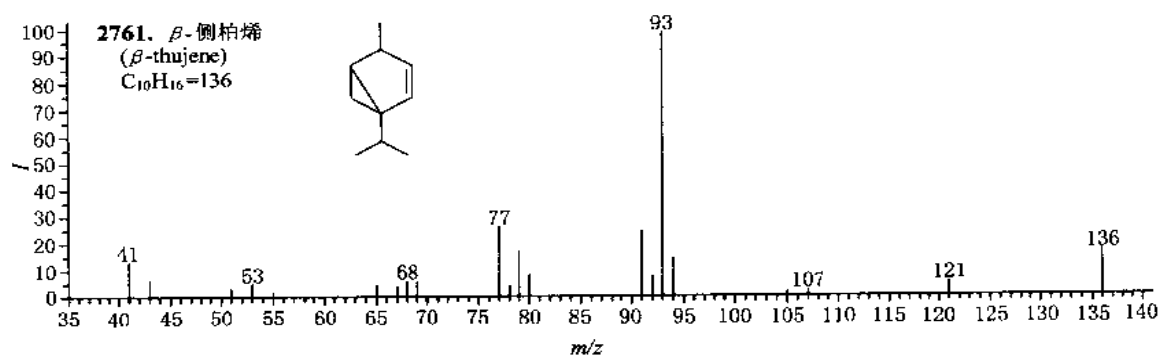
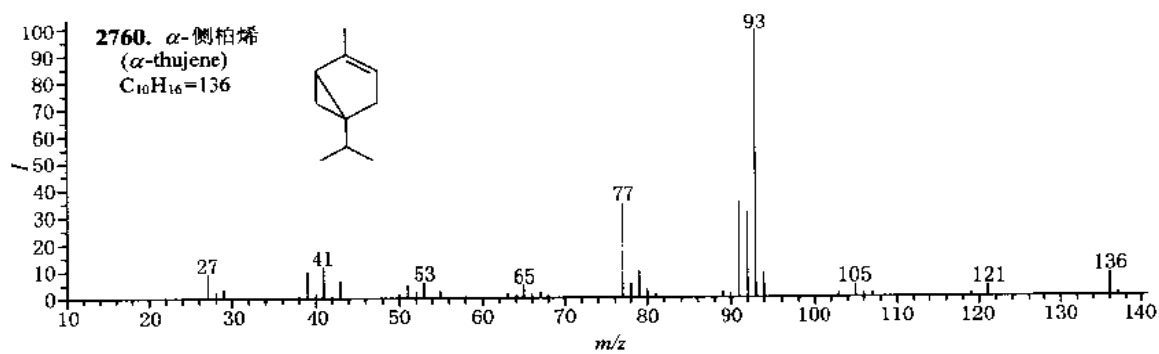
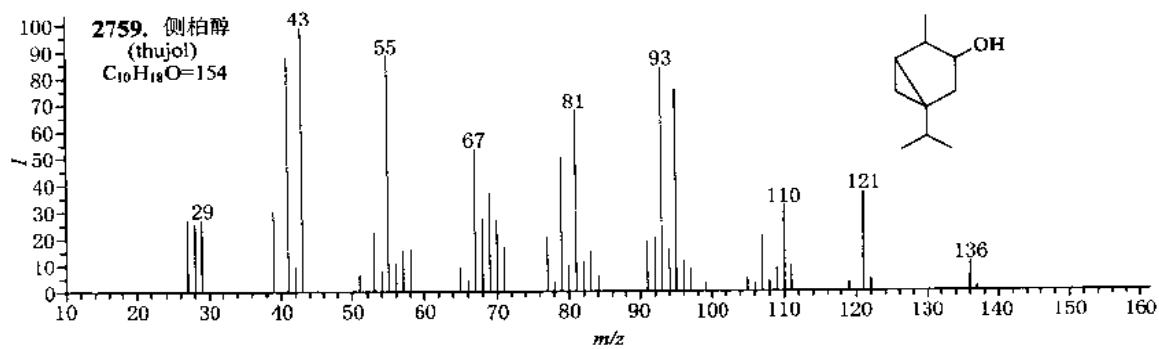


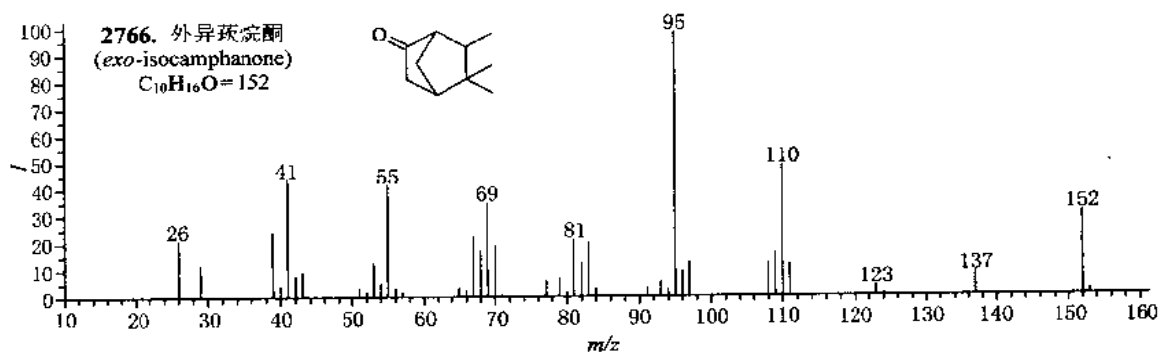
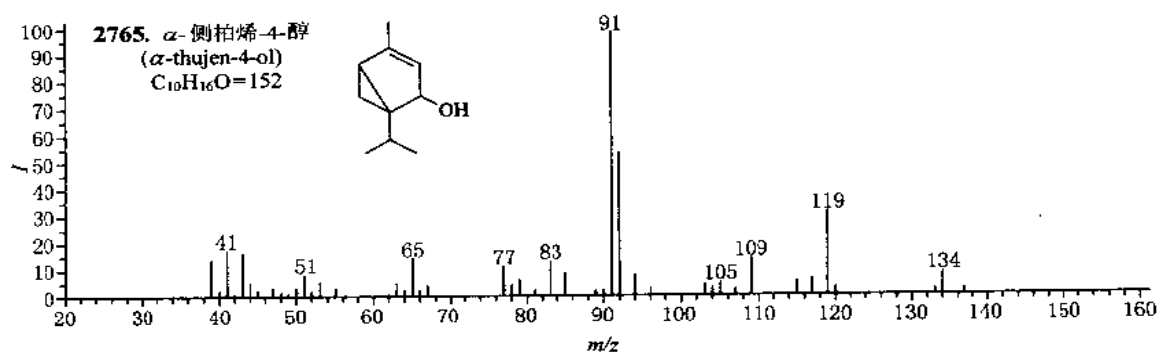
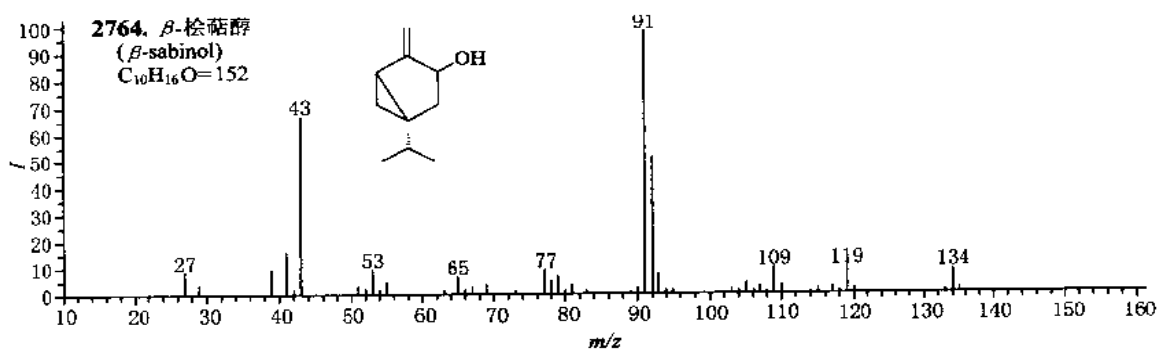
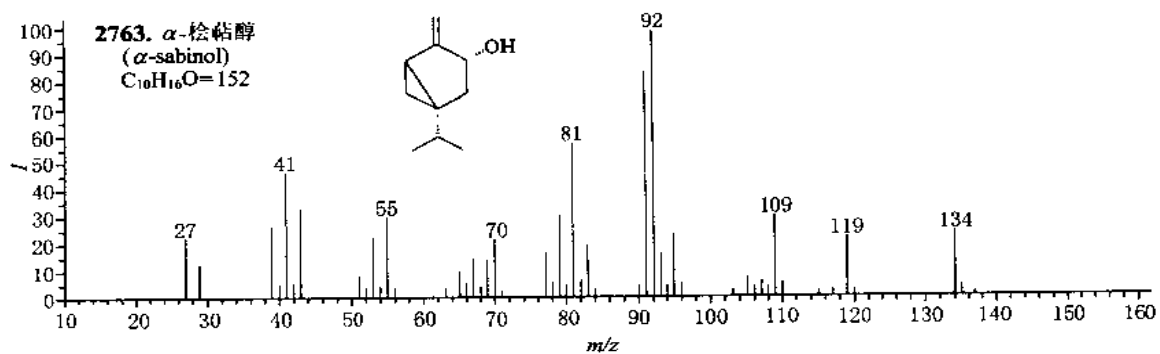




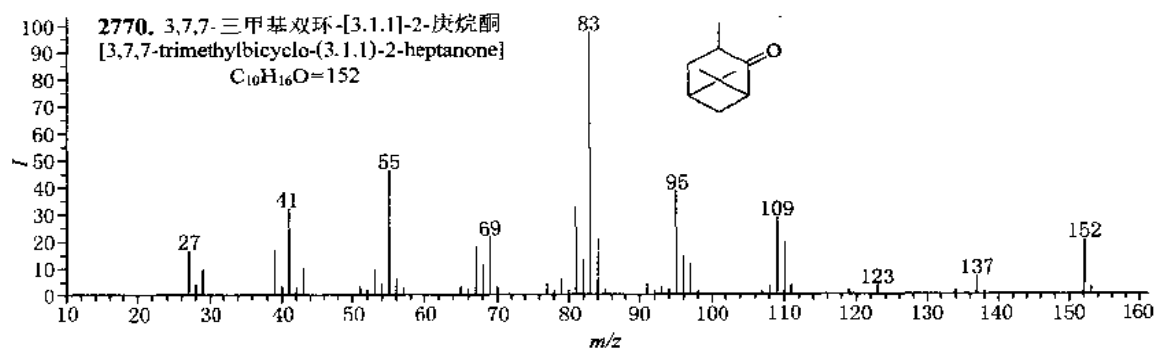
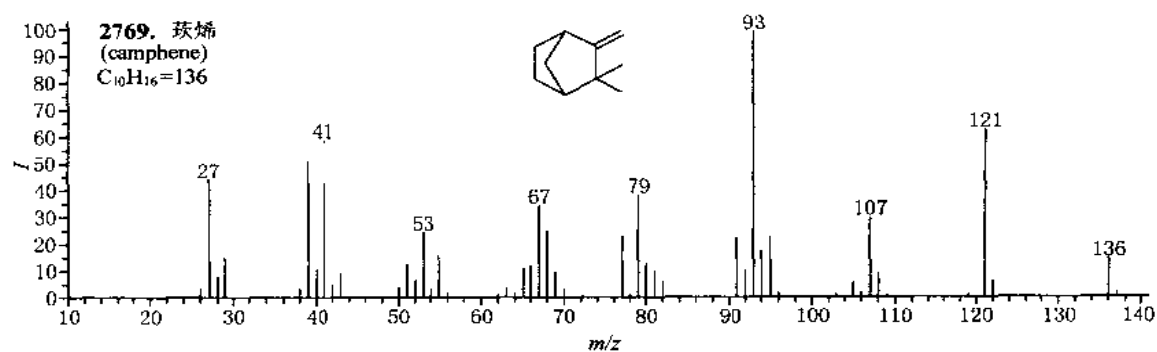
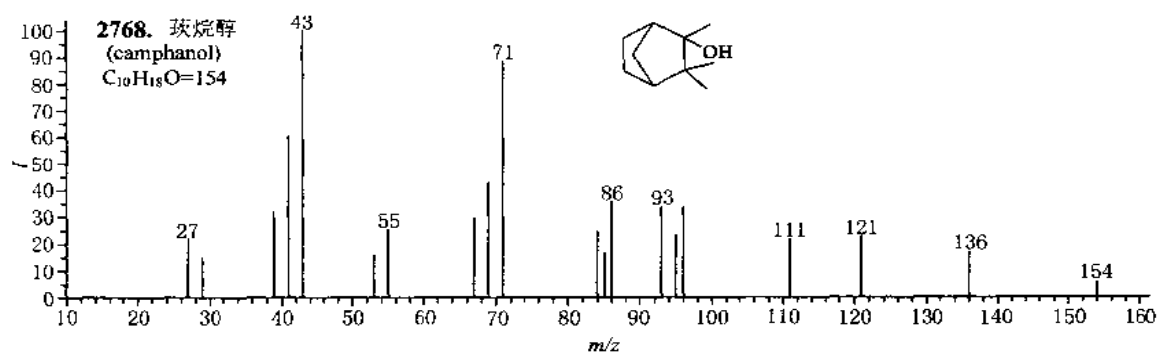
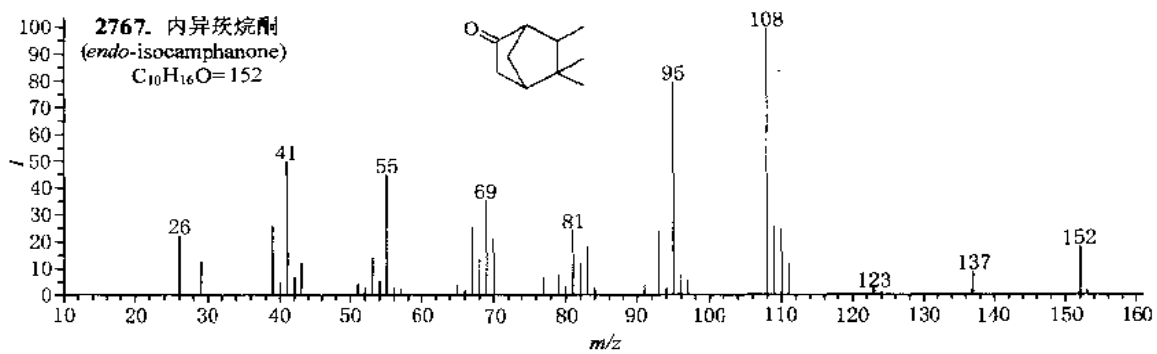


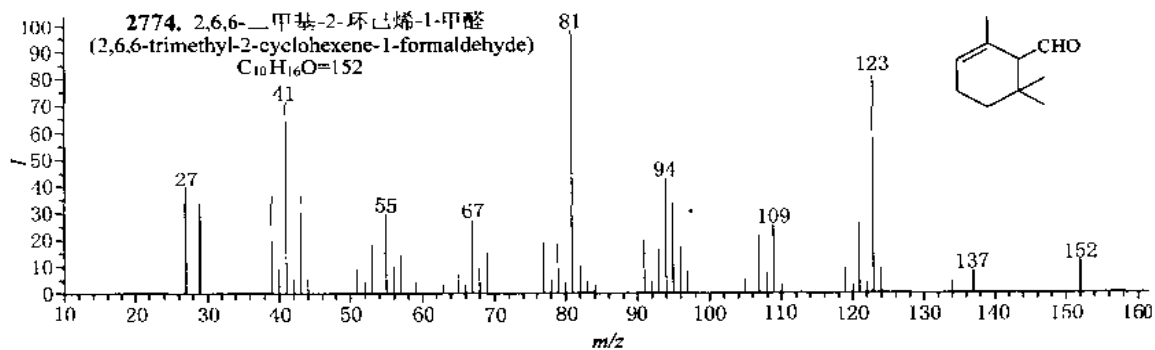
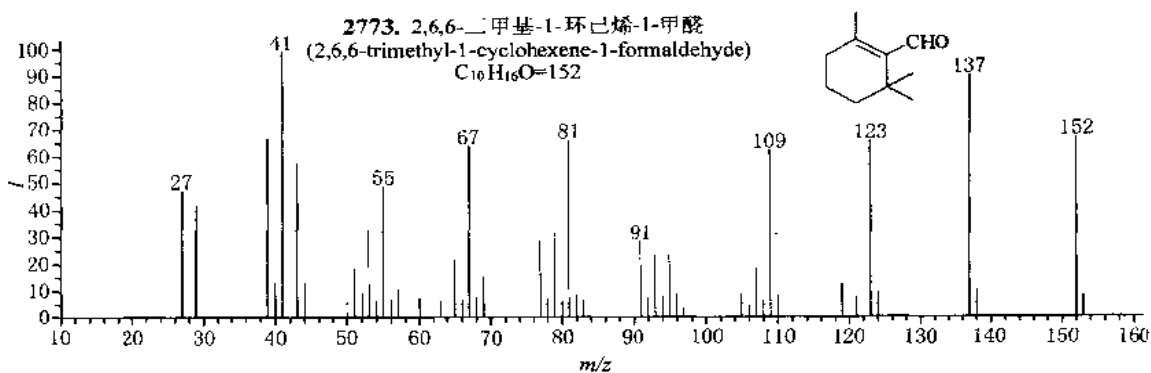
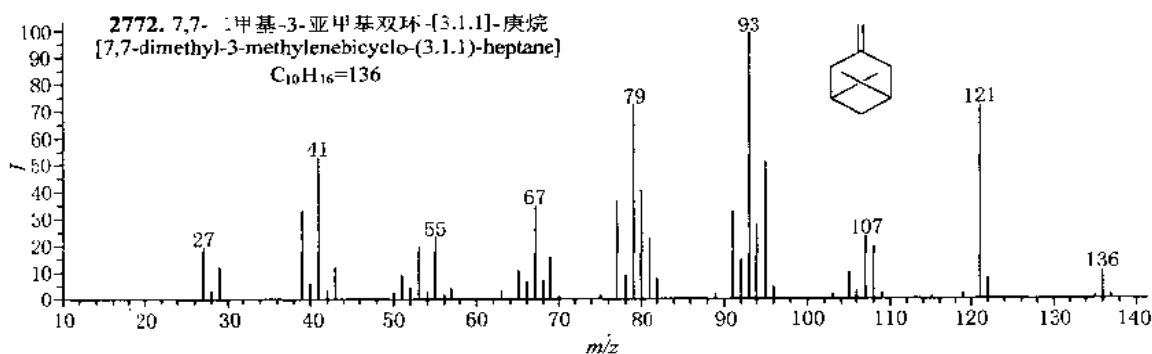
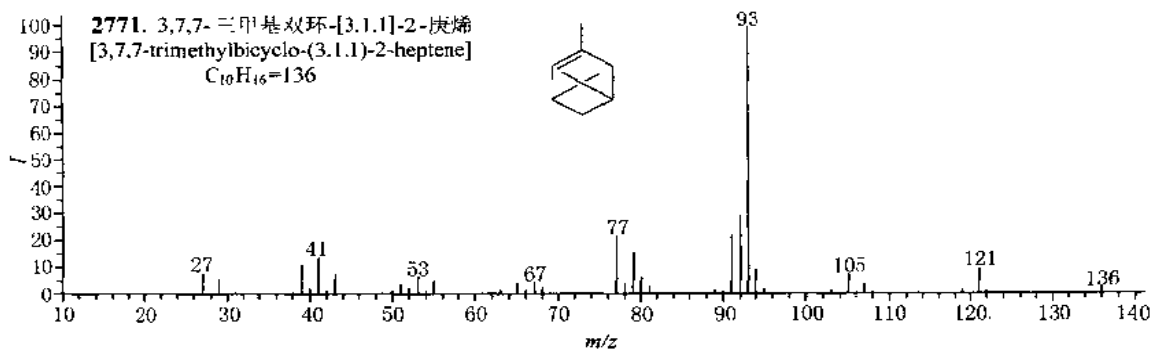


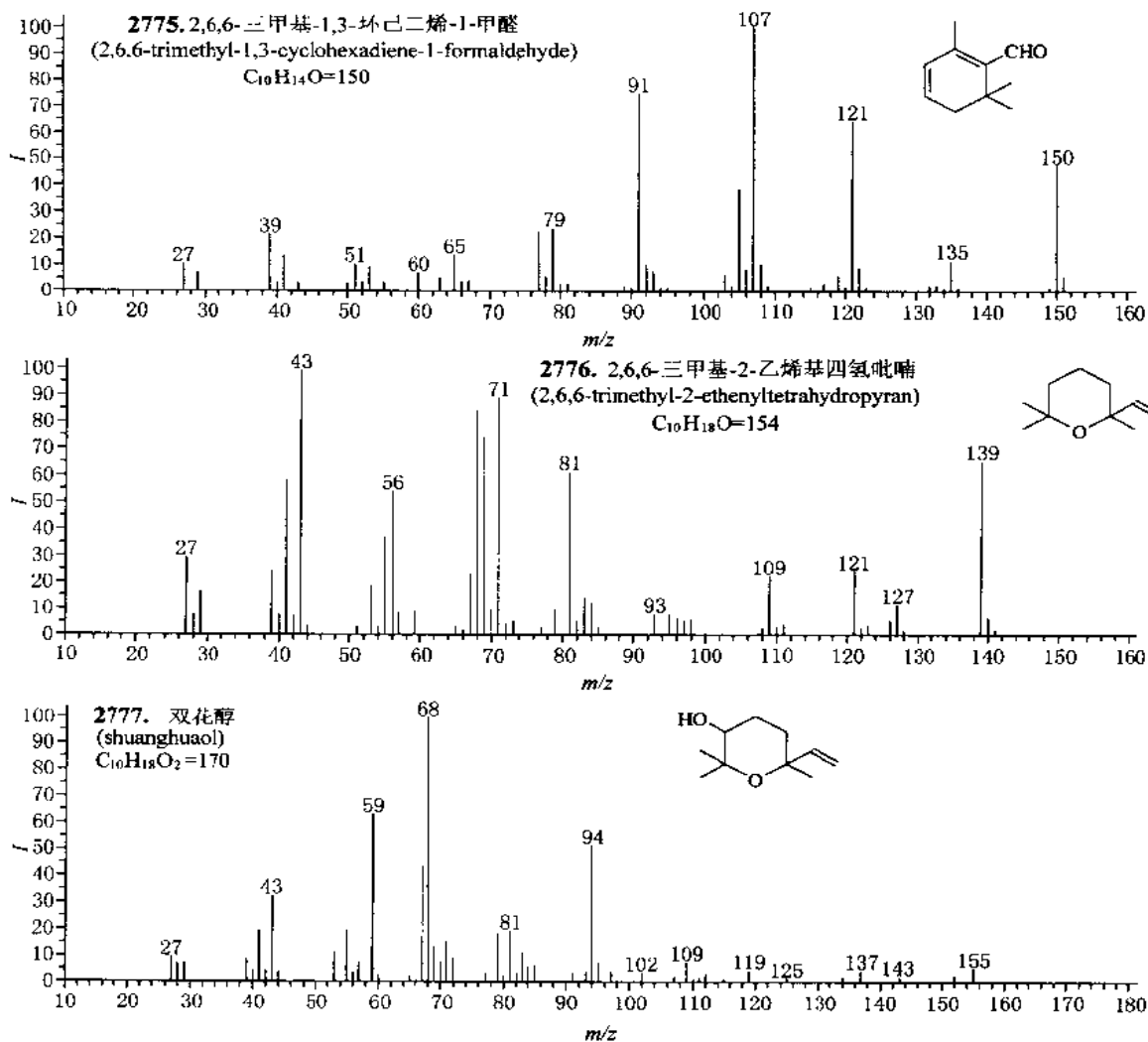








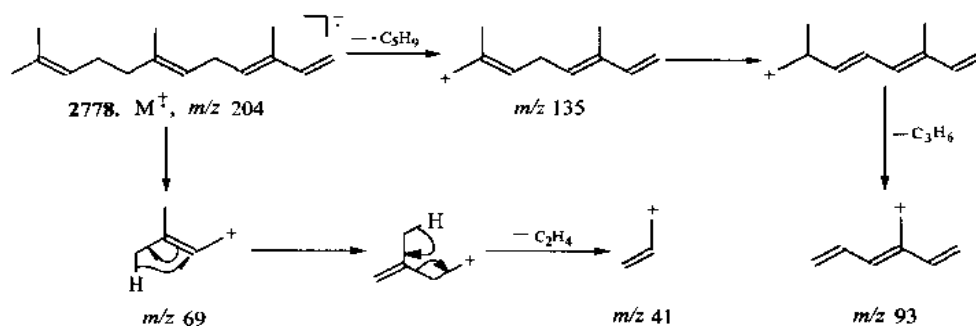




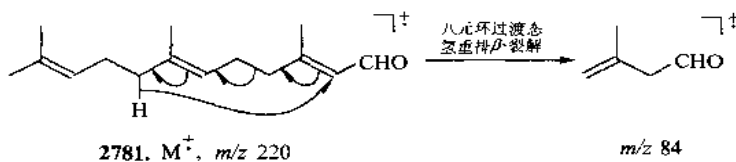
## 第二节 倍半萜类

### 一、麝子油烷类

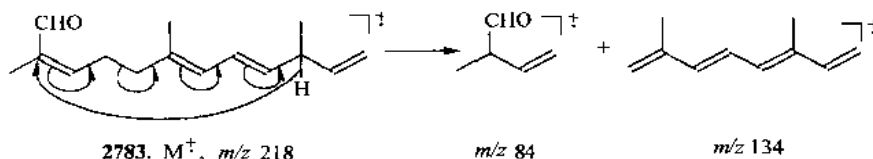
(1) 金合欢烯类 (2778~2780) 都有离子  $m/z$  93、69 和  $m/z$  41, 其产生方式如下:



(2) 金合欢醛类(2781, 2782)除有强峰  $m/z$  69 和  $m/z$  41 外, 尚有偶数质量离子  $m/z$  84, 可用八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解来解释:



$\beta$ -华报春花醛 (2783) 的类似裂解得到的是离子  $m/z$  84 和  $m/z$  134 一对互补离子:

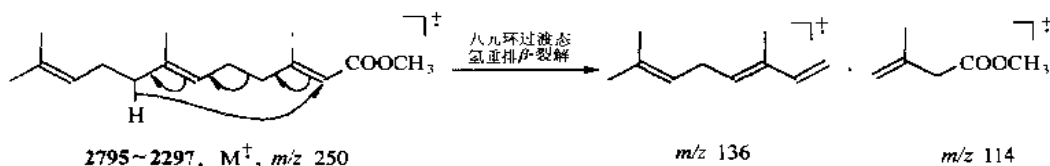


(3) 金合欢醇类 (2784~2786) 的八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解, 是在  $M-H_2O$  离子的结构中进行的, 产物是离子  $m/z$  136 ( $M-H_2O-C_5H_8$ ).

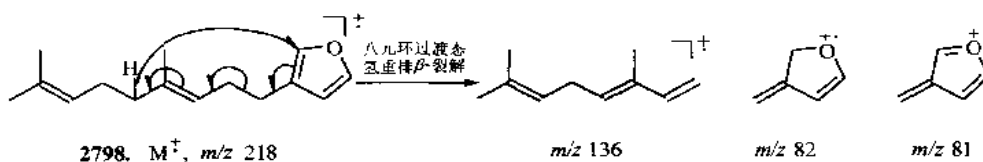
苦橙油醇类 (2787, 2788) 仍然有上述  $M-H_2O-C_5H_8$  的裂解。

二氢金合欢醇类 (2789~2794) 只有一般性裂解, 没有上述的特征裂解。

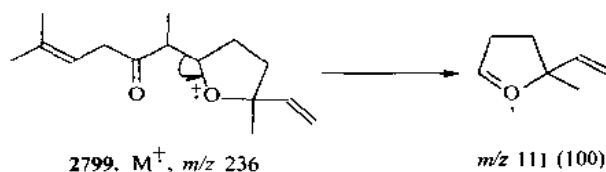
(4) 金合欢烯酸甲酯类 (2795~2797) 都有离子  $m/z$  114, 这也是通过八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解产生的, 同时产生的互补离子  $m/z$  136 较弱:



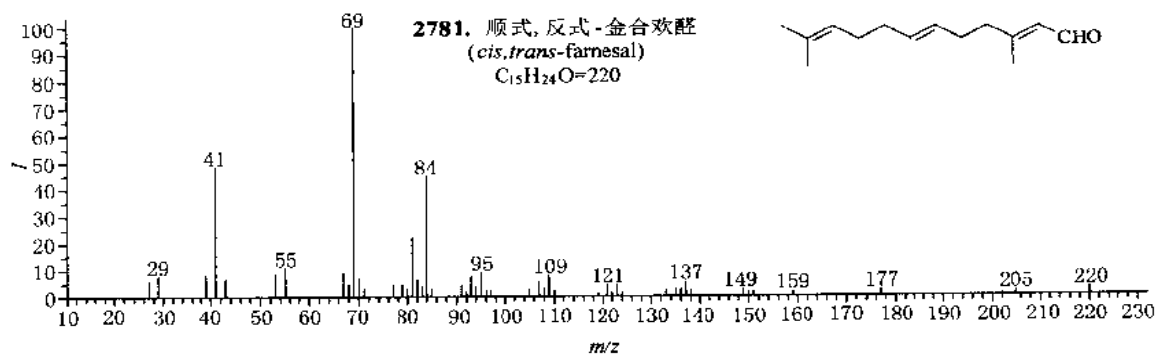
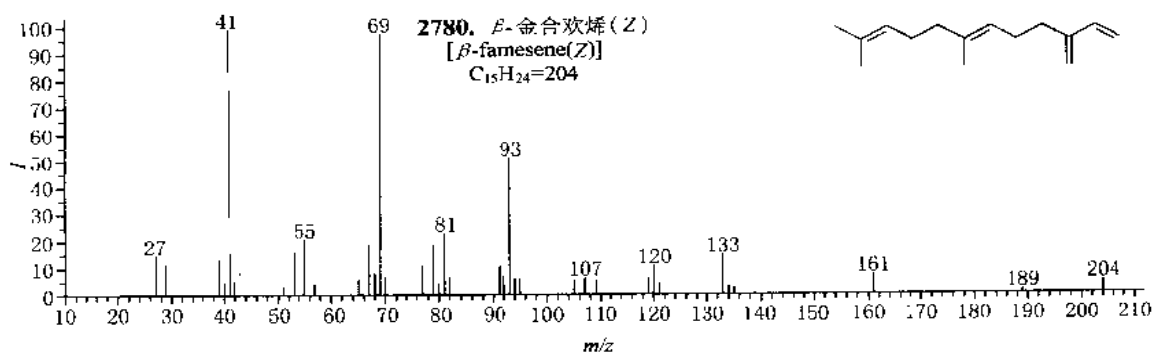
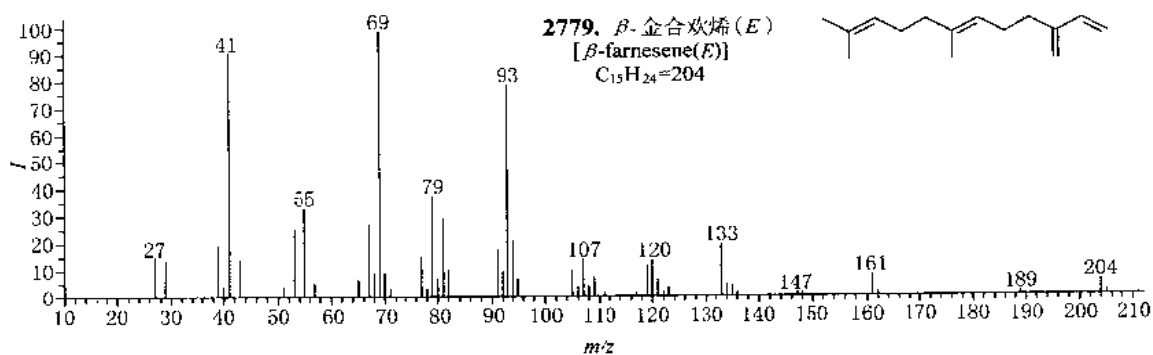
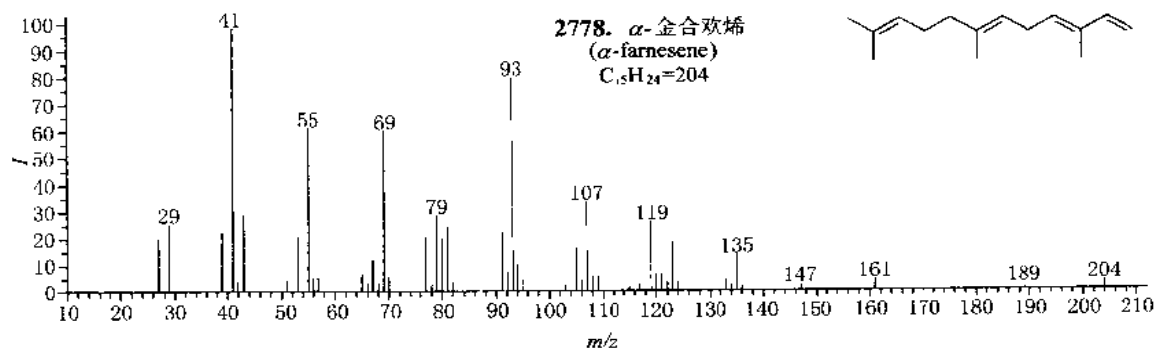
(5) 敦酌拉辛 (2798) 的八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解产生一对互补离子  $m/z$  136 和  $m/z$  82, 离子  $m/z$  81 是不转移氢的烯丙裂解产物:

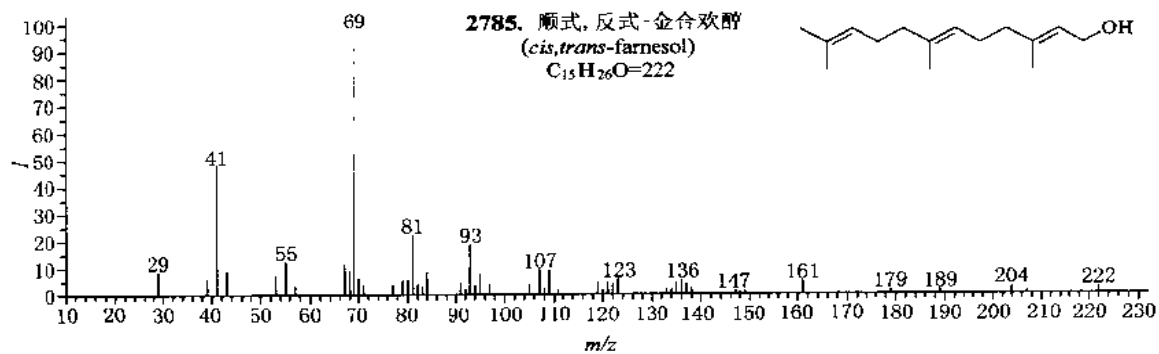
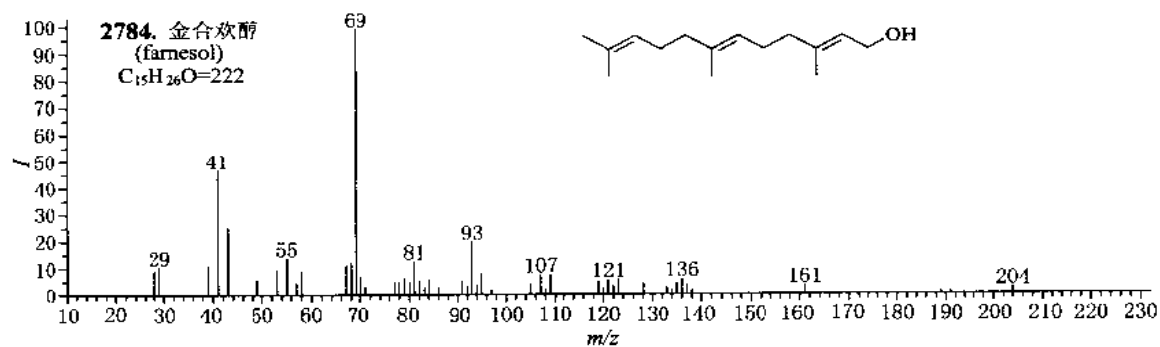
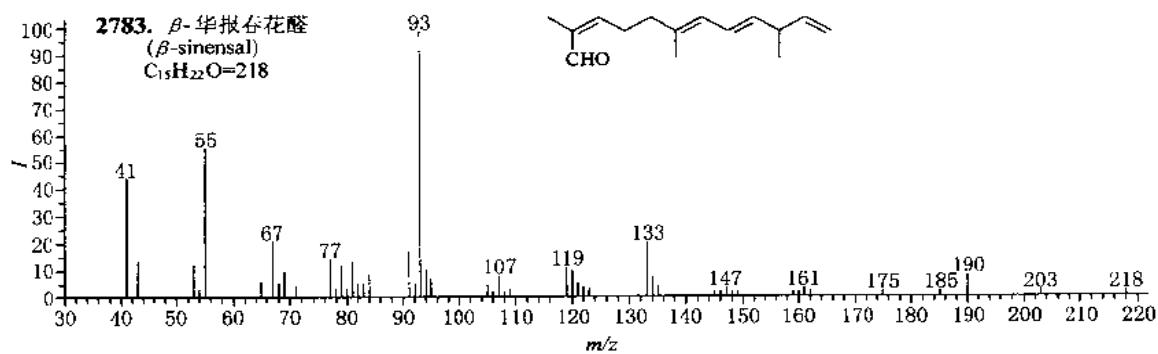
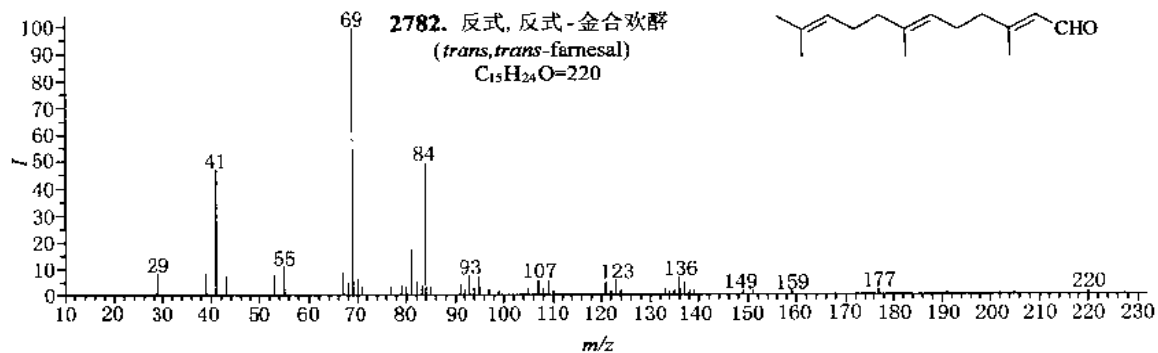


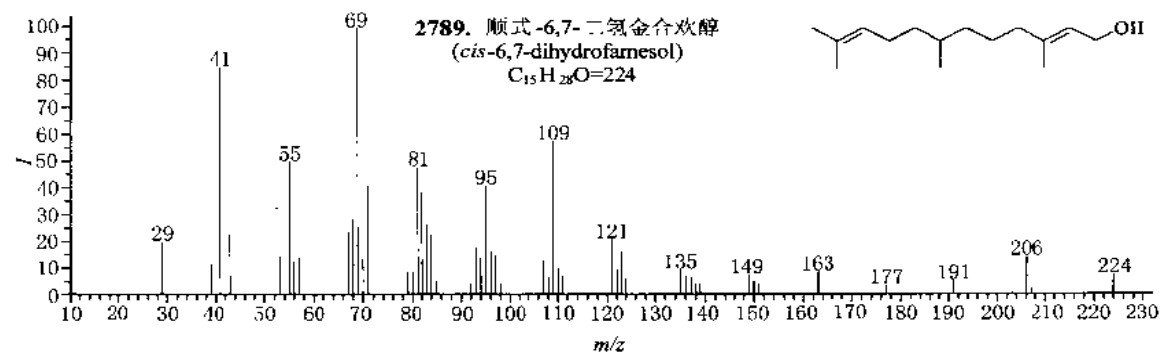
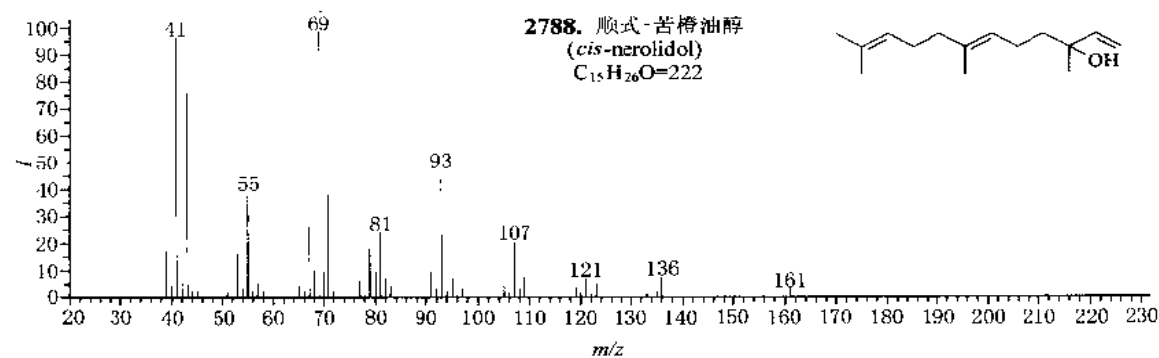
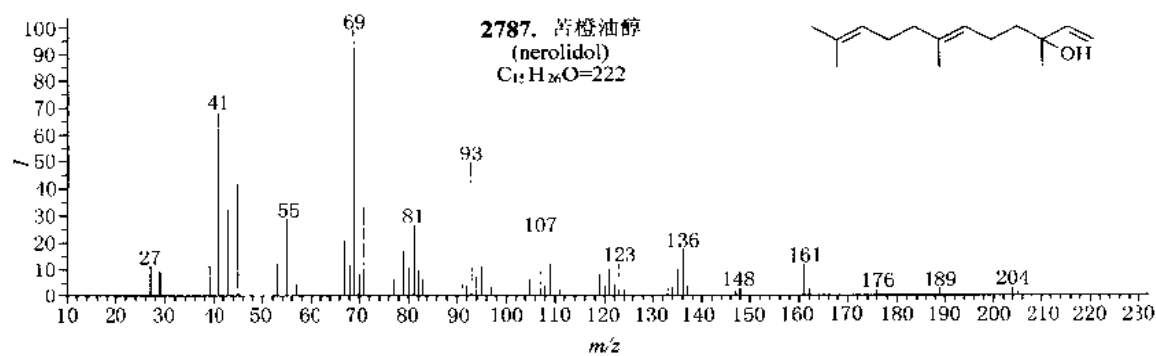
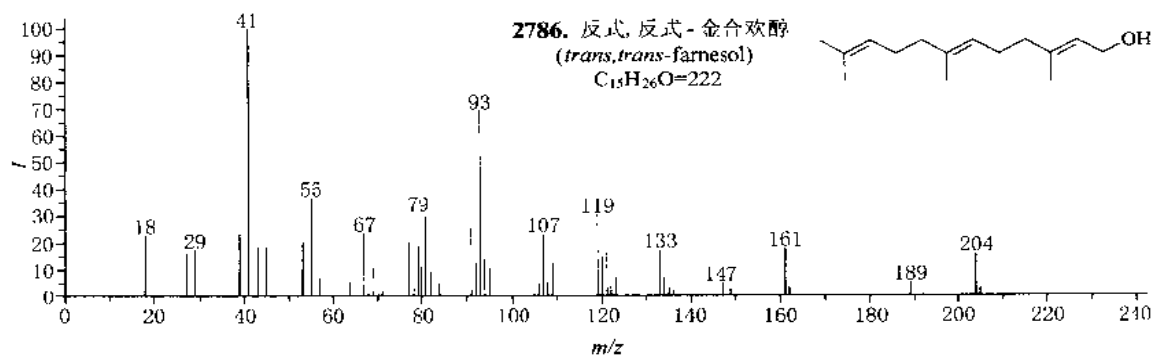
大瓦酮 (2799) 只能进行四氢呋喃环的  $\alpha$ -裂解得离子  $m/z$  111 (基峰), 没有羰基的麦氏重排裂解发生:

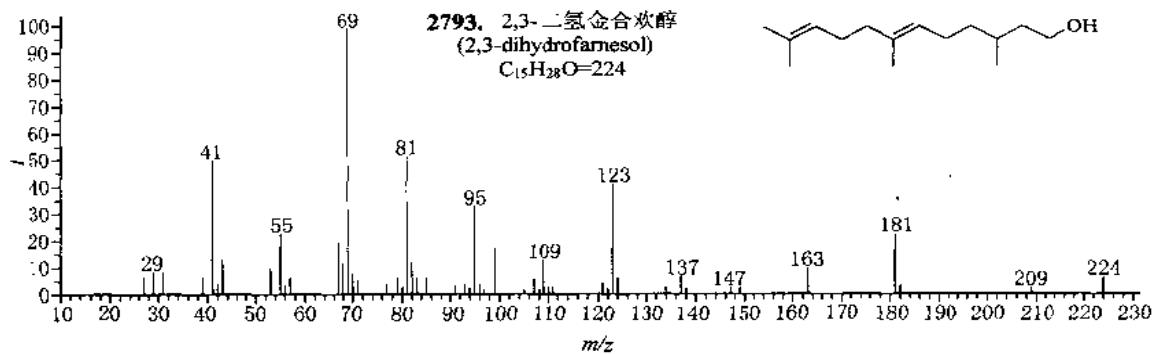
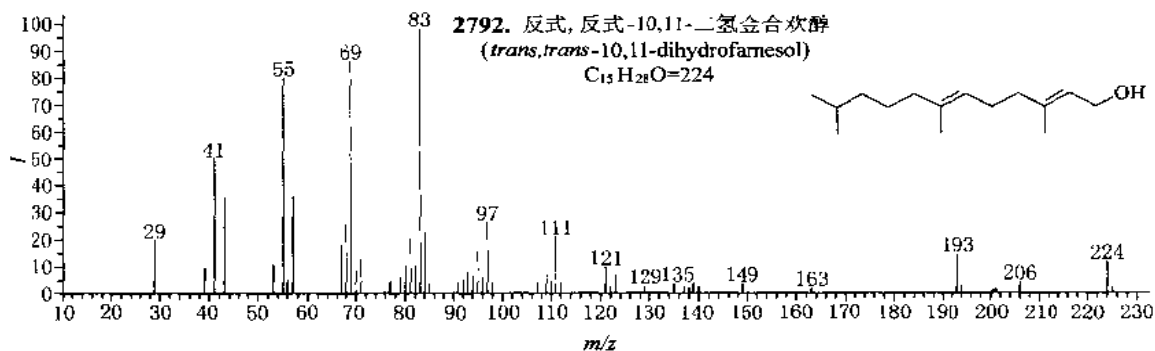
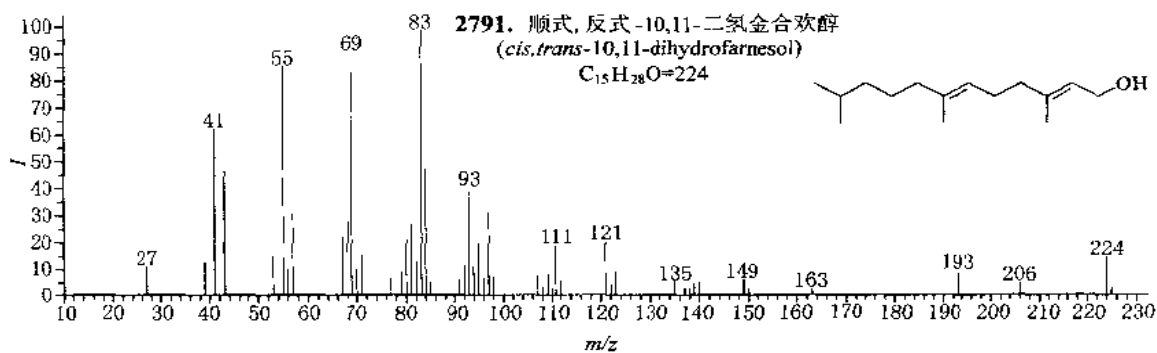
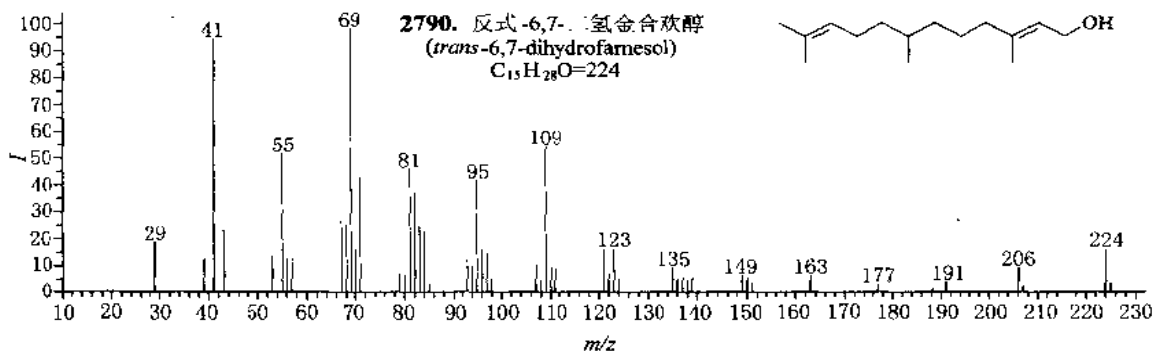


脱落酸甲酯 (2800) 的离子  $m/z$  190 难以解释。

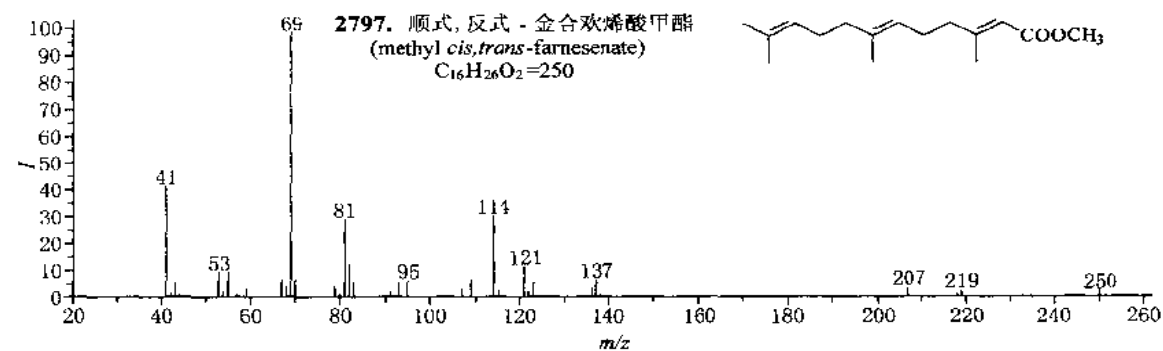
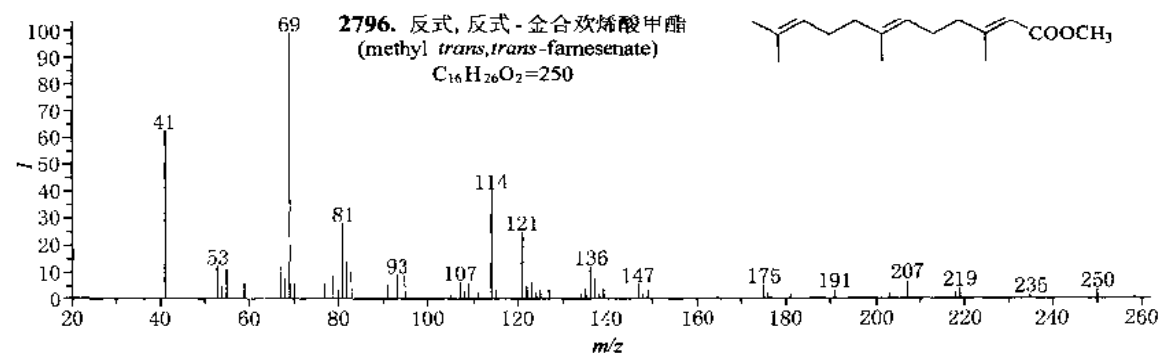
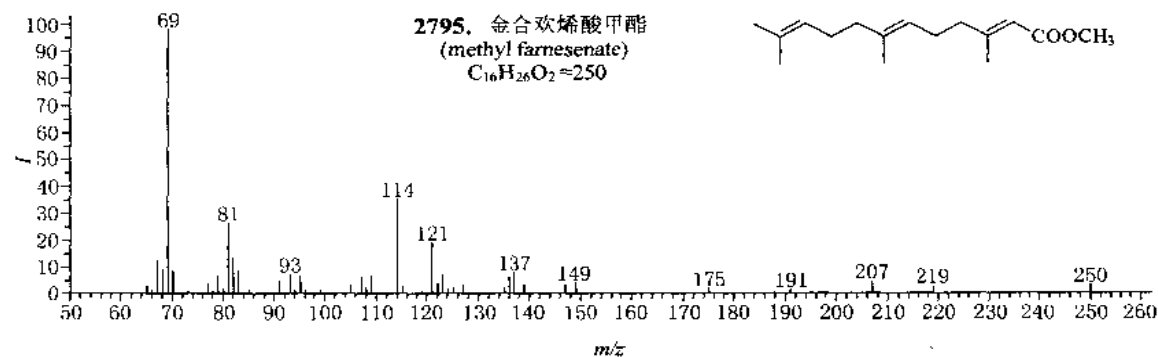
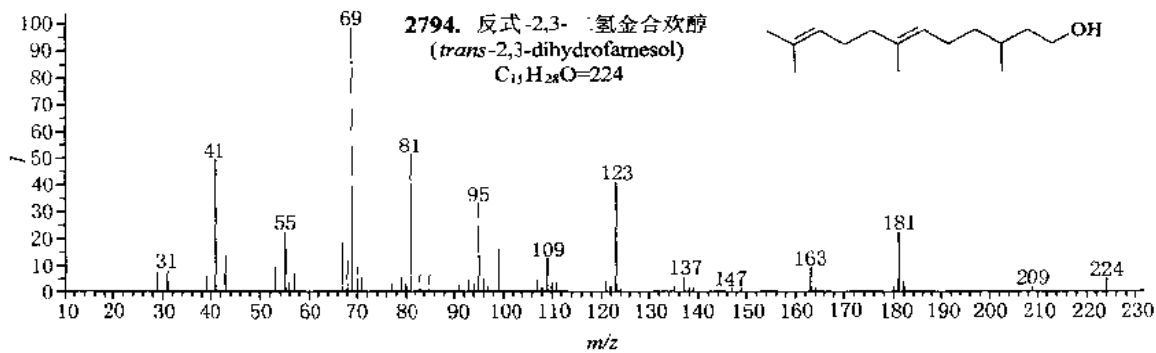


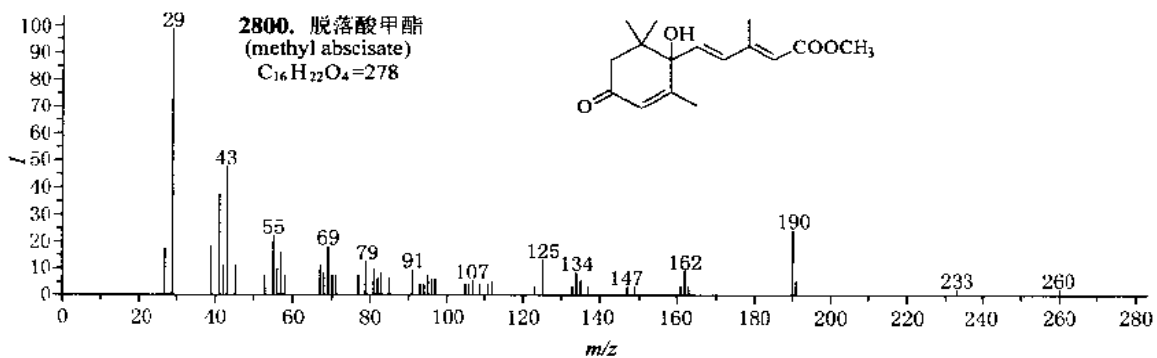
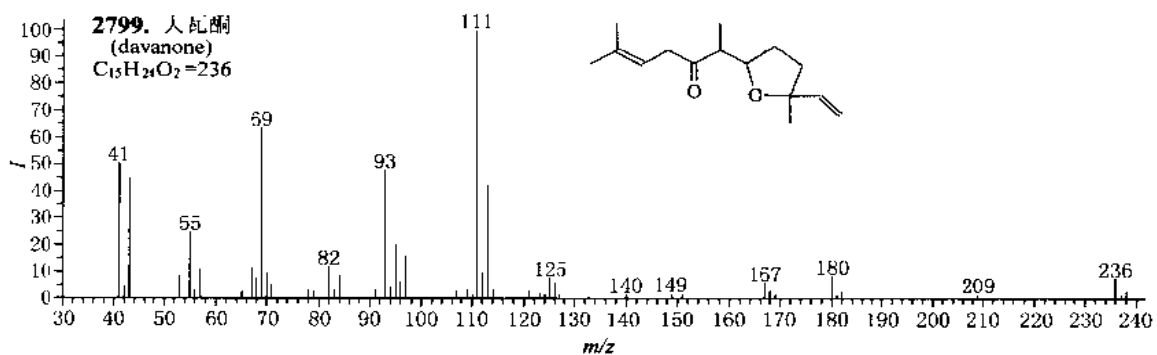
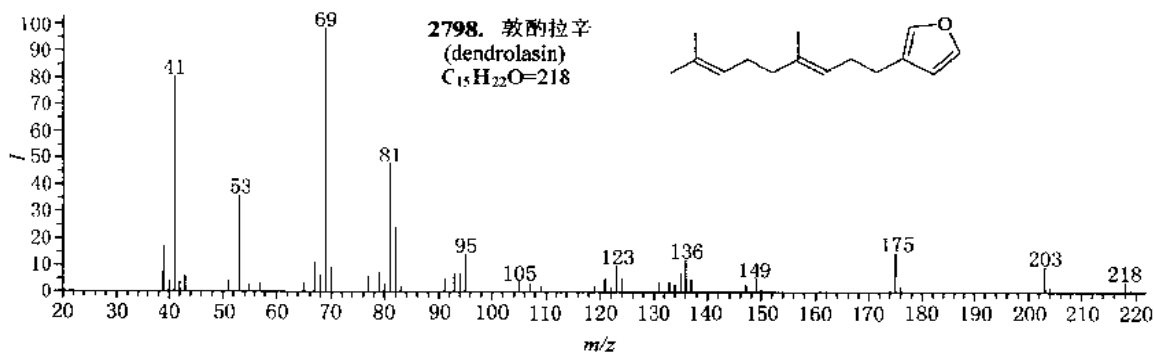






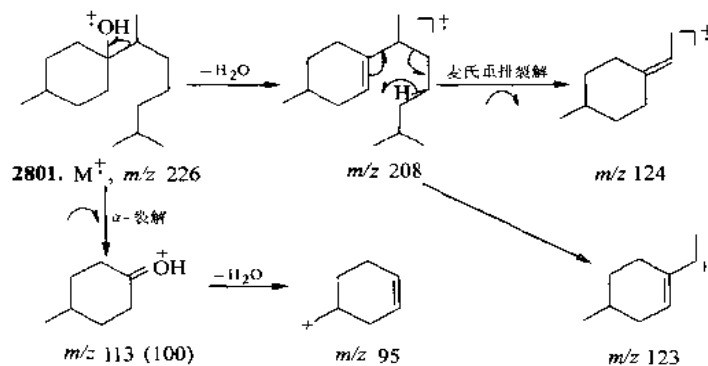




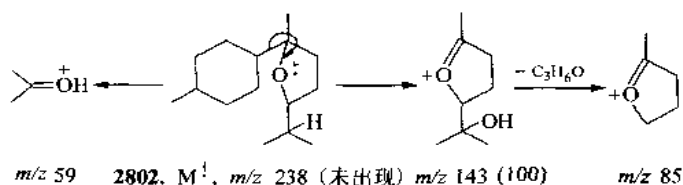


## 二、没药烷类

(1)  $\beta$ -没药烷醇 (2801) 的基峰  $m/z$  113 是由于  $\alpha$ -裂解产生的, 而偶数质量的离子  $m/z$  124, 则是由分子离子失去水, 然后进行麦氏重排裂解产生的:

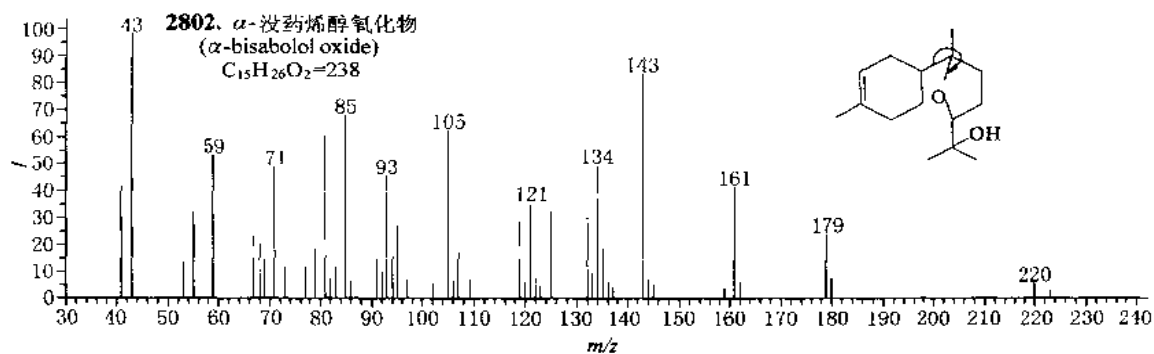
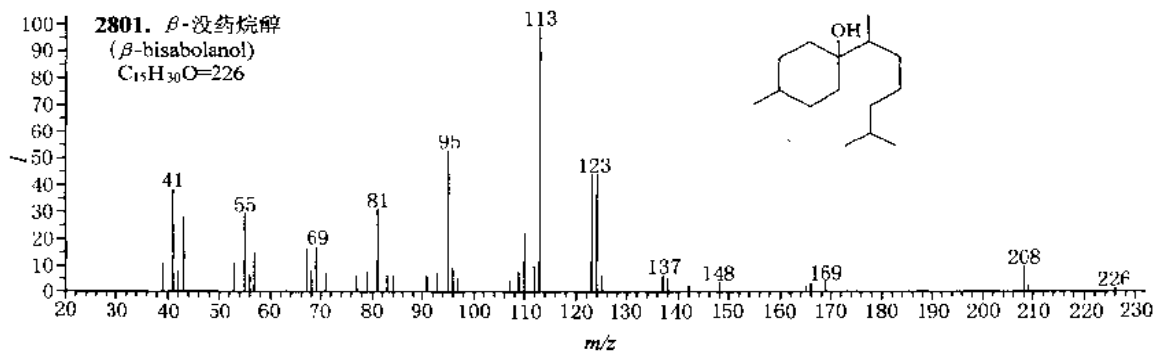


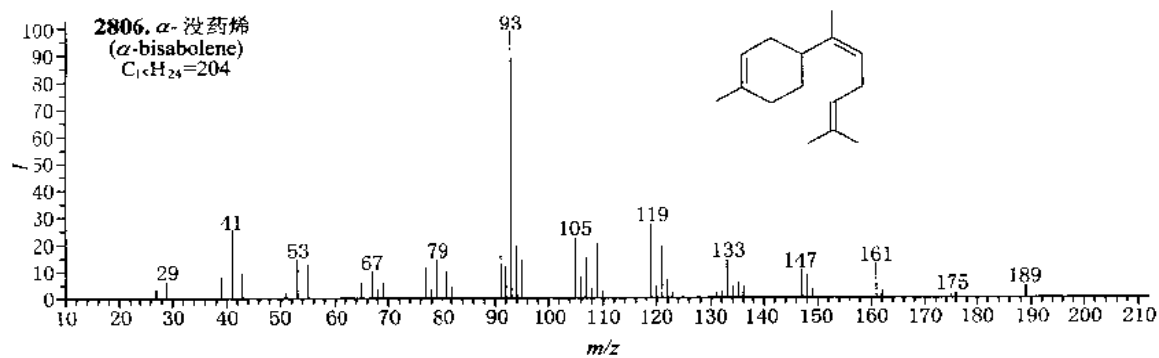
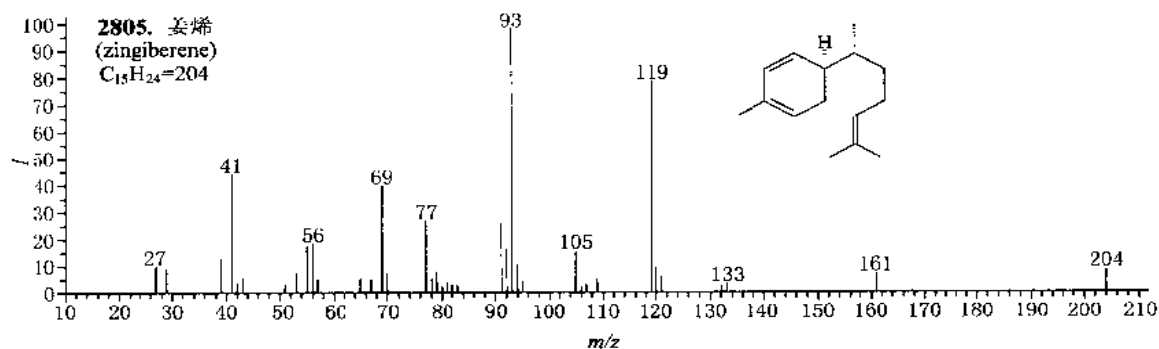
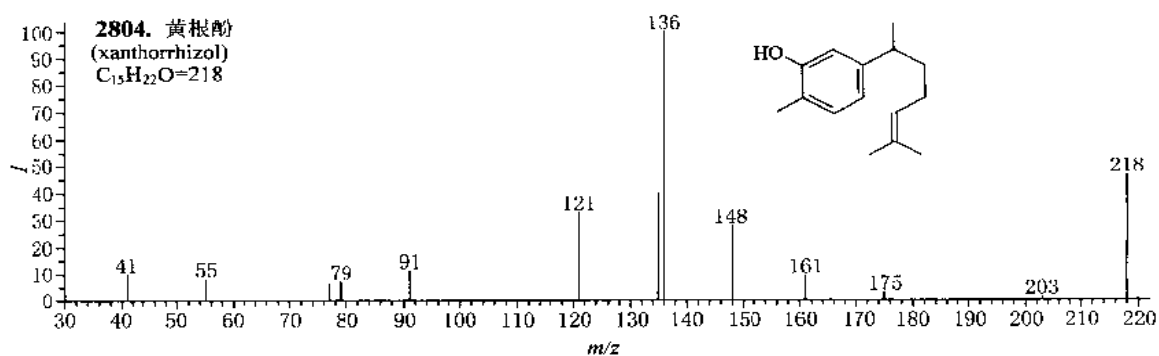
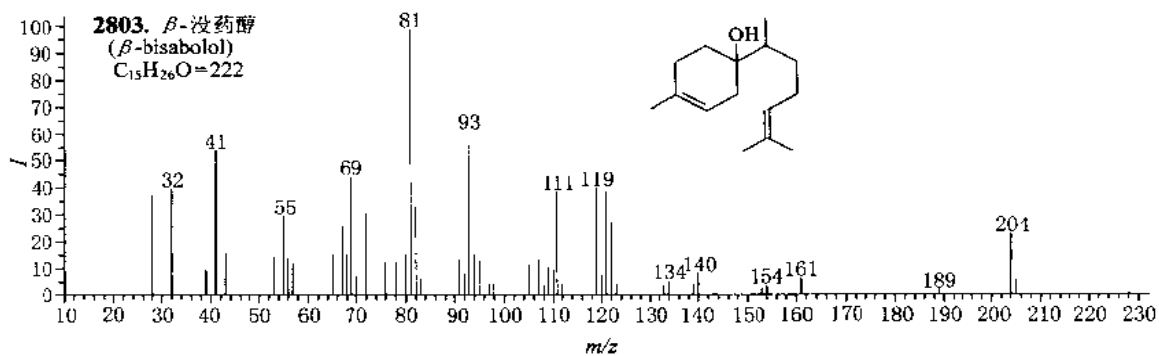
$\alpha$ -没药烯醇氧化物 (2802) 的基峰  $m/z$  143 来自  $\alpha$ -裂解:

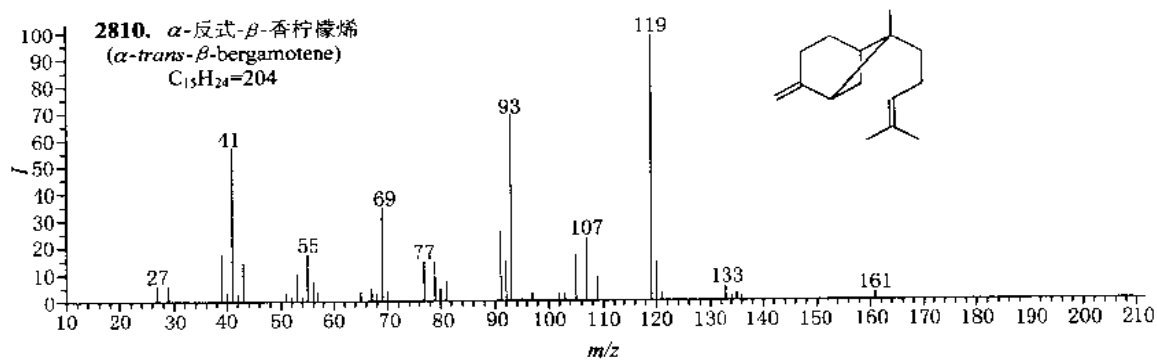
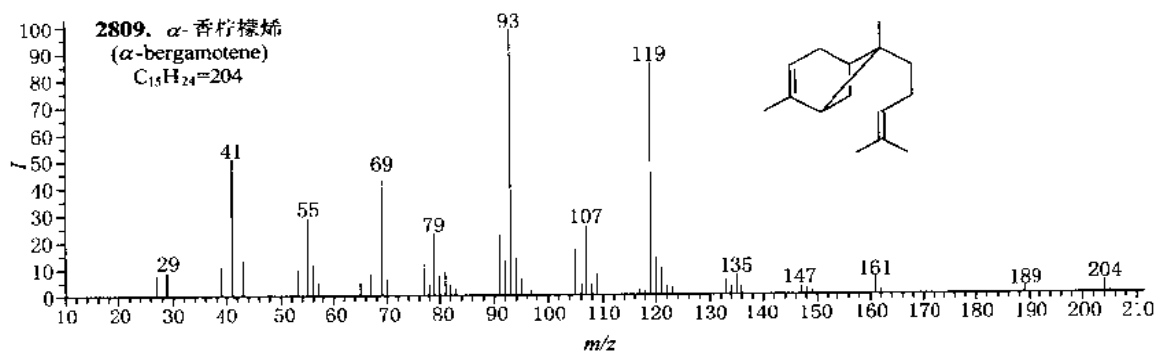
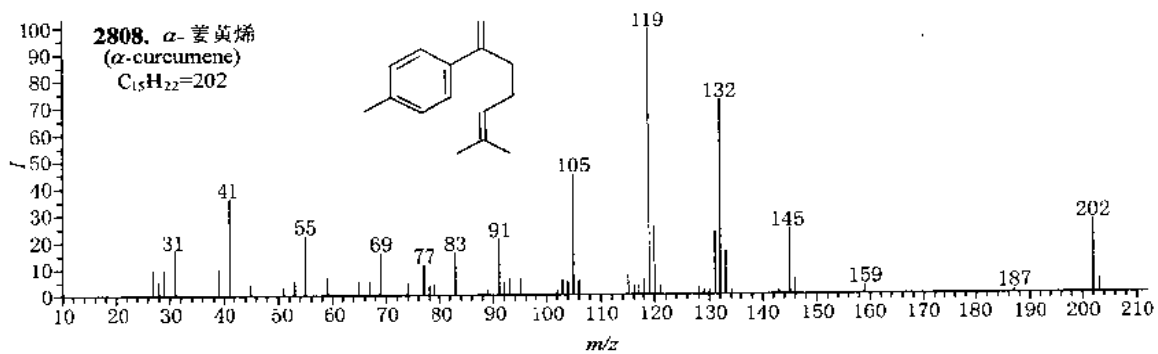
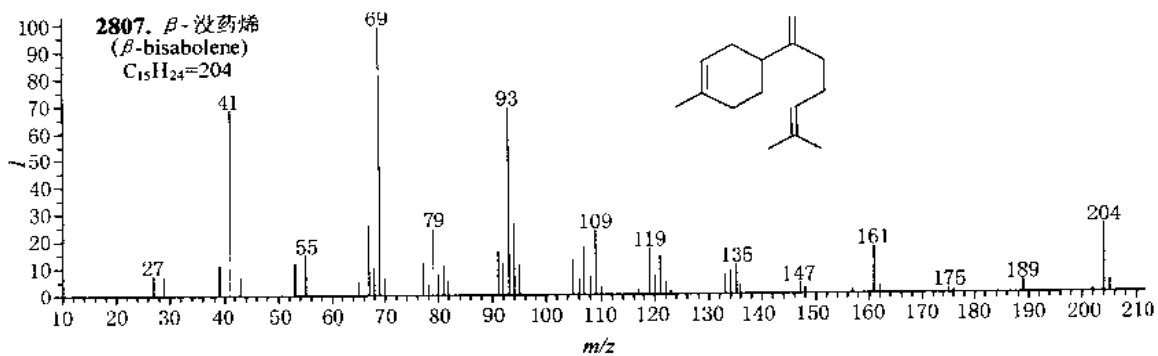


$\beta$ -没药醇 (2803) 的离子  $m/z$  122 和黄根酚 (2804) 的离子  $m/z$  136 都是麦氏重排裂解产生的。

(2) 没药烯类 (2805~2807) 的离子都是来自六元环的, 有的还要再失 2 个氢原子。 $\alpha$ -姜黄烯 (2808) 的离子  $m/z$  119 来自苜基裂解, 而离子  $m/z$  132 则来自侧链双键的麦氏重排裂解。香柠檬烯类 (2809, 2810) 的强峰  $m/z$  119 和  $m/z$  93 都含有六元环。



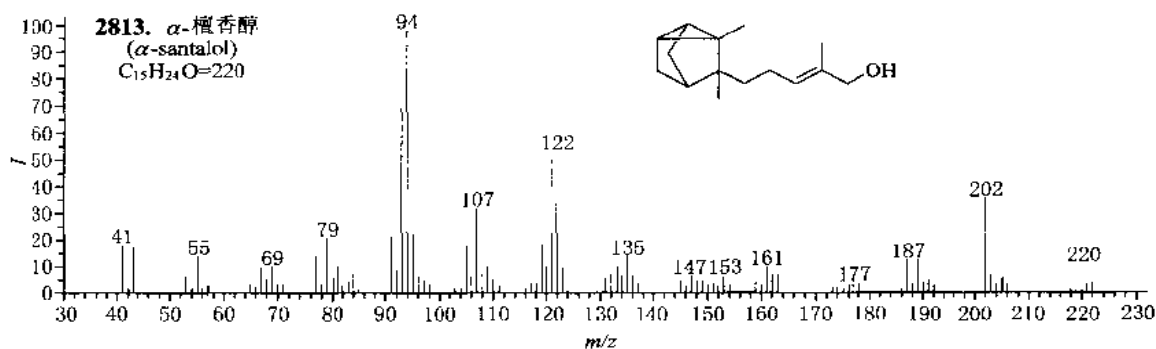
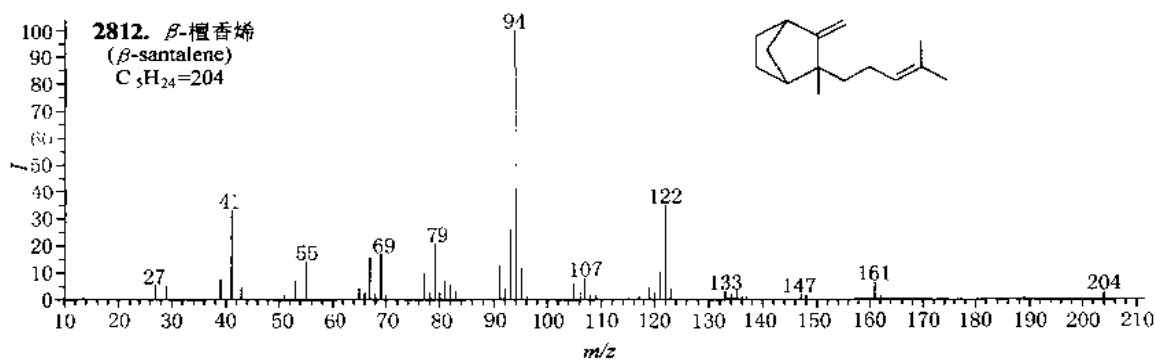
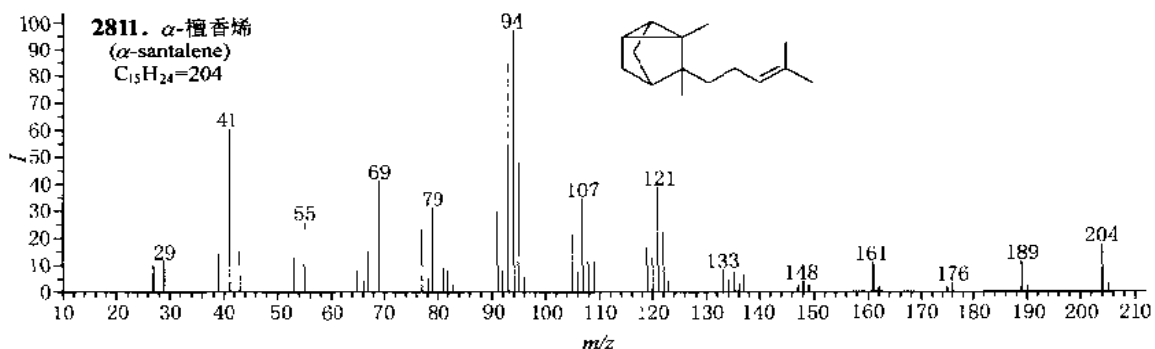




### 三、檀香烷类

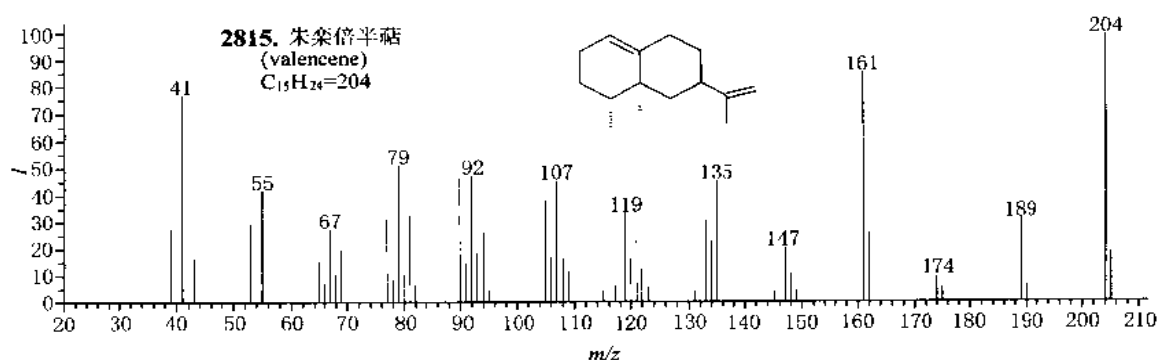
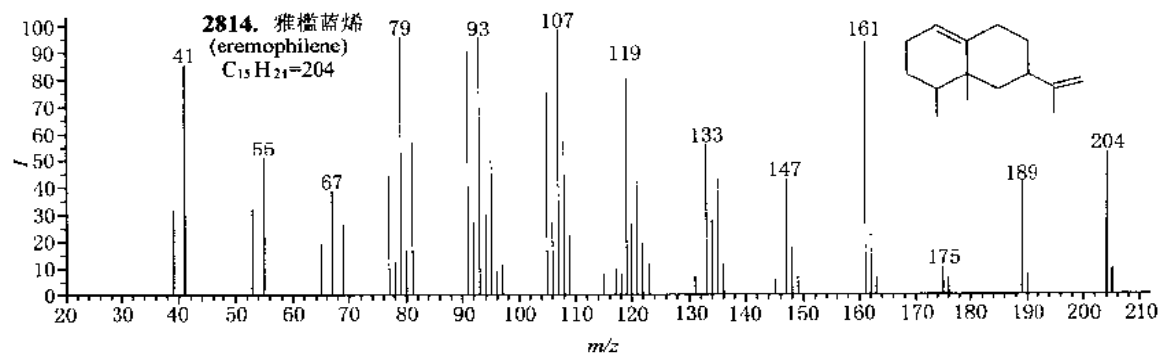
(1)  $\alpha$ -檀香烯 (2811) 和  $\beta$ -檀香烯 (2812) 都有强峰  $m/z$  122、121、94 和  $m/z$  93, 两者的差别仅是这些离子的强度不同, 结构也不一致。

(2)  $\alpha$ -檀香醇 (2813) 也有上述强峰。



### 四、雅槛蓝烷类

这类化合物 (2814, 2815) 的主要裂解是侧链双键重排到环内, 然后失去异丙基。



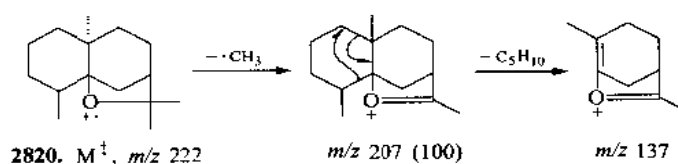
## 五、桉烷类

(1) 芹子烷 (2816) 的主要裂解也是失去异丙基, 另有完全失去 B 环的离子  $m/z$  109 和  $m/z$  96.

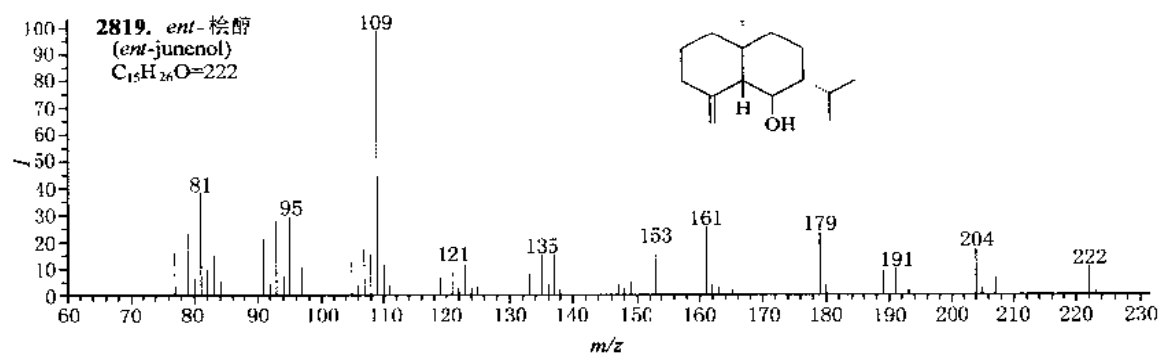
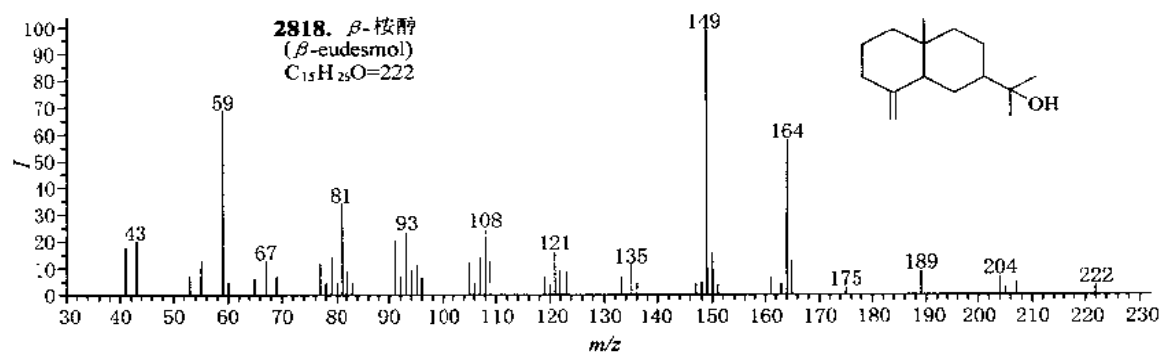
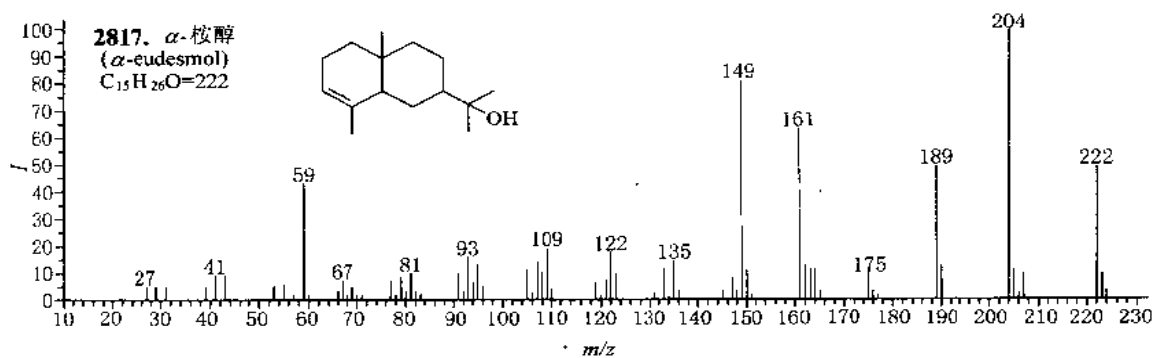
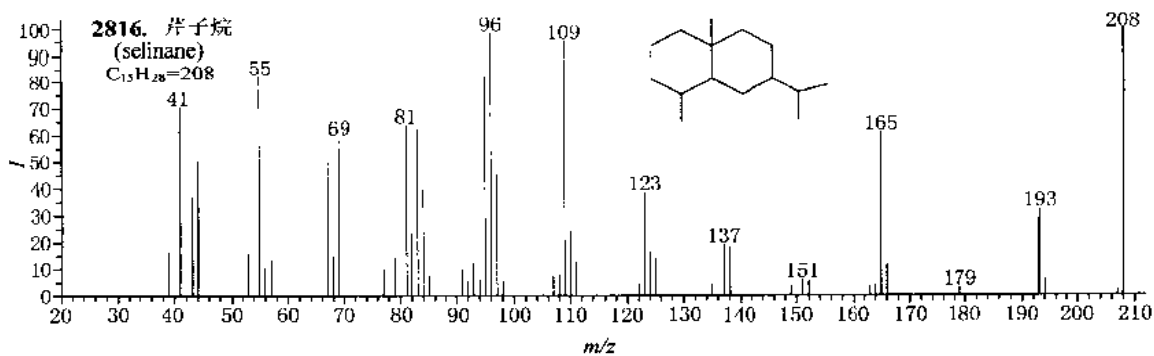
(2)  $\alpha$ -桉醇 (2817) 和  $\beta$ -桉醇 (2818) 有相似的裂解方式, 都有  $M - CH_3$ ,  $M - H_2O$ ,  $M - CH_3 - H_2O$ ,  $M - CH_3COCH_3$ ,  $M - H_2O - C_3H_7$ ,  $M - CH_3 - CH_3COCH_3$  和 羟异丙基离子  $m/z$  59, 但相对丰度差别很大.

*ent*-桉醇 (2819) 的基峰是离子  $m/z$  109, 它仍然来自 A 环.

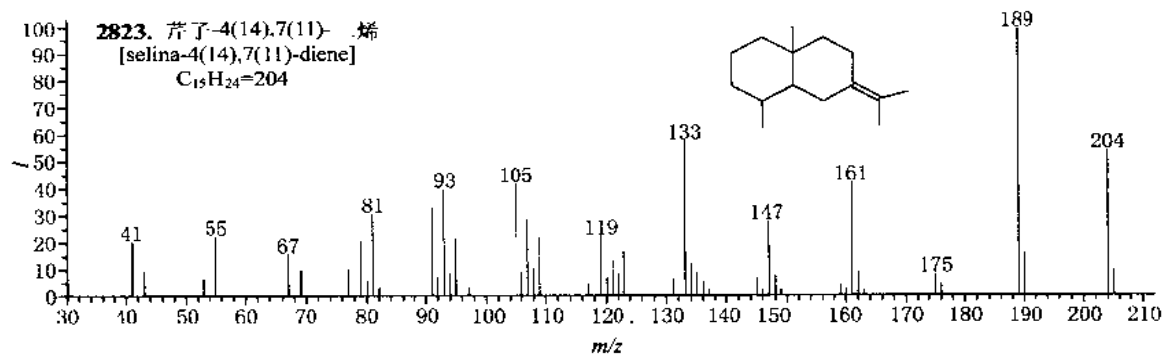
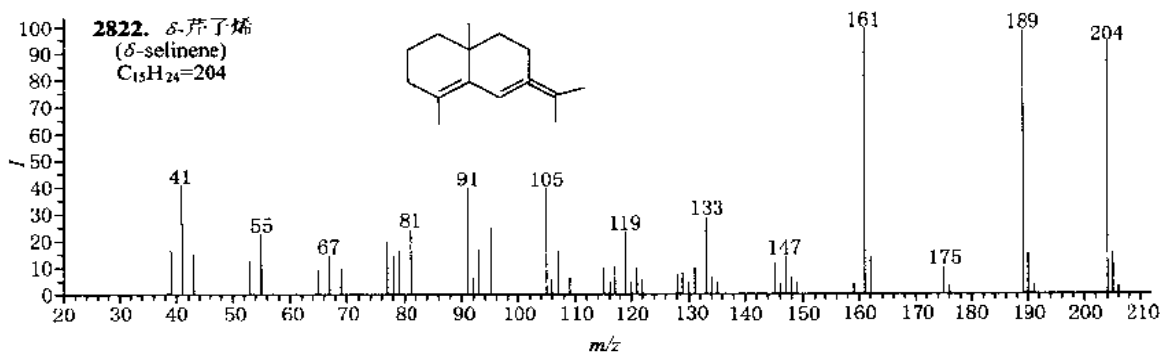
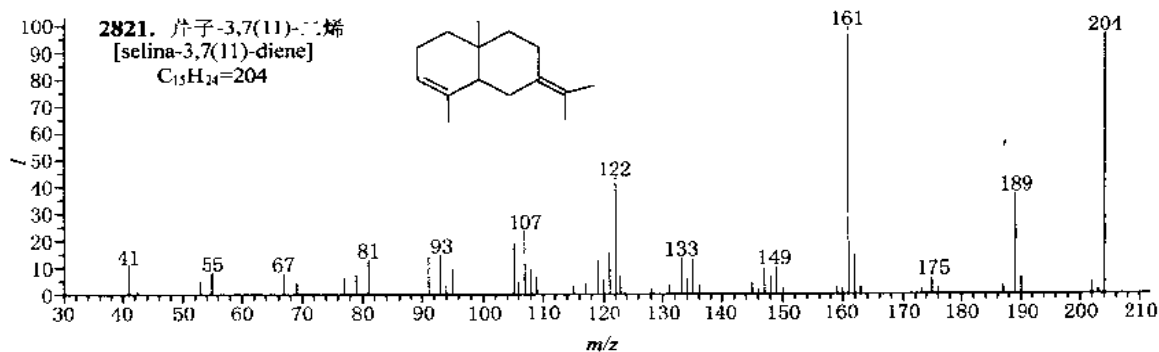
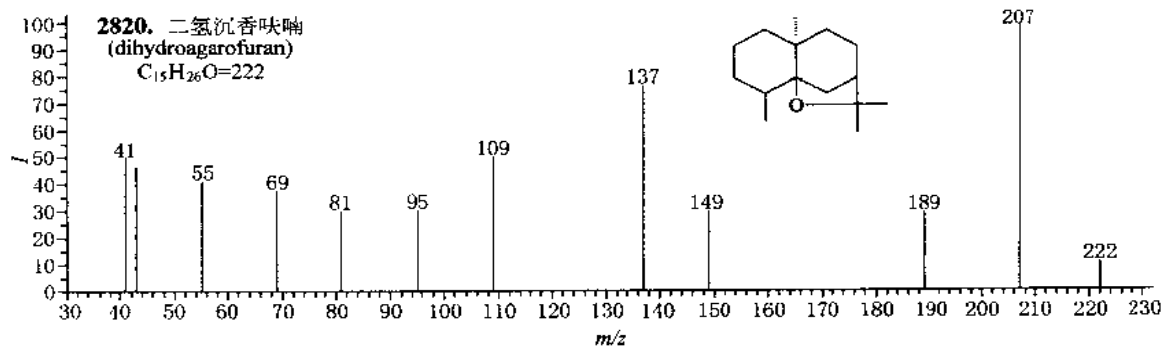
(3) 二氢沉香呔喃 (2820) 有强峰  $m/z$  207 和其继续失去  $C_5H_{10}$  的离子  $m/z$  137:

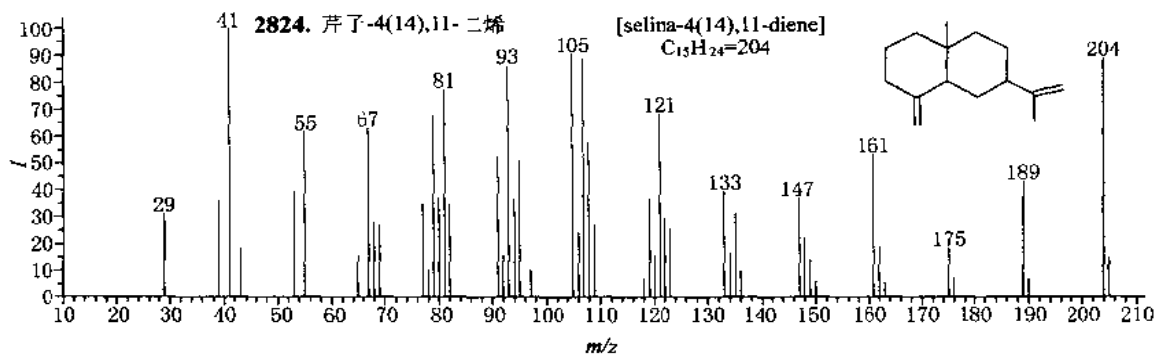


(4) 芹子烯类 (2821~2824) 的主要裂解是重排侧链双键失去异丙基.



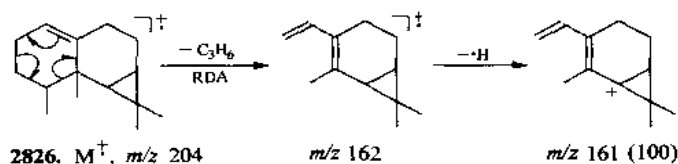




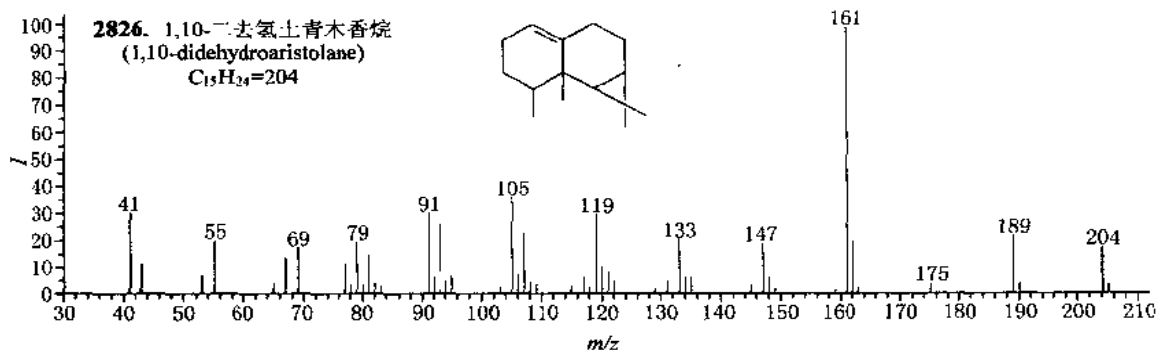
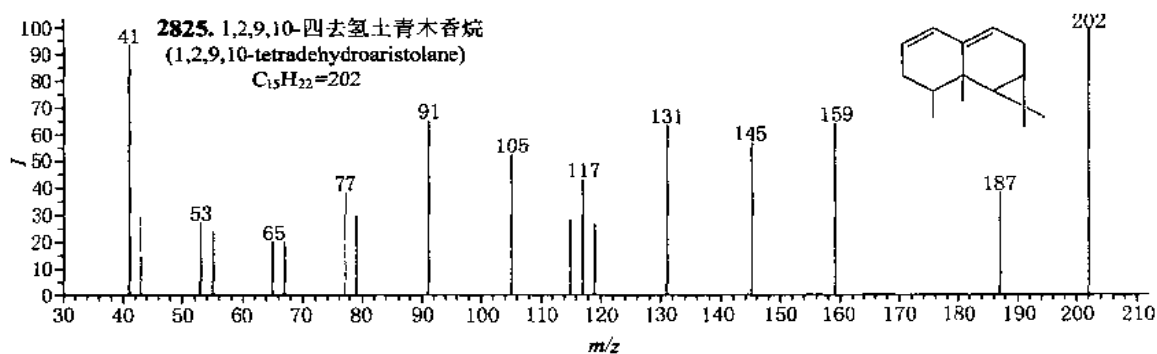


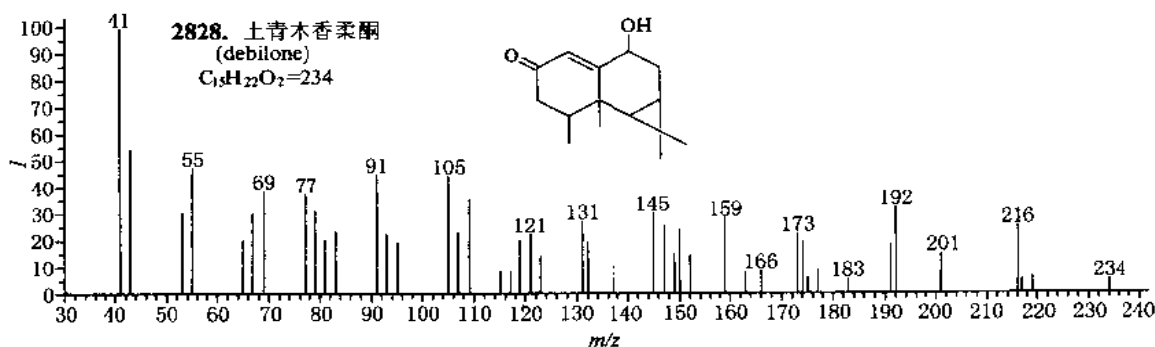
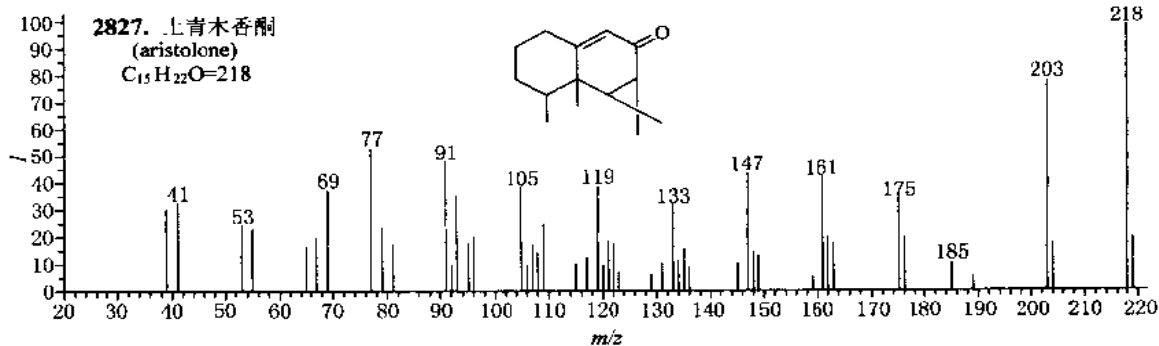
## 六、土青木香烷类

(1) 1,2,9,10-四去氢土青木香烷 (2825) 的主要裂解是连续失去自甲基开始的各种烷基, 失去烷基多数要经过重排。1,10-二去氢土青木香烷 (2826) 的离子  $m/z$  161 很强, 它可能是由于 A 环 RDA 裂解先失去  $C_3H_6$  得到的离子  $m/z$  162 再失 -H 原子生成的:



(2) 土青木香酮 (2827) 没有甚么特征性裂解, 只是失去甲基较强烈。土青木香柔酮 (2828) 的裂解途径是  $M-H_2O$  和  $M-CH_2CO-H_2O$ 。

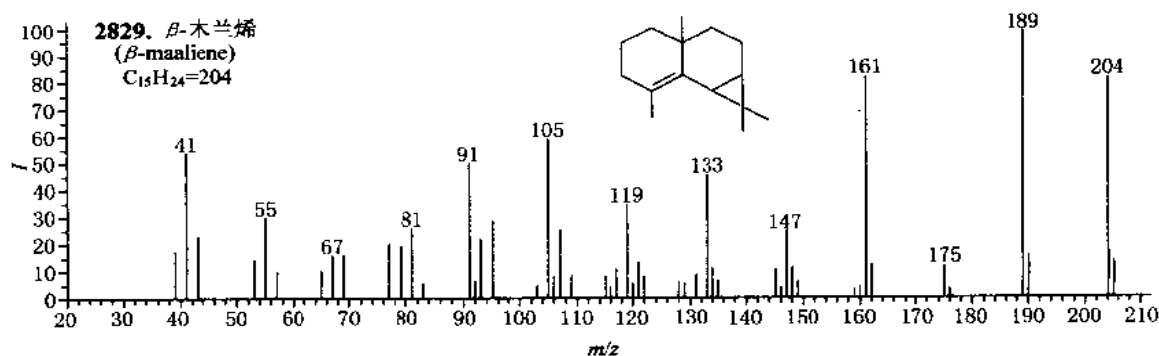
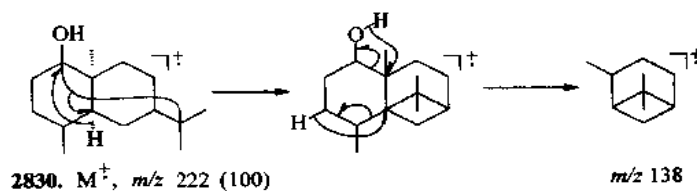


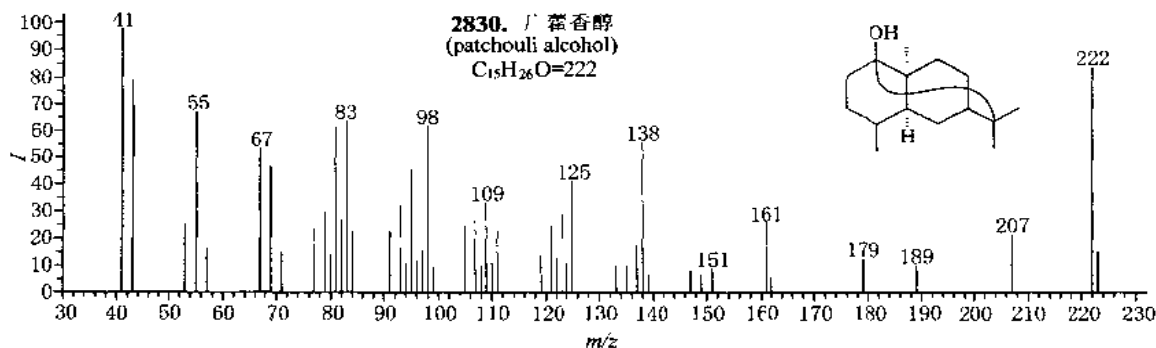


### 七、 $\beta$ -木兰烯和广藿香醇

$\beta$ -木兰烯 (2829) 的主要离子是  $M-CH_3$  和  $M-C_3H_7$  或  $M-CH_3-C_2H_4$ , 失去乙烯可能由于 A 环的 RDA 裂解。

广藿香醇 (2830) 的强峰  $m/z$  138 可能是由于失去 A 环的  $C_5H_8O$  产生的:

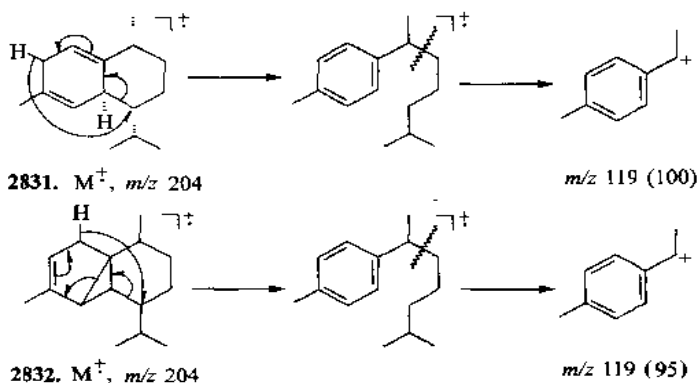




## 八、杜松烷类

### 1. 杜松二烯类

杜松-5,8-二烯 (2831) 和  $\alpha$ -萆澄茄油烯 (2832) 的离子  $m/z$  119 很强, 这主要是因为双键都在 A 环内 (三元环也可视为双键), 这个离子含有 A 环和  $C_1$  及其取代甲基, A 环能够芳香化是这一裂解的推动力。

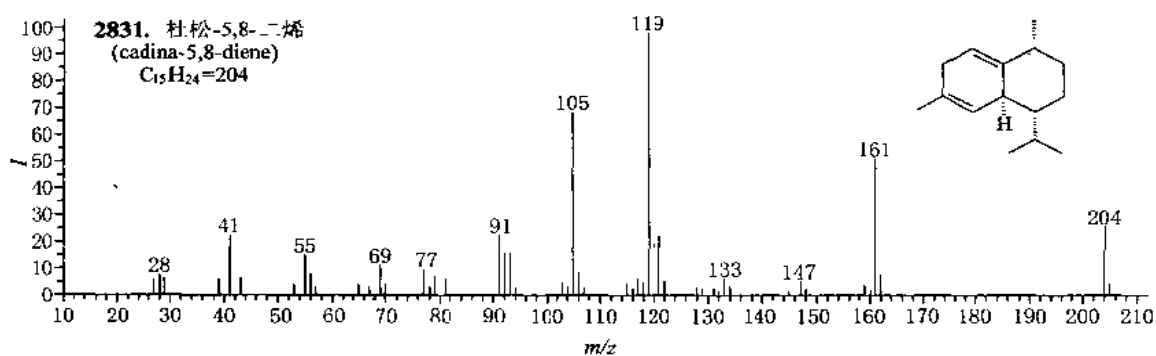


$\beta$ -萆澄茄油烯等 (2833~2835, 2837, 2838) 或因 A 环只有一个双键, 或因 B 环还有双键, 因此 A 环很难芳香化, 所以离子  $m/z$  119 都不强。

$\delta$ -杜松烯 (2836) 的离子  $m/z$  134 很强, 这是由于 B 环能进行 RDA 裂解失去  $C_6H_{10}$  所致。

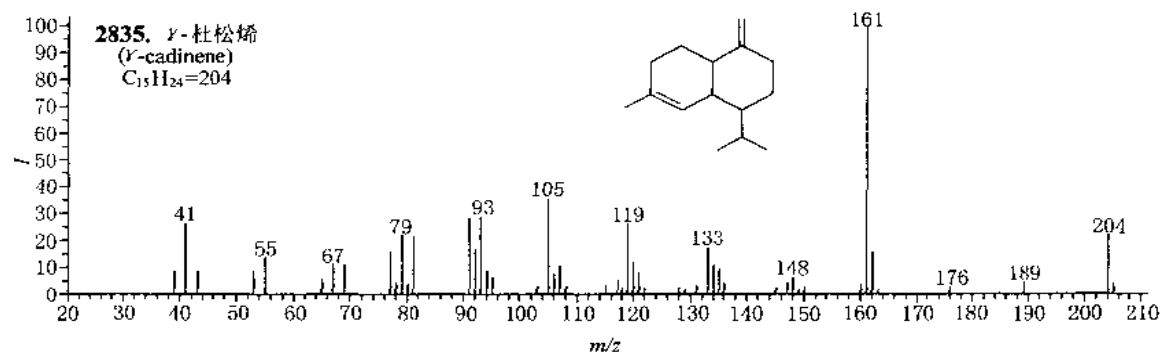
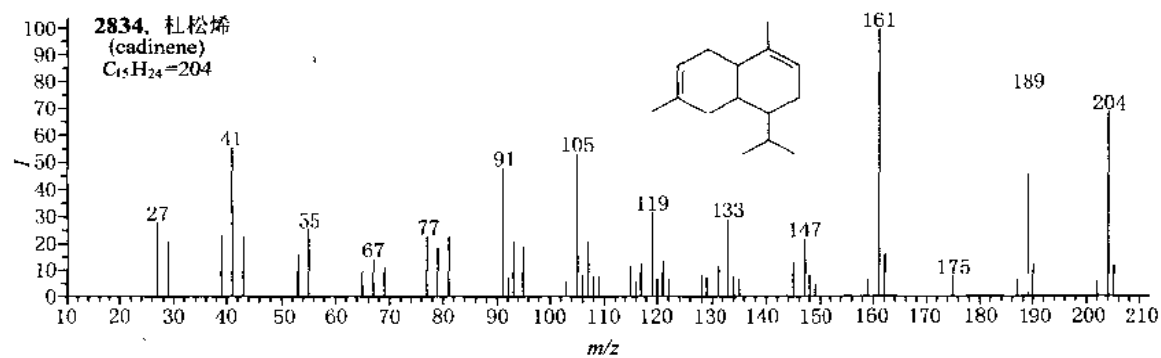
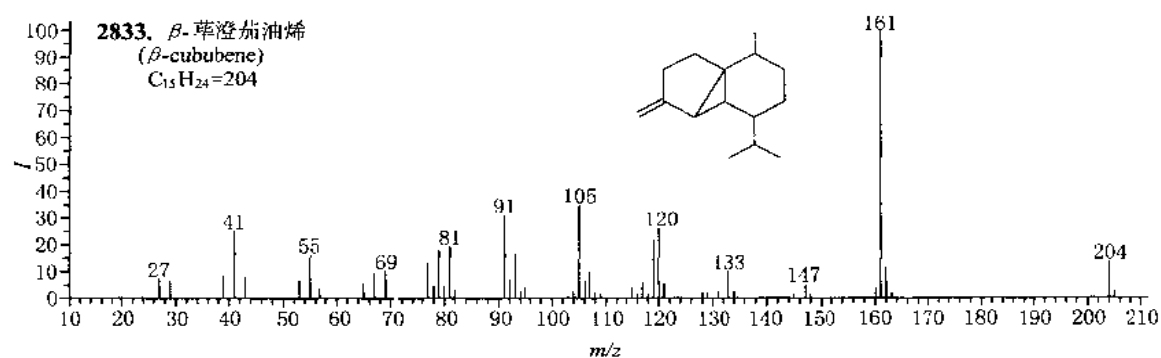
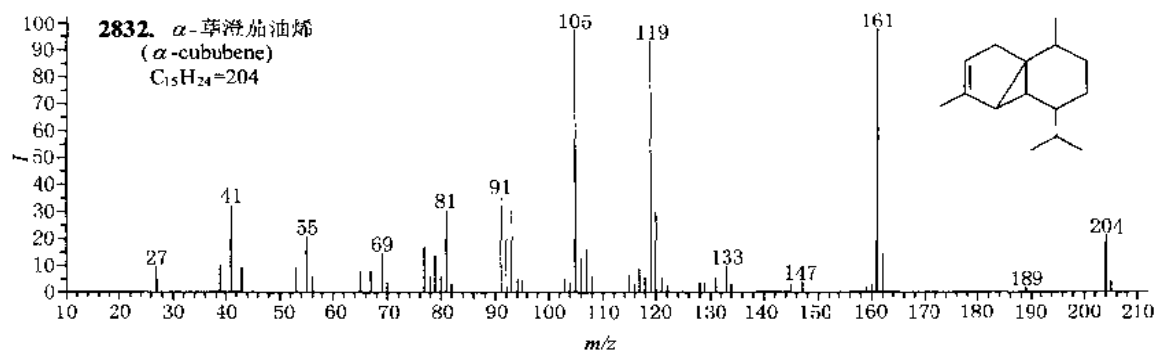
### 2. 杜松三烯类

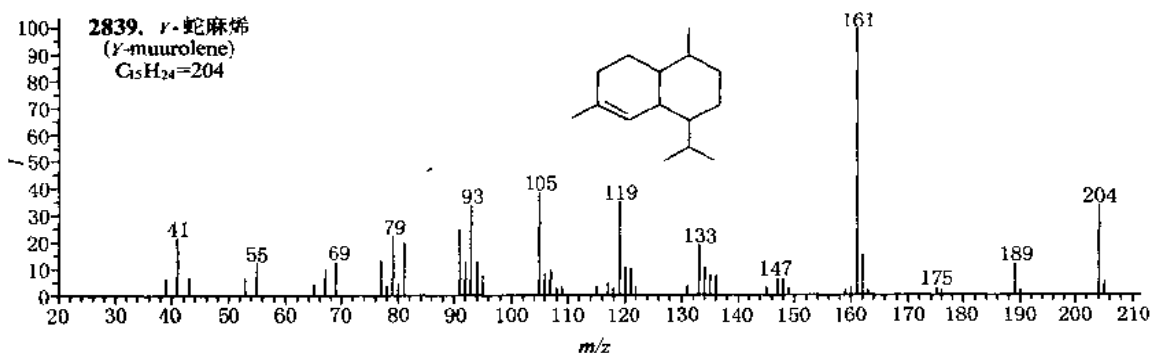
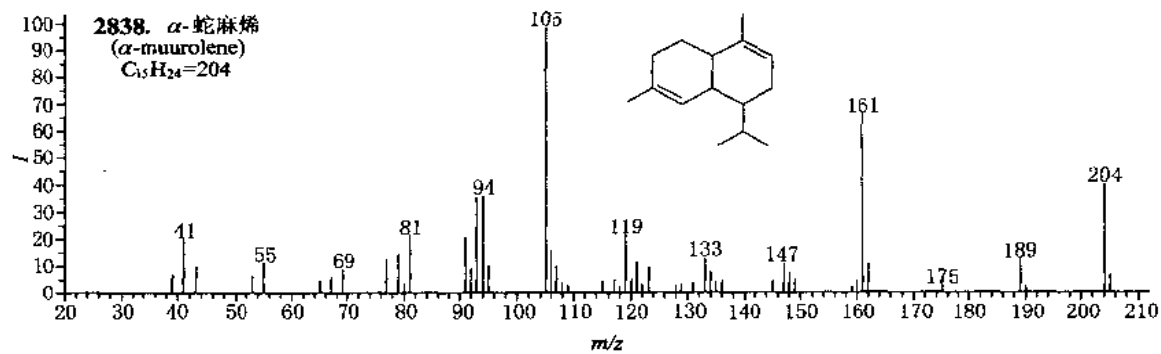
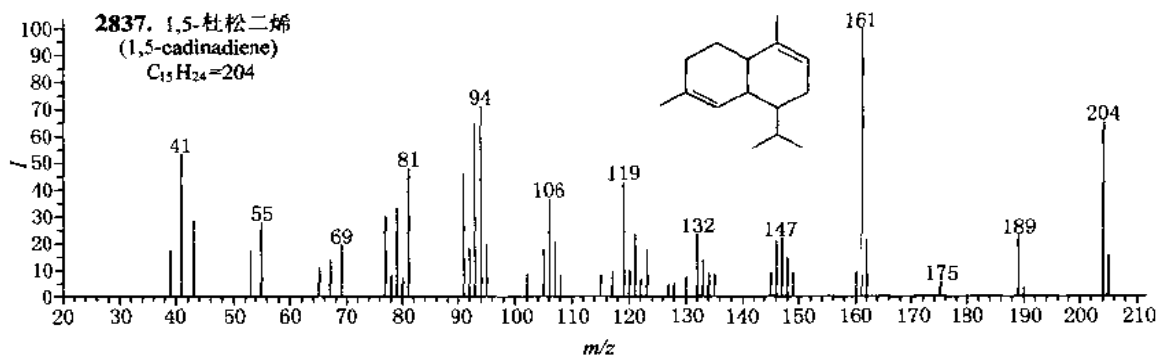
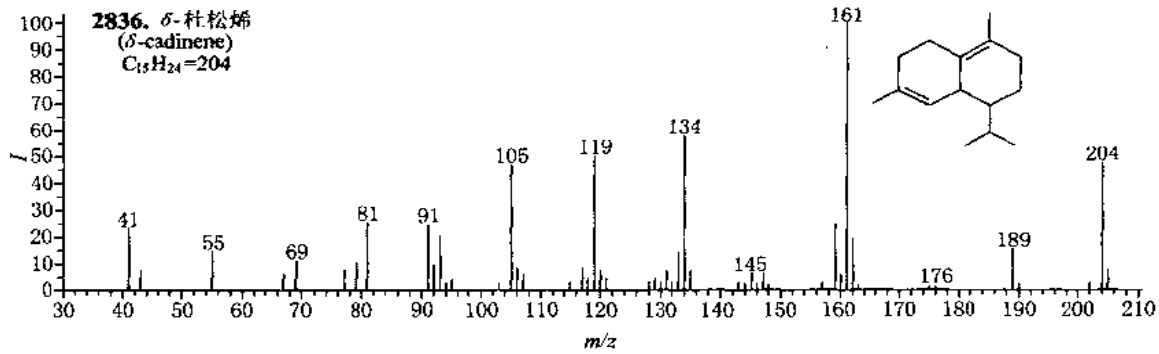
这类化合物 (2840, 2842) 都呈芳香化状态, 因而主要裂解是苜基裂解, 或失甲基或失异丙基。

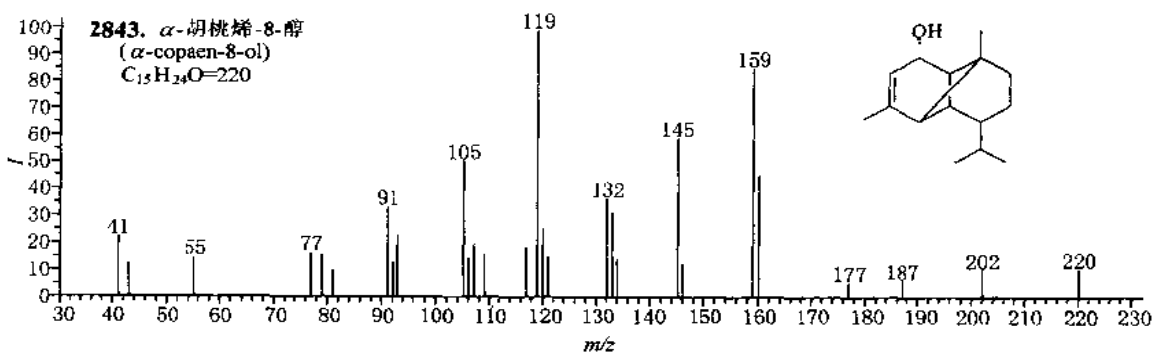
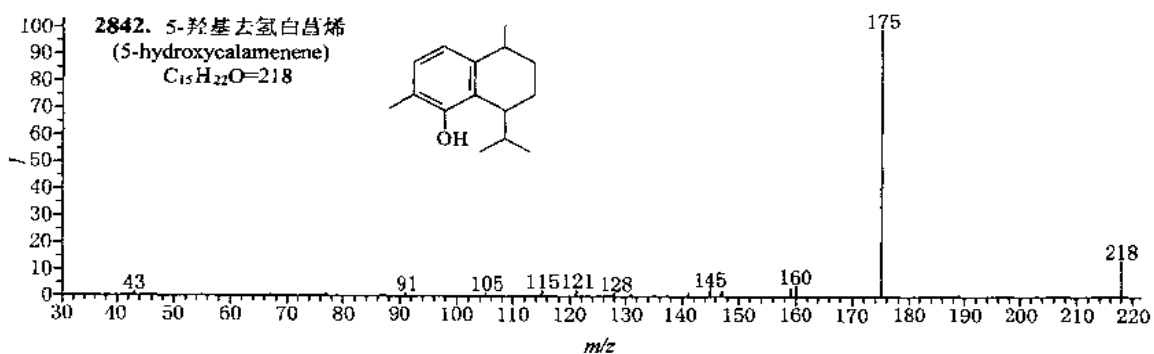
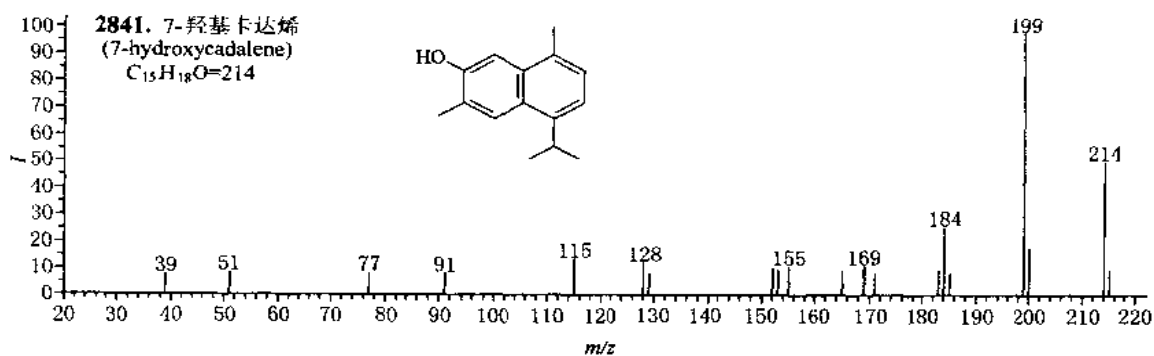
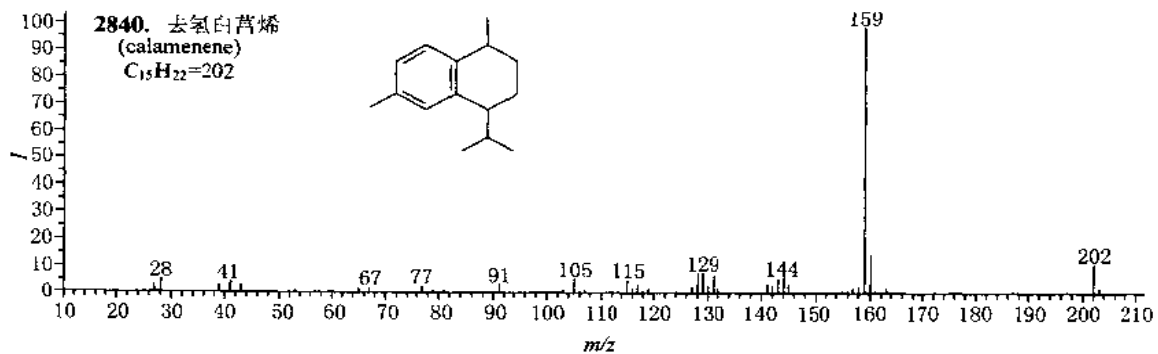


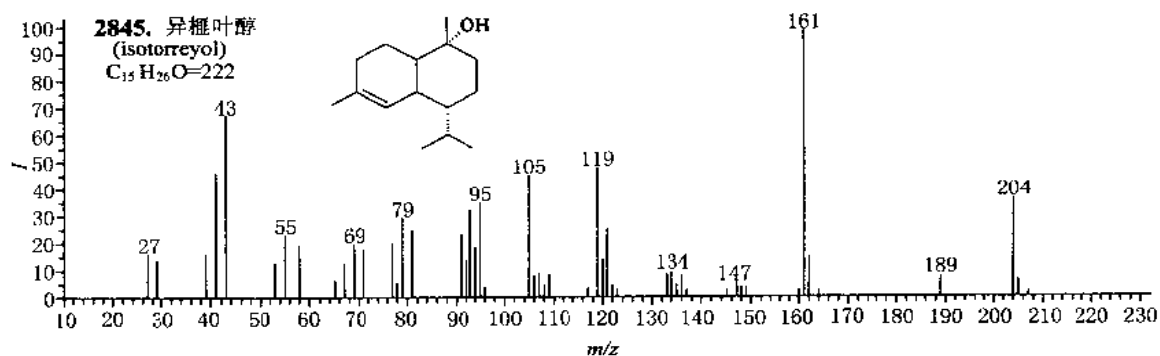
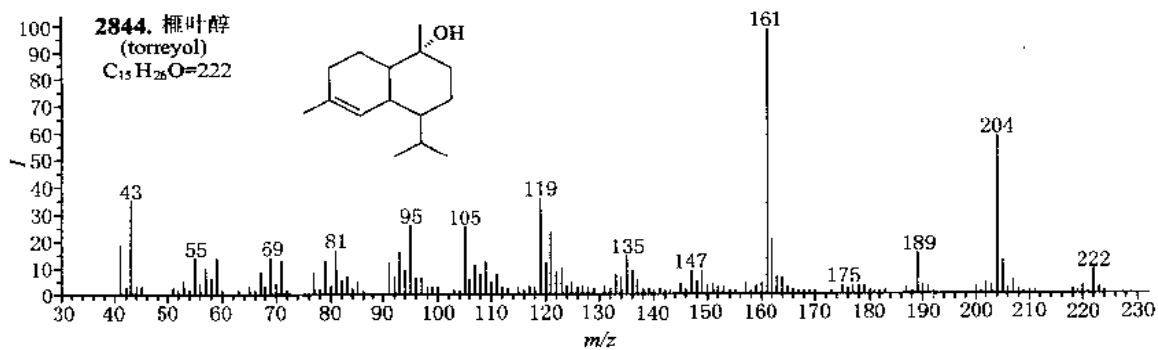
## 3. 胡桃烯醇和杜松烯醇类

$\alpha$ -胡桃烯-8-醇(2843)和两个榧叶醇(2844和2845)都有强的  $M-H_2O$  和  $M-H_2O-C_3H_7$  离子, 但  $\alpha$ -胡桃烯-8-醇(2843)更有强峰  $m/z$  119, 其来源与上述相同。



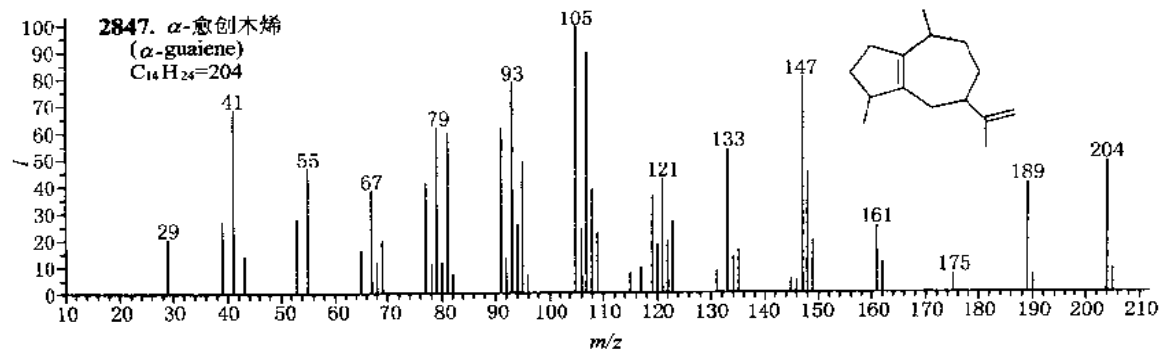
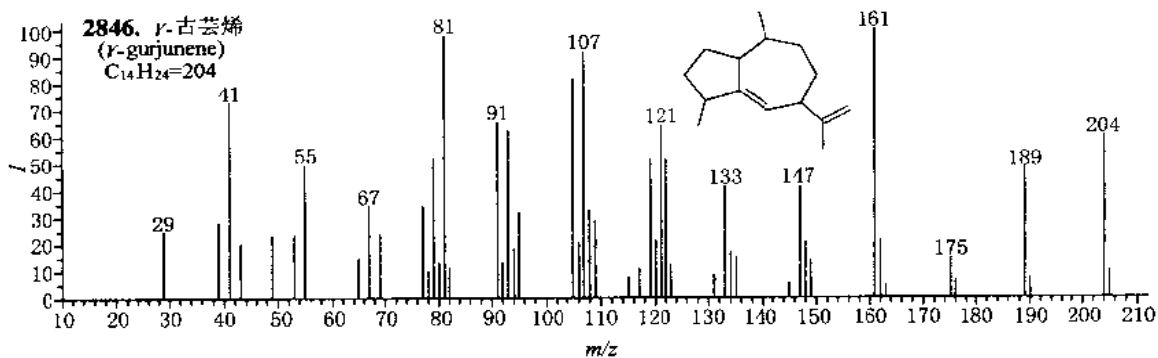






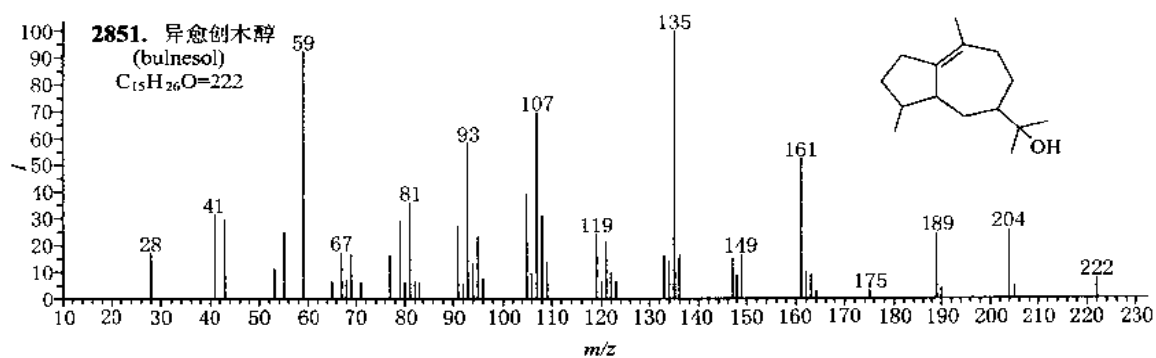
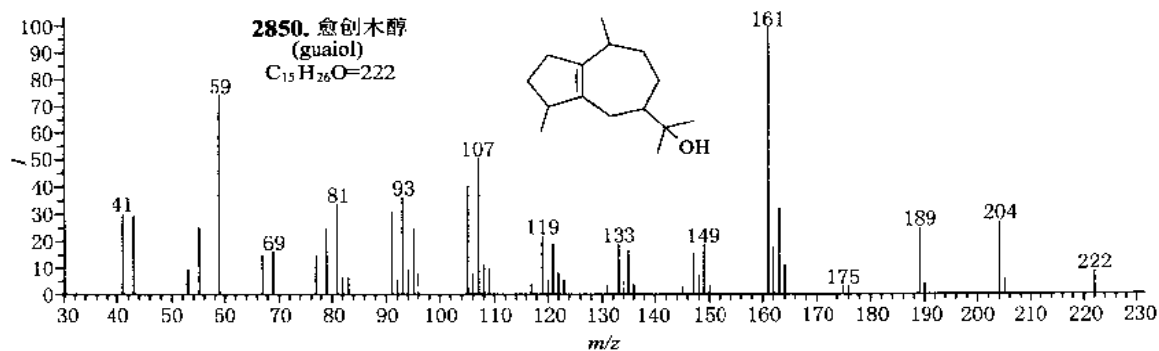
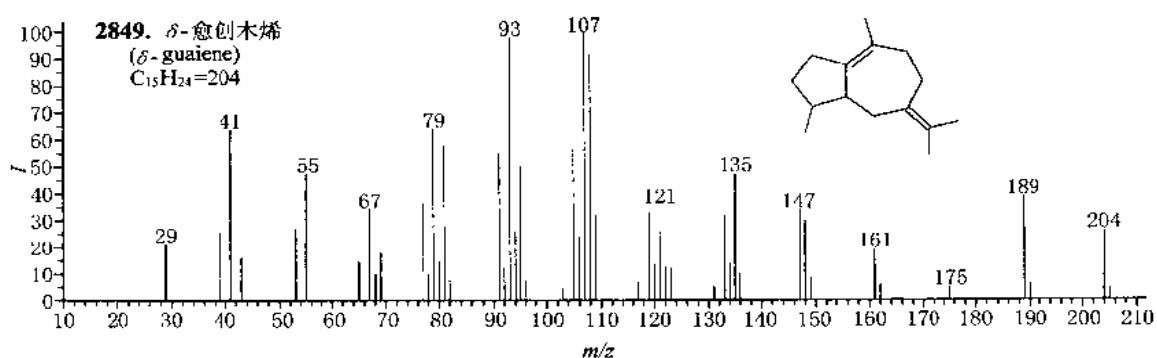
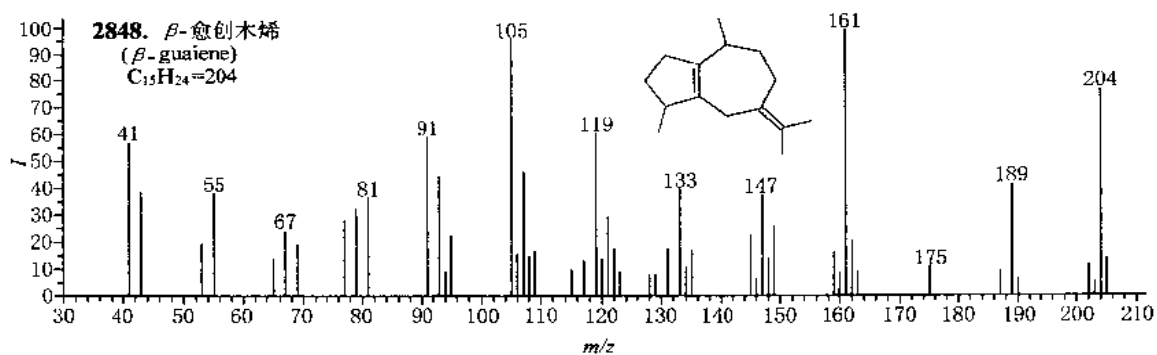
### 九、愈创木烷类

(1) 几个愈创木烯类 (2846~2849) 缺乏特征性裂解。



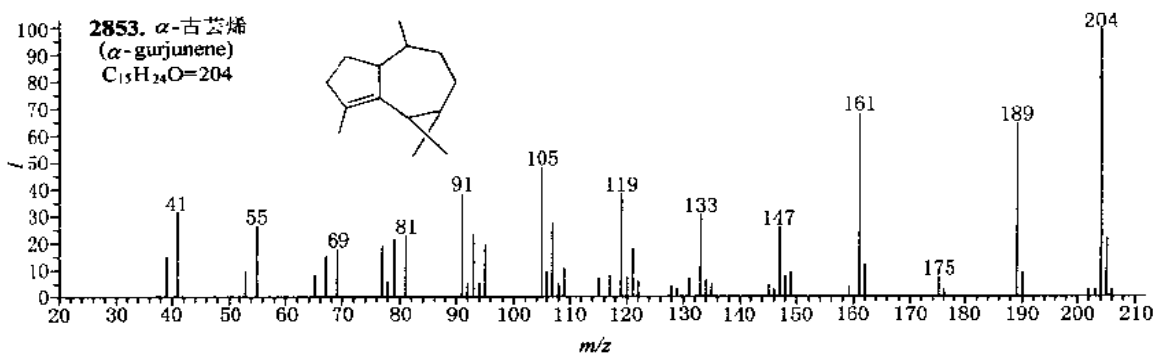
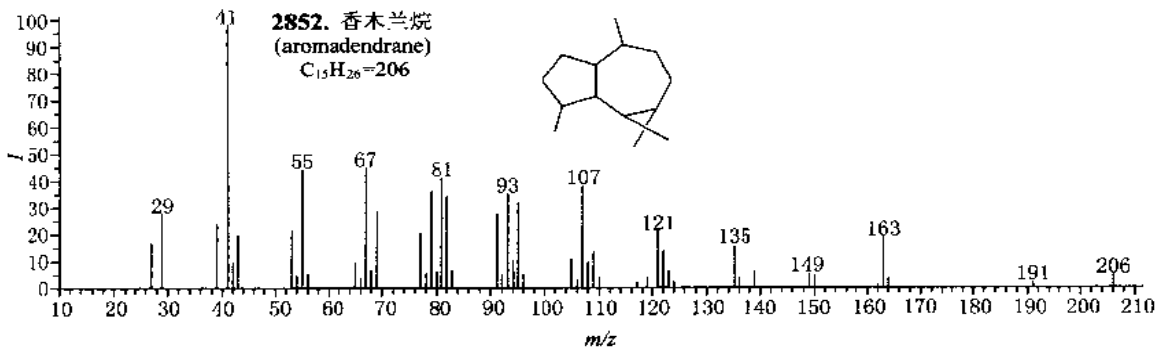
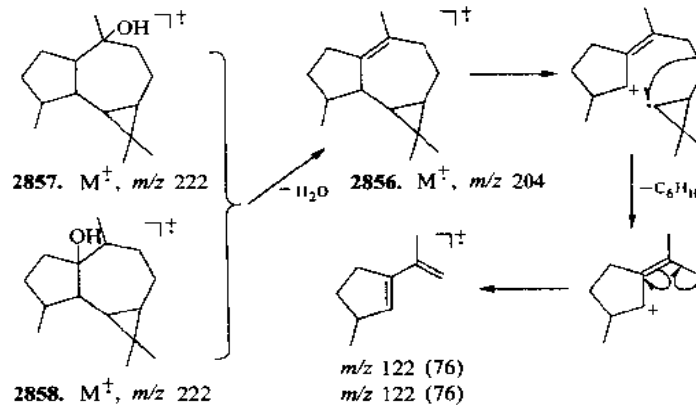


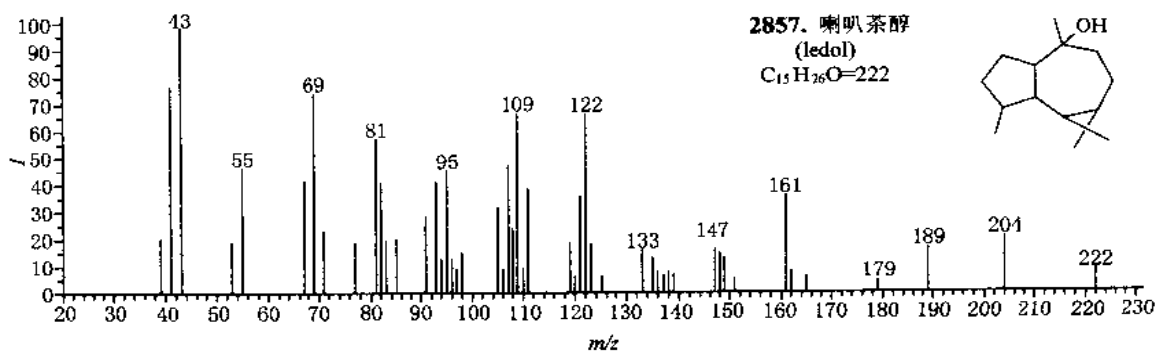
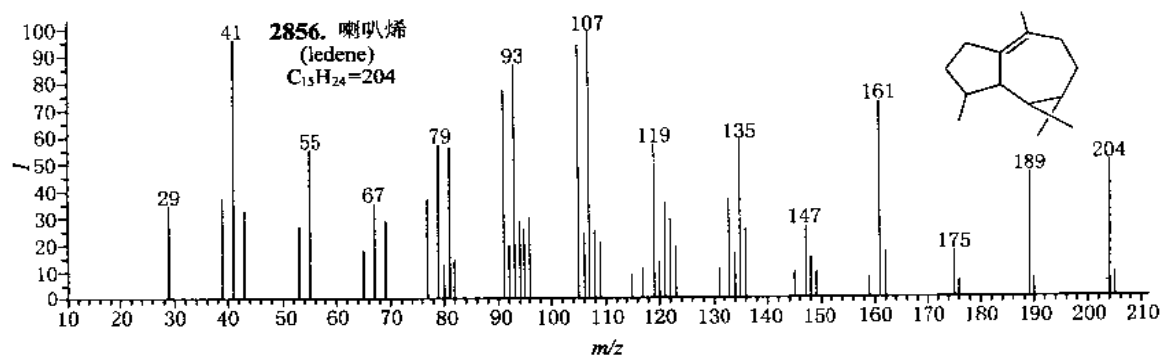
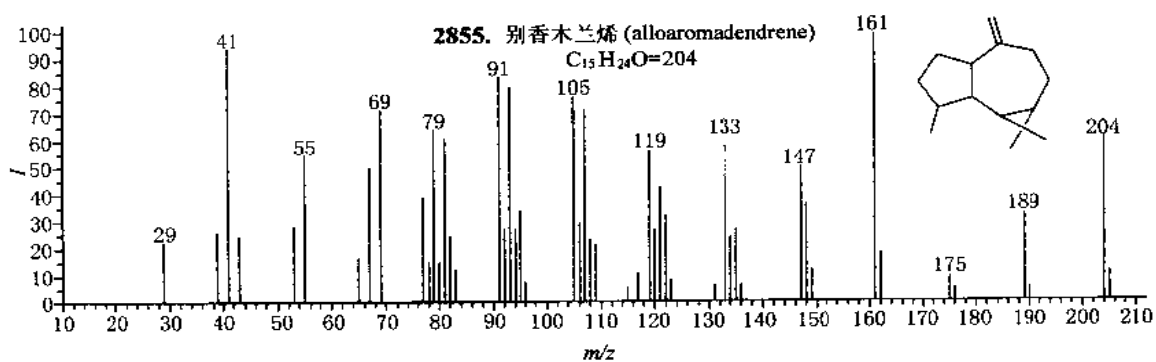
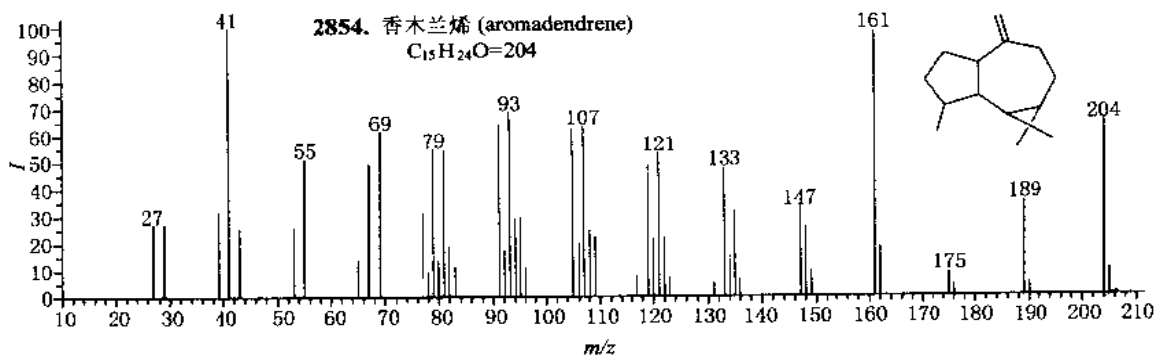
(2) 两个愈创木醇类 (2850 和 2851) 因结构中都有羟异丙基, 所以都出现了羟异丙基离子  $m/z$  59。

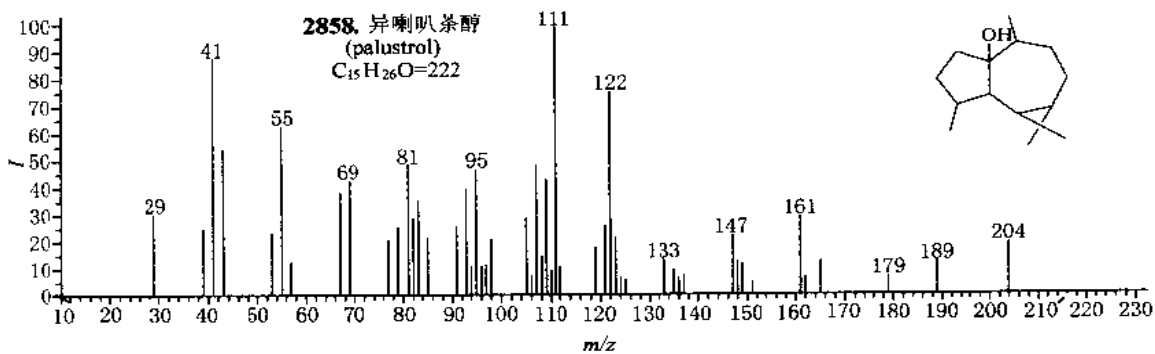


## 十、香木兰烷类

香木兰烷 (2852) 和香木兰烯类 (2853~2856) 缺乏特征性裂解方式, 但喇叭茶醇 (2857) 和异喇叭茶醇 (2858) 都有特征离子  $m/z$  122, 喇叭烯也有这个离子, 其产生方式可能如下:

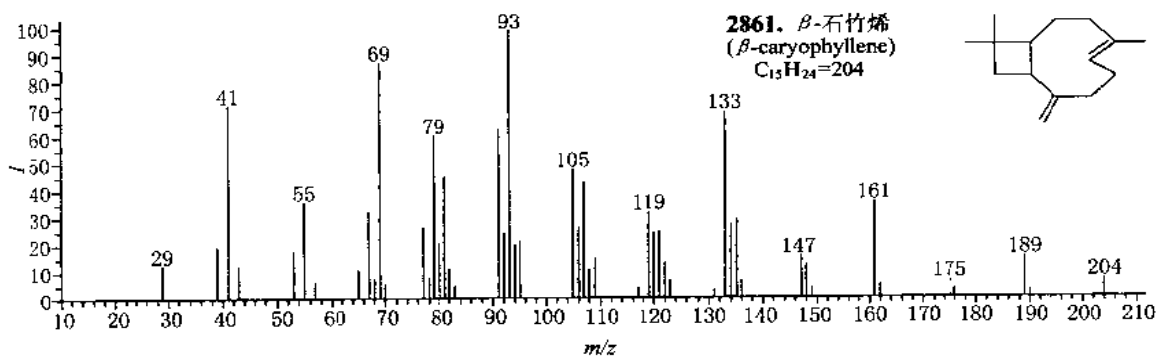
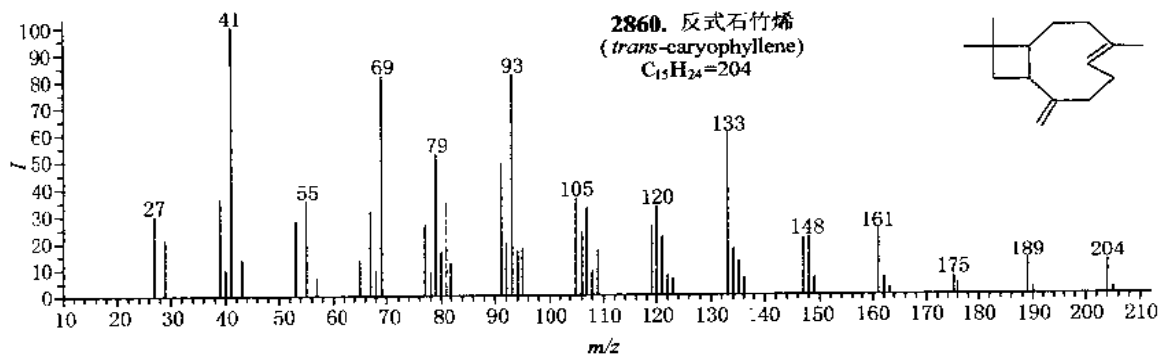
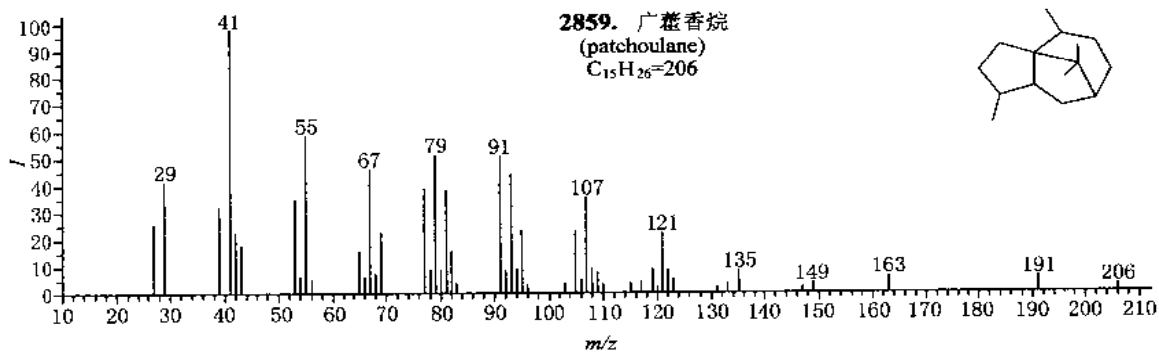






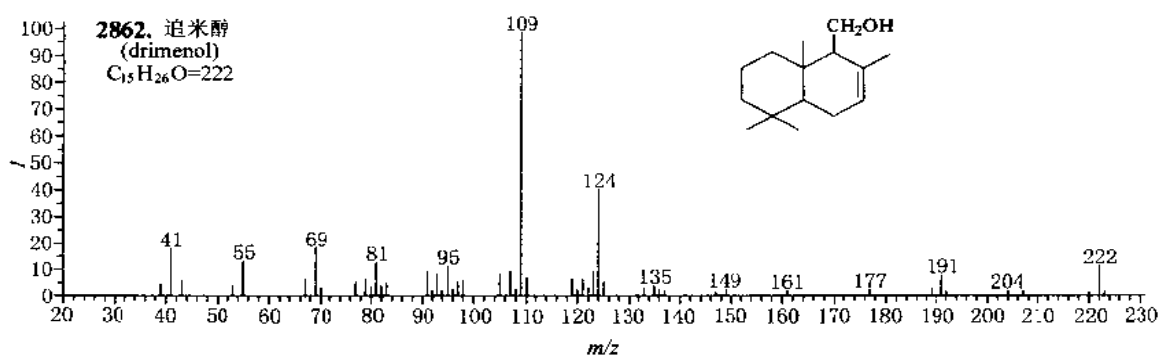
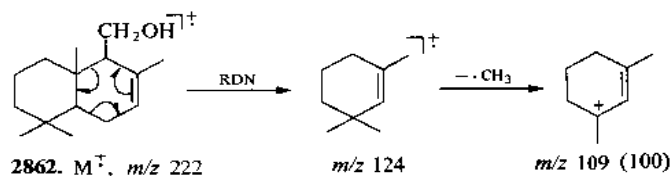
### 十一、广藿香烷类和石竹烷类

广藿香烷 (2859) 缺乏特征性裂解。石竹烯类 (2860, 2861) 缺乏特征性裂解。



## 十二、血菟烷类

追米醇 (2862) 有强峰  $m/z$  124 和  $m/z$  109, 后者来自前者失去甲基的裂解, 产生前者的裂解如下:

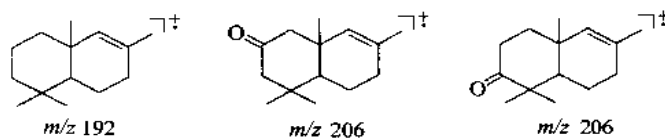


## 第三节 二萜类

### 一、勒布烷类

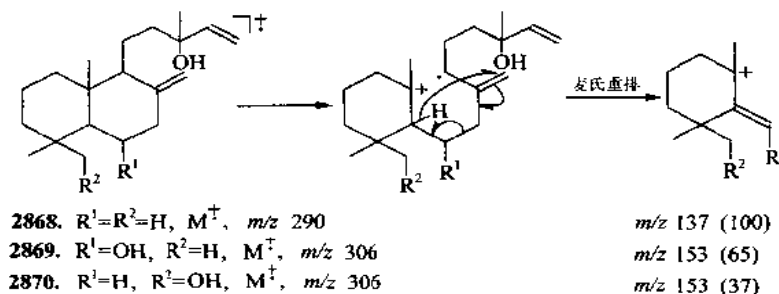
(1) 两个勒布三烯 (2863, 2864) 的主要裂解是失去角甲基。

(2) 三个六元环氧化物 (2865~2867) 的分子离子都未出现, 这可能是由于它们很易失去  $C_{13}$  甲基之故。另外三者都有含 A、B 环的离子, 分别为  $m/z$  192、206 和  $m/z$  206, 结构如下:

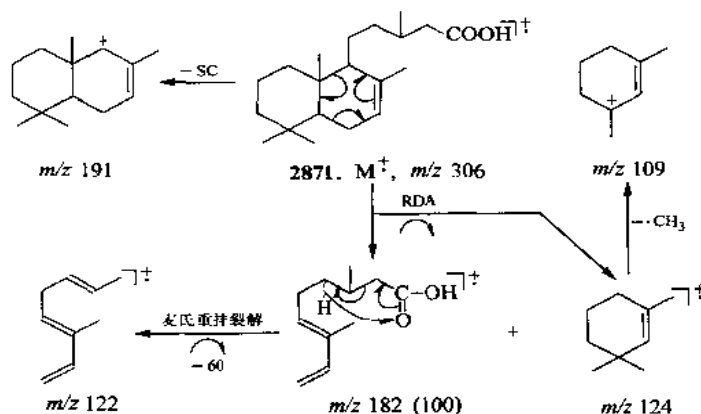


然后各自再失角甲基, 分别得离子  $m/z$  177、191 和  $m/z$  191。

(3) 麦诺醇类 (2868~2870) 都有来自 A 环的共同离子, 分别为  $m/z$  137、153 和  $m/z$  153, 可能的产生方式如下:



(4) 凯替维酸 (2871) 有下述裂解:

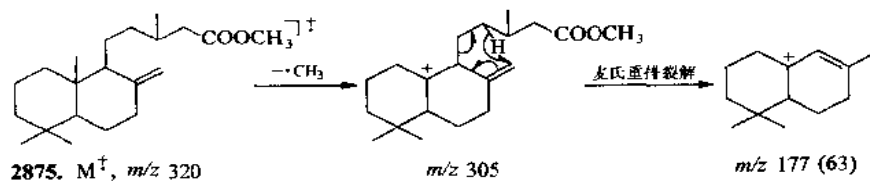


凯替维酸甲酯 (2872) 有如上所述的裂解, 即 B 环 RDA 裂解得互补离子  $m/z$  196 和  $m/z$  124, 前者再进行麦氏重排裂解失去 74u 得离子  $m/z$  122, 后者再失甲基得离子  $m/z$  109。

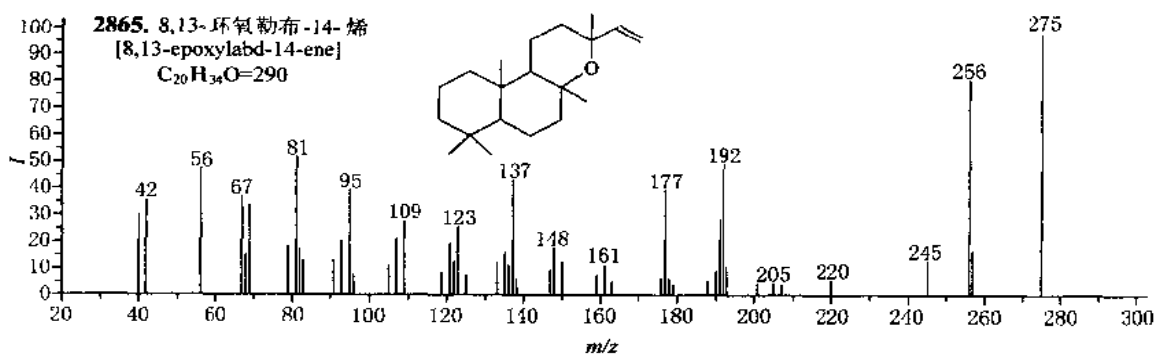
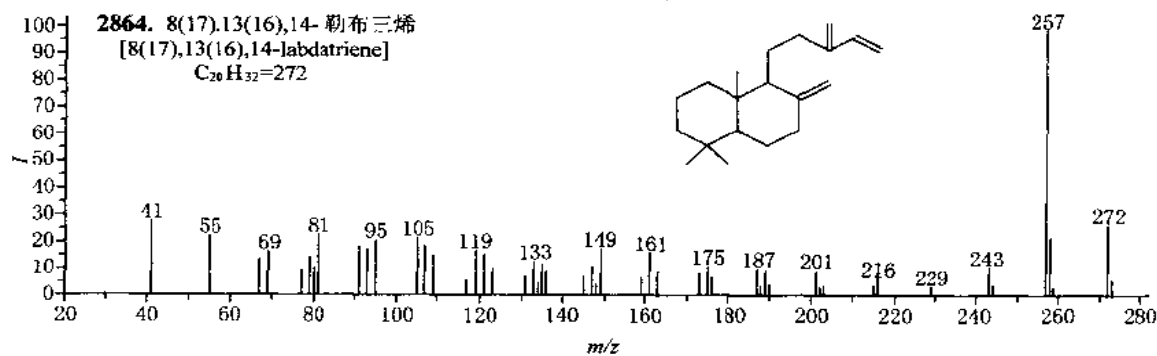
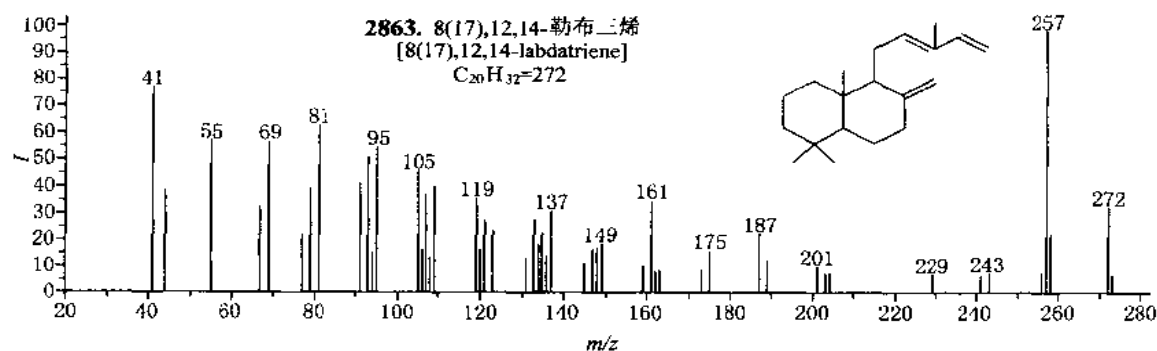
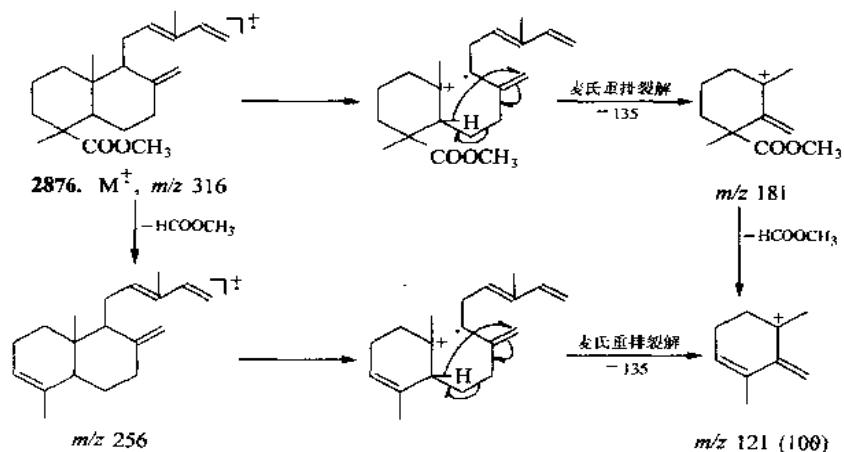
几个  $C_8$ ,  $H_{17}$  具有双键的羧酸和甲酯 (2873~2875) 都有或弱或强的离子  $m/z$  137, 其产生方式与麦诺醇类中的化合物 2868 是相同的。

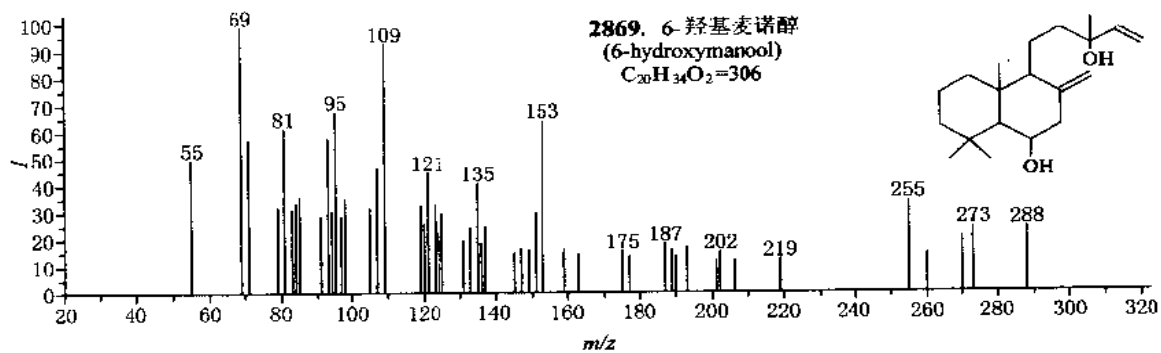
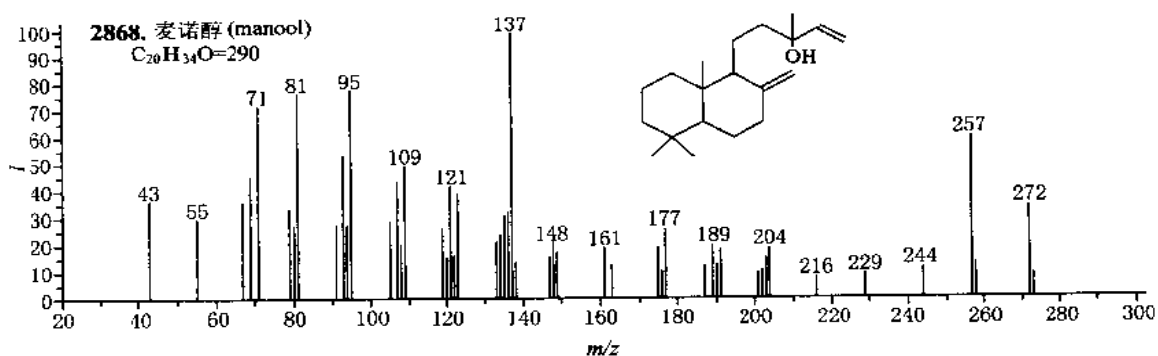
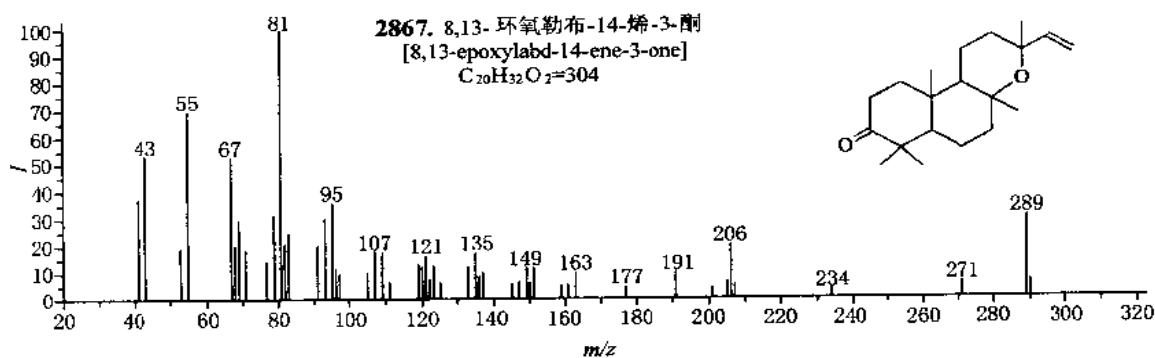
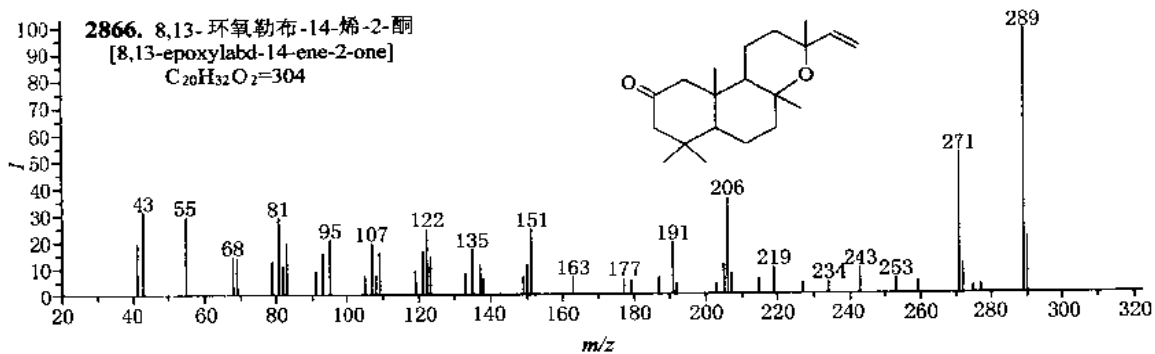
8(17), 13-勒布二烯-15-酸及其甲酯 (2873, 2874) 能由失甲基离子、或直接从分子离子进行  $C_{13}$  双键的烯丙裂解、或进行麦氏重排裂解, 前者得离子  $m/z$  189, 后者得离子  $m/z$  205 和  $m/z$  204。

8(17)-勒布烯-15-酸甲酯 (2875) 的  $M-CH_3$  离子  $m/z$  305 进行双键的麦氏重排裂解失去侧链得强峰  $m/z$  177;

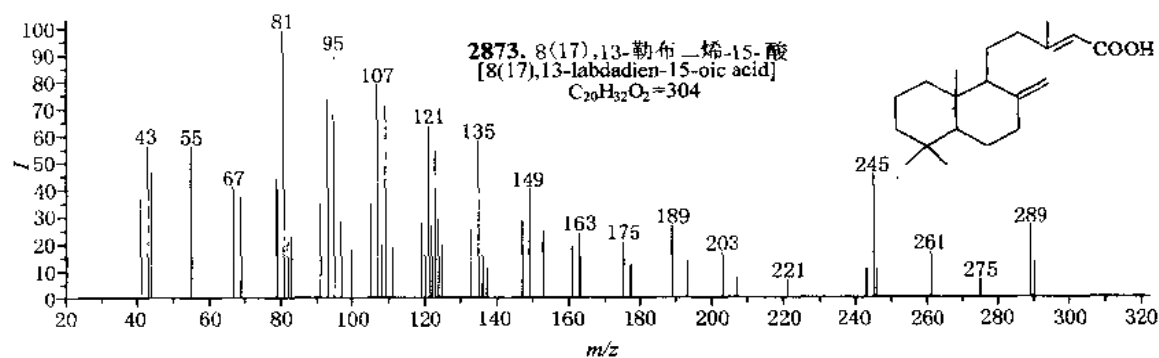
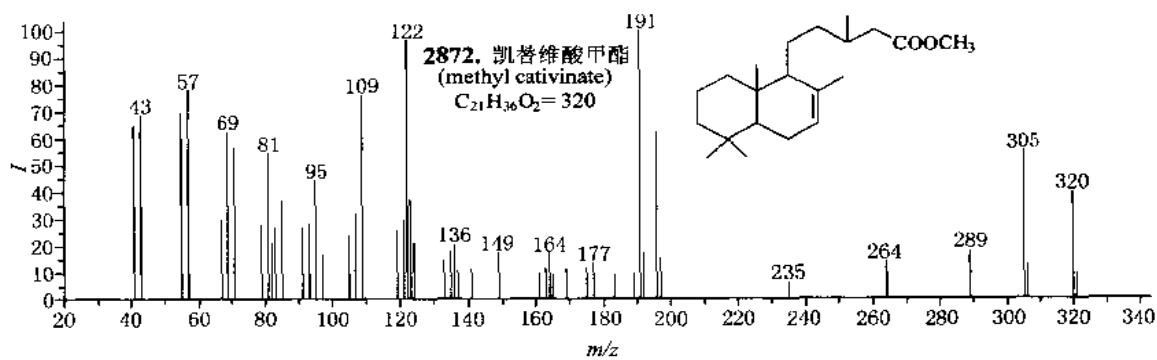
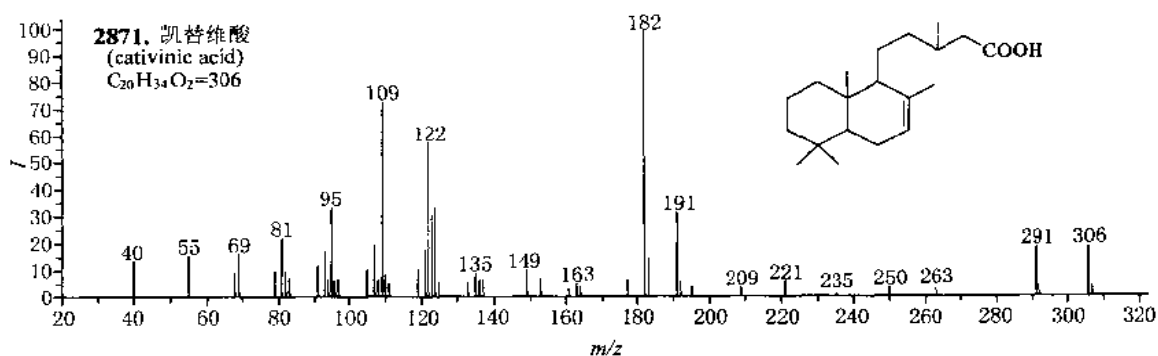
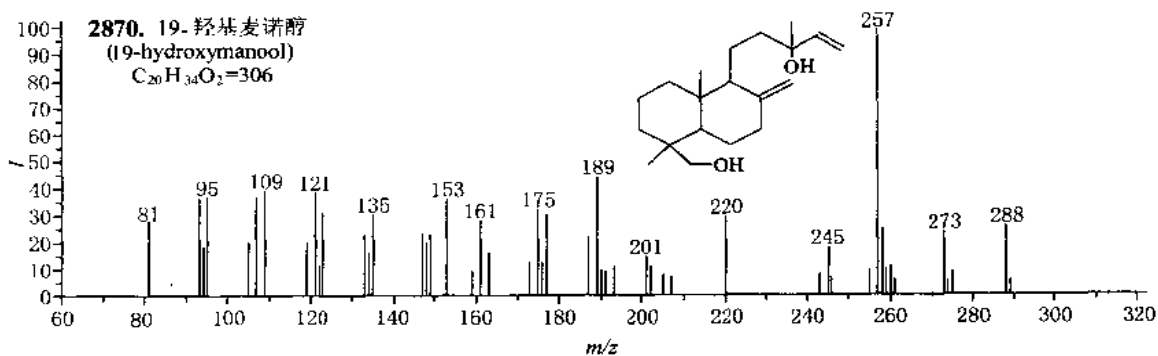


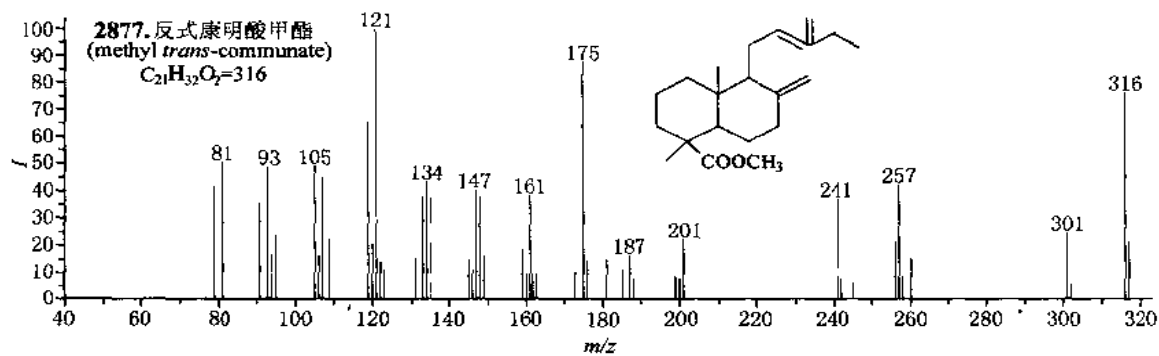
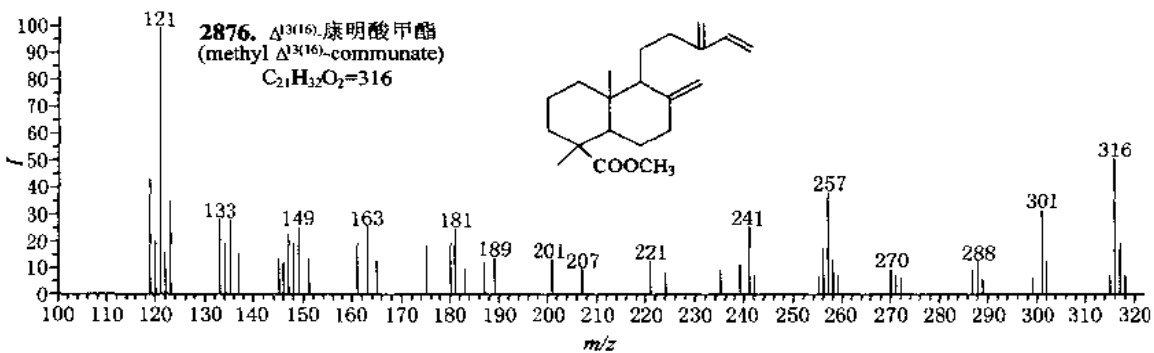
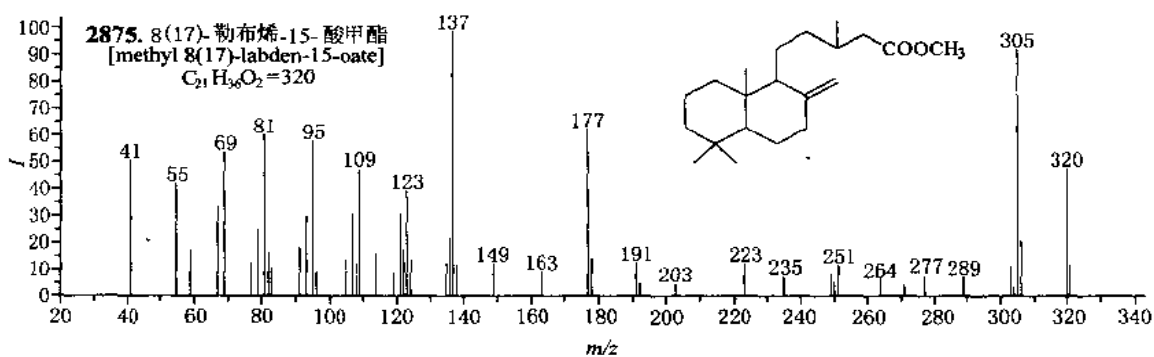
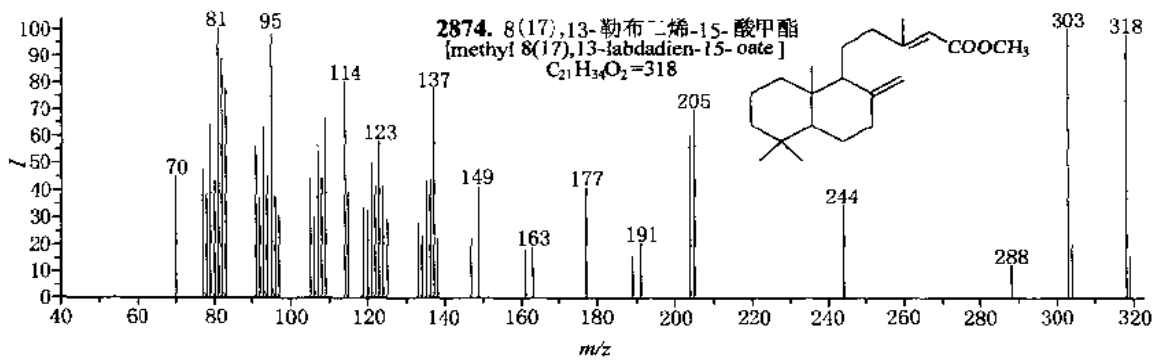
康明酸甲酯类 (2876, 2877) 都有  $M-COOCH_3$  离子  $m/z$  257, 再失去侧链并转移氢得离子  $m/z$  175, 相当于上述的离子  $m/z$  137 都移到  $m/z$  181, 但丰度不大。两者的强峰  $m/z$  121 (100) 可能来自  $M-135$  ( $m/z$  181) 再失去甲酸甲酯的裂解, 或顺序相反: 先失甲酸甲酯得离子  $m/z$  256, 再失 135u。



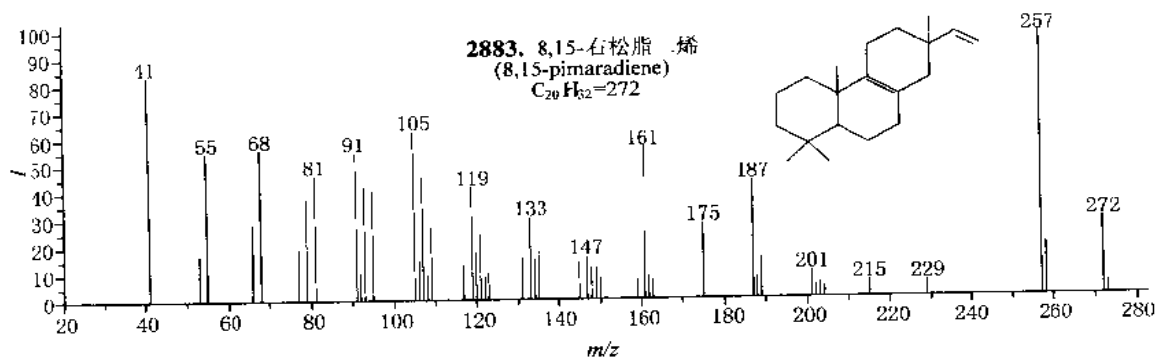
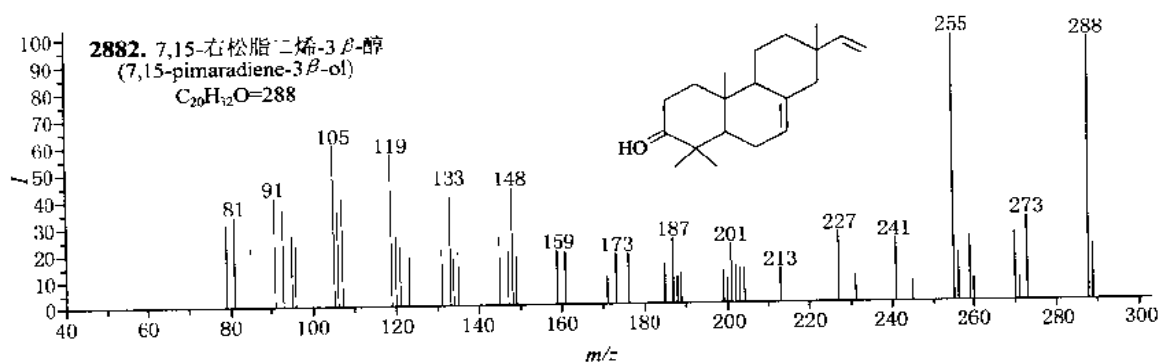
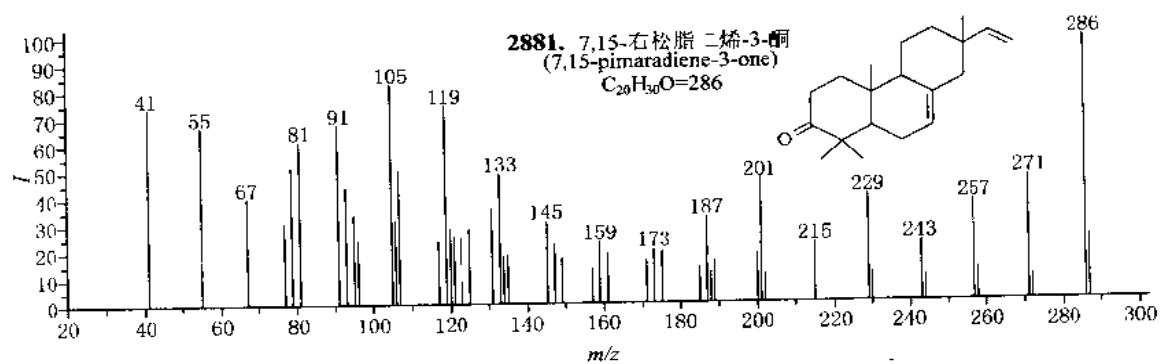
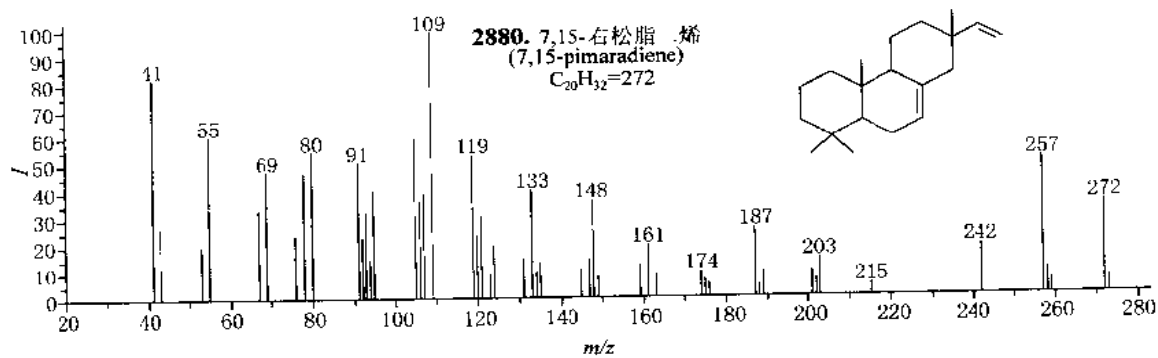


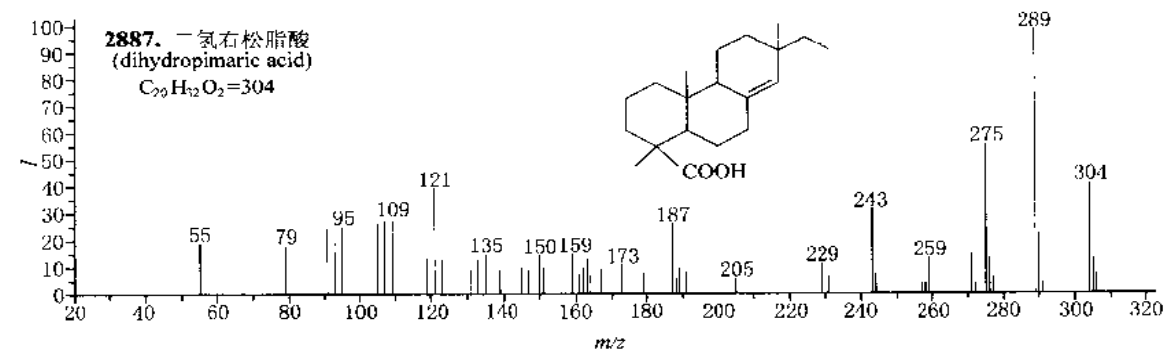
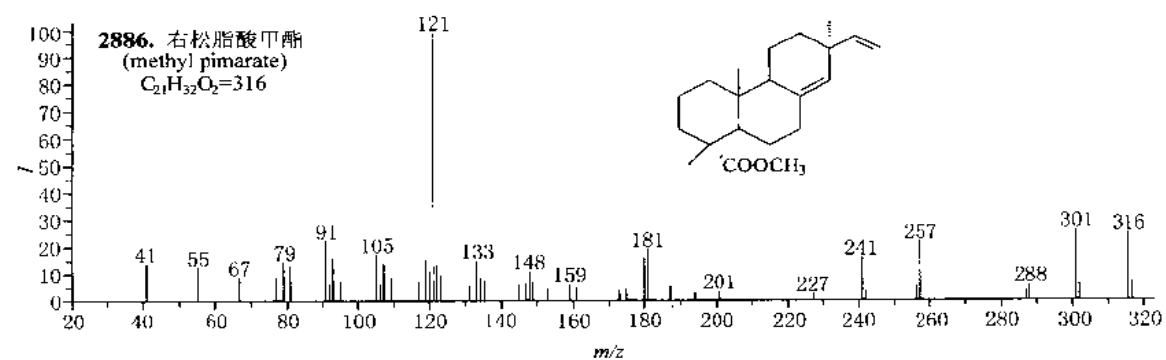
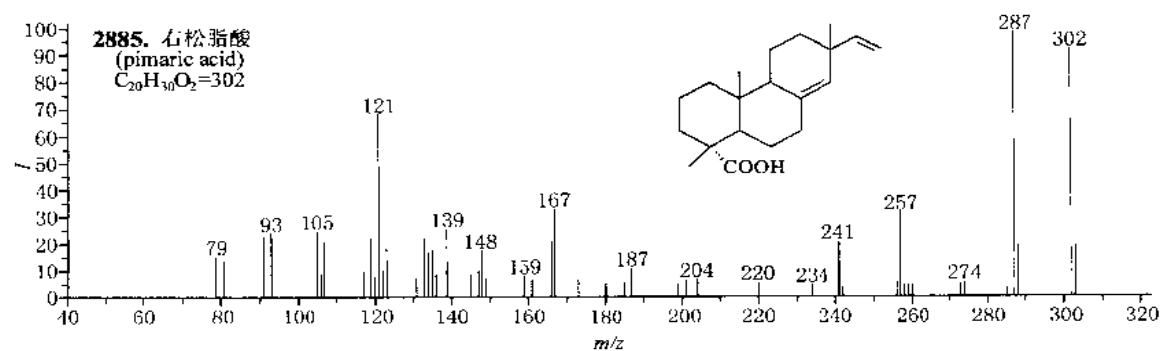
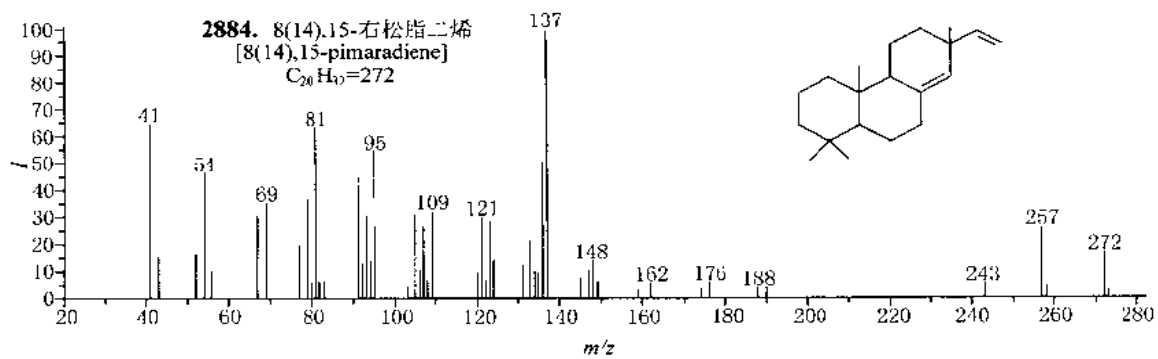










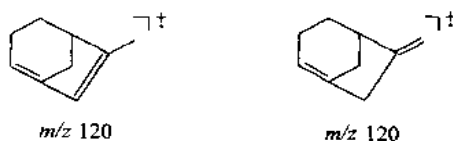


## 三、考兰烷类

(1) 考兰烷-13-醇 (2888) 的主要裂解是氢重排后失去  $C_3H_7$ , D 环清除。

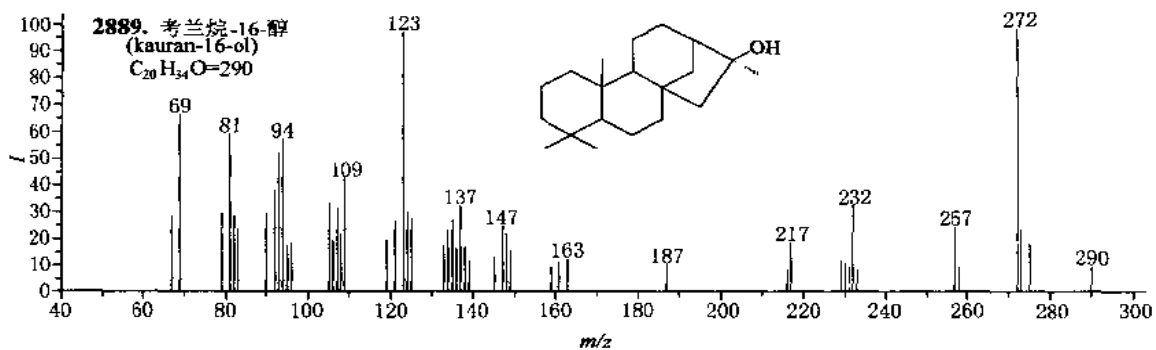
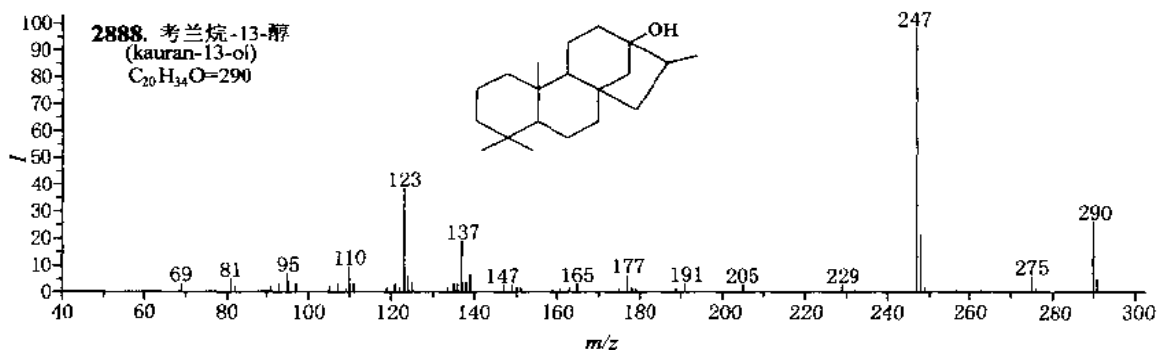
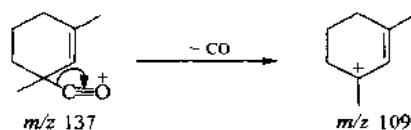
(2) 考兰烷-16-醇类 (2889~2891) 的主要裂解是  $M-H_2O$  和  $M-C_3H_6O$ , 有  $C_{15}$  醛基和羟亚甲基者 (2890 和 2891) 又有  $M-CHO$  和  $M-CH_2OH$  及二者的再失水离子。

(3) 考兰-15-烯 (2892) 和考兰-16-烯 (2893) 都有离子  $m/z$  120, 这个离子含 C、D 环:

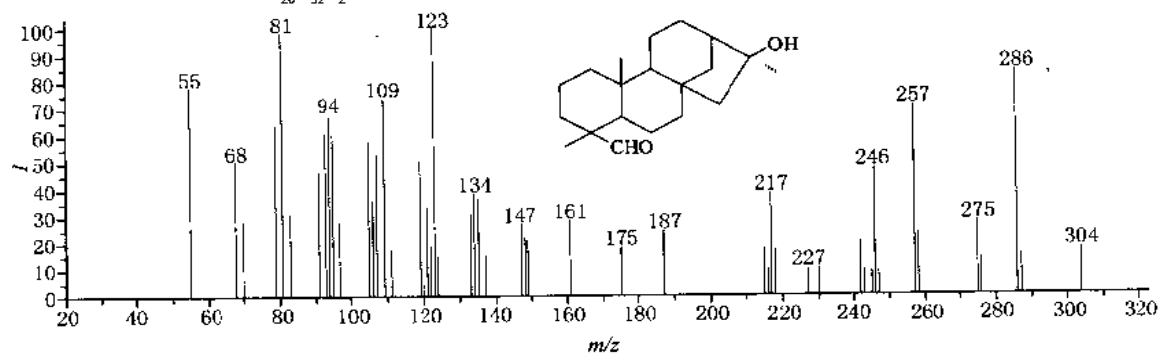


(4) 两个考兰烯酸类 (2894, 2895) 都有  $M-COOH$  离子为其特征性裂解产物。

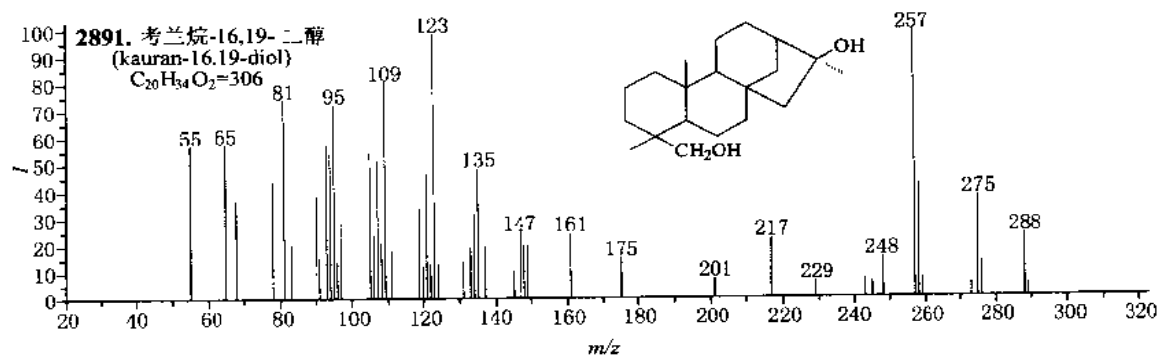
(5) 两个考兰烯内酯类 (2896, 2897) 都有离子  $m/z$  137 和  $m/z$  109, 后者来自前者失去一氧化碳。



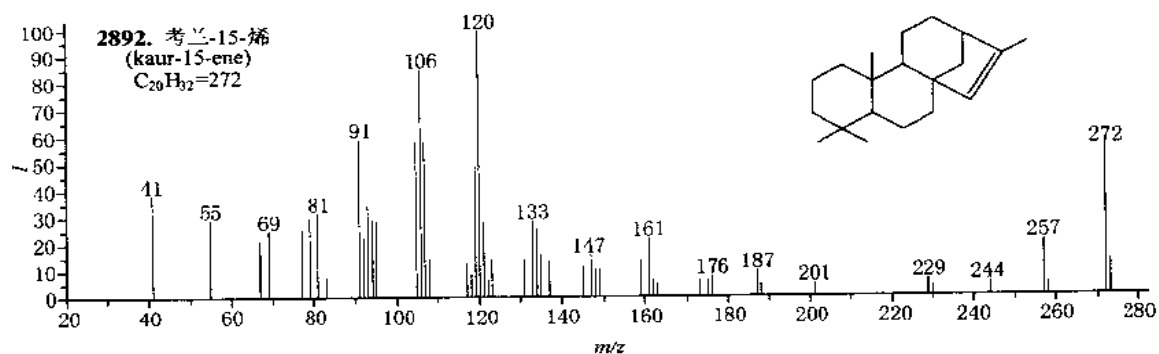
## 2890. 16-羟基考兰烷-19-醛 (16-hydroxykauran-19-al)

 $C_{20}H_{32}O_2=304$ 

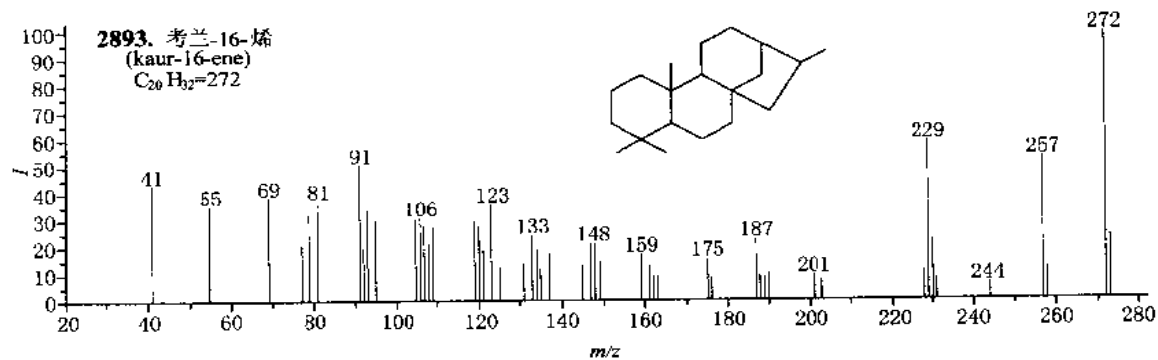
## 2891. 考兰烷-16,19-二醇 (kauran-16,19-diol)

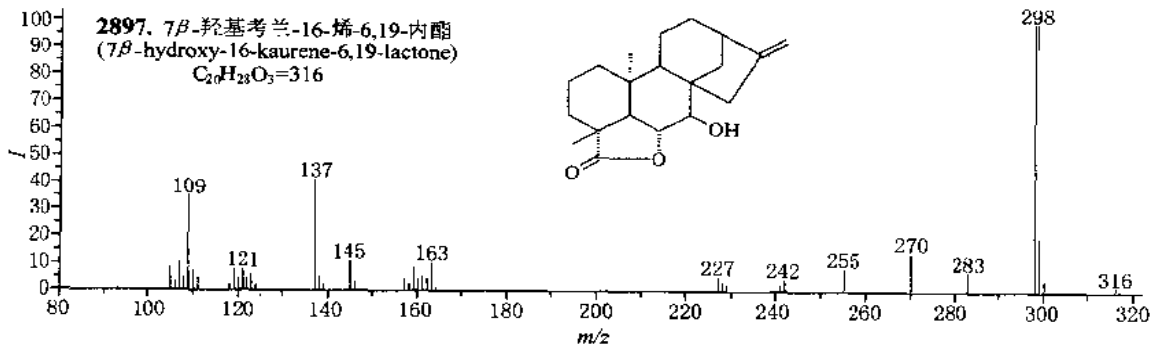
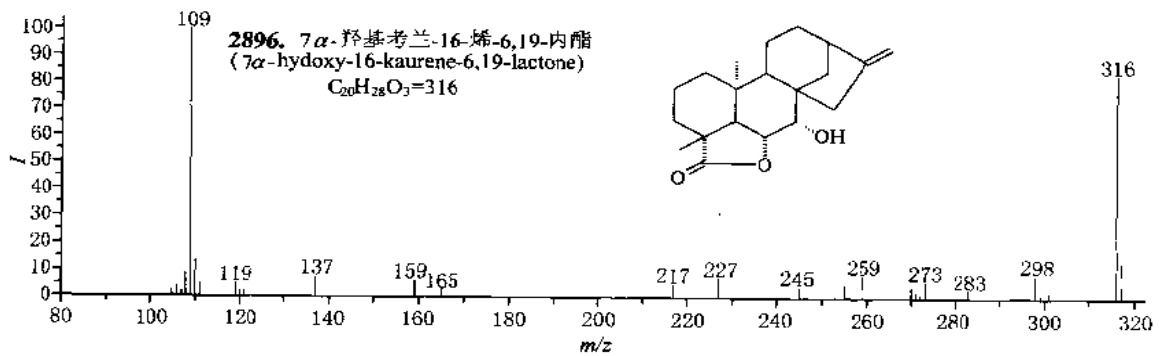
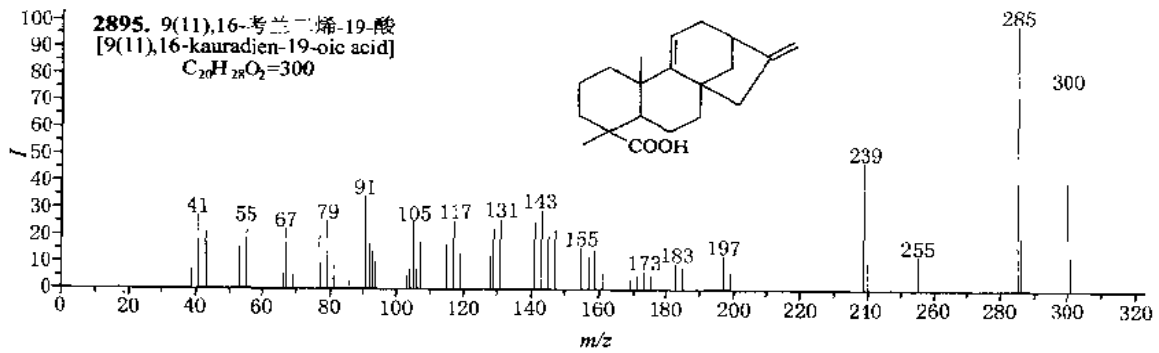
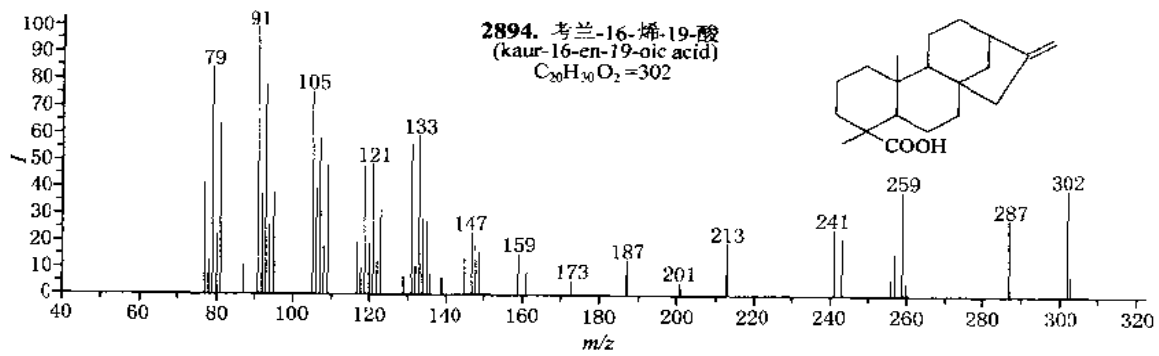
 $C_{20}H_{34}O_2=306$ 

## 2892. 考兰-15-烯 (kaur-15-ene)

 $C_{20}H_{32}=272$ 

## 2893. 考兰-16-烯 (kaur-16-ene)

 $C_{20}H_{32}=272$ 



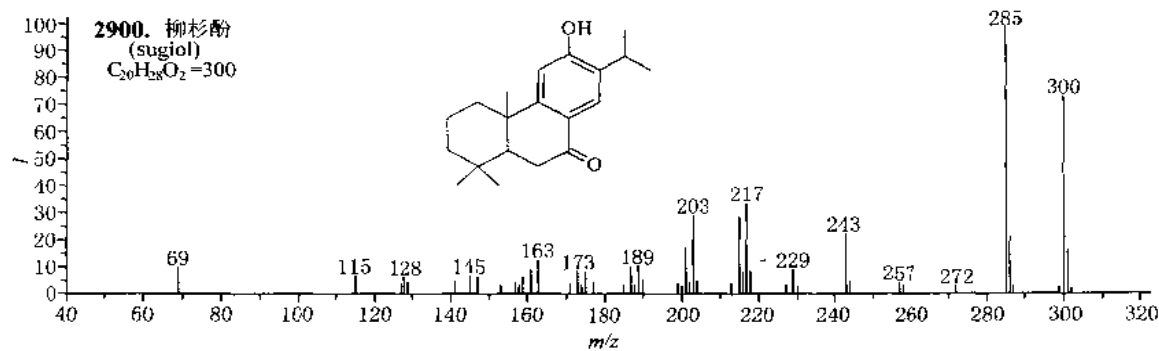
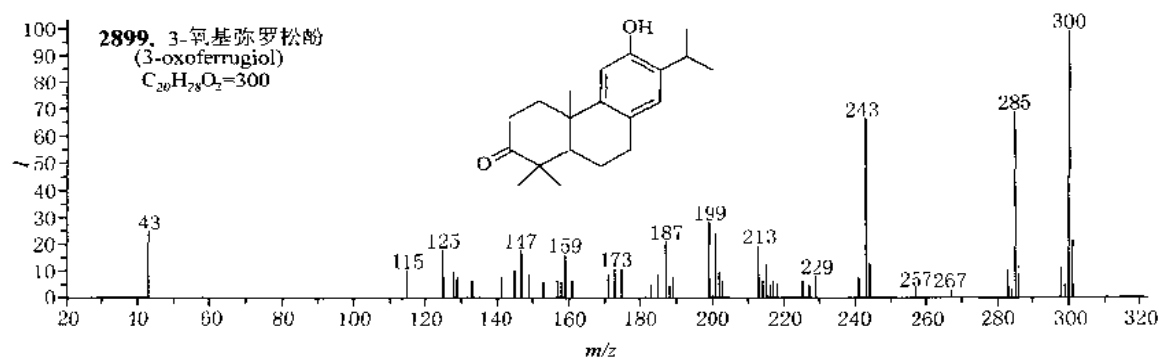
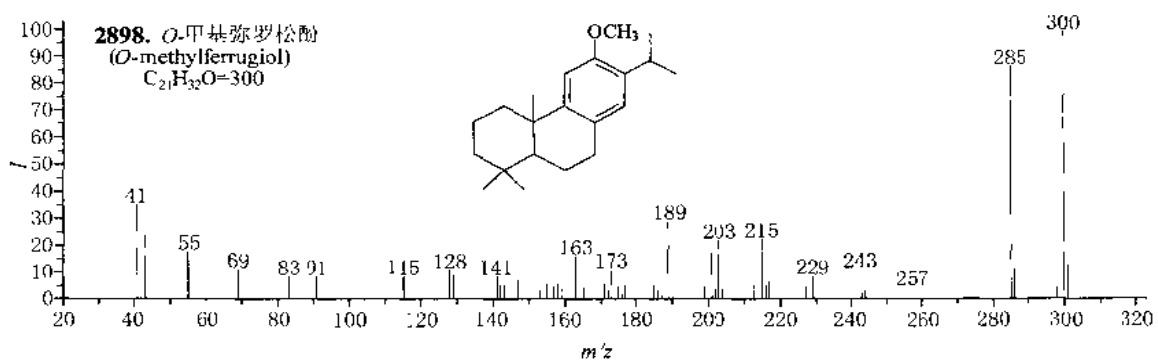


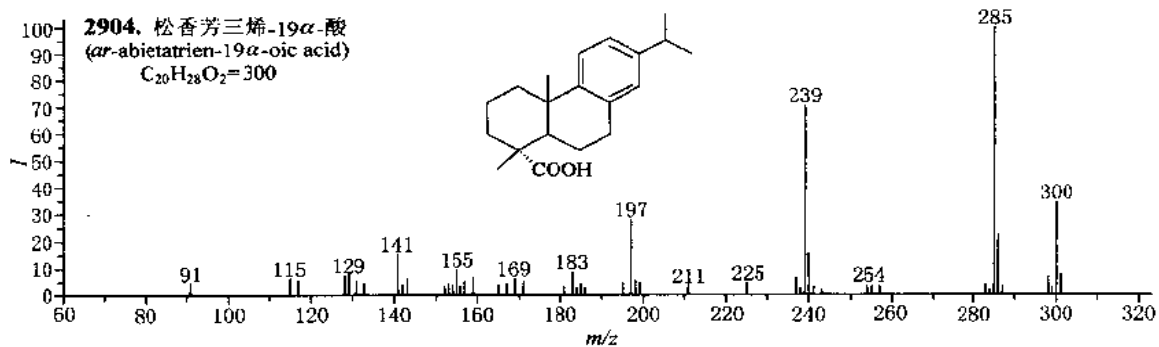
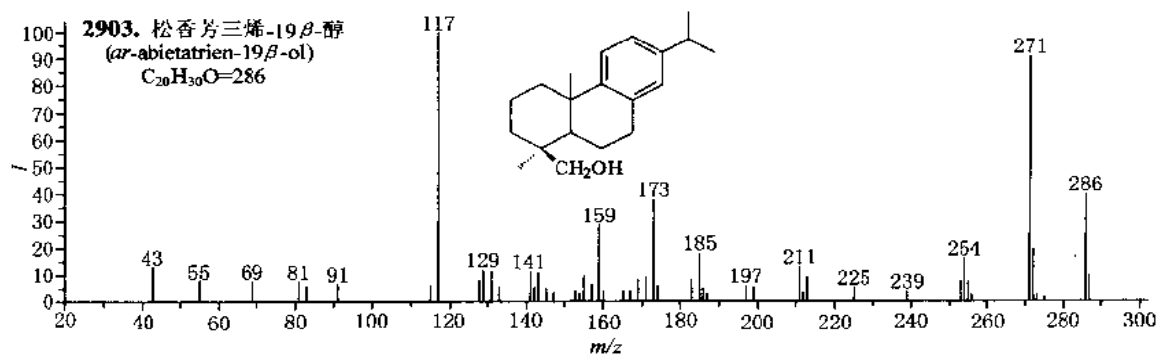
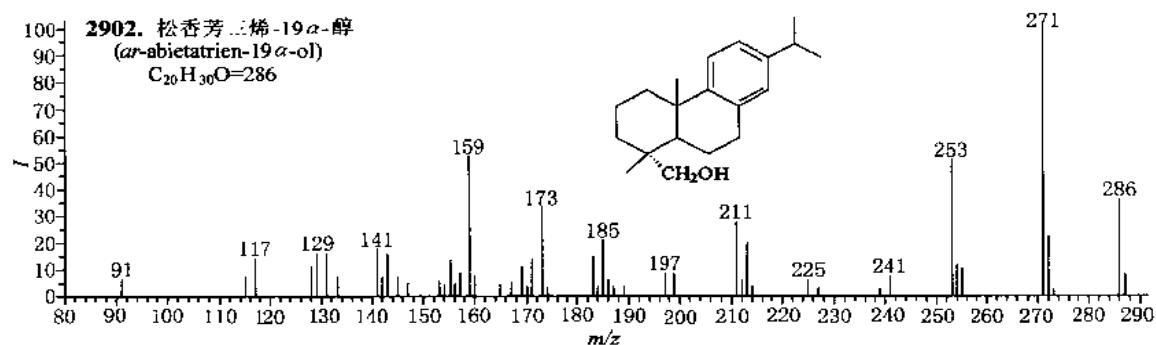
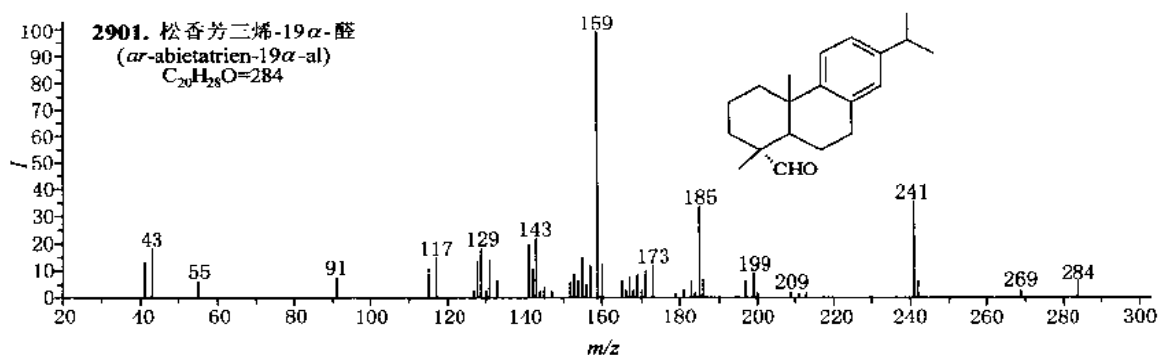
## 四、松香烷类

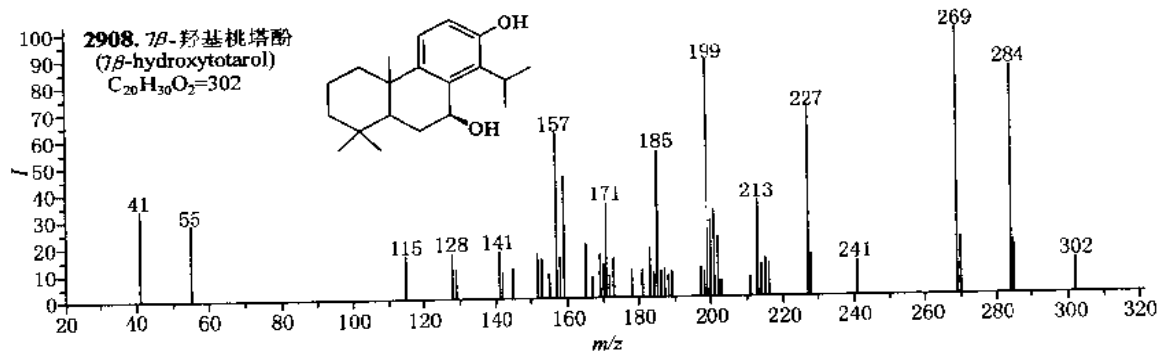
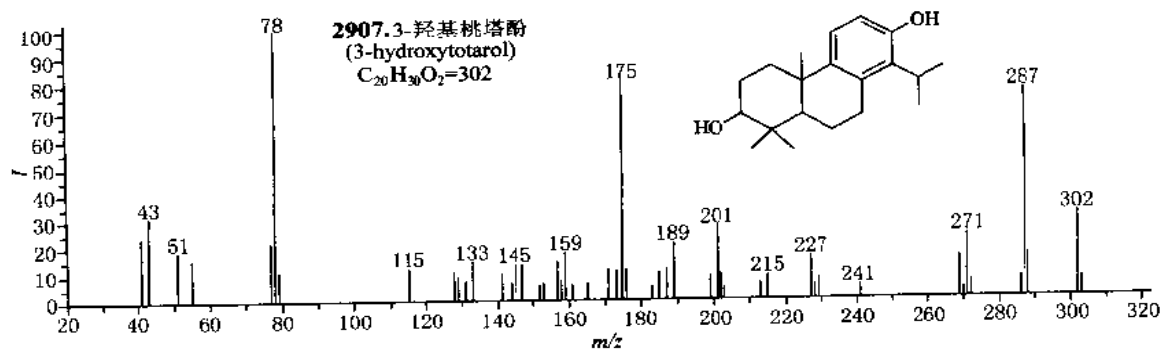
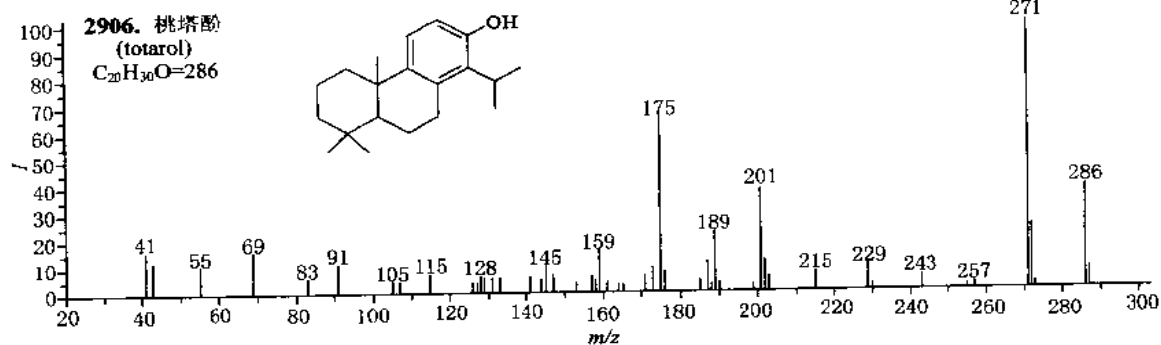
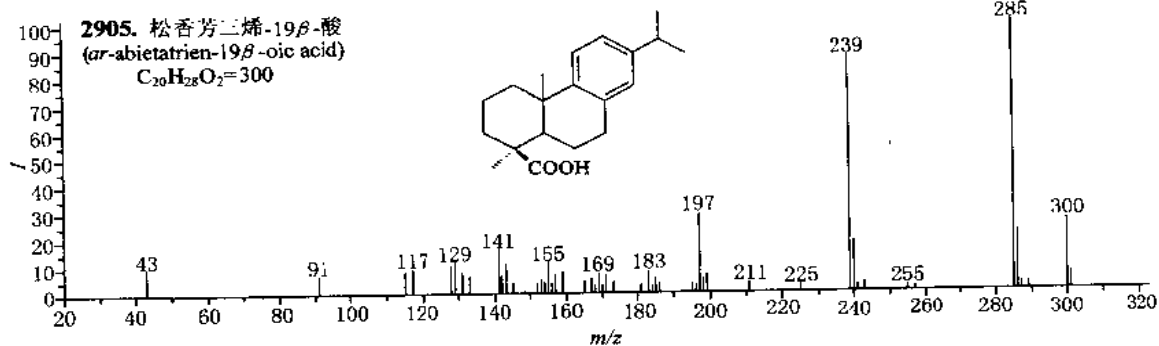
(1) 简单取代的芳三烯类化合物 (2898~2903) 主要裂解是  $M-CH_3$ , 中质量区的离子都是来自失去 A 环和部分 B 环、保留 C 环的离子。

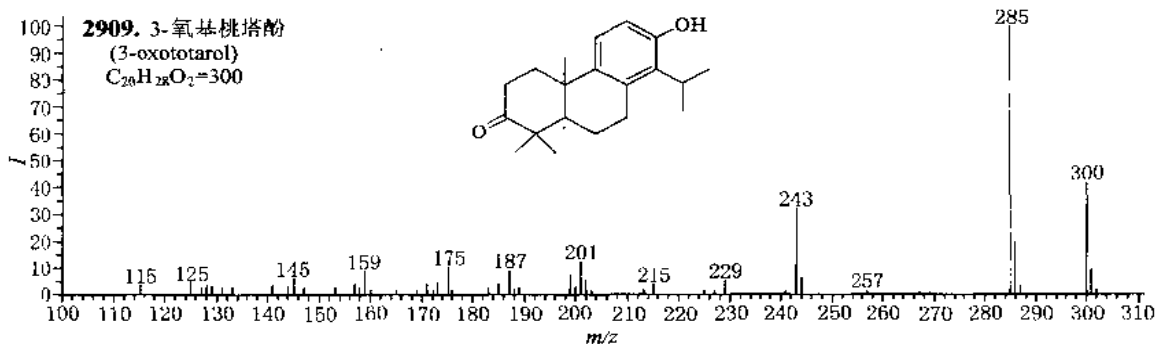
(2) 两个松香芳三烯-19-酸 (2904, 2905) 的主要裂解途径是  $M-CH_3-HCOOH-C_3H_6$ 。

(3) 桃塔酚类 (2906~2909) 的裂解主要是  $M-CH_3$ , 失去的甲基都是角甲基, 中质量区的各离子也是失去 A 环和部分 B 环产生的。





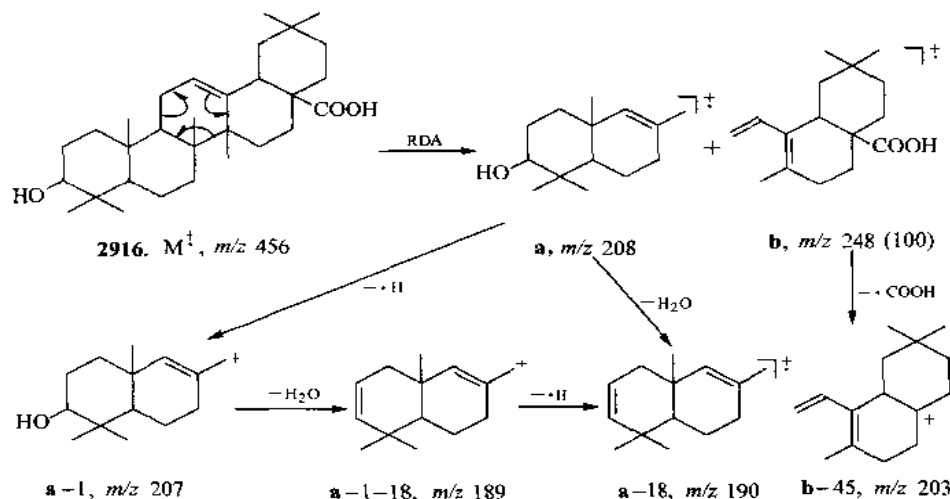




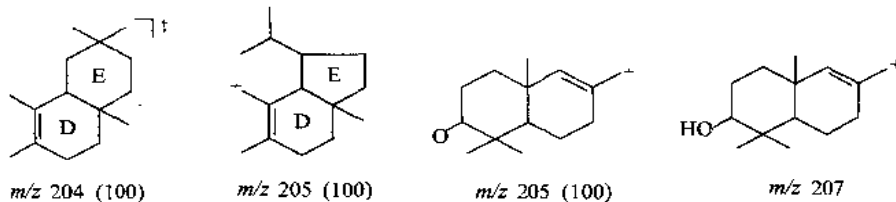
## 第四节 三萜类

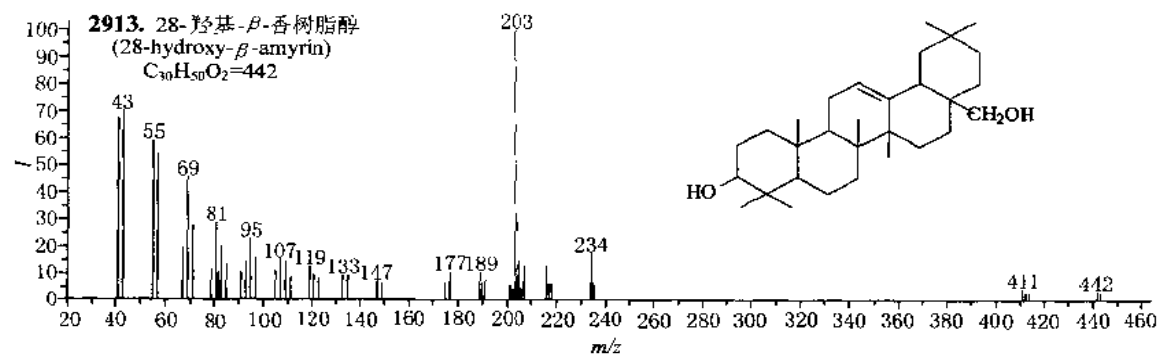
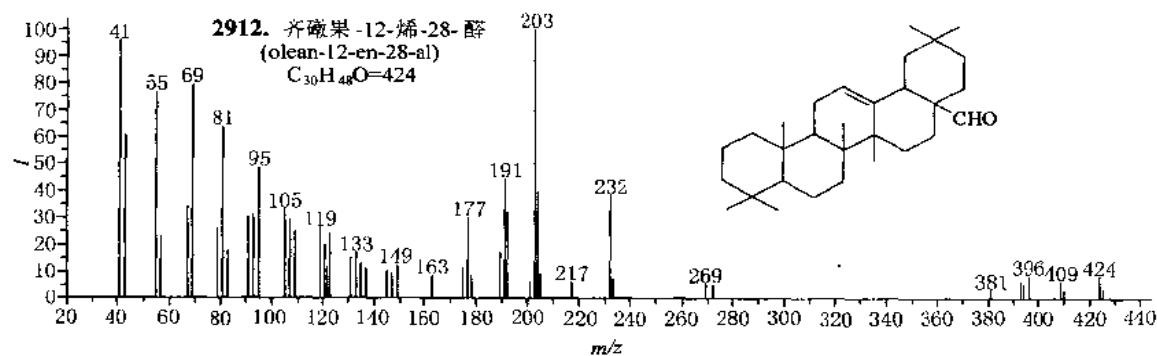
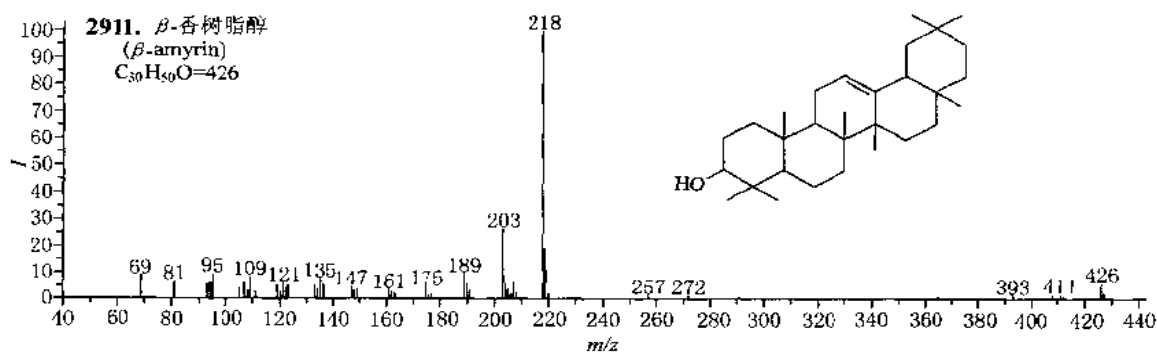
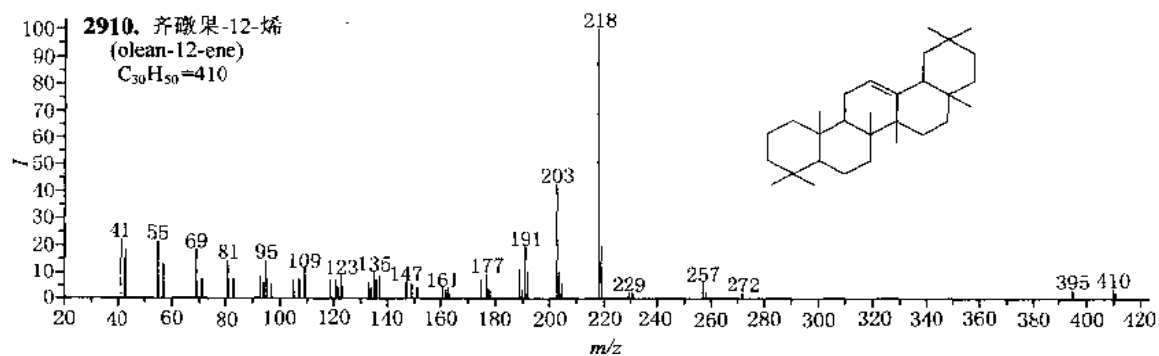
### 一、齐墩果烷类

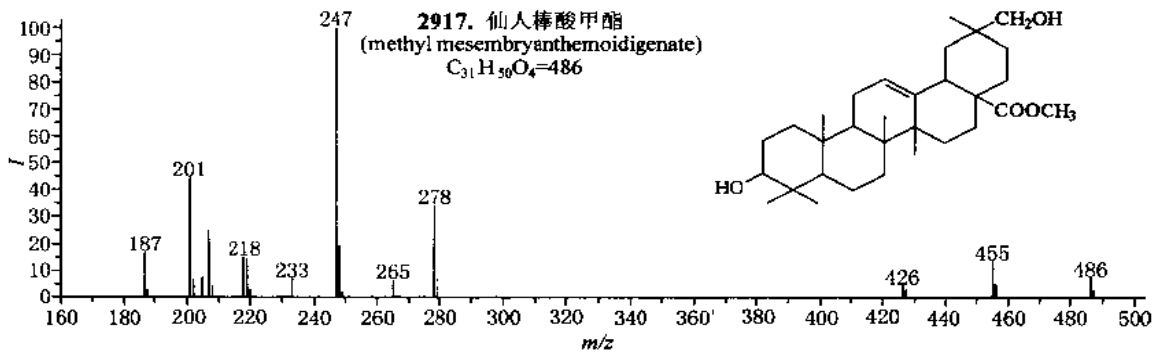
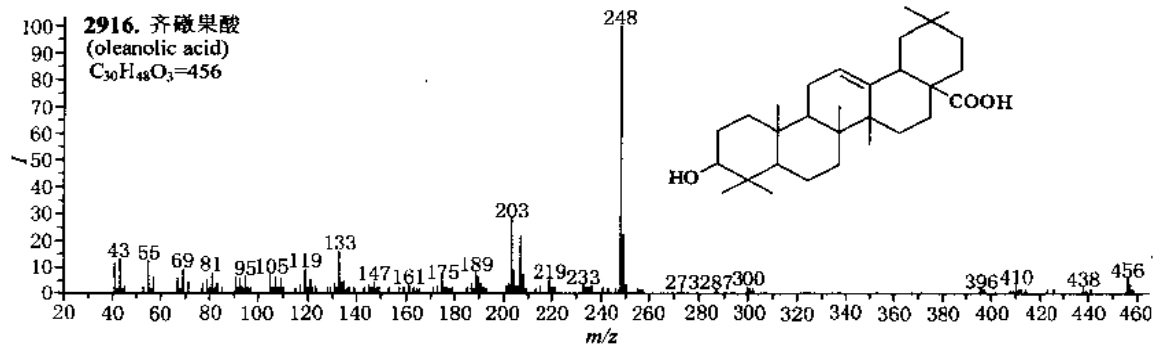
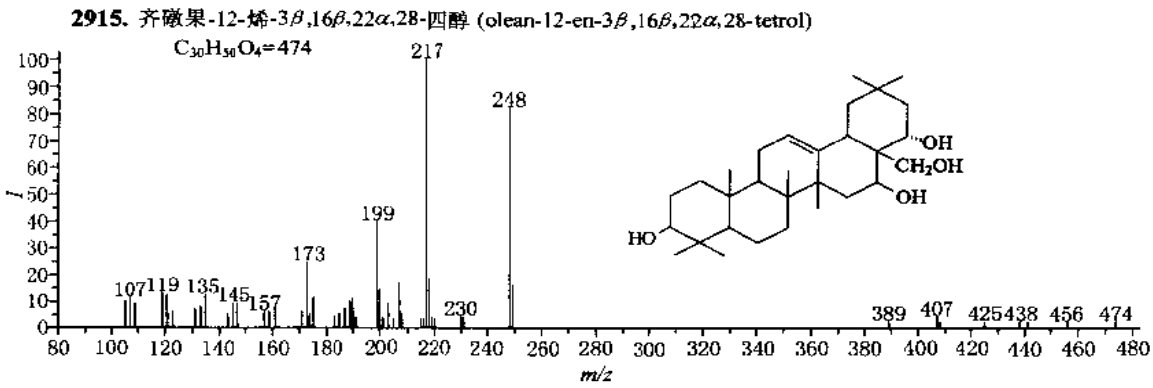
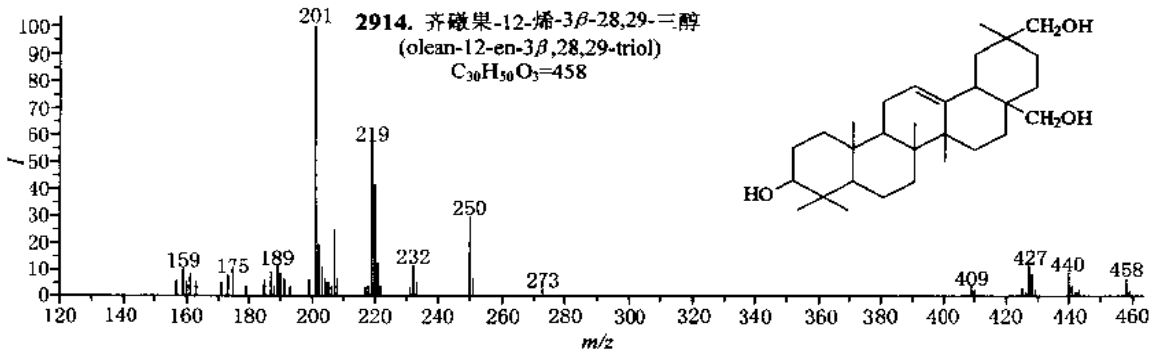
(1) 齐墩果-12-烯(2910)和熊果-12-烯(2923)及其醛、醇、酸和甲酯、乙酸酯类(2910~2928)的主要特征裂解方式是C环进行的RDA裂解。把分子离子分为含A、B环的离子**a**和含D、E环的离子**b**,离子**a**多数很弱,离子**b**多数很强或为基峰;只有在D、E环取代基很多时,离子**b**的相对丰度才会减弱下来。离子**a**和**b**还能继续裂解,根据取代基的性质不同,离子**a**常能产生**a-H**, **a-H<sub>2</sub>O**, **a-H-H<sub>2</sub>O**和**a-HOAc**等;离子**b**则主要是能失去C<sub>17</sub>角取代基,例如**b-CH<sub>3</sub>**, **b-CHO**, **b-CH<sub>2</sub>OH**, **b-COOH**和**b-COOCH<sub>3</sub>**等,这些离子还能再失水或失甲酸甲酯等等。以下以齐墩果酸(2916)为例,说明这些裂解:

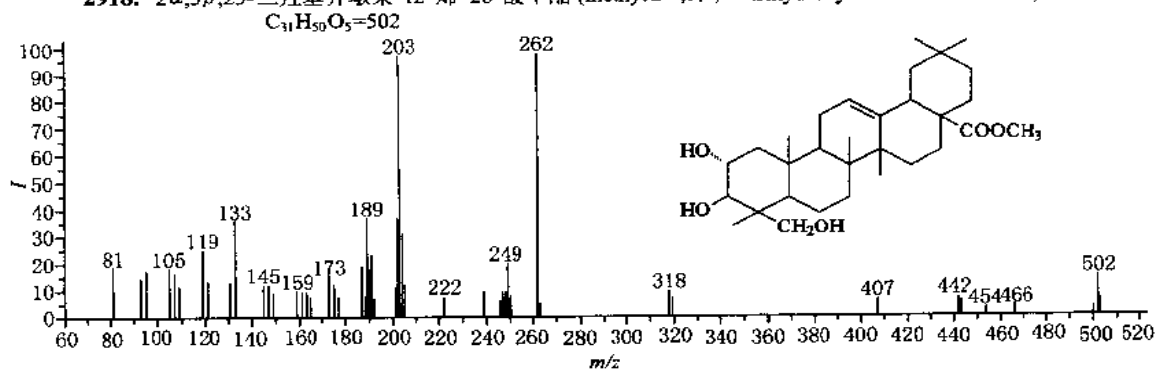
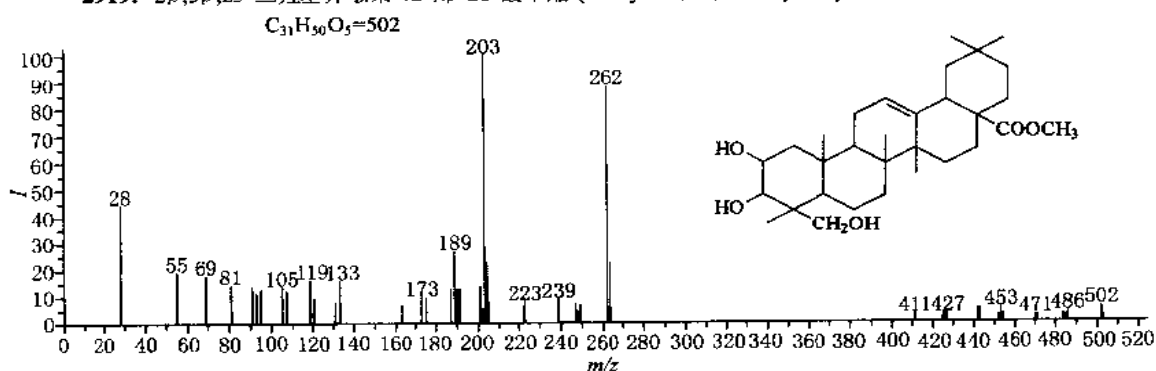
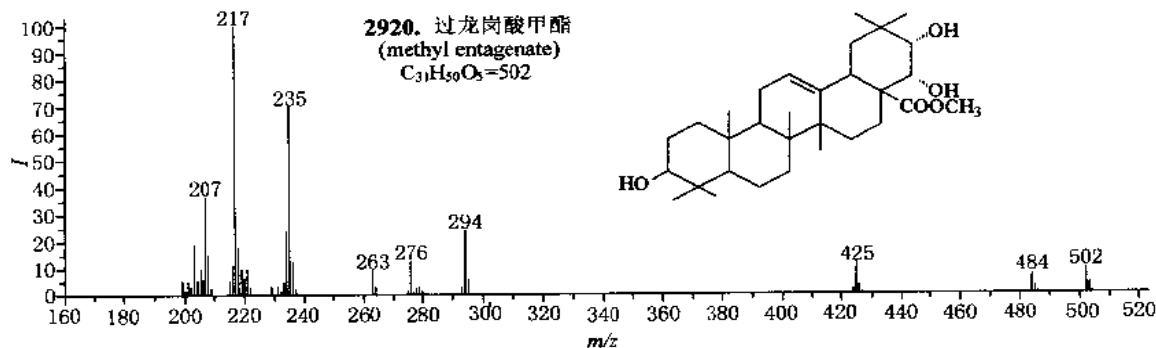


(2) 齐墩果-18-烯(2929)的裂解较为复杂,基峰  $m/z$ 204 可能含有D、E环:

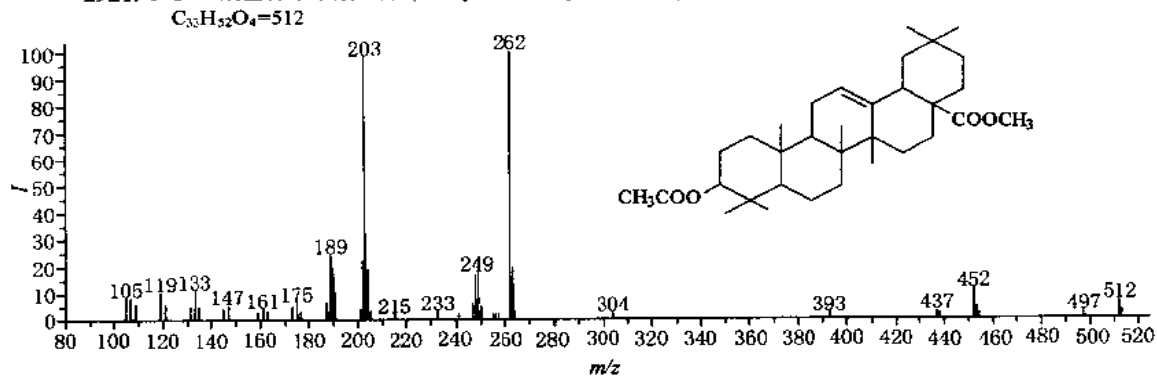






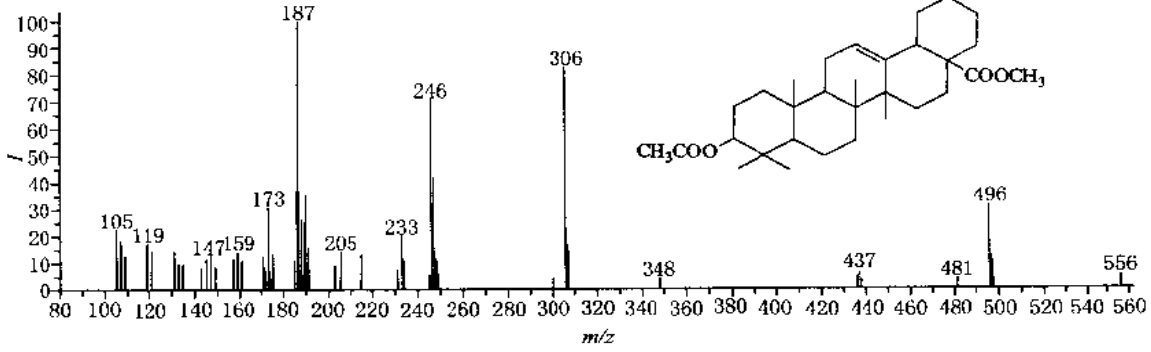
2918. 2 $\alpha$ ,3 $\beta$ ,23-三羟基齐墩果-12-烯-28-酸甲酯 (methyl 2 $\alpha$ ,3 $\beta$ ,23-trihydroxyolean-12-en-28-oate)2919. 2 $\beta$ ,3 $\beta$ ,23-三羟基齐墩果-12-烯-28-酸甲酯 (methyl 2 $\beta$ ,3 $\beta$ ,23-trihydroxyolean-12-en-28-oate)2920. 过龙岗酸甲酯  
(methyl entagenate)

2921. 3-O-乙酰基齐墩果酸甲酯 (methyl 3-O-acetyloleanolate)



2922. 乙酰基菜米草酸二甲酯 (dimethyl acetylspergulagenate)

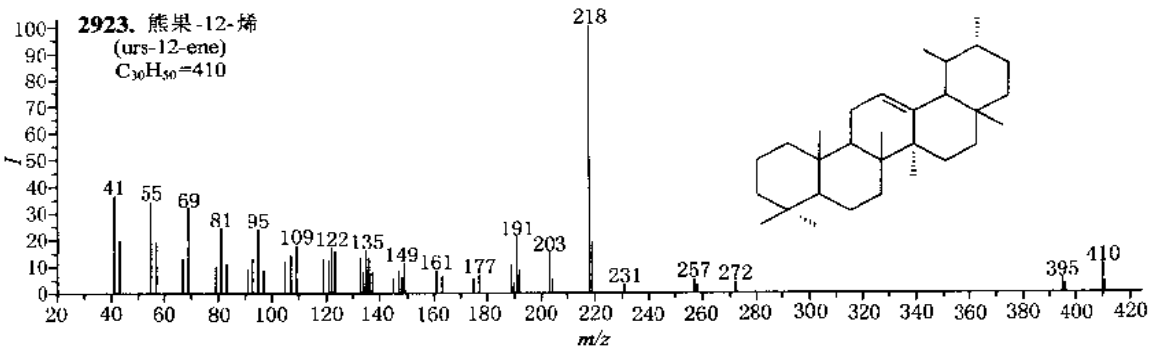
$C_{34}H_{52}O_6=556$



2923. 熊果-12-烯

(urs-12-ene)

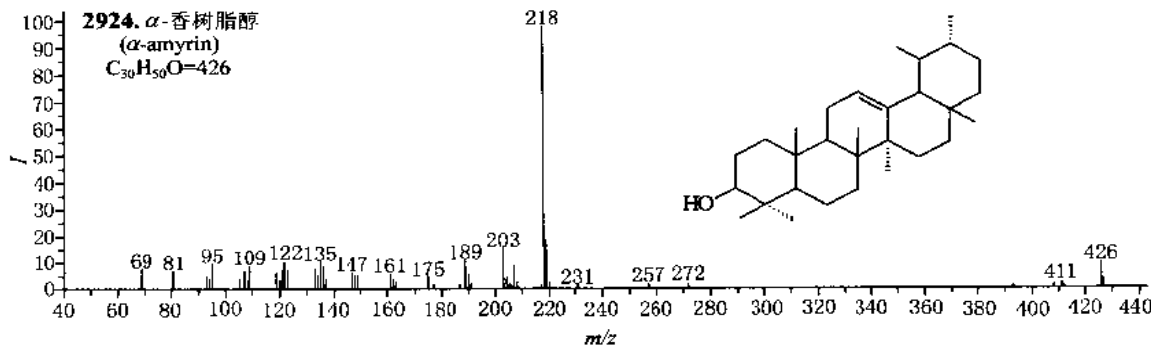
$C_{30}H_{50}=410$



2924.  $\alpha$ -香树脂醇

( $\alpha$ -amyrin)

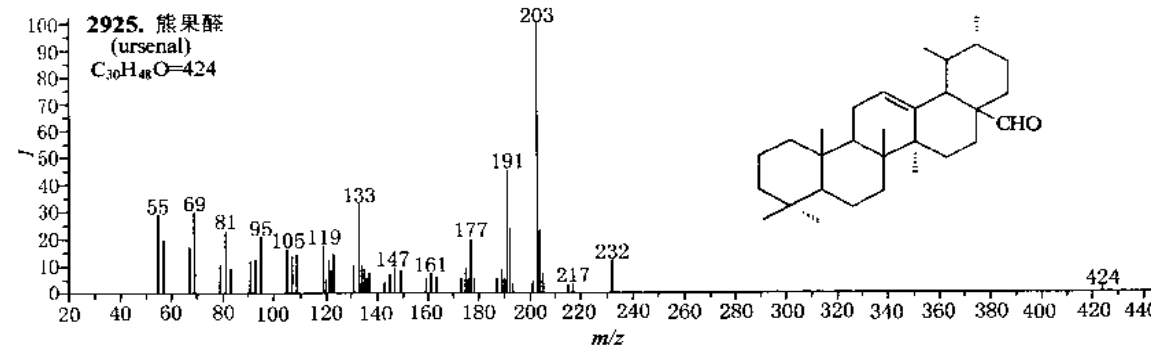
$C_{30}H_{50}O=426$



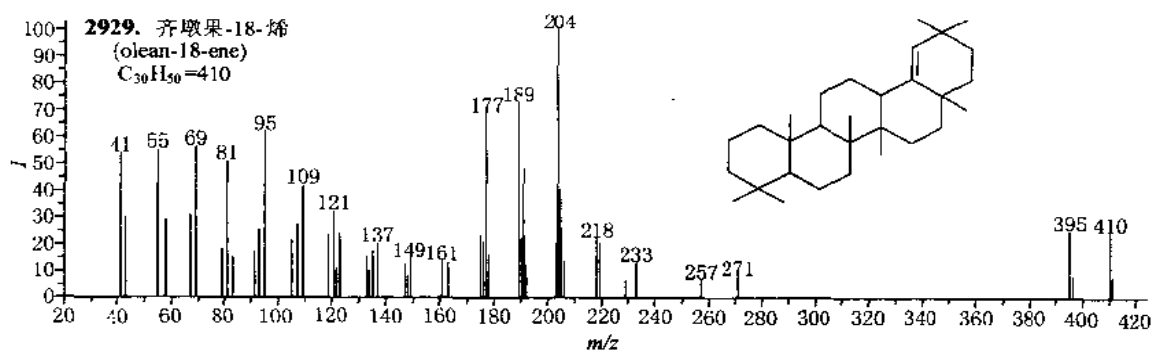
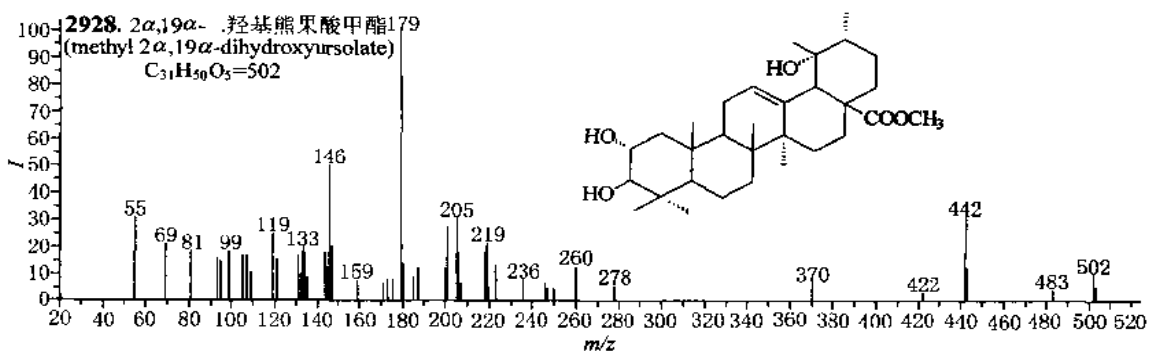
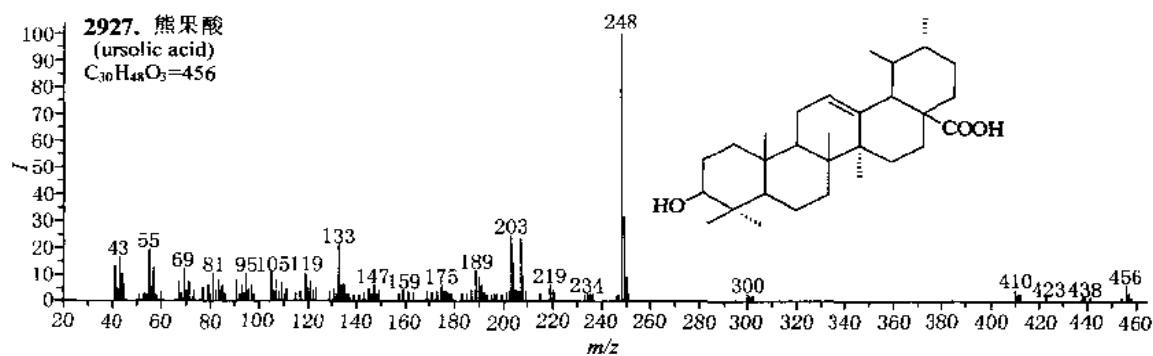
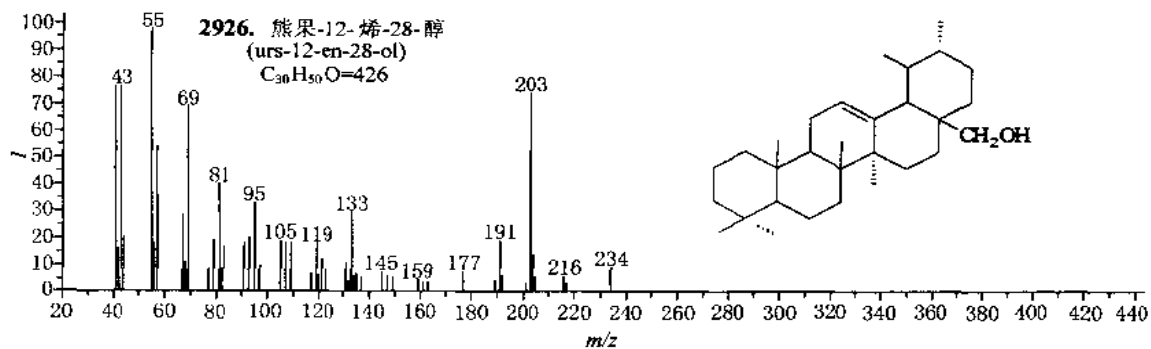
2925. 熊果醛

(ursenal)

$C_{30}H_{48}O=424$

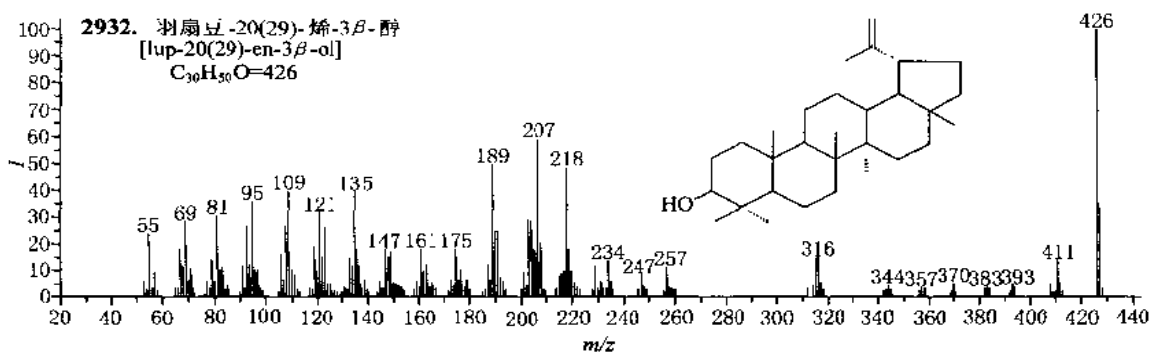
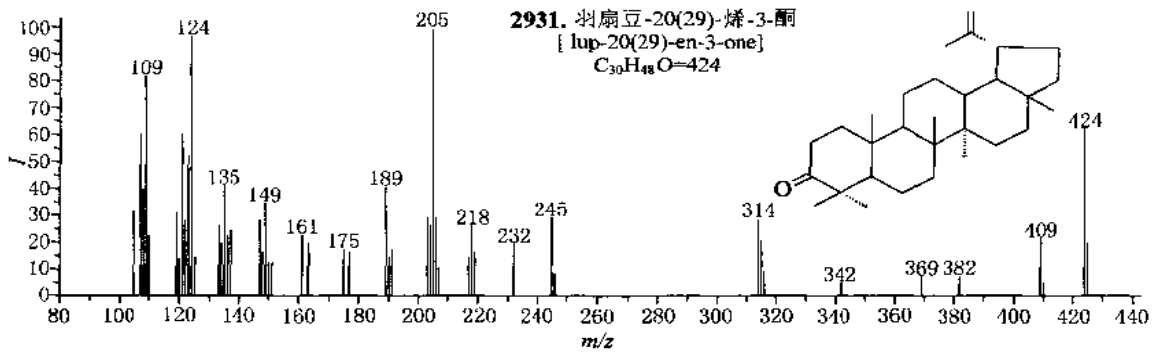
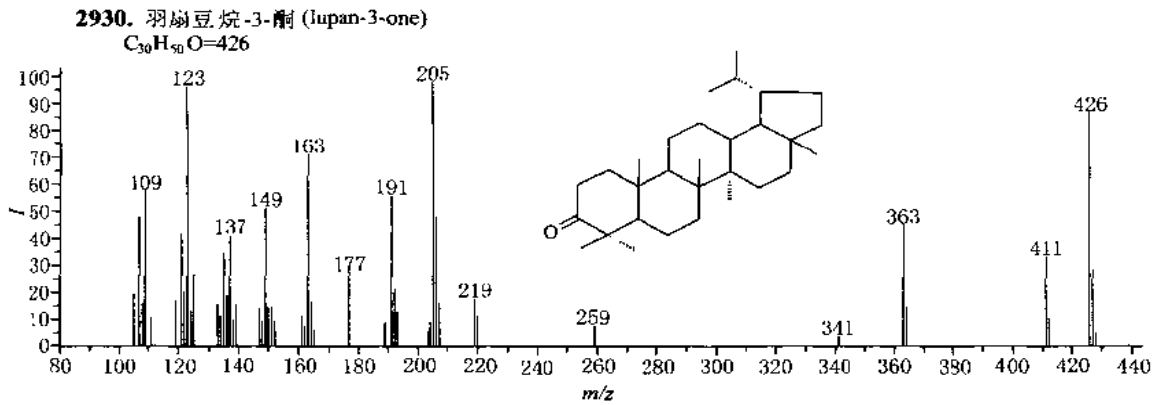


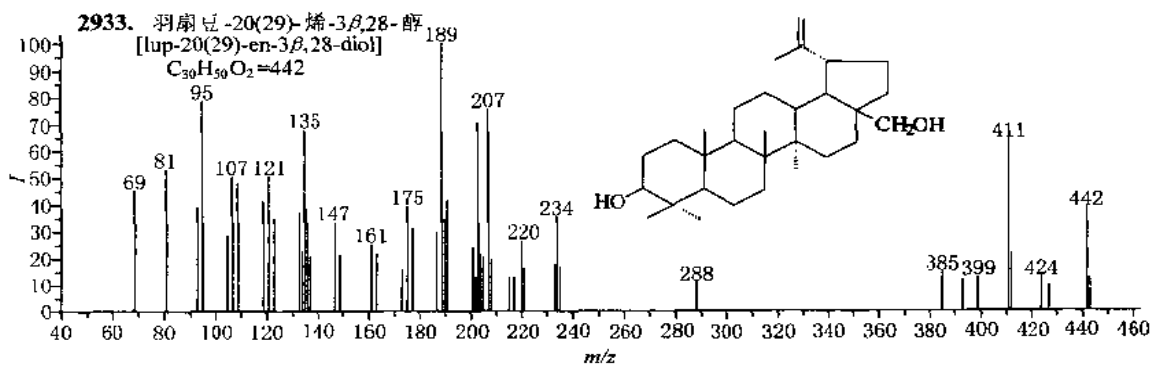




## 二、羽扇豆烷类

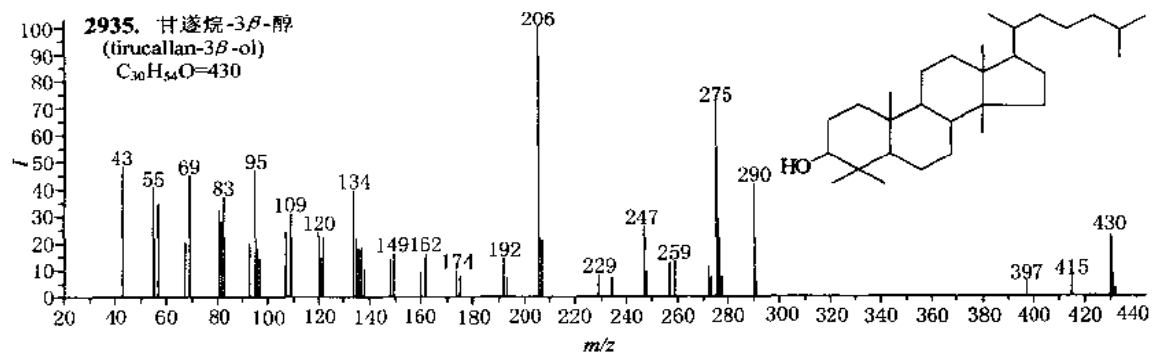
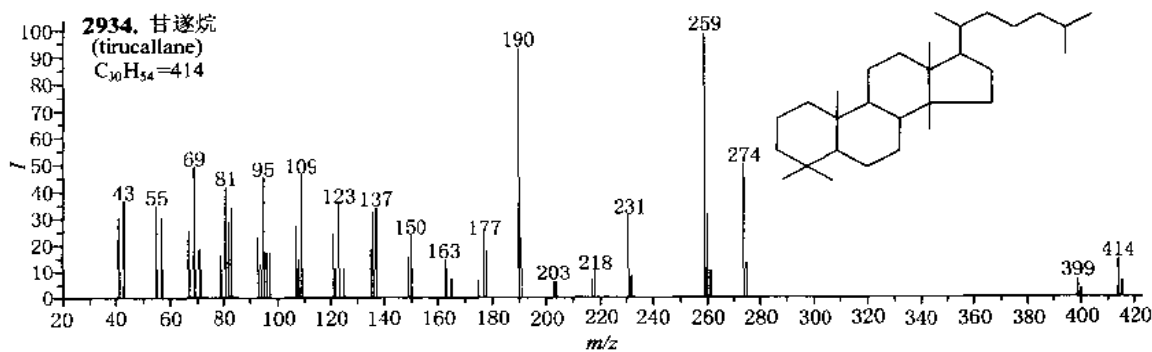
羽扇豆烷-3-酮 (2930) 的基峰  $m/z$  205 也可能含有 D、E 环, 但羽扇豆-20(29)-烯-3-酮 (2931) 的基峰也是  $m/z$  205, 以及羽扇豆烯-3-醇类 (2932, 2933) 有离子  $m/z$  207 和再失水离子  $m/z$  189, 这些离子似又包含 A、B 环, 因而裂解机制尚不完全清楚。





### 三、甘遂烷类

甘遂烷 (2934) 和甘遂烷-3 $\beta$ -醇 (2935) 的主要裂解都是  $M-SC-C_2H_5$  和  $M-SC-C_3H_6$ , 继续的裂解似为再失去  $C_5H_{10}$ 。  $C_5H_{10}$  的来源尚不清楚。

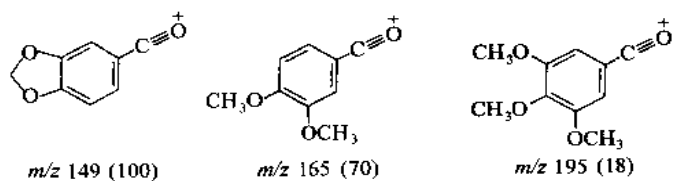


## 第二十二章 其他天然有机化合物

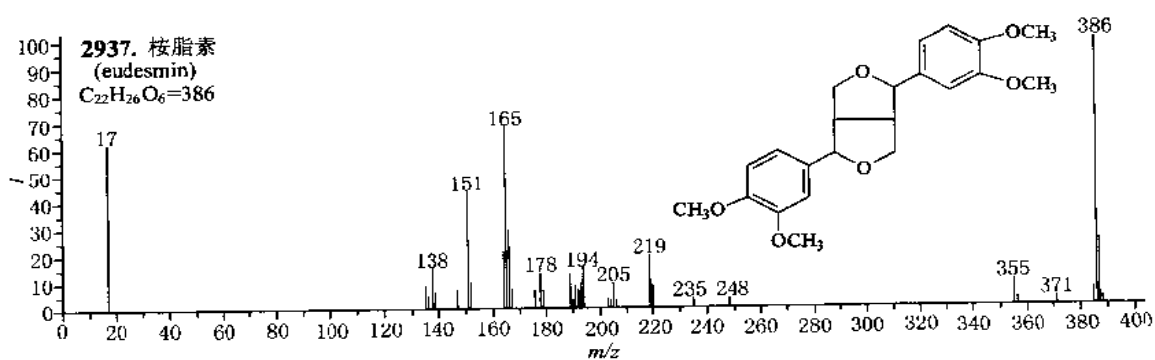
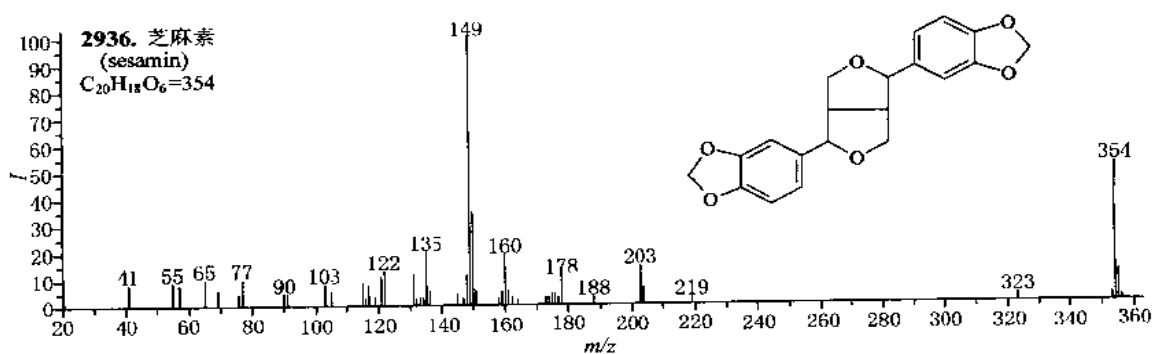
### 第一节 木脂素类

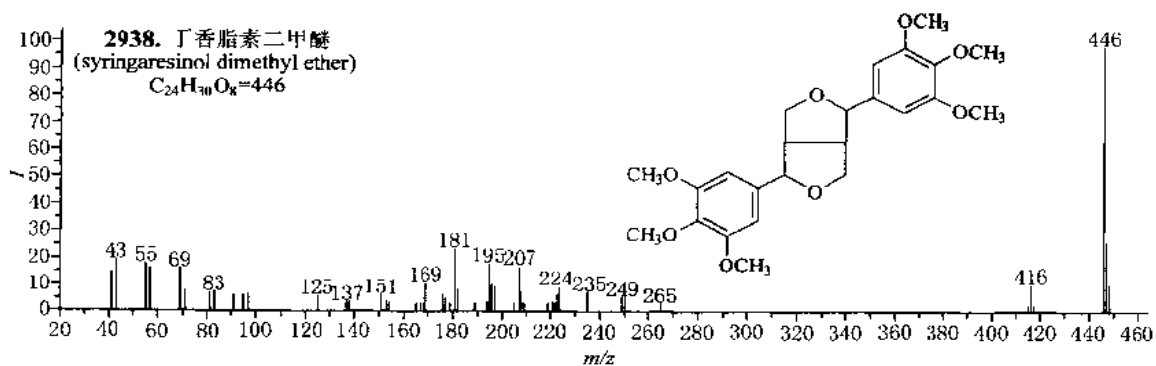
#### 一、双并- $\alpha$ -苯基四氢呋喃类

(1) 芝麻素 (2936) 的基峰是  $m/z$  149, 这是一个亚甲二氧基苯甲酰基离子。



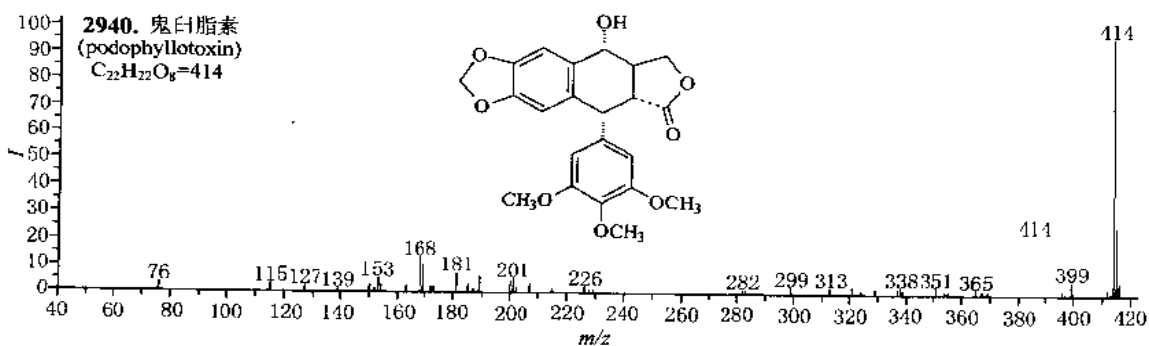
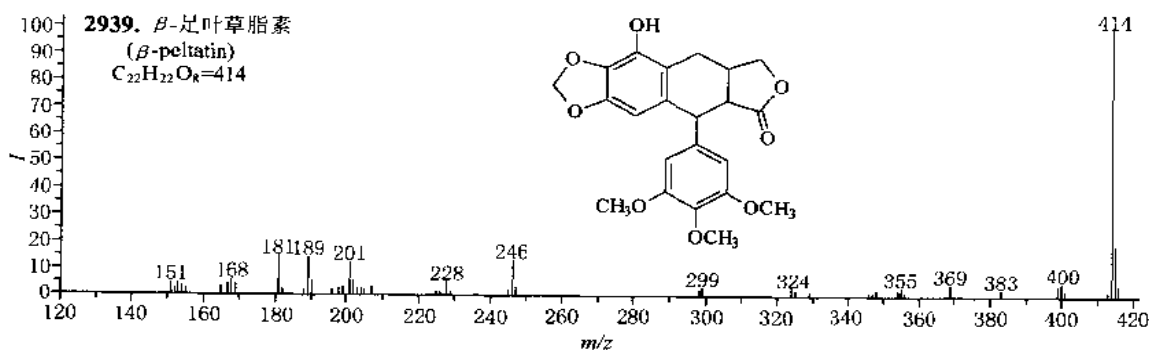
(2) 桉脂素 (2937) 的这个离子移到了  $m/z$  165, 丁香脂素二甲醚 (2938) 的移到  $m/z$  195。





## 二、4-苯基四氢萘并丁内酯类

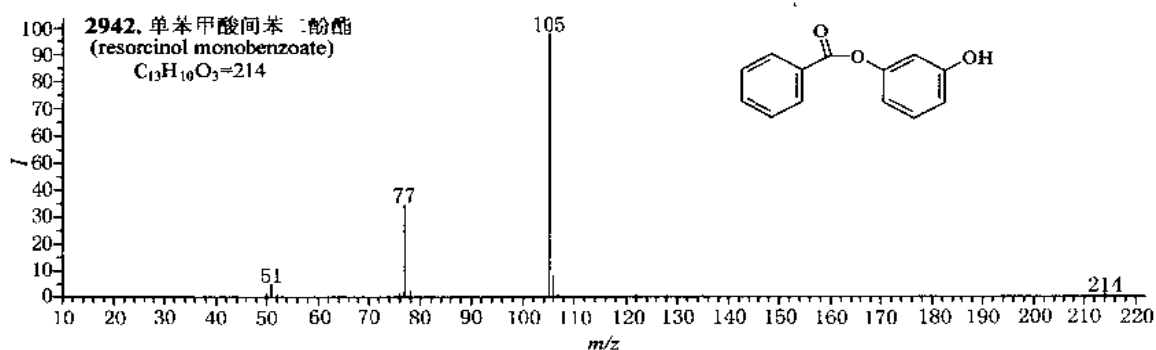
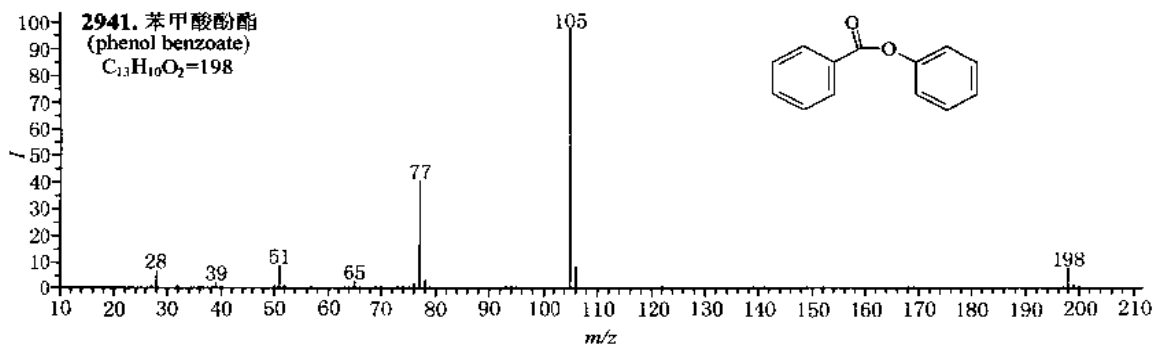
$\beta$ -足叶草脂素 (2939) 和鬼臼脂素 (2940) 的分子离子很强, 裂解较少, 碎片离子的相对丰度都在 15% 以下。



## 第二节 缩酚酸类

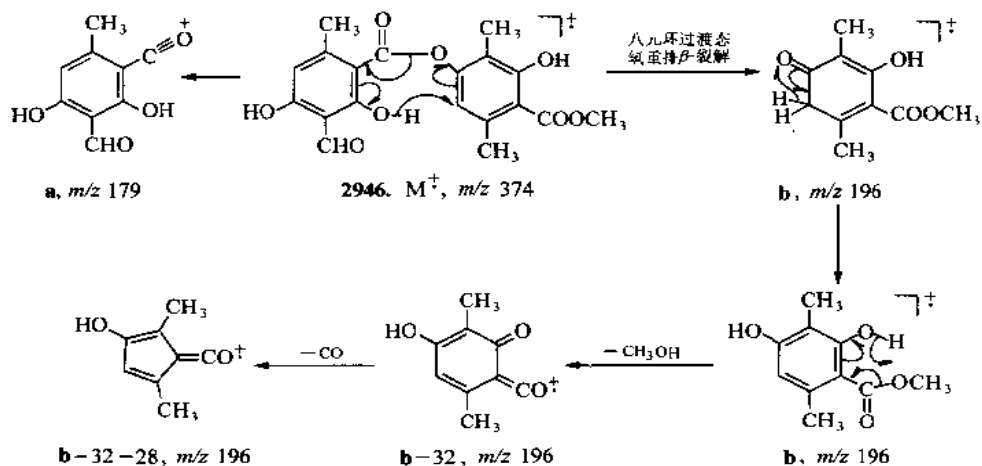
### 一、苯甲酸酚酯类

苯甲酸酚酯 (2941) 和单苯甲酸邻苯二酚酯 (2942) 的主要裂解都是只生成含 A 环的苯甲酰基离子  $a$  ( $m/z$  105), 其他裂解是离子  $a$  继续失去一氧化碳和乙炔。



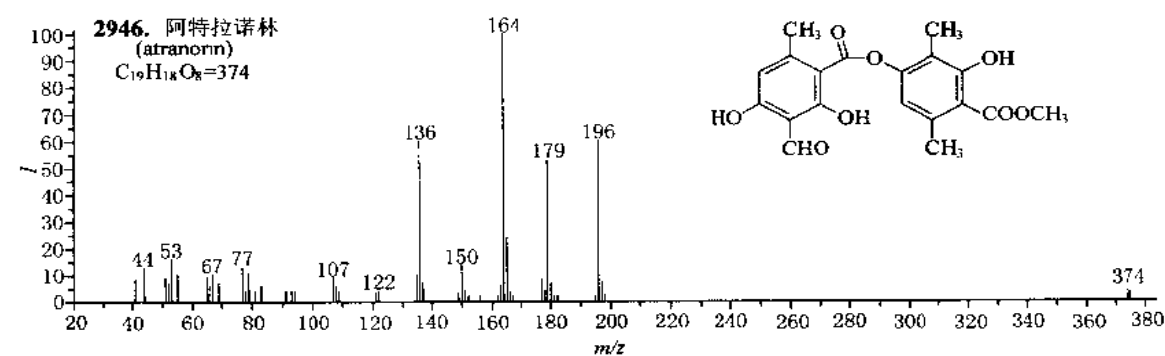
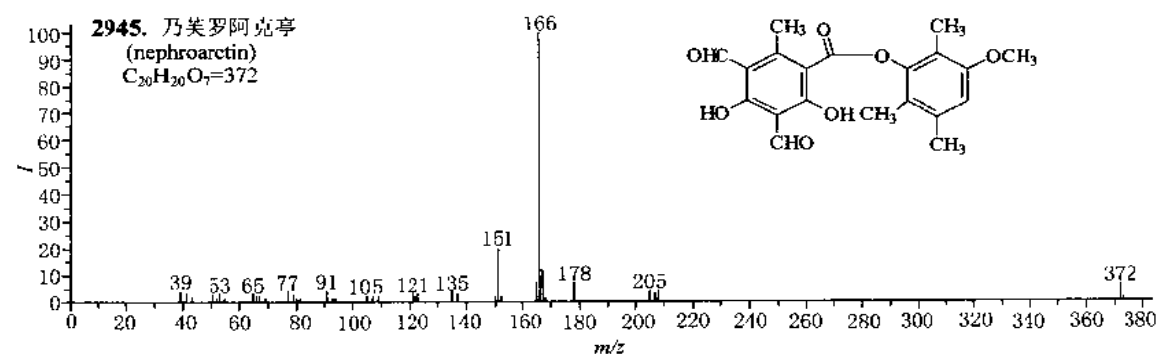
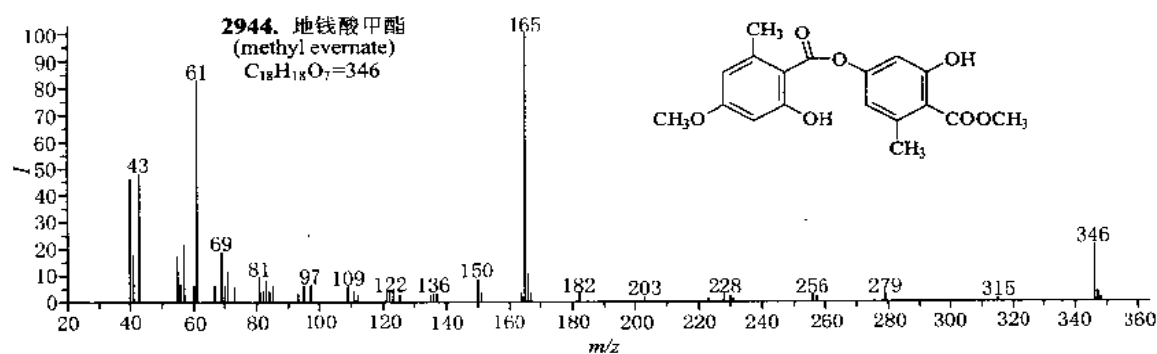
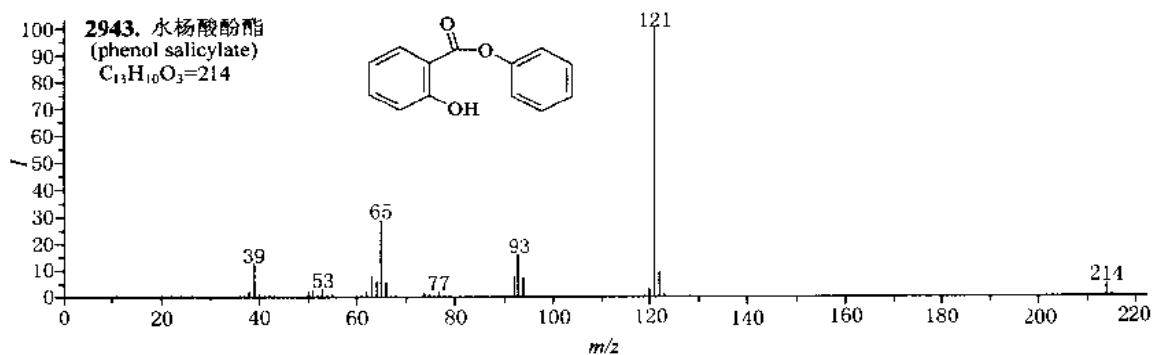
## 二、水杨酸或取代水杨酸酚酯类

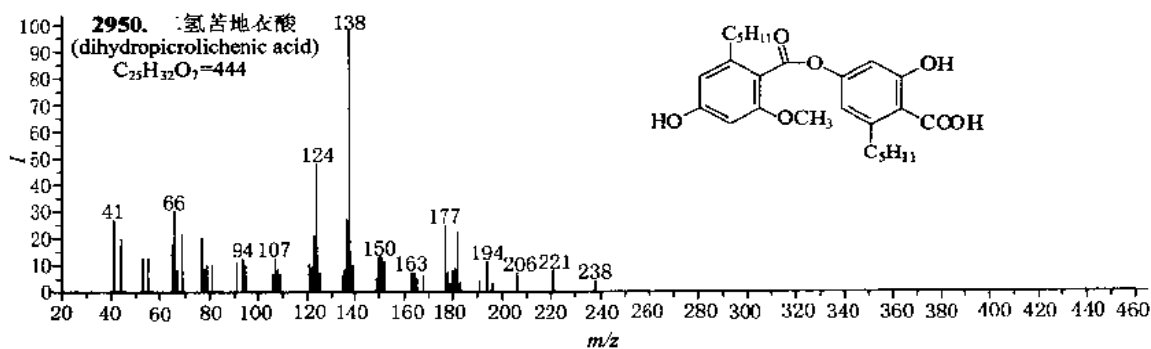
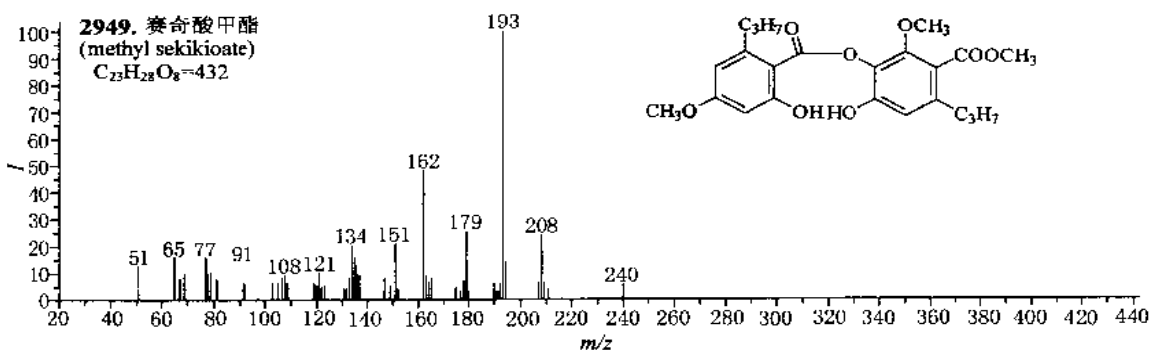
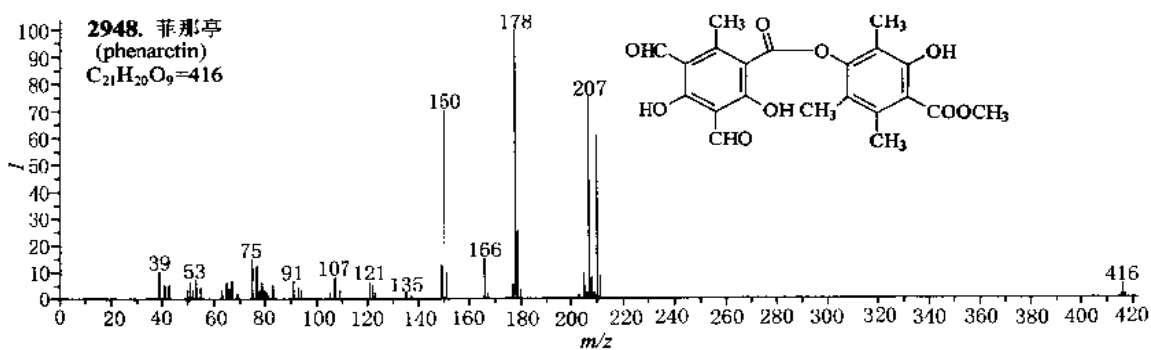
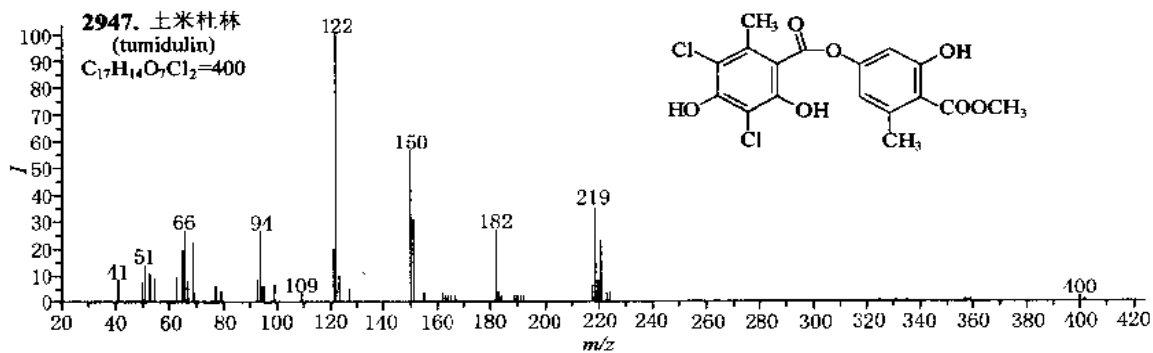
这类化合物 (2943~2955) 除有强弱不等的离子 **a** 外, 又可通过八元环过渡态氢重排  $\beta$ -裂解、由 A 环转移 1 个氢原子到 B 环上生成含有 B 环的离子 **b**。离子 **b** 的质量数为偶数, 与离子 **a** 不同, 两者易于识别。例:



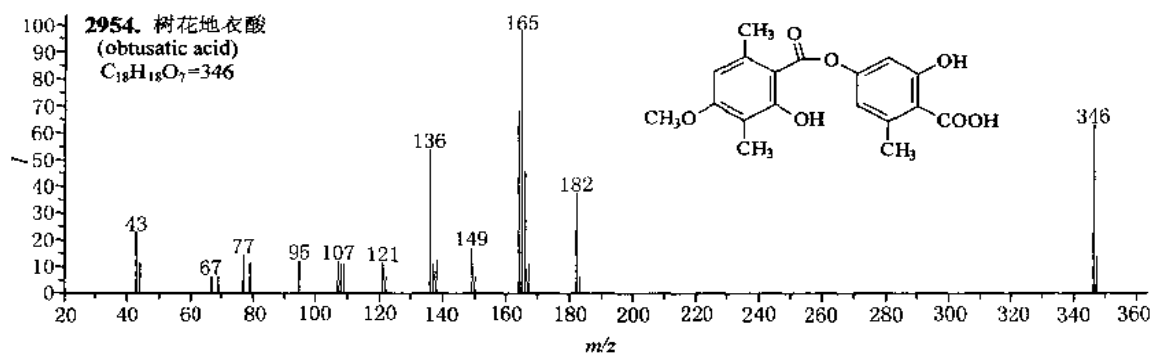
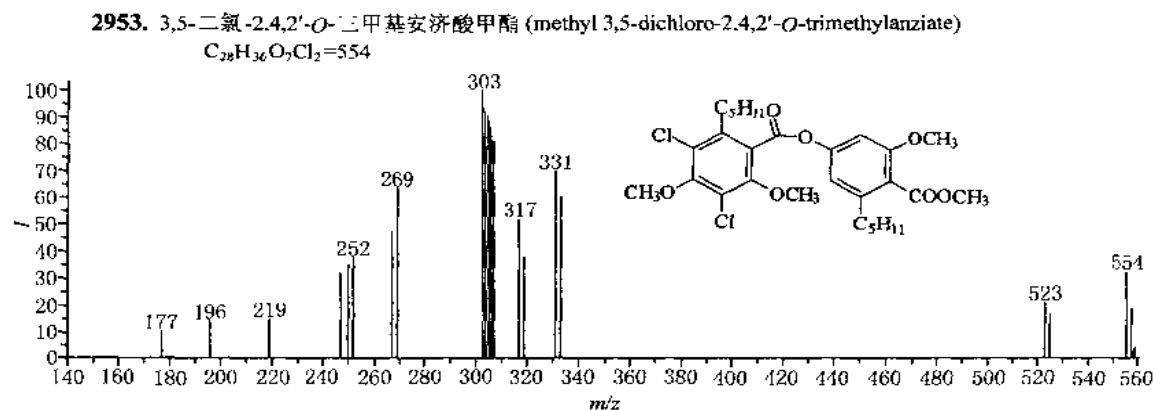
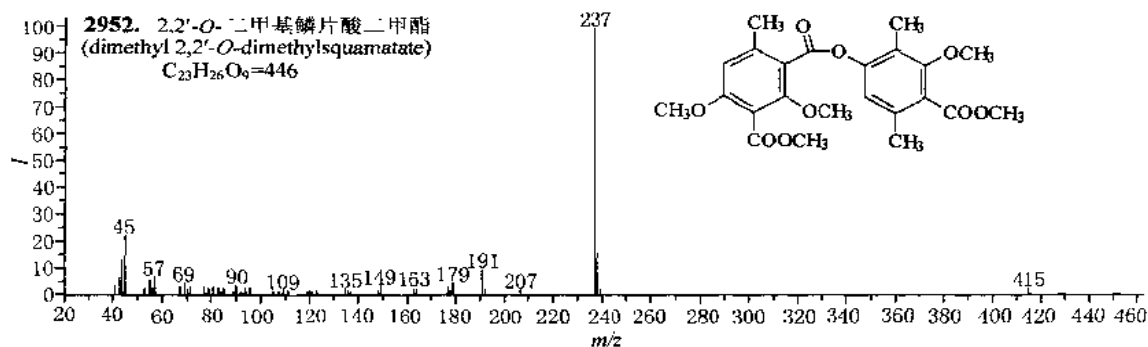
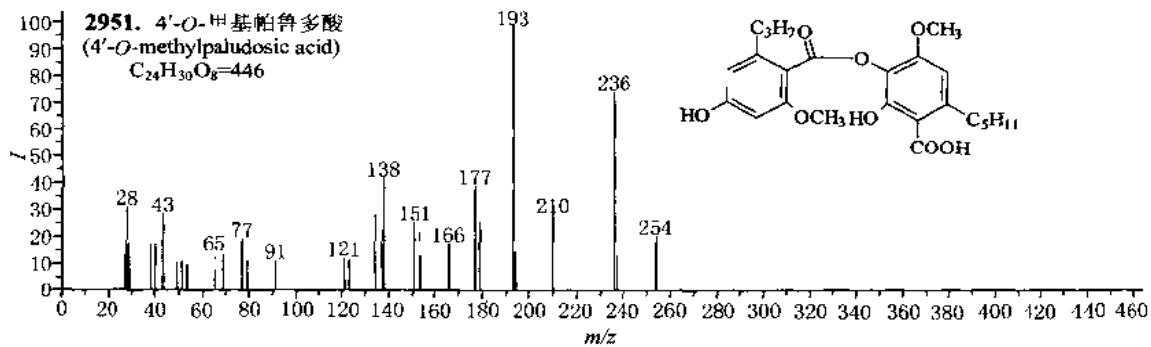
这种裂解在这类化合物中普遍存在, 转移氢原子的来源除了 A 环羰基的邻位羟基外, 羰基的邻位烷基也可提供氢原子; B 环全取代也能进行这种裂解, 但氢由 B 环向 A 环转移则很少发生。根据以上裂解方式推测, 树花地衣酸 (2954) 和 2-O-甲基地钱酸 (2955) 的结构可

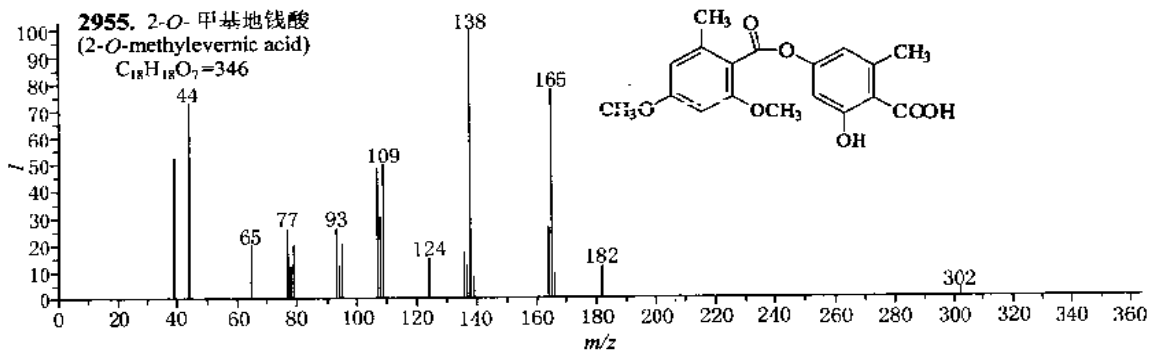
能不正确, 在两者的质谱中, 都出现奇数质量的离子  $m/z$  165, 这应当是离子 **a**。但按其结构计算, 离子 **a** 应为  $m/z$  179, 这个离子根本不存在。又, 离子 **b** 按其结构应为  $m/z$  168, 这个离子也不存在。出现的偶数质量离子  $m/z$  182 应为离子 **b**, 因此若自 A 环移 1 个甲基到 B 环上, 质谱与结构就相符了。







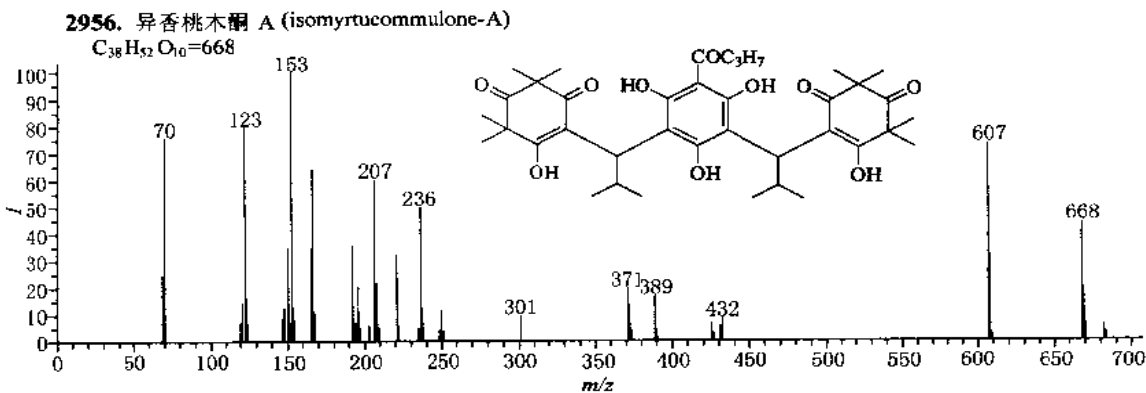
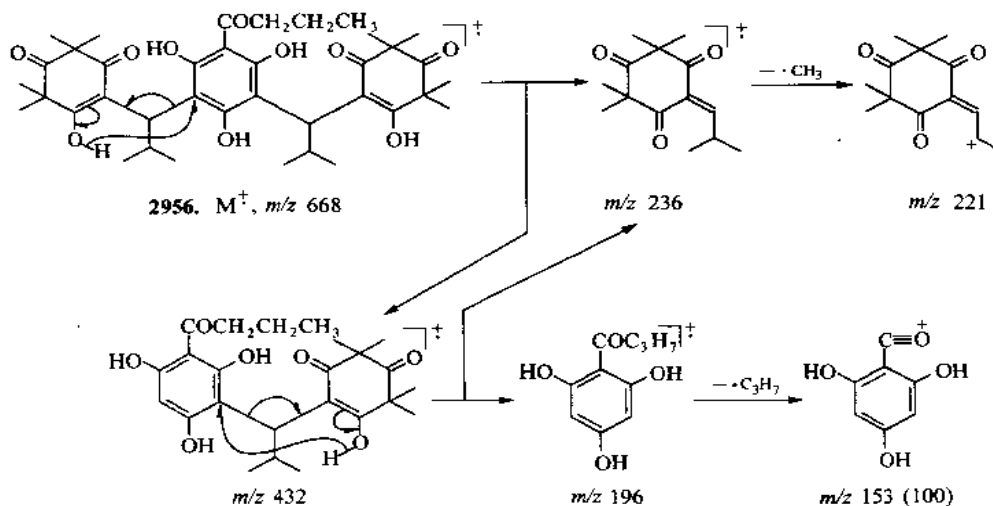




### 第三节 间苯三酚、核苷、糖类

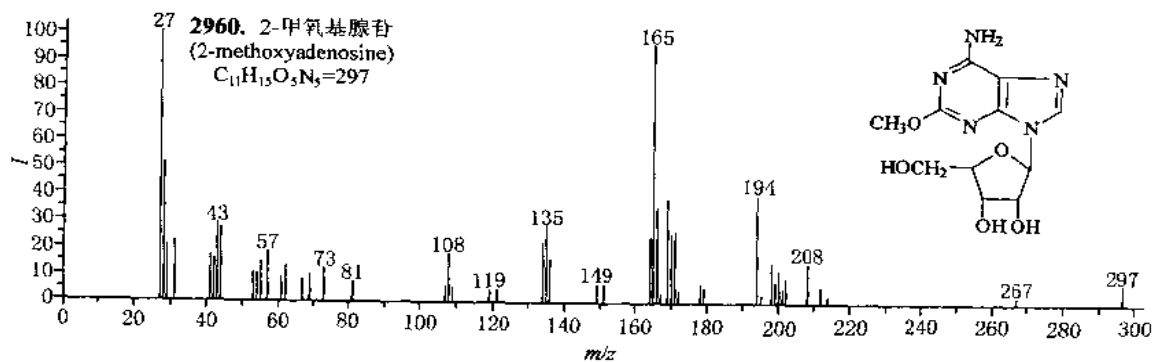
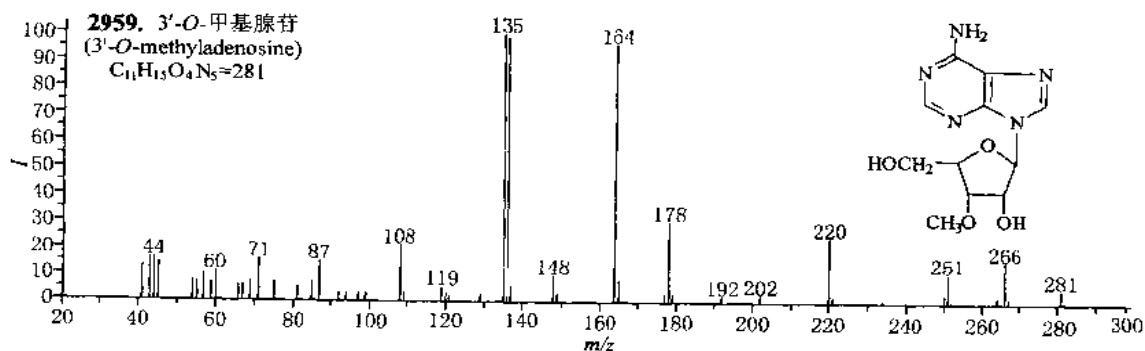
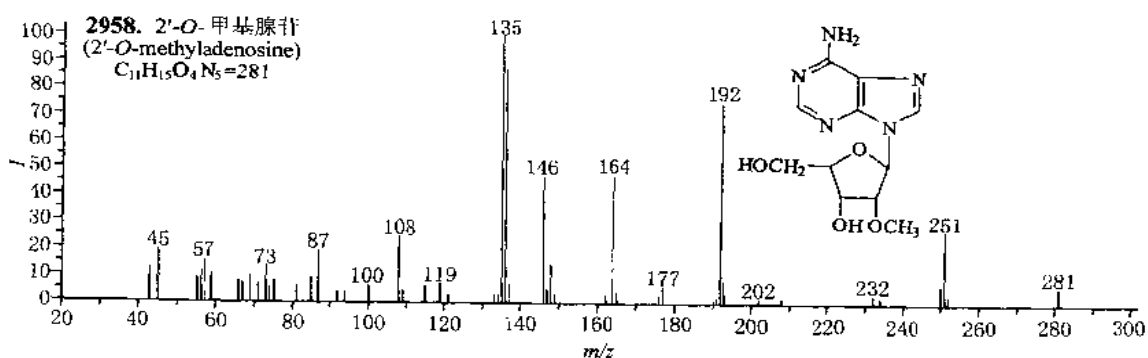
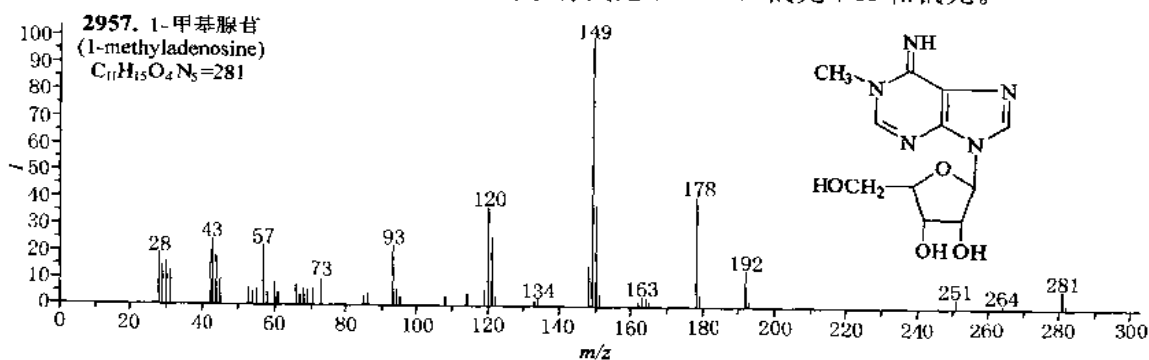
#### 一、间苯三酚类

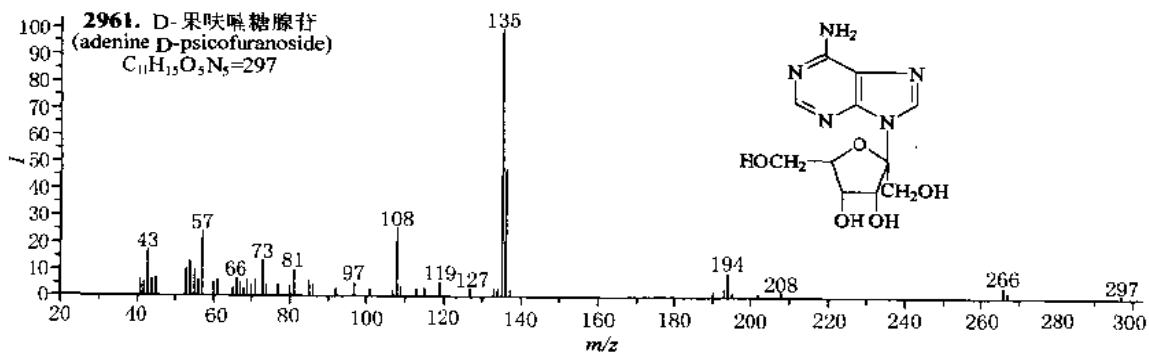
异香桃木酮 (2956) 的主要离子来源如下:



## 二、腺苷类

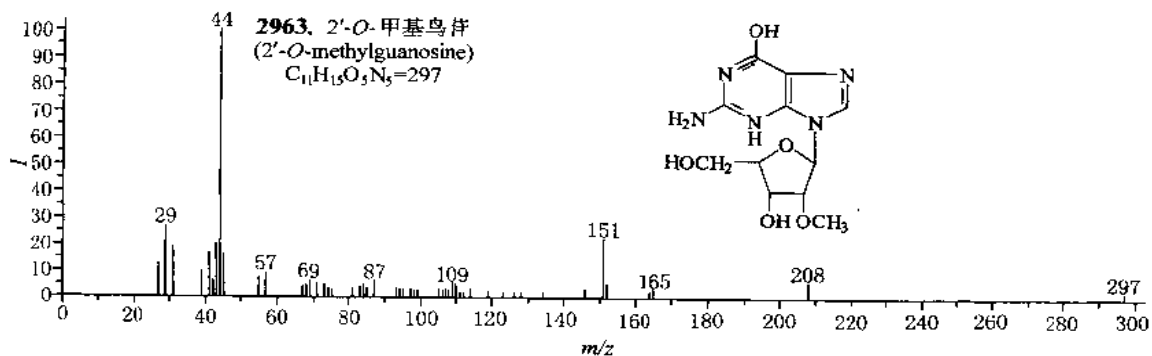
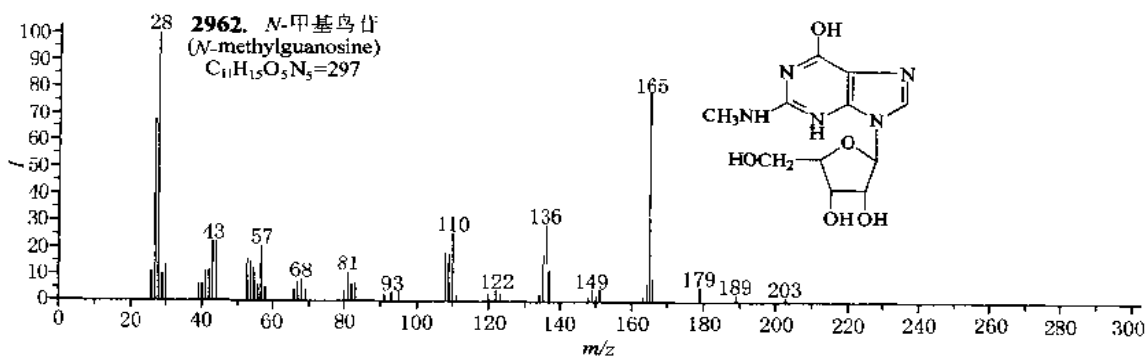
这类化合物 (2957~2961) 的典型离子有 甙元+CHO, 甙元+H 和 甙元。





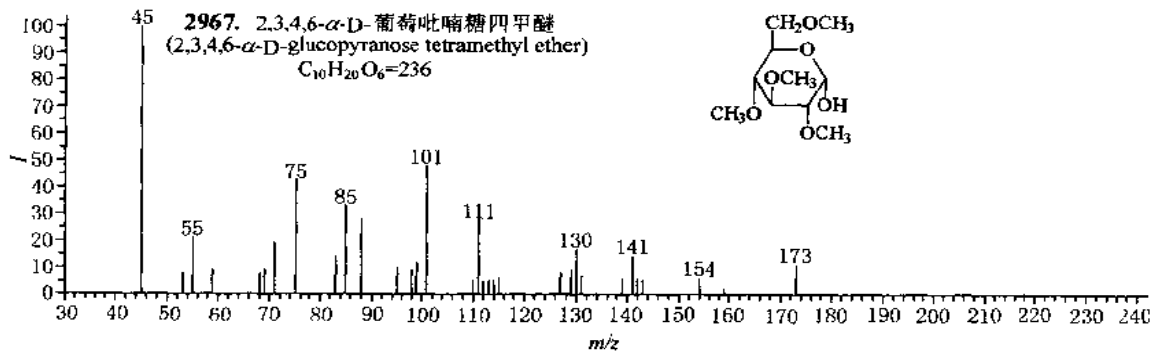
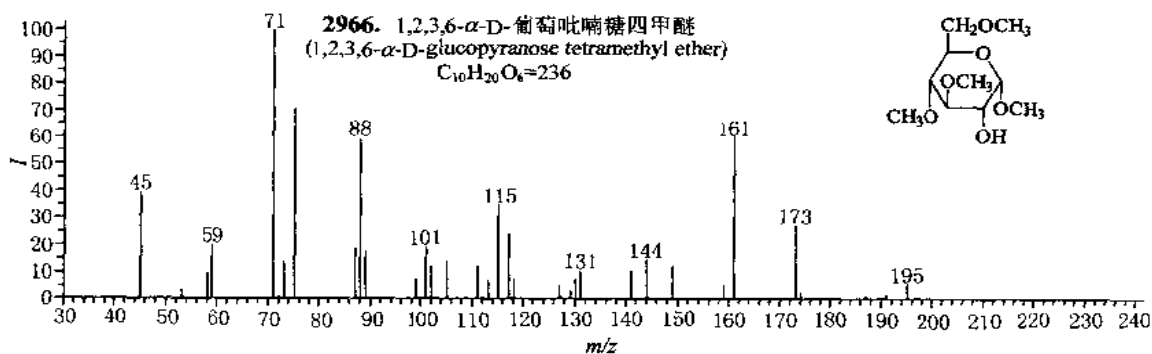
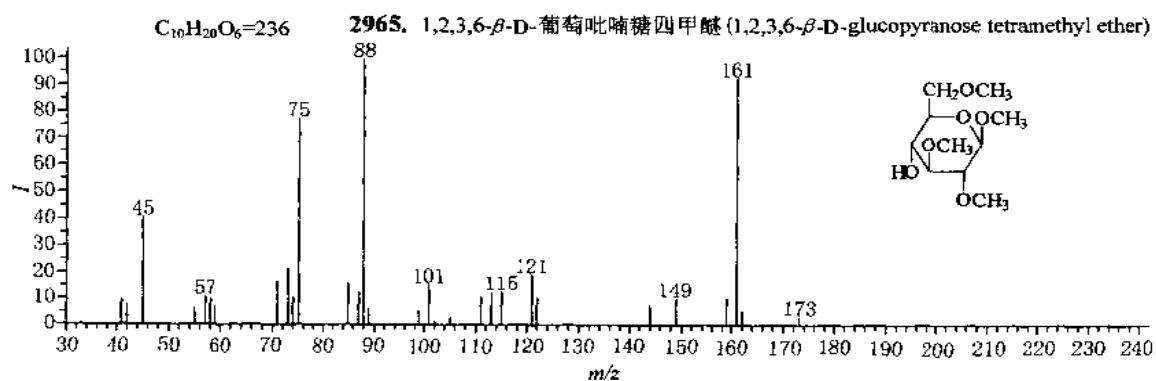
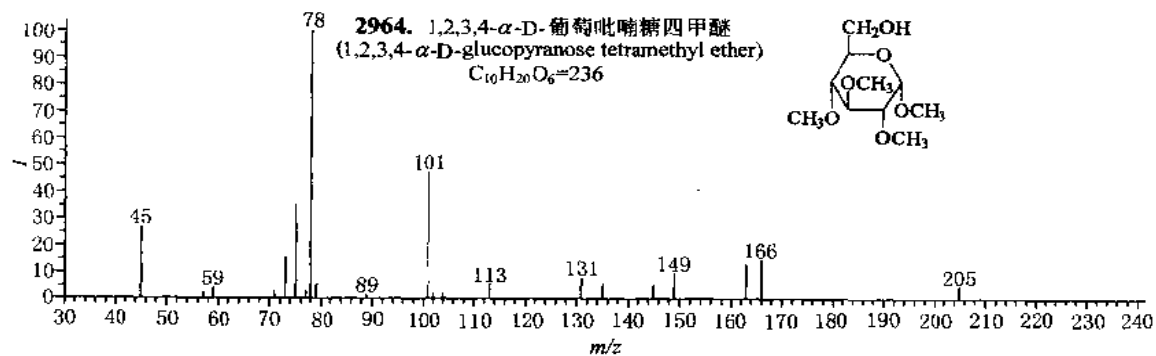
### 三、鸟 苷 类

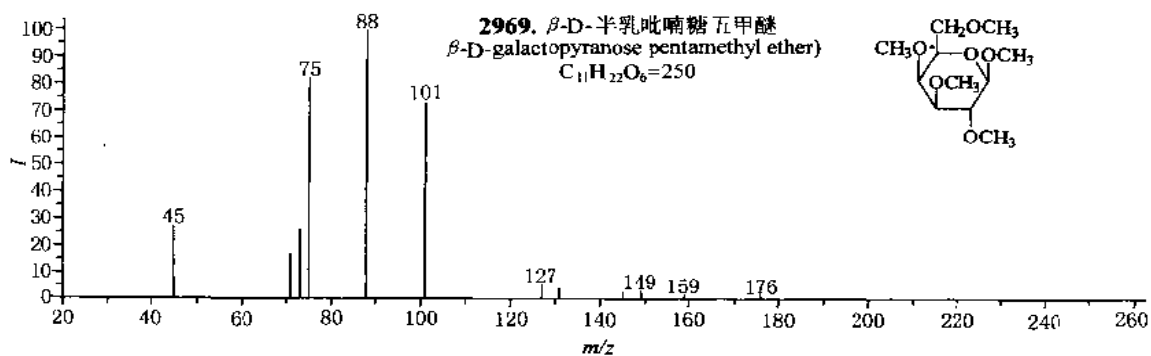
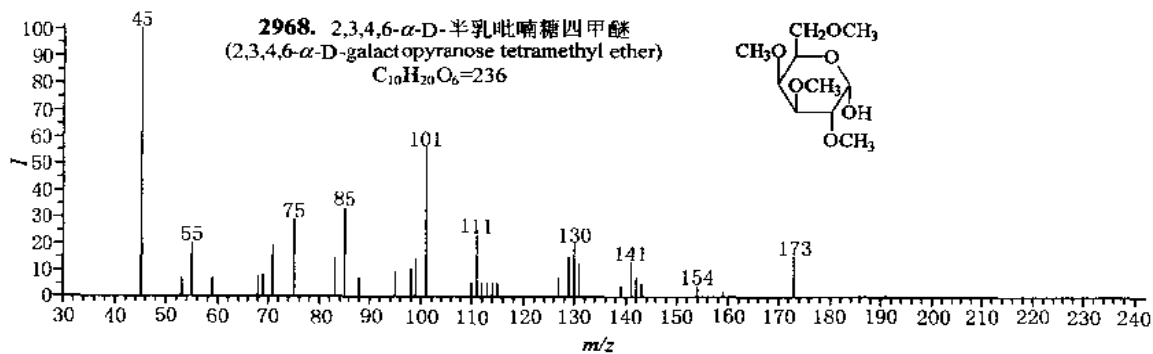
这类化合物 (2962, 2963) 一般只出现貳元+H 离子。



### 四、糖 类

这里给的化合物都是甲醚衍生物 (2964~2969), 但是分子离子仍不出现, 裂解的规律性也不强, 所以, 我们不解释各离子的形成过程。

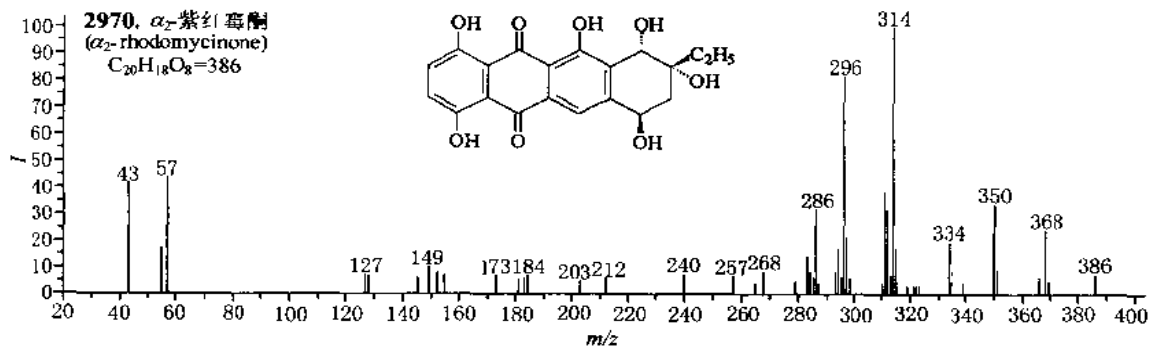


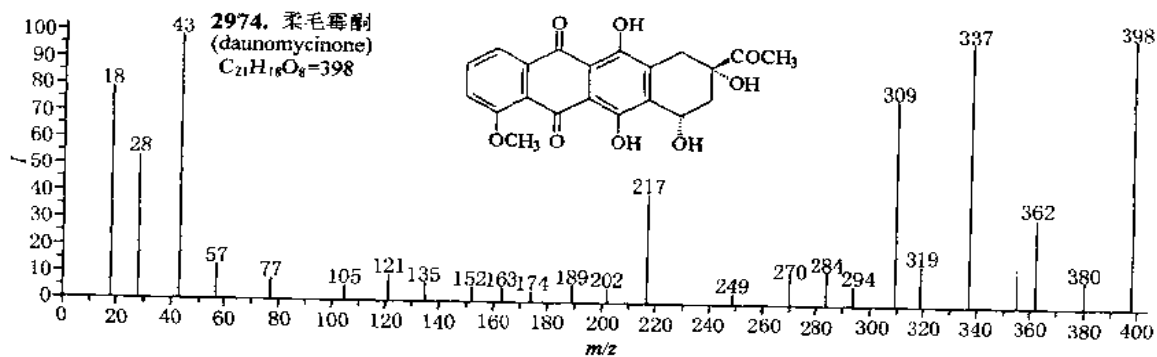
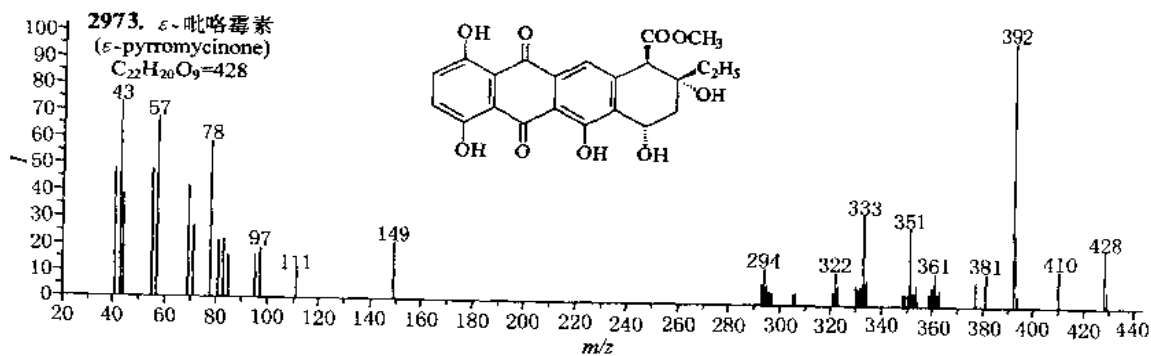
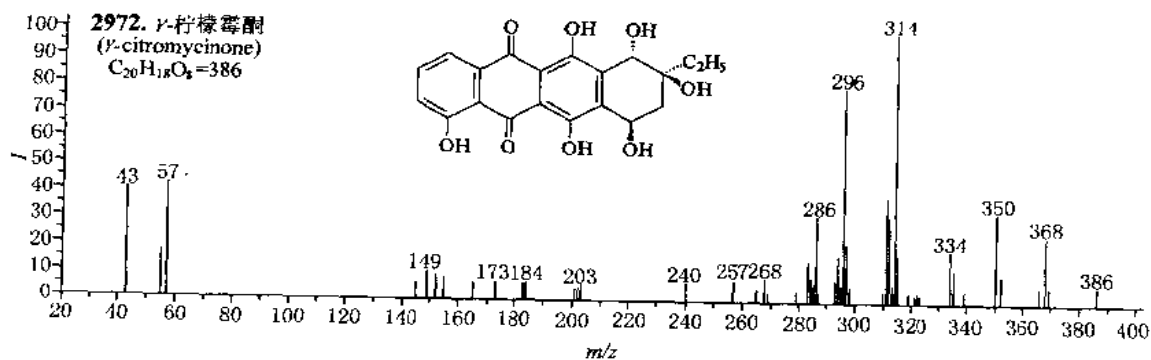
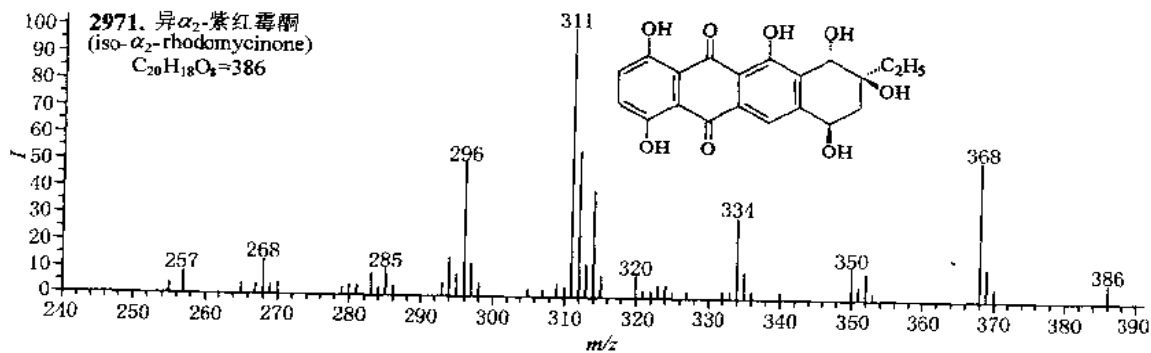


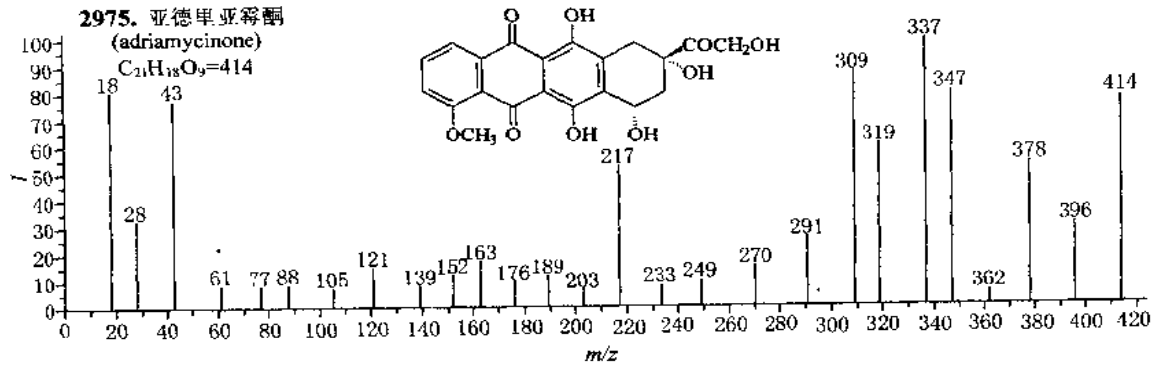
## 第四节 抗菌素类

### 一、萘醌类抗菌素

脂环具有乙基和羟基取代的化合物 (2970~2972) 都有强峰 M-72, 这是由于 D 环 RDA 裂解失去  $C_4H_8O$  所致, 但  $\epsilon$ -吡咯霉素 (2973) 则缺乏这个离子, 它的裂解主要是功能基的裂解, 柔毛霉酮 (2974) 和亚德里亚霉酮 (2975) 也主要是功能基的裂解, 没有 RDA 裂解发生。

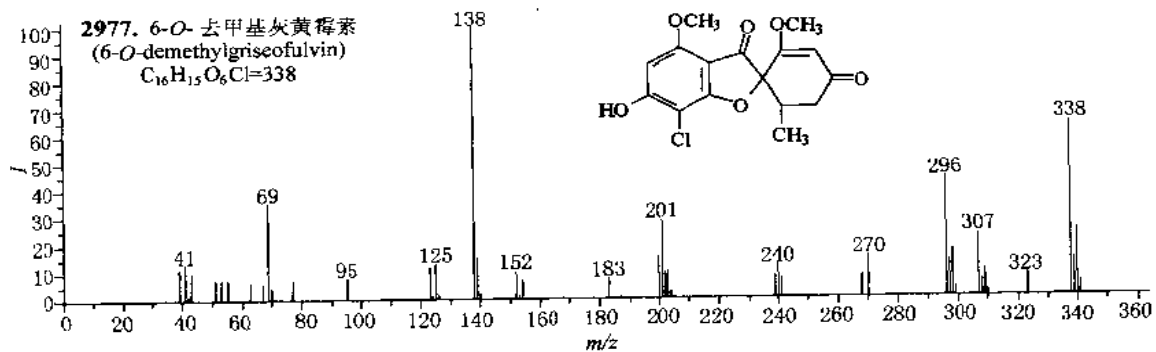
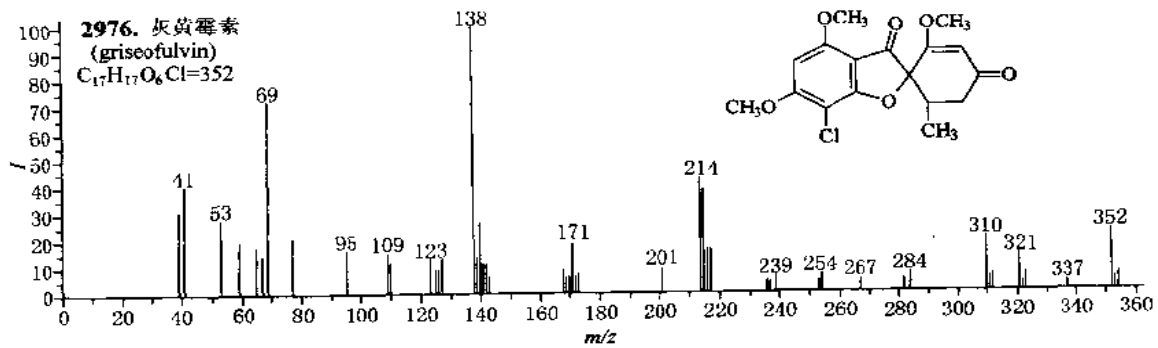
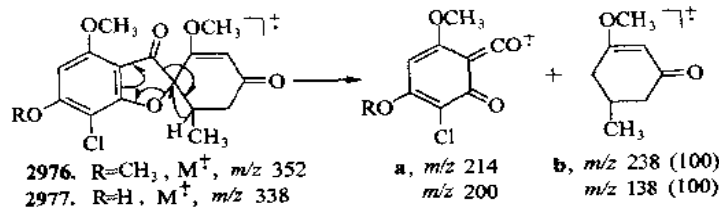






## 二、灰黄霉素类

灰黄霉素类 (2976, 2977) 的主要裂解是五元环的裂解生成一对互补离子 **a** 和 **b**。



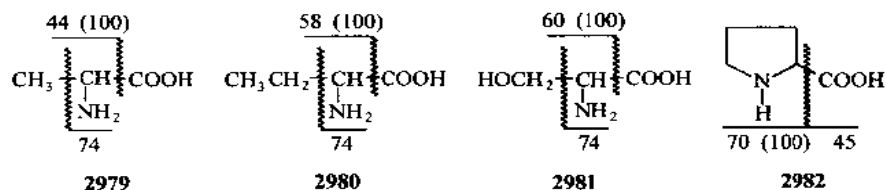


## 第五节 氨基酸及其酯类

### 一、氨基酸类

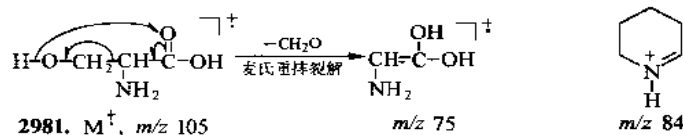
(1) 甘氨酸 (2978) 的主要裂解是双  $\alpha$ -裂解生成互补离子  $m/z$  45 和  $m/z$  30, 前者很弱, 后者很强。

(2) 自L-丙氨酸 (2979) 开始, 以上的氨基酸一般都进行 C-NHR 系统两侧的  $\alpha$ -裂解, 生成的烷氨碎片为离子 a, 生成的羧基碎片为离子 b, 离子 a 很强, 例如:



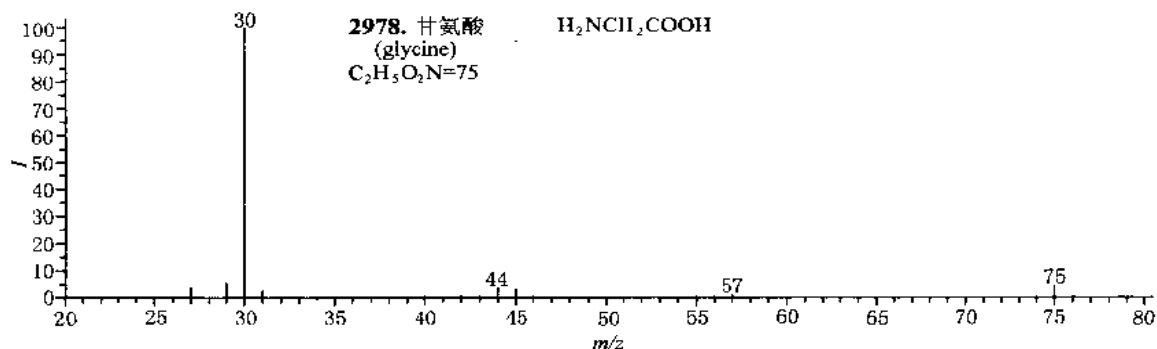
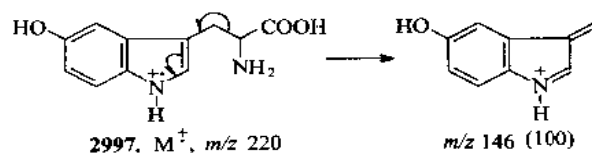
(3) L-脯氨酸 (2982) 只有一种裂解, 即生成弱的羧基离子和生成很强的四氢吡咯离子一对互补离子。

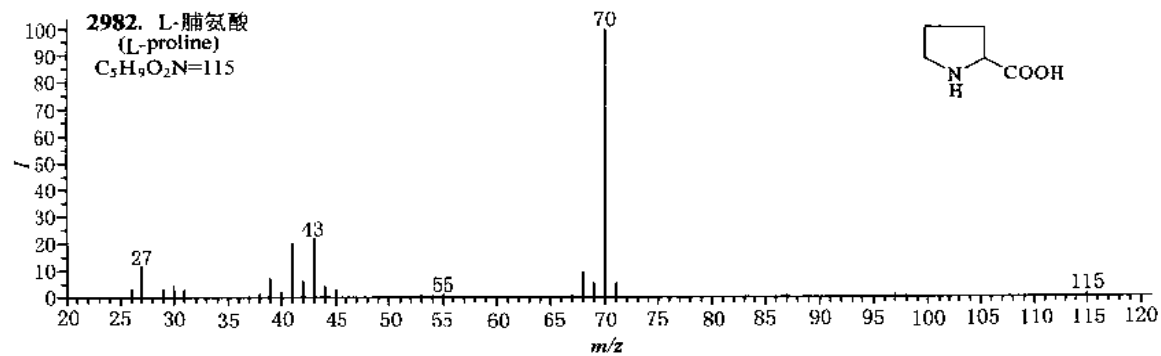
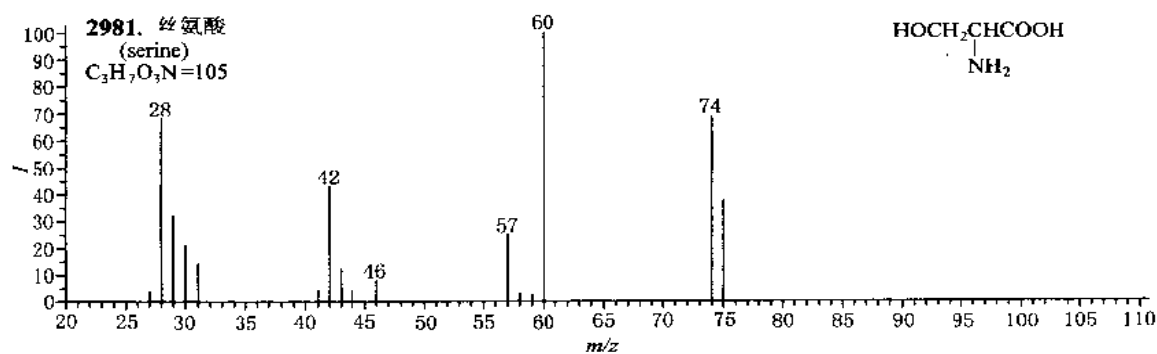
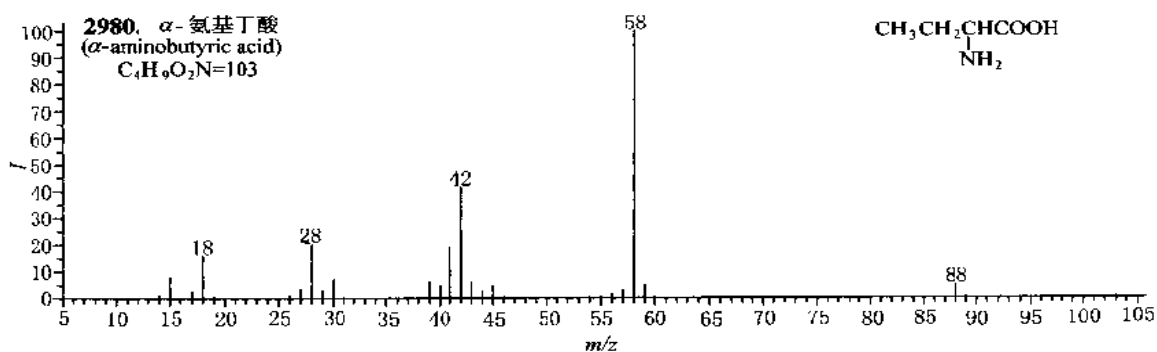
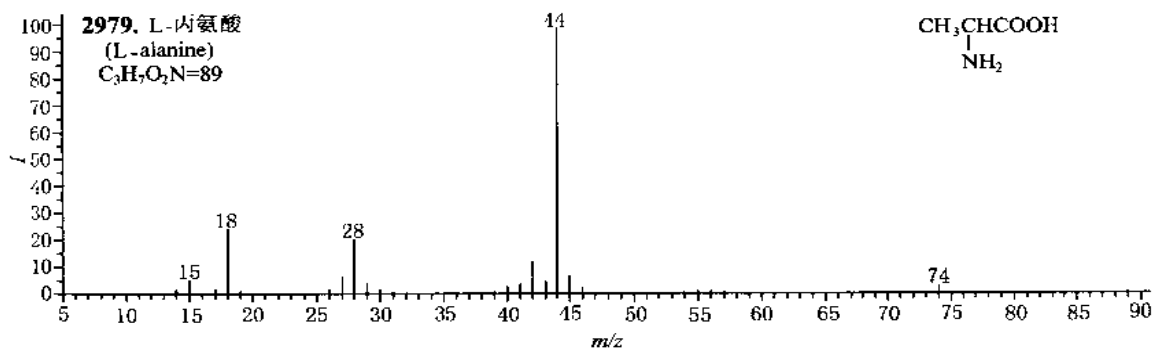
(4) 自丝氨酸 (2981) 开始, 以上的氨基酸一般能够进行羧基的麦氏重排裂解, 例如:

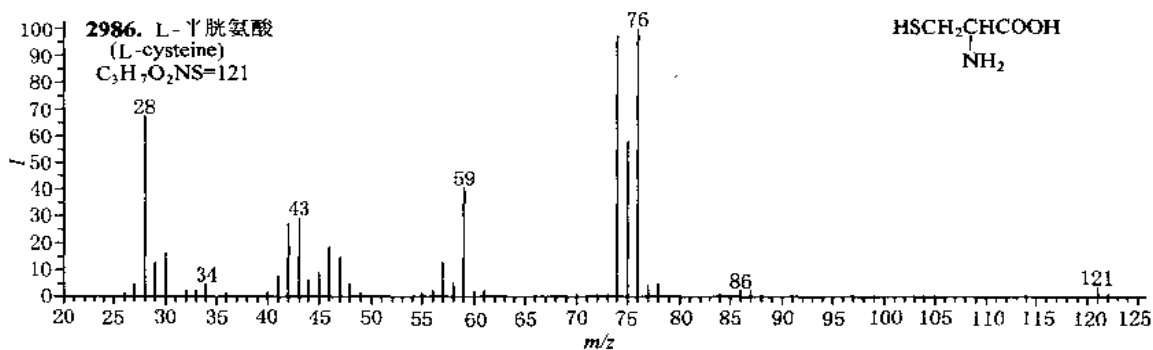
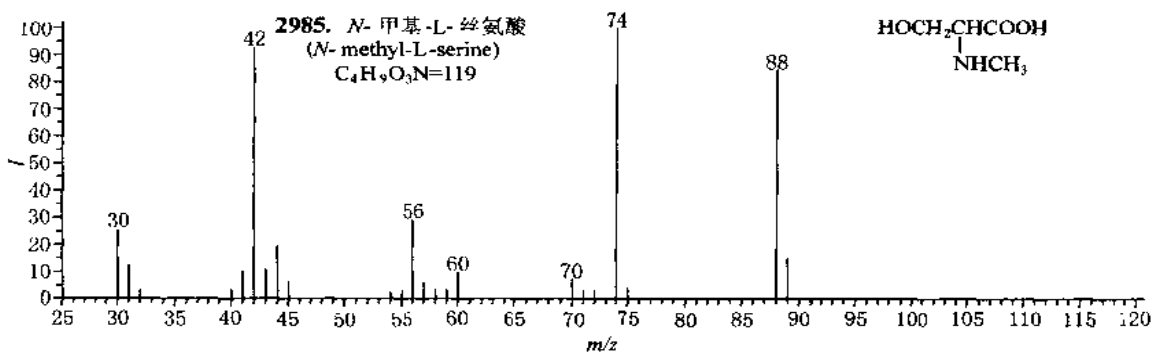
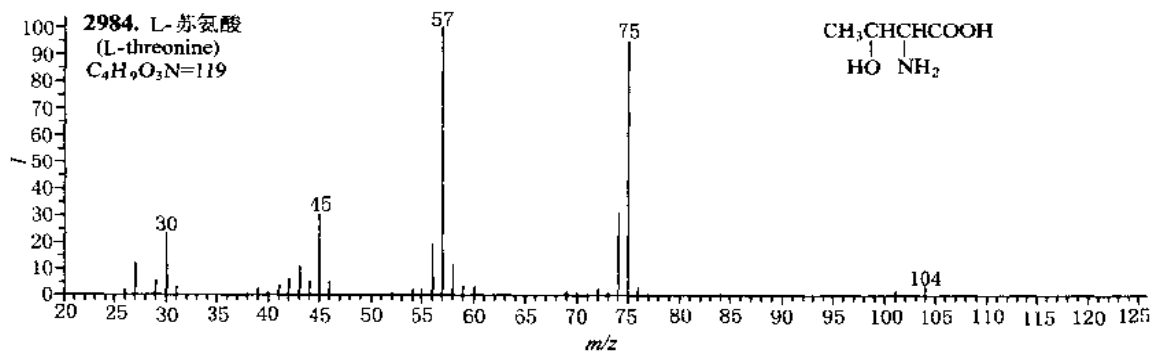
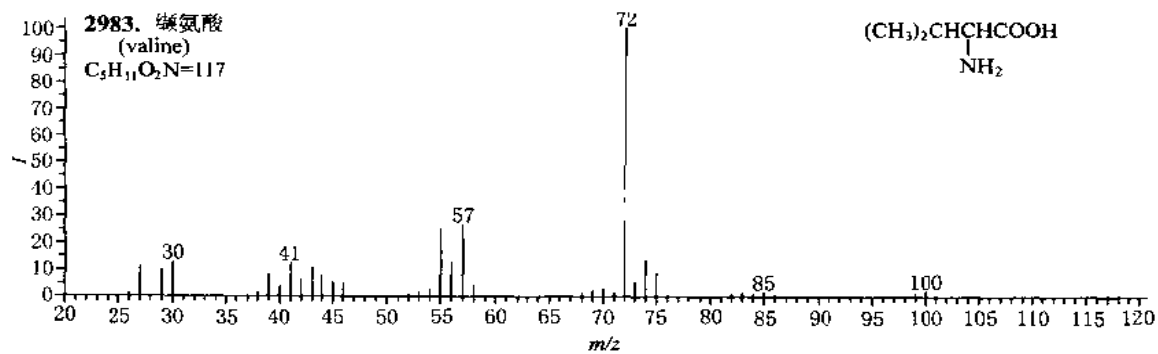


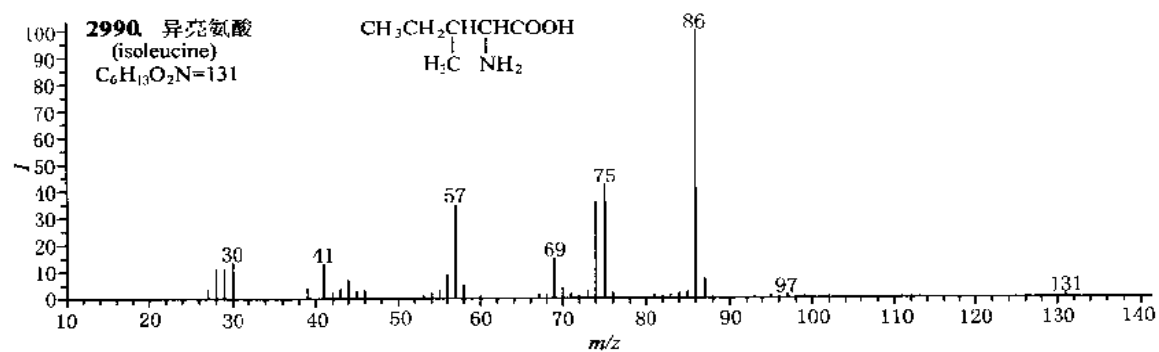
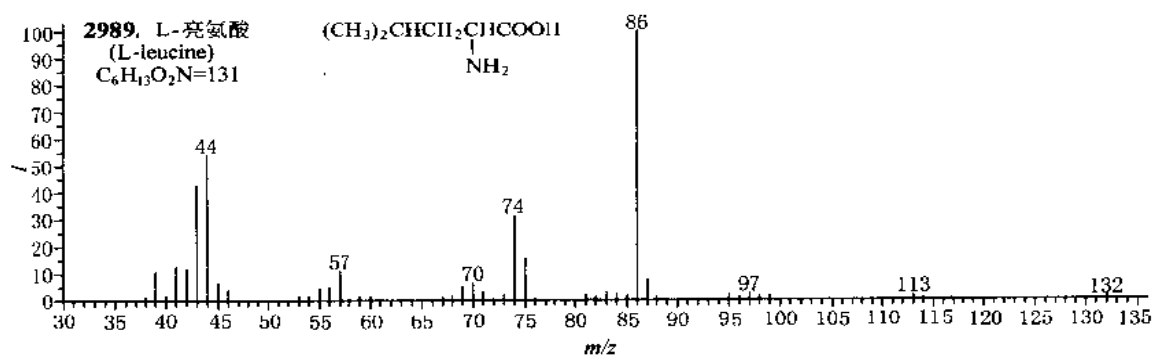
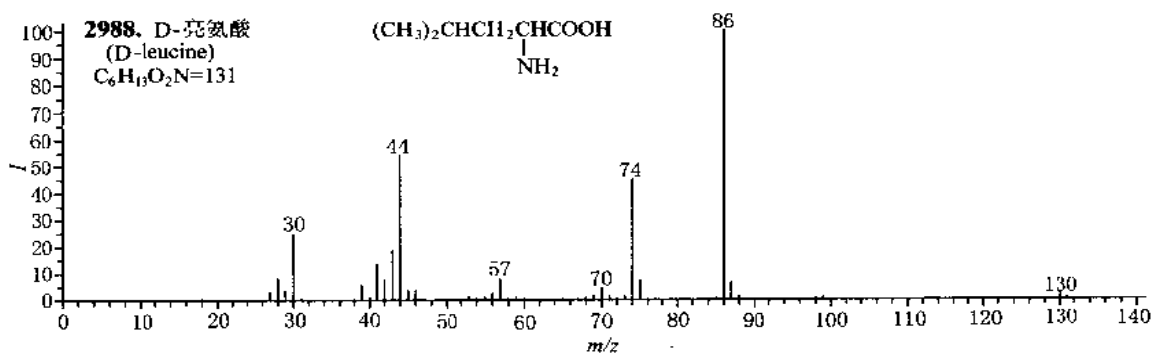
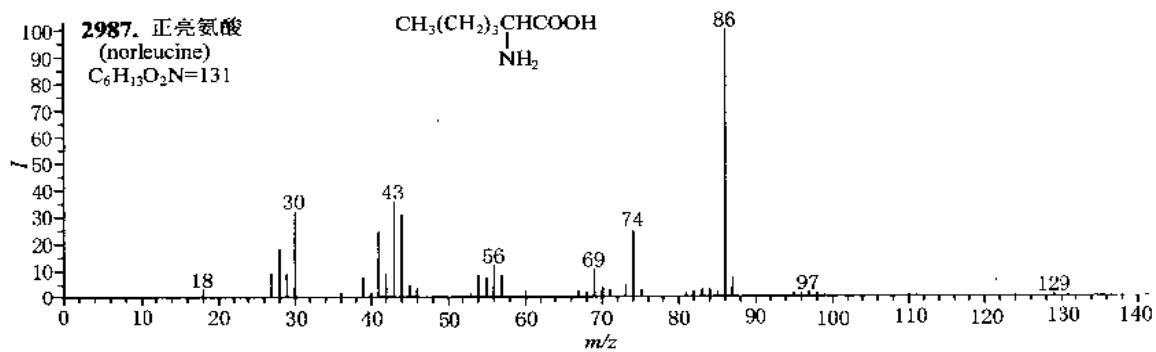
缬氨酸 (2983)、苏氨酸 (2984) 和 L-半胱氨酸 (2986) 等的麦氏重排裂解离子也是  $m/z$  75, N-甲基-L-丝氨酸 (2985) 的这个离子移到了  $m/z$  89。L-赖氨酸 (2993) 生成了一个特殊离子  $m/z$  84。

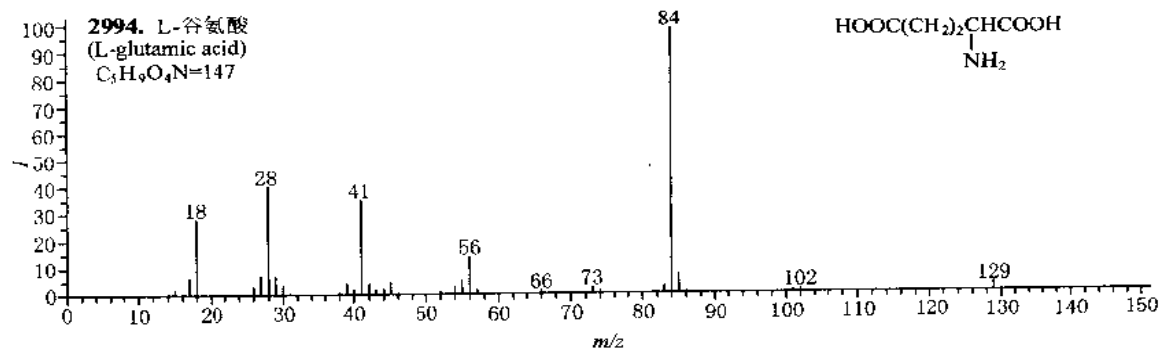
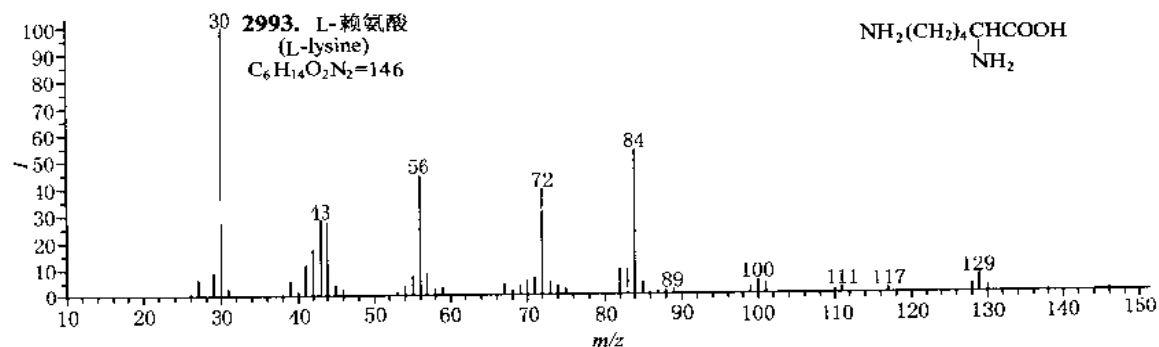
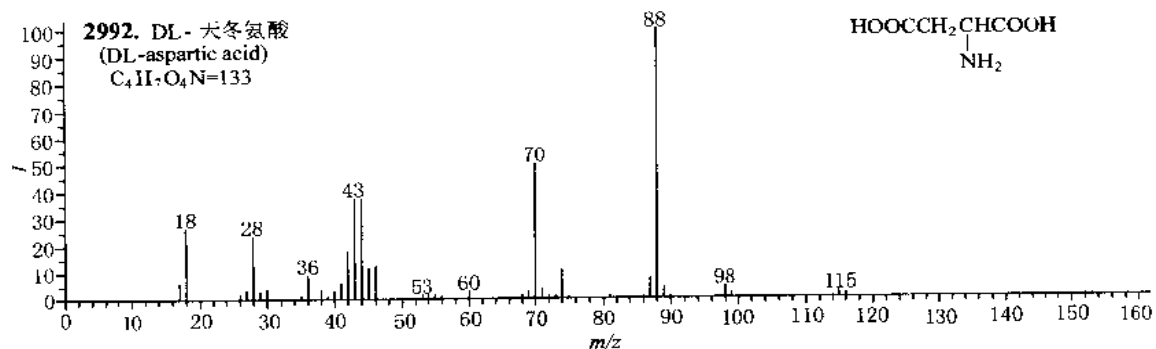
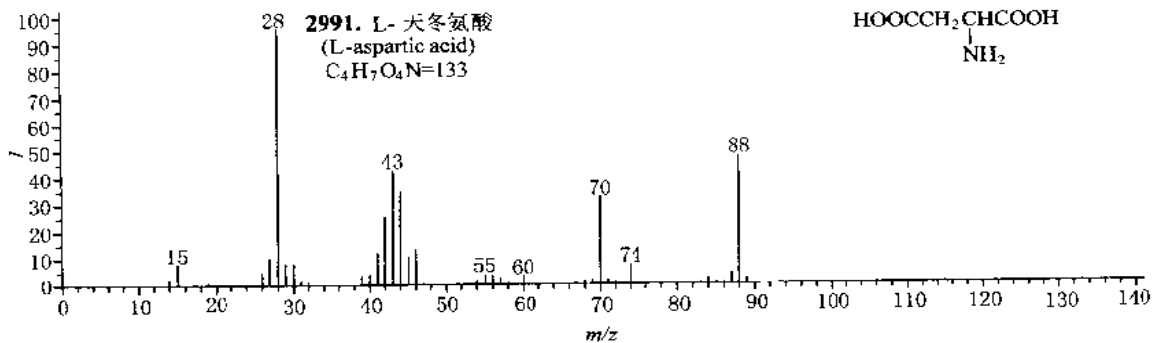
(5) 含有苯环和吡啶环的化合物 (2995~2998), 苄基裂解或吡啶环的  $\beta$ -裂解为主, 含苯环和吡啶环的离子最强, 例如:

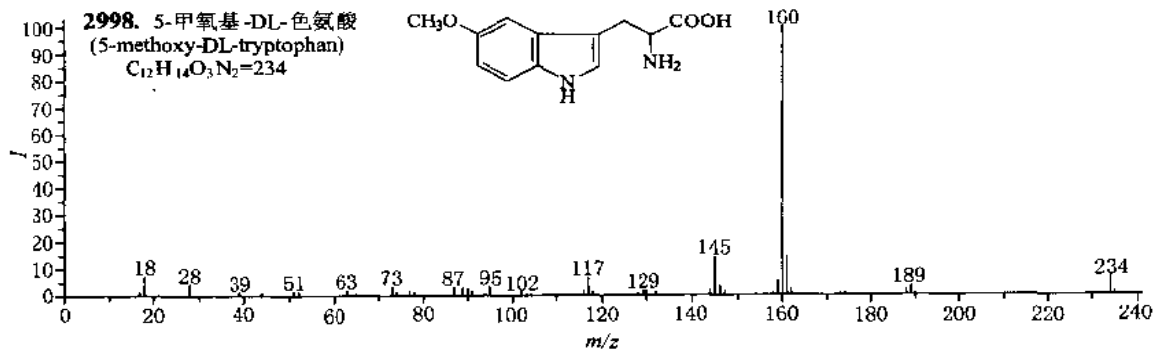
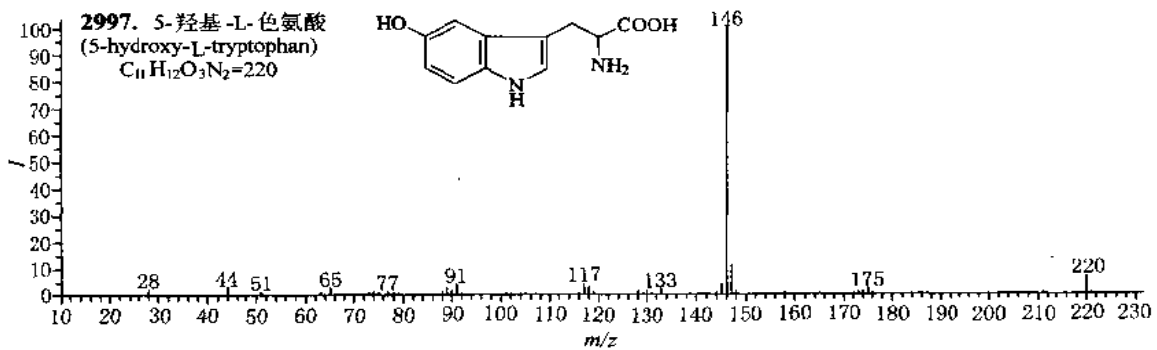
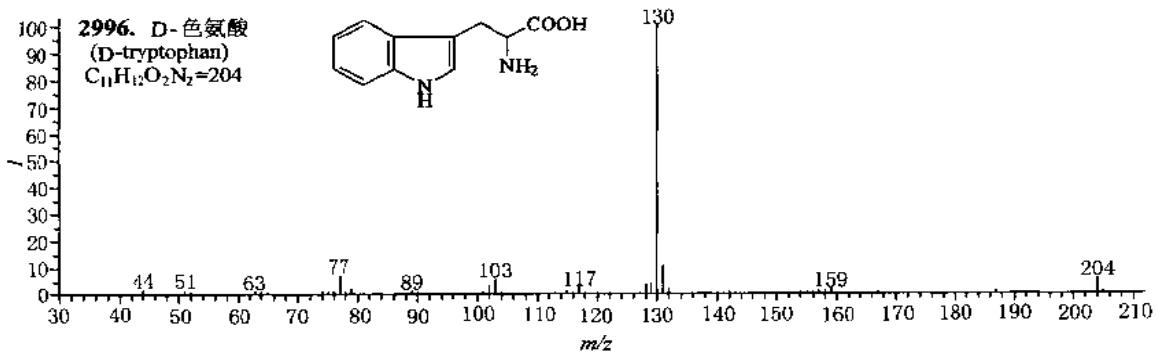
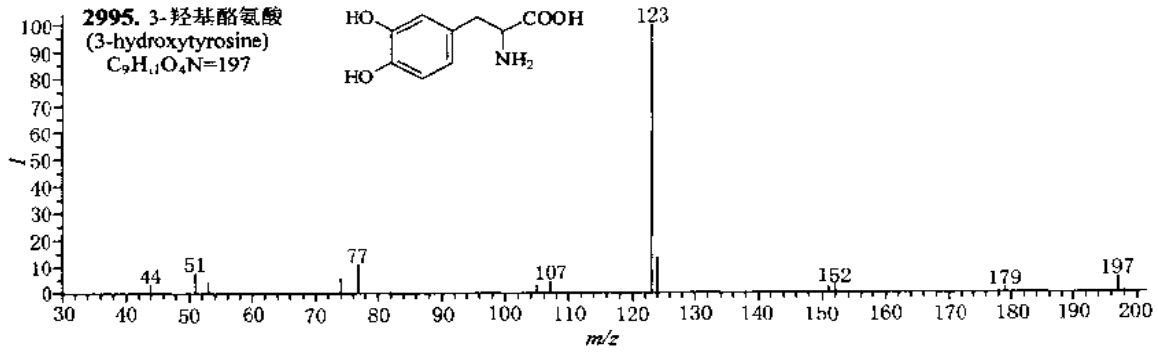








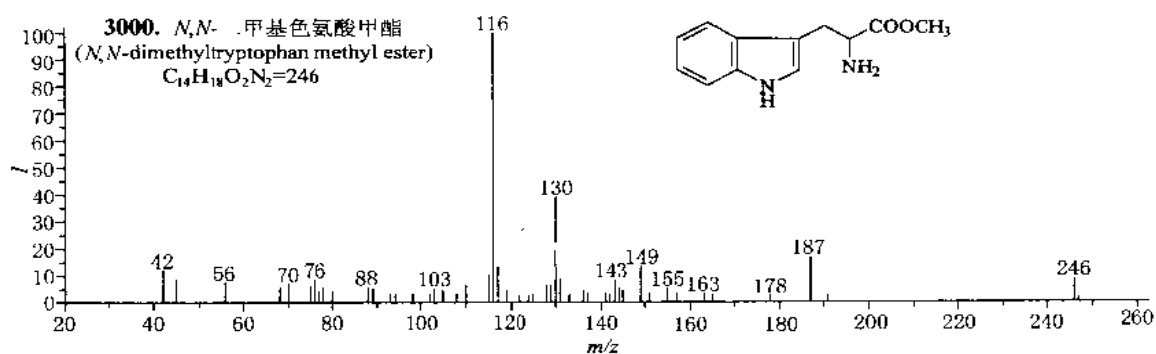
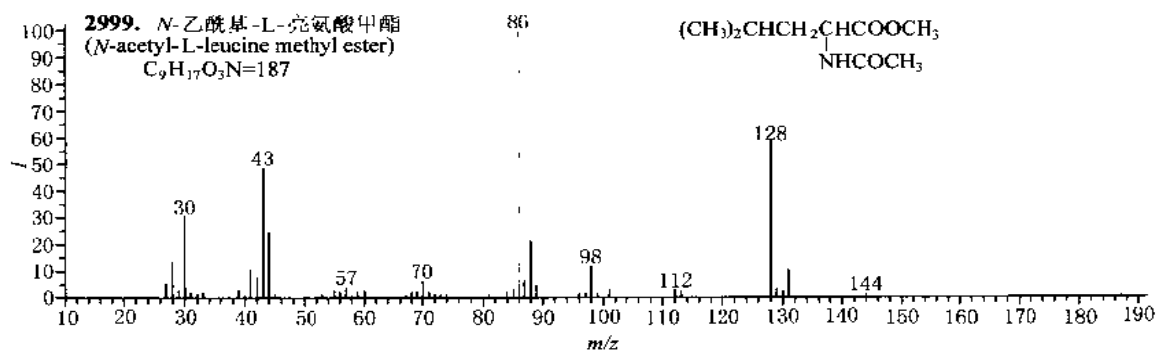




## 二、氨基酸酯类

(1) *N*-乙酰基-L-亮氨酸甲酯 (2999) 的裂解途径是  $M-COOCH_3$  和继续失去乙烯酮, 也存在乙酰基离子  $m/z$  43。

(2) *N,N*-二甲基色氨酸甲酯 (3000) 也有  $M-COOCH_3$  离子, 另外就是吲哚环的  $\beta$ -键裂解生成亚甲基吲哚离子  $m/z$  130 和其互补离子  $m/z$  116, 后者含有甲氧羰基和二甲氨基。



## 主要参考文献

- 1 丛浦珠. 有机化合物分子结构的质谱推导. 台北台湾众光出版社, 1997, 9, 台北.
- 2 丛浦珠, 房其年, 彭佑恩. 天然有机化合物质谱图集, 1983. 内部资料.
- 3 丛浦珠. 质谱学在天然有机化学中的应用. 北京: 科学出版社, 1987.

# 索 引

## 一、化合物分子量索引

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
16	CH <sub>4</sub>	1	60	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> Si	2075,2078
26	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	123		C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> S	1923
27	CHN	1040		C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	345,367,512
28	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	64	61	CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> N	885,1013,1200
30	CH <sub>2</sub> O	547		C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> ON	364
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	2	62	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	375
31	CH <sub>3</sub> N	1278		C <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	287
32	H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	1017		C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl	267
	CH <sub>4</sub> O	343		C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> S	1956,1970
34	CH <sub>3</sub> F	215	64	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	269,270
40	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	124		C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl	230
41	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N	1041,1058	66	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> F <sub>2</sub>	233
42	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O	623		C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	1048
	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	42,65		C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	99
43	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N	1433	67	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N	1468
44	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	3	68	CH <sub>2</sub> FCI	223
	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	548,1105		C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	1568,1604
	C <sub>2</sub> HF	286		C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O	1132
45	CH <sub>3</sub> ON	831		C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	128
	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N	1279,1294	69	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	1635,1637
46	CH <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	715		C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> ON	1661,1669
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	511,344		C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N	1441
	CH <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	1018	70	CHF <sub>3</sub>	225
	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> F	266		CH <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	1655
48	CH <sub>4</sub> S	1955		C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> ON <sub>2</sub>	1675
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> F	229		C <sub>1</sub> H <sub>6</sub> O	522,566,567,626,653,1109,1125
50	CH <sub>3</sub> Cl	216		C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>	43,46,67,70
	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	127	71	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> ON	841,991
52	CH <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	219		C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N	1435
	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	1047	72	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	737,1073
54	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>	79,125,126		C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> O	383,384,387,550,551,625,1107,
55	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N	1042,1059			1103,1113
	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> B	2068		C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	5,31
56	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O	565	73	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	1914
	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	45,66,69		C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NS	997
57	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N	1289,1434,1435		C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> ON	833,1917
58	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	569		C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N	1281,1288,1291,1293,1295,1296,
	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	382,549,624,1106,1110			1307
	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	4,30	74	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> ON <sub>2</sub>	1034,1267,1909
59	CH <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	1913		C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	717,888,916,1153
	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ON	832		C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	1022,1321,1324
	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N	1280,1290,1306		C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> S	1924,1926
60	CH <sub>4</sub> ON <sub>2</sub>	1908		C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> Si	2076
	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	887,716		C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	346,368,374,513,514
	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	1019,1020,1021,1320	75	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> N	2978,1201



分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
75	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NS	884	87	C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N	1282,1292,1297,1298,1308,1310,1311
76	CH <sub>3</sub> N <sub>2</sub> S	1991	88	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	842,1921
	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	735		C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> ON <sub>2</sub>	1910,1911,1912
	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OS	1996		C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	385,718,719,889,917,935,936,1122,1123,1154,1155,1163,1168
	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	376,377,608		C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	1023,1024,1025,1322,1323,1325,1326
	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> S	1957,1958,1971		C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> S	1925,1927,1928,1929,1966
	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> P	2085		C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> Si	2077
	C <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	1056		C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> P	2092
	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> F	248		C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	347,369,370,515
77	CH <sub>3</sub> O <sub>3</sub> N	1010	89	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> N	886,1202,2979
78	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> OCl	820		C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NS	2048
	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> F	752	90	CH <sub>6</sub> ON <sub>4</sub>	1036
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> OS	2006		C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	740
	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	1354		C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> S	1992
	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>	129,131		C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	1008,1015,1174
79	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N	1486		C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	378,379,529,530,610
80	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> FCI	280,281		C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> S	1959,1960,1961,1962,1972
	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	1049,1050,1677,1686,1732		C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> P	2086
	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	85,90,100,101,109,110	91	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	1011
81	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	1761,1762	92	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> S <sub>2</sub>	1977,1997
	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N	1469,1470,1471		C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>1</sub>	381
82	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	1772		C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> OCl	821
	C <sub>2</sub> HF <sub>2</sub>	274		C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	115,132
	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	1569,1570,1571,1605,1606,1607	93	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N	1336,1487,1488,1489
	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O	667,1133,1134	94	CH <sub>3</sub> Br	217
	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>	80,81,82,83,84,91,92,93,94,104		C <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	289
83	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	1638,1639,1640		C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> Cl	753
	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> ON	1670		C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> S	1968,2063
	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N	1043,1462		C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> OF <sub>2</sub>	650
84	CH <sub>3</sub> N <sub>5</sub>	1658		C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	1051,1508,1509,1510,1687,1688,1689,1733
	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	220		C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O	419
	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> F <sub>3</sub>	239		C <sub>7</sub> H <sub>10</sub>	102,103,111,114
	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	1641,1642,1656,1657	95	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	1057,1693,1694
	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> ON <sub>2</sub>	1046		C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> ON	1467,1518,1519
	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1084		C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N	1472,1473,1474,1476,1477,1478
	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	1583,1584,1623,1684	96	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	271,272
	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> S	2007		C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> F <sub>3</sub>	285
	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O	654,662,1126,1127,1128,1129,1148		C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> ON <sub>2</sub>	1678,1697
	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	47,52,68,71,72,73		C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	603,1102,1190
85	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NS	2034,2052		C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O	668,669,685,1135,1136,1572,1573,1574,1608,1609,1610,1611
	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> ON	992,993,1442		C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> F	292
	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N	1328,1437,1438,1443		C <sub>7</sub> H <sub>12</sub>	95,96,97,98,105,107,108,113
86	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> ON <sub>2</sub>	1270,1627	97	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> N	877
	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	570,649,738,739,890,937,1075,1171,1753			
	C <sub>4</sub> F <sub>2</sub>	288			
	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> S	1937,1938,1979			
	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	388,552,627,628,1111,1114,1115,1144			
	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub>	6,32,33			
87	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> NS	998			
	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> ON	834,1915			

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
97	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	1643,1644,1645	103	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> N	1014,1203,2980
	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> ON	869,1,40,1662,1663,1671		C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> NS	2049,2050
	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N	1302	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N	1060,1070	
	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> B	2069	104	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>1</sub>	741
98	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	234,236		C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	736,1162
	C <sub>2</sub> HOF <sub>3</sub>	562	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> S	1963,1973	
	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	1646,1647,1651,1652,1659,1660	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	1067,1068,1069,1918	
	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	814	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub>	162	
	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> ON <sub>2</sub>	1273,1600,1613,1673,1675	105	CNBr	1045
	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	671,1085,1086,1087,1137,1139		C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub> N	1012,2981
	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	1585,1586,1587,1592,1624,1625	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N	1529,1530,1531	
	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> S	2008,2009	106	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Br	268
	C <sub>6</sub> FI <sub>10</sub> O	386,523,524,525,568,655,656, 657,658,663,664,679,1130,1131, 1149,1150,1151		C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> S <sub>2</sub>	1944
	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>	44,48,49,50,51,53,61,74,75,76		C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	1055,1746
	99	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> N		878	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O
		C <sub>4</sub> I <sub>5</sub> NS	2053	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	130,133,134,135,142
		C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> NS	1004,2035,2036,2054,2055	107	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ON
C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> ON		870,994,995,996,1463,1665,1667, 1919	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N		1337,1338,1339,1398,1406,1490, 1491,1492,1493,1494,1495,1499, 1500,1501
C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N		1329,1330,1444,1445,1446,1447	108	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Br	231
100	C <sub>2</sub> F <sub>1</sub>	277		C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2456
	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	1629	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	1027,1052,1413,1414,1415,1511, 1512,1513,1514,1614,1690,1691, 1692,1734,1735,1736,1739	
	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> S	2041	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O	410,426,427,428,532	
	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> ON <sub>2</sub>	1271	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub>	106,112,116	
	C <sub>4</sub> H <sub>1</sub> O <sub>3</sub>	572,813,1092	109	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	1534,1535,1536
	C <sub>4</sub> H <sub>1</sub> OS	1939		C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> ON	872,1352,1353,1354,1520,1521, 1522,1523,1526,1527
	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	392,393,571,1074,1076,1077, 1093,1172,1189	110	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub> S	1006
	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	1026,1754,1755		C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub> P	2089
	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O	389,390,394,553,629,630,1112, 1116,1117,1118,1145,1146		C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	1695,1696,1750,1773
	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	7		C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> ON <sub>2</sub>	1679,1680,1698,1699,1700,1701, 1747
101	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> N	1440,1668	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	420,421,422,604	
	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> NS	999,1003,2044	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	1575,1612	
	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> ON	835,840,1456,1457,1916	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> S	1986	
	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N	1283,1299,1300,1301,1309,1312	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> F	294,295,296	
102	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> F <sub>4</sub>	243	111	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> ON <sub>3</sub>	1702,1703
	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	843		C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> N	1484,1537
	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> Cl	1578	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> ON	1466,1664,1672	
	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> S	2045	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> NF	1371,1372,1373	
	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	811	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N	1464,1465	
	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> ON <sub>2</sub>	1268	112	CH <sub>2</sub> FBr	224
	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	391,891,939,940,941,942,1124, 1147,1156,1159,1160,1164,1165		C <sub>4</sub> H <sub>1</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	1616,1617,1681,1704,1752
	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> S	1930,1933		C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	1650,1653,1654,1774
	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	1327		C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> ON <sub>2</sub>	1599,1685
	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> O	348,516,517		C <sub>5</sub> H <sub>1</sub> OS	1942,2019
	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> F	263		C <sub>5</sub> H <sub>1</sub> O <sub>3</sub>	676,804,805
	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub>	164	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	672,690,691,692,1088,1089	
	103	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> Cl	1648		

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号	
<b>112</b>	$C_6H_{12}N_2$	1588, 1589, 1590, 1591, 1594, 1596, 1626	<b>118</b>	$C_6H_7OCl$	666	
	$C_6H_5Cl$	298		$C_6H_{11}O_2$	531	
	$C_6H_6S$	2010, 2011, 2012, 2014, 2015		$C_6H_{14}S$	1964, 1974	
	$C_8H_{14}$	54, 55, 56, 57, 62, 77, 78		$C_6H_{11}Cl$	264	
<b>113</b>	$C_3H_3O_2N_3$	1579, 1580, 1581, 1621, 1622	$C_4H_{15}P$	2087		
	$C_4H_7ON_3$	1630	$C_8H_6O$	1178		
	$C_5H_7O_2N$	879, 880, 1674	$C_9H_{10}$	118		
	$C_3H_4NCl$	1544, 1545	<b>119</b>	$C_3H_3NS_2$	2046	
	$C_5H_7NS$	2018, 2037, 2038, 2039, 2040, 2056, 2057, 2058		$C_4H_6O_2N$	2984, 2985	
	$C_6H_{11}ON$	871, 1461, 1666	$C_3H_9N$	1823		
	$C_7H_{13}N$	1448, 1449	<b>120</b>	$C_2H_4N_2S_2$	1998	
<b>114</b>	$C_2HO_2F_3$	756		$C_3H_5Br$	282, 283, 284	
	$C_4H_6O_2N_2$	1628, 1632, 1633, 1728, 1760	$C_4H_8S_2$	1945, 1946, 1948		
	$C_4H_3N_2Cl$	1721	$C_5H_4N_3$	1777		
	$C_3H_6N_2S$	2047	$C_8H_8O$	574, 575, 576, 697, 1176		
	$C_4H_{10}N_4$	1775	$C_9H_{12}$	136, 137, 138, 143, 144, 145, 152, 153		
	$C_5H_6O_3$	816	<b>121</b>	$C_3H_7O_2NS$	2986	
	$C_6H_{10}ON_2$	1631		$C_7H_7ON$	845, 1538, 1539, 1540	
	$C_3H_6OS$	1940, 1941, 2033	$C_6H_{11}N$	1340, 1341, 1342, 1343, 1344, 1345, 1349, 1350, 1399, 1400, 1401, 1402, 1403, 1407, 1408, 1409, 1410, 1411, 1496, 1497, 1498, 1502, 1503, 1504, 1505, 1506, 1507		
	$C_6H_{10}O_2$	682, 1078, 1079, 1080, 1081, 1082, 1094, 1152	<b>122</b>	$C_3H_7Br$	250, 251	
	$C_6H_{14}N_2$	1334, 1335, 1455, 1756, 1757, 1758		$C_1H_{10}S_2$	1969, 1984, 2064, 2065	
	$C_7H_{14}O$	395, 396, 397, 526, 554, 631		$C_6H_6ON_2$	1565, 1566	
	$C_6H_5Al$	2073		$C_7H_6O_2$	581, 582, 583, 758, 2457	
	<b>115</b>	$C_6H_6ON_3$	1275	$C_7H_{10}N_2$	1031, 1416, 1417, 1418, 1515, 1516, 1517, 1737, 1740, 1741, 1742, 1745	
		$C_4H_5ONS$	2042, 2043, 2059	$C_8H_{10}O$	411, 412, 414, 429, 430, 431, 432, 433, 434, 440, 441, 442, 528, 533, 534, 535, 536	
		$C_4H_5O_2N$	2982	<b>123</b>	$C_5H_5ON_3$	1751
		$C_6H_{13}ON$	336, 1333, 1458		$C_6H_5O_2N$	498, 1204, 1558, 1559, 1560
		$C_7H_{17}N$	1284		$C_6H_6N_3$	1705, 1706, 1719, 1763
<b>116</b>	$C_2H_3FCl_2$	242	$C_7H_9ON$	873, 874, 875, 876, 1355, 1356, 1357, 1361, 1362, 1363, 1364, 1365, 1366, 1395, 1396, 1483, 1528		
	$C_3H_4ON_2S$	2051	$C_8H_{13}N$	1475, 1479, 1480, 1481, 1482		
	$C_4H_5O_2N_2$	844, 1276	<b>124</b>	$C_2H_5BrO$	365	
	$C_4H_4S_2$	2027, 2028		$C_2H_4S_3$	1949	
	$C_4H_{12}O_2$	400, 401, 402, 892, 943, 944, 945, 1157, 1161, 1166, 1167, 1169, 1170	$C_3H_6O_3P$	2088		
	$C_1H_{12}S$	1931, 1932, 1934, 1935, 1936, 1967	$C_3H_8N_3$	1707, 1768		
	$C_7H_{16}O$	349, 518	$C_3H_4O_2N_2$	1567		
	$C_4H_8$	117	$C_6H_6ON_2$	1615, 1708, 1709, 1710, 1727, 1748, 1749		
<b>117</b>	$C_3H_4N_3Cl$	1649	$C_7H_6O_2$	415, 416, 417, 445, 446, 447, 448, 449, 451, 452, 453, 1103, 1142, 1191, 1192		
	$C_5H_{11}O_2N$	2983	$C_7H_{12}N_2$	1576		
	$C_6H_7N$	1061, 1062, 1071, 1072, 1797	$C_7H_5OF$	593, 594		
<b>118</b>	$CHCl_3$	226				
	$C_2H_6O_2N_1$	1035				
	$C_3H_6ON_2S$	1995				
	$C_3H_3Br$	290				
	$C_4H_6O_4$	742, 924				
	$C_4H_5SCl$	2029				
$C_5H_{10}O_3$	1016					

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
124	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> S	1980,1987,1988,1989		C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> S <sub>2</sub>	1002
	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O	648,670,686,687,688,1138		C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	812,1099
	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub>	63		C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> ON <sub>2</sub>	1269
125	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>5</sub>	1715,1716	130	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	720,893,938,946,1158
	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> ON <sub>3</sub>	1711		C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O	519,520
	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> N	881,1524		C <sub>10</sub> H <sub>10</sub>	163,173
	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> NS	1990	131	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub> N	2987,2988,2989,2990
126	C <sub>2</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	823		C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N	1798,1799,1800,1801,1802,1803,1804
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub> S	1005	132	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>	240,241
	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> S <sub>3</sub>	2066		C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	743,913,925
	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub>	1764		C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> S	1993,1994
	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> OC <sub>2</sub>	651		C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O <sub>J</sub>	403,404,405,1175
	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> ON <sub>4</sub>	1620,1717		C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> OS	1009,1952,1953,1954
	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	1039,1582,1618,1619,1682,1712,1713,1714		C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	609
	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	423,424,425,605,677,815,988,989,1104,1141,1193,1194		C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O	1179,1180
	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> ON <sub>2</sub>	1577,1601,1602,1603		C <sub>10</sub> H <sub>12</sub>	119,120,121,122,174
	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> OS	2020,2021	133	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub> N	2991,2992
	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	673,674,675,697,1090		C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ON	1812,1813
	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	1593,1595,1597,1598		C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N	1824,1884,1890,1905
	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> Cl	320,321,322,336	134	C <sub>2</sub> H <sub>12</sub> Ge	2082
	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> S	2013,2016,2017		C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> S <sub>2</sub>	1947
	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O	647,659,660,661,680		C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	1778,1779,1780
	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub>	58,59,60		C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> OCl	822
127	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> ON <sub>3</sub>	1765		C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	601,602
	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> N <sub>5</sub>	1718		C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> S	2032
	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> NCl	1374,1375,1376,1546,1547,1548,1549		C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O	577,578,579,580,698,699,700,702,714,1177
	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> ON	1439,1453		C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	139,140,146,147,148,156,157,159,2711
	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N	1331,1332,1450,1451,1452	135	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub>	1781
128	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	1731		C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> N	598
	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> ON <sub>2</sub> S	2060,2061		C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> NS	1000
	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	2023,2024		C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> ON	846,848,849,858,859,1367,1368,1369,1541
	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> ON <sub>2</sub>	1272,1274,1454		C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N	1346,1347
	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> OC <sub>2</sub>	455,456,457		C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> S <sub>3</sub>	1943
	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	683,1083,1095,1096,1097,1100,1173	136	C <sub>2</sub> H <sub>0</sub> Br	253,254,255
	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	1759		C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> ON <sub>4</sub>	1783
	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O	398,399,555,632,633,635,636,637,638,639,640,1119,1120,1121		C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> S <sub>2</sub>	1983,1985
	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>7</sub>	1064,1065,1066		C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> ON <sub>2</sub>	850,851,1037
	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub>	8,34		C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	584,585,586,587,588,589,590,591,703,704,705,759,760,761,806,947,959,2458,2459,2460
	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	165		C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	1053,1419,1738,1743
129	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	1766		C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> S	1981
	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> NS	2062		C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O	413,435,436,437,438,443,444,537,538,539,689
	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	1769		C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	2637,2638,2690,2691,2692,2693,2694,2695,2696,2697,2730,2736,
	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> ON	1459,1460			
	C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N	1303			
	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N=129	1855,1892			
130	C <sub>2</sub> HCl <sub>3</sub>	275			

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
136	$C_{10}H_{16}$	2753, 2754, 2760, 2761, 2763, 2769, 2771, 2772	144	$C_3H_{20}Si$	2079
137	$C_7H_7O_2N$	499, 769, 770, 771, 852, 1205, 1206, 1207, 1370, 1525, 1561, 1562		$C_9H_{20}O$	350, 521
	$C_7H_7NS$	2000		$C_9H_8N_2$	1863, 1864, 1865, 1866, 1867, 1868, 1869, 1896, 1897, 1898, 1899, 1900, 1901, 1902
	$C_8H_{11}ON$	490		$C_{10}H_8O$	505, 506
	$C_9H_{15}N$	1314		$C_{11}H_{12}$	177, 178, 179
138	$C_2F_6$	246	145	$C_6H_{15}O_3B$	2070
	$C_2H_3O_2Br$	754		$C_9H_7ON$	1870, 1871, 1872, 1873, 1874, 1875, 1903, 1904
	$C_3H_7OBr$	366		$C_{10}H_{11}N$	1805, 1806, 1807, 1808, 1809, 1810, 1811
	$C_3H_6S_3$	1950	146	$C_2HOCl_3$	563
	$C_4H_{11}O_3P$	2090		$C_6H_{10}O_4$	744, 926, 930, 957
	$C_4H_{10}O_3S$	1007		$C_6H_{14}O_2N_2$	2993
	$C_6H_6O_2N_2$	1232, 1233, 1234, 1922		$C_6H_4Cl_2$	301, 302, 303
	$C_6H_6N_2S$	2003, 2004		$C_8H_{18}O_2$	613, 622
	$C_7H_6O_3$	763, 764, 765, 2466		$C_8H_{18}S$	1975, 1976, 1977, 1978
	$C_7H_6OS$	1999		$C_9H_6O_2$	2379, 2444
	$C_8H_{10}O_2$	450, 540, 541, 542		$C_9H_{10}N_2$	1485
	$C_{10}H_{18}$	175, 176, 2661, 2662, 2663, 2664, 2665, 2717		$C_{10}H_{10}O$	1181
139	$C_6H_5O_3N$	491, 492, 493		$C_{11}H_{14}$	180, 181
	$C_9H_{17}N$	1891, 1907	147	$C_2H_9O_4N$	2994
140	$C_3H_5O_4P$	2091		$C_5H_3NCl_2$	1550, 1551, 1552, 1553
	$C_5H_4O_3N_2$	1720		$C_8H_5O_2N$	882
	$C_6H_{10}Cl_2$	249		$C_9H_9ON$	1814, 1815, 1816, 1817, 1818, 1819
	$C_6H_4O_4$	2463, 2464		$C_{10}H_{13}N$	1825, 1885, 1886, 1906, 2185
	$C_6H_6O_2N_2$	1729, 1730	148	$C_4H_2N_2Cl_2$	1683, 1723, 1724
	$C_7H_3O_3$	1195		$C_6H_{12}O_4$	406, 407
	$C_7H_5O_2F$	790, 791, 792		$C_6H_4O_3$	817
	$C_7H_5OCl$	595, 596, 597, 825		$C_2H_8O_2$	777, 1182, 1183, 2380, 2442
	$C_8H_{12}O_2$	684, 694, 695, 1098, 1101		$C_{10}H_{12}O$	701, 2712
	$C_8H_6Cl$	329, 330, 331, 332		$C_{11}H_{16}$	160
	$C_9H_{16}O$	665, 681	149	$C_6H_7N_5$	1782
	$C_{10}H_{20}$	2646		$C_9H_7NS$	1001
141	$C_6H_4O_2NF$	1213, 1214, 1215		$C_9H_{11}NO$	599, 860, 861, 864
142	$CH_3I$	218		$C_{10}H_{15}N$	1351, 1404, 1405
	$C_7H_2O_5$	678	150	$C_6H_6ON_4$	1784, 1785, 1786, 1787
	$C_8H_6O_4$	750, 1196, 1197		$C_8H_5O_3$	600
	$C_8H_{10}O_2N_2$	1634, 1635		$C_3H_{10}ON_2$	862, 863, 1038
	$C_8H_5O_2S$	2022, 2025, 2026		$C_7H_{10}O_2$	707, 810, 948, 949, 950, 953, 958, 960, 2461
	$C_9H_{18}O$	556, 634		$C_{10}H_{14}O$	439, 2698, 2699, 2700, 2701, 2713, 2714, 2715, 2737, 2738, 2775
	$C_{10}H_{22}$	9, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41	151	$C_3H_5ON_5$	1788
	$C_{11}H_{10}$	166, 167		$C_5HNF_4$	1542
143	$C_5H_8N_3Cl$	1722		$C_7H_5O_3N$	782, 1219, 1220, 1221
	$C_9H_{21}N$	1313		$C_8H_9O_2N$	809, 865, 866, 867, 868, 965, 966, 1563
	$C_{10}H_9N$	1856, 1857, 1858, 1859, 1860, 1861, 1862, 1893, 1894, 1895		$C_8H_6NCl$	1820, 1821
144	$C_4H_8O_2N_4$	1277		$C_8H_9NS$	2005
	$C_6H_{16}N_4$	1776			

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
151	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> ON	1397	161	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N	2186
152	C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> O <sub>1</sub> Si	2080	162	C <sub>2</sub> HO <sub>2</sub> Cl <sub>3</sub>	757
	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	1789		C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> As	2094
	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	772		C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> CCl <sub>2</sub>	464,465,466,467,468,469
	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> OCl	1184,1185		C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> OSi	2081
	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	592,706,767,807,808,961,962,963		C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	818,1188,2385,2386
	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O	2639,2681,2682,2683,2684,2685,2686,2687,2688,2689,2702,2703,2704,2705,2706,2707,2708,2709,2710,2718,2719,2720,2721,2731,2732,2733,2734,2739,2740,2741,2742,2743,2744,2745,2755,2756,2757,2762,2764,2765,2766,2767,2770,2773,2774		C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	709,710,985,2443
	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub>	185		C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> Cl	341,342
153	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	1235,1236,1237,1239,1241		C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> O	2438
	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub> N	1210,1211,1212,1216,1217,1218		C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>	141,149,150,154,161
	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub> N	1358,1359	163	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> NCl	1878,1879,1880
154	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	454		C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N	1348
	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	914,1091	164	C <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	278
	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> Cl	337		C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	856
	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> (O)	2640,2641,2642,2643,2645,2647,2648,2649,2666,2667,2668,2669,2670,2671,2672,2673,2674,2675,2676,2677,2678,2679,2680,2716,2722,2723,2735,2746,2747,2748,2749,2750,2751,2752,2758,2759,2768,2776		C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	778,779
	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>	186		C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	762,2462
155	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> ONCl	853,854		C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	1420,1421
156	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> I	232	165	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ON <sub>3</sub>	1790,1791,1792,1793,1794
	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Br	299		C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub> N	1222,1223,1224
	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> Cl	793,794,795		C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub> N	773,774,1208,1209
	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	894	166	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	244
	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> Al	2074		C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> I	291
	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O	557,2644,2650,2651,2652,2653,2654,2655,2656,2657,2658		C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> Sb	2099
157	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> NBr	1557,1556		C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	1795,1796
158	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> Br	1725		C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	1229,1230,1231
	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	721		C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	776,783,784,785
	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	2476		C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> OCl	827
	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	1422,1423,1424,1425		C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	967
159	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> ON	1839,1876,1887		C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> OS	2001,2002
160	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	745,927,931		C <sub>13</sub> H <sub>10</sub>	196
	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	611,614,621	167	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub> N	1225,1226,1227
	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> S	1965		C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> ON	1920
	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	507,508,509,510,1187,2381,2382,2383,2384,2445	168	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub> As	2095
	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O	2439		C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	824
	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub>	182,183,184		C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	1242,1243,1244
161	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NCl <sub>2</sub>	1380,1381,1382,1383,1384,1385		C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	2467
	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> N	883,1826		C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	2154
	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> ON	1849		C <sub>13</sub> H <sub>12</sub>	187,188,189,190
			169	C <sub>5</sub> NF <sub>5</sub>	1543
				C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N	1427,1429,1430,1431
			170	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	695
				C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> O <sub>5</sub>	765
				C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> Br	323,324,325,338
				C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	2724,2725,2726,2727,2728,2729,2777

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号	
170	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> O	558, 641, 642, 643, 644, 645	184	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Br <sub>2</sub>	273	
	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	10		C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> I	257, 258, 259, 260	
	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O	500, 501, 502, 543		C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	494, 495, 496	
	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub>	168, 169, 170, 171, 172		C <sub>6</sub> HOF <sub>5</sub>	482	
171	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	1767, 1771		C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> OBr	826	
	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub>	1770		C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>5</sub>	964, 990	
	C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N	1285, 1304		C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	1033	
172	CH <sub>2</sub> Br <sub>2</sub>	221		C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O	544, 545, 546	
	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O <sub>6</sub>	2465	185	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> ON	1428	
	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OBr	458, 459, 460		C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N	1305, 1315, 1316	
	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	619, 722, 895, 2659, 2660	186	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> Br <sub>2</sub>	235, 237	
	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> O	351		C <sub>6</sub> F <sub>6</sub>	293	
	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	788, 789, 2477		C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> O	723, 896, 918	
173	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> N	1881, 1882		C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	2391, 2392	
	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> ON	1840, 1851, 1877		C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> O	352, 371	
174	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	932		C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	503, 504, 2478	
	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	2480, 2485		C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	2158	
175	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub> N	1829, 1841, 1888, 1889		C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> P	2093	
	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> ON	1852		C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> S	1982	
176	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>3</sub>	915	187	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> O <sub>3</sub> N	2999	
	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	1426		C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> O <sub>3</sub> B	2071	
	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	606, 2387, 2446	188	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>	746, 928, 933	
	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> ON <sub>2</sub>	1845		C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>	615	
	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	708, 986, 1143		C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	2488, 2495, 2496	
177	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub> N	1827, 1828		C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	1846	
178	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	484, 485	189	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> N <sub>3</sub> · HCl	1240	
	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	780, 987		190	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> ClBr	317, 318, 319
	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>	198			C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	607, 2447, 2481, 2482, 2486, 2487
180	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	408			C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	2448
	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> Cl <sub>3</sub>	307, 308, 309	191	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> O <sub>3</sub> N	1317	
	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	2248, 2249			C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> O <sub>5</sub> N	1830
	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	775, 977			C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub> N	1850
	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	974, 975, 2468, 2469	192	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>7</sub>	751	
	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	1198			C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>1</sub>	2388, 2449
	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub>	192			C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	1744
181	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> N	1044	193	C <sub>7</sub> NF <sub>5</sub>	1063	
182	C <sub>4</sub> HN <sub>2</sub> Cl <sub>3</sub>	1726			C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> N	1564
	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> F <sub>4</sub>	486, 487	194	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>6</sub>	409	
	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	1228, 1238, 1245, 1246, 1247, 1248, 1250			C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>3</sub>	340
	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> F <sub>5</sub>	297			C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	2250
	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	2470, 2471			C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	380, 781, 954, 955, 956, 970, 971, 972, 978, 979, 980
	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> O	711			C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	620
	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub>	191	195	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NCl <sub>3</sub>	1388, 1389, 1390	
183	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	1254, 1255, 1256			C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> NBr	1822
	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> NF <sub>5</sub>	1394			C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	1883
	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub> N	1360			C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> ON	2231

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号	
<b>196</b>	$C_6H_3OCl_3$	472, 473, 474, 475, 476, 477	<b>209</b>	$C_{14}H_{11}ON$	2232	
	$C_8H_5OBr$	1186	<b>210</b>	$C_4H_3SI$	2030	
	$C_{10}H_{12}O_4$	951, 952, 968, 969, 2472		$C_6H_3O_1As$	2097	
	$C_{13}H_8O_2$	2421		$C_9H_6O_6$	786, 787	
	$C_{14}H_{28}$	86		$C_9H_{10}O_4N_2$	1249	
<b>197</b>	$C_9H_{11}O_4N$	2995		$C_{14}H_{10}O_2$	712	
	$C_{13}H_{11}ON$	847		$C_{15}H_{14}O$	2357	
<b>198</b>	$C_5H_{11}I$	261	<b>211</b>	$C_7H_8ONF_5$	855	
	$C_6H_6O_4N_4$	1032	<b>212</b>	$C_6H_{13}I$	262	
	$C_6H_3N_2F_5$	1028		$C_7H_4O_6N_2$	1251, 1252, 1253	
	$C_{12}H_{10}ON_2$	2155, 2156		$C_{10}H_{12}O_5$	768, 2422, 2423, 2424	
	$C_{14}H_{10}O_2$	2941		$C_{14}H_{28}O$	559	
	$C_{14}H_{30}$	11		$C_{14}H_{12}O_2$	976	
<b>199</b>	$C_{12}H_{25}ON$	837		$C_{14}H_{16}N_2$	1412	
<b>200</b>	$C_3H_6Br_2$	252		$C_{15}H_{32}$	12	
	$C_7H_5O_2Br$	796, 797, 798	<b>213</b>	$C_{14}H_{31}N$	1286	
	$C_8H_5O_4Cl$	803	<b>214</b>	$C_3H_4OBr_2$	652	
	$C_{12}H_{24}O_2$	724		$C_4H_8Br_2$	256	
	$C_{12}H_8O_3$	2498		$C_6H_2Cl_4$	312, 313,	
	$C_{13}H_{26}O$	353		$C_8H_7O_2Br$	973	
	$C_{13}H_{12}O_2$	2479		$C_{13}H_{27}O_2$	725, 897, 919	
<b>202</b>	$C_8H_4O_2Cl_2$	828, 829		$C_{13}H_{10}O_3$	2942, 2943	
	$C_{10}H_{18}O_4$	747, 534		$C_{14}H_{30}O$	354, 372	
	$C_{12}H_{28}O_2$	616		$C_{14}H_{14}O_2$	418	
	$C_{11}H_6O_4$	2393, 2394		$C_{15}H_{16}O$	2841	
	$C_{15}H_{22}$	2808, 2825, 2840	<b>216</b>	$C_2H_2O_2Br_2$	755	
	$C_{16}H_{10}$	199		$C_7H_5O_3Br$	802	
<b>203</b>	$C_{12}H_{13}O_2N$	1833, 1836, 1838		$C_{11}H_{29}O_4$	748, 929	
	$C_{13}H_{17}ON$	857		$C_{12}H_8O_4$	2395, 2396, 2397, 2451, 2452	
<b>204</b>	$C_6H_5I$	300		$C_{13}H_9OCl$	830	
	$C_{11}H_{12}O_2N_2$	2996		$C_{13}H_{26}O_2$	617	
	$C_{11}H_8O_4$	2489, 2490, 2497		$C_{18}H_{20}O_5$	2364	
	$C_{12}H_{16}ON_2$	1847, 1848	<b>217</b>	$C_{13}H_{15}O_2N$	1837, 1854	
	$C_{15}H_{24}$	2778, 2779, 2780, 2805, 2806, 2807, 2809, 2810, 2811, 2812, 2814, 2815, 2821, 2822, 2823, 2824, 2826, 2829, 2831, 2832, 2833, 2834, 2835, 2836, 2837, 2838, 2839, 2846, 2847, 2848, 2849, 2853, 2854, 2855, 2856, 2860, 2861.		<b>218</b>	$C_7H_7I$	326, 327, 328, 339
				$C_{10}H_8O_4$	1257, 1258, 1259, 1260, 1261, 1262	
<b>205</b>	$C_{11}H_{11}O_3N$	1831, 1832, 1834		$C_{12}H_{10}O_4$	2491	
<b>206</b>	$C_{10}H_6O_5$	2483		$C_{15}H_{22}O$	2783, 2798, 2804, 2827, 2842	
	$C_{11}H_{10}O_4$	2389, 2390, 2450	<b>219</b>	$C_6H_6NI$	1377, 1378, 1379	
	$C_{15}H_{26}$	2852, 2859		$C_{12}H_{13}O_3N$	1835, 1853	
<b>207</b>	$C_{15}H_{13}N$	1842, 1843, 1844	<b>220</b>	$C_4SCl_4$	2031	
<b>208</b>	$C_6H_{15}Sb$	2100		$C_6H_5OI$	461, 462, 463	
	$C_{11}H_{12}O_4$	1199		$C_{11}H_{12}O_3N_2$	2997	
	$C_{14}H_8O_2$	2499, 2500, 2521		$C_{11}H_{24}O_4$	618	
	$C_{15}H_{26}$	2816		$C_{11}H_8O_5$	2492	
	$C_{15}H_{12}O$	2339		$C_{13}H_{16}O_3$	2440	
				$C_{15}H_{24}O$	2781, 2782, 2813, 2843	



分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
<b>222</b>	$C_6H_9N_2ClBr$	1029, 1030	<b>240</b>	$C_{14}H_8O_4$	984, 2507, 2508, 2509
	$C_9H_4Cl_4$	335		$C_{15}H_{12}O_3$	2317, 2343, 2344
	$C_{10}H_6O_5$	2484		$C_{16}H_{32}O$	550
<b>223</b>	$C_{12}H_{14}O_4$	981, 982		$C_{17}H_{36}$	14
	$C_{15}H_{26}O$	2784, 2785, 2786, 2787, 2788, 2803, 2817, 2818, 2819, 2820, 2830, 2844, 2845, 2850, 2851, 2857, 2858, 2862	<b>241</b>	$C_7H_3O_7N_3$	1265
	$C_{15}H_{16}O_2$	2501, 2502, 2260		$C_{18}H_{16}B$	2072
<b>224</b>	$C_{14}H_8O_4$	2506	<b>242</b>	$C_{15}H_{30}O_2$	727, 899
	$C_{15}H_{26}O$	2789, 2790, 2791, 2792, 2793, 2794		$C_{15}H_{14}O_3$	2359, 2360
	$C_{15}H_{12}O_2$	2312, 2340, 2341, 2342		$C_{16}H_{34}O$	356
	$C_{16}H_{32}$	87	<b>244</b>	$C_{12}H_8O_3$	2425
<b>226</b>	$C_{13}H_{10}O_2N_2$	2157		$C_{14}H_{12}O_4$	2402
	$C_{14}H_{16}O_3$	819, 2426, 2427, 2428, 2429		$C_{15}H_{16}O_2$	2407
	$C_{15}H_{30}O$	2801	<b>245</b>	$C_{10}H_{15}N$	1432
	$C_{15}H_{14}O_2$	2358	<b>246</b>	$C_6H_2O_2Cl_4$	488, 489
	$C_{16}H_{34}$	13		$C_{12}H_{26}Ge$	2083
<b>227</b>	$C_7H_5O_6N_3$	1263, 1264		$C_{13}H_{10}O_5$	2398, 2399
	$C_{15}H_{33}N$	1318		$C_{14}H_{16}O_2N_2$	3000
<b>228</b>	$C_6H_4O_6N_4$	1266		$C_{14}H_{14}O_4$	2400, 2401
	$C_{14}H_{28}O_2$	726, 898, 920		$C_{15}H_{18}O_3$	2410, 2411
	$C_{15}H_{32}O$	355		$C_{15}H_{30}$	151, 155, 158
	$C_{15}H_{20}N_2$	2159, 2160	<b>248</b>	$C_6HCl_3$	315
	$C_{13}H_{12}$	200, 201, 202, 203, 204		$C_7H_5O_2$	799, 800, 801
<b>229</b>	$C_6H_3O_7N_3$	497		$C_7H_6Br_2$	333, 334
	$C_6H_3NCl_4$	1392, 1393		$C_{15}H_{24}ON_2$	2244
<b>230</b>	$C_5H_{15}O_5As$	2096	<b>249</b>	$C_6NCl_3$	1554
	$C_5H_{10}S_5$	1951		$C_6H_5NBr_2$	1386, 1387
	$C_6H_2OCl_4$	479, 480, 481	<b>250</b>	$CHBr_3$	227
	$C_{12}H_{22}O_4$	749		$C_6H_4OBr_2$	470, 471
	$C_{13}H_{10}O_4$	2453, 2454		$C_{11}H_{22}O_6$	2969
	$C_{14}H_{36}O_2$	612		$C_{16}H_{26}O_2$	2795, 2796, 2797
	$C_{14}H_{18}ON_2$	2161	<b>254</b>	$C_{15}H_{10}O_4$	2262, 2324, 2325, 2512, 2513, 2514, 2515
	$C_{13}H_{14}$	193, 194, 195		$C_{16}H_{14}O_3$	2319, 2334
<b>234</b>	$C_2Cl_6$	247		$C_{18}H_{38}$	15
	$C_6H_4Br_2$	304, 305, 306	<b>255</b>	$C_6H_3ON$	838
	$C_{12}H_{14}O_3N_2$	2998		$C_{17}H_3N$	1287
	$C_{15}H_{22}O_2$	2828	<b>256</b>	$C_{14}H_8O_5$	2510
<b>235</b>	$C_5H_3NBr_2$	1557		$C_{15}H_{12}O_1$	2313, 2345
<b>236</b>	$C_{10}H_{20}O_6$	2964, 2965, 2966, 2967, 2968		$C_{16}H_{32}O_2$	728, 900, 921
	$C_{13}H_{24}O_2$	2799		$C_{17}H_{36}O$	357
	$C_{15}H_{12}O_2$	2503, 2504, 2505		$C_{18}H_{24}O$	2568
<b>238</b>	$C_{15}H_{26}O_2$	2802		$S_8$	2067
	$C_{15}H_{16}O_4$	2261	<b>258</b>	$C_{14}H_{10}O_5$	2430, 2431
	$C_{16}H_{14}O_2$	2346, 2347		$C_{15}H_{14}O_4$	2409, 2415
				$C_{18}H_{26}O$	2565
			<b>260</b>	$C_{19}H_{32}$	2536, 2537
			<b>262</b>	$C_2HBr_3$	276
				$C_{15}H_{18}O_4$	2412
				$C_{15}H_{22}O_2N_2$	2245

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
264	C <sub>6</sub> HOCls	483	288	C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	2540, 2541, 2559, 2560, 2567
	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> O <sub>6</sub>	527		C <sub>20</sub> H <sub>32</sub> O	2882
	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> O <sub>5</sub>	2413		C <sub>21</sub> H <sub>36</sub>	2527
268	CH <sub>2</sub> I <sub>2</sub>	222	290	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> O <sub>6</sub>	2361
	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	2268, 2269, 2270, 2516, 2517		C <sub>19</sub> H <sub>30</sub> O	2542, 2543, 2544, 2545, 2553, 2554, 2555, 2562
	C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O	561		C <sub>20</sub> H <sub>4</sub> O	2865, 2868, 2888, 2889
	C <sub>18</sub> H <sub>10</sub>	16	292	C <sub>16</sub> H <sub>26</sub> O <sub>5</sub>	2441
269	C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> N	1319		C <sub>18</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	2473, 2474
270	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> O <sub>5</sub>	2263, 2264, 2518		C <sub>19</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>	2549, 2551, 2552, 2556
	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	2348, 2349	294	C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> ON <sub>2</sub>	2178
	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	729	296	C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> ON <sub>2</sub>	2162, 2177
	C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O	358		C <sub>20</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub>	2104
272	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> O <sub>6</sub>	2511		C <sub>21</sub> H <sub>11</sub>	18
	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	2314, 2432, 2433	297	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub> N <sub>5</sub>	2960, 2961, 2962, 2963
	C <sub>16</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>	2566, 2569		C <sub>18</sub> H <sub>19</sub> O <sub>3</sub> N	2187
	C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O	2558	298	C <sub>17</sub> H <sub>14</sub> O <sub>5</sub>	2275, 2284, 2520
	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	2863, 2864, 2880, 2883, 2884, 2892, 2893		C <sub>19</sub> H <sub>26</sub> ON <sub>2</sub>	2163, 2164
274	C <sub>19</sub> H <sub>30</sub> O	2538, 2539		C <sub>19</sub> H <sub>38</sub> O <sub>2</sub>	731, 902
276	C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	2563		C <sub>19</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2403
	C <sub>18</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	2525		C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> O	359, 373
	C <sub>19</sub> H <sub>32</sub> O	2546, 2547, 2548, 2550	299	C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub> N	2233, 2234, 2235, 2236
	C <sub>22</sub> H <sub>12</sub>	205, 206, 209		C <sub>18</sub> H <sub>23</sub> O <sub>3</sub> N	2214, 2215, 2216
278	C <sub>2</sub> HOB <sub>3</sub>	564	300	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> O <sub>5</sub> A <sub>8</sub>	2098
	C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> O <sub>5</sub>	2414		C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	2285
	C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> O <sub>1</sub>	983, 2800		C <sub>17</sub> H <sub>6</sub> O <sub>5</sub>	2435
	C <sub>16</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>	2564		C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2144
	C <sub>18</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	2526		C <sub>20</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	2895, 2899, 2900, 2904, 2905, 2909
	C <sub>22</sub> H <sub>14</sub>	207, 208, 210, 211		C <sub>21</sub> H <sub>32</sub> O	2898
280	C <sub>20</sub> H <sub>10</sub>	88		C <sub>24</sub> H <sub>12</sub>	212
281	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> O <sub>4</sub> N <sub>5</sub>	2957, 2958, 2959	301	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> O <sub>4</sub> N	2218
282	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> I <sub>2</sub>	238		C <sub>18</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub> N	2217
	C <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	316	302	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> O <sub>7</sub>	2266
	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O <sub>8</sub>	2493, 2494		C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>6</sub>	2321, 2436, 2475
	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	2271, 2280, 2326		C <sub>17</sub> H <sub>18</sub> O <sub>5</sub>	2362
	C <sub>14</sub> H <sub>38</sub> O	646		C <sub>20</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>	2561, 2885, 2894, 2907, 2908
	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	17		C <sub>21</sub> H <sub>34</sub> O	2528, 2532, 2533
	C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	2135		C <sub>24</sub> H <sub>14</sub>	213, 214
283	C <sub>28</sub> H <sub>37</sub> ON	839	303	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> O <sub>4</sub> N	2219
284	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	2272, 2273, 2274, 2283, 2519	304	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O <sub>7</sub>	2316
	C <sub>17</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>	2320, 2406		C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub>	2557
	C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	730, 901, 922		C <sub>20</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>	2866, 2867, 2873, 2887, 2890
	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> O <sub>3</sub>	2570		C <sub>21</sub> H <sub>36</sub> O	2529
	C <sub>20</sub> H <sub>28</sub> O	2901	306	C <sub>20</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	2869, 2870, 2871, 2891
285	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> O <sub>3</sub> N	2211, 2212	308	C <sub>22</sub> H <sub>44</sub>	89
286	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> O <sub>6</sub>	2265	310	C <sub>20</sub> H <sub>26</sub> ON <sub>2</sub>	2136
	C <sub>18</sub> H <sub>14</sub> O <sub>5</sub>	2434		C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub>	2106
	C <sub>20</sub> H <sub>30</sub> O	2879, 2881, 2902, 2903, 2906		C <sub>22</sub> H <sub>16</sub>	19
287	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> O <sub>3</sub> N	2213	311	C <sub>19</sub> H <sub>21</sub> O <sub>3</sub> N	2220
288	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	265	312	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> Br <sub>3</sub>	310, 311
	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	2315		C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> O <sub>5</sub>	2281, 2282, 2308

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
312	C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> O <sub>4</sub>	2145, 2416	340	C <sub>2</sub> Br <sub>4</sub>	279
	C <sub>26</sub> H <sub>28</sub> ON <sub>2</sub>	2105		C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2111, 2138, 2139
	C <sub>26</sub> H <sub>40</sub> O <sub>2</sub>	732, 903, 923		C <sub>22</sub> H <sub>32</sub> ON <sub>2</sub>	2110
313	C <sub>17</sub> H <sub>15</sub> O <sub>5</sub> N	2237, 2238, 2239		C <sub>22</sub> H <sub>41</sub> O <sub>2</sub>	734, 905
	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> O <sub>4</sub> N	2222		C <sub>23</sub> H <sub>48</sub> O	361
	C <sub>18</sub> H <sub>23</sub> O <sub>3</sub> N	2221, 2223	341	C <sub>20</sub> H <sub>23</sub> O <sub>4</sub> N	2188, 2203
314	C <sub>17</sub> H <sub>14</sub> O <sub>6</sub>	2276, 2286, 2287	342	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> Br <sub>4</sub>	245
	C <sub>18</sub> H <sub>22</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2101, 2102, 2103		C <sub>19</sub> H <sub>18</sub> O <sub>6</sub>	2291, 2292, 2303, 2306, 2309, 2328, 2352
	C <sub>18</sub> H <sub>18</sub> O <sub>5</sub>	2350		C <sub>20</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2147
	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>	2535		C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2119
315	C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> O <sub>5</sub> N	2240	344	C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> O <sub>7</sub>	2279, 2293
	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> O <sub>4</sub> N	2224, 2225		C <sub>23</sub> H <sub>40</sub> N <sub>2</sub>	2254
316	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>7</sub>	2277, 2288, 2289, 2521	345	C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> O <sub>6</sub> N	2208
	C <sub>17</sub> H <sub>16</sub> O <sub>6</sub>	2318, 2437		C <sub>19</sub> H <sub>23</sub> O <sub>5</sub> N	2207
	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> O <sub>5</sub>	2363	346	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> O <sub>7</sub>	2944, 2954, 2955
	C <sub>20</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub>	2896, 2897		C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> O <sub>6</sub>	2366, 2367, 2368
	C <sub>21</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>	2876, 2877, 2886	347	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> O <sub>6</sub> N	2209, 2210
317	C <sub>19</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub> N	2246	352	C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> O <sub>6</sub> Cl	2976
318	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> O <sub>8</sub>	2267		C <sub>20</sub> H <sub>16</sub> O <sub>6</sub>	2353
	C <sub>21</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	2534, 2874		C <sub>21</sub> H <sub>24</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2171
320	C <sub>21</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	2530, 2531, 2872, 2875, 2878		C <sub>22</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2132
	C <sub>25</sub> H <sub>20</sub>	197		C <sub>25</sub> H <sub>32</sub>	22
321	C <sub>20</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub> N	2241	353	C <sub>20</sub> H <sub>19</sub> O <sub>5</sub> N	2192
323	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> O <sub>4</sub> N	2198, 2242	354	C <sub>20</sub> H <sub>18</sub> O <sub>6</sub>	2936
324	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> Pb	2084		C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2133, 2151, 2172, 2173, 2182, 2183
	C <sub>23</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2179		C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> O <sub>5</sub>	2322
	C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> ON <sub>2</sub>	2107		C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2112
	C <sub>23</sub> H <sub>48</sub>	20		C <sub>23</sub> H <sub>46</sub> O <sub>2</sub>	906
326	C <sub>20</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2180, 2181		C <sub>24</sub> H <sub>50</sub> O	362
	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> ON <sub>2</sub>	2108	355	C <sub>20</sub> H <sub>21</sub> O <sub>5</sub> N	2193
	C <sub>21</sub> H <sub>42</sub> O <sub>2</sub>	733, 904		C <sub>21</sub> H <sub>25</sub> O <sub>4</sub> N	2200, 2201, 2204
	C <sub>22</sub> H <sub>46</sub> O	360	356	C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2122
327	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NBr <sub>3</sub>	1391		C <sub>22</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2120
328	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> OBr <sub>3</sub>	478	358	C <sub>19</sub> H <sub>18</sub> O <sub>7</sub>	2304, 2354
	C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> O <sub>6</sub>	2290, 2327	360	C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> O <sub>8</sub>	2294, 2305
	C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2146, 2152		C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> O <sub>7</sub>	2323
	C <sub>20</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2118, 2165	362	C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> O <sub>7</sub>	2369
329	C <sub>18</sub> H <sub>19</sub> O <sub>5</sub> N	2243	363	C <sub>23</sub> H <sub>25</sub> O <sub>3</sub> N	2205
330	C <sub>17</sub> H <sub>14</sub> O <sub>7</sub>	2278, 2301, 2302	364	C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	2148
	C <sub>18</sub> H <sub>18</sub> O <sub>6</sub>	2404	366	C <sub>22</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2141, 2142
331	C <sub>23</sub> H <sub>11</sub> N	2251		C <sub>26</sub> H <sub>34</sub>	23
332	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> O <sub>6</sub>	2365	367	C <sub>20</sub> H <sub>17</sub> O <sub>6</sub> N	2196
	C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> O <sub>5</sub>	2405	368	C <sub>21</sub> H <sub>24</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	2184
333	C <sub>19</sub> H <sub>27</sub> O <sub>4</sub> N	2227		C <sub>22</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2125, 2143, 2166, 2167, 2168, 2169
	C <sub>20</sub> H <sub>15</sub> O <sub>4</sub> N	2247		C <sub>24</sub> H <sub>48</sub> O <sub>2</sub>	907
336	C <sub>19</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	2418	369	C <sub>20</sub> H <sub>19</sub> O <sub>6</sub> N	2197
338	C <sub>16</sub> H <sub>15</sub> O <sub>6</sub> Cl	2977		C <sub>21</sub> H <sub>23</sub> O <sub>6</sub> N	2194, 2225
	C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2130, 2131, 2137, 2140	370	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2113, 2116, 2121, 2123
	C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> O <sub>4</sub>	2351		C <sub>26</sub> H <sub>42</sub> O	2620
	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> ON <sub>2</sub>	2109		C <sub>27</sub> H <sub>46</sub>	2614, 2619
	C <sub>24</sub> H <sub>50</sub>	21			
339	C <sub>20</sub> H <sub>21</sub> O <sub>4</sub> N	2199, 2202			

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
372	C <sub>20</sub> H <sub>20</sub> O <sub>7</sub>	2307, 2329, 2945	410	C <sub>27</sub> H <sub>34</sub> O <sub>7</sub>	910
	C <sub>25</sub> H <sub>44</sub> N <sub>2</sub>	2252		C <sub>30</sub> H <sub>50</sub>	2910, 2923, 2929
	C <sub>27</sub> H <sub>48</sub>	2606, 2607	412	C <sub>23</sub> H <sub>28</sub> O <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	2129
374	C <sub>19</sub> H <sub>18</sub> O <sub>8</sub>	2295, 2946		C <sub>28</sub> H <sub>48</sub> O	2623, 2625, 2627
	C <sub>23</sub> H <sub>34</sub> O <sub>4</sub>	2571	414	C <sub>21</sub> H <sub>16</sub> O <sub>6</sub>	2975
	C <sub>24</sub> H <sub>30</sub> N <sub>4</sub>	2153		C <sub>22</sub> H <sub>32</sub> O <sub>8</sub>	2939, 2940
	C <sub>25</sub> H <sub>46</sub> N <sub>2</sub>	2253		C <sub>23</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	2128, 2174
376	C <sub>20</sub> H <sub>24</sub> O <sub>7</sub>	2370		C <sub>28</sub> H <sub>42</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2255
380	C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	2149, 2150		C <sub>27</sub> H <sub>46</sub> ON <sub>2</sub>	2257
382	C <sub>25</sub> H <sub>50</sub> O <sub>2</sub>	908		C <sub>27</sub> H <sub>42</sub> O <sub>3</sub>	2593, 2594
	C <sub>26</sub> H <sub>54</sub> O	363		C <sub>29</sub> H <sub>50</sub> O	2613, 2616
384	C <sub>27</sub> H <sub>28</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	2124, 2134		C <sub>30</sub> H <sub>44</sub>	2931
	C <sub>23</sub> H <sub>32</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2114, 2115	415	C <sub>27</sub> H <sub>45</sub> O <sub>2</sub> N	2258
	C <sub>24</sub> H <sub>42</sub> O <sub>4</sub>	2586, 2587	416	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>9</sub>	2948
	C <sub>27</sub> H <sub>44</sub> O	2628		C <sub>22</sub> H <sub>22</sub> O <sub>10</sub>	2372
386	C <sub>20</sub> H <sub>18</sub> O <sub>8</sub>	2970, 2971, 2972		C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> O <sub>6</sub>	2584, 2590
	C <sub>22</sub> H <sub>26</sub> O <sub>5</sub>	2937		C <sub>25</sub> H <sub>40</sub> O <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2256
	C <sub>24</sub> H <sub>41</sub> O <sub>4</sub>	2580		C <sub>27</sub> H <sub>44</sub> O <sub>3</sub>	2595, 2596
	C <sub>27</sub> H <sub>46</sub> O	2615, 2617	418	C <sub>28</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub>	2333
388	C <sub>20</sub> H <sub>20</sub> O <sub>8</sub>	2296	422	C <sub>30</sub> H <sub>62</sub>	26
	C <sub>23</sub> H <sub>32</sub> O <sub>5</sub>	2575, 2578	424	C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O	2912, 2925, 2931
	C <sub>27</sub> H <sub>38</sub> O	2608, 2609, 2610	426	C <sub>30</sub> H <sub>50</sub> O	2911, 2924, 2926, 2930, 2932
390	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> Br <sub>4</sub>	314	428	C <sub>22</sub> H <sub>20</sub> O <sub>9</sub>	2973
	C <sub>20</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub>	2297	430	C <sub>27</sub> H <sub>42</sub> O <sub>4</sub>	2600
	C <sub>23</sub> H <sub>34</sub> O <sub>5</sub>	2572, 2573, 2574, 2579		C <sub>37</sub> H <sub>34</sub> O	2935
	C <sub>24</sub> H <sub>38</sub> O <sub>4</sub>	2635	432	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>10</sub>	2375
392	C <sub>24</sub> H <sub>47</sub> O <sub>4</sub>	2631, 2632, 2633, 2634		C <sub>23</sub> H <sub>28</sub> O <sub>8</sub>	2949
393	C <sub>24</sub> H <sub>27</sub> O <sub>4</sub> N	2206		C <sub>27</sub> H <sub>44</sub> O <sub>4</sub>	2597, 2598, 2599
394	CHI <sub>3</sub>	228	434	C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> O <sub>10</sub>	2376
	C <sub>23</sub> H <sub>22</sub> O <sub>6</sub>	2330, 2331, 2355, 2356		C <sub>26</sub> H <sub>26</sub> O <sub>6</sub>	2417
	C <sub>28</sub> H <sub>54</sub>	24	442	C <sub>30</sub> H <sub>50</sub> O <sub>2</sub>	2913, 2933
396	C <sub>26</sub> H <sub>52</sub> O <sub>2</sub>	909	444	C <sub>25</sub> H <sub>32</sub> O <sub>7</sub>	2950
	C <sub>24</sub> H <sub>44</sub> O	2629		C <sub>26</sub> H <sub>36</sub> O <sub>6</sub>	2585
397	C <sub>22</sub> H <sub>23</sub> O <sub>6</sub> N	2195	446	C <sub>27</sub> H <sub>22</sub> O <sub>10</sub>	2377, 2378
398	C <sub>21</sub> H <sub>18</sub> O <sub>8</sub>	2974		C <sub>23</sub> H <sub>26</sub> O <sub>8</sub>	2952
	C <sub>23</sub> H <sub>30</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	2126, 2170		C <sub>24</sub> H <sub>30</sub> O <sub>8</sub>	2938, 2951
	C <sub>28</sub> H <sub>46</sub> O	2621, 2622, 2624, 2626, 2630	448	C <sub>27</sub> H <sub>44</sub> O <sub>5</sub>	2601, 2602, 2603, 2604, 2605
399	C <sub>27</sub> H <sub>44</sub> ON	2259	456	C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O <sub>3</sub>	2916, 2927
400	C <sub>17</sub> H <sub>14</sub> O <sub>7</sub> Cl <sub>2</sub>	2947	458	C <sub>28</sub> H <sub>34</sub> O <sub>7</sub>	2591, 2914
	C <sub>23</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	2117	460	C <sub>28</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	2127
	C <sub>24</sub> H <sub>42</sub> O <sub>7</sub>	2586, 2589	462	C <sub>22</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub>	2373
	C <sub>27</sub> H <sub>47</sub> O <sub>2</sub>	2592		C <sub>23</sub> H <sub>26</sub> O <sub>10</sub>	2300
	C <sub>28</sub> H <sub>48</sub> O	2618	464	C <sub>21</sub> H <sub>27</sub> O <sub>12</sub>	2374
	C <sub>29</sub> H <sub>52</sub>	2611	466	C <sub>21</sub> H <sub>62</sub> O <sub>2</sub>	911
402	C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> O <sub>8</sub>	2298, 2299, 2310, 2311	474	C <sub>30</sub> H <sub>50</sub> O <sub>4</sub>	2915
	C <sub>23</sub> H <sub>31</sub> O <sub>5</sub>	2587, 2582, 2583	478	C <sub>34</sub> H <sub>70</sub>	27
	C <sub>28</sub> H <sub>50</sub> O	2612	484	C <sub>30</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub>	2419
404	C <sub>23</sub> H <sub>32</sub> O <sub>6</sub>	2576, 2577	486	C <sub>31</sub> H <sub>50</sub> O <sub>4</sub>	2917
	C <sub>25</sub> H <sub>34</sub> O <sub>4</sub>	2332	492	C <sub>35</sub> H <sub>72</sub>	28
408	C <sub>24</sub> H <sub>40</sub> O <sub>5</sub>	2636	502	C <sub>30</sub> H <sub>30</sub> O <sub>7</sub>	2420
	C <sub>29</sub> H <sub>66</sub>	25		C <sub>31</sub> H <sub>30</sub> O <sub>8</sub>	2918, 2919, 2920, 2928
			506	C <sub>36</sub> H <sub>74</sub>	29

分子量	分子式	化合物编号	分子量	分子式	化合物编号
512	C <sub>33</sub> H <sub>52</sub> O <sub>4</sub>	2921	578	C <sub>22</sub> H <sub>38</sub> O <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	2176
514	C <sub>28</sub> H <sub>18</sub> O <sub>10</sub>	2455	608	C <sub>33</sub> H <sub>10</sub> O <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	2175
531	C <sub>28</sub> H <sub>37</sub> O <sub>9</sub> N	2228, 2229		C <sub>17</sub> H <sub>40</sub> O <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	2189, 2190
538	C <sub>30</sub> H <sub>18</sub> O <sub>10</sub>	2335, 2522, 2523	620	C <sub>42</sub> H <sub>84</sub> O <sub>2</sub>	912
542	C <sub>30</sub> H <sub>22</sub> O <sub>10</sub>	2336	622	C <sub>48</sub> H <sub>42</sub> O <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	2191
545	C <sub>29</sub> H <sub>39</sub> O <sub>9</sub> N	2230	656	C <sub>37</sub> H <sub>36</sub> O <sub>11</sub>	2337
554	C <sub>28</sub> H <sub>36</sub> O <sub>7</sub> Cl <sub>2</sub>	2953	668	C <sub>48</sub> H <sub>52</sub> O <sub>10</sub>	2956
556	C <sub>34</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	2922	686	C <sub>49</sub> H <sub>42</sub> O <sub>11</sub>	2371
574	C <sub>30</sub> H <sub>22</sub> O <sub>12</sub>	2338			

## 二、汉英化合物名称索引

(黑体阿拉伯数字是化合物的编号)

### 一划

一氟一氯甲烷	chlorofluoromethane	223
一氟一溴甲烷	bromofluoromethane	224
一氟乙炔	monofluoroethyne	286
一氟乙烷	monofluoroethane	229
一氟乙烯	monofluoroethene	266
一氟甲烷	monofluoromethane	215
一氟环己烷	monofluorocyclohexane	263
一氟叔丁烷	monofluoro- <i>tert</i> -butane	248
一氯乙烷	monochloroethane	230
一氯乙烯	monochloroethene	267
一氯甲烷	monochloromethane	216
一氯环己烷	monochlorocyclohexane	264
一溴乙烷	monobromoethane	231
一溴乙烯	monobromoethene	268
一溴甲烷	monobromomethane	217
1,2-乙二胺	1,2-ethanediamine	1320
乙二硫醇	1,2-ethanedithiol	1968
乙二腈	acetodinitrile	1047
乙二醛	ethanedial	569
乙二醛二肟	ethanedial dioxime	1921
乙二酸(草酸)	oxalic acid	740
乙二醇二乙酸酯	glycol diacetate	957
乙二醇	glycol	375
乙炔	ethyne	123
乙炔基苯	ethynylbenzene	164
2-乙氧基吡啶	2-ethoxypyridine	1528
乙胺	ethylamine	1279
<i>N</i> -乙基-1,2-乙二胺	<i>N</i> -ethyl-1,2-ethanediamine	1323
2-乙基-3,5-二甲基吡咯	2-ethyl-3,5-dimethylpyrrole	1481
2-乙基-1,3-二氧戊烷	2-ethyl 1,3-dioxolane	1159
4-乙基-1,3-二氧戊烷	4-ethyl-1,3-dioxolane	1160

<i>N</i> -乙基丁烯二酸内酰胺	<i>N</i> -ethylbutenedioic lactam	881
1-乙基-1,2,4-三氮唑	1-ethyl-1,2,4-triazole	1644
3-乙基-1,2,4-三氮唑	3-ethyl-1,2,4-triazole	1645
4-乙基-1,2,4-三氮唑	4-ethyl-1,2,4-triazole	1643
6-乙基己内酯	6-ethylhexyrolactone	1100
<i>N</i> <sub>α</sub> -乙基白坚米定	<i>N</i> <sub>α</sub> -ethylaspidospermidine	2106
乙基丙胺	ethylpropylamine	1297
乙基丙基醚	ethylpropyl ether	515
<i>N</i> <sub>α</sub> -乙基-17-甲氧基白坚米定	<i>N</i> <sub>α</sub> -ethyl-17-methoxyaspidospermidine	2110
2-乙基-4-甲基-1,3-二氧戊烷	2-ethyl-4-methyl-1,3-dioxolane	1161
3-乙基-4-甲基吡啶	3-ethyl-4-methylpyridine	1505
2-乙基-5-甲基咪唑	2-ethyl-5-methylimidazole	1612
2-乙基-5-甲基-2-咪唑啉	2-ethyl-5-methyl-2-imidazoline	1626
乙基甲硅烷	ethylsilicane	2078
<i>N</i> <sub>α</sub> -乙基去乙酰基西林醇碱	<i>N</i> <sub>α</sub> -ethyldeacetylcylinhydrocarpol	2120
<i>N</i> -乙基-3,4-去氢哌啶	<i>N</i> -ethyl-3,4-dehydropiperidine	1465
<i>N</i> -乙基戊二烯酸内酰胺	<i>N</i> -ethylpentadienoic lactam	876
5-乙基戊内酯	5-ethylpentyrolactone	1082
5-乙基-3-戊烯内酯	5-ethyl-3-pentyrolactone	1089
乙基异丙胺	ethylisopropylamine	1298
3- <i>O</i> -乙基吗啡	3- <i>O</i> -ethylmorphine	2223
1-乙基-3-亚氨基-1,2,4-三唑啉	1-ethyl 3-amino-1,2,4-triazoline	1653
1-乙基-5-亚氨基-1,2,4-三唑啉	1-ethyl-5-amino-1,2,4-triazoline	1654
2-乙基吡啶	2-ethylpyridine	1499
3-乙基吡啶	3-ethylpyridine	1500
4-乙基吡啶	4-ethylpyridine	1501
<i>N</i> -乙基吡咯	<i>N</i> -ethylpyrrole	1476
2-乙基吡咯	2-ethylpyrrole	1477
3-乙基吡咯	3-ethylpyrrole	1478
3-乙基吡唑啉	3-ethylpyrazoline	1592
乙基吡嗪	ethylpyrazine	1739
2-乙基呋喃	2-ethylfuran	1136
3-乙基辛烷	3-ethyloctane	38
乙基苯	ethylbenzene	142
<i>N</i> -乙基苯胺	<i>N</i> -ethylaniline	1403
2-乙基苯酚	2-ethylphenol	440
3-乙基苯酚	3-ethylphenol	441
4-乙基苯酚	4-ethylphenol	442
乙基苯基酮	ethylphenylketone	702
2-乙基庚酸甲酯	methyl-2-ethylheptanoate	895
<i>N</i> -乙基环己胺	<i>N</i> -ethylcyclohexanamine	1332
2-乙基-1,3-环戊二酮	2-ethyl-1,3-pentanedione	675
1-乙基环戊烯	1-ethylcyclopentene	97
3-乙基环戊烯	3-ethylcyclopentene	98
乙基环戊烷	ethylcyclopentane	51
乙基肼	ethylhydrazine	1021
1-乙基咪唑	1-ethylimidazole	1610

2-乙基咪唑	2-ethylimidazole	1611
2-乙基-2-咪唑啉	2-ethyl-2-imidazoline	1625
乙基脲	ethylurea	1912
2-乙基硫杂环戊烷	2-ethylthiolane	1932
2-乙基噻吩	2-ethylthiophene	2014
3-乙基噻吩	3-ethylthiophene	2015
5-乙基噻唑	5-ethylthiazole	2040
乙烯	ethene	64
2-乙烯基吡啶	2-ethenylpyridine	1529
3-乙烯基吡啶	3-ethenylpyridine	1530
4-乙烯基吡啶	4-ethenylpyridine	1531
乙烯基吡嗪	ethenylpyrazine	1746
乙烯基苯	ethenylbenzene	162
乙烯基环氧乙烷	ethenyloxirane	1109
乙烯硫基苯	ethenylthiobenzene	1981
乙烯酮	ketene	623
乙烷	ethane	2
乙硫醇	ethanethiol	1956
乙腈	acetonitrile	1041
乙酰苯肼	acetylphenylhydrazide	1038
乙酰苯胺	acetylaniline	859
乙酰肼	acetylhydrazide	1034
乙酰胺	acetamide	832
3 $\alpha$ -乙酰氨基-20-乙酰甲基氨基-5-孕甾烯	3 $\alpha$ -acetylaminino-20-acetylmethylamino-5-pregnene	2255
N <sub>8</sub> -乙酰基白垩米定	N <sub>8</sub> -acetylaspidospermidine	2107
N <sub>8</sub> -乙酰基-16-甲氧基-17-羟基白垩米定	N <sub>8</sub> -acetyl-16-methoxy-17-hydroxyaspidospermidine	2113
2-乙酰基-3-甲基吲哚	2-acetyl-3-methylindole	1840
2-乙酰基-5-甲基咪唑	2-acetyl-5-methylimidazole	1615
N <sub>8</sub> -乙酰基-17-去甲氧基西林卡林	N <sub>8</sub> -acetyl-17-demethoxycylindrocarine	2125
3-O-乙酰基齐墩果酸甲酯	methyl 3-O-acetyloleanolate	2921
N <sub>8</sub> -乙酰基西林卡林	N <sub>8</sub> -acetylcylindrocarine	2126
3-乙酰基吲哚	3-acetylindole	1839
2-乙酰基吡啶	2-acetylpyridine	1538
3-乙酰基吡啶	3-acetylpyridine	1539
4-乙酰基吡啶	4-acetylpyridine	1540
2-乙酰基苯并呋喃	2-acetylbenzofuran	1187
2-乙酰基环己酮	2-acetylcyclohexanone	684
N-乙酰基-L-亮氨酸甲酯	N-acetyl-L-leucine methyl ester	2999
N-乙酰基哌啶	N-acetyl piperidine	1453
N <sub>8</sub> -乙酰基-10-氧基西林卡林	N <sub>8</sub> -acetyl-10-oxocylindrocarine	2129
2-乙酰基萘醌	2-acetylnaphthaquinone	2498
N <sub>8</sub> -乙酰基-20-羟基西林卡林	N <sub>8</sub> -acetyl-20-hydroxycylindrocarine	2128
2-乙酰基-3-羟基呋喃	2-acetyl-3-hydroxyfuran	1141
3-乙酰基-4-羟基噻吩	3-acetyl-4-hydroxythiophene	2022
乙酰基硫脲	acetylthiourea	1995
乙酰基粟米草酸二甲酯	dimethyl acetylspergulagenat	2922
2-乙酰基噻吩	2-acetylthiophene	2020

3-乙酰基噻吩	3-acetylthiophene	2021
乙酰氯	acetyl chloride	820
乙酸	acetic acid	716
乙酸苄醇酯	benzylalcohol acetate	953
乙酸乙酯	ethyl acetate	917
乙酸-2,4-二甲氧基苯酚酯	2,4-dimethoxyphenol acetate	951
乙酸-2,5-二甲氧基苯酚酯	2,5-dimethoxyphenol acetate	952
乙酸对甲基苯酚酯	<i>p</i> -methylphenol acetate	950
乙酸甲酯	methyl acetate	888
乙酸间甲基苯酚酯	<i>m</i> -methylphenol acetate	949
乙酸邻甲基苯酚酯	<i>o</i> -methylphenol acetate	948
乙酸苯酚酯	phenol acetate	947
乙酸酐	acetic anhydride	811
乙酸硫甲酯	<i>S</i> -methyl acetate	1008
乙醇	ethanol	344
乙醛	acetaldehyde	548

## 二划

3,3',4',5,5',6,7,8-八甲氧基黄酮	3,3',4',5,5',6,7,8-octamethoxyflavone	2300
1,3-丁二炔	1,3-butadiyne	127
1,4-丁二胺	1,4-butanediamine	1326
1,3-丁二烯	1,3-butadiene	79
1,4-丁二硫醇	1,4-butanedithiol	1969
丁二腈	butenedinitrile	1049
2,3-丁二酮	2,3-butanedione	649
1,4-丁二醇	1,4-butanediol	378
2,3-丁二醇	2,3-butanediol	379
丁二醛	butanedial	570
丁三醛	butanetriol	572
丁内酯	butyrolactone	1073
1-丁炔	1-butyne	125
2-丁炔	2-butyne	126
丁炔二腈	butynedinitrile	1056
丁香脂素二甲醚	syringaresinol dimethyl ether	2938
丁胺	butylamine	1281
2-丁胺	2-butylamine	1291
1-丁基四氢- $\beta$ -咔啉	1-butyltetrahydro- $\beta$ -carboline	2159
丁基戊基醚	butylpentyl ether	521
<i>N</i> -丁基吡咯	<i>N</i> -butylpyrrole	1482
<i>N</i> -丁基苯胺	<i>N</i> -butylaniline	1405
丁基肼	butylhydrazine	1023
1-丁烯	1-butene	66
2-丁烯	2-butene	69
丁烯二腈	butenedinitrile	1054
丁烯二酸内酰胺	butenedioic lactam	877
丁烯二酸酐	butenedioic anhydride	814



2-丁烯-1,4-二醇	2-buten-1,4-diol	385
3-丁烯-2-酮	3-buten-2-one	626
2-丁烯酸	2-butenic acid	738
3-丁烯酸	3-butenic acid	739
2-丁烯-1-醇	2-buten-1-ol	383
3-丁烯-2-醇	3-buten-2-ol	384
2-丁烯醛	2-butenal	567
丁烷	butane	4
丁硫醇	butanthiol	1959
2-丁硫醇	2-butanthiol	1961
2-丁酮	2-butanone	625
丁酰胺	butanamide	834
丁酸	butanoic acid	718
丁酸丙酯	propyl butanoate	938
丁酸甲酯	methyl butanoate	891
1-丁醇	1-butanol	346
2-丁醇	2-butanol	368
丁醛	butanal	551
丁醛肟	butanal oxime	1915
儿茶精四甲醚	catechin tetramethyl ether	2366
2,2-二乙氧基乙基苯	2,2-diethoxyethylbenzene	620
1,1-二乙氧基丁烷	1,1-diethoxybutane	613
1,1-二乙氧基-2-己烯	1,1-diethoxy-2-hexene	619
1,1-二乙氧基壬烷	1,1-diethoxynonane	617
1,1-二乙氧基戊烷	1,1-diethoxypentane	614
1,1-二乙氧基辛烷	1,1-diethoxyoctane	616
1,1-二乙氧基庚烷	1,1-diethoxyheptane	615
二乙胺	diethylamine	1295
2,6-二乙基-3,5-二甲基-4-吡喃酮	2,6-diethyl-3,5-dimethylpyran-4-one	1198
<i>N,N'</i> -二乙基对苯二胺	<i>N,N'</i> -diethyl- <i>p</i> -benzenediamine	1420
<i>N,N</i> -二乙基甲酰胺	<i>N,N</i> -diethylformamide	840
2,5-二乙基四氢呋喃	2,5-diethyltetrahydrofuran	1121
3,3-二乙基戊烷	3,3-diethylpentane	34
<i>N,N</i> -二乙基肉桂酰胺	<i>N,N</i> -diethylcinnamamide	857
2,6-二乙基吡嗪	2,6-diethylpyrazine	1743
<i>N,N</i> -二乙基苯胺	<i>N,N</i> -diethylaniline	1404
2,6-二乙基苯胺	2,6-diethylaniline	1351
<i>N,N'</i> -二乙基硫脲	<i>N,N'</i> -diethylthiourea	1994
1,1-二乙基肼	1,1-diethylhydrazine	1024
1,2-二乙基肼	1,2-diethylhydrazine	1025
二乙基硫醚	diethyl sulfide	1972
二乙基膦	diethylphosphine	2086
1,3-二乙烯基苯	1,3-diethenylbenzene	163
二乙烯基硫醚	diethenyl sulfide	1979
二乙烯醚	diethenyl ether	522
二乙硫基甲烷	diethylthiomethane	1983
二乙腈胺	2,2'-iminobisacetonitrile	1057

- 二乙醚(乙醚) diethyl ether(ether) 513
- 二丁基硫醚 dibutyl sulfide 1975
- 二丁醚 dibutyl ether 519
- 二十一烷 heneicosane 18
- 二十一酸 heneicosanoic acid 733
- 二十一酸甲酯 methyl heneicosanoate 905
- 二十八烷 octacosane 24
- 二十二烷 docosane 19
- 1-二十二烯 1-docosene 89
- 1-二十二醇 1-docosanol 360
- 二十九烷 nonacosane 25
- 二十三烷 tricosane 20
- 1-二十三醇 1-tricosanol 361
- 二十三酸甲酯 methyl tricosanoate 907
- 二十六烷 hexacosane 23
- 1-二十六醇 1-hexacosanol 363
- 二十五烷 pentacosane 22
- 二十五酸甲酯 methyl pentacosanoate 909
- 二十四烷 tetracosane 21
- 二十四酸甲酯 methyl tetracosanoate 908
- 1-二十四醇 1-tetracosanol 362
- 1-二十烯 1-eicosene 88
- 二十烷 eicosane 17
- 1-二十醇 1-eicosanol 359
- 2-二十醇 2-eicosanol 373
- 1,1-二丙氧基丙烷 1,1-dipropoxypropane 621
- 二丙胺 dipropylamine 1299
- 2-二丙烯胺 2-dipropenylamine 1302
- 1,1'-二丙烯基醚 1,1'-dipropenyl ether 523
- 二丙基硫醚 dipropyl sulfide 1974
- 二丙醚 dipropyl ether 516
- 二甲亚砜 dimethyl sulfoxide 2006
- 二甲氧基乙烷 dimethoxyethane 610
- 1,2-二甲氧基乙烷 1,2-dimethoxyethane 529
- 6,7-二甲氧基-2,2-二甲基色烯 6,7-dimethoxy-2,2-dimethylchromene 2440
- 3',7-二甲氧基-4',5-二羟基黄酮 3',7-dimethoxy-4',5-dihydroxyflavone 2276
- 1,1-二甲氧基十二烷 1,1-dimethoxydodecane 612
- 2,3-二甲氧基-5-甲基对苯醌 2,3-dimethoxy-5-methyl-*p*-benzoquinone 2471
- 二甲氧基甲烷 dimethoxymethane 608
- 7,8-二甲氧基-2,3-亚甲二氧基苯并[*c*]菲啉 7,8-dimethoxy-2,3-methylenedioxybenzo[*c*]phenanthridine 2247
- 6,7-二甲氧基异黄酮 6,7-dimethoxyisoflavone 2326
- 3,4-二甲氧基苯甲酸甲酯 methyl-3,4-dimethoxybenzoate 968
- 3,5-二甲氧基苯甲酸甲酯 methyl-3,5-dimethoxybenzoate 969
- 2,4-二甲氧基苯胺 2,4-dimethoxyaniline 1358
- 3,4-二甲氧基苯胺 3,4-dimethoxyaniline 1359
- 1,1-二甲氧基庚烷 1,1-dimethoxyheptane 611
- 5,7-二甲氧基香豆精 5,7-dimethoxycoumarin 2390

- 5,7-二甲氧基黄酮 5,7-dimethoxyflavanone 2320
- 5,7-二甲氧基黄酮 5,7-dimethoxyflavone 2280
- 4',7-二甲氧基-5-羟基黄酮 4',7-dimethoxy-5-hydroxyflavone 2275
- 5,8-二甲氧基萘醌 5,8-dimethoxynaphthoquinone 2491
- 16,17-二甲氧基斯皮加济定 16,17-dimethoxyspegazzinidine 2117
- 1,5-二甲氧基蒽醌 1,5-dimethoxyanthraquinone 2516
- 1,8-二甲氧基蒽醌 1,8-dimethoxyanthraquinone 2517
- 二甲胺 dimethylamine 1294
- 20-二甲氨基-5 $\alpha$ -孕甾烷 20-dimethylamino-5 $\alpha$ -pregnane 2251
- 4-二甲氨基吡啶 4-dimethylaminopyridine 1516
- 2-二甲氨基嘧啶 2-dimethylamropyrimidine 1719
- N,N'*-二甲基-1,2-乙二胺 *N,N'*-dimethyl-1,2-ethanediamine 1322
- 二甲基乙胺 dimethylethylamine 1307
- 2,4-二甲基-3-乙基吡咯 2,4-dimethyl-3-ethylpyrrole 1479
- 2,5-二甲基-3-乙基吡咯 2,5-dimethyl-3-ethylpyrrole 1480
- 3,5-二甲基-1-乙基吡咯 3,5-dimethyl-1-ethylpyrazole 1576
- 1,4-二甲基-3-乙基吡唑啉 1,4-dimethyl-3-ethylpyrazoline 1593
- 1,4-二甲基-5-乙基吡唑啉 1,4-dimethyl-5-ethylpyrazoline 1595
- 2,3-二甲基-1,3-丁二烯 2,3-dimethylbuta-1,3-diene 81
- 3,3-二甲基丁内脂 3,3-dimethylbutyrolactone 1074
- 2,3-二甲基-2-丁烯 2,3-dimethylbut-2-ene 73
- 2,3-二甲基丁烯二酸酐 2,3-dimethylbutenedioic anhydride 815
- 2,3-二甲基丁烷 2,3-dimethylbutane 33
- 2,6-二甲基-3,5-二乙酰基-4-吡喃酮 2,6-dimethyl-3,5-diacetylpyran-4-one 1199
- 2,5-二甲基-3,6-二甲氧基对苯醌 2,5-dimethyl-3,6-dimethoxy-*p*-benzoquinone 2472
- 3,6-二甲基-4,5-二氮-1,2,4,5-四嗪 3,6-dimethyl-4,5-dihydro-1,2,4,5-tetrazine 1774
- 2,5-二甲基-2,5-二氢呋喃 2,5-dimethyl-2,5-dihydrofuran 1130
- 3,4-二甲基-2,5-二氢呋喃 3,4-dimethyl-2,5-dihydrofuran 1131
- 1,2-二甲基-2,3-二氢吲哚 1,2-dimethyl-2,3-dihydroindole 1825
- 2,3-二甲基-3,4-二氢-4-嘧啶酮 2,3-dimethyl-3,4-dihydropyrimidin-4-one 1727
- 2,5-二甲基-1,4-二氧己环 2,5-dimethyl-1,4-dioxane 1169
- 2,6-二甲基-1,4-二氧己环 2,6-dimethyl-1,4-dioxane 1170
- 4,5-二甲基-1,3-二氧己烷 4,5-dimethyl-1,3-dioxane 1166
- 4,6-二甲基-1,3-二氧己烷 4,6-dimethyl-1,3-dioxane 1167
- 2,2-二甲基-1,3-二氧戊烷 2,2-dimethyl-1,3-dioxolane 1156
- 1,3-二甲基-2,4-二氧基-1,2,3,4-四氢嘧啶 1,3-dimethyl-2,4-dioxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine 1729
- 二甲基七叶内脂 dimethylaesculetin 2389
- 4,6-二甲基己二烯内脂 4,6-dimethylhexadienyrolactone 1103
- 3,5-二甲基己内脂 3,5-dimethylhexyrolactone 1095
- 3,6-二甲基己内脂 3,6-dimethylhexyrolactone 1096
- 6,6-二甲基己内脂 6,6-dimethylhexyrolactone 1097
- 5,5'-二甲基-2,2'-双呋喃甲烷 5,5'-dimethyl-2,2'-bis(furanyl)methane 1143
- 二甲基丙二腈 dimethylpropanedinitrile 1051
- 二甲基丙胺 dimethylpropylamine 1310
- 2,2-二甲基丙烷 2,2-dimethylpropane 31
- N,N*-二甲基对苯二胺 *N,N*-dimethyl-*p*-benzenediamine 1419
- 2,3-二甲基对苯醌 2,3-dimethyl-*p*-benzoquinone 2458

2,5-二甲基对苯醌	2,5-dimethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2459
2,6-二甲基对苯醌	2,6-dimethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2460
1,3-二甲基-5-甲氧基吡唑	1,3-dimethyl-5-methoxypyrazole	1577
<i>N</i> <sub>a</sub> , <i>N</i> <sub>b</sub> -二甲基-6-甲氧基四氢-β-吡啶	<i>N</i> <sub>a</sub> , <i>N</i> <sub>b</sub> -dimethyl-6-methoxytetrahydro-β-carboline	2161
二甲基甲硅烷	dimethylsilicane	2075
2- <i>N</i> -二甲基-3,4-去氧哌啶	2- <i>N</i> -dimethyl-3,4-dehydropiperidine	1464
1,2-二甲基四氢异喹啉	1,2-dimethyltetrahydroisoquinoline	2186
2,4-二甲基四氢呋喃	2,4-dimethyltetrahydrofuran	1116
2,5-二甲基四氢呋喃	2,5-dimethyltetrahydrofuran	1117
3,4-二甲基四氢呋喃	3,4-dimethyltetrahydrofuran	1118
3,6-二甲基-1,2,3,4-四氢-1,2,4,5-四嗪	3,6-dimethyl-1,2,3,4-tetrahydro-1,2,4,5-tetrazine	1775
1,4-二甲基-1,2,3,4-四氢萘	1,4-dimethyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	182
1,5-二甲基-1,2,3,4-四氢萘	1,5-dimethyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	183
2,3-二甲基-1,2,3,4-四氢萘	2,3-dimethyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	184
1,5-二甲基四唑	1,5-dimethyltetrazole	1659
2,5-二甲基四唑	2,5-dimethyltetrazole	1660
3,6-二甲基-1,2,4,5-四嗪	3,6-dimethyl-1,2,4,5-tetrazine	1773
<i>N</i> ,3-二甲基戊二烯酸内酰胺	<i>N</i> ,3-dimethylpentadienoic lactam	873
<i>N</i> ,4-二甲基戊二烯酸内酰胺	<i>N</i> ,4-dimethylpentadienoic lactam	874
<i>N</i> ,5-二甲基戊二烯酸内酰胺	<i>N</i> ,5-dimethylpentadienoic lactam	875
3,5-二甲基戊内酯	3,5-dimethylpentyrolactone	1078
1,4-二甲基戊内酯	1,4-dimethylpentyrolactone	1079
4,5-二甲基戊内酯	4,5-dimethylpentyrolactone	1080
5,5-二甲基戊内酯	5,5-dimethylpentyrolactone	1081
5,5-二甲基-3-戊烯内酯	5,5-dimethyl-3-pentenylolactone	1088
二甲基吗啡	dimethylmorphine	2221
<i>N</i> , <i>N</i> -二甲基色氨酸甲酯	<i>N</i> , <i>N</i> -dimethyltryptophan methyl ester	3000
2,2-二甲基色烯	2,2-dimethylchromene	2439
2,2-二甲基色烷	2,2-dimethylchromane	2438
7,7-二甲基-3-亚甲基双环[3.1.1]庚烷	7,7-dimethyl-3-methylenebicyclo[3.1.1]heptane	2772
2,5-二甲基- <i>N</i> -亚硝基吡咯烷	2,5-dimethyl- <i>N</i> -nitrosopyrrolidine	1272
二甲基异丙胺	dimethylisopropylamine	1311
3,5-二甲基异噁唑	3,5-dimethylisoxazole	1671
3,4-二甲基异噻唑	3,4-dimethylisothiazole	2056
3,5-二甲基异噻唑	3,5-dimethylisothiazole	2057
4,5-二甲基异噻唑	4,5-dimethylisothiazole	2058
3,4-二甲基苄基氯	3,4-dimethylbenzyl chloride	337
3,5-二甲基苄醇	3,5-dimethylbenzenemethanol	413
2,5-二甲基呋喃	2,5-dimethylfuran	1135
1,3-二甲基吲哚	1,3-dimethylindole	1805
1,4-二甲基吲哚	1,4-dimethylindole	1806
1,7-二甲基吲哚	1,7-dimethylindole	1807
2,3-二甲基吲哚	2,3-dimethylindole	1808
2,5-二甲基吲哚	2,5-dimethylindole	1809
2,6-二甲基吲哚	2,6-dimethylindole	1810
5,7-二甲基吲哚	5,7-dimethylindole	1811
4,5-二甲基间苯二酚	4,5-dimethylresorcinol	450

2,3-二甲基吡咯	2,3-dimethylpyrrole	1472
2,4-二甲基吡咯	2,4-dimethylpyrrole	1473
2,5-二甲基吡咯	2,5-dimethylpyrrole	1474
1,3-二甲基吡唑	1,3-dimethylpyrazole	1572
1,5-二甲基吡唑	1,5-dimethylpyrazole	1573
3,5-二甲基吡唑	3,5-dimethylpyrazole	1574
1,5-二甲基吡唑啉	1,5-dimethylpyrazoline	1585
4,5-二甲基吡唑啉	4,5-dimethylpyrazoline	1586
5,5-二甲基吡唑啉	5,5-dimethylpyrazoline	1587
1,4-二甲基-5-吡唑啉酮	1,4-dimethylpyrazolin-5-one	1599
2,3-二甲基吡啶	2,3-dimethylpyridine	1490
2,4-二甲基吡啶	2,4-dimethylpyridine	1491
2,5-二甲基吡啶	2,5-dimethylpyridine	1492
2,6-二甲基吡啶	2,6-dimethylpyridine	1493
3,4-二甲基吡啶	3,4-dimethylpyridine	1494
3,5-二甲基吡啶	3,5-dimethylpyridine	1495
2,6-二甲基-4-吡喃酮	2,6-dimethyl-4-pyranone	1191
3,5-二甲基-4-吡喃酮	3,5-dimethyl-4-pyranone	1192
2,3-二甲基吡嗪	2,3-dimethylpyrazine	1734
2,5-二甲基吡嗪	2,5-dimethylpyrazine	1735
2,6-二甲基吡嗪	2,6-dimethylpyrazine	1736
2,7-二甲基辛烷	2,7-dimethyloctane	39
4,5-二甲基辛烷	4,5-dimethyloctane	40
2,4-二甲基苯甲醛	2,4-dimethylbenzaldehyde	577
2,5-二甲基苯甲醛	2,5-dimethylbenzaldehyde	578
3,4-二甲基苯甲醛	3,4-dimethylbenzaldehyde	579
4,7-二甲基苯并呋喃	4,7-dimethylbenzofuran	1181
2,3-二甲基苯胺	2,3-dimethylaniline	1340
2,4-二甲基苯胺	2,4-dimethylaniline	1341
2,5-二甲基苯胺	2,5-dimethylaniline	1343
2,6-二甲基苯胺	2,6-dimethylaniline	1342
3,4-二甲基苯胺	3,4-dimethylaniline	1344
3,5-二甲基苯胺	3,5-dimethylaniline	1345
<i>N,N</i> -二甲基苯胺	<i>N,N</i> -dimethylaniline	1399
2- <i>N</i> -二甲基苯胺	2- <i>N</i> -dimethylaniline	1400
3- <i>N</i> -二甲基苯胺	3- <i>N</i> -dimethylaniline	1401
4- <i>N</i> -二甲基苯胺	4- <i>N</i> -dimethylaniline	1402
2,3-二甲基苯酚	2,3-dimethylphenol	429
2,4-二甲基苯酚	2,4-dimethylphenol	430
2,5-二甲基苯酚	2,5-dimethylphenol	431
2,6-二甲基苯酚	2,6-dimethylphenol	432
3,4-二甲基苯酚	3,4-dimethylphenol	433
3,5-二甲基苯酚	3,5-dimethylphenol	434
2,2-二甲基环丁酮	2,2-dimethylcyclobutanone	655
2,3-二甲基环丁酮	2,3-dimethylcyclobutanone	656
2,4-二甲基环丁酮	2,4-dimethylcyclobutanone	657
3,3-二甲基环丁酮	3,3-dimethylcyclobutanone	658

5,6-二甲基-1,3-环己二烯	5,6-dimethylcyclohexa-1,3-diene	112
2,2-二甲基-1,3-环己二酮	2,2-dimethylcyclohexa-1,3-dione	694
5,5-二甲基-1,3-环己二酮	5,5-dimethylcyclohexa-1,3-dione	695
<i>N,N</i> -二甲基环己胺	<i>N,N</i> -dimethylcyclohexanamine	1331
1,1-二甲基环己烷	1,1-dimethylcyclohexane	54
1,2-二甲基环己烷	1,2-dimethylcyclohexane	55
1,3-二甲基环己烷	1,3-dimethylcyclohexane	56
1,4-二甲基环己烷	1,4-dimethylcyclohexane	57
2,6-二甲基环己酮	2,6-dimethylcyclohexanone	680
3,5-二甲基-2-环己烯酮	3,5-dimethyl-2-cyclohexenone	686
4,4-二甲基-2-环己烯酮	4,4-dimethyl-2-cyclohexenone	687
4,5-二甲基-2-环己烯酮	4,5-dimethyl-2-cyclohexenone	688
2,6-二甲基环己醇	2,6-dimethylcyclohexanol	398
3,5-二甲基环己醇	3,5-dimethylcyclohexanol	399
1,1-二甲基环丙烷	1,1-dimethylcyclopropane	43
1,2-二甲基环戊二烯	1,2-dimethylcyclopentadiene	102
5,5-二甲基环戊二烯	5,5-dimethylcyclopentadiene	103
2,2-二甲基-1,3-环戊二酮	2,2-dimethyl-1,3-cyclopentanedione	673
4,5-二甲基-1,3-环戊二酮	4,5-dimethyl-1,3-cyclopentanedione	674
1,5-二甲基环戊烯	1,5-dimethylcyclopentene	95
4,4-二甲基环戊烯	4,4-dimethylcyclopentene	96
1,1-二甲基环戊烷	1,1-dimethylcyclopentane	49
1,2-二甲基环戊烷	1,2-dimethylcyclopentane	50
1,3-二甲基环戊烷	1,3-dimethylcyclopentane	48
1,2-二甲基环氧乙烷	1,2-dimethyloxirane	1108
2,2-二甲基环氧乙烷	2,2-dimethyloxirane	1107
2,2-二甲基环氧丙烷	2,2-dimethyloxetane	1111
1,1-二甲基胍	1,1-dimethylhydrazine	1019
1,2-二甲基胍	1,2-dimethylhydrazine	1020
1,2-二甲基咪唑	1,2-dimethylimidazole	1608
2,5-二甲基咪唑	2,5-dimethylimidazole	1609
2,5-二甲基-2-咪唑啉	2,5-dimethyl-2-imidazoline	1624
2,6-二甲基哌啶	2,6-dimethylpiperidine	1448
3,5-二甲基哌啶	3,5-dimethylpiperidine	1449
1,4-二甲基哌嗪	1,4-dimethylpiperazine	1756
2,5-二甲基哌嗪	2,5-dimethylpiperazine	1757
2,6-二甲基哌嗪	2,6-dimethylpiperazine	1758
1,3-二甲基-2-氧基咪唑啉	1,3-dimethyl-2-oximidazolidine	1631
2,2-二甲基-1,3-氧硫杂环己烷	2,2-dimethyl-1,3-oxathiane	1952
2,6-二甲基-1,3-氧硫杂环己烷	2,6-dimethyl-1,3-oxathiane	1953
4,6-二甲基-1,3-氧硫杂环己烷	4,6-dimethyl-1,3-oxathiane	1954
2,4-二甲基-6-氨基吡啶	2,4-dimethyl-6-aminopyridine	1515
2,5-二甲基-4-氨基苯酚	2,5-dimethyl-4-aminophenol	490
2,6-二甲基-4-氨基嘧啶	2,6-dimethyl-4-aminopyrimidine	1705
2,3-二甲基萘醌	2,3-dimethylnaphthaquinone	2478
<i>N,N</i> -二甲基脲	<i>N,N</i> -dimethylurea	1910
<i>N,N'</i> -二甲基脲	<i>N,N'</i> -dimethylurea	1911

2,5-二甲基-7-羟基色酮	2,5-dimethyl-7-hydroxychromone	2448
2,N-二甲基-5-羟基哌啶	2,N-dimethyl-5-hydroxypiperidine	1459
4,N-二甲基-3-羟基哌啶	4,N-dimethyl-3-hydroxypiperidine	1460
2,6-二甲基-3-羟基-4-吡喃酮	2,6-dimethyl-3-hydroxypyran-4-one	1195
2,6-二甲基-4-羟基嘧啶	2,6-dimethyl-4-hydroxypyrimidine	1709
2,3-二甲基硫杂环丙烷	2,3-dimethylthiirane	1925
2,5-二甲基硫杂环戊烷	2,5-dimethylthiolane	1931
二甲基-1,2,5-噁二唑	dimethyl-1,2,5-oxodiazole	1676
2,4-二甲基噁唑	2,4-dimethyloxazole	1662
4,5-二甲基噁唑	4,5-dimethyloxazole	1663
2,4-二甲基噁唑啉	2,4-dimethyloxazolone	1665
2,5-二甲基噁唑啉	2,5-dimethyloxazoline	1667
1,2-二甲基蒽醌	1,2-dimethylanthraquinone	2503
1,4-二甲基蒽醌	1,4-dimethylanthraquinone	2504
2,3-二甲基蒽醌	2,3-dimethylanthraquinone	2505
2,4-二甲基嘧啶	2,4-dimethylpyrimidine	1690
4,5-二甲基嘧啶	4,5-dimethylpyrimidine	1691
4,6-二甲基嘧啶	4,6-dimethylpyrimidine	1692
2,3-二甲基噻吩	2,3-dimethylthiophene	2010
2,4-二甲基噻吩	2,4-dimethylthiophene	2011
2,5-二甲基噻吩	2,5-dimethylthiophene	2012
2,4-二甲基噻唑	2,4-dimethylthiazole	2037
2,5-二甲基噻唑	2,5-dimethylthiazole	2038
4,5-二甲基噻唑	4,5-dimethylthiazole	2039
O,O-二甲基箭毒碱(R,R)	O,O-dimethylcurine(R,R)	2191
2,2'-O-二甲基磷片酸二甲酯	dimethyl-2,2'-O-dimethylsquamatate	2952
1,2-二甲基硫乙烷	1,2-dimethylthioethane	1984
1,3-二甲基硫丙烷	1,3-dimethylthiopropane	1985
二甲硫醚	dimethyl sulfide	1970
二甲醚	dimethyl ether	511
二仲丁基硫醚	di-sec-butyl sulfide	1977
1,10-二去氢土青木香烷	1,10-didehydroaristolane	2826
N,N'-二亚硝基哌嗪	N,N'-dinitrosopiperazine	1277
二异丁基硫醚	diisobutyl sulfide	1976
二异己胺	diisohexylamine	1305
1,1-二异丙氧基乙烷	1,1-diisopropoxyethane	622
二异丙氧基甲烷	diisopropoxymethane	609
二异丙胺	diisopropylamine	1301
二异丙醚	diisopropyl ether	517
1,2-二亚甲基环丁烷	1,2-dimethylenecyclobutane	90
1,4-二亚甲基环己烷	1,4-dimethylenecyclohexane	106
5,5'-二呋喃-2,2'-二醛	5,5'-difuran-2,2'-dial	607
1,2-二呋喃基-2-乙二醇	1,2-difuranyl-2-glycol	380
二苯甲烷	diphenylmethane	190
二苯并并四苯	dibenzonaphthacene	213
二苯并[def,mno]蒽	dibenzo[def,mno]chrysene	206
三苯并[def,p]蒽	dibenzo[def,p]chrysene	214

二苯并[ <i>a,c</i> ]蒽	dibenzo[ <i>a,c</i> ]anthracene	208
二苯并[ <i>a,h</i> ]蒽	dibenzo[ <i>a,h</i> ]anthracene	210
2-二苯胺	2-diphenylamine	1431
3-二苯胺	3-diphenylamine	1430
4-二苯胺	4-diphenylamine	1429
1,2-二苯基-1,2-乙二胺	1,2-diphenyl-1,2-ethanediamine	1412
二苯基乙二酮	diphenylethanedione	712
1,2-二苯基乙二醇	1,2-diphenylglycol	418
1,2-二苯基乙烯	1,2-diphenylethene	192
1,2-二苯基乙烷	1,2-diphenylethane	191
1,2-二苯基胍	1,2-diphenylhydrazine	1033
二苯基硫醚	diphenyl sulfide	1982
二苯基膦	diphenylphosphine	2093
二苯酮	diphenylketone	711
二苯醚	diphenyl ether	543
二叔丁胺	di- <i>tert</i> -butylamine	1303
二叔丁酮	di- <i>tert</i> -butanone	634
二叔丁基硫醚	di- <i>tert</i> -butyl sulfide	1978
二叔丁醚	di- <i>tert</i> -butyl ether	520
二氟乙炔	difluoroethyne	287
1,1-二氟乙烯	1,1-difluoroethene	269
1,2-二氟乙烯	1,2-difluoroethene	270
1,1-二氟乙烷	1,1-difluoroethane	233
1,4-二氟-1,3-丁二炔	1,4-difluorobuta-1,3-diyne	288
1,3-二氟丙酮	1,3-difluoroacetone	650
二氟甲烷	difluoromethane	219
二氢丹参酮 I	dihydrotanshinone I	2526
二氢毛茛因	dihydrorhazinone	2163
7,8-二氢可待因	7,8-dihydrocodeine	2217
7,8-二氢可待因酮	7,8-dihydrocodeinone	2216
二氢尼罗宁	dihydroneonine	2210
二氢右松脂酸	dihydropimaric acid	2887
二氢吉泽林	dihydrogejerin	2412
7,8-二氢吗啡	7,8-dihydromorphine	2213
2,3-二氢他波素宁	2,3-dihydrotabersonine	2130
2,3-二氢色酮	2,3-dihydrochromone	2442
二氢沉香呋喃	dihydroagarofuran	2820
2,5-二氢呋喃	2,5-dihydrofuran	1125
二氢龙椒素	dihydrosuberosin	2411
2,3-二氢吲哚	2,3-dihydroindole	1823
16,17-二氢利血平灵	16,17-dihydroreserpiline	2174
2,5-二氢吡咯	2,5-dihydropyrrole	1441
二氢吡喃	dihydropyran	1148
二氢皂草黄酮	dihydrosaponaretin	2376
二氢苦地衣酸	dihydropicrolicenic acid	2950
2,3-二氢金合欢醇	2,3-dihydrofarnesol	2793
2,3-二氢蒎	2,3-dihydroindene	118



18,19-二氢钩吻绿碱	18,19-dihydrogelsevirine	2151
二氢藏茴香酮	dihydrocarvone	2687
二氢藏茴香醇	dihydrocarveol	2679
二氢柯楠因	dihydrocorynantheine	2168
二氢柯楠醇	dihydrocorynantheol	2164
二氢香豆精	dihydrocoumarin	2380
1,2-二氢萘	1,2-dihydronaphthalene	173
二氢奥索内酯	dihydroosthol	2410
二氢蓝萘林	dihydrofumariline	2192
二氢伞形花酮	dihydroumbellulone	2757
2,3-二氢噻吩	2,3-dihydrothiophene	1937
2,5-二氢噻吩	2,5-dihydrothiophene	1938
2,4-二氢-3-噻喃酮	2,4-dihydrothiopyran-3-one	1940
2,6-二氢-3-噻喃酮	2,6-dihydrothiopyran-3-one	1941
2,5-二氢-2-噻吩酮	2,5-dihydrothiophen-2-one	1939
22,N-二氢藜芦生碱	22,N-dihydroverazine	2259
1,4-二氧己环	1,4-dioxane	1168
1,3-二氧己烷	1,3-dioxane	1163
1,4-二氧化吡嗪	pyrazine 1,4-dioxide	1752
1,3-二氧戊环	1,3-dioxolane	1153
2,5-二氧基咪唑烷	2,5-dioxoimidazolidine	1629
4,5-二氨基-6-甲基嘧啶	4,5-diamino-6-methylpyrimidine	1707
2,6-二氨基吡嗪	2,6-diaminopyrazine	1750
2,3-二氨基吡啶	2,3-diaminopyridine	1534
2,6-二氨基吡啶	2,6-diaminopyridine	1535
3,4-二氨基吡啶	3,4-diaminopyridine	1536
3,5-二氨基苯甲酸	3,5-diaminobenzoic acid	772
2,6-二氨基-4-羟基嘧啶	2,6-diamino-4-hydroxypyrimidine	1717
2,4-二氨基嘧啶	2,4-diaminopyrimidine	1695
4,5-二氨基嘧啶	4,5-diaminopyrimidine	1696
1,4-二萘酚	1,4-naphthadiol	507
1,5-二萘酚	1,5-naphthadiol	508
2,4-二萘酚	2,4-naphthadiol	509
2,7-二萘酚	2,7-naphthadiol	510
2,5-二(4-羟基苯基)对苯醌	2,5-bis(4-hydroxyphenyl)- <i>p</i> -benzoquinone	2474
3,4-二羟基-3',4'-二甲氧基-6-甲基黄酮	3,4-dihydroxy-3',4'-dimethoxy-6-methylflavane	2364
3',7-二羟基-2',4'-二甲氧基黄酮	3',7-dihydroxy-2',4'-dimethoxyflavane	2362
4',5-二羟基-6,7-二甲氧基黄酮	4',5-dihydroxy-6,7-dimethoxyflavone	2287
5,7-二羟基-4',6-二甲氧基黄酮	5,7-dihydroxy-4',6-dimethoxyflavone	2286
2,5-二羟基-3,6-二甲基对苯醌	2,5-dihydroxy-3,6-dimethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2467
2,5-二羟基-3,6-二苯基对苯醌	2,5-dihydroxy-3,6-diphenyl- <i>p</i> -benzoquinone	2473
2',3'-二羟基二氢花椒素	2',3'-dihydroxydihydrosuberoin	2414
3,4-二羟基-4',7,8-三甲氧基黄酮	3,4-dihydroxy-4',7,8-trimethoxyflavane	2365
3,5-二羟基-6,7,8-三甲氧基黄酮	3,5-dihydroxy-6,7,8-trimethoxyflavone	2293
2,5-二羟基对苯醌	2,5-dihydroxy- <i>p</i> -benzoquinone	2463
2,6-二羟基对苯醌	2,6-dihydroxy- <i>p</i> -benzoquinone	2464
3,8-二羟基-1-甲氧基卞酮	3,8-dihydroxy-1-methoxyxanthone	2430

1,3-二羟基-6-甲氧基-8-甲基吡酮	1,3-dihydroxy-6-methoxy-8-methylxanthone	2432
1,6-二羟基-3-甲氧基-8-甲基吡酮	1,6-dihydroxy-3-methoxy-8-methylxanthone	2433
1,7-二羟基-5-甲氧基-8-异戊烯基黄酮	4,7-dihydroxy-5-methoxy-8-isopentenylflavanone	2322
2,4-二羟基-5-甲氧基查耳酮	2,4-dihydroxy-5-methoxychalcone	2349
2,6-二羟基-4-甲氧基查耳酮	2,6-dihydroxy-4-methoxychalcone	2348
1,5-二羟基-7-甲氧基黄酮	4',5-dihydroxy-7-methoxyflavone	2272
5,7-二羟基-6-甲氧基黄酮	5,7-dihydroxy-6-methoxyflavone	2283
3,6-二羟基-4-甲基吡嗪	3,6-dihydroxy-4-methylpyridazine	1682
1,5-二羟基-3-甲基蒽醌	1,5-dihydroxy-3-methylanthraquinone	2512
2,4-二羟基-5-甲基嘧啶	2,4-dihydroxy-5-methylpyrimidine	1712
2,4-二羟基-6-甲基嘧啶	2,4-dihydroxy-6-methylpyrimidine	1713
2,4-二羟基-5-甲酰基嘧啶	2,4-dihydroxy-5-formylpyrimidine	1720
3,4-二羟基-3',4',7,8-四甲氧基黄酮	3,4-dihydroxy-3',4',7,8-tetramethoxyflavone	2369
5,6-二羟基-3',4',7,8-四甲氧基黄酮	5,6-dihydroxy-3',4',7,8-tetramethoxyflavone	2295
5,7-二羟基异黄酮	5,7-dihydroxyisoflavone	2324
2,3-二羟基吡啶	2,3-dihydroxypyridine	1537
5,6-二羟基-5-环己烯-1,2,3,4-四酮	5,6-dihydroxy-5-cyclohexen-1,2,3,4-tetraone	696
1,5-二羟基-4-环戊烯-1,2,3-三酮	4,5-dihydroxy-4-cyclopenten-1,2,3-trione	678
2,3'-二羟基查耳酮	2,3'-dihydroxychalcone	2343
2,1'-二羟基查耳酮	2,4'-dihydroxychalcone	2344
3,6-二羟基吡嗪	3,6-dihydroxypyridazine	1681
3 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -二羟基-7-胆烯酸	3 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -dihydroxy-7-cholenic acid	2635
3 $\alpha$ ,5 $\alpha$ -二羟基胆烷酸	3 $\alpha$ ,5 $\alpha$ -dihydroxycholanic acid	2631
3 $\alpha$ ,7 $\beta$ -二羟基胆烷酸	3 $\alpha$ ,7 $\beta$ -dihydroxycholanic acid	2632
3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ -二羟基胆烷酸	3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ -dihydroxycholanic acid	2633
3 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -二羟基胆烷酸	3 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -dihydroxycholanic acid	2634
2,4-二羟基-5-氨基嘧啶	2,4-dihydroxy-5-aminopyrimidine	1718
1,4'-二羟基黄酮	4,4'-dihydroxyflavone	2360
1,7-二羟基黄酮	4,7-dihydroxyflavone	2359
2,5-二羟基萘醌	2,3-dihydroxynaphthaquinone	2481
2,5-二羟基萘醌	2,5-dihydroxynaphthaquinone	2482
5,7-二羟基萘醌	5,7-dihydroxynaphthaquinone	2486
5,8-二羟基萘醌	5,8-dihydroxynaphthaquinone	2487
3 $\beta$ ,17 $\alpha$ -二羟基雄甾-5-烯	3 $\beta$ ,17 $\alpha$ -dihydroxyandrost-5-ene	2562
3 $\beta$ ,17 $\beta$ -二羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷	3 $\beta$ ,17 $\beta$ -dihydroxy-5 $\alpha$ -androstane	2549
3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -二羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷	3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -dihydroxy-5 $\alpha$ -androstane	2551
3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -二羟基-5 $\beta$ -雄甾烷	3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -dihydroxy-5 $\beta$ -androstane	2552
3 $\beta$ ,11 $\beta$ -二羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷	3 $\beta$ ,11 $\beta$ -dihydroxy-5 $\alpha$ -androstane	2556
3,17 $\alpha$ -二羟基雌甾-1,3,5(10)-三烯	3,17 $\alpha$ -dihydroxycyestra-1,3,5(10)-triene	2569
1,4-二羟基蒽醌	1,4-dihydroxyanthraquinone	2507
2,5-二羟基蒽醌	2,5-dihydroxyanthraquinone	2508
1,8-二羟基蒽醌	1,8-dihydroxyanthraquinone	2509
3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -二羟基-5 $\alpha$ -雌甾烷	3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -dihydroxy-5 $\alpha$ -estrane	2564
2,1-二羟基嘧啶	2,1-dihydroxypyrimidine	1704
2 $\alpha$ ,19 $\alpha$ -二羟基熊果酸甲酯	methyl-2 $\alpha$ ,19 $\alpha$ -dihydroxyursolate	2928
3,3'-烯丙基醚	3,3'-diallyl ether	525
二联苯	diphenylene	185

二硫代乙酸	dithioacetic acid	1997
二硫代草酰胺	dithiooxalamide	1998
1,2-二硫杂环己烷	1,2-dithiane	1945
1,3-二硫杂环己烷	1,3-dithiane	1946
1,4-二硫杂环己烷	1,4-dithiane	1948
1,3-二硫杂环戊烷	1,3-dithiolane	1944
1,3-二硫杂-2-环戊硫酮	1,3-dithiolan-2-one	1943
二硫氰酸亚甲酯	methylene dithiocyanate	1002
二氯乙炔	dichloroethyne	289
1,1-二氯乙烯	1,1-dichloroethene	271
1,2-二氯乙烯	1,2-dichloroethene	272
1,1-二氯乙烷	1,1-dichloroethane	234
1,2-二氯乙烷	1,2-dichloroethane	236
3,5-二氯-2,4,2'-O-三甲基安济酸甲酯	methyl-3,5-dichloro-2,4,2'-O-trimethylanziate	2953
1,3-二氯丙酮	1,3-dichloroacetone	651
2,6-二氯对苯二胺	2,6-dichloro- <i>p</i> -benzenediamine	1426
二氯甲烷	dichloromethane	220
1,5-二氯戊烷	1,5-dichloropentane	249
2,3-二氯吡啶	2,3-dichloropyridine	1550
2,5-二氯吡啶	2,5-dichloropyridine	1551
2,6-二氯吡啶	2,6-dichloropyridine	1552
3,5-二氯吡啶	3,5-dichloropyridine	1553
3,6-二氯哒嗪	3,6-dichloropyridazine	1683
2,3-二氯苯胺	2,3-dichloroaniline	1380
2,4-二氯苯胺	2,4-dichloroaniline	1381
2,5-二氯苯胺	2,5-dichloroaniline	1382
2,6-二氯苯胺	2,6-dichloroaniline	1383
3,4-二氯苯胺	3,4-dichloroaniline	1384
3,5-二氯苯胺	3,5-dichloroaniline	1385
2,3-二氯苯酚	2,3-dichlorophenol	464
2,4-二氯苯酚	2,4-dichlorophenol	465
2,5-二氯苯酚	2,5-dichlorophenol	466
2,6-二氯苯酚	2,6-dichlorophenol	467
3,4-二氯苯酚	3,4-dichlorophenol	468
3,5-二氯苯酚	3,5-dichlorophenol	469
2,4-二氯嘧啶	2,4-dichloropyrimidine	1723
4,6-二氯嘧啶	4,6-dichloropyrimidine	1724
2,4-二硝基-1,3,5-三甲苯	2,4-dinitro-1,3,5-trimethylbenzene	1249
2,3-二硝基甲苯	2,3-dinitrotoluene	1245
2,4-二硝基甲苯	2,4-dinitrotoluene	1246
2,5-二硝基甲苯	2,5-dinitrotoluene	1248
2,6-二硝基甲苯	2,6-dinitrotoluene	1247
3,4-二硝基甲苯	3,4-dinitrotoluene	1250
2,5-二硝基苯甲酸	2,5-dinitrobenzoic acid	1251
3,4-二硝基苯甲酸	3,4-dinitrobenzoic acid	1253
3,5-二硝基苯甲酸	3,5-dinitrobenzoic acid	1252
2,4-二硝基苯肼	2,4-dinitrophenylhydrazine	1032

2,4-二硝基苯胺	2,4-dinitroaniline	1254	
2,6-二硝基苯胺	2,6-dinitroaniline	1255	
3,5-二硝基苯胺	3,5-dinitroaniline	1256	
2,4-二硝基苯酚	2,4-dinitrophenol	494	
2,5-二硝基苯酚	2,5-dinitrophenol	495	
2,6-二硝基苯酚	2,6-dinitrophenol	496	
1,2-二硝基萘	1,2-dinitronaphthalene	1257	
1,4-二硝基萘	1,4-dinitronaphthalene	1258	
1,7-二硝基萘	1,7-dinitronaphthalene	1259	
2,3-二硝基萘	2,3-dinitronaphthalene	1260	
2,6-二硝基萘	2,6-dinitronaphthalene	1261	
2,7-二硝基萘	2,7-dinitronaphthalene	1262	
1,2-二碘乙烷	1,2-diiodoethane	238	
二碘甲烷	diiodomethane	222	
1,2-二溴乙烯	1,2-dibromoethene	273	
1,1-二溴乙烷	1,1-dibromoethane	235	
1,2-二溴乙烷	1,2-dibromoethane	237	
二溴乙酸	dibromoacetic acid	755	
1,4-二溴丁烷	1,4-dibromobutane	256	
1,3-二溴丙烷	1,3-dibromopropane	252	
1,3-二溴丙酮	1,3-dibromoacetone	652	
2,5-二溴甲苯	2,5-dibromotoluene	333	
3,5-二溴甲苯	3,5-dibromotoluene	334	
二溴甲烷	dibromomethane	221	
2,5-二溴吡啶	2,5-dibromopyridine	1557	
2,5-二溴苯胺	2,5-dibromoaniline	1387	
2,4-二溴苯酚	2,4-dibromophenol	470	
2,6-二溴苯酚	2,6-dibromophenol	471	
2,4-二溴苯胺	2,4-dibromoaniline	1386	
3',3'',3''',4',4'',5,5'',7,7''-九甲氧基-3-去氢-4,8''-双黄酮 biflavane	3',3'',3''',4',4'',5,5'',7,7''-nonamethoxy-3-dehydro-4,8''- biflavane	2371	
乃芙罗阿克亭	nephroarctin	2945	
3'',4',4'',5,5'',7,7''-七甲氧基-3,8''-双黄酮酮	3'',4',4'',5,5'',7,7''-heptamethoxy-3,8''-biflavanone	2337	
2-十一酮	undecan-2-one	641	
3-十一酮	undecan-3-one	642	
4-十一酮	undecan-4-one	643	
5-十一酮	undecan-5-one	644	
6-十一酮	undecan-6-one	645	
十一胺	undecanamine	1285	
十一烷二酸	undecanedioic acid	748	
十一酸	undecanoic acid	723	
十一酸乙酯	ethyl undecanoate	919	
1-十一醇	1-undecanol	351	
十一醛	undecanal	558	
十八烷	octadecane	15	
1-十八醇	1-octadecanol	358	
十八醛	octadecanal	561	

十二烷	dodecane	10	
十二烷二酸	dodecanedioic acid	749	
十二腈	dodecanenitrile	1044	
1-十二醇	1-dodecanol	352	
5-十二醇	5-dodecanol	371	
十九烷	nonadecane	16	
2-十九酮	nonadecan-2-one	646	
十九酸	nonadecanoic acid	731	
十九酸甲酯	methyl nonadecanoate	903	
十七胺	heptadecanamine	1287	
十七烷	heptadecane	14	
十七酸	heptadecanoic acid	729	
十七酸甲酯	methyl heptadecanoate	901	
1-十七醇	1-heptadecanol	357	
十三酸	tridecanoic acid	725	
十三酸甲酯	methyl tridecanoate	898	
1-十三醇	1-tridecanol	353	
1-十六烯	1-hexadecene	87	
十六烷	hexadecane	13	
1-十六醇	1-hexadecanol	356	
十六醛	hexadecanal	560	
十五烷	pentadecane	12	
十五酸	pentadecanoic acid	727	
十五酸甲酯	methyl pentadecanoate	900	
1-十五醇	1-pentadecanol	355	
十四胺	tetradecanamine	1286	
1-十四烯	1-tetradecene	86	
十四烷	tetradecane	11	
1-十四醇	1-tetradecanol	354	
2-十四醇	2-tetradecanol	372	
十四醛	tetradecanal	559	
十氢异喹啉	decahydroisoquinoline	1907	
十氢喹啉	decahydroquinoline	1891	

## 三划

大豆酮	davanone	2799	
大豆异黄酮	daidzein	2325	
大黄素二甲醚	emodin dimethyl ether	2520	
大黄素甲醚	physcion	2519	
GB 2	GB 2	2338	
广藿香烷	patchoulane	2859	
广藿香醇	patchouli alcohol	2830	
1,5-己二炔	1,5-hexadiyne	129	
2,4-己二烯	2,4-hexadiene	80	
3,5-己二烯内酯	3,5-hexadienyrolactone	1102	
己二烯-2,4-二酸	hexadiene-2-dioic acid	750	

2,4-己二烯-1-醇	hexa-2,4-dien-1-ol	386
己二腈	hexanedinitrile	1052
己二酸二乙酯	diethyl adipate	934
己二酸酐	adipic anhydride	816
1,3,5-己三烯	1,3,5-hexatriene	85
己内酯	hexyrolactone	1093
己胺	hexylamine	1283
1-己烯	1-hexene	68
2-己烯	2-hexene	71
3-己烯	3-hexene	72
3-己烯二腈	3-hexenedinitrile	1055
2-己烯醛	2-hexenal	568
己烷	hexane	6
己硫醇	hexanthiol	1964
己酸甲酯	methyl hexanoate	893
2-己酮	2-hexanone	629
3-己酮	3-hexanone	630
己酰胺	hexanamide	836
己酰氯	hexanoyl chloride	822
1-己醇	1-hexanol	348
己醛	hexanal	553
三乙胺	triethylamine	1309
1,3,5-三乙基-1,3,5-六氢三嗪	1,3,5-triethyl-1,3,5-hexahydrotriazine	1770
1,2,4-三乙基苯	1,2,4-triethylbenzene	149
1,3,5-三乙基苯	1,3,5-triethylbenzene	150
马尔民	marmine	2405
马鞭草烯酮	verbenone	2738
马鞭草烯醇	verbenol	2741
三乙基砷	triethylarsine	2094
三乙基铝	triethylaluminium	2073
三乙基锡	triethylstibine	2100
三乙基硼	triethylboron	2069
三乙基磷	triethylphosphine	2087
三丁胺	tributylamine	1315
1,3,5-三丁基苯	1,3,5-tributylbenzene	158
三十六烷	hexatriacontane	29
三十五烷	pentatriacontane	28
三十四烷	tetracontane	27
三十烷	triacontane	26
二十酸甲酯	methyl tricontanoate	911
三己胺	trihexylamine	1319
三丙胺	tripropylamine	1313
三丙基铝	tripropylaluminium	2074
三丙烯胺	tripropenylamine	1314
3,4,5-三甲氧基苯胺	3,4,5-trimethoxyaniline	1360
2,4,5-三甲氧基苯甲酸	2,4,5-trimethoxybenzoic acid	768
3',4',5'-三甲氧基-5,7-二羟基黄酮	3',4',5'-trimethoxy-5,7-dihydroxyflavone	2279

3',4',7-三甲氧基黄酮	3',4',7-trimethoxyflavone	2281
3,5,7-三甲氧基黄酮	3,5,7-trimethoxyflavone	2308
4',5,7-三甲氧基黄酮	4',5,7-trimethoxyflavone	2282
1,3,6-三甲氧基-8-甲基呋酮	1,3,6-trimethoxy-8-methylxanthone	2435
2,4,6-三甲氧基-1,3,5-三嗪	2,4,6-trimethoxy-1,3,5-triazine	1767
三甲胺	trimethylamine	1306
2,6,6-三甲基-2-乙炔基四氢吡喃	2,6,6-trimethyl-2-ethynyltetrahydropyran	2776
2,2,4-三甲基-1,3-二氧戊烷	2,2,4-trimethyl-1,3-dioxolane	1157
1,5,5-三甲基-2,4-二氧基咪唑烷	1,5,5-trimethyl-2,4-dioxoimidazolidine	1634
3,5,5-三甲基-2,4-二氧基咪唑烷	3,5,5-trimethyl-2,4-dioxoimidazolidine	1635
3,5,5-三甲基-3-己烯内酯	3,5,5-trimethyl-3-hexenyrolactone	1098
4,6,6-三甲基-3-己烯内酯	4,6,6-trimethyl-3-hexenyrolactone	1101
2,4,6-三甲基-1,3,5-三氧己环	2,4,6-trimethyl-1,3,5-trioxane	1175
1,3,5-三甲基-2,4,6-三氧基-1,3,5-六氢三嗪	1,3,5-trimethyl-2,4,6-trioxo-1,3,5-hexahydrotriazine	1771
2,4,6-三甲基-1,3,5-三嗪	2,4,6-trimethyl-1,3,5-triazine	1763
1,3,5-三甲基-1,3,5-六氢三嗪	1,3,5-trimethyl-1,3,5-hexahydrotriazine	1769
3,7,7-三甲基双环[3.1.1]-2-庚烯	3,7,7-trimethylbicyclo-[3.1.1]-2-heptene	2771
3,7,7-三甲基双环[3.1.1]-2-庚烷酮	3,7,7-trimethylbicyclo-[3.1.1]-2-heptanone	2770
2,3,5-三甲基对苯醌	2,3,5-trimethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2461
三甲基甲硅烷	trimethylsilane	2076
2,3,5-三甲基-2,3-去氢-1,4-二氧己环	2,3,5-trimethyl-2,3-dehydro-1,4-dioxane	1173
3,5,5-三甲基-3-戊烯内酯	3,5,5-trimethyl-3-pentenylolactone	1090
三甲基异噁唑	trimethylisoxazole	1672
1,3,5-三甲基吡唑	1,3,5-trimethylpyrazole	1575
1,3,4-三甲基吡唑啉	1,3,4-trimethylpyrazoline	1588
1,4,5-三甲基吡唑啉	1,4,5-trimethylpyrazoline	1589
3,4,5-三甲基吡唑啉	3,4,5-trimethylpyrazoline	1590
3,5,5-三甲基吡唑啉	3,5,5-trimethylpyrazoline	1591
1,2,5-三甲基-3-吡唑啉酮	1,2,5-trimethylpyrazolin-3-one	1601
1,3,4-三甲基-5-吡唑啉酮	1,3,4-trimethylpyrazolin-5-one	1602
4,4,5-三甲基-3-吡唑啉酮	4,4,5-trimethylpyrazolin-3-one	1603
2,3,5-三甲基吡啶	2,3,5-trimethylpyridine	1496
2,3,6-三甲基吡啶	2,3,6-trimethylpyridine	1497
2,3,6-三甲基吡啶	2,3,6-trimethylpyridine	1498
三甲基吡嗪	trimethylpyrazine	1737
1,2,3-三甲基苯	1,2,3-trimethylbenzene	136
1,2,4-三甲基苯	1,2,4-trimethylbenzene	137
1,3,5-三甲基苯	1,3,5-trimethylbenzene	138
2,4,6-三甲基苯甲酸	2,4,6-trimethylbenzoic acid	762
2,4,5-三甲基苯胺	2,4,5-trimethylaniline	1346
2,4,6-三甲基苯胺	2,4,6-trimethylaniline	1347
2,3,5-三甲基苯酚	2,3,5-trimethylphenol	435
2,4,5-三甲基苯酚	2,4,5-trimethylphenol	436
2,4,6-三甲基苯酚	2,4,6-trimethylphenol	437
3,4,5-三甲基苯酚	3,4,5-trimethylphenol	438
2,6,6-三甲基-1,3-环己二烯-1-甲醛	2,6,6-trimethyl-1,3-cyclohexadiene-1-formaldehyde	2775
3,4,4-三甲基-2,5-环己二烯酮	3,4,4-trimethyl-2,5-cyclohexadienone	689

2,6,6-三甲基-1-环己烯-1-甲醛	2,6,6-trimethyl-1-cyclohexene-1-formaldehyde	2773
2,6,6-三甲基-2-环己烯-1-甲醛	2,6,6-trimethyl-2-cyclohexene-1-formaldehyde	2774
1,2,3-三甲基环己烷	1,2,3-trimethylcyclohexane	58
1,2,4-三甲基环己烷	1,2,4-trimethylcyclohexane	59
1,3,5-三甲基环己烷	1,3,5-trimethylcyclohexane	60
2,2,6-三甲基环己酮	2,2,6-trimethylcyclohexanone	681
3,4,4-三甲基-2-环戊烯酮	3,4,4-trimethyl-2-cyclopentenone	670
2,3,4-三甲基环氧丙烷	2,3,4-trimethyloxetane	1112
2,6, <i>N</i> -三甲基哌啶	2,6, <i>N</i> -trimethylpiperidine	1450
1,2,4-三甲基哌嗪	1,2,4-trimethylpiperazine	1759
1,3,3-三甲基-2-氧化吲哚	1,3,3-trimethyl-2-oxyindole	1852
三甲基硅醚	trimethylsilyl ether	2081
1,3,6-三甲基萘	1,3,6-trimethylnaphthalene	168
1,4,5-三甲基萘	1,4,5-trimethylnaphthalene	169
1,4,6-三甲基萘	1,4,6-trimethylnaphthalene	170
1,6,7-三甲基萘	1,6,7-trimethylnaphthalene	171
2,3,6-三甲基萘	2,3,6-trimethylnaphthalene	172
2,3,6-三甲基萘醌	2,3,6-trimethylnaphthaquinone	2479
2,4,6-三甲基硝基苯	2,4,6-trimethylnitrobenzene	1209
三甲基锡	trimethylstibine	2099
三甲基噁唑	trimethyloxazole	1664
2,4,4-三甲基噁唑啉	2,4,4-trimethyloxazolne	1666
三甲基硼	trimethylboron	2068
2,3,4-三甲基噻吩	2,3,4-trimethylthiophene	2013
三甲基磷	trimethylphosphine	2085
三戊胺	tripentylamine	1318
三尖杉酯碱	harringtonine	2228
三异丁胺	trisobutylamine	1316
二异丙醇胺	trisopropanolylamine	1317
三苯胺	triphenylamine	1432
三苯基硼	triphenylboron	2072
三氟乙烯	trifluoroethene	274
1,1,1-三氟乙烷	1,1,1-trifluoroethane	239
三氟乙酸	trifluoroacetic acid	756
三氟乙醛	trifluoroacetaldehyde	562
3,3,3-三氟丙烯	3,3,3-trifluoropropene	285
三氟甲烷	trifluoromethane	225
1,3,5-三氧己环	1,3,5-trioxane	1174
2,4,6-三氨基-1,3,5-三嗪	2,4,6-triamino-1,3,5-triazine	1764
2,4,6-三氨基嘧啶	2,4,6-triaminopyrimidine	1715
4,5,6-三氨基嘧啶	4,5,6-triaminopyrimidine	1716
4',5,7-三羟基-3,3'-二甲氧基黄酮	4',5,7-trihydroxy-3,3'-dimethoxyflavone	2301
3',4',5-三羟基-3,7-二甲氧基黄酮	3',4',5-trihydroxy-3,7-dimethoxyflavone	2302
3,4',5-三羟基-3',7-二甲氧基黄酮	3,4',5-trihydroxy-3',7-dimethoxyflavone	2278
2,4,6-三羟基-1,3,5-三嗪	2,4,6-trihydroxy-1,3,5-triazine	1766
3,5,7-三羟基-4'-甲氧基黄酮	3,5,7-trihydroxy-4'-methoxyflavanone	2321
4',5,7-三羟基-6-甲氧基黄酮	4',5,7-trihydroxy-6-methoxyflavone	2285



1,3,8-三羟基-6-甲氧基蒽醌	1,3,8-trihydroxy-6-methoxyanthraquinone	2518
1,3,6-三羟基-8-甲基卟酮	1,3,6-trihydroxy-8-methylxanthone	2431
3 $\beta$ ,14,15 $\beta$ -三羟基-20(22)-卡烯内酯-19-醛	3 $\beta$ ,14,15 $\beta$ -trihydroxy-20(22)-cardenolide-19-al	2577
3',5,7-三羟基-4',5',6,8-四甲氧基黄酮	3',5,7-trihydroxy-4',5',6,8-tetramethoxyflavone	2297
2 $\alpha$ ,3 $\beta$ ,23-三羟基齐墩果-12-烯-28-酸甲酯	methyl 2 $\alpha$ ,3 $\beta$ ,23-trihydroxyolean-12-en-28-oate	2918
2 $\beta$ ,3 $\beta$ ,23-三羟基齐墩果-12-烯-28-酸甲酯	methyl 2 $\beta$ ,3 $\beta$ ,23-trihydroxyolean-12-en-28-oate	2919
1,3,8-三羟基卟酮	1,3,8-trihydroxyxanthone	2425
2,4,4'-三羟基查耳酮	2,4,4'-trihydroxychalcone	2345
3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -三羟基胆烷酸	3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -trihydroxycholanolic acid	2636
3,5,7-三羟基黄酮	3,5,7-trihydroxyflavone	2263
2,5,8-三羟基萘醌	2,5,8-trihydroxynaphthaquinone	2483
1,2,4-三羟基蒽醌	1,2,4-trihydroxyanthraquinone	2510
1,2,3-三氮唑	1,2,3-triazole	1636
1,2,4-三氮唑	1,2,4-triazole	1637
三硫化二甲基	dimethyl trisulfide	2066
1,2,4-三硫杂环戊烷	1,2,4-trithiolane	1949
1,3,5-三硫杂环己烷	1,3,5-trithiane	1950
三氯乙烯	trichloroethene	275
1,1,1-三氯乙烷	1,1,1-trichloroethane	240
1,1,2-三氯乙烷	1,1,2-trichloroethane	241
三氯乙酸	trichloroacetic acid	757
三氯乙酸甲酯	methyl trichloroacetate	915
三氯乙醛	trichloroacetaldehyde	563
2,4,6-三氯-1,3,5-三甲苯	2,4,6-trichloro-1,3,5-trimethylbenzene	335
三氯甲烷	trichloromethane	226
1,2,3-三氯苯	1,2,3-trichlorobenzene	307
1,2,4-三氯苯	1,2,4-trichlorobenzene	308
1,3,5-三氯苯	1,3,5-trichlorobenzene	309
2,3,4-三氯苯胺	2,3,4-trichloroaniline	1388
2,4,5-三氯苯胺	2,4,5-trichloroaniline	1389
2,4,6-三氯苯胺	2,4,6-trichloroaniline	1390
2,3,4-三氯苯酚	2,3,4-trichlorophenol	472
2,3,5-三氯苯酚	2,3,5-trichlorophenol	473
2,3,6-三氯苯酚	2,3,6-trichlorophenol	474
2,4,5-三氯苯酚	2,4,5-trichlorophenol	475
2,4,6-三氯苯酚	2,4,6-trichlorophenol	476
3,4,5-三氯苯酚	3,4,5-trichlorophenol	477
2,4,6-三氯嘧啶	2,4,6-trichloropyrimidine	1726
2,4,5-三硝基甲苯	2,4,5-trinitrotoluene	1263
2,4,6-三硝基甲苯	2,4,6-trinitrotoluene	1264
2,4,6-三硝基苯甲醛	2,4,6-trinitrobenzaldehyde	1265
2,4,6-三硝基苯胺	2,4,6-trinitroaniline	1266
2,4,6-三硝基苯酚	2,4,6-trinitrophenol	497
三碘甲烷	triiodomethane	228
三溴乙烯	tribromoethene	276
三溴乙醛	tribromoacetaldehyde	564
三溴甲烷	tribromomethane	227

1,2,4-三溴苯	1,2,4-tribromobenzene	310
1,3,5-三溴苯	1,3,5-tribromobenzene	311
2,4,6-三溴苯胺	2,4,6-tribromoaniline	1391
2,4,6-三溴苯酚	2,4,6-tribromophenol	478
1,2,4-三嗪	1,2,4-triazine	1762
1,3,5-三嗪	1,3,5-triazine	1761
山油荳碱	acronycine	2241
山柰酚	kaempferol	2265
山萘酸	beheric acid	734
山萘酸甲酯	methyl behenate	906
土米杜林	tumidulin	2947
上青木香柔酮	debilone	2828
上青木香酮	aristolone	2827

## 四划

丹参酮 I	tanshinone I	2525
反式-2,3-二氢金合欢醇	<i>trans</i> -2,3-dihydrofarnesol	2794
反式-6,7-二氢金合欢醇	<i>trans</i> -6,7-dihydrofarnesol	2790
反式十氢萘	<i>trans</i> -decahydronaphthalene	176
反式,反式-10,11-二氢金合欢醇	<i>trans,trans</i> -10,11-dihydrofarnesol	2792
反式,反式·金合欢醇	<i>trans,trans</i> -farnesal	2782
反式,反式·金合欢醇	<i>trans,trans</i> -farnesol	2786
反式,反式·金合欢烯酸甲酯	methyl <i>trans,trans</i> -farnesenate	2796
反式心竹烯	<i>trans</i> -caryophyllene	2860
反式罗勒烯	<i>trans</i> -ocimene	2637
反式松香芹醇	<i>trans</i> -pinocarveol	2740
$\alpha$ -反式- $\beta$ -香柠檬烯	$\alpha$ - <i>trans</i> - $\beta$ -bergamotene	2810
反式康明酸甲酯	methyl <i>trans</i> -communate	2877
反式辣薄荷醇	<i>trans</i> -piperitol	2667
反式-2,5-薄荷二烯-7-醇	<i>trans</i> -2,5-menthadien-7-ol	2708
反式薄荷-2-烯-7-醇	<i>trans</i> -menth-2-en-7-ol	2672
反式-8(10)-薄荷烯-9-醇	<i>trans</i> -8(10)-menthen-9-ol	2676
反式薄荷烷-1-醇	<i>trans</i> -menthan-1-ol	2651
反式薄荷烷-9-醇	<i>trans</i> -menthan-9-ol	2658
反式薄荷酮	<i>trans</i> -menthone	2649
反式藏茴香醇	<i>trans</i> -carveol	2704
六乙基苯	hexaethylbenzene	151
2',3',4',5,7,8-六甲氧基黄酮	2',3',4',5,7,8-hexamethoxyflavone	2298
3,3',4',5,5',7-六甲氧基黄酮	3,3',4',5,5',7-hexamethoxyflavone	2310
3,3',4',5,6,7-六甲氧基黄酮	3,3',4',5,6,7-hexamethoxyflavone	2311
1,2,3,4,5,6-六- $\alpha$ -甲基肌醇	1,2,3,4,5,6-hexa- $\alpha$ -methylinositol	527
六甲基苯	hexamethylbenzene	141
六氟乙烷	hexafluoroethane	246
六氟苯	hexafluorobenzene	293
4',1'',5,5'',7,7''-六羟基-3,3''-双黄酮	4',4'',5,5'',7,7''-hexahydroxy-3,3''-biflavone	2335
3,3',4',5,6,7-六羟基黄酮	3,3',4',5,6,7-hexahydroxyflavone	2267

六氯乙烷	hexachloroethane	247
六氯苯	hexachlorobenzene	316
1,2,3,4,5,6-六氯环己烷	1,2,3,4,5,6-hexachlorocyclohexane	265
毛茛藤酮	elliptone	2353
毛茛因	rhaznine	2162
$\beta$ -木兰烯	$\beta$ -maaliene	2829
内异茨烷酮	endo-isocamphanone	2767
日本蟾蜍甙元	gamabufotalin	2581
壬二酸	azelaic acid	746
壬二酸二甲酯	dimethyl azelaate	929
壬烷	nonane	8
壬硫醇	nonanthiol	1965
壬酸	nonanoic acid	721
壬酸乙酯	ethyl nonanoate	918
1-壬醇	1-nonanol	350
壬醛	nonanal	556
3,20-双乙酰氨基-18-羟基-5-孕甾烯	3,20-bisacetylamino-18-hydroxy-5-pregnene	2256
3,20-双二甲氨基-5-孕甾烯	3,20-bisdimethylamino-5-pregnene	2252
3,20-双二甲氨基-5 $\alpha$ -孕甾烷	3,20-bisdimethylamino-5 $\alpha$ -pregnane	2253
双水杨酸内酯	disalicylide	984
3,20-双甲氨基-5-孕甾烯	3,20-bismethylamino-5-pregnene	2254
3,20-双异丙亚氨基-18-羟基-5 $\alpha$ -孕甾烷	3,20-bis(isopropylimino)-18-hydroxy-5 $\alpha$ -pregnane	2257
双花醇	shuanghuaol	2777
双吡咯甲烷	bispyrrolmethane	1485
5,5'-双(2-羟基-3,6-二甲基)对苯醌	5,5' bis(2-hydroxy-3,6-dimethyl)- <i>p</i> -benzoquinone	2475
水杨酸	salicylic acid	763
水杨酸甲酯	methyl salicylate	961
水杨酸异丙酯	isopropyl salicylate	975
水杨酸酚酯	phenol salicylate	2943
DL-天冬氨酸	DL-aspartic acid	2992
L-天冬氨酸	L-aspartic acid	2991
文卡明	vincadifformine	2131
文卡明醇	vincaminol	2180
五乙氧基砷	pentaethoxyarsenic	2098
2',4',5',6,7-五甲氧基异黄酮	2',4',5',6,7-pentamethoxyisoflavone	2329
五甲氧基砷	pentamethoxyarsenic	2096
2',3,4',5,7-五甲氧基黄酮	2',3,4',5,7-pentamethoxyflavone	2307
五甲基苯胺	pentamethylaniline	1348
五氟甲苯	pentafluorotoluene	297
五氟吡啶	pentafluoropyridine	1543
五氟苯甲酰胺	pentafluorobenzamide	855
五氟苯肼	pentafluorophenylhydrazine	1028
五氟苯胺	pentafluoroaniline	1394
五氟苯酚	pentafluorophenol	482
五氟苯腈	pentafluorobenzonitrile	1063
五倍子酸	gallic acid	766
五倍子酸甲酯	methyl gallate	964

3,3',4',5,7-五羟基黄酮	3,3',4',5,7-pentahydroxyflavone	2361
3,3',4',5,7-五羟基黄酮酮	3,3',4',5,7-pentahydroxyflavanone	2316
1,3,5,7,9-五硫杂环癸烷	1,3,5,7,9-pentathiepane	1951
五氯吡啶	pentachloropyridine	1554
五氯苯	pentachlorobenzene	315
五氯苯酚	pentachlorophenol	483
月桂烯	myrcene	2638
月桂酸	lauric acid	724
月桂酸乙酯	ethyl laurate	920
月桂酸甲酯	methyl laurate	897
月桂酰胺	lauramide	837
扎西黄酮	jacedin	2294

## 五划

白坚木美定	aspidofractine	2141
白坚木明	aspidodispermine	2146
白坚木菲林	aspidofilin	2137
白坚木碱	aspidospermine	2112
白芷素	angelicin	2392
白金雀儿碱	lupanine	2244
白杨素	chrysin	2262
白斑网球花碱	alboinaculine	2207
$\beta$ -D-半乳吡喃糖五甲醚	$\beta$ -D-galactopyranose pentamethyl ether	2969
2,3,4,6 $\alpha$ -D-半乳吡喃糖四甲醚	2,3,4,6 $\alpha$ -D galactopyranose tetramethyl ether	2968
L-半胱氨酸	L-cysteine	2986
1,3-丙二胺	1,3-propanediamine	1324
丙二腈	propanedinitrile	1048
丙二酰胺	malonamide	843
丙二酸	malonic acid	741
丙二酸二乙酯	diethyl malonate	931
丙二酸二甲酯	dimethyl malonate	925
1,2-丙二醇	1,2-propanediol	377
1,3-丙二醇	1,3-propanediol	376
丙炔	propyne	124
丙胺	propylamine	1280
L-丙氨酸	L-alanine	2979
丙基丁基醚	propylbutyl ether	518
2-丙基-4-甲基呋喃	2-propyl-4-methylfuran	1138
1-丙基-3-甲基吡唑啉	1-propyl-3-methylpyrazoline	1597
5-丙基戊内酯	5-propylpentylolactone	1083
丙基异丙胺	propylisopropylamine	1300
5-丙基吡唑啉	5-propylpyrazoline	1596
丙基吡嗪	propylpyrazine	1745
4-丙基庚烷	4-propylheptane	41
2-丙基苯酚	2-propylphenol	443
丙基胍	propylhydrazine	1022

1-(2-丙烯基)咪唑	1-(2-propenyl)imidazole	1614
4-丙基哌啶	4-propylpiperidine	1452
2-丙基噻吩	2-propylthiophene	2016
丙烯	propene	65
2-丙烯胺	2-propenylamine	1289
丙烯酰胺	propenamide	841
丙烯酸	propenoic acid	737
丙烯酸甲酯	methyl propenoate	890
2-丙烯-1-醇	2-propen-1-ol	382
2-丙烯醛	2-propenal	565
丙烷	propane	3
丙腈	propanenitrile	1042
丙酰胺	propanamide	833
<i>N</i> <sub>3</sub> -丙酰基白坚米定	<i>N</i> <sub>3</sub> -propionylaspidospermidine	2109
<i>N</i> <sub>3</sub> -丙酰基-16-甲氧基-17-羟基白坚米定	<i>N</i> <sub>3</sub> -propionyl-16-methoxy-17-hydroxyaspidospermidine	2115
2-丙酰基呋喃	2-propionylfuran	1142
<i>N</i> -丙酰基吡咯烷	<i>N</i> -propionylpyrrolidine	1439
3-丙酰基吡啶	3-propionylpyridine	1541
丙酰氯	propionyl chloride	821
丙硫醇	propanthiol	1957
丙酸	propanoic acid	717
丙酸甲酯	methyl propionate	889
丙酸酐	propanoic acid anhydride	812
丙酸苯酚酯	phenol propionate	958
丙酮	acetone	624
丙酮肟	acetone oxime	1917
1-丙醇	1-propanol	345
2-丙醇	2-propanol	367
丙醛	propanal	549
长春胺	vircamine	2182
东莨菪内酯	scopoletin	2388
对乙基甲苯	<i>p</i> -ethyltoluene	145
对乙基苯乙酮	<i>p</i> -ethylacetophenone	701
对乙基苯甲醛	<i>p</i> -ethylbenzaldehyde	580
对乙基苯胺	<i>p</i> -ethylaniline	1350
对乙酰氧基苯甲酸	<i>p</i> -acetoxybenzoic acid	775
对乙酰氧基苯甲酸甲酯	methyl <i>p</i> -acetoxybenzoate	972
对乙酰基苯乙酮	<i>p</i> -acetylacetophenone	710
对乙酰基苯胺	<i>p</i> -acetylaniline	1369
对二乙基苯	<i>p</i> -diethylbenzene	148
对二甲苯	<i>p</i> -dimethylbenzene	135
对二甲氨基苄醇	<i>p</i> -dimethylaminobenzylalcohol	1397
对二甲氨基苯甲酸	<i>p</i> -dimethylaminobenzoic acid	774
对二甲氨基苯甲醛	<i>p</i> -dimethylaminobenzaldehyde	599
对二异丙基苯	<i>p</i> -diisopropylbenzene	154
对二氯对苯二酚	<i>p</i> -dichlorohydroquinone	485
对二氯苯	<i>p</i> -dichlorobenzene	303

对二硝基苯	<i>p</i> -dinitrobenzene	1244
对二溴苯	<i>p</i> -dibromobenzene	306
对甲氧基苯乙酮	<i>p</i> -methoxyacetophenone	707
对甲氧基苯甲酸	<i>p</i> -methoxybenzoic acid	767
对甲氧基苯甲酸乙酯	ethyl <i>p</i> -methoxybenzoate	974
对甲氧基苯甲醛	<i>p</i> -methoxybenzaldehyde	586
对甲氧基苯胺	<i>p</i> -methoxyaniline	1357
对甲氧基苯酚	<i>p</i> -methoxyphenol	453
对甲氧基茴香醚	<i>p</i> -methoxyanisole	542
对甲氧基硝基苯	<i>p</i> -methoxynitrobenzene	1212
对甲基乙酰苯胺	<i>p</i> -methylacetylaniline	861
对甲基异氰基苯	<i>p</i> -methylisocyanobenzene	1072
对甲基苄胺	<i>p</i> -methylbenzylamine	1410
对甲基苯乙酮	<i>p</i> -methylacetophenone	700
对甲基苯甲酸	<i>p</i> -methylbenzoic acid	761
对甲基苯甲酰胺	<i>p</i> -methylbenzamide	849
对甲基苯甲醛	<i>p</i> -methylbenzaldehyde	576
对甲基苯胺	<i>p</i> -methylaniline	1339
对甲基苯酚	<i>p</i> -methylphenol	428
对甲基苯基乙基醚	<i>p</i> -methylphenylethyl ether	538
对甲基苯硫酚	<i>p</i> -methylthiophenol	1989
对甲基苯腈	<i>p</i> -methylbenzonitrile	1062
对甲基茴香醚	<i>p</i> -methylanisole	535
对甲基硫代苯甲酸甲酯	methyl <i>p</i> -methylthiobenzoate	2002
对亚硝基苯酚	<i>p</i> -nitrosophenol	498
对异丙基苯醇	<i>p</i> -isopropylbenzylalcohol	2713
对异丙基苯甲醛	<i>p</i> -isopropylbenzaldehyde	2712
对苯二甲酸	<i>p</i> -phthalic acid	785
对苯二甲酸二乙酯	diethyl <i>p</i> -phthalate	982
对苯二甲酸二甲酯	dimethyl <i>p</i> -phthalate	980
对苯二甲酸单甲酯	monomethyl <i>p</i> -phthalate	977
对苯二胺	<i>p</i> -benzenediamine	1415
对苯二酚	hydroquinone	422
对苯二酚二乙酸酯	hydroquinone diacetate	956
对苯二甲醛	<i>p</i> -benzadial	602
对苯二腈	<i>p</i> -benzodinitrile	1066
对苯二酰氯	<i>p</i> -phthalyl dichloride	829
对苯醌	<i>p</i> -benzoquinone	2456
对氟甲苯	<i>p</i> -flurotoluene	296
对氟苯甲酸	<i>p</i> -fluorobenzoic acid	792
对氟苯甲醛	<i>p</i> -fluorobenzaldehyde	594
对氟苯胺	<i>p</i> -fluoroaniline	1373
对氟硝基苯	<i>p</i> -fluoronitrobenzene	1215
对氨基乙酰苯胺	<i>p</i> -aminoacetylaniline	863
对氨基苯醇	<i>p</i> -aminobenzylalcohol	1396
对氨基苯乙酸	<i>p</i> -aminophenylacetic acid	809
对氨基苯甲酸	<i>p</i> -aminobenzoic acid	771

对氨基苯甲酸甲酯	methyl <i>p</i> -aminobenzoate	966
对氨基苯甲酰胺	<i>p</i> -aminobenzamide	851
对羟基乙酰苯胺	<i>p</i> -hydroxyacetylaniline	867
对羟基苄醇	<i>p</i> -hydroxybenzenemethanol	417
对羟基苯乙酸	<i>p</i> -hydroxyphenylacetic acid	808
对羟基苯甲酸	<i>p</i> -hydroxybenzoic acid	765
对羟基苯甲酸甲酯	methyl <i>p</i> -hydroxybenzoate	963
对羟基苯甲醛	<i>p</i> -hydroxybenzaldehyde	583
对羟基苯胺	<i>p</i> -hydroxyaniline	1354
对联三苯	<i>p</i> -terphenyl	195
对氯甲苯	<i>p</i> -chlorotoluene	322
对氯苯甲酸	<i>p</i> -chlorobenzoic acid	795
对氯苯甲酰胺	<i>p</i> -chlorobenzamide	854
对氯苯甲醛	<i>p</i> -chlorobenzaldehyde	597
对氯苯胺	<i>p</i> -chloroaniline	1376
对氯苯酚	<i>p</i> -chlorophenol	457
对硝基甲苯	<i>p</i> -nitrotoluene	1207
对硝基异丙苯	<i>p</i> -nitroisopropylbenzene	1208
对硝基苄醇	<i>p</i> -nitrobenzylalcohol	1218
对硝基苯乙酮	<i>p</i> -nitroacetophenone	1224
对硝基苯甲酰胺	<i>p</i> -nitrobenzamide	1231
对硝基苯甲酸	<i>p</i> -nitrobenzoic acid	1227
对硝基苯甲醛	<i>p</i> -nitrobenzaldehyde	1221
对硝基苯肼	<i>p</i> -nitrophenylhydrazine	1241
对硝基苯胺	<i>p</i> -nitroaniline	1234
对硝基苯酚	<i>p</i> -nitrophenol	493
对碘甲苯	<i>p</i> -iodotoluene	328
对碘苯甲酸	<i>p</i> -iodobenzoic acid	801
对碘苯胺	<i>p</i> -iodoaniline	1379
对碘苯酚	<i>p</i> -iodophenol	463
对溴甲苯	<i>p</i> -bromotoluene	325
对溴苯甲酸	<i>p</i> -bromobenzoic acid	798
对溴苯肼盐酸盐	<i>p</i> -bromophenylhydrazine hydrochloride	1030
对溴苯酚	<i>p</i> -bromophenol	460
对聚伞素	<i>p</i> -cymene	2711
甘油	glycerin	381
甘草查耳酮	licochalcone	2351
甘氨酸	glycine	2978
甘遂烷	tirucallane	2934
甘遂烷-3 $\beta$ -醇	tirucallan-3 $\beta$ -ol	2935
$\alpha$ -古芸烯	$\alpha$ -gurjunene	2853
$\gamma$ -古芸烯	$\gamma$ -gurjunene	2846
古佛武元	gompogenin	2572
甲乙丙胺	methylethylpropylamine	1312
甲苯	methylbenzene	132
10 $\alpha$ -甲氧基-8 $\alpha$ -二氢麦角酸甲酯	methyl 10 $\alpha$ -methoxy-8 $\alpha$ -dihydrolysergate	2101
10 $\beta$ -甲氧基-8 $\beta$ -二氢麦角酸甲酯	methyl 10 $\beta$ -methoxy-8 $\beta$ -dihydrolysergate	2102

10 $\beta$ -甲氧基-8 $\alpha$ -二氢麦角酸甲酯	methyl 10 $\beta$ -methoxy-8 $\alpha$ -dihydrolysergate	2103
2-甲氧基-5,6-二氢吡喃	2-methoxy-5,6-dihydropiran	1152
10-甲氧基二氢柯楠醇	10-methoxydihydrocorynantheol	2165
2'-甲氧基-5,7-二羟基黄酮	2'-methoxy-5,7-dihydroxyflavone	2274
2-甲氧基-5,8-二羟基萘醌	2-methoxy-5,8-dihydroxynaphthaquinone	2492
17-甲氧基白坚木茛宁	17-methoxyaspidofraetinine	2136
16-甲氧基白坚木碱	16-methoxyaspidospermine	2114
17-甲氧基白坚木定	17-methoxyaspidospermidine	2105
5-甲氧基白芷素	5-methoxyangelicin	2397
16-甲氧基米诺文西宁	16-methoxyminovincinine	2134
16-甲氧基米诺文辛	16-methoxyminovincine	2135
5-甲氧基-DL-色氨酸	5-methoxy-DL-tryptophan	2998
1-甲氧基吡酮	1-methoxyxanthone	2426
2-甲氧基吡酮	2-methoxyxanthone	2427
3-甲氧基吡酮	3-methoxyxanthone	2428
4-甲氧基吡酮	4-methoxyxanthone	2429
7-甲氧基异黄烷酮	7-methoxyisoflavanone	2334
2-甲氧基呋喃	2-methoxyfuran	1137
1-甲氧基吲哚	1-methoxyindole	1814
4-甲氧基吲哚	4-methoxyindole	1815
5-甲氧基吲哚	5-methoxyindole	1816
6-甲氧基吲哚	6-methoxyindole	1817
7-甲氧基吲哚	7-methoxyindole	1818
5-甲氧基-3-吲哚乙酸	5-methoxy-3-indoleacetic acid	1831
5-甲氧基-3-吲哚乙酸甲酯	methyl 5-methoxy-3-indoleacetate	1835
5-甲氧基-3-吲哚乙醇	5-methoxy-3-indoleethanol	1850
6-甲氧基-2-吲哚羧酸乙酯	ethyl 6-methoxy-2-indolecarboxylate	1853
3-甲氧基吡啶	3-methoxypyridine	1526
4-甲氧基吡啶	4-methoxypyridine	1527
甲氧基吡嗪	methoxypyrazine	1747
5-甲氧基苯并呋喃	5-methoxybenzofuran	1182
7-甲氧基苯并呋喃	7-methoxybenzofuran	1183
4-( <i>p</i> -甲氧基苯基)-3-丁烯-2-酮	4-( <i>p</i> -methoxyphenyl)-3-buten-2-one	708
4-甲氧基- $\beta$ -咔啉	4-methoxy- $\beta$ -carboline	2156
4-甲氧基查耳酮	4-methoxychalcone	2346
4'-甲氧基查耳酮	4'-methoxychalcone	2347
3-甲氧基吡嗪	3-methoxypyridazine	1680
3-甲氧基香豆酸	3-methoxycoumaric acid	781
4'-甲氧基黄烷酮	4'-methoxyflavanone	2319
2-甲氧基萘醌	2-methoxynaphthaquinone	2488
4'-甲氧基-5-羟基-7-甲基黄酮	4'-methoxy-5-hydroxy-7-methylflavone	2271
4'-甲氧基-7-羟基黄酮	4'-methoxy-7-hydroxyflavone	2269
2-甲氧基-8-羟基萘醌	2-methoxy-8-hydroxynaphthaquinone	2490
1-甲氧基-2-羟基蒽醌	1-methoxy-2-hydroxyanthraquinone	2514
3-甲氧基喹啉	3-methoxyquinoline	1876
17-甲氧基斯皮加济定	17-methoxyspegazzinidine	2116
11-甲氧基象牙酮宁	11-methoxyeburnamonone	2179



2-甲氧基腺苷	2-methoxyadenosine	2960
2-甲氧基嘧啶	2-methoxypyrimidine	1701
6-甲氧基嘌呤	6-methoxypurine	1785
1-甲氧羰基- $\beta$ -咔啉	1-methoxycarbonyl- $\beta$ -carboline	2157
2-甲氧羰基咪唑	2-methoxycarbonylimidazole	1618
5-甲氧羰基咪唑	5-methoxycarbonylimidazole	1619
2-甲氧基噻唑	2-methoxythiazole	2042
5-甲氧基噻唑	5-methoxythiazole	2043
2-甲氨基-6-羟基嘌呤	2-methylamino-6-hydroxypurine	1791
甲胺	methanamine	1278
<i>N</i> -甲基-1,2-乙二胺	<i>N</i> -methyl-1,2-ethanediamine	1321
1-甲基-4-乙基吡唑啉	1-methyl-4-ethylpyrazoline	1594
2-甲基-5-乙基吡啶	2-methyl-5-ethylpyridine	1503
2-甲基-6-乙基吡啶	2-methyl-6-ethylpyridine	1502
3-甲基-5-乙基吡啶	3-methyl-5-ethylpyridine	1504
2-甲基-3-乙基吡嗪	2-methyl-3-ethylpyrazine	1740
2-甲基-5-乙基吡嗪	2-methyl-5-ethylpyrazine	1742
2-甲基-6-乙基吡嗪	2-methyl-6-ethylpyrazine	1741
2-甲基-5-乙基哌啶	2-methyl-5-ethylpiperidine	1451
甲基乙基硫醚	methyl ethyl sulfide	1971
甲基乙基醚	methylethyl ether	512
<i>N</i> -甲基乙酰苯胺	<i>N</i> -methylacetylaniline	864
<i>N</i> -甲基-2-乙酰吡咯	<i>N</i> -methyl-2-acetylpyrrole	1483
<i>N</i> -甲基-2-丁烯酸内酰胺	<i>N</i> -methyl-2-butanoic lactam	869
<i>N</i> -甲基丁酸内酰胺	<i>N</i> -methyl butanoic lactam	870
3-甲基儿茶酚	3-methylcatechol	445
4-甲基儿茶酚	4-methylcatechol	446
甲基二乙胺	methyldiethylamine	1308
2-甲基二苯醚	2-methyldiphenyl ether	544
3-甲基二苯醚	3-methyldiphenyl ether	545
4-甲基二苯醚	4-methyldiphenyl ether	546
2-甲基-2,3-二氢色酮	2-methyl-2,3-dihydrochromone	2443
2-甲基-4,5-二氢呋喃	2-methyl-4,5-dihydrofuran	1127
3-甲基-2,5-二氢呋喃	3-methyl-2,5-dihydrofuran	1126
3-甲基-4,5-二氢呋喃	3-methyl-4,5-dihydrofuran	1128
4-甲基-4,5-二氢呋喃	4-methyl-4,5-dihydrofuran	1129
4-甲基-2,3-二氢吲哚	4-methyl-2,3-dihydroindole	1824
2-甲基二氢吡喃	2-methyldihdropyran	1150
4-甲基二氢吡喃	4-methyldihdropyran	1149
2-甲基-5,6-二氢吡喃	2-methyl-5,6-dihdropyran	1151
1-甲基-2,3-二氢茚	1-methyl-2,3-dihydroindene	119
2-甲基-2,3-二氢茚	2-methyl-2,3-dihydroindene	120
4-甲基-2,3-二氢茚	4-methyl-2,3-dihydroindene	121
5-甲基-2,3-二氢茚	5-methyl-2,3-dihydroindene	122
2-甲基-1,2-二氢萘	2-methyl-1,2-dihydronaphthalene	177
3-甲基-1,2-二氢萘	3-methyl-1,2-dihydronaphthalene	178
6-甲基-1,2-二氢萘	6-methyl-1,2-dihydronaphthalene	179

5-甲基-2,5-二氧-2-噻吩酮	5-methyl-2,5-dihydrothiophen-2-one	2033
2-甲基-4,5-二氢噻唑	2-methyl-4,5-dihydrothiazole	2044
2-甲基-1,3-二氧己烷	2-methyl-1,3-dioxane	1164
4-甲基-1,3-二氧己烷	4-methyl-1,3-dioxane	1165
2-甲基-1,3-二氧戊环	2-methyl-1,3-dioxolane	1154
4-甲基-1,3-二氧戊环	4-methyl-1,3-dioxolane	1155
1-甲基-2,4-二氧基咪唑烷	1-methyl-2,4-dioximidazolidine	1632
1-甲基-2,5-二氧基咪唑烷	1-methyl-2,5-dioximidazolidine	1628
4-甲基-2,5-二氧基咪唑烷	4-methyl-2,5-dioximidazolidine	1633
2-甲基-5,7-二羟基色酮	2-methyl-5,7-dihydroxychromone	2449
2-甲基-4,6-二羟基吡啶	2-methyl-4,6-dihydroxypyridine	1524
2-甲基-3,5-二羟基-4-吡喃酮	2-methyl-3,5-dihydroxypyran-4-one	1196
2-甲基-5,8-二羟基萘醌	2-methyl-5,8-dihydroxynaphthaquinone	2497
2-甲基-4,5-二羟基嘧啶	2-methyl-4,5-dihydroxypyrimidine	1714
2-甲基-1,3-二硫杂环己烷	2-methyl-1,5-dithiane	1947
6-甲基己内酯	6-methylhexyrolactone	1094
4-甲基-1-己烯	4-methyl-1-hexene	76
1-甲基-1,2,4-三氮唑	1-methyl-1,2,4-triazole	1638
3-甲基-1,2,4-三氮唑	3-methyl-1,2,4-triazole	1639
4-甲基-1,2,4-三氮唑	4-methyl-1,2,4-triazole	1640
2-甲基壬烷	2-methylnonane	35
4-甲基壬烷	4-methylnonane	36
5-甲基壬烷	5-methylnonane	37
<i>N</i> <sub>1</sub> -甲基文卡明	<i>N</i> <sub>1</sub> -methylvincadifformine	2132
<i>O</i> -甲基白坚木明	<i>O</i> -methylaspidospermine	2147
<i>N</i> <sub>1</sub> -甲基白坚米定	<i>N</i> <sub>1</sub> -methylaspidospermidine	2104
<i>N</i> -甲基-1,3-丙二胺	<i>N</i> -methyl-1,3-propanediamine	1325
甲基丙二腈	methylpropanedinitrile	1050
甲基丙基醚	methylpropyl ether	514
2-甲基-2-丙烯醛	2-methyl-2-propenal	566
2-甲基丙烷	2-methylpropane	30
2-甲基对苯二酚	2-methylhydroquinone	449
2-甲基对苯醌	2-methyl- <i>p</i> -benzoquinone	2457
2-甲基-3-甲氧基吡嗪	2-methyl-3-methoxypyrazine	1748
2-甲基-6-甲氧基吡嗪	2-methyl-6-methoxypyrazine	1749
2-甲基-6-甲氧基喹啉	2-methyl-6-methoxyquinoline	1877
2-甲基-4-甲氧基嘧啶	2-methyl-4-methoxypyrimidine	1710
<i>O</i> -甲基去乙酰基白坚木明	<i>O</i> -methyldeacetylaspodospermine	2144
<i>N</i> <sub>1</sub> -甲基去乙酰基白坚木碱	<i>N</i> <sub>1</sub> -methyldeacetylaspodospermine	2108
<i>N</i> <sub>1</sub> -甲基去乙酰基西林醇碱	<i>N</i> <sub>1</sub> -methyldeacetylcylindrocarpol	2119
2-甲基-2,3-去氢-1,4-二氧己环	2-methyl-2,3-dehydro-1,4-dioxane	1172
<i>N</i> -甲基-2,3-去氢-4-哌啶酮	<i>N</i> -methyl-2,3-dehydropiperidin-4-one	1466
<i>N</i> -甲基- <i>L</i> -丝氨酸	<i>N</i> -methyl- <i>L</i> -serine	2985
1-甲基四氢异喹啉	1-methyltetrahydroisoquinoline	2185
3-甲基-1,2,3,4-四氢异喹啉	3-methyl-1,2,3,4-tetrahydroisoquinoline	1906
2-甲基四氢呋喃	2-methyltetrahydrofuran	1114
3-甲基四氢呋喃	3-methyltetrahydrofuran	1115

2-甲基四氢吡喃	2-methyltetrahydropyran	1145
3-甲基四氢吡喃	3-methyltetrahydropyran	1146
1-甲基四氢- $\beta$ -咔啉	1-methyltetrahydro- $\beta$ -carboline	2158
6-甲基-2,3,4,5-四氢-3-哒嗪酮	6-methyl-2,3,4,5-tetrahydropyridazin-3-one	1685
2-甲基-1,2,3,4-四氢萘	2-methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	180
6-甲基-1,2,3,4-四氢萘	6-methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	181
3-甲基-1,2,3,4-四氢喹啉	3-methyl-1,2,3,4-tetrahydroquinoline	1885
6-甲基-1,2,3,4-四氢喹啉	6-methyl-1,2,3,4-tetrahydroquinoline	1886
3-甲基四氢噻吩	3-methyltetrahydrothiophene	1930
2-甲基四氢噻喃	2-methyltetrahydrothiopyran	1934
3-甲基四氢噻喃	3-methyltetrahydrothiopyran	1935
4-甲基四氢噻喃	4-methyltetrahydrothiopyran	1936
1-甲基四唑	1-methyltetrazole	1656
5-甲基四唑	5-methyltetrazole	1657
2-甲基-1,3-戊二烯	2-methylpenta-1,3-diene	83
2-甲基-1,4-戊二烯	2-methylpenta-1,4-diene	84
3-甲基-1,4-戊二烯	3-methylpenta-1,4-diene	82
<i>N</i> -甲基戊二烯酸内酰胺	<i>N</i> -methylpentadienoic lactam	872
3-甲基戊内酯	3-methylpentylolactone	1076
5-甲基戊内酯	5-methylpentylolactone	1077
3-甲基-3-戊烯内酯	3-methyl-3-pentenylolactone	1085
5-甲基-3-戊烯内酯	5-methyl-3-pentenylolactone	1086
5-甲基-4-戊烯内酯	5-methyl-4-pentenylolactone	1087
3-甲基戊烷	3-methylpentane	32
<i>N</i> -甲基戊酸内酰胺	<i>N</i> -methylpentanoic lactam	871
2- <i>O</i> -甲基地钱酸	2- <i>O</i> -methylevermic acid	2955
1-甲基肌醇	1-methylinositol	409
1-甲基鸟嘌呤	1-methylguanine	1793
3-甲基鸟嘌呤	3-methylguanine	1794
7-甲基鸟嘌呤	7-methylguanine	1792
<i>N</i> -甲基鸟苷	<i>N</i> -methylguanosine	2962
2'- <i>O</i> -甲基鸟苷	2'- <i>O</i> -methylguanosine	2963
2-甲基色酮	2-methylchromone	2445
<i>N</i> <sub>s</sub> -甲基西林卡林	<i>N</i> <sub>s</sub> -methylcylindrocarine	2123
<i>N</i> -甲基吡啶酮	<i>N</i> -methylacridone	2232
1-甲基-5-亚氨基-1,2,4-三唑啉	1-methyl-5-imino-1,2,4-triazoline	1652
1-甲基-2-亚氨基-4-氧基咪唑啉	1-methyl-2-imino-4-oxamidazolidine	1630
3-甲基- <i>N</i> -亚硝基哌啶	3-methyl- <i>N</i> -nitrosopiperidine	1274
甲基异丙胺	methylisopropylamine	1296
2-甲基-5-异丙基苯酚	2-methyl-5-isopropylphenol	2714
1-甲基异喹啉	1-methylisoquinoline	1893
3-甲基异喹啉	3-methylisoquinoline	1894
7-甲基异喹啉	7-methylisoquinoline	1895
5-甲基异噁唑	5-methylisoxazole	1670
3-甲基异噻唑	3-methylisothiazole	2053
4-甲基异噻唑	4-methylisothiazole	2054
5-甲基异噻唑	5-methylisothiazole	2055

$\alpha$ -甲基苄胺	$\alpha$ -methylbenzylamine	1411
<i>N</i> -甲基苄胺	<i>N</i> -methylbenzylamine	1407
2-甲基苄醇	2-methylbenzenemethanol	411
4-甲基苄醇	4-methylbenzenemethanol	412
甲基苄基醚	methylbenzyl ether	528
<i>O</i> -甲基别因波拉托内酯	<i>O</i> -methylalloimperatorin	2406
2-甲基呋喃	2-methylfuran	1133
3-甲基呋喃	3-methylfuran	1134
5-甲基-2-呋喃醛	5-methyl-2-furaldehyde	604
1-甲基吲哚	1-methylindole	1798
2-甲基吲哚	2-methylindole	1799
3-甲基吲哚	3-methylindole	1800
4-甲基吲哚	4-methylindole	1801
5-甲基吲哚	5-methylindole	1802
6-甲基吲哚	6-methylindole	1803
7-甲基吲哚	7-methylindole	1804
1-甲基-2-吲哚羧酸	1-methyl-2-indolecarboxylic acid	1841
2-甲基间苯二胺	2-methyl- <i>m</i> -benzenediamine	1417
4-甲基间苯二胺	4-methyl- <i>m</i> -benzenediamine	1418
2-甲基间苯二酚	2-methylresorcinol	447
5-甲基间苯二酚	5-methylresorcinol	448
<i>N</i> -甲基吡咯	<i>N</i> -methylpyrrole	1471
2-甲基吡咯	2-methylpyrrole	1469
3-甲基吡咯	3-methylpyrrole	1470
<i>N</i> -甲基吡咯烷	<i>N</i> -methylpyrrolidine	1437
3-甲基吡咯烷	3-methylpyrrolidine	1438
1-甲基吡唑	1-methylpyrazole	1569
3-甲基吡唑	3-methylpyrazole	1570
4-甲基吡唑	4-methylpyrazole	1571
3-甲基吡唑啉	3-methylpyrazoline	1583
5-甲基吡唑啉	5-methylpyrazoline	1584
3-甲基-5-吡唑啉酮	3-methylpyrazolin-5-one	1600
2-甲基吡啶	2-methylpyridine	1487
3-甲基吡啶	3-methylpyridine	1488
4-甲基吡啶	4-methylpyridine	1489
6-甲基-2-吡啶羧酸	6-methyl-2-pyridinecarboxylic acid	1561
甲基吡嗪	methylpyrazine	1733
<i>N</i> -甲基苯甲酰胺	<i>N</i> -methylbenzamide	846
2-甲基苯并-2,3-二氢呋喃	2-methylbenzo-2,3-dihydrofuran	1177
2-甲基苯并呋喃	2-methylbenzofuran	1179
7-甲基苯并呋喃	7-methylbenzofuran	1180
<i>N</i> -甲基苯胺	<i>N</i> -methylaniline	1398
2-( <i>p</i> -甲基苯基)-1-丙醇	2-( <i>p</i> -methylphenyl)-1-propanol	2715
<i>N</i> -甲基苯肼	<i>N</i> -methylphenylhydrazine	1031
1-甲基-2-苯基吲哚	1-methyl-2-phenylindole	1842
2-甲基-3-苯基吲哚	2-methyl-3-phenylindole	1844
3-甲基-2,6-庚二烯酸甲酯	methyl 3-methyl-2,6-heptadienoate	914

6-甲基-5-庚烯-2-酮	6-methyl-5-hepten-2-one	647
4-甲基-2-庚酮	4-methylheptan-2-one	639
5-甲基-2-庚酮	5-methylheptan-2-one	638
5-甲基-3-庚酮	5-methylheptan-3-one	637
6-甲基-2-庚酮	6-methylheptan-2-one	636
6-甲基-4-庚酮	6-methylheptan-4-one	635
甲基胍	methylguanidine	1914
2-甲基环丁酮	2-methylcyclobutanone	654
1-甲基-1,4-环己二烯	1-methylcyclohexa-1,4-diene	111
2-甲基-1,3-环己二酮	2-methylcyclohexa-1,3-dione	693
1-甲基环己烯	1-methylcyclohexene	107
3-甲基环己烯	3-methylcyclohexene	108
甲基环己烯-3-酮	methylcyclohexen-3-one	648
甲基环己烷	methylcyclohexane	53
2-甲基环己醇	2-methylcyclohexanol	395
3-甲基环己醇	3-methylcyclohexanol	396
4-甲基环己醇	4-methylcyclohexanol	397
甲基环己基醚	methylcyclohexyl ether	526
1-甲基环戊二烯	1-methylcyclopentadiene	100
5-甲基环戊二烯	5-methylcyclopentadiene	101
2-甲基-1,3-环戊二酮	2-methyl-1,3-cyclopentanedione	672
3-甲基-1,2,4-环戊三酮	3-methyl-1,2,4-cyclopentanetrione	677
1-甲基环戊胺	1-methylcyclopentanamine	1329
1-甲基环戊烯	1-methylcyclopentene	92
3-甲基环戊烯	3-methylcyclopentene	93
4-甲基环戊烯	4-methylcyclopentene	94
2-甲基-2-环戊烯酮	2-methyl-2-cyclopentenone	668
3-甲基-2-环戊烯酮	3-methyl-2-cyclopentenone	669
甲基环戊烷	methylcyclopentane	47
2-甲基环戊酮	2-methylcyclopentanone	663
3-甲基环戊酮	3-methylcyclopentanone	664
1-甲基-1-环戊醇	1-methylcyclopentan-1-ol	389
2-甲基-1-环戊醇	2-methylcyclopentan-1-ol	390
甲基环氧乙烷	methylloxirane	1106
N-甲基邻苯二甲酸内酰胺	N-methyl-o-phthalic lactam	883
6-甲基邻苯二甲酸酐	6-methyl-o-phthalic anhydride	818
4-甲基邻苯二胺	4-methyl-o-benzenediamine	1416
O-甲基弥罗松酚	O-methylferrugiol	2898
4'-O-甲基帕鲁多酸	4'-O-methylpaludonic acid	2951
甲基胍	methylhydrazine	1018
14-甲基胆甾-4-烯-3-酮	14-methylcholest-4-en-3-one	2630
1-甲基咪唑	1-methylimidazole	1605
2-甲基咪唑	2-methylimidazole	1606
5-甲基咪唑	5-methylimidazole	1607
2-甲基-2-咪唑啉	2-methyl-2-imidazoline	1623
N-甲基哌啶	N-methylpiperidine	1444
2-甲基哌啶	2-methylpiperidine	1445

3-甲基哌啶	3-methylpiperidine	1446
4-甲基哌啶	4-methylpiperidine	1447
<i>N</i> -甲基-4-哌啶酮	<i>N</i> -methylpiperidin-4-one	1461
1-甲基哌嗪	1-methylpiperazine	1754
2-甲基哌嗪	2-methylpiperazine	1755
<i>O</i> -甲基香豆酸	<i>O</i> -methylcoumaric acid	780
3-甲基香豆精	3-methylcoumarin	2381
4-甲基香豆精	4-methylcoumarin	2382
6-甲基香豆精	6-methylcoumarin	2383
7-甲基香豆精	7-methylcoumarin	2384
1-甲基-3-氨基-1,2,4-三氮唑	1-methyl-3-amino-1,2,4-triazole	1647
1-甲基-6-氧基-1,6-二氢嘌呤	1-methyl-6-oxo-1,6-dihydropurine	1787
3-甲基-6-氧基-3,6-二氢嘌呤	3-methyl-6-oxo-3,6-dihydropurine	1786
1-甲基黄嘌呤	1-methylxanthine	1795
3-甲基黄嘌呤	3-methylxanthine	1796
1-甲基萘	1-methylnaphthalene	166
2-甲基萘	2-methylnaphthalene	167
2-甲基萘醌	2-methylnaphthaquinone	2477
甲基脲	methylurea	1909
2-甲基-5-羟基-7-甲氧基色酮	2-methyl-5-hydroxy-7-methoxychromone	2450
2-甲基-6-羟基色酮	2-methyl-6-hydroxychromone	2446
2-甲基-3-羟基-5-异丙基对苯醌	2-methyl-3-hydroxy-5-isopropyl- <i>p</i> -benzoquinone	2469
3-甲基-4-羟基吲哚	3-methyl-4-hydroxyindole	1819
2-甲基-3-羟基-4-吡喃酮	2-methyl-3-hydroxypyran-4-one	1193
2-甲基-5-羟基-4-吡喃酮	2-methyl-5-hydroxypyran-4-one	1194
2-甲基-3-羟基苯胺	2-methyl-3-hydroxyaniline	1361
2-甲基-4-羟基苯胺	2-methyl-4-hydroxyaniline	1362
2-甲基-5-羟基苯胺	2-methyl-5-hydroxyaniline	1363
3-甲基-4-羟基苯胺	3-methyl-4-hydroxyaniline	1364
1-甲基-7-羟基- $\beta$ -咔啉	1-methyl-7-hydroxy- $\beta$ -carboline	2155
2-甲基-5-羟基哌啶	2-methyl-5-hydroxypiperidine	1458
2-甲基-5-羟基萘醌	2-methyl-5-hydroxynaphthaquinone	2495
1-甲基-4-羟基-2-喹啉酮	1-methyl-4-hydroxyquinolin-2-one	1888
1-甲基-3-羟基-4-喹啉酮	1-methyl-3-hydroxyquinolin-4-one	1889
17 $\beta$ -甲基-17 $\alpha$ -羟基雄甾-4-烯-3-酮	17 $\beta$ -methyl-17 $\alpha$ -hydroxyandrost-4-en-3-one	2561
17 $\beta$ -甲基-17 $\alpha$ -羟基雌甾-4-烯-3-酮	17 $\beta$ -methyl-17 $\alpha$ -hydroxyestr-4-en-3-one	2567
2-甲基-4-羟基嘧啶	2-methyl-4-hydroxypyrimidine	1698
2-甲基-5-羟基嘧啶	2-methyl-5-hydroxypyrimidine	1699
4-甲基-6-羟基嘧啶	4-methyl-6-hydroxypyrimidine	1700
<i>N</i> -甲基氮丙啶	<i>N</i> -methylaziridine	1434
<i>N</i> -甲基琥珀酸内酰胺	<i>N</i> -methylsuccinic lactam	879
2-甲基琥珀酸内酰胺	2-methylsuccinic lactam	880
2-甲基喹啉	2-methylquinoline	1856
3-甲基喹啉	3-methylquinoline	1857
4-甲基喹啉	4-methylquinoline	1858
5-甲基喹啉	5-methylquinoline	1859
6-甲基喹啉	6-methylquinoline	1860

7-甲基喹啉	7-methylquinoline	1861
8-甲基喹啉	8-methylquinoline	1862
1-甲基-4-喹啉酮	1-methylquinolin-4-one	1887
2-甲基联苯	2-methylbiphenyl	187
3-甲基联苯	3-methylbiphenyl	188
4-甲基联苯	4-methylbiphenyl	189
2-甲基硫杂环丁烷	2-methylthietane	1927
3-甲基硫杂环丁烷	3-methylthietane	1928
甲基硫杂环丙烷	methylthiirane	1924
甲基硫脲	methylthiourea	1992
3-甲基-2-噁唑烷酮	3-methyloxazolidin-2-one	1668
1-甲基蒽醌	1-methylanthraquinone	2501
2-甲基蒽醌	2-methylanthraquinone	2502
3-甲基-4-羧基吡唑	3-methyl-4-carboxypyrazole	1582
1-甲基腺苷	1-methyladenosine	2957
2'-O-甲基腺苷	2'-O-methyladenosine	2958
3'-O-甲基腺苷	3'-O-methyladenosine	2959
4'-O-甲基蔓生鱼藤异黄酮	4'-O-methylscandene	2333
2-甲基嘧啶	2-methylpyrimidine	1687
4-甲基嘧啶	4-methylpyrimidine	1688
5-甲基嘧啶	5-methylpyrimidine	1689
2-甲基嘌呤	2-methylpurine	1778
6-甲基嘌呤	6-methylpurine	1779
8-甲基嘌呤	8-methylpurine	1780
12-O-甲基箭毒碱	12-O-methylcurine	2190
2-甲基噻吩	2-methylthiophene	2008
3-甲基噻吩	3-methylthiophene	2009
5-甲基-2-噻吩羧酸	5-methyl-2-thiophenecarboxylic acid	2025
4-甲基噻唑	4-methylthiazole	2035
5-甲基噻唑	5-methylthiazole	2036
2-甲基噻唑烷	2-methylthiazolidine	2050
3-甲基噻唑烷	3-methylthiazolidine	2049
甲烷	methane	1
甲硫基丁烷	methylthiobutane	1973
甲硫基苯	methylthiobenzene	1980
甲硫醇	methanthiol	1955
甲酰胺	formamide	831
7-(3'-甲酰基-2'-丁烯氧基)香豆精	7-(3'-formyl-2'-butenoxy)coumarin	2402
N <sub>5</sub> -甲酰基西林卡林	N <sub>5</sub> -formyleylindrocarine	2124
甲酸(蚁酸)	formic acid	715
甲酸乙酯	ethyl formate	916
甲酸丁酯	butyl formate	939
甲酸己酯	hexyl formate	946
甲酸丙酯	propyl formate	935
甲酸-2-甲基丁酯	2-methylbutyl formate	945
甲酸-1-甲基丙酯	1-methylpropyl formate	941
甲酸甲酯	methyl formate	887

- 甲酸戊酯 pentyl formate 943  
 甲酸异丁酯 isobutyl formate 940  
 甲酸异丙烯酯 isopropenyl formate 937  
 甲酸异丙酯 isopropyl formate 936  
 甲酸异戊酯 isoamyl formate 944  
 甲酸叔丁酯 *tert*-butyl formate 942  
 甲醇 methanol 343  
 甲醛 formaldehyde 547  
 可可豆碱 theobromine 2249  
 可待因 codeine 2214  
 龙脑 borneol 2722  
 尼罗宁 neronine 2208  
 尼奥品 neopine 2215  
 皮脂酸 sebacic acid 747  
 卡那定 canadine 2199  
 去乙酰基华蟾蜍精 deacetylcinobufagin 2589  
 去乙酰基华蟾蜍素 deacetylcinobufotalin 2590  
 去乙酰基西林醇碱 deacetylcylindrocarpol 2118  
 7-去甲氧基利血平 7-demethoxyreserpine 2176  
*O*-去甲基-2,3'-二羟基二氢花椒素 *O*-demethyl-2',3'-dihydroxydihydrosuberosin 2413  
*O*-去甲基白坚木碱 *O*-demethylaspidospermine 2111  
*N*-去甲基可待因 *N*-demethylcodeine 2212  
 6-*O*-去甲基灰黄霉素 6-*O*-demethylgriseofulvin 2977  
 13-去甲基血根碱 13-demethylsanguinarine 2246  
 去甲基异蜜茛菪碱 normelicopidine 2236  
 1-去甲基特克里安辛 1-demethylcleantbinc 2235  
*O*-去甲基维斯那律 *O*-demethylvisnagin 2452  
*O*<sup>1</sup>-去甲基蜜茛菪生碱 *O*<sup>1</sup>-normelicopine 2240  
*O*-去甲基蜜茛菪碱 *O*-normelicopine 2234  
 去甲酰基白坚木美定 deformylaspidofractine, kopsinine 2140  
 去甲酰基-17-甲氧基白坚木美定 deformyl-17-methoxyaspidofractine 2143  
 2,3-去氢-1,4-二氧己环 2,3-dehydro-1,4-dioxane 1171  
 去氢白菖烯 calamenene 2840  
 去氢吉泽林 dehydrogeijerin 2409  
 1,2-去氢哌啶 1,2-dehydropiperidine 1462  
 去氧白坚木明 deoxyaspidospermine 2145  
 14-去氧帕固拉瑞宁 14-deoxypergularinine 2205  
 3-去氧替告皂甙元 3-deoxytigogenin 2592  
 β-石竹烯 β-caryophyllene 2861  
 1,1,3,3-四乙氧基丙烷 1,1,3,3-tetraethoxypropane 618  
 四乙基甲铅烷 tetraethylplumbane 2084  
 四乙基甲硅烷 tetraethylsilicane 2079  
 四乙基吡嗪 tetraethylpyrazine 1744  
 四十-酸甲酯 methyl hentetracontanoate 912  
 四丙基甲锗烷 tetrapropylgermane 2083  
 1,3,5,6-四甲氧基卞酮 1,3,5,6-tetramethoxyxanthone 2437  
 3',4',6,7-四甲氧基异黄酮 3',4',6,7-tetramethoxyisoflavone 2328



2',3,5,7-四甲氧基黄酮	2',3,5,7-tetramethoxyflavone	2306
3,3',4',7-四甲氧基黄酮	3,3',4',7-tetramethoxyflavone	2303
3,4',5,7-四甲氧基黄酮	3,4',5,7-tetramethoxyflavone	2309
4',5,6,7-四甲氧基黄酮	4',5,6,7-tetramethoxyflavone	2291
2,2,4,5-四甲基-1,3-二氧戊烷	2,2,4,5-tetramethyl-1,3-dioxolane	1158
1,2,4,5-四甲基六氢-1,2,4,5-四嗪	1,2,4,5-tetramethylhexahydro-1,2,4,5-tetrazine	1776
<i>N,N,N',N'</i> -四甲基对苯二胺	<i>N,N,N',N'</i> -tetramethylaniline	1421
四甲基对苯醌	tetramethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2462
四甲基甲锗烷	tetramethylgermane	2082
四甲基甲硅烷	tetramethylsilicane	2077
2,2,4,4-四甲基四氢呋喃	2,2,4,4-tetramethyltetrahydrofuran	1120
2,2,5,5-四甲基四氢呋喃	2,2,5,5-tetramethyltetrahydrofuran	1119
2,3,4,5-四甲基吡咯	2,3,4,5-tetramethylpyrrole	1475
四甲基吡嗪(脑益嗪)	tetramethylpyrazine(cinnarizine)	1738
1,2,3,5-四甲基苯	1,2,3,5-tetramethylbenzene	139
1,2,4,5-四甲基苯	1,2,4,5-tetramethylbenzene	140
2,3,5,6-四甲基苯酚	2,3,5,6-tetramethylphenol	439
2,2,3,3-四甲基环丁酮	2,2,3,3-tetramethylcyclobutanone	659
2,2,3,4-四甲基环丁酮	2,2,3,4-tetramethylcyclobutanone	660
2,2,4,4-四甲基环丁酮	2,2,4,4-tetramethylcyclobutanone	661
1,1,2,2-四甲基环丙烷	1,1,2,2-tetramethylcyclopropane	44
2,2,5,5-四甲基环戊酮	2,2,5,5-tetramethylcyclopentanone	665
四甲基硫脲	tetramethylthiourea	1993
1,2,9,10-四去氢土青木香烷	1,2,9,10-tetradehydroaristolane	2825
1,2,4,5-四异丙基苯	1,2,4,5-tetraisopropylbenzene	155
四苯基甲烷	tetraphenylmethane	197
四氟乙烯	tetrafluoroethene	277
1,1,2,2-四氟乙烷	1,1,2,2-tetrafluoroethane	243
四氟对苯二酚	tetrafluorohydroquinone	487
四氟间苯二酚	tetrafluororesorcinol	486
2,3,5,6-四氟吡啶	2,3,5,6-tetrafluoropyridine	1542
1,2,3,4-四氢异喹啉	1,2,3,4-tetrahydroquinoline	1905
四氢呋喃	tetrahydrofuran	1113
四氢吡喃	tetrahydropyran	1144
四氢-4-吡喃酮	tetrahydropyran-4-one	1189
2,3,4,5-四氢哒嗪	2,3,4,5-tetrahydropyridazine	1684
1,2,3,4-四氢萘	1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	174
1,2,3,4-四氢喹啉	1,2,3,4-tetrahydroquinoline	1884
5,6,7,8-四氢喹啉	5,6,7,8-tetrahydroquinoline	1890
四氢撒鲁塔瑞定醇	tetrahydrosalutaridinol	2227
四氢噻吩	tetrahydrothiophene	1929
四氢噻喃	tetrahydrothiopyran	1933
四唑	tetrazole	1655
2,3,5,8-四羟基-6,7-二甲氧基萘醌	2,3,5,8-tetrahydroxy-6,7-dimethoxynaphthaquinone	2493
2,5,7,8-四羟基-3,6-二甲氧基萘醌	2,5,7,8-tetrahydroxy-3,6-dimethoxynaphthaquinone	2494
四羟基对苯醌	tetrahydroxy- <i>p</i> -benzoquinone	2465
3,4',5,7-四羟基-3'-甲氧基黄酮	3,4',5,7-tetrahydroxy-3'-methoxyflavone	2277

3,4',5,7-四羟基-6-甲氧基黄酮	3,4',5,7-tetrahydroxy-6-methoxyflavone	2288
3',4',5,7-四羟基-6-甲氧基黄酮	3',4',5,7-tetrahydroxy-6-methoxyflavone	2289
1,2,6,7-四羟基-3-甲基-8-甲氧基蒽醌	1,2,6,7-tetrahydroxy-3-methyl-8-methoxyanthraquinone	2521
3,4',5,7-四羟基黄酮	3,4',5,7-tetrahydroxyflavanone	2315
2,5,7,8-四羟基萘醌	2,5,7,8-tetrahydroxynaphthaquinone	2484
1,2,5,8-四羟基蒽醌	1,2,5,8-tetrahydroxyanthraquinone	2511
四氯乙烯	tetrachloroethene	278
1,1,2,2-四氯乙烷	1,1,2,2-tetrachloroethane	244
四氯对苯二酚	tetrachlorohydroquinone	489
1,2,3,4-四氯苯	1,2,3,4-tetrachlorobenzene	312
1,2,4,5-四氯苯	1,2,4,5-tetrachlorobenzene	313
2,3,4,5-四氯苯胺	2,3,4,5-tetrachloroaniline	1392
2,3,5,6-四氯苯胺	2,3,5,6-tetrachloroaniline	1393
2,3,4,5-四氯苯酚	2,3,4,5-tetrachlorophenol	479
2,3,4,6-四氯苯酚	2,3,4,6-tetrachlorophenol	480
2,3,5,6-四氯苯酚	2,3,5,6-tetrachlorophenol	481
四氯邻苯二酚	tetrachlorocatechol	488
四氯噻吩	tetrachlorothiophene	2031
1,2,4,5-四嗪	1,2,4,5-tetrazine	1772
四溴乙烯	tetrabromoethene	279
1,1,2,2-四溴乙烷	1,1,2,2-tetrabromoethane	245
1,2,4,5-四溴苯	1,2,4,5-tetrabromobenzene	314
丝氨酸	serine	2981
外异莰烷酮	<i>exo</i> -isocamphanone	2766
乌沙武元	uzarigenin	2571
1,5-戊二胺	1,5-pentanediamine	1327
戊二酰氯	pentadioyl dichloride	824
戊二醛	pentanedial	571
戊内酯	pentylolactone	1075
1-戊炔	1-pentyne	128
戊胺	pentylamine	1282
2-戊胺	2-pentylamine	1292
戊烷	pentane	5
<i>N</i> -戊基己胺	<i>N</i> -pentylhexylamine	1304
5-戊基-3-戊烯内酯	5-pentyl-3-pentenyrolactone	1091
1-戊烯	1-pentene	67
2-戊烯	2-pentene	70
4-戊烯内酯	4-pentenyrolactone	1084
戊硫醇	pentanthiol	1963
戊腈	pentanenitrile	1043
2-戊酮	2-pentanone	627
3-戊酮	3-pentanone	628
戊醛肟	pentanal oxime	1916
戊酰胺	pentanamide	835
戊酸甲酯	methyl pentanoate	892
1-戊醇	1-pentanol	347
2-戊醇	2-pentanol	369

3-戊醇	3-pentanol	370
戊醛	pentanal	552
仙人棒酸甲酯	methyl mesembryanthemoidgenate	2917
叶坎辛	folicanthine	2153
7,15-右松脂二烯	7,15-pimaradiene	2880
8,15-右松脂二烯	8,15-pimaradiene	2883
8(14),15-右松脂二烯	8(14),15-pimaradiene	2884
7,15-右松脂二烯-3 $\beta$ -醇	7,15-pimaradiene-3 $\beta$ -ol	2882
7,15-右松脂二烯-3-酮	7,15-pimaradiene-3-one	2881
15-右松脂二烯-19-醛	15-pimaradiene-19-al	2879
右松脂烷-19-酸甲酯	methyl pimarane-19-oate	2878
右松脂酸	pimaric acid	2885
右松脂酸甲酯	methyl pimarate	2886
正丁基苯	<i>n</i> -butylbenzene	156
正己基苯	<i>n</i> -hexylbenzene	161
2-正丙基吡啶	2- <i>n</i> -propylpyridine	1506
4-正丙基吡啶	4- <i>n</i> -propylpyridine	1507
正丙基苯	<i>n</i> -propylbenzene	152
正戊基苯	<i>n</i> -pentylbenzene	160
正亮氨酸	norleucine	2987

## 六划

并五苯	pentacene	207
并四苯	naphacene	202
当药黄酮	swertisin	2378
地钱酸甲酯	methyl evernate	2944
地盖罗皂甙元	digalogenin	2598
过龙岗酸甲酯	methyl entagenate	2920
过氧二乙醚	ether peroxide	530
过氧二丙醚	dipropyl ether peroxide	531
过硫化二乙醚	diethyl persulfide	2064
过硫化二甲醚	dimethyl persulfide	2063
过硫化甲丙醚	methylpropyl persulfide	2065
红光皂甙元	hongguanggenin	2604
$\beta$ -华报春花醛	$\beta$ -sinensal	2783
华蟾蜍素	cinobufotalin	2591
灰黄霉素	griseofulvin	2976
肌醇	inositol	408
9(11),16-考兰二烯-19-酸	9(11),16-kauradiene-19-oic acid	2895
考兰-15-烯	kaur-15-ene	2892
考兰-16-烯	kaur-16-ene	2893
考兰-16-烯-19-酸	kaur-16-ene-19-oic acid	2894
考兰烷-16,19-二醇	kauran-16,19-diol	2891
考兰烷-13-醇	kauran-13-ol	2888
考兰烷-16-醇	kauran-16-ol	2889
吗啡	morphine	2211

米诺文西宁	minovincinine	2133
齐墩果-12-烯	olean-12-ene	2910
齐墩果-18-烯	olean-18-ene	2929
齐墩果-12-烯-3 $\beta$ ,28,29-三醇	olean-12-en-3 $\beta$ ,28,29-triol	2914
齐墩果-12-烯-3 $\beta$ ,16 $\beta$ ,22 $\alpha$ ,28-四醇	olean-12-en-3 $\beta$ ,16 $\beta$ ,22 $\alpha$ ,28-tetrol	2915
齐墩果-12-烯-28-醛	olean-12-en-28-al	2912
齐墩果酸	oleanolic acid	2916
肉豆蔻酸	myristic acid	726
肉豆蔻酸乙酯	ethyl myristate	921
肉豆蔻酸甲酯	methyl myristate	899
肉桂酰氯	cinnamoyl chloride	827
肉桂酸	cinnamic acid	777
肉桂酸乙酯	ethyl cinnamate	986
肉桂酸甲酯	methyl cinnamate	985
伞形花内酯	umbelliferone	2386
D-色氨酸	D-tryptophan	2996
色曼酮	sermundone	2354
色酮	chromone	2444
2-色酮羧酸	2-chromonecarboxylic acid	2447
吡酮	xanthone	2421
西比瑞辛	sibiricine	2196
西林卡林	cylindrocaine	2122
西林醇碱	cylindrocarpol	2121
托包亭	talbotine	2184
伪柠檬烯	pseudolimonene	2695
3,4-亚甲二氧基苯胺	3,4-methylenedioxyaniline	1370
亚甲基环己烷	methylene cyclohexane	105
亚甲基环戊烷	methylene cyclopentane	91
亚砷酸三乙酯	triethyl arsenite	2097
亚砷酸三甲酯	trimethyl arsenite	2095
2-氨基-4-甲基-2,3-二氢噻唑	2-amino-4-methyl-2,3-dihydrothiazole	2047
3-氨基-5-甲基-1,2,4-三唑啉	3-amino-5-methyl-1,2,4-triazoline	1651
2-氨基-4-氧基噻唑烷	2-amino-4-oxothiazolidine	2051
亚硫酸二乙酯	diethyl sulfurous acid	1007
亚硫酸二甲酯	dimethyl sulfurous acid	1006
N-亚硝基二乙胺	N-nitrosodiethanamine	1268
N-亚硝基二丙胺	N-nitrosodipropylamine	1269
N-亚硝基二甲胺	N-nitrosodimethylamine	1267
N-亚硝基-2,5-二氢吡咯	N-nitroso-2,5-dihydropyrrole	1273
N-亚硝基吗啉	N-nitrosomorpholine	1276
N-亚硝基吡咯烷	N-nitrosopyrrolidine	1271
N-亚硝基哌嗪	N-nitrosopiperazine	1275
N-亚硝基氮杂环丁烷	N-nitrosoazetidine	1270
亚硝酸丁酯	butyl nitrous acid	1014
亚硝酸甲酯	methyl nitrous acid	1013
亚德里亚萹酮	adriamycinone	2975
亚磷酸三甲酯	trimethyl phosphite	2088

吡啶酮	acridone	2231	
异丁胺	isobutylamine	1288	
1-异丁基四氢- $\beta$ -吡啶	1-isobutyltetrahydro- $\beta$ -carboline	2160	
异丁基苯	isobutylbenzene	157	
异丁硫醇	isobutanthiol	1960	
异丁酸	isobutanoic acid	719	
异丁醛	isobutanal	550	
异三尖杉酯碱	isoharringtonine	2229	
21-异白坚木笑定	21-isoaspidofractine	2142	
1-异丙基-3-甲基吡唑啉	1-isopropyl-3-methylpyrazoline	1598	
异丙基苯	isopropylbenzene	153	
4-异丙基苯酚	4-isopropylphenol	444	
2-异丙基-3-羟基-5-甲基对苯醌	2-isopropyl-3-hydroxy-5-methyl- <i>p</i> -benzoquinone	2468	
2-异丙基噻吩	2-isopropylthiophene	2017	
异丙胺	isopropylamine	1290	
异丙硫醇	isopropanthiol	1958	
异龙脑	isoborneol	2723	
$\alpha$ -异松油烯	$\alpha$ -terpinolene	2692	
异松萜醇	isopinocampheol	2735	
异茴芹内酯	isopimpinellin	2399	
异柯楠碱	isocorynantheidine	2167	
异亮氨酸	isoleucine	2990	
14 $\alpha$ -异树脂状蟾蜍甙元	14 $\alpha$ -artebufogenin	2586	
异香桃木酮	isomyrtucommulone-A	2956	
异牻牛儿醇	isogeraniol	2641	
$\gamma$ -异牻牛儿醇	$\gamma$ -isogeraniol	2642	
异苄	triphenylene	200	
异番薄荷酮	isopulegone	2688	
异番薄荷醇	isopulegol	2680	
异维斯那津	isovisnagin	2453	
异喹啉	isoquinoline	1892	
异喇叭茶醇	palustrol	2858	
3-异硫氰酸根合-1-丙烯	3-isothiocyanato-1-propene	1004	
1-异硫氰酸根合丙烷	1-isothiocyanatopropane	1003	
异紫花前胡内酯	mamesin	2400	
异氰基乙烷	isocyanoethane	1059	
异氰基甲烷	isocyanomethane	1058	
异氰基苯	isocyanobenzene	1070	
1-异氰酸根合丁烷	1-isocyanatobutane	996	
异 $\alpha_2$ -紫红霉酮	iso- $\alpha_2$ -rhodomycinone	2971	
异噁唑	isoxazole	1669	
异愈创木醇	bulnesol	2851	
异蜜茛萸碱	melicopidine	2238	
异榧叶醇	isoterreyol	2845	
异薄荷醇	isomenthol	2653	
异噻唑	isothiazole	2052	
3-异噻唑甲酰胺	3-isothiazolecarboxamine	2060	

5-异噻唑甲酰胺	5-isothiazolecarboxamine	2061
3-异噻唑羧酸	3-isothiazolecarboxylic acid	2062
羽扇豆-20(29)-烯-3 $\beta$ ,28-二醇	lup-20(29)-en-3 $\beta$ ,28-diol	2933
羽扇豆-20(29)-烯-3-酮	lup-20(29)-en-3-one	2931
羽扇豆-20(29)-烯-3 $\beta$ -醇	lup-20(29)-en-3 $\beta$ -ol	2932
羽扇豆烷-3-酮	lupan-3-one	2930
约诺皂甙元	yonogenin	2599
孕甾-4-烯-3,20-二酮	pregn-4-en-3,20-dione	2535
孕甾-5-烯-3 $\beta$ -醇	pregn-5-en-3 $\beta$ -ol	2532
5 $\alpha$ -孕甾烷	5 $\alpha$ -pregnane	2527
5 $\alpha$ -孕甾烷-3 $\beta$ ,20-二醇	5 $\alpha$ -pregnan-3 $\beta$ ,20-diol	2531
5 $\beta$ -孕甾烷-3 $\alpha$ ,20-二醇	5 $\beta$ -pregnan-3 $\alpha$ ,20-diol	2530
5 $\alpha$ -孕甾烷-3-酮	5 $\alpha$ -pregnan-3-one	2528
5 $\alpha$ -孕甾烷-20-酮	5 $\alpha$ -pregnan-20-one	2533
5 $\alpha$ -孕甾烷-3 $\beta$ -醇	5 $\alpha$ -pregnan-3 $\beta$ -ol	2529
5 $\beta$ -孕甾烷-3 $\alpha$ -醇-20-酮	5 $\beta$ -pregnan-3 $\alpha$ -ol-20-one	2534
芝麻素	sesamin	2936
朱栾倍半萜	valencene	2815

## 七划

比	pyrene	199
苯胺	benzylamine	1406
苄基三氯	benzyl trichloride	340
苄基氯	benzyl chloride	336
苄基碘	benzyl iodide	339
苄基溴	benzyl bromide	338
苯醇	benzeremethanol	410
别香木兰烯	alloaromadendrene	2855
补骨脂内酯	psoralen	2391
5 $\alpha$ -豆甾-7,22-二烯-3 $\beta$ -醇	5 $\alpha$ -stigmasta-7,22-dien-3 $\beta$ -ol	2625
豆甾烷	stigmastane	2611
豆甾烷-7-酮	stigmastan-7-one	2613
豆甾醇	stigmasterol	2623
杜松烯	cadinene	2834
$\gamma$ -杜松烯	$\gamma$ -cadinene	2835
$\delta$ -杜松烯	$\delta$ -cadinene	2836
1,5-杜松二烯	1,5-cadinadiene	2837
杜松-5,8-二烯	cadina-5,8-diene	2831
芳樟醇	linalool	2645
呋喃	furan	1132
2,5-呋喃二羧酸二甲酯	dimethy 2,5-furandicarboxylate	990
2-呋喃甲胺	2-furanmethanamine	1140
5-呋喃甲基-2-呋喃醛	5-furanylmethyl-2-furaldehyde	606
2-呋喃甲酰胺	2-furancarboxylhydrazide	1039
2-呋喃甲醇	2-furanmethanol	1139
2-呋喃羧酸	2-furancarboxylic acid	804

3-呋喃羧酸	3-furancarboxylic acid	805
2-呋喃羧酸甲酯	methyl 2-furancarboxylate	988
3-呋喃羧酸甲酯	methyl 3-furancarboxylate	989
佛手内酯	bergapten	2395
杠柳甙元	periplogenin	2574
$\beta$ -谷甾醇	$\beta$ -sitosterol	2616
谷树叶碱	chondrofoline	2189
L-谷氨酸	L-glutamic acid	2994
花生酸	arachidic acid	732
花生酸甲酯	methyl arachidate	904
花椒毒素	xanthotoxin	2396
花椒素	suberosin	2407
间乙基甲苯	<i>m</i> -ethyltoluen	144
间乙酰氧基苯甲酸甲酯	methyl <i>m</i> -acetoxibenzoate	971
间乙酰基苯乙酮	<i>m</i> -acetylacetophenone	709
间乙酰基苯胺	<i>m</i> -acetylaniline	1368
间二乙基苯	<i>m</i> -diethylbenzene	147
间二甲苯	<i>m</i> -dimethylbenzene	134
间二甲氧基苯酚	<i>m</i> -dimethoxyphenol	454
间二甲氨基苯甲酸	<i>m</i> -dimethylaminobenzoic acid	773
间二氯间苯二酚	<i>m</i> -dichlororesocinol	484
间二氯苯	<i>m</i> -dichlorobenzene	302
间二硝基苯	<i>m</i> -dinitrobenzene	1243
间二溴苯	<i>m</i> -dibromobenzene	305
间甲氧基苯甲醛	<i>m</i> -methoxybenzaldehyde	585
间甲氧基苯胺	<i>m</i> -methoxyaniline	1356
间甲氧基苯酚	<i>m</i> -methoxyphenol	452
间甲氧基茴香醚	<i>m</i> -methoxyanisole	541
间甲氧基硝基苯	<i>m</i> -methoxynitrobenzene	1211
间甲基对亚硝基苯酚	<i>m</i> -methyl- <i>p</i> -nitrosophenol	499
间甲基异氰基苯	<i>m</i> -methylisocyanobenzene	1071
间甲基苄胺	<i>m</i> -methylbenzylamine	1409
间甲基苯乙酮	<i>m</i> -methylacetophenone	699
间甲基苯甲酸	<i>m</i> -methylbenzoic acid	760
间甲基苯甲醛	<i>m</i> -methylbenzaldehyde	575
间甲基苯胺	<i>m</i> -methylaniline	1338
间甲基苯酚	<i>m</i> -methylphenol	427
间甲基苯基乙基醚	<i>m</i> -methylphenylethyl ether	537
间甲基苯硫酚	<i>m</i> -methylthiophenol	1988
间甲基苯腈	<i>m</i> -methylbenzotrile	1061
间甲基茴香醚	<i>m</i> -methylanisole	534
间甲基硫代苯甲酸甲酯	methyl <i>m</i> -methylthiobenzoate	2001
间苯二甲酸	<i>m</i> -phthalic acid	784
间苯二甲酸二甲酯	dimethyl <i>m</i> -phthalate	979
间苯二胺	<i>m</i> -benzenediamine	1414
间苯二酚	resorcin	421
间苯二酚二乙酸酯	resorcinol diacetate	955

间苯二腈	<i>m</i> -benzodinitrile	1065
间苯二酰氯	<i>m</i> -phthalyl dichloride	828
间苯三酚	phloroglucinol	425
间环己二胺	<i>m</i> -cyclohexanediamine	1335
间氟甲苯	<i>m</i> -flurotoluene	295
间氟苯甲酸	<i>m</i> -fluorobenzoic acid	791
间氟苯胺	<i>m</i> -fluoroaniline	1372
间氟硝基苯	<i>m</i> -fluoronitrobenzene	1214
间氨基乙酰苯胺	<i>m</i> -aminoacetylaniline	862
间氨基苯甲酰胺	<i>m</i> -aminobenzamide	850
间氨基苯甲酸	<i>m</i> -aminobenzoic acid	770
间羟基乙酰苯胺	<i>m</i> -hydroxyacetylaniline	866
间羟基苯醇	<i>m</i> -hydroxybenzenemethanol	416
间羟基苯乙酮	<i>m</i> -hydroxyacetophenone	704
间羟基苯甲酸	<i>m</i> -hydroxybenzoic acid	764
间羟基苯甲酸甲酯	methyl <i>m</i> -hydroxybenzoate	962
间羟基苯甲醛	<i>m</i> -hydroxybenzaldehyde	582
间羟基苯胺	<i>m</i> -hydroxyaniline	1353
间联三苯	<i>m</i> -terphenyl	194
间氯甲苯	<i>m</i> -chlorotoluene	321
间氯苯甲酸	<i>m</i> -chlorobenzoic acid	794
间氯苯甲醛	<i>m</i> -chlorobenzaldehyde	596
间氯苯胺	<i>m</i> -chloroaniline	1375
间氯苯酚	<i>m</i> -chlorophenol	456
间硝基对氨基苯甲酸	<i>m</i> -nitro- <i>p</i> -aminobenzoic acid	1238
间硝基甲苯	<i>m</i> -nitrotoluene	1206
间硝基苯醇	<i>m</i> -nitrobenzylalcohol	1217
间硝基苯乙酮	<i>m</i> -nitroacetophenone	1223
间硝基苯甲酸	<i>m</i> -nitrobenzoic acid	1226
间硝基苯甲酰胺	<i>m</i> -nitrobenzamide	1230
间硝基苯甲醛	<i>m</i> -nitrobenzaldehyde	1220
间硝基苯胺	<i>m</i> -nitroaniline	1233
间硝基苯酚	<i>m</i> -nitrophenol	492
间硝基苯肼盐酸盐	<i>m</i> -nitrophenylhydrazine hydrochloride	1240
间碘甲苯	<i>m</i> -iodotoluene	327
间碘苯甲酸	<i>m</i> -iodobenzoic acid	800
间碘苯胺	<i>m</i> -iodoaniline	1378
间碘苯酚	<i>m</i> -iodophenol	462
间溴甲苯	<i>m</i> -bromotoluene	324
间溴苯甲酸	<i>m</i> -bromobenzoic acid	797
间溴苯甲酸甲酯	methyl <i>m</i> -bromobenzoate	973
间溴苯肼盐酸盐	<i>m</i> -bromophenylhydrazine hydrochloride	1029
间溴苯酚	<i>m</i> -bromophenol	459
克瑞斯塔皂甙元	crestagenin	2601
克瑞捷因	krigeine	2209
利血平	reserpine	2175
麦角甾-5,22-二烯-3 $\beta$ -醇	ergosta-5,22-dien-3 $\beta$ -ol	2621



$\Delta^{5,24(28)}$ -麦角甾二烯-3 $\beta$ -醇	$\Delta^{5,24(28)}$ -ergostadien-3 $\beta$ -ol	2626
5 $\alpha$ -麦角甾-7,22-二烯-3 $\beta$ -醇	5 $\alpha$ -ergosta-7,22-dien-3 $\beta$ -ol	2624
5 $\beta$ -麦角甾-22-烯-3-酮	5 $\beta$ -ergost-22-en-3-one	2622
5 $\alpha$ -麦角甾-7-烯-3 $\beta$ -醇	5 $\alpha$ -ergost-7-en-3 $\beta$ -ol	2618
5 $\alpha$ -麦角甾烷-3 $\beta$ -醇	5 $\alpha$ -ergostan-3 $\beta$ -ol	2612
麦角甾醇	ergosterol	2629
麦诺醇	manool	2868
$\alpha$ -没药烯	$\alpha$ -bisabolene	2806
$\beta$ -没药烯	$\beta$ -bisabolene	2807
$\alpha$ -没药烯醇氧化物	$\alpha$ -bisabolol oxide	2802
$\beta$ -没药烷醇	$\beta$ -bisabolanol	2801
$\beta$ -没药醇	$\beta$ -bisabolol	2803
牡荆黄酮甙	vitexin	2375
那灵黄烷酮	naringenin	2314
尿素	urea	1908
吡咯	pyrrole	1468
吡咯烷	pyrrolidine	1436
2-吡咯烷酮	2-pyrrolidinone	1442
$\epsilon$ -吡咯霉素	$\epsilon$ -pyrromycinone	2973
吡唑	pyrazole	1568
吡啶	pyridine	1486
4-吡啶甲酰胺	4-pyridinecarboxamide	1566
3-吡啶甲醛	3-pyridinecarboxaldehyde	1532
4-吡啶甲醛	4-pyridinecarboxaldehyde	1533
4-吡啶硫代羧酰胺	4-pyridinecarbothioamide	2004
2-吡啶羧酸	2-pyridinecarboxylic acid	1558
4-吡啶羧酸	4-pyridinecarboxylic acid	1560
4-吡啶羧酸乙酯	ethyl-4-pyridinecarboxylate	1563
4-吡啶羧酸甲酯	methyl-4-pyridinecarboxylate	1562
4-吡啶酮	pyridin-4-one	1467
4-吡喃酮	pyran-4-one	1190
吡嗪	pyrazine	1732
吡嗪甲酰胺	pyrazineformamide	1751
芹子-3,7(11)-二烯	selina-3,7(11)-diene	2821
芹子-4(14),7(11)-二烯	selina-4(14),7(11)-diene	2823
芹子-4(14),11-二烯	selina-4(14),11-diene	2824
$\delta$ -芹子烯	$\delta$ -selinene	2822
芹子烷	selinane	2816
芹菜素	apigenin	2264
沙波亭	zapotin	2292
L-苏氨酸	L-threonine	2984
吴茱萸酮	evodione	2441
芴	fluorene	196
1,7-辛二炔	1,7-octadiyne	130
辛二腈	octanedinitrile	1053
2-辛烯	2-octene	77
3-辛烯	3-octene	78

4-辛烯酸甲酯	methyl 4-octenoate	894
2-辛酮	2-octanone	632
3-辛酮	3-octanone	640
4-辛酮	4-octanone	633
辛醛	octanal	555
延胡索乙素	tetrahydropalmatine	2200
吲哚	indole	1797
3-吲哚乙酸	3-indoleacetic acid	1829
3-吲哚乙酸乙酯	ethyl 3-indoleacetate	1838
3-吲哚乙醇	3-indoleethanol	1849
3-吲哚丁酸	3-indolebutanoic acid	1833
2-吲哚丁酸甲酯	methyl 2-indolebutanoate	1854
3-吲哚丁酸甲酯	methyl 3-indolebutanoate	1837
3-吲哚- <i>N,N</i> -二甲基乙胺	3-indole- <i>N,N</i> -dimethylethamine	1846
3-吲哚丙酮	3-indoleacetone	1851
3-吲哚丙酸甲酯	methyl 3-indolepropanoate	1836
3-吲哚- $\alpha$ -羟基丙酸	3-indole- $\alpha$ -hydroxypropanoic acid	1832
3-吲哚羧酸	3-indolecarboxylic acid	1826
针枞酚	piceol	705
$\beta$ -足叶草脂素	$\beta$ -peltatin	2939

## 八划

阿可维诺甙元 A	acovenosigenin-A	2573
阿码碱	ajmalicine	2171
阿特拉诺林	atranorin	2946
阿瑞诺蟾蜍精	arenobufagin	2584
苯	benzene	131
苯乙酮	acetophenone	697
苯乙酸	phenylacetic acid	806
1,2,4-苯三酚	1,2,4-benzenetriol	424
1,2,4-苯三羧酸	1,2,4-benzenetricarboxylic acid	786
1,3,5-苯三羧酸	1,3,5-benzenetricarboxylic acid	787
苯甲酰肼	benzoylhydrazide	1037
苯甲酰胺	benzamide	845
<i>N</i> <sub>s</sub> -苯甲酰基西林卡林	<i>N</i> <sub>s</sub> -benzoylcylindrocarine	2127
苯甲酰氯	benzoyl chloride	825
苯甲酰溴	benzoyl bromide	826
苯甲酸	benzoic acid	758
苯甲酸苄醇酯	benzylalcohol benzoate	976
苯甲酸酐	benzoic anhydride	819
苯甲醛	benzaldehyde	573
苯并-2,3-二氢呋喃	benzo-2,3-dihydrofuran	1176
苯并呋喃	benzofuran	1178
3-苯并呋喃羧酸	3-benzofurancarboxylic acid	1188
苯并[ <i>ghi</i> ]花	benzo[ <i>ghi</i> ]perylene	205
苯并[ <i>a</i> ]菲	benzo[ <i>a</i> ]phenanthrene	201

9,10-苯并菲	9,10-triphenylene	200
苯并萘醌	benzonaphthaquinone	2499
苯并蒽	benzoanthracene	204
苯并噻吩	benzothiophene	2032
苯胺	aniline	1336
苯腈	benzonitrile	1060
苯丙酸	phenylpropionic acid	810
苯甲酸甲酯	methyl benzoate	959
苯甲酸酚酯	phenol benzoate	2941
苯甲醚(茴香醚)	phenylmethyl ether (anisole)	532
苯肼	phenylhydrazine	1027
苯酚	phenol	419
苯基乙基醚	phenylethyl ether	536
苯基乙酰胺	phenylacetamide	858
1-苯基乙醇	1-phenylethanol	414
苯基丙基醚	phenylpropyl ether	539
苯基丙酮	phenylacetone	714
2-苯基-5-甲基吲哚	2-phenyl-5-methylindole	1843
N-苯基苯甲酰胺	N-phenylbenzamide	847
N-苯基苯胺	N-phenylaniline	1427
苯硫酚	thiophenol	1986
14-表文卡明醇	14-epivincaminol	2181
表长春胺	epivincamine	2183
1 <i>R</i> -表樟脑	1 <i>R</i> -epicamphor	2720
1 <i>S</i> -表樟脑	1 <i>S</i> -epicamphor	2721
$\alpha$ -侧柏烯	$\alpha$ -thujene	2760
$\beta$ -侧柏烯	$\beta$ -thujene	2761
$\alpha$ -侧柏烯-4-醇	$\alpha$ -thujen-4-ol	2765
$\alpha$ -侧柏酮	$\alpha$ -thujone	2755
$\beta$ -侧柏酮	$\beta$ -thujone	2756
侧柏醇	thujol	2759
1-侧柏醇	1-thujanol	2758
垂马黄酮	trematin	2377
刺槐素	acacetin	2273
刺罂粟碱	stylopine	2198
单苯甲酸间苯二酚酯	resorcino. monobenzoate	2942
己酸	adipic acid	744
1-庚烯	1-heptene	74
2-庚烯	2-heptene	75
庚胺	heptylamine	1284
庚烷	heptane	7
4-庚酮	4-heptanone	631
庚酸	heptanoic acid	720
1-庚醇	1-heptanol	349
庚醛	heptanal	554
D-果味喃糖腺苷	adenine D-psicofuranoside	2961
环丁烷	cyclobutane	45

环丁酮	cyclobutanone	653
环丁酮肟	cyclobutanone oxime	1918
环丁硫醇	cyclobutanthiol	1966
环丁醇	cyclobutanol	387
1,3-环己二烯	cyclohexa-1,3-diene	109
1,4-环己二烯	cyclohexa-1,4-diene	110
2,5-环己二烯-1,4-二酮二肟	2,5-cyclohexadien-1,4-dione dioxime	1922
1,2-环己二酮	1,2-cyclohexadione	690
1,3-环己二酮	1,3-cyclohexadione	691
1,4-环己二酮	1,4-cyclohexadione	692
1,2-环己二醇	1,2-cyclohexanediol	400
1,3-环己二醇	1,3-cyclohexanediol	401
1,4-环己二醇	1,4-cyclohexanediol	402
1,2,3-环己三醇	1,2,3-cyclohexanetriol	403
1,2,4-环己三醇	1,2,4-cyclohexanetriol	404
1,3,5-环己三醇	1,3,5-cyclohexanetriol	405
1,2,3,4-环己四醇	1,2,3,4-cyclohexanetetrol	406
1,2,4,5-环己四醇	1,2,4,5-cyclohexanetetrol	407
环己胺	cyclohexanamine	1330
环己烯	cyclohexene	104
2-环己烯酮	2-cyclohexenone	685
环己烷	cyclohexane	52
环己硫醇	cyclohexanthiol	1967
环己酮	cyclohexanone	679
环己醇	cyclohexanol	394
环双花椒二烯	cyclobisuberodiene(thamnosia)	2419
环丙烷	cyclopropane	42
环戊二烯	cyclopentadiene	99
1,3-环戊二酮	1,3-cyclopentanedione	671
1,3-环戊二醇	1,3-cyclopentanediol	391
1,2,4-环戊三酮	1,2,4-cyclopentanetrione	676
环戊胺	cyclopentanamine	1328
3-环戊烯-1,2-二醇	3-cyclopenten-1,2-diol	392
2-环戊烯-1,4-二醇	2-cyclopenten-1,4-diol	393
2-环戊烯酮	2-cyclopentenone	667
环戊烷	cyclopentane	46
环戊酮	cyclopentanone	662
环戊酮肟	cyclopentanone oxime	1919
环戊醇	cyclopentanol	388
1,5-环辛二烯	cycloocta-1,5-diene	116
环辛烷	cyclooctane	62
1,3-环庚二烯	cyclohepta-1,3-diene	114
1,3,5-环庚三烯	cyclohepta-1,3,5-triene	115
环庚三烯酮	tropone	713
环庚烯	cycloheptene	113
环庚烷	cycloheptane	61
环氧乙烷	oxirane	1105

环氧二氧环双花椒二烯	epoxycyhydrocyclobisuberodiene	2420
环氧丙烷	oxetane	1110
8,13-环氧勒布-14-烯	8,13-epoxylabd-14-ene	2865
8,13-环氧勒布-14-烯-2-酮	8,13-epoxylabd-14-ene-2-one	2866
8,13-环氧勒布-14-烯-3-酮	8,13-epoxylabd-14-ene-3-one	2867
$\alpha$ -金合欢烯	$\alpha$ -farnesene	2778
$\beta$ -金合欢烯( <i>E</i> )	$\beta$ -farnesene( <i>E</i> )	2779
$\beta$ -金合欢烯( <i>Z</i> )	$\beta$ -farnesene( <i>Z</i> )	2780
金合欢烯酸甲酯	methyl farnesenate	2795
金合欢醇	farnesol	2784
金丝桃甙	hyperin	2374
胼	hydrazine	1017
咖啡碱	caffeine	2250
$\beta$ -咔啉	$\beta$ -carboline	2154
凯替维酸	cativinic acid	2871
凯替维酸甲酯	methyl cativinate	2872
苦橙油醇	nerolidol	2787
拉消色法林	lasiocephalin	2418
邻乙基甲苯	<i>o</i> -ethyltoluene	143
邻乙基苯胺	<i>o</i> -ethylamine	1349
邻乙酰氧基苯甲酸甲酯	methyl <i>o</i> -acetoxybenzoate	970
邻乙酰基苯胺	<i>o</i> -acetylaniline	1367
邻二乙基苯	<i>o</i> -diethylbenzene	146
邻二甲苯	<i>o</i> -dimethylbenzene	133
邻二氯苯	<i>o</i> -dichlorobenzene	301
邻二硝基苯	<i>o</i> -dinitrobenzene	1242
邻二溴苯	<i>o</i> -dibromobenzene	304
邻甲氧基苯甲酸甲酯	methyl <i>o</i> -methoxybenzoate	967
邻甲氧基苯甲醛	<i>o</i> -methoxybenzaldehyde	584
邻甲氧基苯胺	<i>o</i> -methoxyaniline	1355
邻甲氧基苯酚	<i>o</i> -methoxyphenol	451
邻甲氧基茴香醚	<i>o</i> -methoxyanisole	540
邻甲氧基硝基苯	<i>o</i> -methoxynitrobenzene	1210
邻甲基乙酰苯胺	<i>o</i> -methylacetylaniline	860
邻甲基苯胺	<i>o</i> -methylbenzylamine	1408
邻甲基苯乙酮	<i>o</i> -methylacetophenone	698
邻甲基苯甲酰胺	<i>o</i> -methylbenzamide	848
邻甲基苯甲酸	<i>o</i> -methylbenzoic acid	759
邻甲基苯甲酸甲酯	methyl <i>o</i> -methylbenzoate	960
邻甲基苯甲醛	<i>o</i> -methylbenzaldehyde	574
邻甲基苯胺	<i>o</i> -methylaniline	1337
邻甲基苯酚	<i>o</i> -methylphenol	426
邻甲基苯硫酚	<i>o</i> -methylthiophenol	1987
邻甲基茴香醚	<i>o</i> -methylanisole	533
邻亚硝基苯甲酸	<i>o</i> -nitrosobenzoic acid	782
邻亚硝基苯甲醛	<i>o</i> -nitrosobenzaldehyde	598
邻苯二甲酰胺	<i>o</i> -phthalamide	856

邻苯二甲酸	<i>o</i> -phthalic acid	783	
邻苯二甲酸二乙酯	diethyl <i>o</i> -phthalate	981	
邻苯二甲酸二丁酯	dibutyl <i>o</i> -phthalate	983	
邻苯二甲酸二甲酯	dimethyl <i>o</i> -phthalate	978	
邻苯二甲酸内酰胺	<i>o</i> -phthalic lactam	882	
邻苯二甲酸酐	<i>o</i> -phthalic anhydride	817	
邻苯二甲醛	<i>o</i> -benzaldia	601	
邻苯二胺	<i>o</i> -benzenediamine	1413	
邻苯二酚	catechol	420	
邻苯二酚二乙酸酯	catechol diacetate	954	
邻苯二腈	<i>o</i> -benzodinitrile	1064	
邻苯三酚	gallanol	423	
邻环己二胺	<i>o</i> -cyclohexanediamine	1334	
邻氟甲苯	<i>o</i> -flurotoluene	294	
邻氟苯甲酸	<i>o</i> -fluorobenzoic acid	790	
邻氟苯甲醛	<i>o</i> -fluorobenzaldehyde	593	
邻氟苯胺	<i>o</i> -fluoroaniline	1371	
邻氟硝基苯	<i>o</i> -fluoronitrobenzene	1213	
邻氨基对硝基苯甲酸	<i>o</i> -amino- <i>p</i> -nitrobenzoic acid	1228	
邻氨基苄醇	<i>o</i> -aminobenzylalcohol	1395	
邻氨基苯甲酸	<i>o</i> -aminobenzoic acid	769	
邻氨基苯甲酸甲酯	methyl <i>o</i> -aminobenzoate	965	
邻氨基苯硫酚	<i>o</i> -aminothiophenol	1990	
邻羟基乙酰苯胺	<i>o</i> -hydroxyacetylaniline	865	
邻羟基肉桂酸	<i>o</i> -hydroxycinnamic acid	778	
邻羟基苄醇	<i>o</i> -hydroxybenzenemethanol	415	
邻羟基针枞酚	<i>o</i> -hydroxypiceol	706	
邻羟基苯乙酮	<i>o</i> -hydroxyacetophenone	703	
邻羟基苯乙酸	<i>o</i> -hydroxyphenylacetic acid	807	
邻羟基苯甲酰胺	<i>o</i> -hydroxybenzamide	852	
邻羟基苯甲醛	<i>o</i> -hydroxybenzaldehyde	581	
邻羟基苯胺	<i>o</i> -hydroxyaniline	1352	
邻羟基环己胺	<i>o</i> -hydroxycyclohexanamine	1333	
邻联三苯	<i>o</i> -terphenyl	193	
邻氯甲苯	<i>o</i> -chlorotoluene	320	
邻氯苯甲酰胺	<i>o</i> -chlorobenzamide	853	
邻氯苯甲酸	<i>o</i> -chlorobenzoic acid	793	
邻氯苯甲醛	<i>o</i> -chlorobenzaldehyde	595	
邻氯苯胺	<i>o</i> -chloroaniline	1374	
邻氯苯酚	<i>o</i> -chlorophenol	455	
邻硝基对苯二胺	<i>o</i> -nitro- <i>p</i> -benzenediamine	1235	
邻硝基甲苯	<i>o</i> -nitrotoluene	1205	
邻硝基苄醇	<i>o</i> -nitrobenzylalcohol	1216	
邻硝基苯乙酮	<i>o</i> -nitroacetophenone	1222	
邻硝基苯甲酰胺	<i>o</i> -nitrobenzamide	1229	
邻硝基苯甲酸	<i>o</i> -nitrobenzoic acid	1225	
邻硝基苯甲醛	<i>o</i> -nitrobenzaldehyde	1219	

邻硝基苯肼	<i>o</i> -nitrophenylhydrazine	1239
邻硝基苯胺	<i>o</i> -nitroaniline	1232
邻硝基苯酚	<i>o</i> -nitrophenol	491
邻碘甲苯	<i>o</i> -iodotoluene	326
邻碘苯甲酸	<i>o</i> -iodobenzoic acid	799
邻碘苯胺	<i>o</i> -iodoaniline	1377
邻碘苯酚	<i>o</i> -iodophenol	461
邻溴甲苯	<i>o</i> -bromotoluene	323
邻溴苯甲酸	<i>o</i> -bromobenzoic acid	796
邻溴苯酚	<i>o</i> -bromophenol	458
帕尔维异黄酮 A 三甲醚	parvisoflavone-A trimethyl ether	2330
帕尔维异黄酮 B 三甲醚	parvisoflavone-B trimethyl ether	2331
叔丁胺	<i>tert</i> -butylamine	1293
叔丁基苯	<i>tert</i> -butylbenzene	159
叔丁硫醇	<i>tert</i> -butanthiol	1962
叔丁醇	<i>tert</i> -butanol	374
$\alpha$ -松油烯	$\alpha$ -terpinene	2691
$\beta$ -松油烯	$\beta$ -terpinene	2693
$\gamma$ -松油烯	$\gamma$ -terpinene	2694
$\alpha$ -松油醇	$\alpha$ -terpineol	2669
$\beta$ -松油醇	$\beta$ -terpineol	2678
松油烯-4-醇	terpinen-4-ol	2668
松香芳三烯-19 $\alpha$ -酸	<i>ar</i> -abietatrien-19 $\alpha$ -oic acid	2904
松香芳三烯-19 $\beta$ -酸	<i>ar</i> -abietatrien-19 $\beta$ -oic acid	2905
松香芳三烯-19 $\alpha$ -醇	<i>ar</i> -abietatrien-19 $\alpha$ -ol	2902
松香芳三烯-19 $\beta$ -醇	<i>ar</i> -abietatrien-19 $\beta$ -ol	2903
松香芳三烯-19 $\alpha$ -醛	<i>ar</i> -abietatrien-19 $\alpha$ -al	2901
2 $\alpha$ -松香芹酮	2 $\alpha$ -pinocarpone	2731
2 $\beta$ -松香芹酮	2 $\beta$ -pinocarpone	2732
松香芹醇	pinocarveol	2739
岩藻甾醇	fucosterol	2627
依加皂甙元	igagenin	2602
依卡津	icajine	2148
依诺黄烷酮	inocenbrin	2313
茛	indene	117
茛并芘	indenopyrene	209
鱼藤素	deguelin	2355
鱼藤酮	rotenone	2356
17 $\alpha$ -育亨宾	17 $\alpha$ -yohimbine	2172
17 $\beta$ -育亨宾	17 $\beta$ -yohimbine	2173
鸢尾酮茜素	iridoskyrin	2522

## 九划

$\alpha$ -葑澄茄油烯	$\alpha$ -cububene	2832
$\beta$ -葑澄茄油烯	$\beta$ -cububene	2833
草二酰氯	oxalyl dichloride	823

草酰二胍	oxalic dihydrazide	1035
草酰胺	oxamide	842
草酸二乙酯	diethyl oxalate	930
草酸二甲酯	dimethyl oxalate	924
查耳酮	chalcone	2339
茶碱	theophylline	2248
哒嗪	pyridazine	1677
$\Delta^{5,7}$ -胆甾二烯-3 $\beta$ -醇	$\Delta^{5,7}$ -cholestadien-3 $\beta$ -ol	2628
$\Delta^5$ -胆甾烯	$\Delta^5$ -cholestene	2614
$\Delta^{22}$ -5 $\alpha$ -胆甾烯	$\Delta^{22}$ -5 $\alpha$ -cholestene	2619
$\Delta^7$ -5 $\alpha$ -胆甾烯-3 $\beta$ -醇	$\Delta^7$ -5 $\alpha$ -cholesten-3 $\beta$ -ol	2617
胆甾烷	cholestane	2606
5 $\beta$ -胆甾烷	5 $\beta$ -cholestane	2607
5 $\alpha$ -胆甾烷-3 $\alpha$ -醇	5 $\alpha$ -cholesten-3 $\alpha$ -ol	2608
5 $\alpha$ -胆甾烷-3 $\beta$ -醇	5 $\alpha$ -cholesten-3 $\beta$ -ol	2609
5 $\beta$ -胆甾烷-3 $\alpha$ -醇	5 $\beta$ -cholesten-3 $\alpha$ -ol	2610
胆甾醇	cholesterol	2615
毒毛旋花子甙元	strophanthidin	2576
氟乙酸	fluoroacetic acid	752
1-氟-1,2-二氯乙烷	1-fluoro-1,2-dichloroethane	242
氟苯	fluorobenzene	292
1-氟-1-氯乙烷	1-fluoro-1-chloroethane	280
1-氟-2-氯乙烷	1-fluoro-2-chloroethane	281
胍	guanidine	1913
钩吻定	gelsemine	2152
癸烷	decane	9
癸酸	decanoic acid	722
癸酸甲酯	methyl decanoate	896
癸醛	decanal	557
鬼臼脂素	podophyllotoxin	2940
哈佛的宁	ha.fordinin	2404
哈肯内酯	ha.kendin	2398
厚果皮醇	pachygenol	2578
$\alpha$ -胡桃烯-8-醇	$\alpha$ -copaen-8-ol	2843
胡椒基酸	piperonylic acid	776
胡椒醛	piperonal	600
柯楠碱	corynantheidine	2166
D-亮氨酸	D-leucine	2988
L-亮氨酸	L-leucine	2989
柳杉酚	sugiol	2900
洛乃因	romneine	2188
咪唑	imidazole	1604
2-咪唑基喹啉	2-imidazolylquinoline	1883
美艳百里亭	speciociliatine	2170
南天竹宁	nantenine	2202
柠檬烯	limonene	2690
柠檬酸	citric acid	751



γ-柠檬萜酮	γ-citromycinone	2972
哌啶	pipendine	1443
2-哌啶酮	2-piperidinone	1463
哌嗪	piperazine	1753
氢氰酸	hydrocyanic acid	1040
柔毛萜酮	daunomycinone	2974
椴花地衣酸	obtusatic acid	2954
顺式八氢茛	cis-octahydroindene	63
顺式-6,7-二氢金合欢醇	cis-6,7-dihydrofarnesol	2789
顺式十氢萘	cis-decahydronaphthalene	175
顺式,反式-10,11-二氢金合欢醇	cis,trans-10,11-dihydrofarnesol	2791
顺式,反式-金合欢烯酸甲酯	methyl cis,trans-farnesenate	2797
顺式,反式-金合欢醇	cis,trans-farnesol	2785
顺式,反式-金合欢醛	cis,trans-farnesal	2781
顺式苦橙油醇	cis-nerolidol	2788
顺式-β-松油醇	cis-β-terpineol	2677
顺式辣薄荷醇	cis-pipentol	2666
顺式-2,5-薄荷二烯-7-醇	cis-2,5-menthadien-7-ol	2709
顺式薄荷-2-烯-7-醇	cis-menth-2-en-7-ol	2671
顺式-8(10)-薄荷烯-9-醇	cis-8(10)-menthen-9-ol	2675
顺式薄荷烷-7-醇	cis-menthan-7-ol	2655
顺式薄荷烷-9-醇	cis-menthan-9-ol	2657
顺式藏茴香醇	cis-carveol	2703
香木兰烷	aromadendrane	2852
香木兰烯	aromadendrene	2854
香豆精	coumarin	2379
香豆酸	coumaric acid	779
香豆酸甲酯	methyl coumarate	987
香芹烯酮	carvenone	2683
香茅醛	citronellal	2643
香茅醇	citronellol	2644
α-香柠檬烯	α-bergamotene	2809
α-香树脂醇	α-amyrin	2924
β-香树脂醇	β-amyrin	2911
香橙醇	nerol	2640
香橙醛	neral	2639
洋茛菪黄酮-7-D-葡萄糖甙	diinsmetin-7-D-glucoside	2373
洋菝葜皂甙元	sarsasapogenin	2596
追米醇	drimenol	2862

## 十划

粉绿小冠花甙元	coroglaucigenin	2579
高三尖杉酯碱	homoharringtonine	2230
哥伦比亚素	columbianetin	2401
海柯皂甙元	hecogenin	2600
海洛因	heroine	2226

海南皂甙元	hainanigenin	2603
海蓝粟碱	glaucine	2204
海螵蛸精	marinobufagin	2588
胶酸	glutaric acid	743
胶酸二乙酯	diethyl glutarate	933
胶酸二甲酯	dimethyl glutarate	927
$\alpha$ -姜黄烯	$\alpha$ -curcumene	2808
姜烯	zingiberene	2805
莜烯	camphene	2769
莜烷醇	camphanol	2768
$\alpha$ -桉萜醇	$\alpha$ -sabinol	2763
$\beta$ -桉萜醇	$\beta$ -sabinol	2764
桉烯	sabinene	2762
<i>ent</i> -桉醇	<i>ent</i> -sabinol	2819
狼毒素	chamaejasmin	2336
苜蓿艾菊酮	carvotanacetone	2685
苜蓿艾菊醇	carvotanacetol	2670
苜蓿薄荷酮	carvomenthone	2647
桃金娘烯醇	myrtenol	2742
桃金娘烯醛	myrtenal	2737
桃金娘醛	myrtanal	2733
桃塔酚	totarol	2906
特克里安辛	tecleanthine	2239
特里阿奇菲林	trachyphyllin	2416
特洛西诺螵蛸精	telocinobufagin	2583
娃儿藤碱	tylophorine	2206
氧化松油精	dipentene oxide	2689
17-氧基白金雀儿碱	17-oxolupanine	2245
4-氧基戊内酯	4-oxopentylolactone	1092
3-氧基弥罗松酚	3-oxoferrugiol	2899
3-氧基桃塔酚	3-oxototarol	2909
圆锥茄皂甙元	paniculogenin	2605
晕苯	coronene	212

## 十一划

2-(1-氨基)吡啶	2-(1-aminoethyl)pyridine	1517
2-氨基哌啶	2-aminomethylpiperidine	1455
2-氨基噻吩	2-aminomethylthiophene	2018
3-氨基-4-乙基-1,2,4-三氮唑	3-amino-4-ethyl-1,2,4-triazole	1650
$\beta$ -氨基乙醇	$\beta$ -aminoethanol	364
$\alpha$ -氨基丁酸	$\alpha$ -aminobutyric acid	2980
3-氨基-5,6-二甲基-1,2,4-三嗪	3-amino-5,6-dimethyl-1,2,4-triazine	1768
2-氨基-4,6-二甲基嘧啶	2-amino-4,6-dimethylpyrimidine	1706
4-氨基二苯醚	4-aminodiphenyl ether	1428
2-氨基-4,5-二氢噻唑	2-amino-4,5-dihydrothiazole	2045
3-氨基-1,2,4-三氮唑	3-amino-1,2,4-triazole	1641

4-氨基-1,2,4-三氮唑	4-amino-1,2,4-triazole	1642
2-氨基-6-甲氧基嘌呤	2-amino-6-methoxypurine	1790
3-氨基-4-甲基-1,2,4-三氮唑	3-amino-4-methyl-1,2,4-triazole	1646
3-氨基-5-甲基异噁唑	3-amino-5-methylisoxazole	1673
2-氨基-3-甲基吡啶	2-amino-3-methylpyridine	1511
2-氨基-4-甲基吡啶	2-amino-4-methylpyridine	1512
2-氨基-5-甲基吡啶	2-amino-5-methylpyridine	1513
2-氨基-6-甲基吡啶	2-amino-6-methylpyridine	1514
6-氨基-7-甲基嘌呤	6-amino-7-methylpurine	1782
4-氨基甲酰基哌啶	4-aminoformylpiperidine	1454
氨基甲酸	carbamic acid	885
氨基甲酸乙酯	ethyl carbamate	886
5-氨基四唑	5-aminotetrazole	1658
1-氨基异喹啉	1-aminoisoquinoline	1896
3-氨基异喹啉	3-aminoisoquinoline	1897
4-氨基异喹啉	4-aminoisoquinoline	1898
5-氨基异喹啉	5-aminoisoquinoline	1899
6-氨基异喹啉	6-aminoisoquinoline	1900
7-氨基异喹啉	7-aminoisoquinoline	1901
8-氨基异喹啉	8-aminoisoquinoline	1902
2-氨基吡啶	2-aminopyridine	1508
3-氨基吡啶	3-aminopyridine	1509
4-氨基吡啶	4-aminopyridine	1510
1-氨基-5-氨基甲酰基咪唑	4-amino-5-aminoformylimidazole	1620
2-氨基-4-羟基嘧啶	2-amino-4-hydroxypyrimidine	1703
2-氨基-6-羟基嘌呤	2-amino-6-hydroxypurine	1788
N-氨基氮杂环己烷	N-aminopiperidine	1026
2-氨基-4-氯-6-甲基嘧啶	2-amino-4-chloro-6-methylpyrimidine	1722
2-氨基喹啉	2-aminoquinoline	1863
3-氨基喹啉	3-aminoquinoline	1864
4-氨基喹啉	4-aminoquinoline	1865
5-氨基喹啉	5-aminoquinoline	1866
6-氨基喹啉	6-aminoquinoline	1867
7-氨基喹啉	7-aminoquinoline	1868
8-氨基喹啉	8-aminoquinoline	1869
2-氨基嘧啶	2-aminopyrimidine	1693
4-氨基嘧啶	4-aminopyrimidine	1694
2-氨基噻唑	2-aminothiazole	2041
1,4-桉油精	1,4-cineole	2716
桉脂素	eudesmin	2937
$\alpha$ -桉醇	$\alpha$ -eudesmol	2817
$\beta$ -桉醇	$\beta$ -eudesmol	2818
淡黄紫堇碱	ochrobrine	2197
菲那亭	phenarctin	2948
$\alpha$ -菲兰烯	$\alpha$ -phellandrene	2697
$\beta$ -菲兰烯	$\beta$ -phellandrene	2696
菲醌	phenanthraquinone	2524

副冠武元	corotoxigenin	2575
硅酸四甲酯	tetramethyl silicate	2080
黄根酚	xanthorrhizol	2804
黄烷	flavane	2357
黄烷酮	flavanone	2312
黄酮	flavone	2260
黄嘌呤	xanthine	1789
降异维斯那津	norisovisnagin	2451
24-降胆甾-5,22-二烯-3 $\beta$ -醇	24-norcholesta-5,22-dien-3 $\beta$ -ol	2620
$\Delta^{13(14)}$ -康明酸甲酯	methyl $\Delta^{13(16)}$ -communate	2876
8(17),13-勒布二烯-15-酸	8(17),13-labdadien-15-oic acid	2873
8(17),13-勒布二烯-15-酸甲酯	methyl 8(17),13-labdadien-15-oate	2874
8(17),12,14-勒布三烯	8(17),12,14-labdatene	2863
8(17),13(16),14-勒布三烯	8(17),13(16),14-labdatiene	2864
8(17)-勒布烯-15-酸甲酯	methyl 8(17)-labden-15-oate	2875
曼得西酮	munduserone	2352
7-牻牛儿基氧基香豆精	7-geranyloxycoumarin	2403
萘	naphthalene	165
1,4-萘二胺	1,4-naphthalenediamine	1422
1,5-萘二胺	1,5-naphthalenediamine	1423
1,8-萘二胺	1,8-naphthalenediamine	1424
2,3-萘二胺	2,3-naphthalenediamine	1425
1-萘甲酸	1-naphthalenecarboxylic acid	788
2-萘甲酸	2-naphthalenecarboxylic acid	789
萘并[ $\alpha$ ]蒽	naphthaleno[ $\alpha$ ]anthracene	211
1-萘酚( $\alpha$ -萘酚)	1-naphthol( $\alpha$ -naphthol)	505
2-萘酚( $\beta$ -萘酚)	2-naphthol( $\beta$ -naphthol)	506
萘醌	naphthaquinone	2476
L-脯氨酸	L-proline	2982
2-羟甲基-1,3-二氧戊烷	2-hydroxymethyl-1,3-dioxolane	1162
3 $\alpha$ -羟甲基-17-甲氧基白坚木萜宁	3 $\alpha$ -hydroxymethyl-17-methoxyaspidofractinine	2138
3 $\beta$ -羟甲基-17-甲氧基白坚木萜宁	3 $\beta$ -hydroxymethyl-17-methoxyaspidofractinine	2139
2-羟甲基四氢呋喃	2-hydroxymethyltetrahydrofuran	1124
5-羟甲基异噻唑	5-hydroxymethylisothiazole	2059
5-羟甲基-2-呋喃醛	5-hydroxymethyl-2-furaldehyde	605
2-羟甲基咪唑	2-hydroxymethylimidazole	1613
2-羟甲基-5-羟基-4-吡喃酮	2-hydroxymethyl-5-hydroxypyran-4-one	1197
羟基乙酰苯胺	hydroxyacetylaniline	868
$\alpha$ -羟基乙酸	$\alpha$ -hydroxyacetic acid	735
$\alpha$ -羟基丁酸	$\alpha$ -hydroxybutanoic acid	736
1-羟基-3,6-二甲氧基-8-甲基吡酮	1-hydroxy-3,6-dimethoxy-8-methylxanthone	2434
5-羟基-6,7-二甲氧基黄酮	5-hydroxy-6,7-dimethoxyflavone	2284
3-羟基-4,5-二甲基异噻唑	3-hydroxy-4,5-dimethylisoxazole	1674
2-羟基-3,6-二甲基-4-氧基-3,4-二氢嘧啶	2-hydroxy-3,6-dimethyl-4-oxo-3,4-dihydropyrimidine	1730
2-羟基-3,5-二甲基-6-羟甲基对苯醌	2-hydroxy-3,5-dimethyl-6-hydroxymethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2470
2-羟基-4,6-二甲基嘧啶	2-hydroxy-4,6-dimethylpyrimidine	1708
14-羟基-7,8-二氢吗啡	14-hydroxy-7,8-dihydromorphine	2219

2-羟基-4,6-二氨基-1,3,5-三嗪	2-hydroxy-4,6-diamino-1,3,5-triazine	1765
1-羟基-3,5,6-三甲氧基吡酮	1-hydroxy-3,5,6-trimethoxyxanthone	2436
5-羟基-2',4',7-三甲氧基异黄酮	5-hydroxy-2',4',7-trimethoxyisoflavone	2327
2-羟基-3,4,6-三甲氧基查耳酮	2-hydroxy-3,4,6-trimethoxychalcone	2350
4-羟基-4',5,7-三甲氧基黄酮	4-hydroxy-4',5,7-trimethoxyflavane	2363
5-羟基-4',6,7-三甲氧基黄酮	5-hydroxy-4',6,7-trimethoxyflavone	2290
3-羟基-3',4',5,5',7-五甲氧基黄酮	3-hydroxy-3',4',5,5',7-pentamethoxyflavane	2370
5-羟基-3,3',4',6,7-五甲氧基黄酮	5-hydroxy-3,3',4',6,7-pentamethoxyflavone	2296
3-羟基-4-甲氧基苯甲醛	2-hydroxy-5-methoxybenzaldehyde	592
3-羟基-7-甲氧基黄酮	3-hydroxy-7-methoxyflavone	2268
5-羟基-7-甲氧基黄酮	5-hydroxy-7-methoxyflavone	2270
2-羟基-3-甲氧基萘醌	2-hydroxy-3-methoxynaphthaquinone	2489
1-羟基-2-甲氧基蒽醌	1-hydroxy-2-methoxyanthraquinone	2513
4-羟基-6-甲基己二烯内酯	4-hydroxy-6-methylhexadienylolactone	1104
4-羟基-4-甲基己内酯	4-hydroxy-4-methylhexylolactone	1099
2-羟基-5-甲基对苯醌	2-hydroxy-5-methyl- <i>p</i> -benzoquinone	2466
2-羟基-3-甲基吡啶	2-hydroxy-3-methylpyridine	1520
2-羟基-4-甲基吡啶	2-hydroxy-4-methylpyridine	1521
2-羟基-5-甲基吡啶	2-hydroxy-5-methylpyridine	1522
2-羟基-6-甲基吡啶	2-hydroxy-6-methylpyridine	1523
2-羟基-4-甲基苯甲醛	2-hydroxy-4-methylbenzaldehyde	587
2-羟基-5-甲基苯甲醛	2-hydroxy-5-methylbenzaldehyde	588
2-羟基-6-甲基苯甲醛	2-hydroxy-6-methylbenzaldehyde	589
3-羟基-4-甲基苯甲醛	3-hydroxy-4-methylbenzaldehyde	590
4-羟基-2-甲基苯甲醛	4-hydroxy-2-methylbenzaldehyde	591
2-羟基-4-甲基苯胺	2-hydroxy-4-methylaniline	1365
2-羟基-5-甲基苯胺	2-hydroxy-5-methylaniline	1366
4-羟基-4-甲基环己酮	4-hydroxy-4-methylcyclohexanone	683
3-羟基-6-甲基吡嗪	3-hydroxy-6-methylpyridazine	1679
2-羟基-3-甲基萘醌	2-hydroxy-3-methylnaphthaquinone	2496
6-羟基-7-甲基嘌呤	6-hydroxy-7-methylpurine	1784
3-羟基-3',4,4',7-四甲氧基黄酮	3-hydroxy-3',4,4',7-tetramethoxyflavane	2367
4-羟基-3',4',5,7-四甲氧基黄酮	4-hydroxy-3',4',5,7-tetramethoxyflavane	2368
3-羟基-3',4',5,7-四甲氧基黄酮	3-hydroxy-3',4',5,7-tetramethoxyflavanone	2323
5-羟基-3,3',4',7-四甲氧基黄酮	5-hydroxy-3,3',4',7-tetramethoxyflavone	2304
2-羟基四氢呋喃	2-hydroxytetrahydrofuran	1122
3-羟基四氢呋喃	3-hydroxytetrahydrofuran	1123
2-羟基四氢吡喃	2-hydroxytetrahydropyran	1147
7-羟基卡达烯	7-hydroxycadalene	2841
14-羟基可待因	14-hydroxycodeine	2224
14-羟基可待因酮	14-hydroxycodeinone	2222
5-羟基去氢白菖烯	5-hydroxycalamenene	2842
2'-羟基杜鹃素	2'-hydroxyfarrerol	2318
5-羟基呋喃香豆精	5-hydroxyfurocoumarin	2393
8-羟基呋喃香豆精	8-hydroxyfurocoumarin	2394
6-羟基麦诺醇	6-hydroxymanool	2869
19-羟基麦诺醇	19-hydroxymanool	2870

7 $\alpha$ -羟基考兰-16-烯-6,19-内酯	7 $\alpha$ -hydroxy-16-kaurene-6,19-lactone	2896
7 $\beta$ -羟基考兰-16-烯-6,19-内酯	7 $\beta$ -hydroxy-16-kaurene-6,19-lactone	2897
16-羟基考兰烷-19-醛	16-hydroxykauran-19-al	2890
14-羟基吗啡	14-hydroxymorphine	2218
5-羟基-L-色氨酸	5-hydroxy-L-tryptophan	2997
1-羟基吡酮	1-hydroxyxanthone	2422
2-羟基吡酮	2-hydroxyxanthone	2423
4-羟基吡酮	4-hydroxyxanthone	2424
1-羟基异喹啉	1-hydroxyisoquinoline	1903
5-羟基异喹啉	5-hydroxyisoquinoline	1904
N-羟基-2-吡咯烷酮	N-hydroxypyrrolidin-2-one	1440
2-羟基吡啶	2-hydroxypyridine	1518
3-羟基吡啶	3-hydroxypyridine	1519
4-羟基吡啶乙酸酯	4-hydroxypyridine acetate	1525
4-羟基吲哚	4-hydroxyindole	1812
5-羟基吲哚	5-hydroxyindole	1813
5-羟基-3-吲哚乙胺	5-hydroxy-3-indoleethamine	1845
5-羟基-3-吲哚乙酸	5-hydroxy-3-indoleacetic acid	1830
5-羟基-3-吲哚乙酸甲酯	methyl 5-hydroxy-3-indoleacetate	1834
4-羟基-3-吲哚-N,N-二甲基乙胺	4-hydroxy-3-indole-N,N-dimethylethamine	1847
5-羟基-3-吲哚-N,N-二甲基乙胺	5-hydroxy-3-indole-N,N-dimethylethamine	1848
9-羟基吲哚咪可待因	9-hydroxyindolinocodeine	2225
4-羟基-3-吲哚羧酸	4-hydroxy-3-indolecarboxylic acid	1827
5-羟基-3-吲哚羧酸	5-hydroxy-3-indolecarboxylic acid	1828
羟基阿亚黄酮 B	oxyayanin-B	2305
2-羟基环己酮	2-hydroxycyclohexanone	682
14-羟基依卡津	14-hydroxyicajine	2150
2-羟基查耳酮	2-hydroxychalcone	2340
4-羟基查耳酮	4-hydroxychalcone	2341
4'-羟基查耳酮	4'-hydroxychalcone	2342
3-羟基哒嗪	3-hydroxypyridazine	1678
2-羟基-2-咪唑啉	2-hydroxy-2-imidazoline	1627
N-羟基哌啶	N-hydroxypiperidine	1456
3-羟基哌啶	3-hydroxypiperidine	1457
4-羟基香豆精	4-hydroxycoumarin	2385
28-羟基- $\beta$ -香树脂醇	28-hydroxy- $\beta$ -amyrin	2913
3-羟基桃塔酚	3-hydroxytatarol	2907
7 $\beta$ -羟基桃塔酚	7 $\beta$ -hydroxytatarol	2908
2-羟基-5-氧基-1,2-去氧哌嗪	2-hydroxy-5-oxo-1,2-dehydropiperazine	1760
2-羟基-4-氧基-3,4,5,6-四氢嘧啶	2-hydroxy-4-oxo-3,4,5,6-tetrahydropyrimidine	1728
2-羟基-4-氨基-5-甲基嘧啶	2-hydroxy-4-amino-5-methylpyrimidine	1711
2-羟基-4-氨基嘧啶	2-hydroxy-4-aminopyrimidine	1702
4-羟基黄酮	4-hydroxyflavane	2358
2'-羟基黄酮酮	2'-hydroxyflavanone	2317
7-羟基黄酮	7-hydroxyflavone	2261
2-羟基萘醌	2-hydroxynaphthaquinone	2480
5-羟基萘醌	5-hydroxynaphthaquinone	2485

1-羟基-2-羟甲基蒽醌	1-hydroxy-2-hydroxymethylanthraquinone	2515
2-羟基喹啉	2-hydroxyquinoline	1870
3-羟基喹啉	3-hydroxyquinoline	1871
5-羟基喹啉	5-hydroxyquinoline	1872
6-羟基喹啉	6-hydroxyquinoline	1873
7-羟基喹啉	7-hydroxyquinoline	1874
8-羟基喹啉	8-hydroxyquinoline	1875
12 $\beta$ -羟基-5 $\beta$ -雄甾烷-3,17-二酮	12 $\beta$ -hydroxy-5 $\beta$ -androstan-3,17-dione	2557
3 $\alpha$ -羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷-17-酮	3 $\alpha$ -hydroxy-5 $\alpha$ -androstan-17-one	2545
3 $\alpha$ -羟基-5 $\beta$ -雄甾烷-17-酮	3 $\alpha$ -hydroxy-5 $\beta$ -androstan-17-one	2544
3 $\beta$ -羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷-11-酮	3 $\beta$ -hydroxy-5 $\alpha$ -androstan-11-one	2555
3 $\beta$ -羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷-17-酮	3 $\beta$ -hydroxy-5 $\alpha$ -androstan-17-one	2542
3 $\beta$ -羟基-5 $\beta$ -雄甾烷-17-酮	3 $\beta$ -hydroxy-5 $\beta$ -androstan-17-one	2543
17 $\beta$ -羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷-3-酮	17 $\beta$ -hydroxy-5 $\alpha$ -androstan-3-one	2554
17 $\beta$ -羟基-5 $\beta$ -雄甾烷-3-酮	17 $\beta$ -hydroxy-5 $\beta$ -androstan-3-one	2553
1-羟基蒽醌	1-hydroxyanthraquinone	2506
3-羟基酪氨酸	3-hydroxytyrosine	2995
6-羟基嘌呤	6-hydroxypurine	1783
3-羟基雌甾-1,3,5(10)-三烯	3-hydroxyestra-1,3,5(10)-triene	2568
3-羟基雌甾-1,3,5(10)-三烯-7,17-二酮	3-hydroxyestra-1,3,5(10)-trien-7,17-dione	2570
17 $\beta$ -羟基-5 $\alpha$ -雌甾烷-3-酮	17 $\beta$ -hydroxy-5 $\alpha$ -estran-3-one	2563
4-羟基嘧啶	4-hydroxypyrimidine	1697
15 $\alpha$ -羟基蟾蜍灵	15 $\alpha$ -hydroxybufalin	2582
蒎	chrysene	203
$\alpha$ -蛇麻烯	$\alpha$ -muurolene	2838
$\gamma$ -蛇麻烯	$\gamma$ -muurolene	2839
脱肠草内酯	herniarin	2387
脱落酸甲酯	methyl abscisate	2800
维斯那津	visnagin	2454
3,1'-烯丙基丙烯基醚	3,1'-allylpropenyl ether	524
菸酰胺	nicotinamide	1565
菸酸	nicotinic acid	1559
菸酸异戊酯	isoamyl nicotinate	1564

## 十二划

奥索内酯	osthol	2408
斑那帕宁	bannamurpanin	2299
氮丙啶	aziridine	1433
氮杂环丁烷	azetidine	1435
蒂巴因	thebaine	2220
敦酌拉辛	dendrolasin	2798
番木鳖次碱	vomicine	2149
番茄次碱	tomatidine	2258
番荔枝宁	xylopinine (norcoralydine)	2201
番薄荷酮	pulegone	2686
黑曲定 A	ustilaginoidin A	2455

黑苏亭	hirsutine	2169
琥珀二酰胺	succinamide	844
琥珀酸	succinic acid	742
琥珀酸二乙酯	diethyl succinate	932
琥珀酸二甲酯	dimethyl succinate	926
琥珀酸内酰胺	succinic lactam	878
琥珀酸单甲酯	monomethyl succinate	913
琥珀酸酐	succinic anhydride	813
$\Delta^1$ -蒎烯	$\Delta^1$ -carene	2753
$\Delta^5$ -蒎烯	$\Delta^5$ -carene	2754
1 $\beta$ -2-萜酮	1 $\beta$ -2-carone	2743
1 $\alpha$ -6-萜酮	1 $\alpha$ -6-carone	2744
1 $\beta$ -6-萜酮	1 $\beta$ -6-carone	2745
1 $\alpha$ -1 $\beta$ -萜醇	1 $\alpha$ -1 $\beta$ -carol	2752
1 $\beta$ -1 $\alpha$ -萜醇	1 $\beta$ -1 $\alpha$ -carol	2751
1 $\beta$ -5 $\beta$ -萜醇	1 $\beta$ -5 $\beta$ -carol	2750
1 $\alpha$ -6 $\alpha$ -萜醇	1 $\alpha$ -6 $\alpha$ -carol	2746
1 $\alpha$ -6 $\beta$ -萜醇	1 $\alpha$ -6 $\beta$ -carol	2748
1 $\beta$ -6 $\alpha$ -萜醇	1 $\beta$ -6 $\alpha$ -carol	2747
1 $\beta$ -6 $\beta$ -萜醇	1 $\beta$ -6 $\beta$ -carol	2749
喹啉	quinoline	1855
2-喹啉羧酸	2-quinolinecarboxylic acid	1881
6-喹啉羧酸	6-quinolinecarboxylic acid	1882
喇叭茶醇	ledol	2857
喇叭烯	ledene	2856
联苯	biphenyl	186
联苯-2,2'-二酚	biphenyl-2,2'-diol	504
联苯-4,4'-二酚	biphenyl-4,4'-diol	503
联苯甲酰氯	biphenylcarbonyl chloride	830
联苯-2-酚	biphenyl-2-ol	500
联苯-3-酚	biphenyl-3-ol	501
联苯-4-酚	biphenyl-4-ol	502
硫代乙酰苯胺	thioacetylaniline	2005
硫代乙酰胺	thioacetamide	884
硫代乙酸	thioacetic acid	1996
硫代戊酸甲酯	methyl thiopentanoate	1009
硫代苯甲酰胺	thiobenzamide	2000
硫代苯甲酸	thiobenzoic acid	1999
硫代菸酰胺	thionicotiamide	2003
硫杂环丁烷	thietane	1926
硫杂环丙烷	thiirane	1923
硫脲	thiourea	1991
硫氰酸乙酯	ethyl thiocyanate	998
硫氰酸丙酯	propyl thiocyanate	999
硫氰酸甲酯	methyl thiocyanate	997
硫氰酸苄醇酯	benzylalcohol thiocyanate	1001
硫氰酸苯酯	phenyl thiocyanate	1000



硫酸二甲酯	dimethyl sulfate	1005	
硫磺	sulfur	2067	
氯乙酸	chloroacetic acid	753	
2-氯-1,3-二甲苯	2-chloro-1,3-dimethylbenzene	329	
2-氯-1,4-二甲苯	2-chloro-1,4-dimethylbenzene	330	
4-氯-1,2-二甲苯	4-chloro-1,2-dimethylbenzene	331	
4-氯-1,3-二甲苯	4-chloro-1,3-dimethylbenzene	332	
3-氯-1,2,4-三氮唑	3-chloro-1,2,4-triazole	1648	
3-氯-5-甲基-1,2,4-三氮唑	3-chloro-5-methyl-1,2,4-triazole	1649	
2-氯-3-甲基吡啶	2-chloro-3-methylpyridine	1546	
2-氯-4-甲基吡啶	2-chloro-4-methylpyridine	1547	
2-氯-5-甲基吡啶	2-chloro-5-methylpyridine	1548	
2-氯-6-甲基吡啶	2-chloro-6-methylpyridine	1549	
4-氯吡唑	4-chloropyrazole	1578	
2-氯吡啶	2-chloropyridine	1544	
3-氯吡啶	3-chloropyridine	1545	
4-氯吲哚	4-chloroindole	1820	
5-氯吲哚	5-chloroindole	1821	
氯苯	chlorobenzene	298	
5-氯苯并呋喃	5-chlorobenzofuran	1184	
7-氯苯并呋喃	7-chlorobenzofuran	1185	
2-氯环戊酮	2-chlorocyclopentanone	666	
4-氯邻苯二甲酸	4-chloro- <i>o</i> -phthalic acid	803	
1-氯萘	1-chloronaphthalene	341	
2-氯萘	2-chloronaphthalene	342	
2-氯喹啉	2-chloroquinoline	1878	
6-氯喹啉	6-chloroquinoline	1879	
8-氯喹啉	8-chloroquinoline	1880	
1-氯-2-溴苯	1-chloro-2-bromobenzene	317	
1-氯-3-溴苯	1-chloro-3-bromobenzene	318	
1-氯-4-溴苯	1-chloro-4-bromobenzene	319	
2-氯嘧啶	2-chloropyrimidine	1721	
2-氯噻吩	2-chlorothiophene	2029	
$\alpha$ -蒎烯	$\alpha$ -pinene	2736	
$\delta$ -蒎烯	$\delta$ -pinene	2730	
$\alpha$ -蒎烯氧化物	$\alpha$ -pinene oxide	2734	
1,2,3,4- $\alpha$ -D-葡萄糖吡喃糖四甲醚	1,2,3,4- $\alpha$ -D-glucopyranose tetramethyl ether	2964	
1,2,3,6- $\beta$ -D-葡萄糖吡喃糖四甲醚	1,2,3,6- $\beta$ -D-glucopyranose tetramethyl ether	2965	
1,3,4,6- $\alpha$ -D-葡萄糖吡喃糖四甲醚	1,3,4,6- $\alpha$ -D-glucopyranose tetramethyl ether	2966	
2,3,4,6- $\alpha$ -D-葡萄糖吡喃糖四甲醚	2,3,4,6- $\alpha$ -D-glucopyranose tetramethyl ether	2967	
氰基乙酰胺	cianoacetamide	1046	
2-氰基吡啶	2-cyanopyridine	1067	
3-氰基吡啶	3-cyanopyridine	1068	
4-氰基吡啶	4-cyanopyridine	1069	
氰酸乙酯	ethyl cyanate	991	
氰酸丁酯	butyl cyanate	994	
氰酸丙酯	propyl cyanate	992	

氰酸仲丁酯	<i>sec</i> -butyl cyanate	995
氰酸异丙酯	isopropyl cyanate	993
2-巯基-4,5-二氢噻唑	2-mercapto-4,5-dihydrothiazole	2046
2-巯基噻吩	2-mercaptothiophene	2027
3-巯基噻吩	3-mercaptothiophene	2028
替告皂甙元	tigogenin	2595
替告皂甙元-3-酮	tigogen-3-one	2594
硝基乙烷	nitroethane	1201
硝基丁烷	nitrobutane	1203
硝基丙烷	nitropropane	1202
硝基甲烷	nitromethane	1200
1-硝基吡唑	1-nitropyrazole	1579
3-硝基吡唑	3-nitropyrazole	1580
4-硝基吡唑	4-nitropyrazole	1581
2-硝基吡啶	2-nitropyridine	1567
硝基苯	nitrobenzene	1204
3-硝基邻苯二胺	3-nitro- <i>o</i> -benzenediamine	1236
4-硝基邻苯二胺	4-nitro- <i>o</i> -benzenediamine	1237
2-硝基咪唑	2-nitroimidazole	1621
5-硝基咪唑	5-nitroimidazole	1622
硝酸乙酯	ethyl nitrate	1011
硝酸丙酯	propyl nitrate	1012
硝酸甲酯	methyl nitrate	1010
象牙胺	eburnamine	2177
象牙酮宁	eburnamonine	2178
雄甾-4-烯-3-酮	androst-4-en-3-one	2558
雄甾-4-烯-3-酮-17 $\alpha$ -醇	androst-4-en-3-one-17 $\alpha$ -ol	2560
雄甾-4-烯-3-酮-17 $\beta$ -醇	androst-4-en-3-one-17 $\beta$ -ol	2559
5 $\alpha$ -雄甾烷	5 $\alpha$ -androstane	2536
5 $\beta$ -雄甾烷	5 $\beta$ -androstane	2537
5 $\alpha$ -雄甾烷-3,17-二酮	5 $\alpha$ -androstan-3,17-dione	2540
5 $\beta$ -雄甾烷-3,17-二酮	5 $\beta$ -androstan-3,17-dione	2541
5 $\alpha$ -雄甾烷-3 $\beta$ -醇	5 $\alpha$ -androstan-3 $\beta$ -ol	2548
5 $\beta$ -雄甾烷-3 $\alpha$ -醇	5 $\beta$ -androstan-3 $\alpha$ -ol	2546
5 $\beta$ -雄甾烷-3 $\beta$ -醇	5 $\beta$ -androstan-3 $\beta$ -ol	2547
5 $\alpha$ -雄甾烷-17 $\beta$ -醇	5 $\alpha$ -androstan-17 $\beta$ -ol	2550
5 $\alpha$ -雄甾烷-17-酮	5 $\alpha$ -androstan-17-one	2538
5 $\beta$ -雄甾烷-17-酮	5 $\beta$ -androstan-17-one	2539
雅檀蓝烯	eremophilene	2814
硬脂酰胺	stearamide	839
硬脂酸	stearic acid	730
硬脂酸乙酯	ethyl stearate	923
硬脂酸甲酯	methyl stearate	902
$\alpha_2$ -紫红霉酮	$\alpha_2$ -rhodomycinone	2970
紫苏醇	perillaldehyde	2700
紫堇定	corydine	2203
棕榈酰胺	palmitamide	838

棕榈酸 palmic acid 728  
 棕榈酸乙酯 ethyl palmitate 922

## 十三划

碘乙烷 iodoethane 232  
 1-碘丁烷 1-iodobutane 257  
 2-碘丁烷 2-iodobutane 258  
 1-碘己烷 1-iodohexane 262  
 3-碘丙炔 3-iodopropyne 291  
 碘代叔丁烷 iodo-*tert*-butane 260  
 碘甲烷 iodomethane 218  
 1-碘戊烷 1-iodopentane 261  
 1-碘异丁烷 1-iodoisobutane 259  
 碘苯 iodobenzene 300  
 2-碘噻吩 2-iodothiophene 2030  
 椴树黄酮 tilianin 2372  
 1,2,5-噁二唑 1,2,5-oxodiazole 1675  
 噁唑 oxazole 1661  
 蒽 anthracene 198  
 蒽醌 anthraquinone 2500  
 L-赖氨酸 L-lysine 2993  
 蓝萆辛 fumaricine 2194  
 蓝萆亭 fumaritine 2193  
 蓝萆亭乙酸酯 fumaritine acetate, fumarophycine 2195  
 硼酸三乙酯 triethyl borate 2070  
 硼酸三丙酯 tripropyl borate 2071  
 蒲桃酸 pimelic acid 745  
 蒲桃酸二甲酯 dimethyl pimelate 928  
 瑞西蟾蜍甙元 resibufogenin 2587  
 2-羧基吡咯 2-carboxylpyrrole 1484  
 2-羧基咪唑 2-carboxylimidazole 1616  
 5-羧基咪唑 5-carboxylimidazole 1617  
 腺嘌呤 adenine 1781  
 新绿莲皂甙元 neochlorogenin 2597  
 溴乙酸 bromoacetic acid 754  
 2-溴乙醇 2-bromoethanol 365  
 1-溴丁烷 1-bromobutane 253  
 2-溴丁烷 2-bromobutane 254  
 溴化氰 cyanogen bromide 1045  
 1-溴丙烯 1-bromopropene 282  
 2-溴丙烯 2-bromopropene 283  
 3-溴丙烯 3-bromopropene 284  
 3-溴丙炔 3-bromopropyne 290  
 1-溴丙烷 1-bromopropane 250  
 2-溴丙烷 2-bromopropane 251  
 5-溴水杨酸 5-bromosalicylic acid 802

3-溴-1-丙醇	3-bromo-1-propanol	366
1-溴异丁烷	1-bromoisobutane	255
2-溴吡啶	2-bromopyridine	1555
3-溴吡啶	3-bromopyridine	1556
5-溴吲哚	5-bromoindole	1822
溴苯	bromobenzene	299
5-溴苯并呋喃	5-bromobenzofuran	1186
5-溴嘧啶	5-bromopyrimidine	1725
$\alpha$ -愈创木烯	$\alpha$ -guaiene	2847
$\beta$ -愈创木烯	$\beta$ -guaiene	2848
$\delta$ -愈创木烯	$\delta$ -guaiene	2849
愈创木醇	guaiol	2850

## 十四划

雌甾-4-烯-3,17-二酮	estr-4-en-3,17-dione	2566
雌甾-4-烯-3-酮	estr-4-en-3-one	2565
碱 Ia	alkaloid Ia	2242
碱 X VI	alkaloid X VI	2233
蜡酸甲酯	methyl cerotate	910
$\Delta^{4(8)}$ -辣薄荷烯酮	$\Delta^{4(8)}$ -piperitenone	2701
$\Delta^8$ -辣薄荷烯酮	$\Delta^8$ -piperitenone	2699
辣薄荷酮	piperitone	2682
蔓生鱼藤异黄酮	scandenone	2332
蔓生鱼藤素	scandenun	2417
蜜茶萸生碱	melicopicine	2243
蜜茶萸碱	melicopine	2237
嘧啶	pyrimidine	1686
2,4,6-嘧啶三酮	2,4,6-pyrimidinetrione	1731
嘌呤	purine	1777
赛母诺斯民	thamnosmin	2415
赛奇酸甲酯	methyl sekikioate	2949
碳酸二肼	carbonic dihydrazide	1036
碳酸二乙酯	diethyl carbonate	1016
碳酸二甲酯	dimethyl carbonate	1015
熊果-12-烯	urs-12-ene	2923
熊果-12-烯-28-醇	urs-12-en-28-ol	2926
熊果酸	ursolic acid	2927
熊果醛	ursenal	2925

## 十五划

榧叶醇	torreyol	2844
槲皮素	quercetin	2266
缬氨酸	valine	2983
醍茜素	skyrin	2523
樟芳林	cinnamolaurine	2187

樟脑	camphor	2718
1S-樟脑	1S-camphor	2719
樟脑肟	camphor oxime	1920
樟烷	camphane	2717
樟烷-2 $\alpha$ ,3 $\beta$ -二醇	camphane-2 $\alpha$ ,3 $\beta$ -diol	2724
樟烷-2 $\beta$ ,3 $\beta$ -二醇	camphane-2 $\beta$ ,3 $\beta$ -diol	2725
樟烷-2 $\beta$ ,3 $\alpha$ -二醇	camphane-2 $\beta$ ,3 $\alpha$ -diol	2726
樟烷-2 $\alpha$ ,3 $\alpha$ -二醇	camphane-2 $\alpha$ ,3 $\alpha$ -diol	2727
樟烷-2,7-二醇	camphane-2,7-diol	2728
樟烷-2,9-二醇	camphane-2,9-diol	2729

## 十六划

1,4-薄荷二烯-7-醇	1,4-menthadien-7-ol	2706
1,5-薄荷二烯-7-醇	1,5-menthadien-7-ol	2707
1,8-薄荷二烯-7-醇	1,8-menthadien-7-ol	2705
1,8(10)-薄荷二烯-9-醇	1,8(10)-menthadien-9-ol	2710
$\Delta^1$ -薄荷烯	$\Delta^1$ -menthene	2661
$\Delta^2$ -薄荷烯	$\Delta^2$ -menthene	2662
$\Delta^3$ -薄荷烯	$\Delta^3$ -menthene	2663
$\Delta^{4(8)}$ -薄荷烯	$\Delta^{4(8)}$ -menthene	2664
$\Delta^8$ -薄荷烯	$\Delta^8$ -menthene	2665
1(7)-薄荷烯-9-醇	1(7)-menthen-9-ol	2673
4(8)-薄荷烯-9-醇	4(8)-menthen-9-ol	2674
薄荷-4-烯-3-酮	menth-4-en-3-one	2684
薄荷烷	menthane	2646
薄荷烷-1,2-二醇	menthan-1,2-diol	2659
薄荷烷-3,4-二醇	menthan-3,4-diol	2660
薄荷烷-1-醇	menthan-1-ol	2650
薄荷烷-4-醇	menthan-4-ol	2654
薄荷烷-8-醇	menthan-8-ol	2656
薄荷酮	menthone	2648
薄荷醇	menthol	2652
1-薄荷-9-醛	1-menthen-9-al	2681
噻吩	thiophene	2007
2-噻吩乙酸	2-thiopheneacetic acid	2026
2-噻吩羧酸	2-thiophenecarboxylic acid	2023
3-噻吩羧酸	3-thiophenecarboxylic acid	2024
2-噻吩醛	2-thiophenecarboxaldehyde	2019
噻唑	thiazole	2034
噻唑烷	thiazolidine	2048
4-噻喃酮	thiopyran-4-one	1942
薯蓣皂甙元	diosgenin	2593

## 十七划

糠醛	furaldehyde	603
----	-------------	-----

磷酸二乙酯	diethyl phosphate	<b>2090</b>
磷酸二甲酯	dimethyl phosphate	<b>2089</b>
$\alpha$ -檀香烯	$\alpha$ -santalene	<b>2811</b>
$\beta$ -檀香烯	$\beta$ -santalene	<b>2812</b>
$\alpha$ -檀香醇	$\alpha$ -santalol	<b>2813</b>

## 十八划

磷杂环戊烷	phospholane	<b>2092</b>
磷酸三甲酯	trimethyl phosphate	<b>2091</b>
藏茴香酮	carvone	<b>2698</b>
藏茴香醇	carveol	<b>2702</b>

## 十九划

蟾蜍灵	bufalin	<b>2580</b>
蟾蜍甙元	bufotalin	<b>2585</b>

## 三、英汉化合物名称索引

(黑体阿拉伯数字是化合物的编号)

## A

$\alpha$ -abietatrien-19 $\alpha$ -oic acid	松香芳三烯-19 $\alpha$ -酸	<b>2904</b>
$\alpha$ -abietatrien-19 $\beta$ -oic acid	松香芳三烯-19 $\beta$ -酸	<b>2905</b>
$\alpha$ -abietatrien-19 $\alpha$ -al	松香芳三烯-19 $\alpha$ -醛	<b>2901</b>
$\alpha$ -abietatrien-19 $\alpha$ -ol	松香芳三烯-19 $\alpha$ -醇	<b>2902</b>
$\alpha$ -abietatrien-19 $\beta$ -ol	松香芳三烯-19 $\beta$ -醇	<b>2903</b>
acacetin	刺槐素	<b>2273</b>
acetaldehyde	乙醛	<b>548</b>
acetamide	乙酰胺	<b>832</b>
acetic acid	乙酸	<b>716</b>
acetic anhydride	乙酸酐	<b>811</b>
acetodinitrile	乙二腈	<b>1047</b>
acetone	丙酮	<b>624</b>
acetone oxime	丙酮肟	<b>1917</b>
acetonitrile	乙腈	<b>1041</b>
acetophenone	苯乙酮	<b>697</b>
<i>p</i> -acetoxybenzoic acid	对乙酰氧基苯甲酸	<b>775</b>
<i>m</i> -acetylacetophenone	间乙酰基苯乙酮	<b>709</b>
<i>p</i> -acetylacetophenone	对乙酰基苯乙酮	<b>710</b>
3 $\alpha$ -acetylamino-20-acetylmethylamino-5-pregnene	3 $\alpha$ -乙酰氨基-20-乙酰甲基氨基-5-孕甾烯	<b>2255</b>
acetylaniline	乙酰苯胺	<b>859</b>
<i>o</i> -acetylaniline	邻乙酰基苯胺	<b>1367</b>
<i>m</i> -acetylaniline	间乙酰基苯胺	<b>1368</b>
<i>p</i> -acetylaniline	对乙酰基苯胺	<b>1369</b>

<i>N</i> <sub>6</sub> -acetylaspidospermidine	<i>N</i> <sub>6</sub> -乙酰基白坚米定	2107
2-acetylbenzofuran	2-乙酰基苯并呋喃	1187
acetyl chloride	乙酰氯	820
2-acetylcyclohexanone	2-乙酰基环己酮	684
<i>N</i> <sub>6</sub> -acetylcylindrocarine	<i>N</i> <sub>6</sub> -乙酰基西林卡林	2126
<i>N</i> <sub>6</sub> -acetyl-17-demethoxycylindrocarine	<i>N</i> <sub>6</sub> -乙酰基-17-去甲氧基西林卡林	2125
acetylhydrazide	乙酰肼	1034
<i>N</i> <sub>6</sub> -acetyl-20-hydroxycylindrocarine	<i>N</i> <sub>6</sub> -乙酰基-20-羟基西林卡林	2128
2-acetyl-3-hydroxyfuran	2-乙酰基-3-羟基呋喃	1141
3-acetyl-4-hydroxythiophene	3-乙酰基-4-羟基噻吩	2022
3-acetylindole	3-乙酰基吲哚	1839
<i>N</i> -acetyl-L-leucine methyl ester	<i>N</i> -乙酰基-L-亮氨酸甲酯	2999
<i>N</i> <sub>6</sub> -acetyl-16-methoxy-17-hydroxyaspidospermidine	<i>N</i> <sub>6</sub> -乙酰基-16-甲氧基-17-羟基白坚米定	2113
2-acetyl-5-methylimidazole	2-乙酰基-5-甲基咪唑	1615
2-acetyl-3-methylindole	2-乙酰基-3-甲基吲哚	1840
2-acetylnaphthaquinone	2-乙酰基萘醌	2498
<i>N</i> <sub>6</sub> -acetyl-10-oxocylindrocarine	<i>N</i> <sub>6</sub> -乙酰基-10-氧基西林卡林	2129
acetylphenylhydrazide	乙酰苯肼	1038
<i>N</i> -acetyl piperidine	<i>N</i> -乙酰基哌啶	1453
2-acetylpyridine	2-乙酰基吡啶	1538
3-acetylpyridine	3-乙酰基吡啶	1539
4-acetylpyridine	4-乙酰基吡啶	1540
2-acetylthiophene	2-乙酰基噻吩	2020
3-acetylthiophene	3-乙酰基噻吩	2021
acetylthiourea	乙酰基硫脲	1995
acovenosigenin-A	阿可维诺贰元 A	2573
acridone	吡啶酮	2231
acronycine	山油柑碱	2241
adenine	腺嘌呤	1781
adenine D-psicofuranoside	D-果呋喃糖腺苷	2961
adipic acid	肥酸	744
adipic anhydride	己二酸酐	816
adriamycinone	亚德里亚霉素	2975
ajmalicine	阿码碱	2171
L-alanine	L-丙氨酸	2979
albomaculine	白斑网球花碱	2207
alkoaromadendrene	别香木兰烯	2855
3,1'-allylpropenyl ether	3,1'-烯丙基丙烯基醚	524
alkaloid Ia	碱 Ia	2242
alkaloid XVI	碱 XVI	2233
<i>m</i> -aminoacetylaniline	间氨基乙酰苯胺	862
<i>p</i> -aminoacetylaniline	对氨基乙酰苯胺	863
4-amino-5-aminoformylimidazole	4-氨基-5-氨甲酰基咪唑	1620
<i>m</i> -aminobenzamide	间氨基苯甲酰胺	850
<i>p</i> -aminobenzamide	对氨基苯甲酰胺	851
<i>o</i> -aminobenzoic acid	邻氨基苯甲酸	769
<i>m</i> -aminobenzoic acid	间氨基苯甲酸	770

<i>p</i> -aminobenzoic acid	对氨基苯甲酸	771
<i>o</i> -aminobenzylalcohol	邻氨基苄醇	1395
<i>p</i> -aminobenzylalcohol	对氨基苄醇	1396
$\alpha$ -aminobutyric acid	$\alpha$ -氨基丁酸	2980
2-amino-4-chloro-6-methylpyrimidine	2-氨基-4-氯-6-甲基嘧啶	1722
2-amino-4,5-dihydrothiazole	2-氨基-4,5-二氢噻唑	2045
2-amino-4,6-dimethylpyrimidine	2-氨基-4,6-二甲基嘧啶	1706
3-amino-5,6-dimethyl-1,2,4-triazine	3-氨基-5,6-二甲基-1,2,4-三嗪	1768
4-aminodiphenyl ether	4-氨基二苯醚	1428
$\beta$ -aminoethanol	$\beta$ -氨基乙醇	364
2-(1-aminoethyl)pyridine	2-(1-氨基乙基)吡啶	1517
3-amino-4-ethyl-1,2,4-triazole	3-氨基-4-乙基-1,2,4-三氮唑	1650
4-aminofornylpiperidine	4-氨基甲酰基哌啶	1454
2-amino-6-hydroxypurine	2-氨基-6-羟基嘌呤	1788
2-amino-4-hydroxypyrimidine	2-氨基-4-羟基嘧啶	1703
1-aminoisoquinoline	1-氨基异喹啉	1896
3-aminoisoquinoline	3-氨基异喹啉	1897
4-aminoisoquinoline	4-氨基异喹啉	1898
5-aminoisoquinoline	5-氨基异喹啉	1899
6-aminoisoquinoline	6-氨基异喹啉	1900
7-aminoisoquinoline	7-氨基异喹啉	1901
8-aminoisoquinoline	8-氨基异喹啉	1902
2-amino-6-methoxypurine	2-氨基-6-甲氧基嘌呤	1790
3-amino-5-methylisoxazole	3-氨基-5-甲基异噁唑	1673
2-aminomethylpiperidine	2-氮甲基哌啶	1455
6-amino-7-methylpurine	6-氨基-7-甲基嘌呤	1782
2-amino-3-methylpyridine	2-氨基-3-甲基吡啶	1511
2-amino-4-methylpyridine	2-氨基-4-甲基吡啶	1512
2-amino-5-methylpyridine	2-氨基-5-甲基吡啶	1513
2-amino-6-methylpyridine	2-氨基-6-甲基吡啶	1514
2-aminomethylthiophene	2-氮甲基噻吩	2018
3-amino-4-methyl-1,2,4-triazole	3-氨基-4-甲基-1,2,4-三氮唑	1646
<i>o</i> -amino- <i>p</i> -nitrobenzoic acid	邻氨基对硝基苯甲酸	1228
<i>p</i> -aminophenylacetic acid	对氨基苯乙酸	809
<i>N</i> -aminopiperidine	<i>N</i> -氨基氮杂环己烷	1026
2-aminopyridine	2-氨基吡啶	1508
3-aminopyridine	3-氨基吡啶	1509
4-aminopyridine	4-氨基吡啶	1510
2-aminopyrimidine	2-氨基嘧啶	1693
4-aminopyrimidine	4-氨基嘧啶	1694
2-aminoquinoline	2-氨基喹啉	1863
3-aminoquinoline	3-氨基喹啉	1864
4-aminoquinoline	4-氨基喹啉	1865
5-aminoquinoline	5-氨基喹啉	1866
6-aminoquinoline	6-氨基喹啉	1867
7-aminoquinoline	7-氨基喹啉	1868
8-aminoquinoline	8-氨基喹啉	1869



5-aminotetrazole	5-氨基四唑	1658
2-aminothiazole	2-氨基噻唑	2041
<i>o</i> -aminothiophenol	邻氨基苯硫酚	1990
3-amino-1,2,4-triazole	3-氨基-1,2,4-三氮唑	1641
4-amino-1,2,4-triazole	4-氨基-1,2,4-三氮唑	1642
$\alpha$ -amyrin	$\alpha$ -香树脂醇	2924
$\beta$ -amyrin	$\beta$ -香树脂醇	2911
5 $\alpha$ -androstan-3,17-dione	5 $\alpha$ -雄甾烷-3,17-二酮	2540
5 $\beta$ -androstan-3,17-dione	5 $\beta$ -雄甾烷-3,17-二酮	2541
5 $\alpha$ -androstan-3-one	5 $\alpha$ -雄甾烷-3-酮	2536
5 $\beta$ -androstan-3-one	5 $\beta$ -雄甾烷-3-酮	2537
5 $\alpha$ -androstan-3 $\beta$ -ol	5 $\alpha$ -雄甾烷-3 $\beta$ -醇	2548
5 $\beta$ -androstan-3 $\alpha$ -ol	5 $\beta$ -雄甾烷-3 $\alpha$ -醇	2546
5 $\beta$ -androstan-3 $\beta$ -ol	5 $\beta$ -雄甾烷-3 $\beta$ -醇	2547
5 $\alpha$ -androstan-17 $\beta$ -ol	5 $\alpha$ -雄甾烷-17 $\beta$ -醇	2550
5 $\alpha$ -androstan-17-one	5 $\alpha$ -雄甾烷-17-酮	2538
5 $\beta$ -androstan-17-one	5 $\beta$ -雄甾烷-17-酮	2539
androst-4-en-3-one	雄甾-4-烯-3-酮	2558
androst-4-en-3-one-17 $\alpha$ -ol	雄甾-4-烯-3-酮-17 $\alpha$ -醇	2560
androst-4-en-3-one-17 $\beta$ -ol	雄甾-4-烯-3-酮-17 $\beta$ -醇	2559
angelicin	白芷素	2392
aniline	苯胺	1336
anthracene	蒽	198
anthraquinone	蒽醌	2500
apigenin	芹菜素	2264
arachidic acid	花生酸	732
arenobufagin	阿瑞诺蟾蜍精	2584
aristolone	土青木香酮	2827
aromadendrane	香木兰烷	2852
aromadendrene	香木兰烯	2854
14 $\alpha$ -artebufogenin	14 $\alpha$ -异树脂状蟾蜍甙元	2586
L-aspartic acid	L-天冬氨酸	2991
DL-aspartic acid	DL-天冬氨酸	2992
aspidodispermine	白坚木明	2146
aspidofiline	白坚木菲林	2137
aspidofractine	白坚木茛定	2141
aspidospermine	白坚木碱	2112
atranorin	阿特拉诺林	2945
azelaic acid	壬二酸	746
azetidine	氮杂环丁烷	1435
aziridine	氮丙啶	1433

## B

banamurpanin	斑那帕宁	2299
behenic acid	山萘酸	734
<i>o</i> -benzaldial	邻苯二甲醛	601

<i>p</i> -benzadial	对苯二甲醛	602
benzaldehyde	苯甲醛	573
benzamide	苯甲酰胺	845
benzene	苯	131
<i>o</i> -benzenediamine	邻苯二胺	1413
<i>m</i> -benzenediamine	间苯二胺	1414
<i>p</i> -benzenediamine	对苯二胺	1415
benzenemethanol	苯醇	410
1,2,4-benzenetricarboxylic acid	1,2,4-苯三羧酸	786
1,3,5-benzenetricarboxylic acid	1,3,5-苯三羧酸	787
1,2,4-benzenetriol	1,2,4-苯三酚	424
benzoanthracene	苯并蒽	204
benzo-2,3-dihydrofuran	苯并-2,3-二氢呋喃	1176
<i>o</i> -benzodinitrile	邻苯二腈	1064
<i>m</i> -benzodinitrile	间苯二腈	1065
<i>p</i> -benzodinitrile	对苯二腈	1066
benzofuran	苯并呋喃	1178
3-benzofurancarboxylic acid	3-苯并呋喃羧酸	1188
benzoic acid	苯甲酸	758
benzoic anhydride	苯甲酸酐	819
benzophenanthraquinone	苯并蒽醌	2499
benzonitrile	苯腈	1060
benzo[ghi]perylene	苯并[ghi]花	205
benzo[a]phenanthrene	苯并[a]菲	201
<i>p</i> -benzoquinone	对苯醌	2456
benzothiophene	苯并噻吩	2032
benzoyl bromide	苯甲酰溴	826
benzoyl chloride	苯甲酰氯	825
<i>N</i> <sub>6</sub> -benzoylcylindrocaine	<i>N</i> <sub>6</sub> -苯甲酰基西林卡林	2127
benzoylhydrazide	苯甲酰肼	1037
benzylalcohol acetate	乙酸苄醇酯	953
benzylalcohol benzoate	苯甲酸苄醇酯	976
benzylalcohol thiocyanate	硫氰酸苄醇酯	1001
benzylamine	苄胺	1406
benzyl bromide	苄基溴	338
benzyl chloride	苄基氯	336
benzyl iodide	苄基碘	339
benzyl trichloride	苄基三氯	340
$\alpha$ -bergamotene	$\alpha$ -香柠檬烯	2809
$\alpha$ - <i>trans</i> - $\beta$ -bergamotene	$\alpha$ -反式- $\beta$ -香柠檬烯	2810
bergapten	佛手内酯	2395
biphenyl	联苯	186
biphenylcarbonyl chloride	联苯甲酰氯	830
biphenyl-2-ol	联苯-2-酚	500
biphenyl-3-ol	联苯-3-酚	501
biphenyl-4-ol	联苯-4-酚	502
biphenyl-2,2'-diol	联苯-2,2'-二酚	504

biphenyl-4,4'-diol	联苯-4,4'-二酚	503	
$\beta$ -bisabolanol	$\beta$ -没药烷醇	2801	
$\alpha$ -bisabolene	$\alpha$ -没药烯	2806	
$\beta$ -bisabolene	$\beta$ -没药烯	2807	
$\beta$ -bisabolol	$\beta$ -没药醇	2803	
$\alpha$ -bisabolol oxide	$\alpha$ -没药烯醇氧化物	2802	
3,20-bisacetylamino-18-hydroxy-5-pregnene	3,20-双乙酰氨基-18-羟基-5-孕甾烯	2256	
3,20-bisdimethylamino-5 $\alpha$ -pregnane	3,20-双二甲氨基-5 $\alpha$ -孕甾烷	2253	
3,20-bisdimethylamino-5-pregnene	3,20-双二甲氨基-5-孕甾烯	2252	
5,5'-bis(2-hydroxy-3,6-dimethyl)- <i>p</i> -benzoquinone	5,5'-双(2-羟基-3,6-二甲基)对苯醌	2475	
2,5-bis(4-hydroxyphenyl)- <i>p</i> -benzoquinone	2,5-二(4-羟基苯基)对苯醌	2474	
3,20-bis(isopropylimino)-18-hydroxy-5 $\alpha$ -pregnane	3,20-双异丙亚氨基-18-羟基-5 $\alpha$ -孕甾烷	2257	
3,20-bismethylamino-5-pregnene	3,20-双甲基氨基-5-孕甾烯	2254	
bispyrrolmethane	双吡咯甲烷	1485	
borneol	龙脑	2722	
bromoacetic acid	溴乙酸	754	
bromobenzene	溴苯	299	
5-bromobenzofuran	5-溴苯并呋喃	1186	
<i>o</i> -bromobenzoic acid	邻溴苯甲酸	796	
<i>m</i> -bromobenzoic acid	间溴苯甲酸	797	
<i>p</i> -bromobenzoic acid	对溴苯甲酸	798	
1-bromobutane	1-溴丁烷	253	
2-bromobutane	2-溴丁烷	254	
2-bromoethanol	2-溴乙醇	365	
bromofluoromethane	一氟一溴甲烷	224	
5-bromoindole	5-溴吲哚	1822	
1-bromoisobutane	1-溴异丁烷	255	
<i>o</i> -bromophenol	邻溴苯酚	458	
<i>m</i> -bromophenol	间溴苯酚	459	
<i>p</i> -bromophenol	对溴苯酚	460	
<i>m</i> -bromophenylhydrazine hydrochloride	间溴苯肼盐酸盐	1029	
<i>p</i> -bromophenylhydrazine hydrochloride	对溴苯肼盐酸盐	1030	
1-bromopropane	1-溴丙烷	250	
2-bromopropane	2-溴丙烷	251	
3-bromo-1-propanol	3-溴-1-丙醇	366	
1-bromopropene	1-溴丙烯	282	
2-bromopropene	2-溴丙烯	283	
3-bromopropene	3-溴丙烯	284	
3-bromopropyne	3-溴丙炔	290	
3-bromopyridine	3-溴吡啶	1556	
2-bromopyridine	2-溴吡啶	1555	
5-bromopyrimidine	5-溴嘧啶	1725	
5-bromosalicylic acid	5-溴水杨酸	802	
<i>o</i> -bromotoluene	邻溴甲苯	323	
<i>m</i> -bromotoluene	间溴甲苯	324	
<i>p</i> -bromotoluene	对溴甲苯	325	
bufalin	蟾蜍灵	2580	

bufotalin	蟾蜍甙元	2585	
bulnesol	异愈创木醇	2851	
1,3-butadiene	1,3-丁二烯	79	
1,3-butadiyne	1,3-丁二炔	127	
butanal	丁醛	551	
butanal oxime	丁醛肟	1915	
butanamide	丁酰胺	834	
butane	丁烷	4	
butanedial	丁二醛	570	
1,4-butanediamine	1,4-丁二胺	1326	
butanedinitrile	丁二腈	1049	
1,4-butanediol	1,4-丁二醇	378	
2,3-butanediol	2,3-丁二醇	379	
2,3-butanedione	2,3-丁二酮	649	
1,4-butanedithiol	1,4-丁二硫醇	1969	
butanetriol	丁三醇	572	
butanoic acid	丁酸	718	
1-butanol	1-丁醇	346	
2-butanol	2-丁醇	368	
<i>tert</i> -butanol	叔丁醇	374	
2-butanone	2-丁酮	625	
butanthiol	丁硫醇	1959	
2-butanthiol	2-丁硫醇	1961	
<i>tert</i> -butanthiol	叔丁硫醇	1962	
2-butenal	2-丁烯醛	567	
2-buten-1,4-diol	2-丁烯-1,4-二醇	385	
1-butene	1-丁烯	66	
2-butene	2-丁烯	69	
butenedinitrile	丁烯二腈	1054	
butenedioic anhydride	丁烯二酸酐	814	
butenedioic lactam	丁烯二酸内酰胺	877	
2-butenic acid	2-丁烯酸	738	
3-butenic acid	3-丁烯酸	739	
2-buten-1-ol	2-丁烯-1-醇	383	
3-buten-2-ol	3-丁烯-2-醇	384	
3-buten-2-one	3-丁烯-2-酮	626	
butylamine	丁胺	1281	
2-butylamine	2-丁胺	1291	
<i>tert</i> -butylamine	叔丁胺	1293	
<i>N</i> -butylaniline	<i>N</i> -丁基苯胺	1405	
butyl cyanate	氰酸丁酯	994	
<i>sec</i> -butyl cyanate	氰酸仲丁酯	995	
<i>n</i> -butylbenzene	正丁基苯	156	
<i>tert</i> -butylbenzene	叔丁基苯	159	
butyl formate	甲酸丁酯	939	
<i>tert</i> -butyl formate	甲酸叔丁酯	942	
butylhydrazine	丁基肼	1023	

butyl nitrous acid	亚硝酸丁酯	1014
butylpentyl ether	丁基戊基醚	521
N-butylpyrrole	N-丁基吡咯	1482
1-butyltetrahydro- $\beta$ -carboline	1-丁基四氢- $\beta$ -咔啉	2159
1-butyne	1-丁炔	125
2-butyne	2-丁炔	126
butynedinitrile	丁炔二腈	1056
butyrolactone	丁内酯	1073

## C

cadina-5,8-diene	杜松-5,8-二烯	2831
1,5-cadinadiene	1,5-杜松二烯	2837
cadinene	杜松烯	2834
$\gamma$ -cadinene	$\gamma$ -杜松烯	2835
$\delta$ -cadinene	$\delta$ -杜松烯	2836
caffeine	咖啡碱	2250
calamenene	去氢白菖烯	2840
camphane	樟烷	2717
camphane-2 $\alpha,3$ $\beta$ -diol	樟烷-2 $\alpha,3$ $\beta$ -二醇	2724
camphane-2 $\beta,3$ $\beta$ -diol	樟烷-2 $\beta,3$ $\beta$ -二醇	2725
camphane-2 $\beta,3$ $\alpha$ -diol	樟烷-2 $\beta,3$ $\alpha$ -二醇	2726
camphane-2 $\alpha,3$ $\alpha$ -diol	樟烷-2 $\alpha,3$ $\alpha$ -二醇	2727
camphane-2,7-diol	樟烷-2,7-二醇	2728
camphane-2,9-diol	樟烷-2,9-二醇	2729
camphanol	玫烷醇	2768
camphene	茨烯	2769
camphor	樟脑	2718
1S-camphor	1S-樟脑	2719
camphor oxime	樟脑肟	1920
canadine	卡那定	2199
carbamic acid	氨基甲酸	885
$\beta$ -carboline	$\beta$ -咔啉	2154
carbonic dihydrazide	碳酰二肼	1036
2-carboxylimidazole	2-羧基咪唑	1616
5-carboxylimidazole	5-羧基咪唑	1617
2-carboxylpyrrole	2-羧基吡咯	1484
$\Delta^1$ -carene	$\Delta^1$ -萜烯	2753
$\Delta^5$ -carene	$\Delta^5$ -萜烯	2754
1 $\alpha$ -1 $\beta$ -carol	1 $\alpha$ -1 $\beta$ -萜醇	2752
1 $\beta$ -1 $\alpha$ -carol	1 $\beta$ -1 $\alpha$ -萜醇	2751
1 $\beta$ -5 $\beta$ -carol	1 $\beta$ -5 $\beta$ -萜醇	2750
1 $\alpha$ -6 $\alpha$ -carol	1 $\alpha$ -6 $\alpha$ -萜醇	2746
1 $\alpha$ -6 $\beta$ -carol	1 $\alpha$ -6 $\beta$ -萜醇	2748
1 $\beta$ -6 $\alpha$ -carol	1 $\beta$ -6 $\alpha$ -萜醇	2747
1 $\beta$ -6 $\beta$ -carol	1 $\beta$ -6 $\beta$ -萜醇	2749
1 $\beta$ -2-carone	1 $\beta$ -2-萜酮	2743

1 $\alpha$ -6-carone	1 $\alpha$ -6-萜酮	2744
1 $\beta$ -6-carone	1 $\beta$ -6-萜酮	2745
carvenone	香芹烯酮	2683
carveol	藏茴香醇	2702
cis-carveol	顺式藏茴香醇	2703
trans-carveol	反式藏茴香醇	2704
carvomenthone	莴萝薄荷酮	2647
carvone	藏茴香酮	2698
carvotanacetol	莴萝艾菊醇	2670
carvotanacetone	莴萝艾菊酮	2685
$\beta$ -caryophyllene	$\beta$ -石竹烯	2861
trans-caryophyllene	反式石竹烯	2860
catechin tetramethyl ether	儿茶精四甲醚	2366
catechol	邻苯二酚	420
catechol diacetate	邻苯二酚二乙酸酯	954
catvinic acid	凯替维酸	2871
chalcone	查耳酮	2339
chamaejasmin	狼毒素	2336
chloroacetic acid	氯乙酸	753
<i>o</i> -chloroaniline	邻氯苯胺	1374
<i>m</i> -chloroaniline	间氯苯胺	1375
<i>p</i> -chloroaniline	对氯苯胺	1376
<i>o</i> -chlorobenzaldehyde	邻氯苯甲醛	595
<i>m</i> -chlorobenzaldehyde	间氯苯甲醛	596
<i>p</i> -chlorobenzaldehyde	对氯苯甲醛	597
<i>o</i> -chlorobenzamide	邻氯苯甲酰胺	853
<i>p</i> -chlorobenzamide	对氯苯甲酰胺	854
chlorobenzene	氯苯	298
5-chlorobenzofuran	5-氯苯并呋喃	1184
7-chlorobenzofuran	7-氯苯并呋喃	1185
<i>o</i> -chlorobenzoic acid	邻氯苯甲酸	793
<i>m</i> -chlorobenzoic acid	间氯苯甲酸	794
<i>p</i> -chlorobenzoic acid	对氯苯甲酸	795
1-chloro-2-bromobenzene	1-氯-2-溴苯	317
1-chloro-3-bromobenzene	1-氯-3-溴苯	318
1-chloro-4-bromobenzene	1-氯-4-溴苯	319
2-chlorocyclopentanone	2-氯环戊酮	666
2-chloro-1,3-dimethylbenzene	2-氯-1,3-二甲苯	329
2-chloro-1,4-dimethylbenzene	2-氯-1,4-二甲苯	330
4-chloro-1,2-dimethylbenzene	4-氯-1,2-二甲苯	331
4-chloro-1,3-dimethylbenzene	4-氯-1,3-二甲苯	332
chlorofluoromethane	一氟一氯甲烷	223
4-chloroindole	4-氯吲哚	1820
5-chloroindole	5-氯吲哚	1821
2-chloro-3-methylpyridine	2-氯-3-甲基吡啶	1546
2-chloro-4-methylpyridine	2-氯-4-甲基吡啶	1547
2-chloro-5-methylpyridine	2-氯-5-甲基吡啶	1548

2-chloro-6-methylpyridine	2-氯-6-甲基吡啶	1549
3-chloro-5-methyl-1,2,4-triazole	3-氯-5-甲基-1,2,4-三氮唑	1649
1-chloronaphthalene	1-氯萘	341
2-chloronaphthalene	2-氯萘	342
<i>o</i> -chlorophenol	邻氯苯酚	455
<i>m</i> -chlorophenol	间氯苯酚	456
<i>p</i> -chlorophenol	对氯苯酚	457
4-chloro- <i>o</i> -phthalic acid	4-氯邻苯二甲酸	803
4-chloropyrazole	4-氯吡唑	1578
2-chloropyridine	2-氯吡啶	1544
3-chloropyridine	3-氯吡啶	1545
2-chloropyrimidine	2-氯嘧啶	1721
2-chloroquinoline	2-氯喹啉	1878
6-chloroquinoline	6-氯喹啉	1879
8-chloroquinoline	8-氯喹啉	1880
2-chlorothiophene	2-氯噻吩	2029
<i>o</i> -chlorotoluene	邻氯甲苯	320
<i>m</i> -chlorotoluene	间氯甲苯	321
<i>p</i> -chlorotoluene	对氯甲苯	322
3-chloro-1,2,4-triazole	3-氯-1,2,4-三氮唑	1648
$\Delta^{5,7}$ -cholestadien-3 $\beta$ -ol	$\Delta^{5,7}$ -胆甾二烯-3 $\beta$ -醇	2628
cholestane	胆甾烷	2606
5 $\beta$ -cholestane	5 $\beta$ -胆甾烷	2607
$\Delta^5$ -cholestene	$\Delta^5$ -胆甾烯	2614
$\Delta^{22}$ -5 $\alpha$ -cholestene	$\Delta^{22}$ -5 $\alpha$ -胆甾烯	2619
5 $\alpha$ -cholesten-3 $\alpha$ -ol	5 $\alpha$ -胆甾烷-3 $\alpha$ -醇	2608
5 $\alpha$ -cholesten-3 $\beta$ -ol	5 $\alpha$ -胆甾烷-3 $\beta$ -醇	2609
5 $\beta$ -cholesten-3 $\alpha$ -ol	5 $\beta$ -胆甾烷-3 $\alpha$ -醇	2610
$\Delta^7$ -5 $\alpha$ -cholesten-3 $\beta$ -ol	$\Delta^7$ -5 $\alpha$ -胆甾烯-3 $\beta$ -醇	2617
cholesterol	胆甾醇	2615
chondrofoline	谷树叶碱	2189
chromone	色酮	2444
2-chromonecarboxylic acid	2-色酮羧酸	2447
chrysene	蒽	203
chrysin	白杨素	2262
1,4-cineole	1,4-桉油精	2716
cinnamic acid	肉桂酸	777
cinnamolaurine	樟劳林	2187
cinnamoyl chloride	肉桂酰氯	827
cunobufotalin	华蟾蜍素	2591
citric acid	柠檬酸	751
$\gamma$ -citromycinone	$\gamma$ -柠檬霉酮	2972
citronellal	香茅醛	2643
citronellol	香茅醇	2644
codeine	可待因	2214
columbianetin	哥伦比亚素	2401
$\alpha$ -copaen-8-ol	$\alpha$ -胡桃烯-8-醇	2843

coroglauigenin	粉绿小冠花甙元	2579
coronene	晕苯	212
corotoxigenin	副冠甙元	2575
corydine	紫堇定	2203
corynantheidine	柯楠碱	2166
coumaric acid	香豆酸	779
coumarin	香豆精	2379
crestagenin	克瑞斯塔皂甙元	2601
$\alpha$ -cububene	$\alpha$ -单澄茄油烯	2832
$\beta$ -cububene	$\beta$ -单澄茄油烯	2833
$\alpha$ -curcumene	$\alpha$ -姜黄烯	2808
cynoacetamide	氰基乙酰胺	1046
cyanogen bromide	溴化氰	1045
2-cyanopyridine	2-氰基吡啶	1067
3-cyanopyridine	3-氰基吡啶	1068
4-cyanopyridine	4-氰基吡啶	1069
cyclobisubero diene (thamnosit)	环双花椒二烯	2419
cyclobutane	环丁烷	45
cyclobutanol	环丁醇	387
cyclobutanone	环丁酮	653
cyclobutanone oxime	环丁酮肟	1918
cyclobutanthiol	环丁硫醇	1966
cycloheptane	环庚烷	61
cyclohepta-1,3,5-triene	1,3,5-环庚三烯	115
cycloheptene	环庚烯	113
cyclohepta-1,3-diene	1,3-环庚二烯	114
2,5-cyclohexadien-1,4-dione dioxime	2,5-环己二烯-1,4-二酮二肟	1922
cyclohexa-1,3-diene	1,3-环己二烯	109
cyclohexa-1,4-diene	1,4-环己二烯	110
1,2-cyclohexadione	1,2-环己二酮	690
1,3-cyclohexadione	1,3-环己二酮	691
1,4-cyclohexadione	1,4-环己二酮	692
cyclohexanamine	环己胺	1330
cyclohexane	环己烷	52
<i>o</i> -cyclohexanediamine	邻环己二胺	1334
<i>m</i> -cyclohexanediamine	间环己二胺	1335
1,2-cyclohexanediol	1,2-环己二醇	400
1,3-cyclohexanediol	1,3-环己二醇	401
1,4-cyclohexanediol	1,4-环己二醇	402
1,2,3,4-cyclohexanetetrol	1,2,3,4-环己四醇	406
1,2,4,5-cyclohexanetetrol	1,2,4,5-环己四醇	407
1,2,3-cyclohexanetriol	1,2,3-环己三醇	403
1,2,4-cyclohexanetriol	1,2,4-环己三醇	404
1,3,5-cyclohexanetriol	1,3,5-环己三醇	405
cyclohexanol	环己醇	394
cyclohexanone	环己酮	679
cyclohexanthiol	环己硫醇	1967



cyclohexene	环己烯	104
2-cyclohexenone	2-环己烯酮	685
cycloocta-1,5-diene	1,5-环辛二烯	116
cyclooctane	环辛烷	62
cyclopentadiene	环戊二烯	99
cyclopentanamine	环戊胺	1328
cyclopentane	环戊烷	46
1,3-cyclopentanediol	1,3-环戊二醇	391
1,3-cyclopentanedione	1,3-环戊二酮	671
1,2,4-cyclopentanetrione	1,2,4-环戊三酮	676
cyclopentanol	环戊醇	388
cyclopentanone	环戊酮	662
cyclopentanone oxime	环戊酮肟	1919
3-cyclopenten-1,2-diol	3-环戊烯-1,2-二醇	392
2-cyclopenten-1,4-diol	2-环戊烯-1,4-二醇	393
2-cyclopentenone	2-环戊烯酮	667
cyclopropane	环丙烷	42
cylindrocaine	西林卡林	2122
cylindrocarpol	西林醇碱	2121
<i>p</i> -cymene	对聚伞素	2711
L-cysteine	L-半胱氨酸	2986

## D

daidzein	大豆异黄酮	2325
daunomycinone	柔毛霉酮	2974
davanone	大瓦酮	2799
deacetylnobafagin	去乙酰基华蟾蜍精	2589
deacetylnobifotafin	去乙酰基华蟾蜍素	2590
deacetylcylindrocarpol	去乙酰基西林醇碱	2118
dehbilone	土青木香酮	2828
decahydroisoquinoline	十氢异喹啉	1907
<i>cis</i> -decahydronaphthalene	顺式十氢萘	175
<i>trans</i> -decahydronaphthalene	反式十氢萘	176
decahydroquinoline	十氢喹啉	1891
decanal	癸醛	557
decane	癸烷	9
decanoic acid	癸酸	722
deformylaspidofractine, kopsamine	去甲酰基白坚木美定	2140
deformyl-17-methoxyaspidofractine	去甲酰基-17-甲氧基白坚木美定	2143
deguelin	鱼藤素	2355
2,3-dehydro-1,4-dioxane	2,3-去氢-1,4-二氧己环	1171
dchydrogermin	去氢吉泽林	2409
1,2-dihydropiperidine	1,2-去氢哌啉	1462
7-demethoxyreserpine	7-去甲氧基利血平	2176
O-demethylaspidospermin	O-去甲基白坚木碱	2111
N-demethylodeine	N-去甲基可待因	2212

<i>O</i> -demethyl-2',3'-dihydroxydihydrosuberoin	<i>O</i> -去甲基-2',3'-二羟基二氢花椒素	2413
6- <i>O</i> -demethylgriseofulvin	6- <i>O</i> -去甲基灰黄霉素	2977
13-demethylsanguinarine	13-去甲基血根碱	2246
1-demethyltecleanthine	1-去甲基特克里安辛	2235
<i>O</i> -demethylvisnagin	<i>O</i> -去甲基维斯那津	2452
dendrolasin	敦酌拉辛	2798
deoxyaspidodispermine	去氧白坚木明	2145
14-deoxypergularinine	14-去氧帕固拉瑞宁	2205
3-deoxytigogenin	3-去氧替告皂甙元	2592
3,3'-diallyl ether	3,3'-二烯丙基醚	525
3,5-diaminobenzoic acid	3,5-二氨基苯甲酸	772
2,6-diamino-4-hydroxypyrimidine	2,6-二氨基-4-羟基嘧啶	1717
4,5-diamino-6-methylpyrimidine	4,5-二氨基-6-甲基嘧啶	1707
2,6-diaminopyrazine	2,6-二氨基吡嗪	1750
2,3-diaminopyridine	2,3-二氨基吡啶	1534
2,6-diaminopyridine	2,6-二氨基吡啶	1535
3,4-diaminopyridine	3,4-二氨基吡啶	1536
2,4-diaminopyrimidine	2,4-二氨基嘧啶	1695
4,5-diaminopyrimidine	4,5-二氨基嘧啶	1696
dibenzo[ <i>a,c</i> ]anthracene	二苯并[ <i>a,c</i> ]蒽	208
dibenzo[ <i>a,h</i> ]anthracene	二苯并[ <i>a,h</i> ]蒽	210
dibenzo[ <i>def,mno</i> ]chrysene	二苯并[ <i>def,mno</i> ]蒽	206
dibenzo[ <i>def,p</i> ]chrysene	二苯并[ <i>def,p</i> ]蒽	214
dibenzonaphthacene	二苯并并四苯	213
dibromoacetic acid	二溴乙酸	755
1,3-dibromoacetone	1,3-二溴丙酮	652
2,4-dibromoaniline	2,4-二溴苯胺	1386
2,5-dibromoaniline	2,5-二溴苯胺	1387
<i>o</i> -dibromobenzene	邻二溴苯	304
<i>m</i> -dibromobenzene	间二溴苯	305
<i>p</i> -dibromobenzene	对二溴苯	306
1,4-dibromobutane	1,4-二溴丁烷	256
1,1-dibromoethane	1,1-二溴乙烷	235
1,2-dibromoethane	1,2-二溴乙烷	237
1,2-dibromoethene	1,2-二溴乙烯	273
dibromomethane	二溴甲烷	221
2,4-dibromophenol	2,4-二溴苯酚	470
2,6-dibromophenol	2,6-二溴苯酚	471
1,3-dibromopropane	1,3-二溴丙烷	252
2,5-dibromopyridine	2,5-二溴吡啶	1557
2,5-dibromotoluene	2,5-二溴甲苯	333
3,5-dibromotoluene	3,5-二溴甲苯	334
di- <i>tert</i> -butanone	二叔丁酮	634
di- <i>tert</i> -butylamine	二叔丁胺	1303
dibutyl ether	二丁醚	519
di- <i>tert</i> -butyl ether	二叔丁醚	520
dibutyl <i>o</i> -phthalate	邻苯二甲酸二丁酯	983

dibutyl sulfide	二丁基硫醚	1975	
di- <i>sec</i> -butyl sulfide	二仲丁基硫醚	1977	
di- <i>tert</i> -butyl sulfide	二叔丁基硫醚	1978	
1,3-dichloroacetone	1,3-二氯丙酮	651	
2,3-dichloroaniline	2,3-二氯苯胺	1380	
2,4-dichloroaniline	2,4-二氯苯胺	1381	
2,5-dichloroaniline	2,5-二氯苯胺	1382	
2,6-dichloroaniline	2,6-二氯苯胺	1383	
3,4-dichloroaniline	3,4-二氯苯胺	1384	
3,5-dichloroaniline	3,5-二氯苯胺	1385	
<i>o</i> -dichlorobenzene	邻二氯苯	301	
<i>m</i> -dichlorobenzene	间二氯苯	302	
<i>p</i> -dichlorobenzene	对二氯苯	303	
2,6-dichloro- <i>p</i> -benzenediamine	2,6-二氯对苯二胺	1426	
1,1-dichloroethane	1,1-二氯乙烷	234	
1,2-dichloroethane	1,2-二氯乙烷	236	
1,1-dichloroethene	1,1-二氯乙烯	271	
1,2-dichloroethene	1,2-二氯乙烯	272	
dichloroethyne	二氯乙炔	289	
<i>p</i> -dichlorohydroquinone	对二氯对苯二酚	485	
dichloromethane	二氯甲烷	220	
1,5-dichloropentane	1,5-二氯戊烷	249	
2,3-dichlorophenol	2,3-二氯苯酚	464	
2,4-dichlorophenol	2,4-二氯苯酚	465	
2,5-dichlorophenol	2,5-二氯苯酚	466	
2,6-dichlorophenol	2,6-二氯苯酚	467	
3,4-dichlorophenol	3,4-二氯苯酚	468	
3,5-dichlorophenol	3,5-二氯苯酚	469	
3,6-dichloropyridazine	3,6-二氯哒嗪	1683	
2,3-dichloropyridine	2,3-二氯吡啶	1550	
2,5-dichloropyridine	2,5-二氯吡啶	1551	
2,6-dichloropyridine	2,6-二氯吡啶	1552	
3,5-dichloropyridine	3,5-二氯吡啶	1553	
2,4-dichloropyrimidine	2,4-二氯嘧啶	1723	
4,6-dichloropyrimidine	4,6-二氯嘧啶	1724	
<i>m</i> -dichlororesocinol	间二氯间苯二酚	484	
1,10-didehydroaristolane	1,10-二去氢上青木香烷	2826	
1,3-diethenylbenzene	1,3-二乙烯基苯	163	
diethenyl ether	二乙烯醚	522	
diethenyl sulfide	二乙烯基硫醚	1979	
1,1-diethoxybutane	1,1-二乙氧基丁烷	613	
2,2-diethoxyethylbenzene	2,2-二乙氧基乙基苯	620	
1,1-diethoxyheptane	1,1-二乙氧基庚烷	615	
1,1-diethoxy-2-hexene	1,1-二乙氧基-2-己烯	619	
1,1-diethoxynonane	1,1-二乙氧基壬烷	617	
1,1-diethoxyoctane	1,1-二乙氧基辛烷	616	
1,1-diethoxypentane	1,1-二乙氧基戊烷	614	

diethyl adipate	己二酸二乙酯	934
diethylamine	二乙胺	1295
<i>N,N</i> -diethylaniline	<i>N,N</i> -二乙基苯胺	1404
2,6-diethylaniline	2,6-二乙基苯胺	1351
<i>o</i> -diethylbenzene	邻二乙基苯	146
<i>m</i> -diethylbenzene	间二乙基苯	147
<i>p</i> -diethylbenzene	对二乙基苯	148
<i>N,N'</i> -diethyl- <i>p</i> -benzenediamine	<i>N,N'</i> -二乙基对苯二胺	1420
diethyl carbonate	碳酸二乙酯	1016
<i>N,N</i> -diethylcinnamide	<i>N,N</i> -二乙基肉桂酰胺	857
2,6-diethyl-3,5-dimethylpyran-4-one	2,6-二乙基-3,5-二甲基-4-吡喃酮	1198
diethyl ether(ether)	二乙醚(乙醚)	513
<i>N,N</i> -diethylformamide	<i>N,N</i> -二乙基甲酰胺	840
diethyl glutarate	胶酸二乙酯	933
1,1-diethylhydrazine	1,1-二乙基肼	1024
1,2-diethylhydrazine	1,2-二乙基肼	1025
diethyl malonate	丙二酸二乙酯	931
diethyl oxalate	草酸二乙酯	930
3,3-diethylpentane	3,3-二乙基戊烷	34
diethyl persulfide	过氧化二乙硫	2064
diethylphosphine	二乙基膦	2086
diethylphosphate	磷酸二乙酯	2090
diethyl <i>o</i> -phthalate	邻苯二甲酸二乙酯	981
diethyl <i>p</i> -phthalate	对苯二甲酸二乙酯	982
2,6-diethylpyrazine	2,6-二乙基吡嗪	1743
diethyl succinate	琥珀酸二乙酯	932
diethyl sulfide	二乙基硫醚	1972
diethyl sulfurous acid	亚硫酸二乙酯	1007
2,5-diethyltetrahydrofuran	2,5-二乙基四氢呋喃	1121
diethylthioacetane	二乙硫基甲烷	1983
<i>N,N'</i> -diethylthiourea	<i>N,N'</i> -二乙基硫脲	1994
1,3-difluoroacetone	1,3-二氟丙酮	650
1,4-difluorobuta-1,3-diyne	1,4-二氟-1,3-丁二炔	288
1,1-difluoroethane	1,1-二氟乙烷	233
1,1-difluoroethene	1,1-二氟乙烯	269
1,2-difluoroethene	1,2-二氟乙烯	270
difluoroethyne	二氟乙炔	287
difluoromethane	二氟甲烷	219
5,5'-difuran-2,2'-dial	5,5'-二呋喃-2,2'-二醛	607
1,2-difuranyl-2-glycol	1,2-二呋喃基-2-乙二醇	380
digalogenin	地盖罗皂甙元	2598
dihydroagarofuran	二氢沉香呋喃	2820
dihydrocarveol	二氢藏茴香醇	2679
dihydrocarvone	二氢藏茴香酮	2687
2,3-dihydrochromone	2,3-二氢色酮	2442
7,8-dihydrocodeine	7,8-二氢可待因	2217
7,8-dihydrocodeinone	7,8-二氢可待因酮	2216

dihydrocorynantheine	二氢柯楠因	2168
d. hydrocorynantheol	二氢柯梓醇	2164
dihydrocoumarin	二氢香豆精	2380
2,3-dihydrofarnesol	2,3-二氢金合欢醇	2793
<i>trans</i> -2,3-dihydrofarnesol	反式-2,3-二氢金合欢醇	2794
<i>cis</i> -6,7-dihydrofarnesol	顺式-6,7-二氢金合欢醇	2789
<i>trans</i> -6,7-dihydrofarnesol	反式-6,7-二氢金合欢醇	2790
<i>cis,trans</i> -10,11-dihydrofarnesol	顺式,反式-10,11-二氢金合欢醇	2791
<i>trans,trans</i> -10,11-dihydrofarnesol	反式,反式-10,11-二氢金合欢醇	2792
dihydrofumarylilone	二氢蓝萘林	2192
2,5-dihydrofuran	2,5-二氢呋喃	1125
dihydrogeijerin	二氢吉泽林	2412
18,19-dihydrogelsevirine	18,19-二氢钩吻绿碱	2151
2,3-dihydroindene	2,3-二氢茛	118
2,3-dihydroindole	2,3-二氢吲哚	1823
7,8-dihydromorphine	7,8-二氢吗啡	2213
1,2-dihydronaphthalene	1,2-二氢萘	173
dihydroneerone	二氢尼罗宁	2210
dihydroosthol	二氢奥索内酯	2410
dihydropicrolicheic acid	二氢苦地衣酸	2950
dihydropimaric acid	二氢右松脂酸	2887
dihydropyran	二氢吡喃	1148
2,5-dihydropyrrole	2,5-二氢吡咯	1441
16,17-dihydroreserpiline	16,17-二氢利血平灵	2174
dihydrothezamine	二氢毛茶因	2163
dihydrosaponaretin	二氢皂草黄酮	2376
dihydrosuberosin	二氢花椒素	2411
2,3-dihydrotabersonine	2,3-二氢他波素宁	2130
dihydrotanshinone I	二氢丹参酮 I	2526
2,3-dihydrothiophene	2,3-二氢噻吩	1937
2,5-dihydrothiophene	2,5-二氢噻吩	1938
2,5-dihydrothiophen-2-one	2,5-二氢-2-噻吩酮	1939
2,4-dihydrothiopyran-3-one	2,4-二氢-3-噻喃酮	1940
2,6-dihydrothiopyran-3-one	2,6-二氢-3-噻喃酮	1941
dihydroumbellulone	二氢伞形花酮	2757
22,N-dihydroverazine	22,N-二氢藜芦生碱	2259
2,4-dihydroxy-5-aminopyrimidine	2,4-二羟基-5-氨基嘧啶	1718
3 $\beta$ ,17 $\beta$ -dihydroxy-5 $\alpha$ -androstane	3 $\beta$ ,17 $\beta$ -二羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷	2549
3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -dihydroxy-5 $\alpha$ -androstane	3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -二羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷	2551
3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -dihydroxy-5 $\beta$ -androstane	3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -二羟基-5 $\beta$ -雄甾烷	2552
3 $\beta$ ,11 $\beta$ -dihydroxy-5 $\alpha$ -androstane	3 $\beta$ ,11 $\beta$ -二羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷	2556
3 $\beta$ ,17 $\alpha$ -dihydroxyandrost-5-ene	3 $\beta$ ,17 $\alpha$ -二羟基雄甾-5-烯	2562
1,4-dihydroxyanthraquinone	1,4-二羟基蒽醌	2507
1,5-dihydroxyanthraquinone	1,5-二羟基蒽醌	2508
1,8-dihydroxyanthraquinone	1,8-二羟基蒽醌	2509
2,5-dihydroxy- <i>p</i> -benzoquinone	2,5-二羟基对苯醌	2463
2,6-dihydroxy- <i>p</i> -benzoquinone	2,6-二羟基对苯醌	2464

2,3'-dihydroxychalcone	2,3'-二羟基查耳酮	2343
2,4'-dihydroxychalcone	2,4'-二羟基查耳酮	2344
3 $\alpha$ ,5 $\alpha$ -dihydroxycholic acid	3 $\alpha$ ,5 $\alpha$ -二羟基胆烷酸	2631
3 $\alpha$ ,7 $\beta$ -dihydroxycholic acid	3 $\alpha$ ,7 $\beta$ -二羟基胆烷酸	2632
3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ -dihydroxycholic acid	3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ -二羟基胆烷酸	2633
3 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -dihydroxycholic acid	3 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -二羟基胆烷酸	2634
3 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -dihydroxy-7-cholic acid	3 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -二羟基-7-胆烯酸	2635
5,6-dihydroxy-5-cyclohexen-1,2,3,4-tetraone	5,6-二羟基-5-环己烯-1,2,3,4-四酮	696
4,5-dihydroxy-4-cyclopenten-1,2,3-trione	4,5-二羟基-4-环戊烯-1,2,3-三酮	678
2',3'-dihydroxydihydrosuberosin	2',3'-二羟基二氢花椒素	2414
2,5-dihydroxy-3,6-diphenyl- <i>p</i> -benzoquinone	2,5-二羟基-3,6-二苯基对苯醌	2473
3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -dihydroxy-5 $\alpha$ -estrane	3 $\alpha$ ,17 $\beta$ -二羟基-5 $\alpha$ -雌甾烷	2564
3,17 $\alpha$ -dihydroxyestra-1,3,5(10)-triene	3,17 $\alpha$ -二羟基雌甾-1,3,5(10)-三烯	2569
3',7'-dihydroxy-2',4'-dimethoxyflavane	3',7'-二羟基-2',4'-二甲氧基黄烷	2362
5,7-dihydroxy-4',6'-dimethoxyflavone	5,7-二羟基-4',6'-二甲氧基黄酮	2286
4',5'-dihydroxy-6,7'-dimethoxyflavone	4',5'-二羟基-6,7'-二甲氧基黄酮	2287
3,4-dihydroxy-3',4'-dimethoxy-6-methylflavane	3,4-二羟基-3',4'-二甲氧基-6-甲基黄烷	2364
2,5-dihydroxy-3,6-dimethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2,5-二羟基-3,6-二甲基对苯醌	2467
4,4'-dihydroxyflavane	4,4'-二羟基黄烷	2360
4,7-dihydroxyflavane	4,7-二羟基黄烷	2359
2,4-dihydroxy-5-formylpyrimidine	2,4-二羟基-5-甲酰基嘧啶	1720
5,7-dihydroxyisoflavone	5,7-二羟基异黄酮	2324
2,6-dihydroxy-4-methoxychalcone	2,6-二羟基-4-甲氧基查耳酮	2348
2,4-dihydroxy-5-methoxychalcone	2,4-二羟基-5-甲氧基查耳酮	2349
4',5'-dihydroxy-7-methoxyflavone	4',5'-二羟基-7-甲氧基黄酮	2272
5,7-dihydroxy-6-methoxyflavone	5,7-二羟基-6-甲氧基黄酮	2283
4',7'-dihydroxy-5-methoxy-8-isopentenylflavanone	4',7'-二羟基-5-甲氧基-8-异戊烯基黄烷酮	2322
1,3-dihydroxy-6-methoxy-8-methylxanthone	1,3-二羟基-6-甲氧基-8-甲基吡喃	2432
1,6-dihydroxy-3-methoxy-8-methylxanthone	1,6-二羟基-3-甲氧基-8-甲基吡喃	2433
3,8-dihydroxy-1-methoxyxanthone	3,8-二羟基-1-甲氧基吡喃	2430
1,5-dihydroxy-3-methylanthraquinone	1,5-二羟基-3-甲基蒽醌	2512
3,6-dihydroxy-4-methylpyridazine	3,6-二羟基-4-甲基哒嗪	1682
2,4-dihydroxy-5-methylpyrimidine	2,4-二羟基-5-甲基嘧啶	1712
2,4-dihydroxy-6-methylpyrimidine	2,4-二羟基-6-甲基嘧啶	1713
2,3-dihydroxynaphthaquinone	2,3-二羟基萘醌	2481
2,5-dihydroxynaphthaquinone	2,5-二羟基萘醌	2482
5,7-dihydroxynaphthaquinone	5,7-二羟基萘醌	2486
5,8-dihydroxynaphthaquinone	5,8-二羟基萘醌	2487
3,6-dihydroxypyridazine	3,6-二羟基哒嗪	1681
2,3-dihydroxypyridine	2,3-二羟基吡啶	1537
2,4-dihydroxypyrimidine	2,4-二羟基嘧啶	1704
3,4-dihydroxy-3',4',7,8-tetramethoxyflavane	3,4-二羟基-3',4',7,8-四甲氧基黄烷	2369
5,6-dihydroxy-3',4',7,8-tetramethoxyflavone	5,6-二羟基-3',4',7,8-四甲氧基黄酮	2295
3,4-dihydroxy-4',7,8-trimethoxyflavane	3,4-二羟基-4',7,8-三甲氧基黄烷	2365
3,5-dihydroxy-6,7,8-trimethoxyflavone	3,5-二羟基-6,7,8-三甲氧基黄酮	2293
1,2-diiodoethane	1,2-二碘乙烷	238
diuodomethane	二碘甲烷	222

diisobutyl sulfide	二异丁基硫醚	1976
diisohexylamine	二异己胺	1305
1,1-diisopropoxyethane	1,1-二异丙氧基乙烷	622
diisopropoxymethane	二异丙氧基甲烷	609
diisopropylamine	二异丙胺	1301
<i>p</i> -diisopropylbenzene	对二异丙基苯	154
diisopropyl ether	二异丙醚	517
2,4-dimethoxyaniline	2,4-二甲氧基苯胺	1358
3,4-dimethoxyaniline	3,4-二甲氧基苯胺	1359
1,5-dimethoxyanthraquinone	1,5-二甲氧基蒽醌	2516
1,8-dimethoxyanthraquinone	1,8-二甲氧基蒽醌	2517
5,7-dimethoxycoumarin	5,7-二甲氧基香豆精	2390
3',7'-dimethoxy-4',5'-dihydroxyflavone	3',7'-二甲氧基-4',5'-二羟基黄酮	2276
6,7-dimethoxy-2,2-dimethylchromene	6,7-二甲氧基-2,2-二甲基色烯	2440
1,1-dimethoxydodecane	1,1-二甲氧基十二烷	612
d.methoxyethane	二甲氧基乙烷	610
1,2-dimethoxyethane	1,2-二甲氧基乙烷	529
5,7-dimethoxyflavanone	5,7-二甲氧基黄酮	2320
5,7-dimethoxyflavone	5,7-二甲氧基黄酮	2280
1,1-dimethoxyheptane	1,1-二甲氧基庚烷	611
4',7'-dimethoxy-5-hydroxyflavone	4',7'-二甲氧基-5-羟基黄酮	2275
6,7-dimethoxyisoflavone	6,7-二甲氧基异黄酮	2326
dimethoxymethane	二甲氧基甲烷	608
2,3-dimethoxy-5-methyl- <i>p</i> -benzoquinone	2,3-二甲氧基-5-甲基对苯醌	2471
7,8-dimethoxy-2,3-methylenedioxybenzo[ <i>c</i> ]phenanthridine	7,8-二甲氧基-2,3-亚甲二氧基苯并[ <i>c</i> ]菲定	2247
5,8-dimethoxynaphthaquinone	5,8-二甲氧基萘醌	2491
<i>m</i> -dimethoxyphenol	间二甲氧基苯酚	454
2,4-dimethoxyphenol acetate	乙酸-2,4-二甲氧基苯酚酯	951
2,5-dimethoxyphenol acetate	乙酸-2,5-二甲氧基苯酚酯	952
16,17-dimethoxypegazzinidine	16,17-二甲氧基斯皮加济定	2117
dimethyl acetylspergulagenat	乙酰基粟米草酸二甲酯	2922
dimethylaesculetin	二甲基七叶内酯	2389
dimethylamine	二甲胺	1294
<i>p</i> -dimethylaminobenzaldehyde	对二甲氨基苯甲醛	599
<i>m</i> -dimethylaminobenzoic acid	间二甲氨基苯甲酸	773
<i>p</i> -dimethylaminobenzoic acid	对二甲氨基苯甲酸	774
<i>p</i> -dimethylaminobenzylalcohol	对二甲氨基苯醇	1397
2,5-dimethyl-4-aminophenol	2,5-二甲基-4-氨基苯酚	490
20-dimethylamino-5 $\alpha$ -pregnane	20-二甲氨基-5 $\alpha$ -孕甾烷	2251
2,4-dimethyl-6-aminopyridine	2,4-二甲基-6-氨基吡啶	1515
4-dimethylaminopyridine	4-二甲氨基吡啶	1516
2-dimethylaminopyrimidine	2-二甲氨基嘧啶	1719
2,6-dimethyl-4-aminopyrimidine	2,6-二甲基-4-氨基嘧啶	1705
2,3-dimethylaniline	2,3-二甲基苯胺	1340
2,4-dimethylaniline	2,4-二甲基苯胺	1341
2,5-dimethylaniline	2,5-二甲基苯胺	1343
2,6-dimethylaniline	2,6-二甲基苯胺	1342

3,4-dimethylaniline	3,4-二甲基苯胺	1344	
3,5-dimethylaniline	3,5-二甲基苯胺	1345	
<i>N,N</i> -dimethylaniline	<i>N,N</i> -二甲基苯胺	1399	
2- <i>N</i> -dimethylaniline	2- <i>N</i> -二甲基苯胺	1400	
3- <i>N</i> -dimethylaniline	3- <i>N</i> -二甲基苯胺	1401	
4- <i>N</i> -dimethylaniline	4- <i>N</i> -二甲基苯胺	1402	
1,2-dimethylanthraquinone	1,2-二甲基蒽醌	2503	
1,4-dimethylanthraquinone	1,4-二甲基蒽醌	2504	
2,3-dimethylanthraquinone	2,3-二甲基蒽醌	2505	
dimethyl azelaate	壬二酸二甲酯	929	
2,4-dimethylbenzaldehyde	2,4-二甲基苯甲醛	577	
2,5-dimethylbenzaldehyde	2,5-二甲基苯甲醛	578	
3,4-dimethylbenzaldehyde	3,4-二甲基苯甲醛	579	
<i>o</i> -dimethylbenzene	邻二甲苯	133	
<i>m</i> -dimethylbenzene	间二甲苯	134	
<i>p</i> -dimethylbenzene	对二甲苯	135	
<i>N,N</i> -dimethyl- <i>p</i> -benzenediamine	<i>N,N</i> -二甲基对苯二胺	1419	
3,5-dimethylbenzenemethanol	3,5-二甲基苯醇	413	
4,7-dimethylbenzofuran	4,7-二甲基苯并呋喃	1181	
2,3-dimethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2,3-二甲基对苯醌	2458	
2,5-dimethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2,5-二甲基对苯醌	2459	
2,6-dimethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2,6-二甲基对苯醌	2460	
3,4-dimethylbenzyl chloride	3,4-二甲基苄基氯	337	
3,5'-dimethyl-2,2'-bisfuranylethane	3,5'-二甲基-2,2'-双呋喃甲烷	1143	
2,3-dimethylbuta-1,3-diene	2,3-二甲基-1,3-丁二烯	81	
2,3-dimethylbutane	2,3-二甲基丁烷	33	
2,3-dimethylbut-2-ene	2,3-二甲基-2-丁烯	73	
2,3-dimethylbutenedioic anhydride	2,3-二甲基丁烯二酸酐	815	
3,3-dimethylbutyrolactone	3,3-二甲基丁内酯	1074	
dimethyl carbonate	碳酸二甲酯	1015	
2,2-dimethylchromane	2,2-二甲基色烷	2438	
2,2-dimethylchromene	2,2-二甲基色烯	2439	
<i>O,O</i> -dimethylcurine( <i>R,R</i> )	<i>O,O</i> -二甲基箭毒碱( <i>R,R</i> )	2191	
2,2-dimethylcyclobutanone	2,2-二甲基环丁酮	655	
2,3-dimethylcyclobutanone	2,3-二甲基环丁酮	656	
2,4-dimethylcyclobutanone	2,4-二甲基环丁酮	657	
3,3-dimethylcyclobutanone	3,3-二甲基环丁酮	658	
5,6-dimethylcyclohexa-1,3-diene	5,6-二甲基-1,3-环己二烯	112	
2,2-dimethylcyclohexa-1,3-dione	2,2-二甲基-1,3-环己二酮	694	
5,5-dimethylcyclohexa-1,3-dione	5,5-二甲基-1,3-环己二酮	695	
<i>N,N</i> -dimethylcyclohexanamine	<i>N,N</i> -二甲基环己胺	1331	
1,1-dimethylcyclohexane	1,1-二甲基环己烷	54	
1,2-dimethylcyclohexane	1,2-二甲基环己烷	55	
1,3-dimethylcyclohexane	1,3-二甲基环己烷	56	
1,4-dimethylcyclohexane	1,4-二甲基环己烷	57	
2,6-dimethylcyclohexanol	2,6-二甲基环己醇	398	
3,5-dimethylcyclohexanol	3,5-二甲基环己醇	399	



2,6-dimethylcyclohexanone	2,6-二甲基环己酮	680
3,5-dimethyl-2-cyclohexenone	3,5-二甲基-2-环己烯酮	686
4,4-dimethyl-2-cyclohexenone	4,4-二甲基-2-环己烯酮	687
4,5-dimethyl-2-cyclohexenone	4,5-二甲基-2-环己烯酮	688
1,2-dimethylcyclopentadiene	1,2-二甲基环戊二烯	102
5,5-dimethylcyclopentadiene	5,5-二甲基环戊二烯	103
1,1-dimethylcyclopentane	1,1-二甲基环戊烷	49
1,2-dimethylcyclopentane	1,2-二甲基环戊烷	50
1,3-dimethylcyclopentane	1,3-二甲基环戊烷	48
2,2-dimethyl-1,3-cyclopentanedione	2,2-二甲基-1,3-环戊二酮	673
1,5-dimethyl-1,3-cyclopentanedione	4,5-二甲基-1,3-环戊二酮	674
1,5-dimethylcyclopentene	1,5-二甲基环戊烯	95
4,4-dimethylcyclopentene	4,4-二甲基环戊烯	96
1,1-dimethylcyclopropane	1,1-二甲基环丙烷	43
2,N-dimethyl-3,4-dihydropiperidine	2,N-二甲基-3,4-哌啶	1464
2,6-dimethyl-3,5-diacetylpyran-4-one	2,6-二甲基-3,5-二乙酰基-4-吡喃酮	1199
2,5-dimethyl-2,5-dihydrofuran	2,5-二甲基-2,5-二氢呋喃	1130
3,4-dimethyl-2,5-dihydrofuran	3,4-二甲基-2,5-二氢呋喃	1131
1,2-dimethyl-2,3-dihydroindole	1,2-二甲基-2,3-二氢吲哚	1825
2,3-dimethyl-3,4-dihydropyrimidin-4-one	2,3-二甲基-3,4-二氢-4-嘧啶酮	1727
3,6-dimethyl-4,5-dihydro-1,2,4,5-tetrazine	3,6-二甲基-4,5-二氢-1,2,4,5-四嗪	1774
2,5-dimethyl-3,6-dimethoxy- <i>p</i> -benzoquinone	2,5-二甲基-3,6-二甲氧基对苯醌	2472
dimethyl 2,2'-( <i>O</i> -dimethylsquamate)	2,2'-( <i>O</i> -二甲基鱗片酸二甲酯)	2952
2,5-dimethyl-1,4-dioxane	2,5-二甲基-1,4-二氧己环	1169
2,6-dimethyl-1,4-dioxane	2,6-二甲基-1,4-二氧己环	1170
4,5-dimethyl-1,3-dioxane	4,5-二甲基-1,3-二氧己烷	1166
1,6-dimethyl-1,3-dioxane	4,6-二甲基-1,3-二氧己烷	1167
2,2-dimethyl-1,3-dioxolane	2,2-二甲基-1,3-二氧戊烷	1156
1,3-dimethyl-2,4-dioxo-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine	1,3-二甲基-2,4-二氧基-1,2,3,4-四氢嘧啶	1729
1,2-dimethylenecyclobutane	1,2-二亚甲基环丁烷	90
1,1-dimethylenecyclohexane	1,4-二亚甲基环己烷	106
<i>N,N'</i> -dimethyl-1,2-ethanediamine	<i>N,N'</i> -二甲基-1,2-乙二胺	1322
dimethyl ether	二甲醚	511
dimethylethylamine	二甲基乙胺	1307
3,5-dimethyl-1-ethylpyrazole	3,5-二甲基-1-乙基吡唑	1576
1,4-dimethyl-3-ethylpyrazolone	1,4-二甲基-3-乙基吡唑啉	1593
1,4-dimethyl-5-ethylpyrazolone	1,4-二甲基-5-乙基吡唑啉	1595
2,4-dimethyl-3-ethylpyrrole	2,4-二甲基-3-乙基吡咯	1479
2,5-dimethyl-3-ethylpyrrole	2,5-二甲基-3-乙基吡咯	1480
2,5-dimethylfuran	2,5-二甲基呋喃	1135
dimethyl 2,5-furandicarboxylate	2,5-呋喃二羧酸二甲酯	990
dimethyl glutarate	胶酸二甲酯	927
4,6-dimethylhexadienyrolactone	4,6-二甲基己二烯内酯	1103
3,5-dimethylhexyrolactone	3,5-二甲基己内酯	1095
3,6-dimethylhexyrolactone	3,6-二甲基己内酯	1096
6,6-dimethylhexyrolactone	6,6-二甲基己内酯	1097
1,1-dimethylhydrazine	1,1-二甲基肼	1019

1,2-dimethylhydrazine	1,2-二甲基肼	1020	
2,5-dimethyl-7-hydroxychromone	2,5-二甲基-7-羟基色酮	2448	
2,N-dimethyl-5-hydroxypiperidine	2,N-二甲基-5-羟基哌啶	1459	
4,N-dimethyl-3-hydroxypiperidine	4,N-二甲基-3-羟基哌啶	1460	
2,6-dimethyl-3-hydroxypyran-4-one	2,6-二甲基-3-羟基-4-吡喃酮	1195	
2,6-dimethyl-4-hydroxypyrimidine	2,6-二甲基-4-羟基嘧啶	1709	
1,2-dimethylimidazole	1,2-二甲基咪唑	1608	
2,5-dimethylimidazole	2,5-二甲基咪唑	1609	
2,5-dimethyl-2-imidazoline	2,5-二甲基-2-咪唑啉	1624	
1,3-dimethylindole	1,3-二甲基吲哚	1805	
1,4-dimethylindole	1,4-二甲基吲哚	1806	
1,7-dimethylindole	1,7-二甲基吲哚	1807	
2,3-dimethylindole	2,3-二甲基吲哚	1808	
2,5-dimethylindole	2,5-二甲基吲哚	1809	
2,6-dimethylindole	2,6-二甲基吲哚	1810	
5,7-dimethylindole	5,7-二甲基吲哚	1811	
dimethylisopropylamine	二甲基异丙胺	1311	
3,4-dimethylisothiazole	3,4-二甲基异噻唑	2056	
3,5-dimethylisothiazole	3,5-二甲基异噻唑	2057	
4,5-dimethylisothiazole	4,5-二甲基异噻唑	2058	
3,5-dimethylisoxazole	3,5-二甲基异噁唑	1671	
dimethyl malonate	丙二酸二甲酯	925	
1,3-dimethyl-5-methoxypyrazole	1,3-二甲基-5-甲氧基吡唑	1577	
N <sub>a</sub> ,N <sub>b</sub> -dimethyl-6-methoxytetrahydro-β-carboline	N <sub>a</sub> ,N <sub>b</sub> -二甲基-6-甲氧基四氢-β-咔啉	2161	
7,7-dimethyl-3-methylenebicyclo(3.1.1)heptane	7,7-二甲基-3-亚甲基双环[3.1.1]庚烷	2772	
dimethylmorphine	二甲基吗啡	2221	
2,3-dimethylnaph:haquinone	2,3-二甲基萘醌	2478	
2,5-dimethyl-N-nitrosopyrrolidine	2,5-二甲基-N-亚硝基吡咯烷	1272	
2,7-dimethyloctane	2,7-二甲基辛烷	39	
4,5-dimethyloctane	4,5-二甲基辛烷	40	
dimethyl oxalate	草酸二甲酯	924	
2,2-dimethyl-1,3-oxathiane	2,2-二甲基-1,3-氧硫杂环己烷	1952	
2,6-dimethyl-1,3-oxathiane	2,6-二甲基-1,3-氧硫杂环己烷	1953	
4,6-dimethyl-1,3-oxathiane	4,6-二甲基-1,3-氧硫杂环己烷	1954	
2,4-dimethyloxazole	2,4-二甲基噁唑	1662	
4,5-dimethyloxazole	4,5-二甲基噁唑	1663	
2,4-dimethyloxazoline	2,4-二甲基噁唑啉	1665	
2,5-dimethyloxazoline	2,5-二甲基噁唑啉	1667	
2,2-dimethyloxetane	2,2-二甲基环氧丙烷	1111	
1,2-dimethyloxirane	1,2-二甲基环氧乙烷	1108	
2,2-dimethyloxirane	2,2-二甲基环氧乙烷	1107	
dimethyl-1,2,5-oxdiazole	二甲基-1,2,5-噁二唑	1676	
1,3-dimethyl-2-oxoimidazolidine	1,3-二甲基-2-氧基咪唑啉	1631	
N,3-dimethylpentadienoic lactam	N,3-二甲基戊二烯酸内酰胺	873	
N,4-dimethylpentadienoic lactam	N,4-二甲基戊二烯酸内酰胺	874	
N,5-dimethylpentadienoic lactam	N,5-二甲基戊二烯酸内酰胺	875	
5,5-dimethyl-3-pentenylolactone	5,5-二甲基-3-戊烯内酯	1088	

3,5-dimethylpentylolactone	3,5-二甲基戊内酯	1078
4,4-dimethylpentylolactone	4,4-二甲基戊内酯	1079
4,5-dimethylpentylolactone	4,5-二甲基戊内酯	1080
5,5-dimethylpentylolactone	5,5-二甲基戊内酯	1081
dimethyl persulfide	过硫化二甲醚	2063
2,3-dimethylphenol	2,3-二甲基苯酚	429
2,4-dimethylphenol	2,4-二甲基苯酚	430
2,5-dimethylphenol	2,5-二甲基苯酚	431
2,6-dimethylphenol	2,6-二甲基苯酚	432
3,4-dimethylphenol	3,4-二甲基苯酚	433
3,5-dimethylphenol	3,5-二甲基苯酚	434
dimethyl phosphorate	磷酸二甲酯	2089
dimethyl <i>o</i> -phthalate	邻苯二甲酸二甲酯	978
dimethyl <i>m</i> -phthalate	间苯二甲酸二甲酯	979
dimethyl <i>p</i> -phthalate	对苯二甲酸二甲酯	980
dimethyl pimelate	蒲桃酸二甲酯	928
1,4-dimethylpiperazine	1,4-二甲基哌嗪	1756
2,5-dimethylpiperazine	2,5-二甲基哌嗪	1757
2,6-dimethylpiperazine	2,6-二甲基哌嗪	1758
2,6-dimethylpiperidine	2,6-二甲基哌啶	1448
3,5-dimethylpiperidine	3,5-二甲基哌啶	1449
2,2-dimethylpropane	2,2-二甲基丙烷	31
dimethylpropanedinitrile	二甲基丙二腈	1051
dimethylpropylamine	二甲基丙胺	1310
2,6-dimethyl-4-pyranone	2,6-二甲基-4-吡喃酮	1191
3,5-dimethyl-4-pyranone	3,5-二甲基-4-吡喃酮	1192
2,3-dimethylpyrazine	2,3-二甲基吡嗪	1734
2,5-dimethylpyrazine	2,5-二甲基吡嗪	1735
2,6-dimethylpyrazine	2,6-二甲基吡嗪	1736
1,3-dimethylpyrazole	1,3-二甲基吡唑	1572
1,5-dimethylpyrazole	1,5-二甲基吡唑	1573
3,5-dimethylpyrazole	3,5-二甲基吡唑	1574
5,5-dimethylpyrazoline	5,5-二甲基吡唑啉	1587
1,5-dimethylpyrazoline	1,5-二甲基吡唑啉	1585
4,5-dimethylpyrazoline	4,5-二甲基吡唑啉	1586
1,4-dimethylpyrazolin-5-one	1,4-二甲基-5-吡唑啉酮	1599
2,3-dimethylpyridine	2,3-二甲基吡啶	1490
2,5-dimethylpyridine	2,5-二甲基吡啶	1492
2,6-dimethylpyridine	2,6-二甲基吡啶	1493
2,4-dimethylpyridine	2,4-二甲基吡啶	1491
3,4-dimethylpyridine	3,4-二甲基吡啶	1494
3,5-dimethylpyridine	3,5-二甲基吡啶	1495
2,4-dimethylpyrimidine	2,4-二甲基嘧啶	1690
4,5-dimethylpyrimidine	4,5-二甲基嘧啶	1691
4,6-dimethylpyrimidine	4,6-二甲基嘧啶	1692
2,3-dimethylpyrrole	2,3-二甲基吡咯	1472
2,4-dimethylpyrrole	2,4-二甲基吡咯	1473

2,5-dimethylpyrrole	2,5-二甲基吡咯	1474
1,5-dimethylresorcinol	1,5-二甲基间苯二酚	450
dimethylsilicane	二甲基甲硅烷	2075
dimethyl succinate	琥珀酸二甲酯	926
dimethyl sulfate	硫酸二甲酯	1005
dimethyl sulfide	二甲硫醚	1970
dimethyl sulfoxide	二甲亚砜	2006
dimethyl sulfurous acid	亚硫酸二甲酯	1006
2,4-dimethyltetrahydrofuran	2,4-二甲基四氢呋喃	1116
2,5-dimethyltetrahydrofuran	2,5-二甲基四氢呋喃	1117
3,4-dimethyltetrahydrofuran	3,4-二甲基四氢呋喃	1118
1,2-dimethyltetrahydroisoquinoline	1,2-二甲基四氢异喹啉	2186
1,4-dimethyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	1,4-二甲基-1,2,3,4-四氢萘	182
1,5-dimethyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	1,5-二甲基-1,2,3,4-四氢萘	183
2,3-dimethyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	2,3-二甲基-1,2,3,4-四氢萘	184
3,6-dimethyl-1,2,3,4-tetrahydro-1,2,4,5-tetrazine	3,6-二甲基-1,2,3,4-四氢-1,2,4,5-四嗪	1775
3,6-dimethyl-1,2,4,5-tetrazine	3,6-二甲基-1,2,4,5-四嗪	1773
1,5-dimethyltetrazole	1,5-二甲基四唑	1659
2,5-dimethyltetrazole	2,5-二甲基四唑	1660
2,4-dimethylthiazole	2,4-二甲基噻唑	2037
2,5-dimethylthiazole	2,5-二甲基噻唑	2038
4,5-dimethylthiazole	4,5-二甲基噻唑	2039
2,3-dimethylthirane	2,3-二甲基硫杂环丙烷	1925
1,2-diacetylthioethane	1,2-二乙酰基乙烷	1984
2,5-dimethylthiolane	2,5-二甲基硫杂环戊烷	1931
2,3-dimethylthiophene	2,3-二甲基噻吩	2010
2,4-dimethylthiophene	2,4-二甲基噻吩	2011
2,5-dimethylthiophene	2,5-二甲基噻吩	2012
1,3-dimethylthiopropane	1,3-二甲基硫基丙烷	1985
dimerhyl trisulfide	三硫化二甲醚	2066
<i>N,N</i> -dimethyltryptophan methyl ester	<i>N,N</i> -二甲基色氨酸甲酯	3000
<i>N,N</i> -dimethylurea	<i>N,N</i> -二甲基脲	1910
<i>N,N'</i> -dimethylurea	<i>N,N'</i> -二甲基脲	1911
2,4-dinitroaniline	2,4-二硝基苯胺	1254
2,6-dinitroaniline	2,6-二硝基苯胺	1255
3,5-dinitroaniline	3,5-二硝基苯胺	1256
<i>o</i> -dinitrobenzene	邻二硝基苯	1242
<i>m</i> -dinitrobenzene	间二硝基苯	1243
<i>p</i> -dinitrobenzene	对二硝基苯	1244
2,5-dinitrobenzoic acid	2,5-二硝基苯甲酸	1251
3,4-dinitrobenzoic acid	3,4-二硝基苯甲酸	1253
3,5-dinitrobenzoic acid	3,5-二硝基苯甲酸	1252
1,2-dinitronaphthalene	1,2-二硝基萘	1257
1,4-dinitronaphthalene	1,4-二硝基萘	1258
1,7-dinitronaphthalene	1,7-二硝基萘	1259
2,3-dinitronaphthalene	2,3-二硝基萘	1260
2,6-dinitronaphthalene	2,6-二硝基萘	1261

2,7-dinitronaphthalene	2,7-二硝基萘	1262
2,4-dinitrophenol	2,4-二硝基苯酚	494
2,5-dinitrophenol	2,5-二硝基苯酚	495
2,6-dinitrophenol	2,6-二硝基苯酚	496
2,4-dinitrophenylhydrazine	2,4-二硝基苯肼	1032
<i>N,N'</i> -dinitrosopiperazine	<i>N,N'</i> -二亚硝基哌嗪	1277
2,3-dinitrotoluene	2,3-二硝基甲苯	1245
2,4-dinitrotoluene	2,4-二硝基甲苯	1246
2,5-dinitrotoluene	2,5-二硝基甲苯	1248
2,6-dinitrotoluene	2,6-二硝基甲苯	1247
3,4-dinitrotoluene	3,4-二硝基甲苯	1250
2,4-dinitro-1,3,5-trimethylbenzene	2,4-二硝基-1,3,5-三甲苯	1249
diosgenin	薯蓣皂甙元	2593
diosmetin-7-D-glucoside	洋茺萸黄酮 7-D-葡萄糖甙	2373
1,3-dioxane	1,3-二氧己烷	1163
1,4-dioxane	1,4-二氧己环	1168
2,5-dioxoimidazolidine	2,5-二氧基咪唑烷	1629
1,3-dioxolane	1,3-二氧戊环	1153
dipentene oxide	氧化松油精	2689
2-diphenylamine	2-二苯胺	1431
3-diphenylamine	3-二苯胺	1430
4-diphenylamine	4-二苯胺	1429
diphenylene	二联苯	185
1,2-diphenylethane	1,2-二苯基乙烷	191
1,2-diphenyl-1,2-ethanediamine	1,2-二苯基-1,2-乙二胺	1412
diphenylethanedione	二苯基乙二酮	712
1,2-diphenylethene	1,2-二苯基乙烯	192
diphenyl ether	二苯醚	543
1,2-diphenylglycol	1,2-二苯基乙二醇	418
1,2-diphenylhydrazine	1,2-二苯基肼	1033
diphenylketone	二苯酮	711
diphenylmethane	二苯甲烷	190
diphenylphosphine	二苯基磷	2093
diphenyl sulfide	二苯基硫醚	1982
2-dipropenylamine	2-二丙烯胺	1302
1,1'-dipropenyl ether	1,1'-二丙烯基醚	523
1,1-dipropoxypropane	1,1-二丙氧基丙烷	621
dipropylamine	二丙胺	1299
dipropyl ether	二丙醚	516
dipropyl ether peroxide	过氧二丙醚	531
dipropyl sulfide	二丙基硫醚	1974
disalicylide	双水杨酸内酯	984
1,2-dithiane	1,2-二硫杂环己烷	1945
1,3-dithiane	1,3-二硫杂环己烷	1946
1,4-dithiane	1,4-二硫杂环己烷	1948
dithioacetic acid	二硫代乙酸	1997
1,3-dithiolane	1,3-二硫杂环戊烷	1944

1,3-dithiolan-2-one	1,3-二硫杂-2-环戊硫酮	1943
dithiooxalamide	二硫代草酰胺	1998
docosane	二十二烷	19
1-docosanol	1-二十二醇	360
1-docosene	1-二十二烯	89
dodecane	十二烷	10
dodecanedioic acid	十二烷二酸	749
dodecanenitrile	十二腈	1044
1-dodecanol	1-十二醇	352
5-dodecanol	5-十二醇	371
drimenol	追米醇	2862

## E

eburnamine	象牙胺	2177
eburnamonine	象牙酮宁	2178
ecosane	二十烷	17
1-ecosanol	1-二十醇	359
2-ecosanol	2-二十醇	373
1-ecocene	1-二十烯	88
elliptone	毛鱼藤酮	2353
emodin dimethyl ether	大黄素二甲醚	2520
1 <i>R</i> -epicamphor	1 <i>R</i> -表樟脑	2720
1 <i>S</i> -epicamphor	1 <i>S</i> -表樟脑	2721
epivincamine	表长春胺	2183
14-cpivincaminol	14-表文卡明醇	2181
epoxydihydrocyclobisuberoiene	环氧二氢环双花椒二烯	2420
8,13-epoxylabd-14-ene	8,13-环氧勒布-14-烯	2865
8,13-epoxylabd-14-ene-2-one	8,13-环氧勒布-14-烯-2-酮	2866
8,13-epoxylabd-14-ene-3-one	8,13-环氧勒布-14-烯-3-酮	2867
eremophilene	雅檀蓝烯	2814
5 $\alpha$ -ergosta-7,22-dien-3 $\beta$ -ol	5 $\alpha$ -麦角甾-7,22-二烯-3 $\beta$ -醇	2624
ergosta-5,22-dien-3 $\beta$ -ol	麦角甾-5,22-二烯-3 $\beta$ -醇	2621
$\Delta^{5,24(28)}$ -ergostadien-3 $\beta$ -ol	$\Delta^{5,24(28)}$ -麦角甾二烯-3 $\beta$ -醇	2626
5 $\alpha$ -ergostan-3 $\beta$ -ol	5 $\alpha$ -麦角甾烷-3 $\beta$ -醇	2612
5 $\alpha$ -ergost-7-en-3 $\beta$ -ol	5 $\alpha$ -麦角甾-7-烯-3 $\beta$ -醇	2618
5 $\beta$ -ergost-22-en-3-one	5 $\beta$ -麦角甾-22-烯-3-酮	2622
ergosterol	麦角甾醇	2629
estr-4-en-3,17-dione	雌甾-4-烯-3,17-二酮	2566
estr-4-en-3-one	雌甾-4-烯-3-酮	2565
ethane	乙烷	2
etbarodial	乙二醛	569
ethanedial dioxime	乙二醛二肟	1921
1,2-ethanediamine	1,2-乙二胺	1320
1,2-ethandithiol	乙二硫醇	1968
ethanol	乙醇	344
ethanthiol	乙硫醇	1956

ethene	乙烯	64	
ethenylbenzene	乙烯基苯	162	
ethenyloxirane	乙烯基环氧乙烷	1109	
ethenylpyrazine	乙烯基吡嗪	1746	
2-ethenylpyridine	2-乙烯基吡啶	1529	
3-ethenylpyridine	3-乙烯基吡啶	1530	
4-ethenylpyridine	4-乙烯基吡啶	1531	
ethenylthiobenzene	乙烯硫基苯	1981	
ether peroxide	过氧二乙醚	530	
2-ethoxyypyridine	2-乙氧基吡啶	1528	
ethyl acetate	乙酸乙酯	917	
<i>p</i> -ethylacetophenone	对乙基苯乙酮	701	
ethylamine	乙胺	1279	
<i>o</i> -ethylaniline	邻乙基苯胺	1349	
<i>p</i> -ethylaniline	对乙基苯胺	1350	
<i>N</i> -ethylaniline	<i>N</i> -乙基苯胺	1403	
<i>N</i> <sub>8</sub> -ethylaspidospermidine	<i>N</i> <sub>8</sub> -乙基白坚米定	2106	
<i>p</i> -ethylbenzaldehyde	对乙基苯甲醛	580	
ethylbenzene	乙基苯	142	
<i>N</i> -ethylbutenedioic lactam	<i>N</i> -乙基丁烯二酸内酰胺	881	
ethyl carbamate	氨基甲酸乙酯	886	
ethyl cinnamate	肉桂酸乙酯	986	
ethyl cyanate	氰酸乙酯	991	
<i>N</i> -ethylcyclohexanamine	<i>N</i> -乙基环己胺	1332	
ethylcyclopentane	乙基环戊烷	51	
1-ethylcyclopentene	1-乙基环戊烯	97	
3-ethylcyclopentene	3-乙基环戊烯	98	
<i>N</i> <sub>8</sub> -ethyldeacetylcyllindrocarpol	<i>N</i> <sub>8</sub> -乙基去乙酰基西林醇碱	2120	
<i>N</i> -ethyl-3,4-dehydropiperidine	<i>N</i> -乙基-3,4-去氢哌啶	1465	
2-ethyl-3,5-dimethylpyrrole	2-乙基-3,5-二甲基吡咯	1481	
2-ethyl-1,3-dioxolane	2-乙基-1,3-二氧戊烷	1159	
4-ethyl-1,3-dioxolane	4-乙基-1,3-二氧戊烷	1160	
<i>N</i> -ethyl-1,2-ethanediamine	<i>N</i> -乙基-1,2-乙二胺	1323	
ethyl formate	甲酸乙酯	916	
2-ethylfuran	2-乙基呋喃	1136	
6-ethylhexyrolactone	6-乙基己内酯	1100	
ethylhydrazine	乙基肼	1021	
1-ethylimidazole	1-乙基咪唑	1610	
2-ethylimidazole	2-乙基咪唑	1611	
2-ethyl-2-imidazolone	2-乙基-2-咪唑啉	1625	
1-ethyl-3-imino-1,2,4-triazoline	1-乙基-3-亚氨基-1,2,4-三唑啉	1653	
1-ethyl-5-imino-1,2,4-triazoline	1-乙基-5-亚氨基-1,2,4-三唑啉	1654	
ethyl 3-indoleacetate	3-吲哚乙酸乙酯	1838	
ethylisopropylamine	乙基异丙胺	1298	
ethyl laurate	月桂酸乙酯	920	
<i>N</i> <sub>8</sub> -ethyl-17-methoxyaspidospermidine	<i>N</i> <sub>8</sub> -乙基-17-甲氧基白坚米定	2110	
ethyl <i>p</i> -methoxybenzoate	对甲氧基苯甲酸乙酯	974	

ethyl 6-methoxy-2-imidazolecarboxylate	5-甲氧基-2-咪唑羧酸乙酯	1853
2-ethyl-1-methyl-1,3-dioxolane	2-乙基-4-甲基-1,3-二氧戊烷	1161
2-ethyl-5-methyl-2-imidazole	2-乙基-5-甲基-2-咪唑啉	1626
2-ethyl-5-methylimidazole	2-乙基-5-甲基咪唑	1612
3-ethyl-4-methylpyridine	3-乙基-4-甲基吡啶	1505
3-(2-ethylmorphine	3-(2-乙基吗啡	2223
ethyl myristate	肉豆蔻酸乙酯	921
ethyl nitrate	硝酸乙酯	1011
ethyl nonanoate	壬酸乙酯	918
3-ethyloctane	3-乙基辛烷	38
ethyl palmitate	棕榈酸乙酯	922
N-ethylpentadecanone lactam	N-乙基戊二烯酸内酰胺	876
2-ethyl-1,3-pentanedione	2-乙基-1,3-环戊二酮	675
5-ethyl-3-pentenyrolactone	5-乙基-3-戊烯内酯	1089
5-ethylpentylolactone	5-乙基戊内酯	1082
2-ethylphenol	2-乙基苯酚	440
3-ethylphenol	3-乙基苯酚	441
1-ethylphenol	1-乙基苯酚	442
ethylphenylketone	乙基苯基酮	702
ethylpropylamine	乙基丙胺	1297
ethylpropyl ether	乙基丙基醚	515
ethylpyrazine	乙基吡嗪	1739
3-ethylpyrazole	3-乙基吡唑	1592
2-ethylpyridine	2-乙基吡啶	1499
3-ethylpyridine	3-乙基吡啶	1500
4-ethylpyridine	4-乙基吡啶	1501
ethyl 1-pyridinecarboxylate	4-吡啶羧酸乙酯	1563
N-ethylpyrrole	N-乙基吡咯	1476
2-ethylpyrrole	2-乙基吡咯	1477
3-ethylpyrrole	3-乙基吡咯	1478
ethylsilicane	乙基甲硅烷	2078
ethyl stearate	硬脂酸乙酯	923
5-ethylthiazole	5-乙基噻唑	2040
ethyl thiocyanate	硫氰酸乙酯	998
2-ethylthiolane	2-乙基硫杂环戊烷	1932
2-ethylthiophene	2-乙基噻吩	2014
3-ethylthiophene	3-乙基噻吩	2015
<i>o</i> -ethyltoluene	邻乙基甲苯	143
<i>m</i> -ethyltoluen	间乙基甲苯	144
<i>p</i> -ethyltoluene	对乙基甲苯	145
1-ethyl-1,2,4-triazole	1-乙基-1,2,4-三氮唑	1644
3-ethyl-1,2,4-triazole	3-乙基-1,2,4-三氮唑	1645
4-ethyl-1,2,4-triazole	4-乙基-1,2,4-三氮唑	1643
ethyl undecanoate	十一酸乙酯	919
ethylurea	乙基脲	1912
ethyne	乙炔	123
ethynylbenzene	乙炔基苯	164



eudesmin	桉脂素	2937
$\alpha$ -eudesmol	$\alpha$ -桉醇	2817
$\beta$ -eudesmol	$\beta$ -桉醇	2818
evodione	吴茱萸酮	2441

## F

<i>cis,trans</i> -farnesal	顺式,反式-金合欢醛	2781
<i>trans,trans</i> -farnesal	反式,反式-金合欢醛	2782
$\alpha$ -farnesene	$\alpha$ -金合欢烯	2778
$\beta$ -farnesene( <i>E</i> )	$\beta$ -金合欢烯( <i>E</i> )	2779
$\beta$ -farnesene( <i>Z</i> )	$\beta$ -金合欢烯( <i>Z</i> )	2780
farnesol	金合欢醇	2784
<i>cis,trans</i> -farnesol	顺式,反式-金合欢醇	2785
<i>trans,trans</i> -farnesol	反式,反式-金合欢醇	2786
flavane	黄烷	2357
flavanone	黄烷酮	2312
flavone	黄酮	2260
fluorene	芴	196
fluoroacetic acid	氟乙酸	752
<i>o</i> -fluoroaniline	邻氟苯胺	1371
<i>m</i> -fluoroaniline	间氟苯胺	1372
<i>p</i> -fluoroaniline	对氟苯胺	1373
<i>o</i> -fluorobenzaldehyde	邻氟苯甲醛	593
<i>p</i> -fluorobenzaldehyde	对氟苯甲醛	594
fluorobenzene	氟苯	292
<i>o</i> -fluorobenzoic acid	邻氟苯甲酸	790
<i>m</i> -fluorobenzoic acid	间氟苯甲酸	791
<i>p</i> -fluorobenzoic acid	对氟苯甲酸	792
1-fluoro-2-chloroethene	1-氟-2-氯乙烯	281
1-fluoro-1-chloroethene	1-氟-1-氯乙烯	280
1-fluoro-1,2-dichloroethane	1-氟-1,2-二氯乙烷	242
<i>o</i> -fluoronitrobenzene	邻氟硝基苯	1213
<i>m</i> -fluoronitrobenzene	间氟硝基苯	1214
<i>p</i> -fluoronitrobenzene	对氟硝基苯	1215
<i>o</i> -fluorotoluene	邻氟甲苯	294
<i>m</i> -fluorotoluene	间氟甲苯	295
<i>p</i> -fluorotoluene	对氟甲苯	296
folicanthine	叶坎辛	2153
formaldehyde	甲醛	547
formamide	甲酰胺	831
formic acid	甲酸(蚁酸)	715
7-(3'-formyl-2'-butenoxy)coumarin	7-(3'-甲酰基-2'-丁烯氧基)香豆精	2402
<i>N</i> <sub>6</sub> -formyleylindrocaine	<i>N</i> <sub>6</sub> -甲酰基西林卡林	2124
lucosterol	岩藻甾醇	2627
fumaric acid	蓝萆辛	2194
fumaritine	蓝萆亭	2193

fumaritine acetate, fumarophycine	蓝堇亭乙酸酯	2195
furaldehyde	糠醛	603
furan	呋喃	1132
2-furancarboxylhydrazide	2-呋喃甲酰肼	1039
2-furancarboxylic acid	2-呋喃羧酸	804
3-furancarboxylic acid	3-呋喃羧酸	805
2-furamethanamine	2-呋喃甲胺	1140
2-furanmethanol	2-呋喃甲醇	1139
5-furanylmethyl-2-furaldehyde	5-呋喃甲基-2-呋喃醛	606

## G

$\beta$ -D-galactopyranose pentamethyl ether	$\beta$ -D-半乳吡喃糖五甲醚	2969
2,3,4,6- $\alpha$ -D-galactopyranose tetramethyl ether	2,3,4,6- $\alpha$ -D-半乳吡喃糖四甲醚	2968
gallanol	邻苯二酚	423
gallic acid	五倍子酸	766
gamabufotalin	日本蟾蜍甙元	2581
GB2	GB2	2338
gelsedine	钩吻定	2152
7-geranyloxycoumarin	7-牻牛儿基氧基香豆精	2403
glaucine	海墨粟碱	2204
1,2,3,4- $\alpha$ -D-glucopyranose tetramethyl ether	1,2,3,4- $\alpha$ -D-葡萄糖吡喃糖四甲醚	2964
1,2,3,6- $\beta$ -D-glucopyranose tetramethyl ether	1,2,3,6- $\beta$ -D-葡萄糖吡喃糖四甲醚	2965
1,3,4,6- $\alpha$ -D-glucopyranose tetramethyl ether	1,3,4,6- $\alpha$ -D-葡萄糖吡喃糖四甲醚	2966
2,3,4,6- $\alpha$ -D-glucopyranose tetramethyl ether	2,3,4,6- $\alpha$ -D-葡萄糖吡喃糖四甲醚	2967
L-glutamic acid	L-谷氨酸	2994
glutaric acid	胶酸	743
glycerin	甘油	381
glycine	甘氨酸	2978
glycol	乙二醇	375
glycol diacetate	乙二醇二乙酸酯	957
gompogenin	古佛甙元	2572
griseofulvin	灰黄霉素	2976
$\alpha$ -guaiene	$\alpha$ -愈创木烯	2847
$\beta$ -guaiene	$\beta$ -愈创木烯	2848
$\delta$ -guaiene	$\delta$ -愈创木烯	2849
guaiol	愈创木醇	2850
guandine	胍	1913
$\alpha$ -gurjunene	$\alpha$ -古芸烯	2853
$\gamma$ -gurjunene	$\gamma$ -古芸烯	2846

## H

hainangenn	海南皂甙元	2603
halfordinin	哈佛的宁	2404
haikendin	哈肯内酯	2398
harringtonine	三尖杉酯碱	2228

hecogenin	海柯皂甙元	2600		
heneicosane	二十一烷	18		
heneicosanoic acid	二十一酸	733		
heptadecanamine	十七胺	1287		
heptadecane	十七烷	14		
heptadecanoic acid	十七酸	729		
1-heptadecanol	1-十七醇	357		
3'',4',4'',5,5'',7,7''-heptamethoxy-3,8''-biflavanone	3'',4',4'',5,5'',7,7''-七甲氧基-3,8''-双黄烷酮	2337		
heptanal	庚醛	554		
heptane	庚烷	7		
heptanoic acid	庚酸	720		
1-heptanol	1-庚醇	349		
4-heptanone	4-庚酮	631		
1-heptene	1-庚烯	74		
2-heptene	2-庚烯	75		
heptylamine	庚胺	1284		
herniarin	脱肠草内酯	2387		
heroin	海洛因	2226		
hexachlorobenzene	六氯苯	316		
1,2,3,4,5,6-hexachlorocyclohexane	1,2,3,4,5,6-六氯环己烷	265		
hexachloroethane	六氯乙烷	247		
hexacosane	二十六烷	23		
1-hexacosanol	1-二十六醇	363		
hexadecanal	十六醛	560		
hexadecane	十六烷	13		
1-hexadecanol	1-十六醇	356		
1-hexadecene	1-十六烯	87		
2,4-hexadiene	2,4-己二烯	80		
hexadiene-2-dioic acid	己二烯-2,4-二酸	750		
2,4-hexadien-1-ol	2,4-己二烯-1-醇	386		
3,5-hexadienyrolactone	3,5-己二烯内酯	1102		
1,5-hexadiyne	1,5-己二炔	129		
hexaethylbenzene	六乙基苯	151		
hexafluorobenzene	六氟苯	293		
hexafluoroethane	六氟乙烷	246		
4',4'',5,5'',7,7''-hexahydroxy-3,3''-biflavone	4',4'',5,5'',7,7''-六羟基-3,3''-双黄酮	2335		
3,3',4',5,6,7-hexahydroxyflavone	3,3',4',5,6,7-六羟基黄酮	2267		
2',3',4',5,7,8-hexamethoxyflavone	2',3',4',5,7,8-六甲氧基黄酮	2298		
3,3',4',5,5',7-hexamethoxyflavone	3,3',4',5,5',7-六甲氧基黄酮	2310		
3,3',4',5,6,7-hexamethoxyflavone	3,3',4',5,6,7-六甲氧基黄酮	2311		
hexamethylbenzene	六甲基苯	141		
1,2,3,4,5,6-hexa-O-methylinositol	1,2,3,4,5,6-六-O-甲基肌醇	527		
hexanal	己醛	553		
hexanamide	己酰胺	836		
hexane	己烷	6		
hexanedinitrile	己二腈	1052		
1-hexanol	1-己醇	348		

2-hexanone	2-己酮	629
3-hexanone	3-己酮	630
hexanoyl chloride	己酰氯	822
hexanthiol	己硫醇	1964
hexatriacontane	三十六烷	29
1,3,5-hexatriene	1,3,5-己三烯	85
2-hexenal	2-己烯醛	568
1-hexene	1-己烯	68
2-hexene	2-己烯	71
3-hexene	3-己烯	72
3-hexenedinitrile	3-己烯二腈	1055
hexylamine	己胺	1283
<i>n</i> -hexylbenzene	正己基苯	161
hexyl formate	甲酸己酯	946
hexyrolactone	己内酯	1093
hirsutine	黑苏亭	2169
homoharringtonine	高三尖杉酯碱	2230
hongguanggenin	红光皂甙元	2604
hydrazine	胼	1017
hydroxyamic acid	氢氰酸	1040
hydroquinone	对苯二酚	422
hydroquinone diacetate	对苯二酚二乙酸酯	956
$\alpha$ -hydroxyacetic acid	$\alpha$ -羟基乙酸	735
<i>o</i> -hydroxyacetophenone	邻羟基苯乙酮	703
<i>m</i> -hydroxyacetophenone	间羟基苯乙酮	704
<i>o</i> -hydroxyacetylaniline	邻羟基乙酰苯胺	865
<i>m</i> -hydroxyacetylaniline	间羟基乙酰苯胺	866
<i>p</i> -hydroxyacetylaniline	对羟基乙酰苯胺	867
hydroxyacetylaniline	羟基乙酰苯胺	868
2-hydroxy-4-amino-5-methylpyrimidine	2-羟基-4-氨基-5-甲基嘧啶	1711
2-hydroxy-4-aminopyrimidine	2-羟基-4-氨基嘧啶	1702
28-hydroxy- $\beta$ -amyryn	28-羟基- $\beta$ -香树脂醇	2913
3 $\alpha$ -hydroxy-5 $\alpha$ -androstan-17-one	3 $\alpha$ -羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷-17-酮	2545
3 $\alpha$ -hydroxy-5 $\beta$ -androstan-17-one	3 $\alpha$ -羟基-5 $\beta$ -雄甾烷-17-酮	2544
3 $\beta$ -hydroxy-5 $\alpha$ -androstan-17-one	3 $\beta$ -羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷-17-酮	2542
3 $\beta$ -hydroxy-5 $\beta$ -androstan-17-one	3 $\beta$ -羟基-5 $\beta$ -雄甾烷-17-酮	2543
3 $\beta$ -hydroxy-5 $\alpha$ -androstan-11-one	3 $\beta$ -羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷-11-酮	2555
12 $\beta$ -hydroxy-5 $\beta$ -androstan-3,17-dione	12 $\beta$ -羟基-5 $\beta$ -雄甾烷-3,17-二酮	2557
17 $\beta$ -hydroxy-5 $\alpha$ -androstan-3-one	17 $\beta$ -羟基-5 $\alpha$ -雄甾烷-3-酮	2554
17 $\beta$ -hydroxy-5 $\beta$ -androstan-3-one	17 $\beta$ -羟基-5 $\beta$ -雄甾烷-3-酮	2553
<i>o</i> -hydroxyaniline	邻羟基苯胺	1352
<i>m</i> -hydroxyaniline	间羟基苯胺	1353
<i>p</i> -hydroxyaniline	对羟基苯胺	1354
1-hydroxyanthraquinone	1-羟基蒽醌	2506
<i>o</i> -hydroxybenzaldehyde	邻羟基苯甲醛	581
<i>m</i> -hydroxybenzaldehyde	间羟基苯甲醛	582
<i>p</i> -hydroxybenzaldehyde	对羟基苯甲醛	583

<i>o</i> -hydroxybenzamide	邻羟基苯甲酰胺	852
<i>o</i> -hydroxybenzenemethanol	邻羟基苯醇	415
<i>m</i> -hydroxybenzenemethanol	间羟基苯醇	416
<i>p</i> -hydroxybenzenemethanol	对羟基苯醇	417
<i>m</i> -hydroxybenzoic acid	间羟基苯甲酸	764
<i>p</i> -hydroxybenzoic acid	对羟基苯甲酸	765
15 $\alpha$ -hydroxybufalin	15 $\alpha$ -羟基蟾蜍灵	2582
$\alpha$ -hydroxybutanoic acid	$\alpha$ -羟基丁酸	736
7-hydroxycadalene	7-羟基卡达烯	2841
5-hydroxycalamenene	5-羟基去氧白蒿烯	2842
2-hydroxychalcone	2-羟基查耳酮	2340
4-hydroxychalcone	4-羟基查耳酮	2341
4'-hydroxychalcone	4'-羟基查耳酮	2342
<i>o</i> -hydroxycinnamic acid	邻羟基肉桂酸	778
14-hydroxycodeine	14-羟基可待因	2224
14-hydroxycodermone	14-羟基可待因酮	2222
4-hydroxycoumarin	4-羟基香豆精	2385
<i>o</i> -hydroxycyclohexanamine	邻羟基环己胺	1333
2-hydroxycyclohexanone	2-羟基环己酮	682
2-hydroxy-4,6-diamino-1,3,5-triazine	2-羟基-4,6-二氨基-1,3,5-三嗪	1765
14-hydroxy-7,8-dihydromorphine	14-羟基-7,8-二氢吗啡	2219
5-hydroxy-6,7-dimethoxyflavone	5-羟基-6,7-二甲氧基黄酮	2284
1-hydroxy-3,6-dimethoxy-8-methylxanthone	1-羟基-3,6-二甲氧基-8-甲基吡啶酮	2434
2-hydroxy-3,5-dimethyl-6-hydroxymethyl- <i>p</i> -benzoquinone	2-羟基-3,5-二甲基-6-羟甲基对苯醌	2470
3-hydroxy-4,5-dimethylisoxazole	3-羟基-4,5-二甲基异噁唑	1674
2-hydroxy-3,6-dimethyl-4-oxo-3,4-dihydropyrimidine	2-羟基-3,6-二甲基-4-氧基-3,4-二氢嘧啶	1730
2-hydroxy-4,6-dimethylpyrimidine	2-羟基-4,6-二甲基嘧啶	1708
17 $\beta$ -hydroxy-5 $\alpha$ -estrane-3-one	17 $\beta$ -羟基-5 $\alpha$ -雌甾烷-3-酮	2563
3-hydroxyestra-1,3,5(10)-triene	3-羟基雌甾-1,3,5(10)-三烯	2568
3-hydroxyestra-1,3,5(10)-trien-7,17-dione	3-羟基雌甾-1,3,5(10)-三烯-7,17-二酮	2570
2'-hydroxyfarrerol	2'-羟基杜鹃素	2318
4-hydroxyflavane	4-羟基黄酮	2358
2'-hydroxyflavanone	2'-羟基黄酮酮	2317
7-hydroxyflavone	7-羟基黄酮	2261
5-hydroxyfurocoumarin	5-羟基呋喃香豆精	2393
8-hydroxyfurocoumarin	8-羟基呋喃香豆精	2394
1-hydroxy-2-hydroxymethylanthraquinone	1-羟基-2-羟甲基蒽醌	2515
14-hydroxyicajinc	14-羟基依卡津	2150
2-hydroxy-2-imidazoline	2-羟基-2-咪唑啉	1627
4-hydroxyindole	4-羟基吲哚	1812
5-hydroxyindole	5-羟基吲哚	1813
5-hydroxy-3-indoleacetic acid	5-羟基-3-吲哚乙酸	1830
4-hydroxy-3-indolecarboxylic acid	4-羟基-3-吲哚羧酸	1827
5-hydroxy-3-indolecarboxylic acid	5-羟基-3-吲哚羧酸	1828
4-hydroxy-3-indole- <i>N,N</i> -dimethylethamine	4-羟基-3-吲哚- <i>N,N</i> -二甲基乙胺	1847
5-hydroxy-3-indole- <i>N,N</i> -dimethylethamine	5-羟基-3-吲哚- <i>N,N</i> -二甲基乙胺	1848
5-hydroxy-3-indolethamine	5-羟基-3-吲哚乙胺	1845

9-hydroxyindolinocodine	9-羟基吲哚啉可待因	2225	
1-hydroxyisoquinoline	1-羟基异喹啉	1903	
5-hydroxyisoquinoline	5-羟基异喹啉	1904	
16-hydroxykauran-19-al	16-羟基考兰烷-19-醛	2890	
7 $\alpha$ -hydroxy-16-kaurene-6,19-lactone	7 $\alpha$ -羟基考兰-16-烯-6,19-内酯	2896	
7 $\beta$ -hydroxy-16-kaurene-6,19-lactone	7 $\beta$ -羟基考兰-16-烯-6,19-内酯	2897	
6-hydroxymanool	6-羟基麦诺醇	2869	
19-hydroxymanool	19-羟基麦诺醇	2870	
1-hydroxy-2-methoxyanthraquinone	1-羟基-2-甲氧基蒽醌	2513	
2-hydroxy-5-methoxybenzaldehyde	3-羟基-4-甲氧基苯甲醛	592	
3-hydroxy-7-methoxyflavone	3-羟基-7-甲氧基黄酮	2268	
5-hydroxy-7-methoxyflavone	5-羟基-7-甲氧基黄酮	2270	
2-hydroxy-3-methoxynaphthaquinone	2-羟基-3-甲氧基萘醌	2489	
2-hydroxy-4-methylaniline	2-羟基-4-甲基苯胺	1365	
2-hydroxy-5-methylaniline	2-羟基-5-甲基苯胺	1366	
2-hydroxy-4-methylbenzaldehyde	2-羟基-4-甲基苯甲醛	587	
2-hydroxy-5-methylbenzaldehyde	2-羟基-5-甲基苯甲醛	588	
2-hydroxy-6-methylbenzaldehyde	2-羟基-6-甲基苯甲醛	589	
3-hydroxy-4-methylbenzaldehyde	3-羟基-4-甲基苯甲醛	590	
4-hydroxy-2-methylbenzaldehyde	4-羟基-2-甲基苯甲醛	591	
2-hydroxy-5-methyl- <i>p</i> -benzoquinone	2-羟基-5-甲基对苯醌	2466	
4-hydroxy-4-methylcyclohexanone	4-羟基-4-甲基环己酮	683	
2-hydroxymethyl-1,3-dioxolane	2-羟甲基-1,3-二氧戊烷	1162	
5-hydroxymethyl-2-furaldehyde	5-羟甲基-2-呋喃醛	605	
4-hydroxy-6-methylhexadienylolactone	4-羟基-6-甲基己二烯内酯	1104	
4-hydroxy-4-methylhexylolactone	4-羟基-4-甲基己内酯	1099	
2-hydroxymethyl-5-hydroxypyran-4-one	2-羟甲基-5-羟基-4-吡喃酮	1197	
2-hydroxymethylimidazole	2-羟甲基咪唑	1613	
5-hydroxymethylisothiazole	5-羟甲基异噻唑	2059	
3 $\alpha$ -hydroxymethyl-17-methoxyaspidofractinine	3 $\alpha$ -羟甲基-17-甲氧基白坚木茛宁	2138	
3 $\beta$ -hydroxymethyl-17-methoxyaspidofractinine	3 $\beta$ -羟甲基-17-甲氧基白坚木茛宁	2139	
2-hydroxy-3-methylnaphthaquinone	2-羟基-3-甲基萘醌	2496	
6-hydroxy-7-methylpurine	6-羟基-7-甲基嘌呤	1784	
3-hydroxy-6-methylpyridazine	3-羟基-6-甲基哒嗪	1679	
2-hydroxy-3-methylpyridine	2-羟基-3-甲基吡啶	1520	
2-hydroxy-4-methylpyridine	2-羟基-4-甲基吡啶	1521	
2-hydroxy-5-methylpyridine	2-羟基-5-甲基吡啶	1522	
2-hydroxy-6-methylpyridine	2-羟基-6-甲基吡啶	1523	
2-hydroxymethyltetrahydrofuran	2-羟甲基四氢呋喃	1124	
14-hydroxymorphine	14-羟基吗啡	2218	
2-hydroxynaphthaquinone	2-羟基萘醌	2480	
5-hydroxynaphthaquinone	5-羟基萘醌	2485	
2-hydroxy-5-oxo-1,2-dehydropiperazine	2-羟基-5-氧基-1,2-去氢哌嗪	1760	
2-hydroxy-4-oxo-3,4,5,6-tetrahydropyrimidine	2-羟基-4-氧基-3,4,5,6-四氢嘧啶	1728	
3-hydroxy-3',4',5,5',7-pentamethoxyflavone	3-羟基-3',4',5,5',7-五甲氧基黄酮	2370	
5-hydroxy-3,3',4',6,7-pentamethoxyflavone	5-羟基-3,3',4',6,7-五甲氧基黄酮	2296	
<i>o</i> -hydroxyphenylacetic acid	邻羟基苯乙酸	807	

<i>p</i> -hydroxyphenylacetic acid	对羟基苯乙酸	808
<i>o</i> -hydroxypiceol	邻羟基针枞酚	706
<i>N</i> -hydroxypiperidine	<i>N</i> -羟基哌啶	1456
3-hydroxypiperidine	3-羟基哌啶	1457
6-hydroxypurine	6-羟基嘌呤	1783
3-hydroxypyridazine	3-羟基哒嗪	1678
2-hydroxypyridine	2-羟基吡啶	1518
3-hydroxypyridine	3-羟基吡啶	1519
4-hydroxypyridine acetate	4-羟基吡啶乙酸酯	1525
4-hydroxypyrimidine	4-羟基嘧啶	1697
<i>N</i> -hydroxypyrrolidin-2-one	<i>N</i> -羟基-2-吡咯烷酮	1440
2-hydroxyquinoline	2-羟基喹啉	1870
3-hydroxyquinoline	3-羟基喹啉	1871
5-hydroxyquinoline	5-羟基喹啉	1872
6-hydroxyquinoline	6-羟基喹啉	1873
7-hydroxyquinoline	7-羟基喹啉	1874
8-hydroxyquinoline	8-羟基喹啉	1875
2-hydroxytetrahydrofuran	2-羟基四氢呋喃	1122
3-hydroxytetrahydrofuran	3-羟基四氢呋喃	1123
2-hydroxytetrahydropyran	2-羟基四氢吡喃	1147
3-hydroxy-3',4,4',7-tetramethoxyflavane	3-羟基-3',4,4',7-四甲氧基黄烷	2367
4-hydroxy-3',4',5,7-tetramethoxyflavane	4-羟基-3',4',5,7-四甲氧基黄烷	2368
3-hydroxy-3',4',5,7-tetramethoxyflavanone	3-羟基-3',4',5,7-四甲氧基黄烷酮	2323
5-hydroxy-3,3',4',7-tetramethoxyflavone	5-羟基-3,3',4',7-四甲氧基黄酮	2304
3-hydroxytatarol	3-羟基桃塔酚	2907
7 $\beta$ -hydroxytatarol	7 $\beta$ -羟基桃塔酚	2908
2-hydroxy-3,4,6-trimethoxychalcone	2-羟基-3,4,6-三甲氧基查耳酮	2350
4-hydroxy-4',5,7-trimethoxyflavane	4-羟基-4',5,7-三甲氧基黄烷	2363
5-hydroxy-4',6,7-trimethoxyflavone	5-羟基-4',6,7-三甲氧基黄酮	2290
5-hydroxy-2',4',7-trimethoxyisoflavone	5-羟基-2',4',7-三甲氧基异黄酮	2327
1-hydroxy-3,5,6-trimethoxyxanthone	1-羟基-3,5,6-三甲氧基吡酮	2436
5-hydroxy-L-tryptophan	5-羟基-L-色氨酸	2997
3-hydroxytyrosine	3-羟基酪氨酸	2995
1-hydroxyxanthone	1-羟基吡酮	2422
2-hydroxyxanthone	2-羟基吡酮	2423
4-hydroxyxanthone	4-羟基吡酮	2424
hyperin	金丝桃甙	2374

## I

icajine	依卡津	2148
igageton	依加皂甙元	2602
imidazole	咪唑	1604
2-imidazolylquinoline	2-咪唑基喹啉	1883
2,2'-iminobisacetonitrile	二乙腈胺	1057
2-imino-4-methyl-2,3-dihydrothiazole	2-亚氨基-4-甲基-2,3-二氢噻唑	2047
3-imino-5-methyl-1,2,4-triazolone	3-亚氨基-5-甲基-1,2,4-三唑啉	1651

2-imino-4-oxothiazolidine	2-亚氨基-4-氧基噻唑烷	2051
indene	茚	117
indeno[1,2-b]pyrene	茚并芘	209
indole	吲哚	1797
3-indoleacetic acid	3-吲哚乙酸	1829
3-indoleacetone	3-吲哚丙酮	1851
3-indolebutanoic acid	3-吲哚丁酸	1833
3-indolecarboxylic acid	3-吲哚羧酸	1826
3-indole <i>N,N</i> -dimethylamine	3-吲哚- <i>N,N</i> -二甲基乙胺	1846
3-indoleethanol	3-吲哚乙醇	1849
3-indole- $\alpha$ -hydroxypropanoic acid	3-吲哚- $\alpha$ -羟基丙酸	1832
inocebrin	依诺黄烷酮	2313
inositol	肌醇	408
<i>o</i> -iodoaniline	邻碘苯胺	1377
<i>m</i> -iodoaniline	间碘苯胺	1378
<i>p</i> -iodoaniline	对碘苯胺	1379
iodobenzene	碘苯	300
<i>o</i> -iodobenzoic acid	邻碘苯甲酸	799
<i>m</i> -iodobenzoic acid	间碘苯甲酸	800
<i>p</i> -iodobenzoic acid	对碘苯甲酸	801
1-iodobutane	1-碘丁烷	257
2-iodobutane	2-碘丁烷	258
iodo- <i>tert</i> -butane	碘代叔丁烷	260
iodoethane	碘乙烷	232
1-iodohexane	1-碘己烷	262
1-iodoisobutane	1-碘异丁烷	259
iodomethane	碘甲烷	218
1-iodopentane	1-碘戊烷	261
<i>o</i> -iodophenol	邻碘苯酚	461
<i>m</i> -iodophenol	间碘苯酚	462
<i>p</i> -iodophenol	对碘苯酚	463
3-iodopropyne	3-碘丙炔	291
2-iodothiophene	2-碘噻吩	2030
<i>o</i> -iodotoluene	邻碘甲苯	326
<i>m</i> -iodotoluene	间碘甲苯	327
<i>p</i> -iodotoluene	对碘甲苯	328
indoskyrin	鸢尾酮茜素	2522
isoamyl formate	甲酸异戊酯	944
isoamyl nicotinate	菸酸异戊酯	1564
21-isoaspidofractine	21-异白坚木萜定	2142
isoborneol	异龙脑	2723
isobutanal	异丁醛	550
isobutanoic acid	异丁酸	719
isobutanthiol	异丁硫醇	1960
isobutylamine	异丁胺	1288
isobutylbenzene	异丁基苯	157
isobutyl formate	甲酸异丁酯	940



1-isobutyltetrahydro- $\beta$ -carboline	1-异丁基四氢- $\beta$ -咪啉	2160
<i>exo</i> -isocamphanone	外异莰烷酮	2766
<i>endo</i> -isocamphanone	内异莰烷酮	2767
isocorynantheidine	异柯楠碱	2167
1-isocyanatobutane	1-异氰酸根合丁烷	996
isocyanobenzene	异氰基苯	1070
isocyclohexane	异氰基乙烷	1059
isocyanomethane	异氰基甲烷	1058
isogeraniol	异牻牛儿醇	2641
7-isogeraniol	7-异牻牛儿醇	2642
isobarringtonene	异三尖杉酯碱	2229
isoleucine	异亮氨酸	2990
isomenthol	异薄荷醇	2653
isonyrtucommulone-A	异香桃木酮 A	2956
isopimpinellin	异茴芹内酯	2399
isopinocampheol	异松蒎醇	2735
isopropanthiol	异丙硫醇	1958
isopropenyl formate	甲酸异丙烯酯	937
isopropylamine	异丙胺	1290
<i>p</i> -isopropylbenzaldehyde	对异丙基苯甲醛	2712
isopropylbenzene	异丙基苯	153
<i>p</i> -isopropylbenzylalcohol	对异丙基苄醇	2713
isopropyl cyanate	氰酸异丙酯	993
isopropyl formate	甲酸异丙酯	936
2-isopropyl-3-hydroxy-5-methyl- <i>p</i> -benzoquinone	2-异丙基-3-羟基-5-甲基对苯醌	2468
1-isopropyl-3-methylpyrazoline	1-异丙基-3-甲基吡唑啉	1598
4-isopropylphenol	4-异丙基苯酚	444
isopropyl salicylate	水杨酸异丙酯	975
2-isopropylthiophene	2-异丙基噻吩	2017
isopulegol	异番薄荷醇	2680
isopulegone	异番薄荷酮	2688
isoquinoline	异喹啉	1892
iso- $\alpha_2$ -rhodomycinone	异 $\alpha_2$ -紫红霉素酮	2971
isoterreyol	异榧叶醇	2845
isothiazole	异噻唑	2052
3-isothiazolecarboxamine	3-异噻唑甲酰胺	2060
5-isothiazolecarboxamine	5-异噻唑甲酰胺	2061
3-isothiazolecarboxylic acid	3-异噻唑羧酸	2062
1-isothiocyanatopropane	1-异硫氰酸根合丙烷	1003
3-isothiocyanato-1-propene	3-异硫氰酸根合-1-丙烯	1004
isovisnagin	异维斯那津	2453
isoxazole	异噁唑	1669

## J

jaceidin	扎西黄酮	2294
<i>ent</i> -junenol	<i>ent</i> -桉醇	2819

## K

kaempferol	山奈酚	2265	
9(11),16-kauradien-19-oic acid	9(11),16-考兰二烯-19-酸	2895	
kauran-13-ol	考兰烷-13-醇	2888	
kauran-16-ol	考兰烷-16-醇	2889	
kauran-16,19-diol	考兰烷-16,19-二醇	2891	
kaur-15-ene	考兰-15-烯	2892	
kaur-16-ene	考兰-16-烯	2893	
kaur-16-en-19-oic acid	考兰-16-烯-19-酸	2894	
ketene	乙烯酮	623	
krigeine	克瑞捷因	2209	

## L

8(17),13-labdadien-15-oic acid	8(17),13-勒布二烯-15-酸	2873	
8(17),12,14-labdatriene	8(17),12,14-勒布三烯	2863	
8(17),13(16),14-labdatriene	8(17),13(16),14-勒布三烯	2864	
lasioccephalin	拉消色法林	2418	
lauramide	月桂酰胺	837	
lauric acid	月桂酸	724	
ledene	喇叭烯	2856	
ledol	喇叭茶醇	2857	
D-leucine	D-亮氨酸	2988	
L-leucine	L-亮氨酸	2989	
licochalcone	甘草查耳酮	2351	
limonene	柠檬烯	2690	
linalool	芳樟醇	2645	
lupanine	白金雀儿碱	2244	
lupan-3-one	羽扇豆烷-3-酮	2930	
lup-20(29)-en-3 $\beta$ ,28-diol	羽扇豆-20(29)-烯-3 $\beta$ ,28-二醇	2933	
lup-20(29)-en-3 $\beta$ -ol	羽扇豆-20(29)-烯-3 $\beta$ -醇	2932	
lup-20(29)-en-3-one	羽扇豆-20(29)-烯-3-酮	2931	
L-lysine	L-赖氨酸	2993	

## M

$\beta$ -malene	$\beta$ -木兰烯	2829	
malonamide	丙二酰胺	843	
malonic acid	丙二酸	741	
marnesin	异紫花前胡内酯	2400	
manool	麦诺醇	2868	
marinobufagin	海蟾蜍精	2588	
martin	马尔民	2405	
melicopicine	蜜茱萸生碱	2243	
melicopidine	异蜜茱萸碱	2238	

melicopine	蜜茱萸碱	2237	
1,4-menthadien-7-ol	1,4-薄荷二烯-7-醇	2706	
1,5-menthadien-7-ol	1,5-薄荷二烯-7-醇	2707	
1,8-menthadien-7-ol	1,8-薄荷二烯-7-醇	2705	
1,8(10)-menthadien-9-ol	1,8(10)-薄荷二烯-9-醇	2710	
<i>cis</i> -2,5-menthadien-7-ol	顺式-2,5-薄荷二烯-7-醇	2709	
<i>trans</i> -2,5-menthadien-7-ol	反式-2,5-薄荷二烯-7-醇	2708	
menthan-1,2-diol	薄荷烷-1,2-二醇	2659	
menthan-3,4-diol	薄荷烷-3,4-二醇	2660	
menthane	薄荷烷	2646	
menthan-1-ol	薄荷烷-1-醇	2650	
<i>trans</i> -menthan-1-ol	反式薄荷烷-1-醇	2651	
menthan-4-ol	薄荷烷-4-醇	2654	
<i>cis</i> -menthan-7-ol	顺式薄荷烷-7-醇	2655	
menthan-8-ol	薄荷烷-8-醇	2656	
<i>cis</i> -menthan-9-ol	顺式薄荷烷-9-醇	2657	
<i>trans</i> -menthan-9-ol	反式薄荷烷-9-醇	2658	
$\Delta^1$ -menthene	$\Delta^1$ -薄荷烯	2661	
$\Delta^2$ -menthene	$\Delta^2$ -薄荷烯	2662	
$\Delta^3$ -menthene	$\Delta^3$ -薄荷烯	2663	
$\Delta^{4(8)}$ -menthene	$\Delta^{4(8)}$ -薄荷烯	2664	
$\Delta^8$ -menthene	$\Delta^8$ -薄荷烯	2665	
1-menthen-9-al	1-薄荷-9-醛	2681	
1(7)-menthen-9-ol	1(7)-薄荷烯-9-醇	2673	
<i>cis</i> -menth-2-en-7-ol	顺式薄荷-2-烯-7-醇	2671	
<i>trans</i> -menth-2-en-7-ol	反式薄荷-2-烯-7-醇	2672	
4(8)-menthen-9-ol	4(8)-薄荷烯-9-醇	2674	
<i>cis</i> -8(10)-menthen-9-ol	顺式-8(10)-薄荷烯-9-醇	2675	
<i>trans</i> -8(10)-menthen-9-ol	反式-8(10)-薄荷烯-9-醇	2676	
menth-4-en-3-one	薄荷-4-烯-3-酮	2684	
menthol	薄荷醇	2652	
menthone	薄荷酮	2648	
<i>trans</i> -menthone	反式薄荷酮	2649	
2-mercapto-4,5-dihydrothiazole	2-巯基-4,5-二氢噻唑	2046	
2-mercaptothiophene	2-巯基噻吩	2027	
3-mercaptothiophene	3-巯基噻吩	2028	
methanamine	甲胺	1278	
methane	甲烷	1	
methanol	甲醇	343	
methanthiol	甲硫醇	1955	
<i>p</i> -methoxyacetophenone	对甲氧基苯乙酮	707	
2-methoxyadenosine	2-甲氧基腺苷	2960	
5-methoxyangelicin	5-甲氧基白芷素	2397	
<i>o</i> -methoxyaniline	邻甲氧基苯胺	1355	
<i>m</i> -methoxyaniline	间甲氧基苯胺	1356	
<i>p</i> -methoxyaniline	对甲氧基苯胺	1357	
<i>o</i> -methoxyanisole	邻甲氧基茴香醚	540	

<i>m</i> -methoxyanisole	间甲氧基茴香醚	541	
<i>p</i> -methoxyanisole	对甲氧基茴香醚	542	
17-methoxyaspidofractinone	17-甲氧基白坚木美宁	2136	
17-methoxyaspidospermidine	17-甲氧基白坚米定	2105	
16-methoxyaspidospermine	16-甲氧基白坚木碱	2114	
<i>o</i> -methoxybenzaldehyde	邻甲氧基苯甲醛	584	
<i>m</i> -methoxybenzaldehyde	间甲氧基苯甲醛	585	
<i>p</i> -methoxybenzaldehyde	对甲氧基苯甲醛	586	
5-methoxybenzofuran	5-甲氧基苯并呋喃	1182	
7-methoxybenzofuran	7-甲氧基苯并呋喃	1183	
<i>p</i> -methoxybenzoic acid	对甲氧基苯甲酸	767	
4-methoxy- $\beta$ -carboline	4-甲氧基- $\beta$ -咔啉	2156	
1-methoxycarbonyl- $\beta$ -carboline	1-甲氧羰基- $\beta$ -咔啉	2157	
2-methoxycarbonylimidazole	2-甲氧羰基咪唑	1618	
5-methoxycarbonylimidazole	5-甲氧羰基咪唑	1619	
4-methoxychalcone	4-甲氧基查耳酮	2346	
4'-methoxychalcone	4'-甲氧基查耳酮	2347	
3-methoxycoumaric acid	3-甲氧基香豆酸	781	
10-methoxydihydrocorynantheol	10-甲氧基二氢柯楠醇	2165	
2-methoxy-5,6-dihydropiran	2-甲氧基-5,6-二氢吡喃	1152	
2'-methoxy-5,7-dihydroxyflavone	2'-甲氧基-5,7-二羟基黄酮	2274	
2-methoxy-5,8-dihydroxynaphthaquinone	2-甲氧基-5,8-二羟基萘醌	2492	
11-methoxyeburnamonine	11-甲氧基象牙酮宁	2179	
4'-methoxyflavanone	4'-甲氧基黄烷酮	2319	
2-methoxyfuran	2-甲氧基呋喃	1137	
1-methoxy-2-hydroxyanthraquinone	1-甲氧基-2-羟基蒽醌	2514	
4'-methoxy-7-hydroxyflavone	4'-甲氧基-7-羟基黄酮	2269	
4'-methoxy-5-hydroxy-7-methylflavone	4'-甲氧基-5-羟基-7-甲基黄酮	2271	
2-methoxy-8-hydroxynaphthaquinone	2-甲氧基-8-羟基萘醌	2490	
1-methoxyindole	1-甲氧基吲哚	1814	
4-methoxyindole	4-甲氧基吲哚	1815	
5-methoxyindole	5-甲氧基吲哚	1816	
6-methoxyindole	6-甲氧基吲哚	1817	
7-methoxyindole	7-甲氧基吲哚	1818	
5-methoxy-3-indoleacetic acid	5-甲氧基-3-吲哚乙酸	1831	
5-methoxy-3-indoleethanol	5-甲氧基-3-吲哚乙醇	1850	
7-methoxyisoflavanone	7-甲氧基异黄烷酮	2334	
16-methoxyminovincine	16-甲氧基米诺文辛	2135	
16-methoxyminovincinone	16-甲氧基米诺文西酮	2134	
2-methoxynaphthaquinone	2-甲氧基萘醌	2488	
<i>o</i> -methoxynitrobenzene	邻甲氧基硝基苯	1210	
<i>m</i> -methoxynitrobenzene	间甲氧基硝基苯	1211	
<i>p</i> -methoxynitrobenzene	对甲氧基硝基苯	1212	
<i>o</i> -methoxyphenol	邻甲氧基苯酚	451	
<i>m</i> -methoxyphenol	间甲氧基苯酚	452	
<i>p</i> -methoxyphenol	对甲氧基苯酚	453	
4-( <i>p</i> -methoxyphenyl)-3-buten-2-one	4-( <i>p</i> -甲氧基苯基)-3-丁烯-2-酮	708	

6-methoxypurine	6-甲氧基嘌呤	1785	
methoxypyrazine	甲氧基吡嗪	1747	
3-methoxypyridazine	3-甲氧基哒嗪	1680	
3-methoxypyridine	3-甲氧基吡啶	1526	
4-methoxypyridine	4-甲氧基吡啶	1527	
2-methoxypyrimidine	2-甲氧基嘧啶	1701	
3-methoxyquinoline	3-甲氧基喹啉	1876	
17-methoxyspegazindine	17-甲氧基斯皮加济定	2116	
5-methoxythiazole	5-甲氧基噻唑	2043	
2-methoxythiazole	2-甲氧基噻唑	2042	
5-methoxy-L-tryptophan	5-甲氧基-L-色氨酸	2998	
1-methoxyxanthone	1-甲氧基呋喃	2426	
2-methoxyxanthone	2-甲氧基呋喃	2427	
3-methoxyxanthone	3-甲氧基呋喃	2428	
4-methoxyxanthone	4-甲氧基呋喃	2429	
methyl abscisate	脱落酸甲酯	2800	
methyl acetate	乙酸甲酯	888	
S-methyl acetate	乙酸硫甲酯	1008	
<i>o</i> -methylacetophenone	邻甲基苯乙酮	698	
<i>m</i> -methylacetophenone	间甲基苯乙酮	699	
<i>p</i> -methylacetophenone	对甲基苯乙酮	700	
methyl <i>o</i> -acetoxybenzoate	邻乙酰氧基苯甲酸甲酯	970	
methyl <i>m</i> -acetoxybenzoate	间乙酰氧基苯甲酸甲酯	971	
methyl <i>p</i> -acetoxybenzoate	对乙酰氧基苯甲酸甲酯	972	
<i>o</i> -methylacetylaniline	邻甲基乙酰苯胺	860	
<i>p</i> -methylacetylaniline	对甲基乙酰苯胺	861	
<i>N</i> -methylacetylaniline	<i>N</i> -甲基乙酰苯胺	864	
methyl 3- <i>O</i> -acetylalcanolate	3- <i>O</i> -乙酰基齐墩果酸甲酯	2921	
<i>N</i> -methyl-2-acetylpyrrole	<i>N</i> -甲基-2-乙酰基吡咯	1483	
<i>N</i> -methylacridone	<i>N</i> -甲基吡啶酮	2232	
1-methyladenosine	1-甲基腺苷	2957	
2'- <i>O</i> -methyladenosine	2'- <i>O</i> -甲基腺苷	2958	
3'- <i>O</i> -methyladenosine	3'- <i>O</i> -甲基腺苷	2959	
<i>O</i> -methylalloimperatorin	<i>O</i> -甲基别因波拉托内酯	2406	
methyl <i>o</i> -aminobenzoate	邻氨基苯甲酸甲酯	965	
methyl <i>p</i> -aminobenzoate	对氨基苯甲酸甲酯	966	
2-methylamino-6-hydroxypurine	2-甲基氨基-6-羟基嘌呤	1791	
1-methyl-3-amino-1,2,4-triazole	1-甲基-3-氨基-1,2,4-三氮唑	1647	
<i>N</i> -methylaniline	<i>N</i> -甲基苯胺	1398	
<i>o</i> -methylaniline	邻甲基苯胺	1337	
<i>m</i> -methylaniline	间甲基苯胺	1338	
<i>p</i> -methylaniline	对甲基苯胺	1339	
<i>o</i> -methylanisole	邻甲基茴香醚	533	
<i>m</i> -methylanisole	间甲基茴香醚	534	
<i>p</i> -methylanisole	对甲基茴香醚	535	
1-methylanthraquinone	1-甲基蒽醌	2501	
2-methylanthraquinone	2-甲基蒽醌	2502	

methyl arachidate	花生酸甲酯	904	
<i>O</i> -methylaspidospermine	<i>O</i> -甲基白坚木明	2147	
<i>N</i> <sub>6</sub> -methylaspidospermidine	<i>N</i> <sub>6</sub> -甲基白坚米定	2104	
<i>N</i> -methylaziridine	<i>N</i> -甲基氮丙啶	1434	
methyl behenate	山萘酸甲酯	906	
<i>o</i> -methylbenzaldehyde	邻甲基苯甲醛	574	
<i>m</i> -methylbenzaldehyde	间甲基苯甲醛	575	
<i>p</i> -methylbenzaldehyde	对甲基苯甲醛	576	
<i>N</i> -methylbenzamide	<i>N</i> -甲基苯甲酰胺	846	
<i>o</i> -methylbenzamide	邻甲基苯甲酰胺	848	
<i>p</i> -methylbenzamide	对甲基苯甲酰胺	849	
methylbenzene	甲苯 C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> -92	132	
4-methyl- <i>o</i> -benzenediamine	4-甲基邻苯二胺	1416	
2-methyl- <i>m</i> -benzenediamine	2-甲基间苯二胺	1417	
4-methyl- <i>m</i> -benzenediamine	4-甲基间苯二胺	1418	
2-methylbenzenemethanol	2-甲基苯醇	411	
4-methylbenzenemethanol	4-甲基苯醇	412	
methyl benzoate	苯甲酸甲酯	959	
2-methylbenzo-2,3-dihydrofuran	2-甲基苯并-2,3-二氢呋喃	1177	
2-methylbenzofuran	2-甲基苯并呋喃	1179	
7-methylbenzofuran	7-甲基苯并呋喃	1180	
<i>o</i> -methylbenzoic acid	邻甲基苯甲酸	759	
<i>m</i> -methylbenzoic acid	间甲基苯甲酸	760	
<i>p</i> -methylbenzoic acid	对甲基苯甲酸	761	
<i>m</i> -methylbenzotrile	间甲基苯腈	1061	
<i>p</i> -methylbenzotrile	对甲基苯腈	1062	
2-methyl- <i>p</i> -benzoquinone	2-甲基对苯醌	2457	
<i>N</i> -methylbenzylamine	<i>N</i> -甲基苄胺	1407	
<i>o</i> -methylbenzylamine	邻甲基苄胺	1408	
<i>m</i> -methylbenzylamine	间甲基苄胺	1409	
<i>p</i> -methylbenzylamine	对甲基苄胺	1410	
<i>α</i> -methylbenzylamine	<i>α</i> -甲基苄胺	1411	
methylbenzyl ether	甲基苄基醚	528	
2-methylbiphenyl	2-甲基联苯	187	
3-methylbiphenyl	3-甲基联苯	188	
4-methylbiphenyl	4-甲基联苯	189	
methyl <i>m</i> -bromobenzoate	间溴苯甲酸甲酯	973	
methyl butanoate	丁酸甲酯	891	
<i>N</i> -methyl butanoic lactam	<i>N</i> -甲基丁酸内酰胺	870	
<i>N</i> -methyl-2-butanoic lactam	<i>N</i> -甲基-2-丁烯酸内酰胺	869	
2-methylbutyl formate	甲酸-2-甲基丁酯	945	
3-methyl-4-carboxypyrazole	3-甲基-4-羧基吡唑	1582	
3-methylcatechol	3-甲基儿茶酚	445	
4-methylcatechol	4-甲基儿茶酚	446	
methyl cativate	凯替维酸甲酯	2872	
methyl cerotate	蜡酸甲酯	910	
14-methylcholest-4-en-3-one	14-甲基胆甾-4-烯-3-酮	2630	

2-methylchromone	2-甲基色酮	2445	
methyl cinnamate	肉桂酸甲酯	985	
methyl $\Delta^{13(16)}$ -communate	$\Delta^{13(16)}$ -康明酸甲酯	2876	
methyl <i>trans</i> -communate	反式康明酸甲酯	2877	
methyl coumarate	香豆酸甲酯	987	
<i>O</i> -methylcoumaric acid	<i>O</i> -甲基香豆酸	780	
3-methylcoumarin	3-甲基香豆精	2381	
4-methylcoumarin	4-甲基香豆精	2382	
6-methylcoumarin	6-甲基香豆精	2383	
7-methylcoumarin	7-甲基香豆精	2384	
12- <i>O</i> -methylcurine	12- <i>O</i> -甲基箭毒碱	2190	
2-methylcyclobutanone	2-甲基环丁酮	654	
1-methylcyclohexa-1,4-diene	1-甲基-1,4-环己二烯	111	
2-methylcyclohexa-1,3-dione	2-甲基-1,3-环己二酮	693	
methylcyclohexane	甲基环己烷	53	
2-methylcyclohexanol	2-甲基环己醇	395	
3-methylcyclohexanol	3-甲基环己醇	396	
4-methylcyclohexanol	4-甲基环己醇	397	
1-methylcyclohexene	1-甲基环己烯	107	
3-methylcyclohexene	3-甲基环己烯	108	
methylcyclohexen-3-one	甲基环己烯-3-酮	648	
methylcyclohexyl ether	甲基环己基醚	526	
1-methylcyclopentadiene	1-甲基环戊二烯	100	
5-methylcyclopentadiene	5-甲基环戊二烯	101	
1-methylcyclopentanamine	1-甲基环戊胺	1329	
methylcyclopentane	甲基环戊烷	47	
2-methyl-1,3-cyclopentanedione	2-甲基-1,3-环戊二酮	672	
3-methyl-1,2,4-cyclopentanetrione	3-甲基-1,2,4-环戊三酮	677	
1-methylcyclopentanol-1	1-甲基环戊-1-醇	389	
2-methylcyclopentanol-1	2-甲基环戊-1-醇	390	
2-methylcyclopentanone	2-甲基环戊酮	663	
3-methylcyclopentanone	3-甲基环戊酮	664	
1-methylcyclopentene	1-甲基环戊烯	92	
3-methylcyclopentene	3-甲基环戊烯	93	
4-methylcyclopentene	4-甲基环戊烯	94	
2-methyl-2-cyclopentenone	2-甲基-2-环戊烯酮	668	
3-methyl-2-cyclopentenone	3-甲基-2-环戊烯酮	669	
<i>N</i> <sub>s</sub> -methylcylindrocarrine	<i>N</i> <sub>s</sub> -甲基西林卡林	2123	
<i>O</i> -methyldeacetylaspidospermine	<i>O</i> -甲基去乙酰基白坚木明	2144	
<i>N</i> <sub>s</sub> -methyldeacetylaspidospermine	<i>N</i> <sub>s</sub> -甲基去乙酰基白坚木碱	2108	
<i>N</i> <sub>s</sub> -methyldeacetylcylindrocarpol	<i>N</i> <sub>s</sub> -甲基去乙酰基西林醇碱	2119	
methyl decanoate	癸酸甲酯	896	
2-methyl-2,3-dehydro-1,4-dioxane	2-甲基-2,3-去氢-1,4-二氧己环	1172	
<i>N</i> -methyl-2,3-dehydropiperidin-4-one	<i>N</i> -甲基-2,3-去氢-4-哌啉酮	1466	
methyl 3,5-dichloro-2,4,2'- <i>O</i> -trimethylanziate	3,5-二氯-2,4,2'- <i>O</i> -三甲基安济酸甲酯	2953	
methyldiethylamine	甲基二乙胺	1308	
2-methyl-2,3-dihydrochromone	2-甲基-2,3-二氢色酮	2443	

2-methyl-4,5-dihydrofuran	2-甲基-4,5-二氢呋喃	1127
3-methyl-2,5-dihydrofuran	3-甲基-2,5-二氢呋喃	1126
3-methyl-4,5-dihydrofuran	3-甲基-4,5-二氢呋喃	1128
4-methyl-4,5-dihydrofuran	4-甲基-4,5-二氢呋喃	1129
1-methyl-2,3-dihydroindene	1-甲基-2,3-二氢茚	119
2-methyl-2,3-dihydroindene	2-甲基-2,3-二氢茚	120
4-methyl-2,3-dihydroindene	4-甲基-2,3-二氢茚	121
5-methyl-2,3-dihydroindene	5-甲基-2,3-二氢茚	122
4-methyl-2,3-dihydroindole	4-甲基-2,3-二氢吲哚	1824
2-methyl-1,2-dihydronaphthalene	2-甲基-1,2-二氢萘	177
3-methyl-1,2-dihydronaphthalene	3-甲基-1,2-二氢萘	178
6-methyl-1,2-dihydronaphthalene	6-甲基-1,2-二氢萘	179
2-methyldihydropyran	2-甲基二氢吡喃	1150
4-methyldihydropyran	4-甲基二氢吡喃	1149
2-methyl-5,6-dihydropyran	2-甲基-5,6-二氢吡喃	1151
2-methyl-4,5-dihydrothiazole	2-甲基-4,5-二氢噻唑	2044
5-methyl-2,5-dihydrothiophen-2-one	5-甲基-2,5-二氢-2-噻吩酮	2033
2-methyl-5,7-dihydroxychromone	2-甲基-5,7-二羟基色酮	2449
2-methyl-5,8-dihydroxynaphthaquinone	2-甲基-5,8-二羟基萘醌	2497
2-methyl-3,5-dihydroxypyran-4-one	2-甲基-3,5-二羟基-4-吡喃酮	1196
2-methyl-4,6-dihydroxypyridine	2-甲基-4,6-二羟基吡啶	1524
2-methyl-4,5-dihydroxypyrimidine	2-甲基-4,5-二羟基嘧啶	1714
methyl 2 $\alpha$ ,19 $\alpha$ -dihydroxyursolate	2 $\alpha$ ,19 $\alpha$ -二羟基熊果酸甲酯	2928
methyl 3,4-dimethoxybenzoate	3,4-二甲氧基苯甲酸甲酯	968
methyl 3,5-dimethoxybenzoate	3,5-二甲氧基苯甲酸甲酯	969
2-methyl-1,3-dioxane	2-甲基-1,3-二氧己烷	1164
4-methyl-1,3-dioxane	4-甲基-1,3-二氧己烷	1165
1-methyl-2,4-dioxoimidazolidine	1-甲基-2,4-二氧基咪唑烷	1632
1-methyl-2,5-dioxoimidazolidine	1-甲基-2,5-二氧基咪唑烷	1628
4-methyl-2,5-dioxoimidazolidine	4-甲基-2,5-二氧基咪唑烷	1633
2-methyl-1,3-dioxolane	2-甲基-1,3-二氧戊环	1154
4-methyl-1,3-dioxolane	4-甲基-1,3-二氧戊环	1155
2-methyldiphenyl ether	2-甲基二苯醚	544
3-methyldiphenyl ether	3-甲基二苯醚	545
4-methyldiphenyl ether	4-甲基二苯醚	546
2-methyl-1,5-dithiane	2-甲基-1,3-二硫杂环己烷	1947
methylene cyclopentane	亚甲基环戊烷	91
methylene cyclohexane	亚甲基环己烷	105
3,4-methylenedioxyaniline	3,4-亚甲二氧基苯胺	1370
methylene dithiocyanate	二硫氰酸亚甲酯	1002
methyl entagenate	过龙岗酸甲酯	2920
N-methyl-1,2-ethanediamine	N-甲基-1,2-乙二胺	1321
methylethyl ether	甲基乙基醚	512
methyl 2-ethylheptanoate	2-乙基庚酸甲酯	895
2-methyl-5-ethylpiperidine	2-甲基-5-乙基哌啶	1451
methylethylpropylamine	甲乙丙胺	1312
2-methyl-3-ethylpyrazine	2-甲基-3-乙基吡嗪	1740



2-methyl-5-ethylpyrazine	2-甲基-5-乙基吡嗪	1742
2-methyl-6-ethylpyrazine	2-甲基-6-乙基吡嗪	1741
1-methyl-4-ethylpyrazoline	1-甲基-4-乙基吡唑啉	1594
2-methyl-5-ethylpyridine	2-甲基-5-乙基吡啶	1503
2-methyl-6-ethylpyridine	2-甲基-6-乙基吡啶	1502
3-methyl-5-ethylpyridine	3-甲基-5-乙基吡啶	1504
methyl ethyl sulfide	甲基乙基硫醚	1971
methyl evernate	地钱酸甲酯	2944
2-O-methylevernic acid	2-O-甲基地钱酸	2955
methyl farnesenate	金合欢烯酸甲酯	2795
methyl <i>cis,trans</i> -farnesenate	顺式,反式-金合欢烯酸甲酯	2797
methyl <i>trans,trans</i> -farnesenate	反式,反式-金合欢烯酸甲酯	2796
O-methylferrugiol	O-甲基弥罗松醇	2898
methyl formate	甲酸甲酯	887
5-methyl-2-furaldehyde	5-甲基-2-呋喃醛	604
2-methylfuran	2-甲基呋喃	1133
3-methylfuran	3-甲基呋喃	1134
methyl 2-furancarboxylate	2-呋喃羧酸甲酯	988
methyl 3-furancarboxylate	3-呋喃羧酸甲酯	989
methyl gallate	五倍子酸甲酯	964
methylguanidine	甲基胍	1914
1-methylguanine	1-甲基鸟嘌呤	1793
3-methylguanine	3-甲基鸟嘌呤	1794
7-methylguanine	7-甲基鸟嘌呤	1792
N-methylguanosine	N-甲基鸟苷	2962
2'-O-methylguanosine	2'-O-甲基鸟苷	2963
methyl heneicosanoate	二十一酸甲酯	905
methyl hectetranontanoate	四十一酸甲酯	912
methyl heptadecanoate	十七酸甲酯	901
4-methylheptan-2-one	4-甲基-2-庚酮	639
5-methylheptan-2-one	5-甲基-2-庚酮	638
5-methylheptan-3-one	5-甲基-3-庚酮	637
6-methylheptan-2-one	6-甲基-2-庚酮	636
6-methylheptan-4-one	6-甲基-4-庚酮	635
6-methyl-5-hepten-2-one	6-甲基庚-5-烯-2-酮	647
methyl hexanoate	己酸甲酯	893
4-methyl-1-hexene	4-甲基-1-己烯	76
6-methylhexyrolactone	6-甲基己内酯	1094
methylhydrazine	甲基胂	1018
2-methylhydroquinone	2-甲基对苯二酚	449
17 $\beta$ -methyl-17 $\alpha$ -hydroxyandrost-4-en-3-one	17 $\beta$ -甲基-17 $\alpha$ -羟基雄甾-4-烯-3-酮	2561
2-methyl-3-hydroxyaniline	2-甲基-3-羟基苯胺	1361
2-methyl-4-hydroxyaniline	2-甲基-4-羟基苯胺	1362
2-methyl-5-hydroxyaniline	2-甲基-5-羟基苯胺	1363
3-methyl-4-hydroxyaniline	3-甲基-4-羟基苯胺	1364
methyl <i>m</i> -hydroxybenzoate	间羟基苯甲酸甲酯	962
methyl <i>p</i> -hydroxybenzoate	对羟基苯甲酸甲酯	963

1-methyl-7-hydroxy- $\beta$ -carboline	1-甲基-7-羟基- $\beta$ -咔啉	2155
2-methyl-6-hydroxychromone	2-甲基-6-羟基色酮	2446
17 $\beta$ -methyl-17 $\alpha$ -hydroxyestr-4-en-3-one	17 $\beta$ -甲基-17 $\alpha$ -羟基雌甾-4-烯-3-酮	2567
3-methyl-4-hydroxyindole	3-甲基-4-羟基吲哚	1819
methyl 5-hydroxy-3-indoleacetate	5-羟基-3-吲哚乙酸甲酯	1834
2-methyl-3-hydroxy-5-isopropyl- <i>p</i> -benzoquinone	2-甲基-3-羟基-5-异丙基对苯醌	2469
2-methyl-5-hydroxy-7-methoxychromone	2-甲基-5-羟基-7-甲氧基色酮	2450
2-methyl-5-hydroxynaphthaquinone	2-甲基-5-羟基萘醌	2495
2-methyl-5-hydroxypiperidine	2-甲基-5-羟基哌啶	1458
2-methyl-3-hydroxypyran-4-one	2-甲基-3-羟基-4-吡喃酮	1193
2-methyl-5-hydroxypyran-4-one	2-甲基-5-羟基-4-吡喃酮	1194
2-methyl-4-hydroxypyrimidine	2-甲基-4-羟基嘧啶	1698
2-methyl-5-hydroxypyrimidine	2-甲基-5-羟基嘧啶	1699
4-methyl-6-hydroxypyrimidine	4-甲基-6-羟基嘧啶	1700
1-methyl-4-hydroxyquinolin-2-one	1-甲基-4-羟基-2-喹啉酮	1888
1-methyl-3-hydroxyquinolin-4-one	1-甲基-3-羟基-4-喹啉酮	1889
1-methylimidazole	1-甲基咪唑	1605
2-methylimidazole	2-甲基咪唑	1606
5-methylimidazole	5-甲基咪唑	1607
2-methyl-2-imidazoline	2-甲基-2-咪唑啉	1623
1-methyl-2-imino-4-oxoimidazolidine	1-甲基-2-亚氨基-4-氧基咪唑烷	1630
1-methyl-5-imino-1,2,4-triazoline	1-甲基-5-亚氨基-1,2,4-三唑啉	1652
1-methylindole	1-甲基吲哚	1798
2-methylindole	2-甲基吲哚	1799
3-methylindole	3-甲基吲哚	1800
4-methylindole	4-甲基吲哚	1801
5-methylindole	5-甲基吲哚	1802
6-methylindole	6-甲基吲哚	1803
7-methylindole	7-甲基吲哚	1804
methyl 2-indolebutanoate	2-吲哚丁酸甲酯	1854
methyl 3-indolebutanoate	3-吲哚丁酸甲酯	1837
1-methyl-2-indolecarboxylic acid	1-甲基-2-吲哚羧酸	1841
methyl 3-indolepropanoate	3-吲哚丙酸甲酯	1836
<i>m</i> -methylisocyanobenzene	间甲基异氰基苯	1071
<i>p</i> -methylisocyanobenzene	对甲基异氰基苯	1072
methylsopropylamine	甲基异丙胺	1296
2-methyl-5-isopropylphenol	2-甲基-5-异丙基苯酚	2714
1-methylisoquinoline	1-甲基异喹啉	1893
3-methylisoquinoline	3-甲基异喹啉	1894
7-methylisoquinoline	7-甲基异喹啉	1895
3-methylisothiazole	3-甲基异噻唑	2053
4-methylisothiazole	4-甲基异噻唑	2054
5-methylisothiazole	5-甲基异噻唑	2055
5-methylisoxazole	5-甲基异噁唑	1670
methyl 8(17),13-labdadien-15-oate	8(17),13-勒布二烯-15-酸甲酯	2874
methyl 8(17)-labden-15-oate	8(17)-勒布烯-15-酸甲酯	2875
methyl laurate	月桂酸甲酯	897

1-methylinositol	1-甲基肌醇	409	
methyl mesembryanthemoidigenate	仙人棒酸甲酯	2917	
methyl <i>o</i> -methoxybenzoate	邻甲氧基苯甲酸甲酯	967	
methyl 10 $\alpha$ -methoxy-8 $\alpha$ -dihydrolysergate	10 $\alpha$ -甲氧基-8 $\alpha$ -二氢麦角酸甲酯	2101	
methyl 10 $\beta$ -methoxy-8 $\beta$ -dihydrolysergate	10 $\beta$ -甲氧基-8 $\beta$ -二氢麦角酸甲酯	2102	
methyl 10 $\beta$ -methoxy-8 $\alpha$ -dihydrolysergate	10 $\beta$ -甲氧基-8 $\alpha$ -二氢麦角酸甲酯	2103	
methyl 5-methoxy-3-indoleacetate	5-甲氧基-3-吲哚乙酸甲酯	1835	
2-methyl-3-methoxypyrazine	2-甲基-3-甲氧基吡嗪	1748	
2-methyl-6-methoxypyrazine	2-甲基-6-甲氧基吡嗪	1749	
2-methyl-4-methoxypyrimidine	2-甲基-4-甲氧基嘧啶	1710	
2-methyl-6-methoxyquinoline	2-甲基-6-甲氧基喹啉	1877	
methyl <i>o</i> -methylbenzoate	邻甲基苯甲酸甲酯	960	
methyl 3-methyl-2,6-heptadienoate	3-甲基-2,6-庚二烯酸甲酯	914	
methyl <i>m</i> -methylthiobenzoate	间甲基硫代苯甲酸甲酯	2001	
methyl <i>p</i> -methylthiobenzoate	对甲基硫代苯甲酸甲酯	2002	
methyl myristate	肉豆蔻酸甲酯	899	
1-methylnaphthalene	1-甲基萘	166	
2-methylnaphthalene	2-甲基萘	167	
2-methylnaphthaquinone	2-甲基萘醌	2477	
methyl nitrate	硝酸甲酯	1010	
<i>m</i> -methyl- <i>p</i> -nitrosophenol	间甲基对亚硝基苯酚	499	
3-methyl- <i>N</i> -nitrosopiperidine	3-甲基- <i>N</i> -亚硝基哌啶	1274	
methyl nitrous acid	亚硝酸甲酯	1013	
methyl nonadecanoate	十九酸甲酯	903	
2-methylnonane	2-甲基壬烷	35	
4-methylnonane	4-甲基壬烷	36	
5-methylnonane	5-甲基壬烷	37	
methyl 4-octenoate	4-辛烯酸甲酯	894	
3-methylloxazolidin-2-one	3-甲基-2-噁唑烷酮	1668	
methyloxirane	甲基环氧乙烷	1106	
1-methyl-6-oxo-1,6-dihydropurine	1-甲基-6-氧基-1,6-二氢嘌呤	1787	
3-methyl-6-oxo-3,6-dihydropurine	3-甲基-6-氧基-3,6-二氢嘌呤	1786	
4'- <i>O</i> -methylpaludonic acid	4'- <i>O</i> -甲基帕鲁多酸	2951	
methyl pentacosanoate	二十五酸甲酯	909	
methyl pentadecanoate	十五酸甲酯	900	
2-methylpenta-1,3-diene	2-甲基-1,3-戊二烯	83	
2-methylpenta-1,4-diene	2-甲基-1,4-戊二烯	84	
3-methylpenta-1,4-diene	3-甲基-1,4-戊二烯	82	
<i>N</i> -methylpentadienoic lactam	<i>N</i> -甲基戊二烯酸内酰胺	872	
3-methylpentane	3-甲基戊烷	32	
methyl pentanoate	戊酸甲酯	892	
<i>N</i> -methylpentanoic lactam	<i>N</i> -甲基戊酸内酰胺	871	
3-methyl-3-pentenylolactone	3-甲基-3-戊烯内酯	1085	
5-methyl-3-pentenylolactone	5-甲基-3-戊烯内酯	1086	
5-methyl-4-pentenylolactone	5-甲基-4-戊烯内酯	1087	
3-methylpentylolactone	3-甲基戊内酯	1076	
5-methylpentylolactone	5-甲基戊内酯	1077	

<i>o</i> -methylphenol	邻甲基苯酚	426	
<i>m</i> -methylphenol	间甲基苯酚	427	
<i>p</i> -methylphenol	对甲基苯酚	428	
<i>o</i> -methylphenol acetate	乙酸邻甲基苯酚酯	948	
<i>m</i> -methylphenol acetate	乙酸间甲基苯酚酯	949	
<i>p</i> -methylphenol acetate	乙酸对甲基苯酚酯	950	
<i>m</i> -methylphenylethyl ether	间甲基苯基乙基醚	537	
<i>p</i> -methylphenylethyl ether	对甲基苯基乙基醚	538	
<i>N</i> -methylphenylhydrazine	<i>N</i> -甲基苯肼	1031	
1-methyl-2-phenylindole	1-甲基-2-苯基吲哚	1842	
2-methyl-3-phenylindole	2-甲基-3-苯基吲哚	1844	
2-( <i>p</i> -methylphenyl)-1-propanol	2-( <i>p</i> -甲基苯基)-1-丙醇	2715	
6-methyl- <i>o</i> -phthalic anhydride	6-甲基邻苯二甲酸酐	818	
<i>N</i> -methyl- <i>o</i> -phthalic lactam	<i>N</i> -甲基邻苯二甲酸内酰胺	883	
methyl pimarate	右松脂烷-19-酸甲酯	2878	
methyl pimarate	右松脂酸甲酯	2886	
1-methylpiperazine	1-甲基哌嗪	1754	
2-methylpiperazine	2-甲基哌嗪	1755	
<i>N</i> -methylpiperidine	<i>N</i> -甲基哌啶	1444	
2-methylpiperidine	2-甲基哌啶	1445	
3-methylpiperidine	3-甲基哌啶	1446	
4-methylpiperidine	4-甲基哌啶	1447	
<i>N</i> -methylpiperidin-4-one	<i>N</i> -甲基-4-哌啶酮	1461	
2-methylpropane	2-甲基丙烷	30	
<i>N</i> -methyl-1,3-propanediamine	<i>N</i> -甲基-1,3-丙二胺	1325	
methylpropanedinitrile	甲基丙二腈	1050	
2-methyl-2-propenal	2-甲基-2-丙烯醛	566	
methyl propenoate	丙烯酸甲酯	890	
methyl propionate	丙酸甲酯	889	
methylpropyl ether	甲基丙基醚	514	
1-methylpropyl formate	甲酸-1-甲基丙酯	941	
methylpropyl persulfide	过硫化甲丙醚	2065	
2-methylpurine	2-甲基嘌呤	1778	
6-methylpurine	6-甲基嘌呤	1779	
8-methylpurine	8-甲基嘌呤	1780	
methylpyrazine	甲基吡嗪	1733	
1-methylpyrazole	1-甲基吡唑	1569	
3-methylpyrazole	3-甲基吡唑	1570	
4-methylpyrazole	4-甲基吡唑	1571	
3-methylpyrazoline	3-甲基吡唑啉	1583	
5-methylpyrazoline	5-甲基吡唑啉	1584	
3-methylpyrazolin-5-one	3-甲基-5-吡唑啉酮	1600	
2-methylpyridine	2-甲基吡啶	1487	
3-methylpyridine	3-甲基吡啶	1488	
4-methylpyridine	4-甲基吡啶	1489	
methyl 4-pyridinecarboxylate	4-吡啶羧酸甲酯	1562	
6-methyl-2-pyridinecarboxylic acid	6-甲基-2-吡啶羧酸	1561	

2-methylpyrimidine	2-甲基嘧啶	1687
4-methylpyrimidine	4-甲基嘧啶	1688
5-methylpyrimidine	5-甲基嘧啶	1689
<i>N</i> -methylpyrrole	<i>N</i> -甲基吡咯	1471
2-methylpyrrole	2-甲基吡咯	1469
3-methylpyrrole	3-甲基吡咯	1470
<i>N</i> -methylpyrrolidine	<i>N</i> -甲基吡咯烷	1437
3-methylpyrrolidine	3-甲基吡咯烷	1438
2-methylquinoline	2-甲基喹啉	1856
3-methylquinoline	3-甲基喹啉	1857
4-methylquinoline	4-甲基喹啉	1858
5-methylquinoline	5-甲基喹啉	1859
6-methylquinoline	6-甲基喹啉	1860
7-methylquinoline	7-甲基喹啉	1861
8-methylquinoline	8-甲基喹啉	1862
1-methylquinolin-4-one	1-甲基-4-喹啉酮	1887
2-methylresorcinol	2-甲基间苯二酚	447
5-methylresorcinol	5-甲基间苯二酚	448
methyl salicylate	水杨酸甲酯	961
4'- <i>O</i> -methylscandene	4'- <i>O</i> -甲基蔓生鱼藤异黄酮	2333
methyl sekikioate	赛奇酸甲酯	2949
<i>N</i> -methyl-L-serine	<i>N</i> -甲基-L-丝氨酸	2985
methyl stearate	硬脂酸甲酯	902
<i>N</i> -methylsuccinic lactam	<i>N</i> -甲基琥珀酸内酰胺	879
2-methylsuccinic lactam	2-甲基琥珀酸内酰胺	880
methyl tetracosanoate	二十四酸甲酯	908
1-methyltetrahydro- $\beta$ -carboline	1-甲基四氢- $\beta$ -咔啉	2158
2-methyltetrahydrofuran	2-甲基四氢呋喃	1114
3-methyltetrahydrofuran	3-甲基四氢呋喃	1115
1-methyltetrahydroisoquinoline	1-甲基四氢异喹啉	2185
3-methyl-1,2,3,4-tetrahydroisoquinoline	3-甲基-1,2,3,4-四氢异喹啉	1906
2-methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	2-甲基-1,2,3,4-四氢萘	180
6-methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	6-甲基-1,2,3,4-四氢萘	181
3-methyl-1,2,3,4-tetrahydroquinoline	3-甲基-1,2,3,4-四氢喹啉	1885
6-methyl-1,2,3,4-tetrahydroquinoline	6-甲基-1,2,3,4-四氢喹啉	1886
2-methyltetrahydropyran	2-甲基四氢吡喃	1145
3-methyltetrahydropyran	3-甲基四氢吡喃	1146
6-methyl-2,3,4,5-tetrahydropyridazin-3-one	6-甲基-2,3,4,5-四氢-3-哒嗪酮	1685
3-methyltetrahydrothiophene	3-甲基四氢噻吩	1930
2-methyltetrahydrothiopyran	2-甲基四氢噻喃	1934
3-methyltetrahydrothiopyran	3-甲基四氢噻喃	1935
4-methyltetrahydrothiopyran	4-甲基四氢噻喃	1936
1-methyltetrazole	1-甲基四唑	1656
5-methyltetrazole	5-甲基四唑	1657
4-methylthiazole	4-甲基噻唑	2035
5-methylthiazole	5-甲基噻唑	2036
2-methylthiazolidine	2-甲基噻唑烷	2050

3-methylthiazolidine	3-甲基噻唑烷	2049	
2-methylthietane	2-甲基硫杂环丁烷	1927	
3-methylthietane	3-甲基硫杂环丁烷	1928	
methylthiirane	甲基硫杂环丙烷	1924	
methylthiobenzene	甲硫基苯	1980	
methylthiobutane	甲硫基丁烷	1973	
methyl thiocyanate	硫氰酸甲酯	997	
methyl thiopentanoate	硫代戊酸甲酯	1009	
2-methylthiophene	2-甲基噻吩	2008	
3-methylthiophene	3-甲基噻吩	2009	
5-methyl-2-thiophenecarboxylic acid	5-甲基-2-噻吩羧酸	2025	
<i>o</i> -methylthiophenol	邻甲基苯硫酚	1987	
<i>m</i> -methylthiophenol	间甲基苯硫酚	1988	
<i>p</i> -methylthiophenol	对甲基苯硫酚	1989	
methylthiourea	甲基硫脲	1992	
1-methyl-1,2,4-triazole	1-甲基-1,2,4-三氮唑	1638	
3-methyl-1,2,4-triazole	3-甲基-1,2,4-三氮唑	1639	
4-methyl-1,2,4-triazole	4-甲基-1,2,4-三氮唑	1640	
methyl trichloroacetate	三氯乙酸甲酯	915	
methyl tricontoanoate	三十酸甲酯	911	
methyl tricosanoate	二十三酸甲酯	907	
methyl tridecanoate	十三酸甲酯	898	
methyl 2 $\alpha$ ,3 $\beta$ ,23-trihydroxyolean-12-en-28-oate	2 $\alpha$ ,3 $\beta$ ,23-三羟基齐墩果-12-烯-28-酸甲酯	2918	
methyl 2 $\beta$ ,3 $\beta$ ,23-trihydroxyolean-12-en-28-oate	2 $\beta$ ,3 $\beta$ ,23-三羟基齐墩果-12-烯-28-酸甲酯	2919	
methylurea	甲基脲	1909	
<i>N</i> <sub>a</sub> -methylvincadifformine	<i>N</i> <sub>a</sub> -甲基文卡明	2132	
1-methylxanthine	1-甲基黄嘌呤	1795	
3-methylxanthine	3-甲基黄嘌呤	1796	
minovincinine	米诺文西宁	2133	
monobromoethane	一溴乙烷	231	
monobromoethene	一溴乙烯	268	
monobromomethane	一溴甲烷	217	
monochlorocyclohexane	一氯环己烷	264	
monochloroethane	一氯乙烷	230	
monochloroethene	一氯乙烯	267	
monochloromethane	一氯甲烷	216	
monofluoro- <i>tert</i> -butane	一氟叔丁烷	248	
monofluorocyclohexane	一氟环己烷	263	
monofluoroethane	一氟乙烷	229	
monofluoroethene	一氟乙烯	266	
monofluoroethyne	一氟乙炔	286	
monofluoromethane	一氟甲烷	215	
monomethyl- <i>p</i> -phthalate	对苯二甲酸单甲酯	977	
monomethyl succinate	琥珀酸单甲酯	913	
morphine	吗啡	2211	
manduserone	曼得西酮	2352	
$\alpha$ -muurolene	$\alpha$ -蛇麻烯	2838	

<i>γ</i> -muurolene	γ-蛇麻烯	2839
myrcene	月桂烯	2638
myristic acid	肉豆蔻酸	726
myrtanal	桃金娘醛	2733
myrtenal	桃金娘烯醛	2737
myrtenol	桃金娘烯醇	2742

## N

nantenine	南天竹宁	2202
naphthacene	并四苯	202
1,4-naphthadiol	1,4-二萘酚	507
1,5-naphthadiol	1,5-二萘酚	508
2,4-naphthadiol	2,4-二萘酚	509
2,7-naphthadiol	2,7-二萘酚	510
naphthalene	萘	165
1-naphthalenecarboxylic acid	1-萘甲酸	788
2-naphthalenecarboxylic acid	2-萘甲酸	789
1,4-naphthalenediamine	1,4-萘二胺	1422
1,5-naphthalenediamine	1,5-萘二胺	1423
1,8-naphthalenediamine	1,8-萘二胺	1424
2,3-naphthalenediamine	2,3-萘二胺	1425
naphthaleno[ <i>a</i> ]anthracene-1,2	萘并[ <i>a</i> ]蒽	211
naphthaquinone	萘醌	2476
1-naphthol( <i>α</i> -naphthol)	1-萘酚( <i>α</i> -萘酚)	505
2-naphthol( <i>β</i> -naphthol)	2-萘酚( <i>β</i> -萘酚)	506
naringenin	那灵黄烷酮	2314
neochlorogenin	新绿莲皂甙元	2597
neopine	尼奥品	2215
nephroarctin	乃芙罗阿克亭	2945
neral	香橙醛	2639
nerol	香橙醇	2640
nerolidol	苦橙油醇	2787
<i>cis</i> -nerolidol	顺式苦橙油醇	2788
neronine	尼罗宁	2208
nicotinamide	菸酰胺	1565
nicotinic acid	菸酸	1559
<i>o</i> -nitroacetophenone	邻硝基苯乙酮	1222
<i>m</i> -nitroacetophenone	间硝基苯乙酮	1223
<i>p</i> -nitroacetophenone	对硝基苯乙酮	1224
<i>m</i> -nitro <i>p</i> -aminobenzoic acid	间硝基对氨基苯甲酸	1238
<i>o</i> -nitroaniline	邻硝基苯胺	1232
<i>m</i> -nitroaniline	间硝基苯胺	1233
<i>p</i> -nitroaniline	对硝基苯胺	1234
<i>o</i> -nitrobenzaldehyde	邻硝基苯甲醛	1219
<i>m</i> -nitrobenzaldehyde	间硝基苯甲醛	1220
<i>p</i> -nitrobenzaldehyde	对硝基苯甲醛	1221

<i>o</i> -nitrobenzamide	邻硝基苯甲酰胺	1229
<i>m</i> -nitrobenzamide	间硝基苯甲酰胺	1230
<i>p</i> -nitrobenzamide	对硝基苯甲酰胺	1231
nitrobenzene	硝基苯	1204
<i>o</i> -nitro- <i>p</i> -benzenediamine	邻硝基对苯二胺	1235
3-nitro- <i>o</i> -benzenediamine	3-硝基邻苯二胺	1236
4-nitro- <i>o</i> -benzenediamine	4-硝基邻苯二胺	1237
<i>o</i> -nitrobenzoic acid	邻硝基苯甲酸	1225
<i>m</i> -nitrobenzoic acid	间硝基苯甲酸	1226
<i>p</i> -nitrobenzoic acid	对硝基苯甲酸	1227
<i>o</i> -nitrobenzylalcohol	邻硝基苄醇	1216
<i>m</i> -nitrobenzylalcohol	间硝基苄醇	1217
<i>p</i> -nitrobenzylalcohol	对硝基苄醇	1218
nitrobutane	硝基丁烷	1203
nitroethane	硝基乙烷	1201
2-nitroimidazole	2-硝基咪唑	1621
5-nitroimidazole	5-硝基咪唑	1622
<i>p</i> -nitroisopropylbenzene	对硝基异丙苯	1208
nitromethane	硝基甲烷	1200
<i>o</i> -nitrophenol	邻硝基苯酚	491
<i>m</i> -nitrophenol	间硝基苯酚	492
<i>p</i> -nitrophenol	对硝基苯酚	493
<i>o</i> -nitrophenylhydrazine	邻硝基苯肼	1239
<i>p</i> -nitrophenylhydrazine	对硝基苯肼	1241
<i>m</i> -nitrophenylhydrazine hydrochloride	间硝基苯肼盐酸盐	1240
nitropropane	硝基丙烷	1202
1-nitropyrazole	1-硝基吡唑	1579
3-nitropyrazole	3-硝基吡唑	1580
4-nitropyrazole	4-硝基吡唑	1581
2-nitropyridine	2-硝基吡啶	1567
<i>N</i> -nitrosoazetidine	<i>N</i> -亚硝基氮杂环丁烷	1270
<i>o</i> -nitrosobenzaldehyde	邻亚硝基苯甲醛	598
<i>o</i> -nitrosobenzoic acid	邻亚硝基苯甲酸	782
<i>N</i> -nitrosodiethanamine	<i>N</i> -亚硝基二乙胺	1268
<i>N</i> -nitroso-2,5-dihydropyrrole	<i>N</i> -亚硝基-2,5-二氢吡咯	1273
<i>N</i> -nitrosodimethylamine	<i>N</i> -亚硝基二甲胺	1267
<i>N</i> -nitrosodipropylamine	<i>N</i> -亚硝基二丙胺	1269
<i>N</i> -nitrosomorpholine	<i>N</i> -亚硝基吗啉	1276
<i>p</i> -nitrosophenol	对亚硝基苯酚	498
<i>N</i> -nitrosopiperazine	<i>N</i> -亚硝基哌嗪	1275
<i>N</i> -nitrosopyrrolidine	<i>N</i> -亚硝基吡咯烷	1271
<i>o</i> -nitrotoluene	邻硝基甲苯	1205
<i>m</i> -nitrotoluene	间硝基甲苯	1206
<i>p</i> -nitrotoluene	对硝基甲苯	1207
nonacosane	二十九烷	25
nonadecane	十九烷	16
nonadecanoic acid	十九酸	731



nonadecan-2-one	2-十九酮	646	
3',3'',3''',4',4'',5',5'',7,7''-nonamethoxy-3-dehydro-4,8''-biflavane	3',3'',3''',4',4'',5',5'',7,7''-九甲氧基-3-去氢-4,8''-双黄酮	2371	
nonanal	壬醛	556	
nonane	壬烷	8	
nonanoic acid	壬酸	721	
1-nonanol	1-壬醇	350	
nonanthiol	壬硫醇	1965	
24-norcholesta-5,22-dien-3 $\beta$ -ol	24-降胆甾-5,22-二烯-3 $\beta$ -醇	2620	
norisovisnagin	降异维斯那津	2451	
norleucine	正亮氨酸	2987	
O <sup>1</sup> -normelicopicine	O <sup>1</sup> -去甲基蜜茱萸生碱	2240	
normelicopidine	去甲基异蜜茱萸碱	2236	
O-normelicopine	O-去甲基蜜茱萸碱	2234	

## O

obtusatic acid	树花地衣酸	2954	
ochrobirine	淡黄紫萘碱	2197	
trans-ocimene	反式罗勒烯	2637	
octacosane	二十八烷	24	
octadecanal	十八醛	561	
octadecane	十八烷	15	
1-octadecanol	1-十八醇	358	
1,7-octadiyne	1,7-辛二炔	130	
cis-octahydrondene	顺式八氢茛	63	
3,3',4',5,5',6,7,8-octamethoxyflavone	3,3',4',5,5',6,7,8-八甲氧基黄酮	2300	
octanal	辛醛	555	
octanedinitrile	辛二腈	1053	
2-octanone	2-辛酮	632	
3-octanone	3-辛酮	640	
4-octanone	4-辛酮	633	
2-octene	2-辛烯	77	
3-octene	3-辛烯	78	
olean-12-ene	齐墩果-12-烯	2910	
olean-18-ene	齐墩果-18-烯	2929	
olean-12-en-28-al	齐墩果-12-烯-28-醛	2912	
olean-12-en-3 $\beta$ ,16 $\beta$ ,22 $\alpha$ ,28-tetrol	齐墩果-12-烯-3 $\beta$ ,16 $\beta$ ,22 $\alpha$ ,28-四醇	2915	
olean-12-en-3 $\beta$ ,28,29-triol	齐墩果-12-烯-3 $\beta$ ,28,29-三醇	2914	
oleanolic acid	齐墩果酸	2916	
osthol	奥索内酯	2408	
oxalic acid	乙二酸(草酸)	740	
oxalic dihydrazide	草酰二肼	1035	
oxalyl dichloride	草二酰氯	823	
oxamide	草酰胺	842	
oxazole	噁唑	1661	
oxetane	环氧丙烷	1110	

oxirane	环氧乙烷	1105
1,2,5-oxodiazole	1,2,5-噁二唑	1675
3-oxoferruginol	3-氧基弥罗松酚	2899
17-oxolupanine	17-氧基白金雀儿碱	2245
4-oxopentylolactone	4-氧基戊内酯	1092
3-oxototarol	3-氧基桃塔酚	2909
oxyayanin-B	羟基阿亚黄酮B	2305

## P

pachygenol	厚果皮醇	2578
palmitic acid	棕榈酸	728
palmitamide	棕榈酰胺	838
palustrol	异喇叭茶醇	2858
paniculogenin	圆锥茄皂甙元	2605
patchoulane	广藿香烷	2859
patchouli alcohol	广藿香醇	2830
parvisoflavone-A trimethyl ether	帕尔维异黄酮A三甲醚	2330
parvisoflavone-B trimethyl ether	帕尔维异黄酮B三甲醚	2331
$\beta$ -peltatin	$\beta$ -足叶草脂素	2939
pentacene	并五苯	207
pentachlorobenzene	五氯苯	315
pentachlorophenol	五氯苯酚	483
pentachloropyridine	五氯吡啶	1554
pentacosane	二十五烷	22
pentadecane	十五烷	12
pentadecanoic acid	十五酸	727
1-pentadecanol	1-十五醇	355
pentadioyl dichloride	戊二酰氯	824
pentaethoxyarsenic	五乙氧基砷	2098
pentafluoroaniline	五氟苯胺	1394
pentafluorobenzamide	五氟苯甲酰胺	855
pentafluorobenzonitrile	五氟苯腈	1063
3,3',4',5,7-pentahydroxyflavane	3,3',4',5,7-五羟基黄酮	2361
3,3',4',5,7-pentahydroxyflavanone	3,3',4',5,7-五羟基黄酮酮	2316
pentafluorophenol	五氟苯酚	482
pentafluorophenylhydrazine	五氟苯肼	1028
pentafluoropyridine	五氟吡啶	1543
pentafluorotoluene	五氟甲苯	297
pentamethoxyarsenic	五甲氧基砷	2096
2',3,4',5,7-pentamethoxyflavone	2',3,4',5,7-五甲氧基黄酮	2307
2',4',5',6,7-pentamethoxyisoflavone	2',4',5',6,7-五甲氧基异黄酮	2329
pentamethylaniline	五甲基苯胺	1348
pentanal	戊醛	552
pentanal oxime	戊醛肟	1916
pentanamide	戊酰胺	835
pentane	戊烷	5

pentanedial	戊二醛	571	
1,5-pentanediamine	1,5-戊二胺	1327	
pentanenitrile	戊腈	1043	
1-pentanol	1-戊醇	347	
2-pentanol	2-戊醇	369	
3-pentanol	3-戊醇	370	
2-pentanone	2-戊酮	627	
3-pentanone	3-戊酮	628	
1,3,5,7,9-pentathiepane	1,3,5,7,9-五硫杂环癸烷	1951	
pentanthiol	戊硫醇	1963	
pentatriacontane	三十五烷	28	
1-pentene	1-戊烯	67	
2-pentene	2-戊烯	70	
4-pentenyrolactone	4-戊烯内酯	1084	
pentylamine	戊胺	1282	
2-pentylamine	2-戊胺	1292	
<i>n</i> -pentylbenzene	正戊基苯	160	
pentyl formate	甲酸戊酯	943	
<i>N</i> -pentylhexylamine	<i>N</i> -戊基己胺	1304	
5-pentyl-3-pentenyrolactone	5-戊基-3-戊烯内酯	1091	
1-pentyne	1-戊炔	128	
pentyrolactone	戊内酯	1075	
perillaldehyde	紫苏醛	2700	
periplogenin	杠柳甙元	2574	
$\alpha$ -phellandrene	$\alpha$ -菲兰烯	2697	
$\beta$ -phellandrene	$\beta$ -菲兰烯	2696	
phenanthraquinone	菲醌	2524	
phenaretin	菲那亭	2948	
phenol	苯酚	419	
phenol acetate	乙酸苯酚酯	947	
phenol benzoate	苯甲酸酚酯	2941	
phenol salicylate	水杨酸酚酯	2943	
phenol propionate	丙酸苯酚酯	958	
phenylacetamide	苯基乙酰胺	858	
phenylacetic acid	苯乙酸	806	
phenylacetone	苯基丙酮	714	
<i>N</i> -phenylaniline	<i>N</i> -苯基苯胺	1427	
<i>N</i> -phenylbenzamide	<i>N</i> -苯基苯甲酰胺	847	
1-phenylethanol	1-苯基乙醇	414	
phenylethyl ether	苯基乙基醚	536	
phenylhydrazine	苯肼	1027	
phenylmethyl ether (anisole)	苯甲醚(茴香醚)	532	
2-phenyl-5-methylindole	2-苯基-5-甲基吲哚	1843	
phenylpropionic acid	苯丙酸	810	
phenylpropyl ether	苯基丙基醚	539	
phenyl thiocyanate	硫氰酸苯酯	1000	
phloroglucinol	间苯三酚	425	

phospholane	磷杂环戊烷	2092	
<i>o</i> -phthalimide	邻苯二甲酰胺	856	
<i>o</i> -phthalic acid	邻苯二甲酸	783	
<i>m</i> -phthalic acid	间苯二甲酸	784	
<i>p</i> -phthalic acid	对苯二甲酸	785	
<i>o</i> -phthalic anhydride	邻苯二甲酸酐	817	
<i>o</i> -phthalic lactam	邻苯二甲酸内酰胺	882	
<i>m</i> -phthalyl dichloride	间苯二酰氯	828	
<i>p</i> -phthalyl dichloride	对苯二酰氯	829	
physcion	大黄素甲醚	2519	
piceol	针枞酚	705	
7,15-pimaradiene	7,15-右松脂二烯	2880	
8,15-pimaradiene	8,15-右松脂二烯	2883	
8(14),15-pimaradiene	8(14),15-右松脂二烯	2884	
7,15-pimaradiene-3 $\beta$ -ol	7,15-右松脂二烯-3 $\beta$ -醇	2882	
7,15-pimaradiene-3-one	7,15-右松脂二烯-3-酮	2881	
15-pimaren-19-al	15-右松脂烯-19-醛	2879	
pinuric acid	右松脂酸	2885	
pimelic acid	薄桃酸	745	
$\alpha$ -pinene	$\alpha$ -蒎烯	2736	
$\delta$ -pinene	$\delta$ -蒎烯	2730	
$\alpha$ -pinene oxide	$\alpha$ -蒎烯氧化物	2734	
pinocarveol	松香芹醇	2739	
<i>trans</i> -pinocarveol	反式松香芹醇	2740	
2 $\alpha$ -pinocarpone	2 $\alpha$ -松香芹酮	2731	
2 $\beta$ -pinocarpone	2 $\beta$ -松香芹酮	2732	
piperazine	哌嗪	1753	
piperidine	哌啶	1443	
2-piperidinone	2-哌啶酮	1463	
$\Delta^{4(8)}$ -piperitenone	$\Delta^{4(8)}$ -辣薄荷烯酮	2701	
$\Delta^8$ -piperitenone	$\Delta^8$ -辣薄荷烯酮	2699	
<i>cis</i> -piperitol	顺式辣薄荷醇	2666	
<i>trans</i> -piperitol	反式辣薄荷醇	2667	
piperitone	辣薄荷酮	2682	
piperonal	胡椒醛	600	
piperonylic acid	胡椒基酸	776	
podophyllotoxin	鬼臼脂素	2944	
5 $\alpha$ -pregnane	5 $\alpha$ -孕甾烷	2527	
5 $\alpha$ -pregnan-3 $\beta$ ,20-diol	5 $\alpha$ -孕甾烷-3 $\beta$ ,20-二醇	2531	
5 $\beta$ -pregnan-3 $\alpha$ ,20-diol	5 $\beta$ -孕甾烷-3 $\alpha$ ,20-二醇	2530	
5 $\alpha$ -pregnan-3 $\beta$ -ol	5 $\alpha$ -孕甾烷-3 $\beta$ -醇	2529	
5 $\beta$ -pregnan-3 $\alpha$ -ol-20-one	5 $\beta$ -孕甾烷-3 $\alpha$ -醇-20-酮	2534	
5 $\alpha$ -pregnan-3-one	5 $\alpha$ -孕甾烷-3-酮	2528	
5 $\alpha$ -pregnan-20-one	5 $\alpha$ -孕甾烷-20-酮	2533	
pregn-4-en-3,20-dione	孕甾-4-烯-3,20-二酮	2535	
pregn-5-en-3 $\beta$ -ol	孕甾-5-烯-3 $\beta$ -醇	2532	
L-proline	L-脯氨酸	2982	

propanal	丙醛	549		
propanamide	丙酰胺	833		
propane	丙烷	3		
1,3-propanediamine	1,3-丙二胺	1324		
propanedinitrile	丙二腈	1048		
1,2-propanediol	1,2-丙二醇	377		
1,3-propanediol	1,3-丙二醇	376		
propanenitrile	丙腈	1042		
propanoic acid	丙酸	717		
propanoic acid anhydride	丙酸酐	812		
1-propanol	1-丙醇	345		
2-propanol	2-丙醇	367		
propanthiol	丙硫醇	1957		
2-propenal	2-丙烯醛	565		
propenamide	丙烯酰胺	841		
propene	丙烯	65		
propenoic acid	丙烯酸	737		
2-propen-1-ol	2-丙烯-1-醇	382		
2-propenylamine	2-丙烯胺	1289		
<i>N</i> <sub>s</sub> -propionylaspidospermidine	<i>N</i> <sub>s</sub> -丙酰基白坚米定	2109		
propionyl chloride	丙酰氯	821		
2-propionylfuran	2-丙酰基呋喃	1142		
1-(2-propenyl)imidazole	1-(2-丙烯基)咪唑	1614		
<i>N</i> <sub>s</sub> -propionyl-16-methoxy-17-hydroxyaspidospermidine	<i>N</i> <sub>s</sub> -丙酰基-16-甲氧基-17-羟基白坚米定	2115		
3-propionylpyridine	3-丙酰基吡啶	1541		
<i>N</i> -propionylpyrrolidine	<i>N</i> -丙酰基吡咯烷	1439		
propylamine	丙胺	1280		
<i>n</i> -propylbenzene	正丙基苯	152		
propyl butanoate	丁酸丙酯	938		
propylbutyl ether	丙基丁基醚	518		
propyl cyanate	氰酸丙酯	992		
propyl formate	甲酸丙酯	935		
4-propylheptane	4-丙基庚烷	41		
propylhydrazine	丙基肼	1022		
propylisopropylamine	丙基异丙胺	1300		
2-propyl-4-methylfuran	2-丙基-4-甲基呋喃	1138		
1-propyl-3-methylpyrazoline	1-丙基-3-甲基吡唑啉	1597		
propyl nitrate	硝酸丙酯	1012		
5-propylpentylolactone	5-丙基戊内酯	1083		
2-propylphenol	2-丙基苯酚	443		
4-propylpiperidine	4-丙基哌啶	1452		
propylpyrazine	丙基吡嗪	1745		
5-propylpyrazoline	5-丙基吡唑啉	1596		
2- <i>n</i> -propylpyridine	2-正丙基吡啶	1506		
4- <i>n</i> -propylpyridine	4-正丙基吡啶	1507		
propyl thiocyanate	硫氰酸丙酯	999		
2-propylthiophene	2-丙基噻吩	2016		

propyne	丙炔	124	
pseudomonene	伪柠檬烯	2695	
psoralen	补骨脂内酯	2391	
pulegone	薄荷萜酮	2686	
purine	嘌呤	1777	
pyran-4-one	4-吡喃酮	1190	
pyrazine	吡嗪	1732	
pyrazine 1,4-dioxide	1,4-二氧化吡嗪	1752	
pyrazineformamide	吡嗪甲酰胺	1751	
pyrazole	吡唑	1568	
pyrene	芘	199	
pyridazine	哒嗪	1677	
pyridine	吡啶	1486	
4-pyridinecarbothioamide	4-吡啶硫代羧酰胺	2004	
3-pyridinecarboxaldehyde	3-吡啶甲醛	1532	
4-pyridinecarboxaldehyde	4-吡啶甲醛	1533	
4-pyridinecarboxamide	4-吡啶甲酰胺	1566	
2-pyridinecarboxylic acid	2-吡啶羧酸	1558	
4-pyridinecarboxylic acid	4-吡啶羧酸	1560	
pyridin-4-one	4-吡啶酮	1467	
pyrimidine	嘧啶	1686	
2,4,6-pyrimidinetrione	2,4,6-嘧啶三酮	1731	
pyrrole	吡咯	1468	
pyrrolidine	吡咯烷	1436	
2-pyrroldinone	2-吡咯烷酮	1442	
$\epsilon$ -pyrrolycinone	$\epsilon$ -吡咯霉素	2973	

## Q

quercetin	槲皮素	$C_{21}H_{16}O_7 = 302$	2266
quinoline	喹啉	$C_9H_7N = 129$	1855
2-quinolinecarboxylic acid	2-喹啉羧酸	$C_{10}H_7O_2N = 173$	1881
6-quinolinecarboxylic acid	6-喹啉羧酸	$C_{10}H_7O_2N = 173$	1882

## R

reserpine	利血平	$C_{33}H_{40}O_9N_2 = 608$	2175
resibufogenin	瑞西蟾蜍甙元	$C_{24}H_{32}O_4 = 384$	2587
resorcin	间苯二酚	$C_6H_6O_2 = 110$	421
resorcinol diacetate	间苯二酚二乙酸酯	$C_{10}H_{10}O_4 = 194$	955
resorcinol monobenzoate	单苯甲酸间苯二酚酯	$C_{13}H_{10}O_3 = 214$	2942
rhazizone	毛茛因	$C_{19}H_{24}ON_2 = 296$	2162
$\alpha_2$ -rhodomycinone	$\alpha_2$ -紫红霉素酮	$C_{20}H_{18}O_8 = 386$	2970
romipne	洛乃因	$C_{20}H_{23}O_4N = 341$	2188
rotnone	色藤酮	$C_{27}H_{22}O_8 = 394$	2356

## S

sabinene	桉烯	2762	
----------	----	------	--

$\alpha$ -sabinol	$\alpha$ -桉萜醇	2763
$\beta$ -sabinol	$\beta$ -桉萜醇	2764
salicylic acid	水杨酸	763
$\alpha$ -santalene	$\alpha$ -檀香烯	2811
$\beta$ -santalene	$\beta$ -檀香烯	2812
$\alpha$ -santalol	$\alpha$ -檀香醇	2813
sarsasapogenin	洋菝葜皂甙元	2596
scandenin	蔓生鱼藤素	2417
scandенone	蔓生鱼藤异黄酮	2332
scopoletin	东莨菪内酯	2388
sebacic acid	皮脂酸	747
selina-3,7(11)-diene	芹子-3,7(11)-二烯	2821
selina-4(14),7(11)-diene	芹子-4(14),7(11)-二烯	2823
selina-4(14),11-diene	芹子-4(14),11-二烯	2824
selinane	芹子烷	2816
$\delta$ -selinene	$\delta$ -芹子烯	2822
serine	丝氨酸	2981
serunundone	色曼酮	2354
sesamin	芝麻素	2936
shuanghuaol	双花醇	2777
sibiricine	西比瑞辛	2196
$\beta$ -sinensal	$\beta$ -华报春花醛	2783
$\beta$ -sitosterol	$\beta$ -谷甾醇	2616
skyrin	靛茜素	2523
speciociliatine	美艳西里亭	2170
stearamide	硬脂酰胺	839
stearic acid	硬脂酸	730
5 $\alpha$ -stigmasta-7,22-dien-3 $\beta$ -ol	$\alpha$ -豆甾-7,22-二烯-3 $\beta$ -醇	2625
stigmastane	豆甾烷	2611
stigmastan-7-one	豆甾烷-7-酮	2613
stigmasterol	豆甾醇	2623
strophanthidin	毒毛旋花子甙元	2576
stylopine	刺罂粟碱	2198
suberosin	花椒素	2407
succinamide	琥珀二酰胺	844
succinic acid	琥珀酸	742
succinic anhydride	琥珀酸酐	813
succinic lactam	琥珀酸内酰胺	878
sugiol	柳杉酚	2900
sulfur	硫磺	2067
swertisin	当药黄酮	2378
syringaresinol dimethyl ether	丁香脂素二甲醚	2938

## T

talbotine	托包亭	2184
tanshinone I	丹参酮 I	2525

tecleanthine	特克里安辛	2239
telocnobufagin	特洛西诺蟾蜍精	2583
<i>o</i> -terphenyl	邻联三苯	193
<i>m</i> -terphenyl	间联三苯	194
<i>p</i> -terphenyl	对联三苯	195
$\alpha$ -terpinene	$\alpha$ -松油烯	2691
$\beta$ -terpinene	$\beta$ -松油烯	2693
$\gamma$ -terpinene	$\gamma$ -松油烯	2694
$\alpha$ -terpineol	$\alpha$ -松油醇	2669
$\beta$ -terpineol	$\beta$ -松油醇	2678
terpinen-4-ol	松油烯-4-醇	2668
<i>cis</i> - $\beta$ -terpineol	顺式- $\beta$ -松油醇	2677
$\alpha$ -terpinolene	$\alpha$ -异松油烯	2692
1,2,4,5-tetrabromobenzene	1,2,4,5-四溴苯	314
1,1,2,2-tetrabromoethane	1,1,2,2-四溴乙烷	245
tetrabromoethene	四溴乙烯 C <sub>2</sub> Br <sub>4</sub> =340	279
2,3,4,5-tetrachloroaniline	2,3,4,5-四氯苯胺	1392
2,3,5,6-tetrachloroaniline	2,3,5,6-四氯苯胺	1393
1,2,3,4-tetrachlorobenzene	1,2,3,4-四氯苯	312
1,2,4,5-tetrachlorobenzene	1,2,4,5-四氯苯	313
tetrachlorocatechol	四氯邻苯二酚	488
1,1,2,2-tetrachloroethane	1,1,2,2-四氯乙烷	244
tetrachloroethene	四氯乙烯	278
tetrachlorohydroquinone	四氯对苯二酚	489
2,3,4,5-tetrachlorophenol	2,3,4,5-四氯苯酚	479
2,3,4,6-tetrachlorophenol	2,3,4,6-四氯苯酚	480
2,3,5,6-tetrachlorophenol	2,3,5,6-四氯苯酚	481
tetrachlorothiophene	四氯噻吩	2031
tetracosane	二十四烷	21
1-tetracosanol	1-二十四醇	362
tetradecanal	十四醛	559
tetradecanamine	十四胺	1286
tetradecane	十四烷	11
1-tetradecanol	1-十四醇	354
2-tetradecanol	2-十四醇	372
1-tetradecene	1-十四烯	86
1,2,9,10-tetrahydroaristolane	1,2,9,10-四去氢上青木香烷	2825
1,1,3,3-tetraethoxypropane	1,1,3,3-四乙氧基丙烷	618
tetraethylplumbane	四乙基甲铅烷	2084
tetraethylpyrazine	四乙基吡嗪	1744
tetraethylsilicane	四乙基甲硅烷	2079
1,1,2,2-tetrafluoroethane	1,1,2,2-四氟乙烷	243
tetrafluoroethene	四氟乙烯	277
tetrafluorohydroquinone	四氟对苯二酚	487
2,3,5,6-tetrafluoropyridine	2,3,5,6-四氟吡啶	1542
tetrafluororesorcinol	四氟间苯二酚	486
tetrahydrofuran	四氢呋喃	1113



1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	1,2,3,4-四氢萘	174
tetrahydropyrimidine	延胡索乙素	2200
tetrahydropyran	四氢吡喃	1144
tetrahydropyran-4-one	四氢-4-吡喃酮	1189
2,3,4,5-tetrahydropyridazine	2,3,4,5-四氢哒嗪	1684
1,2,3,4-tetrahydroquinoline	1,2,3,4-四氢喹啉	1884
5,6,7,8-tetrahydroquinoline	5,6,7,8-四氢喹啉	1890
1,2,3,4-tetrahydroquinoline	1,2,3,4-四氢异喹啉	1905
tetrahydrosalutaridinol	四氢撒鲁塔瑞定醇	2227
tetrahydrothiophene	四氢噻吩	1929
tetrahydrothiopyran	四氢噻喃	1933
1,2,5,8-tetrahydroxyanthraquinone	1,2,5,8-四羟基蒽醌	2511
tetrahydroxy- <i>p</i> -benzoquinone	四羟基对苯醌	2465
2,3,5,8-tetrahydroxy-6,7-dimethoxynaphthaquinone	2,3,5,8-四羟基-6,7-二甲氧基萘醌	2493
2,5,7,8-tetrahydroxy-3,6-dimethoxynaphthaquinone	2,5,7,8-四羟基-3,6-二甲氧基萘醌	2494
3,4',5,7-tetrahydroxyflavanone	3,4',5,7-四羟基黄酮	2315
3,4',5,7-tetrahydroxy-3'-methoxyflavone	3,4',5,7-四羟基-3'-甲氧基黄酮	2277
3,4',5,7-tetrahydroxy-6-methoxyflavone	3,4',5,7-四羟基-6-甲氧基黄酮	2288
3,4',5,7-tetrahydroxy-6-methoxyflavone	3,4',5,7-四羟基-6-甲氧基黄酮	2289
1,2,6,7-tetrahydroxy-3-methyl-8-methoxyanthraquinone	1,2,6,7-四羟基-3-甲基-8-甲氧基蒽醌	2521
2,5,7,8-tetrahydroxynaphthaquinone	2,5,7,8-四羟基萘醌	2484
1,2,4,5-tetraisopropylbenzene	1,2,4,5-四异丙基苯	155
2',3,5,7-tetramethoxyflavone	2',3,5,7-四甲氧基黄酮	2306
3,3',4',7-tetramethoxyflavone	3,3',4',7-四甲氧基黄酮	2303
3,4',5,7-tetramethoxyflavone	3,4',5,7-四甲氧基黄酮	2309
4',5,6,7-tetramethoxyflavone	4',5,6,7-四甲氧基黄酮	2291
3',4',6,7-tetramethoxyisoflavone	3',4',6,7-四甲氧基异黄酮	2328
1,3,5,6-tetramethoxyxanthone	1,3,5,6-四甲氧基呋喃	2437
<i>N,N,N',N'</i> -tetramethylamine	<i>N,N,N',N'</i> -四甲基对苯二胺	1421
1,2,3,5-tetramethylbenzene	1,2,3,5-四甲基苯	139
1,2,4,5-tetramethylbenzene	1,2,4,5-四甲基苯	140
tetramethyl- <i>p</i> -benzoquinone	四甲基对苯醌	2462
2,2,3,3-tetramethylcyclobutanone	2,2,3,3-四甲基环丁酮	659
2,2,3,4-tetramethylcyclobutanone	2,2,3,4-四甲基环丁酮	660
2,2,4,4-tetramethylcyclobutanone	2,2,4,4-四甲基环丁酮	661
2,2,5,5-tetramethylcyclopentanone	2,2,5,5-四甲基环戊酮	665
1,1,2,2-tetramethylcyclopropane	1,1,2,2-四甲基环丙烷	44
2,2,4,5-tetramethyl-1,3-dioxolane	2,2,4,5-四甲基-1,3-二氧戊烷	1158
tetramethylgermane	四甲基甲锗烷	2082
1,2,4,5-tetramethylhexahydro-1,2,4,5-tetrazine	1,2,4,5-四甲基六氢-1,2,4,5-四嗪	1776
2,3,5,6-tetramethylphenol	2,3,5,6-四甲基苯酚	439
tetramethylpyrazine (cinnarizine)	四甲基吡嗪(脑益嗪)	1738
2,3,4,5-tetramethylpyrrole	2,3,4,5-四甲基吡咯	1475
tetramethylsilicane	四甲基甲硅烷	2077
tetramethylsilicate	硅酸四甲酯	2080
2,2,4,4-tetramethyltetrahydrofuran	2,2,4,4-四甲基四氢呋喃	1120
2,2,5,5-tetramethyltetrahydrofuran	2,2,5,5-四甲基四氢呋喃	1119

tetramethylthiourea	四甲基硫脲	1993
tetraphenylmethane	四苯基甲烷	197
tetrapropylgermane	四丙基甲锗烷	2083
tetratricontane	三十四烷	27
1,2,4,5-tetrazine	1,2,4,5-四嗪	1772
tetrazole	四唑	1655
thamnosan	赛母诺斯民	2415
thebaine	蒂巴因	2220
theobromine	可可豆碱	2249
theophylline	茶碱	2248
thiazole	噻唑	2034
thiazolidine	噻唑烷	2048
thietane	硫杂环丁烷	1926
thiirane	硫杂环丙烷	1923
thioacetamide	硫代乙酰胺	884
thioacetic acid	硫代乙酸	1996
thioacetamide	硫代乙酰苯胺	2005
thioacetamide	硫代苯甲酰胺	2000
thiobenzoic acid	硫代苯甲酸	1999
thionicotinamide	硫代菸酰胺	2003
thiophene	噻吩	2007
2-thiopheneacetic acid	2-噻吩乙酸	2026
2-thiophenecarboxaldehyde	2-噻吩醛	2019
2-thiophenecarboxylic acid	2-噻吩羧酸	2023
3-thiophenecarboxylic acid	3-噻吩羧酸	2024
thiophenol	苯硫酚	1986
thiopyran-4-one	4-噻喃酮	1942
thiourea	硫脲	1991
L-threonine	L-苏氨酸	2984
1-thujanol	1-侧柏醇	2758
$\alpha$ -thujene	$\alpha$ -侧柏烯	2760
$\beta$ -thujene	$\beta$ -侧柏烯	2761
$\alpha$ -thujen-4-ol	$\alpha$ -侧柏烯-4-醇	2765
thujol	侧柏醇	2759
$\alpha$ -thujone	$\alpha$ -侧柏酮	2755
$\beta$ -thujone	$\beta$ -侧柏酮	2756
tigogenin	替告皂甙元	2595
tigogen-3-one	替告皂甙元-3-酮	2594
thamni	榎树黄酮	2372
tirucallane	甘遂烷	2934
tirucallan-3 $\beta$ -ol	甘遂烷-3 $\beta$ -醇	2935
tomatidine	番茄次碱	2258
torreyol	榧叶醇	2844
totarol	桃塔酚	2906
trachyphyllin	特里阿奇菲林	2416
trematin	垂马黄酮	2377
triacontane	三十烷	26

2,4,6-triaminopyrimidine	2,4,6-三氨基嘧啶	1715
4,5,6-triaminopyrimidine	4,5,6-三氨基嘧啶	1716
2,4,6-triamino-1,3,5-triazine	2,4,6-三氨基-1,3,5-三嗪	1764
1,3,5-triazine	1,3,5-三嗪	1761
1,2,4-triazine	1,2,4-三嗪	1762
1,2,3-triazole	1,2,3-三氮唑	1636
1,2,4-triazole	1,2,4-三氮唑	1637
tribromoacetaldehyde	三溴乙醛	564
2,4,6-tribromoaniline	2,4,6-三溴苯胺	1391
1,2,4-tribromobenzene	1,2,4-三溴苯	310
1,3,5-tribromobenzene	1,3,5-三溴苯	311
tribromoethene	三溴乙烯	276
tribromomethane	三溴甲烷	227
2,4,6-tribromophenol	2,4,6-三溴苯酚	478
tributylamine	三丁胺	1315
1,3,5-tributylbenzene	1,3,5-三丁基苯	158
trichloroacetaldehyde	三氯乙醛	563
trichloroacetic acid	三氯乙酸	757
2,3,4-trichloroaniline	2,3,4-三氯苯胺	1388
2,4,5-trichloroaniline	2,4,5-三氯苯胺	1389
2,4,6-trichloroaniline	2,4,6-三氯苯胺	1390
1,2,3-trichlorobenzene	1,2,3-三氯苯	307
1,2,4-trichlorobenzene	1,2,4-三氯苯	308
1,3,5-trichlorobenzene	1,3,5-三氯苯	309
1,1,1-trichloroethane	1,1,1-三氯乙烷	240
1,1,2-trichloroethane	1,1,2-三氯乙烷	241
trichloroethene	三氯乙烯	275
trichloromethane	三氯甲烷	226
2,3,4-trichlorophenol	2,3,4-三氯苯酚	472
2,3,5-trichlorophenol	2,3,5-三氯苯酚	473
2,3,6-trichlorophenol	2,3,6-三氯苯酚	474
2,4,5-trichlorophenol	2,4,5-三氯苯酚	475
2,4,6-trichlorophenol	2,4,6-三氯苯酚	476
2,4,5-trichlorophenol	2,4,5-三氯苯酚	477
2,4,6-trichloropyrimidine	2,4,6-三氯嘧啶	1726
2,4,6-trichloro-1,3,5-trimethylbenzene	2,4,6-三氯-1,3,5-三甲苯	335
tricosane	二十三烷	20
1-tricosanol	1-二十三醇	361
tridecanoic acid	十三酸	725
1-tridecanol	1-十三醇	353
triethylaluminium	三乙基铝	2073
triethylamine	三乙胺	1309
triethylarsine	三乙基胂	2094
triethyl arsenite	亚砷酸三乙酯	2097
1,2,4-triethylbenzene	1,2,4-三乙基苯	149
1,3,5-triethylbenzene	1,3,5-三乙基苯	150
triethyl borate	硼酸三乙酯	2070

- triethylboron 三乙基硼 2069
- 1,3,5-triethyl-1,3,5-hexahydrotriazine 1,3,5-三乙基-1,3,5-六氢三嗪 1770
- triethylphosphine 三乙基膦 2087
- triethylstibine 三乙基锑 2100
- trifluoroacetaldehyde 三氟乙醛 562
- trifluoroacetic acid 三氟乙酸 756
- 1,1,1-trifluoroethane 1,1,1-三氟乙烷 239
- trifluoroethene 三氟乙烯 274
- trifluoromethane 三氟甲烷 225
- 3,3,3-trifluoropropene 3,3,3-三氟丙烯 285
- trihexylamine 三己胺 1319
- 1,2,4-trihydroxyanthraquinone 1,2,4-三羟基蒽醌 2510
- 3 $\beta$ ,14,15 $\beta$ -trihydroxy-20(22)-cardenolide-19-al 3 $\beta$ ,14,15 $\beta$ -三羟基-20(22)-卡烯内酯-19-醛 2577
- 2,4,4'-trihydroxychalcone 2,4,4'-三羟基查耳酮 2345
- 3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -trihydroxycholanolic acid 3 $\alpha$ ,7 $\alpha$ ,12 $\alpha$ -三羟基胆烷酸 2636
- 3,4',5-trihydroxy-3',7-dimethoxyflavone 3,4',5-三羟基-3',7-二甲氧基黄酮 2278
- 3',4',5-trihydroxy-3,7-dimethoxyflavone 3',4',5-三羟基-3,7-二甲氧基黄酮 2302
- 4',5,7-trihydroxy-3,3'-dimethoxyflavone 4',5,7-三羟基-3,3'-二甲氧基黄酮 2301
- 3,5,7-trihydroxyflavone 3,5,7-三羟基黄酮 2263
- 1,3,8-trihydroxy-6-methoxyanthraquinone 1,3,8-三羟基-6-甲氧基蒽醌 2518
- 3,5,7-trihydroxy-4'-methoxyflavanone 3,5,7-三羟基-4'-甲氧基黄酮 2321
- 4',5,7-trihydroxy-6-methoxyflavone 4',5,7-三羟基-6-甲氧基黄酮 2285
- 1,3,6-trihydroxy-8-methylxanthone 1,3,6-三羟基-8-甲基吡酮 2431
- 2,5,8-trihydroxynaphthaquinone 2,5,8-三羟基萘醌 2483
- 3',5,7-trihydroxy-4',5',6,8-tetramethoxyflavone 3',5,7-三羟基-4',5',6,8-四甲氧基黄酮 2297
- 2,4,6-trihydroxy-1,3,5-triazine 2,4,6-三羟基-1,3,5-三嗪 1766
- 1,3,8-trihydroxyxanthone 1,3,8-三羟基吡酮 2425
- triiodomethane 三碘甲烷 228
- triisobutylamine 三异丁胺 1316
- triisopropanolamine 三异丙醇胺 1317
- 3,4,5-trimethoxyaniline 3,4,5-三甲氧基苯胺 1360
- 2,4,5-trimethoxybenzoic acid 2,4,5-三甲氧基苯甲酸 768
- 3',4',5'-trimethoxy-5,7-dihydroxyflavone 3',4',5'-三甲氧基-5,7-二羟基黄酮 2279
- 3',4',7-trimethoxyflavone 3',4',7-三甲氧基黄酮 2281
- 3,5,7-trimethoxyflavone 3,5,7-三甲氧基黄酮 2308
- 4',5,7-trimethoxyflavone 4',5,7-三甲氧基黄酮 2282
- 1,3,6-trimethoxy-8-methylxanthone 1,3,6-三甲氧基-8-甲基吡酮 2435
- 2,4,6-trimethoxy-1,3,5-triazine 2,4,6-三甲氧基-1,3,5-三嗪 1767
- trimethylamine 三甲胺 1306
- 2,4,5-trimethylamine 2,4,5-三甲基苯胺 1346
- 2,4,6-trimethylaniline 2,4,6-三甲基苯胺 1347
- trimethyl arsenite 亚砷酸三甲酯 2095
- 1,2,3-trimethylbenzene 1,2,3-三甲基苯 136
- 1,2,4-trimethylbenzene 1,2,4-三甲基苯 137
- 1,3,5-trimethylbenzene 1,3,5-三甲基苯 138
- 2,4,6-trimethylbenzoic acid 2,4,6-三甲基苯甲酸 762
- 2,3,5-trimethyl-*p*-benzoquinone 2,3,5-三甲基对苯醌 2461

3,7,7-trimethylbicyclo-(3.1.1)-2-heptanone	3,7,7-三甲基双环[3.1.1]-2-庚烷酮	2770
3,7,7-trimethylbicyclo-(3.1.1)-2-heptene	3,7,7-三甲基双环[3.1.1]-2-庚烯	2771
trimethylboron	三甲基硼	2068
2,6,6-trimethyl-1,3-cyclohexadiene-1-formaldehyde	2,6,6-三甲基-1,3-环己二烯-1-甲醛	2775
3,4,4-trimethyl-2,5-cyclohexadienone	3,4,4-三甲基-2,5-环己二烯酮	689
1,2,3-trimethylcyclohexane	1,2,3-三甲基环己烷	58
1,2,4-trimethylcyclohexane	1,2,4-三甲基环己烷	59
1,3,5-trimethylcyclohexane	1,3,5-三甲基环己烷	60
2,2,6-trimethylcyclohexanone	2,2,6-三甲基环己酮	681
2,6,6-trimethyl-1-cyclohexene-1-formaldehyde	2,6,6-三甲基-1-环己烯-1-甲醛	2773
2,6,6-trimethyl-2-cyclohexene-1-formaldehyde	2,6,6-三甲基-2-环己烯-1-甲醛	2774
3,4,4-trimethyl-2-cyclopentenone	3,4,4-三甲基-2-环戊烯酮	670
2,3,5-trimethyl-2,3-dihydro-1,4-dioxane	2,3,5-三甲基-2,3-去氢-1,4-二氧己环	1173
1,5,5-trimethyl-2,4-dioxoimidazolidine	1,5,5-三甲基-2,4-二氧基咪唑烷	1634
3,5,5-trimethyl-2,4-dioxoimidazolidine	3,5,5-三甲基-2,4-二氧基咪唑烷	1635
2,2,4-trimethyl-1,3-dioxolane	2,2,4-三甲基-1,3-二氧戊烷	1157
2,6,6-trimethyl-2-ethenyltetrahydropyran	2,6,6-三甲基-2-乙烯基四氢吡喃	2776
1,3,5-trimethyl-1,3,5-hexahydrotriazine	1,3,5-三甲基-1,3,5-六氢三嗪	1769
3,5,5-trimethyl-3-hexenyrolactone	3,5,5-三甲基-3-己烯内酯	1098
4,6,6-trimethyl-3-hexenyrolactone	4,6,6-三甲基-3-己烯内酯	1101
trimethylisoxazole	三甲基异噁唑	1672
1,3,6-trimethylnaphthalene	1,3,6-三甲基萘	168
1,4,5-trimethylnaphthalene	1,4,5-三甲基萘	169
1,4,6-trimethylnaphthalene	1,4,6-三甲基萘	170
1,6,7-trimethylnaphthalene	1,6,7-三甲基萘	171
2,3,6-trimethylnaphthalene	2,3,6-三甲基萘	172
2,3,6-trimethylnaphthaquinone	2,3,6-三甲基萘醌	2479
2,4,6-trimethylnitrobenzene	2,4,6-三甲基硝基苯	1209
trimethylloxazole	三甲基噁唑	1664
2,4,4-trimethylloxazoline	2,4,4-三甲基噁唑啉	1666
2,3,4-trimethylloxetane	2,3,4-三甲基环氧丙烷	1112
1,3,3-trimethyl-2-oxyindole	1,3,3-三甲基-2-氧化吲哚	1852
3,5,5-trimethyl-3-pentenylolactone	3,5,5-三甲基-3-戊烯内酯	1090
2,3,5-trimethylphenol	2,3,5-三甲基苯酚	435
2,4,5-trimethylphenol	2,4,5-三甲基苯酚	436
2,4,6-trimethylphenol	2,4,6-三甲基苯酚	437
3,4,5-trimethylphenol	3,4,5-三甲基苯酚	438
trimethyl phosphate	磷酸三甲酯	2091
trimethylphosphine	三甲基膦	2085
trimethyl phosphite	亚磷酸三甲酯	2088
1,2,4-trimethylpiperazine	1,2,4-三甲基哌嗪	1759
2,6-N-trimethylpiperidine	2,6,N-三甲基哌啶	1450
trimethylpyrazine	三甲基吡嗪	1737
1,3,5-trimethylpyrazole	1,3,5-三甲基吡唑	1575
1,3,4-trimethylpyrazoline	1,3,4-三甲基吡唑啉	1588
1,4,5-trimethylpyrazolone	1,4,5-三甲基吡唑啉	1589
3,4,5-trimethylpyrazoline	3,4,5-三甲基吡唑啉	1590

3,5,5-trimethylpyrazoline	3,5,5-三甲基吡唑啉	1591
1,2,5-trimethylpyrazolin-3-one	1,2,5-三甲基-3-吡唑啉酮	1601
1,3,4-trimethylpyrazolin-5-one	1,3,4-三甲基-5-吡唑啉酮	1602
4,4,5-trimethylpyrazolin-3-one	4,4,5-三甲基-3-吡唑啉酮	1603
2,3,5-trimethylpyridine	2,3,5-三甲基吡啶	1496
2,3,6-trimethylpyridine	2,3,6-三甲基吡啶	1497
2,3,6-trimethylpyridine	2,3,6-三甲基吡啶	1498
trimethylsilicane	三甲基甲硅烷	2076
trimethylsilyl ether	三甲基硅醚	2081
trimethylstibine	三甲基锑	2099
2,3,4-trimethylthiophene	2,3,4-三甲基噻吩	2013
2,4,6-trimethyl-1,3,5-triazine	2,4,6-三甲基-1,3,5-三嗪	1763
2,4,6-trimethyl-1,3,5-trioxane	2,4,6-三甲基-1,3,5-三氧己环	1175
1,3,5-trimethyl-2,4,6-trioxo-1,3,5-hexahydrotriazine	1,3,5-三甲基-2,4,6-三氧基-1,3,5-六氢三嗪	1771
2,4,6-trinitroaniline	2,4,6-三硝基苯胺	1266
2,4,6-trinitrobenzaldehyde	2,4,6-三硝基苯甲醛	1265
2,4,6-trinitrophenol	2,4,6-三硝基苯酚	497
2,4,5-trinitrotoluene	2,4,5-三硝基甲苯	1263
2,4,6-trinitrotoluene	2,4,6-三硝基甲苯	1264
1,3,5-trioxane	1,3,5-三氧己环	1174
tripentylamine	三戊胺	1318
triphenylamine	三苯胺	1432
triphenylboron	三苯基硼	2072
9,10-triphenylene	9,10-苯并菲	200
tripropenylamine	三丙烯胺	1314
tripropylaluminium	三丙基铝	2074
tripropylamine	三丙胺	1313
tripropyl borate	硼酸三丙酯	2071
1,3,5-trithiane	1,3,5-三硫杂环己烷	1950
1,2,4-trithiolane	1,2,4-三硫杂环戊烷	1949
tropone	环庚三烯酮	713
D-tryptophan	D-色氨酸	2996
tumidulin	土米杜林	2947
tylophorine	娃儿藤碱	2206

## U

umbelliferone	伞形花内酯	2386
undecanal	十一醛	558
undecanamine	十一胺	1285
undecanedioic acid	十一烷二酸	748
undecanoic acid	十一酸	723
1-undecanol	1-十一醇	351
undecan-2-one	2-十一酮	641
undecan-3-one	3-十一酮	642
undecan-4-one	4-十一酮	643
undecan-5-one	5-十一酮	644

undecan-6-one	6-十一酮	645
urea	尿素	1908
ursenal	熊果醛	2925
urs-12-ene	熊果-12-烯	2923
urs-12-en-28-ol	熊果-12-烯-28-醇	2926
ursolic acid	熊果酸	2927
ustilaginoidin A	黑曲定 A	2455
uzarigenin	乌沙貳元	2571

## V

valencene	朱栾倍半萜	2815
valine	缬氨酸	2983
verbenol	马鞭草烯醇	2741
verbenone	马鞭草烯酮	2738
vincadifformine	文卡明	2131
vincamine	长春胺	2182
vincaminol	文卡明醇	2180
visnagin	维斯那津	2454
vitexin	牡荆黄酮貳	2375
vomucine	番木鳖次碱	2149

## X

xanthine	黄嘌呤	1789
xanthon	吡酮	2421
xanthorrhizol	黄根酚	2804
xanthotoxin	花椒毒素	2396
xylopinine(norcoralydine)	番荔枝宁	2201

## Y

17 $\alpha$ -yohimbine	17 $\alpha$ -育亨宾	2172
17 $\beta$ -yohimbine	17 $\beta$ -育亨宾	2173
yonogenin	约诺皂貳元	2599

## Z

zapotin	沙波亭	2292
zingiberene	姜烯	2805

undecan-6-one	6-十一酮	645
urea	尿素	1908
ursenal	熊果醛	2925
urs-12-ene	熊果-12-烯	2923
urs-12-en-28-ol	熊果-12-烯-28-醇	2926
ursolic acid	熊果酸	2927
ustilaginoidin A	黑曲定 A	2455
uzarigenin	乌沙貳元	2571

## V

valencene	朱栾倍半萜	2815
valine	缬氨酸	2983
verbenol	马鞭草烯醇	2741
verbenone	马鞭草烯酮	2738
vincadifformine	文卡明	2131
vincamine	长春胺	2182
vincaminol	文卡明醇	2180
visnagin	维斯那津	2454
vitexin	牡荆黄酮貳	2375
vomucine	番木鳖次碱	2149

## X

xanthine	黄嘌呤	1789
xanthone	吡酮	2421
xanthorrhizol	黄根酚	2804
xanthotoxin	花椒毒素	2396
xylopinine(norcoralydine)	番荔枝宁	2201

## Y

17 $\alpha$ -yohimbine	17 $\alpha$ -育亨宾	2172
17 $\beta$ -yohimbine	17 $\beta$ -育亨宾	2173
yonogenin	约诺皂貳元	2599

## Z

zapotin	沙波亭	2292
zingiberene	姜烯	2805