

<<有机化合物的分子量与分子式>>

图书基本信息

书名：<<有机化合物的分子量与分子式>>

13位ISBN编号：9787122117946

10位ISBN编号：7122117944

出版时间：2011-11

出版时间：化学工业出版社

作者：丛浦珠

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

<<有机化合物的分子量与分子式>>

前言

有机化合物分子结构测定的首要事项是确定分子式，以前确定分子式的方法是微量元素分析、分子量的质谱测定和高分辨质谱的精确质量测定，这些方法都有一定的局限性。

笔者经过数十年工作的思考，提出了找到一个确定分子式的新方法，该方法能与上述方法相互配合、相互验证。

有人说：“这种确定分子式的方法就像是一层窗户纸一样，一捅就破，怎么别人就没想出来呢？”

笔者的回答很简单：就是因为我是研究质谱的，而质谱的最大特点就是测定分子质量、化学组成和化学结构。

笔者在长期观察质谱图后，发现每一张质谱图中的离子峰，都是间隔几乎相等地、一组一组地排列着。

笔者在自己的其他著作中讲过：一幅质谱图就像自然界的地貌一样，它有高大的乔木、低矮的灌木、巍巍的山岭、深深的沟壑，非常美丽，耐人寻味。

这一组一组的峰，或者是一簇一簇的“草甸子”的间隔距离大致都是12~16个原子质量单位。

这个间距不正是碳、氢、氧、氮的质量所引起的？

既然如此，那不就能很容易地弄清这些峰的化学组成？

因此，笔者就试着计算一些已知离子峰的化学组成，也还真的算出来一些。

但是，一张质谱图的离子峰很多，若再计算化学组成，任务就更显繁重。

但是若只计算分子离子峰的化学组成，问题就简单多了。

谁知这样的计算是无止境的，这与自然界的有限性不符。

所以，笔者就根据自然界的基本有机化合物的组成规律，设立了化合物分子式中合理的氢的最低值和氮、氧的最高值，有了这些值，每个分子量对应的有限的分子式便能列写出来。

在这些分子式中要挑选出具体化合物的真正分子式，则必须要再有一两个MS、¹H NMR、¹³C NMR或IR数据来帮助确认，特别是通过计算不饱和度，能更迅速确认真正的分子式。

用这种方法来确定分子式，能使化学工作者一改过去只能服从某些仪器的测定数据来确定化合物分子式的被动局面，而是获得了计算、判断和选取分子式的主动能力（当然，知道整数分子量数是必要的先决条件）。

不言而喻，在选取分子式时必须能够同时分析MS、¹H NMR、¹³C NMR和IR的谱图，否则便无从谈起。

本书详细介绍了有机化合物分子式的组合方式和分布规律，给出了如何确认特定分子质量对应的可能的分子式的方法及其应用。

由于大多数天然有机化合物的相对分子质量（以下简称分子量）都在800以内，所以本书只给出了相对分子质量16~800的化合物对应的分子式。

化合物的分子量越大，对应的分子式数目越多，单靠手写要列出所有的分子式，工作浩繁，因此，本书在编著过程中，曾经请诸钢同志根据笔者提出的界定条件，编写了计算机程序，想要知道哪个分子量对应的分子式，就可通程序快速计算给出。

在此，谨向诸钢同志表示感谢。

作者2011年2月于北京

<<有机化合物的分子量与分子式>>

内容概要

本书详细介绍了有机化合物分子式的组合方式和分布规律，给出了依据分子量（1000以内）确定对应的分子式的方法，这些方法有助于化学工作者在分析和鉴定化合物结构时发挥主观能动性，参考有关仪器分析的结果，可以更加快速、准确地推断和确定未知化合物的分子式。书中列出了分子量为16~800的化合物对应的分子式，方便读者查阅。

本书可供从事天然产物研究与开发、有机合成、药物研发、质谱分析的技术人员在鉴定未知化合物的分子式和结构时参考。

<<有机化合物的分子量与分子式>>

书籍目录

总论分子量与分子论数据集

<<有机化合物的分子量与分子式>>

章节摘录

版权页：插图：

<<有机化合物的分子量与分子式>>

编辑推荐

《有机化合物的分子量与分子式》是天然有机化合物结构信息手册之一。

<<有机化合物的分子量与分子式>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介, 请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>